
Resultados e Discussões

7.1 Técnica de HATR

Nas tabelas 7.1, 7.2 e 7.3 são apresentados os resultados obtidos para os valores do coeficiente de correlação (R^2), do SEC e do SEV, para os parâmetros de qualidade da farinha empregando os dados de HATR, sendo o número de variáveis latentes (ou fatores) utilizado, correspondente ao menor PRESS.

Os três diferentes modelos apresentados em cada uma das tabelas, por exemplo na tabela 7.1, diferem nos pré-processamentos empregados. Para o modelo HATR-A1 os dados foram apenas centrados na média (MC); já para o modelo HATR-B1 os dados foram centrados na média e escalados pela variância simultaneamente (MC/VS); enquanto que para o modelo HATR-C1 os dados foram somente escalados pela variância (VS).

Tabela 7.1 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda			
	Modelo	A1	B1	C1	A1	B1	C1	A1	B1	C1
R^2		0,847	0,976	0,153	0,811	0,967	0,968	0,117	0,093	0,009
Variáveis Latentes		6	9	4	6	9	10	3	3	4
SEC		0,388	0,151	1,577	0,093	0,039	0,039	42,07	42,60	61,48
SEV		0,240	0,210	0,945	0,043	0,042	0,056	24,25	23,64	33,64
Centrados na média		sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância		não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.2 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR com primeira derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
	D1	E1	F1	D1	E1	F1	D1	E1	F1
R²	0,967	0,990	0,579	0,968	0,989	0,925	0,899	0,827	0,376
Variáveis Latentes	6	5	3	6	5	4	5	3	3
SEC	0,179	0,098	0,943	0,038	0,022	0,062	14,17	18,65	47,97
SEV	0,405	0,651	1,129	0,060	0,109	0,103	22,98	37,21	49,14
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.3 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR com segunda derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
	G1	H1	I1	G1	H1	I1	G1	H1	I1
R²	0,958	0,968	0,118	0,831	0,972	0,788	0,889	0,955	0,406
Variáveis Latentes	5	4	1	3	4	3	4	4	3
SEC	0,201	0,176	2,768	0,088	0,036	0,107	14,89	9,53	45,69
SEV	0,647	0,483	1,392	0,100	0,074	0,096	34,57	20,31	50,60
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

O desempenho dos modelos (em função dos valores calculados de SEV), comparando os tratamento dos espectros e o pré-processamento dos dados, estão representados graficamente nas figuras 7.1, 7.2 e 7.3.

Nestes gráficos é possível observar que quando são utilizados apenas os dados escalados pela variância, os valores de SEV para os modelos selecionados pelo PRESS, tendem a ser mais elevados do que os modelos que necessariamente empregam os dados centrados na média.

Também é possível observar que os modelos que empregam espectros HATR sem tratamento, tendem a fornecer valores de SEV geralmente inferiores aos que empregam os dados com primeira ou segunda derivada. Porém estes modelos que utilizam dados sem tratamento fornecem números maiores de variáveis latentes, conforme pode ser verificado nas tabelas 7.1, 7.2 e 7.3.

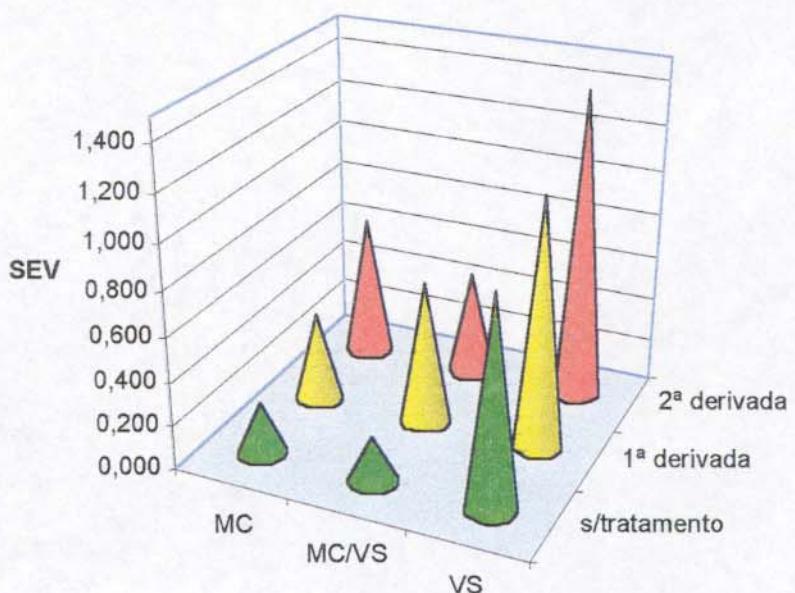


Figura 7.1 – Valores de SEV com dados de HATR para o teor de proteína.

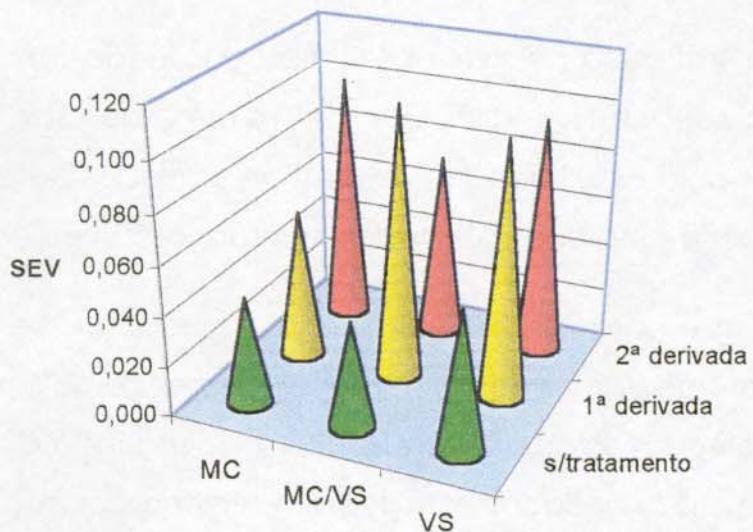


Figura 7.2 – Valores de SEV com dados de HATR para o teor de cinza.

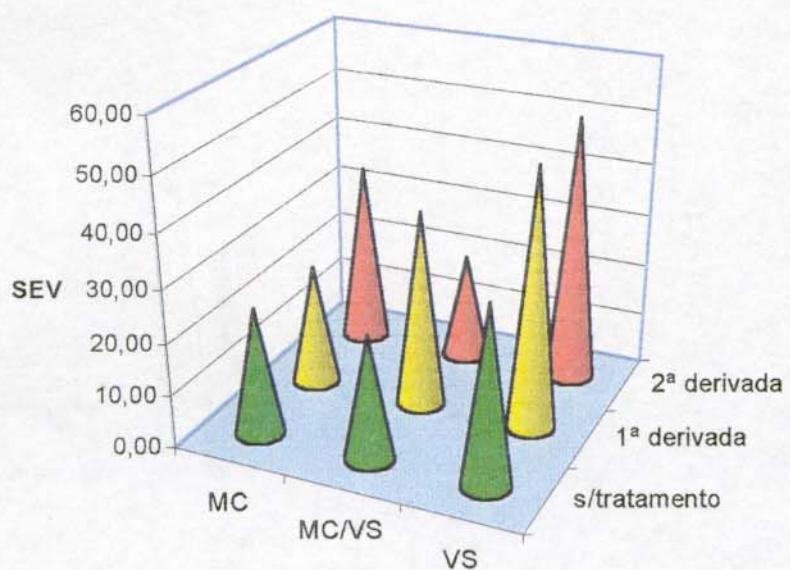


Figura 7.3 – Valores de SEV com dados de HATR para o número de queda.

A análise conjunta dos gráficos das figuras 7.1, 7.2 e 7.3 permitiu selecionar quais combinações de pré-processamentos e tratamentos deveriam ser mais profundamente estudados. Foram desta forma excluídos os modelos que empregam apenas o escalamento pela variância, devido ao fato destes modelos apresentarem elevados valores de SEV, quando comparados com aqueles que empregam os dados centrados na média.

Para os dados de HATR também foram construídos modelos empregando correção do espalhamento de luz (MSC), sendo estes modelos apresentados nas tabelas 7.4 e 7.5.

Comparando-se os modelos das tabelas 7.4 e 7.5 com os respectivos modelos das tabelas 7.1 e 7.2, pode-se observar que os modelos apresentados, selecionados segundo o PRESS, são semelhantes tanto nos valores de R^2 , quanto nos valores SEV e SEC, porém empregando mais variáveis latentes.

Tabela 7.4 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR somente com correção do espalhamento de luz (MSC).

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda		
	Modelo	A2	B2	A2	B2	A2	B2
R²		0,978	0,991	0,967	0,982	0,509	0,952
Variáveis Latentes		9	10	9	9	5	9
SEC		0,144	0,093	0,039	0,028	31,34	9,75
SEV		0,187	0,191	0,042	0,043	21,87	22,49
Centrados na média		sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância		não	sim	não	sim	não	sim

Tabela 7.5 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR com correção do espalhamento de luz (MSC) e com primeira derivada.

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda	
Modelo	D2	E2	D2	E2	D2	E2
R ²	0,965	0,986	0,969	0,987	0,891	0,753
Variáveis Latentes	5	5	5	5	4	2
SEC	0,183	0,114	0,038	0,024	14,76	22,24
SEV	0,399	0,416	0,056	0,067	23,74	23,37
Centrados na média	sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância	não	sim	não	sim	não	sim

Uma outra variante experimentada para os dados de HATR foi o emprego do alisamento com o algoritmo de Savitzky-Golay, cujos principais resultados são apresentados nas tabelas 7.6 e 7.7.

Nos modelos apresentados na tabela 7.6 pode-se observar a baixa correlação obtida, quando são selecionadas o número de variáveis latentes pelo mínimo PRESS. Além disso os modelos HATR-A3 e HATR-B3 empregam números menores de variáveis latentes que os análogos apresentados anteriormente.

Já para os modelos da tabela 7.7, os resultados não apresentam melhora significativa, sendo evidenciada uma tendência diferenciada em relação aos demais apresentados. Enquanto que os modelos apresentados nas tabelas 7.2 e 7.5, que empregam primeira derivada, utilizam poucas variáveis latentes, o modelo HATR-D3 utiliza um número maior de variáveis latentes.

Tabela 7.6 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR somente com alisamento com o algoritmo de Savitzky-Golay.

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda	
Modelo	A3	B3	A3	B3	A3	B3
R²	0,798	0,815	0,757	0,726	0,110	0,084
Variáveis Latentes	6	6	6	5	3	3
SEC	0,445	0,425	0,106	0,113	42,25	42,82
SEV	0,240	0,215	0,044	0,047	23,99	23,33
Centrados na média	sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância	não	sim	não	sim	não	sim

Tabela 7.7 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR com alisamento via algoritmo de Savitzky-Golay e com primeira derivada.

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda	
Modelo	D3	E3	D3	E3	D3	E3
R²	0,979	0,890	0,987	0,967	0,811	0,791
Variáveis Latentes	8	3	9	5	6	3
SEC	0,143	0,328	0,024	0,039	19,48	20,48
SEV	0,271	0,381	0,039	0,064	24,23	21,75
Centrados na média	sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância	não	sim	não	sim	não	sim

O comportamento observado para os modelos que empregam alisamento podem estar associados ao fato deste tratamento estar inserindo artefatos ao conjunto de espectros, resultando em modelos menos robustos.

Os dados de HATR foram também submetidos a um conjunto de tratamentos, conforme apresentado no fluxograma da figura 6.12, e que foram modelados empregando dois métodos para a seleção de variáveis. Os principais modelos empregando seleção via método das variáveis importantes são apresentados na tabela 7.8, e empregando seleção via método da subtração dos espectros são apresentados na tabela 7.9.

Tanto os modelos apresentados na tabela 7.8, quanto os apresentados na tabela 7.9 mostram baixas correlações, quando comparados com os modelos análogos anteriores. Acredita-se que o grande número de tratamentos realizados sobre os espectros originais seja responsável por este baixo desempenho.

Dentre os dois métodos apresentados para a seleção de variáveis, os resultados indicam que o método da subtração parece ser mais eficiente, além de ser o método de mais fácil implementação.

Um vez que, dentre os principais objetivos deste trabalho, está o de determinar os parâmetros de qualidade selecionados para amostras de farinha de trigo utilizando somente dados espectrais, é importante que o modelo responda bem a amostras externas e que o modelo seja o mínimo "fechado" possível.

Para tanto, foram calculados valores de SEV para outros modelos relacionados, fazendo-se mudar o número de variáveis latentes afim de acompanhar o desempenho destes modelos frente ao conjunto de amostras de validação.

Tabela 7.8 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR e seleção de variáveis via método das variáveis mais importantes.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	E4	E4	H4
R²	0,873	0,513	0,343
Variáveis Latentes	3	1	1
SEC	0,354	0,150	36,34
SEV	0,491	0,084	31,25
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

Tabela 7.9 – Resultados da modelagem empregando os espectros HATR e seleção de variáveis via método da subtração dos espectros.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	E5	E5	H5
R²	0,893	0,597	0,487
Variáveis Latentes	4	1	3
SEC	0,324	0,136	32,06
SEV	0,308	0,078	32,18
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

Os principais resultados foram preliminarmente tabelados e estes são apresentados graficamente nas figuras 7.4, 7.5 e 7.6.

Com base nestes gráficos foram selecionados os melhores modelos, agora segundo os valores de SEV e que serão comparados empregando o teste F.

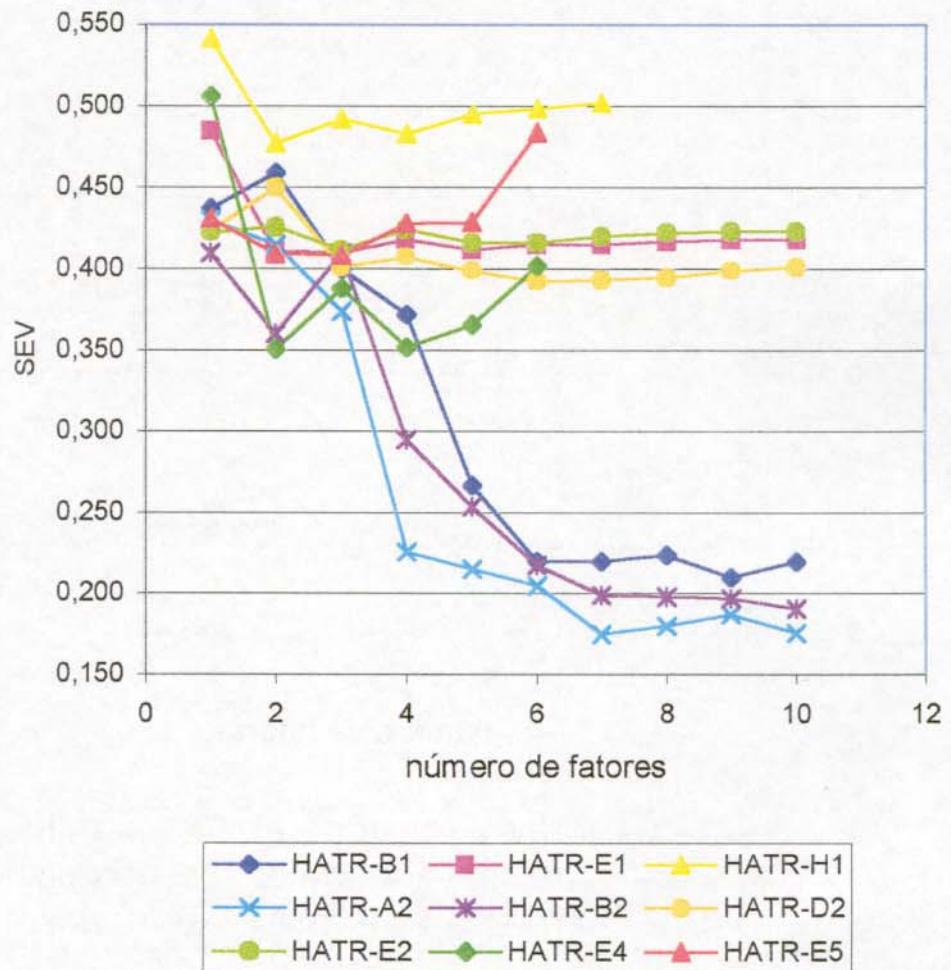


Figura 7.4 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR para o teor de proteína.

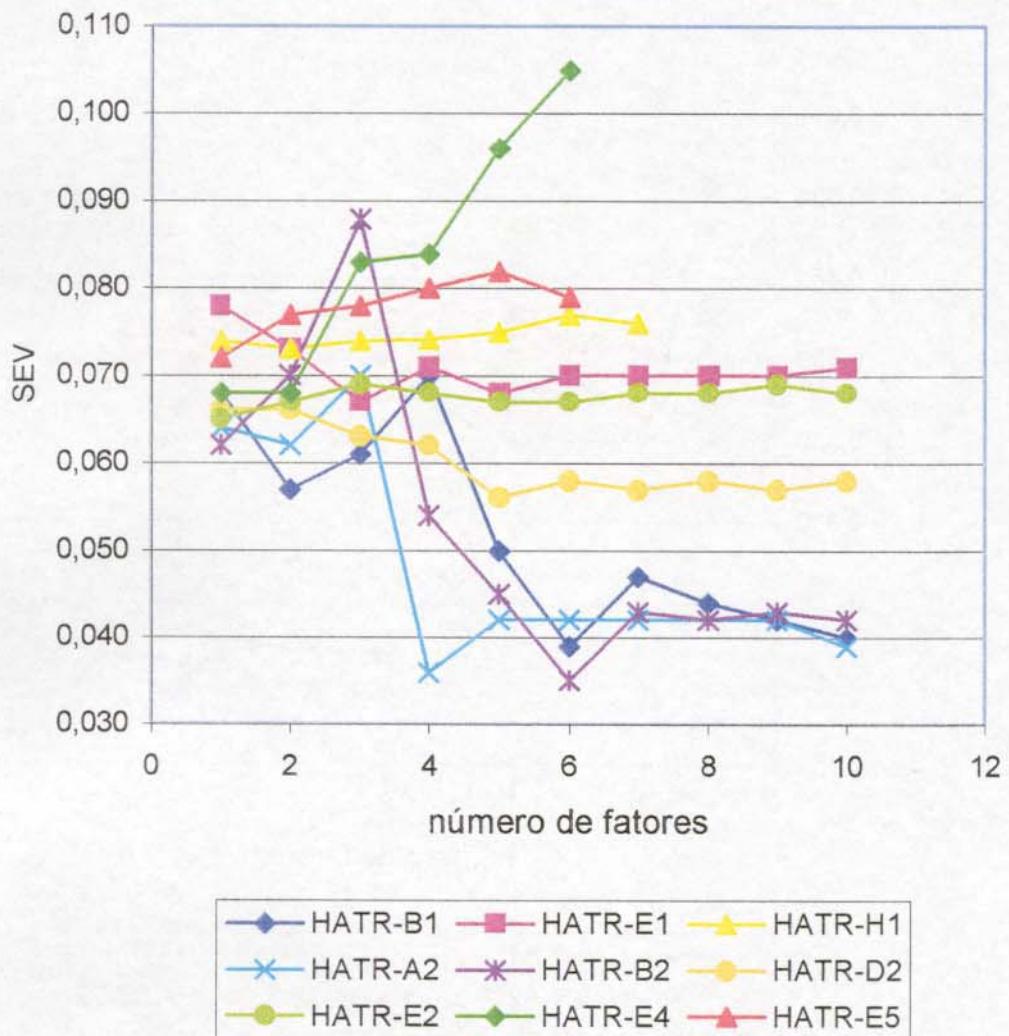


Figura 7.5 – Gráficos dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR para o teor de cinza.

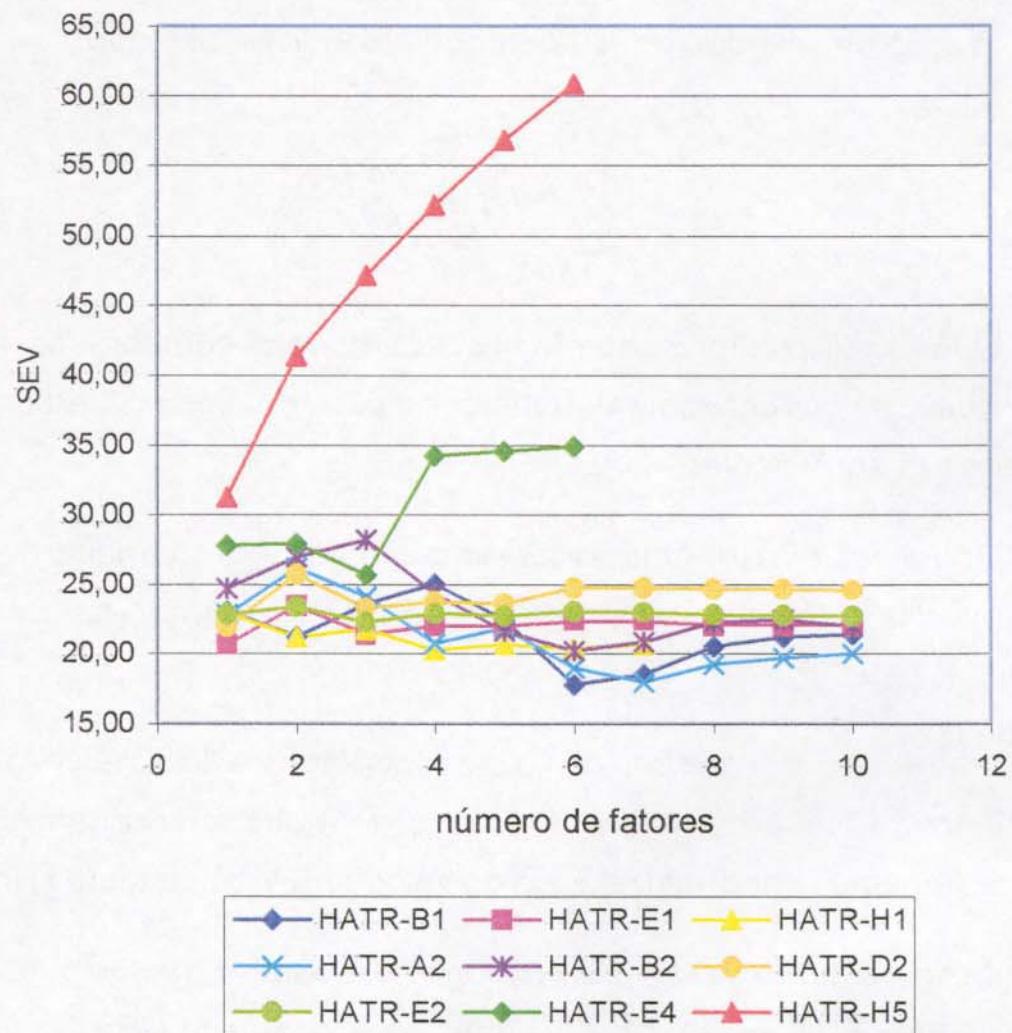


Figura 7.6 – Gráficos dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR para o número de queda.

Para comparar de forma estatística os modelos que apresentaram menores valores de SEV, para os três parâmetros de qualidade em estudo, foi empregado o teste F, sendo extraído o valor crítico de 1,69 para o nível de confiança de 95% [305, 306].

Os valores de $F(i,j)$ para os melhores valores de SEV foram calculados empregando a expressão 7.1, na qual i e j representam o número de amostras de validação empregado em cada modelo, sendo ambos iguais a 45.

$$F(i,j) = \left(\frac{SEV_i}{SEV_j} \right)^2 \quad (7.1)$$

Quando $F(i,j)$ for maior que F crítico, os modelos comparados apresentam desempenhos significativamente diferentes, caso contrário o desempenho dos modelos são equivalentes.

Os valores de $F(i,j)$ calculados para os grupos de modelos que estimam cada um dos parâmetros, empregando dados de HATR, são apresentados nas figuras 7.7, 7.8 e 7.9.

Uma forma de analisar os valores tabelados é facilmente aplicada se considerarmos que cada elemento interno da matriz teve origem do valor de SEV do elemento i (linha) em relação ao valor de SEV do elemento j (coluna).

Desta forma o valor 3,83 encontrado para a proteína relaciona os modelos HATR-E1(2) e HATR-B1(9). Como este valor é superior ao valor crítico deve-se entender que o modelo que tiver menor valor de SEV (HATR-E1(2)) é significativamente melhor que o de maior SEV (HATR-B1(9)).

Na forma gráfica, o valor crítico está representado pelo plano, sendo que os $F(i,j)$ localizados acima do plano indicam que os modelos comparados são significativamente diferentes, enquanto que os valores localizados abaixo do plano indicam modelos semelhantes.

Proteína	HATR-B1(9)	HATR-E1(2)	HATR-H1(2)
HATR-B1(9)	1	-	-
HATR-E1(2)	3,83 (a)	1	-
HATR-H1(2)	5,16 (b)	1,35 (c)	1
Cinzas	HATR-B1(13)	HATR-E1(3)	HATR-H1(2)
HATR-B1(13)	1	-	-
HATR-E1(3)	3,28 (a)	1	-
HATR-H1(2)	3,89 (b)	1,19 (c)	1
Nº de Queda	HATR-B1(6)	HATR-E1(1)	HATR-H1(4)
HATR-B1(6)	1	-	-
HATR-E1(1)	1,36 (a)	1	1,04 (c)
HATR-H1(4)	1,31 (b)	-	1

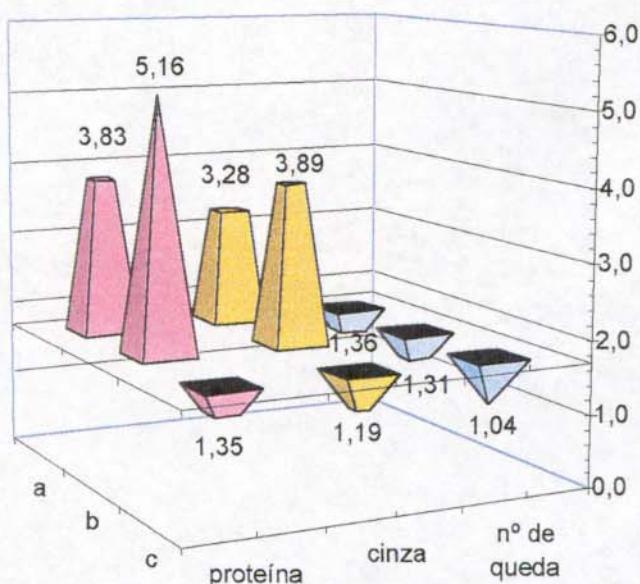


Figura 7.7 – Resultados do teste F para a avaliação do desempenho dos modelos HATR-B1, HATR-E1 e HATR-H1.

Proteína	HATR-A2(7)	HATR-B2(10)	HATR-D2(6)	HATR-E2(3)
HATR-A2(7)	1	-	-	-
HATR-B2(10)	1,19 (a)	1	-	-
HATR-D2(6)	5,02 (b)	4,21 (d)	1	-
HATR-E2(3)	5,54 (c)	4,65 (e)	1,10 (f)	1
Cinzas	HATR-A2(4)	HATR-B2(6)	HATR-D2(5)	HATR-E2(1)
HATR-A2(4)	1	1,06 (a)	-	-
HATR-B2(6)	-	1	-	-
HATR-D2(5)	2,42 (b)	2,56 (d)	1	-
HATR-E2(1)	3,26 (c)	3,45 (e)	1,35 (f)	1
Nº de Queda	HATR-A2(7)	HATR-B2(6)	HATR-D2(1)	HATR-E2(3)
HATR-A2(7)	1	-	-	-
HATR-B2(6)	1,26 (a)	1	-	-
HATR-D2(1)	1,50 (b)	1,18 (d)	1	-
HATR-E2(3)	1,54 (c)	1,22 (e)	1,03 (f)	1

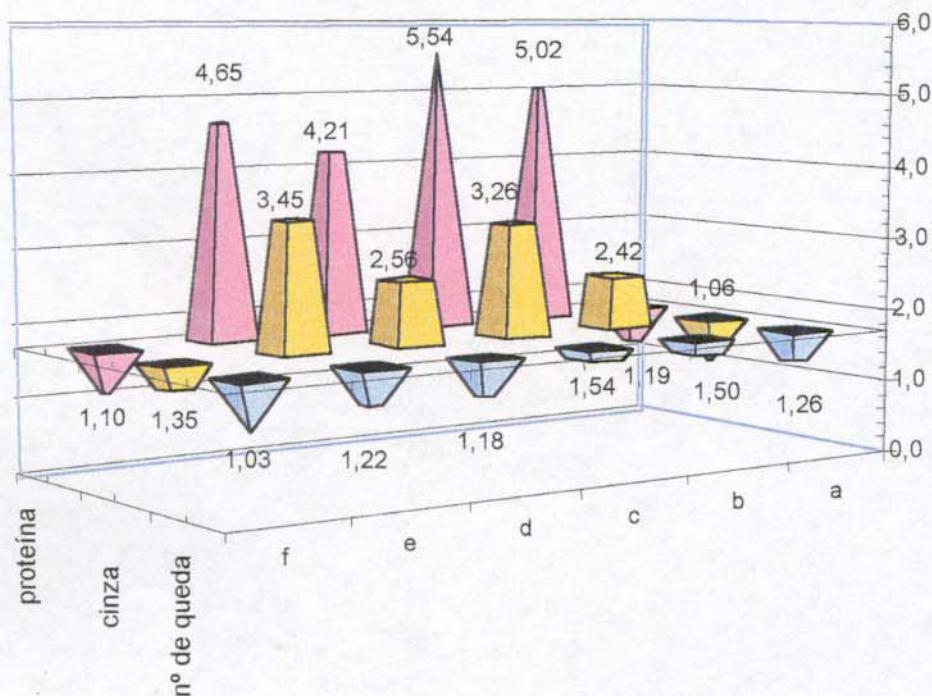


Figura 7.8 – Resultados do teste F para a avaliação do desempenho dos modelos HATR-A2, HATR-B2, HATR-D2 e HATR-E2.

Proteína	HATR-A3(6)	HATR-B3(6)	HATR-D3(8)	HATR-E3(3)
HATR-A3(6)	1	1,25 (a)	-	-
HATR-B3(6)	-	1	-	-
HATR-D3(8)	1,28 (b)	1,59 (d)	1	-
HATR-E3(3)	2,52 (c)	3,14 (e)	1,98 (f)	1

Cinzas	HATR-A3(6)	HATR-B3(5)	HATR-D3(9)	HATR-E3(5)
HATR-A3(6)	1	-	-	-
HATR-B3(5)	1,14 (a)	1	1,14 (d)	-
HATR-D3(9)	1,00 (b)	-	1	-
HATR-E3(5)	2,12 (c)	1,85 (e)	2,12 (f)	1

Nº de Queda	HATR-A3(3)	HATR-B3(3)	HATR-D3(6)	HATR-E3(3)
HATR-A3(3)	1	1,06 (a)	-	1,22 (c)
HATR-B3(3)	-	1	-	1,15 (d)
HATR-D3(6)	1,02 (b)	1,08 (e)	1	1,24 (f)
HATR-E3(3)	-	-	-	1

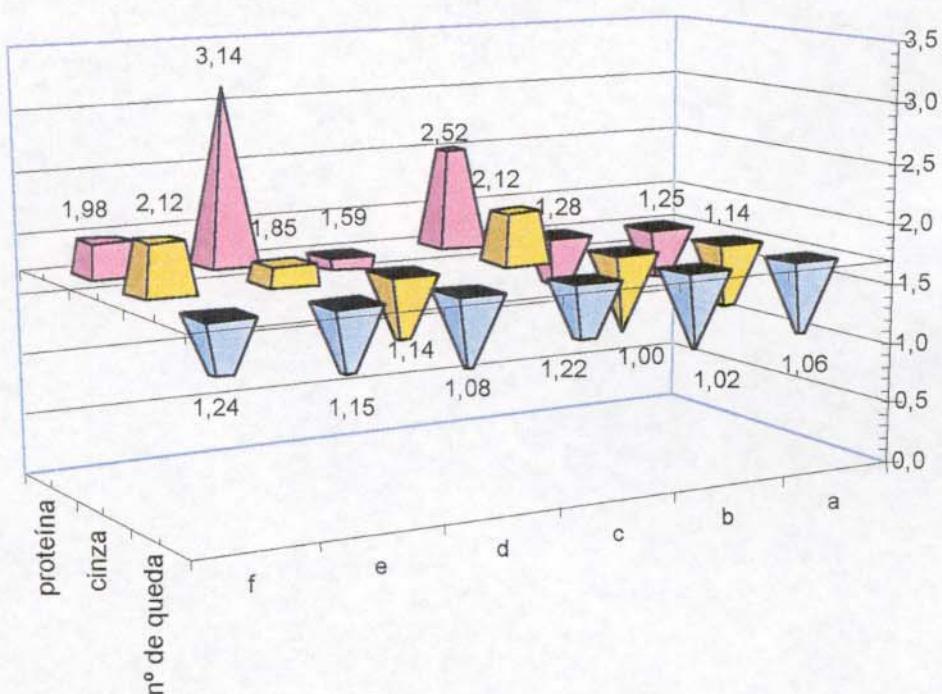


Figura 7.9 – Resultados do teste F para a avaliação do desempenho dos modelos HATR-A3, HATR-B3, HATR-D3 e HATR-E3.

Estes resultados indicam que, dentre os modelos apresentados para estimar o teor de proteína com os dados de HATR, o modelo HATR-B1 empregando 9 variáveis latentes é significativamente melhor que os outros dois modelos apresentados.

Da mesma forma que este modelo com 13 variáveis latentes é significativamente melhor que os demais, quando o parâmetro de importância é o teor de cinza.

Já para estimar o número de queda, os resultados indicam que os três modelos são equivalentes.

7.2 Técnica de DRIFTS

Nas tabelas 7.10, 7.11 e 7.12 são apresentados os resultados encontrados para os valores de R^2 , SEC e SEV, para os três parâmetros empregando os dados de DRIFTS, sendo o número de variáveis latentes (ou fatores) utilizado correspondente ao menor PRESS.

Os modelos DRIFTS-A1, DRIFTS-B1 e DRIFTS-C1, apesar de empregarem diferentes pré-processamentos, apresentam desempenhos semelhantes. Já quando os dados são tratados com primeira e segunda derivadas, os modelos E1-DRIFTS e H1-DRIFTS se destacam dos demais por sempre apresentarem 2 ou 3 variáveis latentes, sem perda significativa da correlação (R^2).

Estes resultados novamente refletem a importância da escolha do tipo de pré-processamento, sobre o desempenho das modelagens, sendo evidenciado até o presente momento um comportamento sinergético quando os dados são centrados na média e escalados pela variância simultaneamente.

Tabela 7.10 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda			
	Modelo	A1	B1	C1	A1	B1	C1	A1	B1	C1
R²		0,938	0,935	0,915	0,854	0,954	0,825	0,002	0,002	0,059
Variáveis Latentes		9	9	10	7	10	7	1	1	3
SEC		0,247	0,253	0,290	0,082	0,046	0,091	44,67	44,71	43,42
SEV		0,284	0,276	0,238	0,067	0,044	0,052	23,11	23,13	20,31
Centrados na média		sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância		não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.11 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT com primeira derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
	D1	E1	F1	D1	E1	F1	D1	E1	F1
R²	0,868	0,925	0,914	0,827	0,913	0,934	0,008	0,877	0,695
Variáveis Latentes	4	3	4	4	3	4	1	3	3
SEC	0,360	0,271	0,291	0,089	0,063	0,056	44,60	15,68	24,69
SEV	0,283	0,324	0,454	0,054	0,055	0,061	23,23	21,95	24,44
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.12 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT com segunda derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
	G1	H1	I1	G1	H1	I1	G1	H1	I1
R²	0,996	0,921	0,845	0,797	0,883	0,886	0,027	0,877	0,003
Variáveis Latentes	9	2	3	4	2	3	1	2	1
SEC	0,059	0,279	0,405	0,097	0,073	0,073	44,14	15,70	48,66
SEV	0,415	0,431	0,564	0,085	0,077	0,083	23,49	24,05	23,46
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Para os dados de DRIFTS também foram construídos modelos empregando correção do espalhamento de luz (MSC), sendo estes modelos apresentados nas tabelas 7.13 e 7.14.

Com relação aos parâmetros teor de proteína e teor de cinza, novamente é verificada uma sensível redução do número de variáveis latentes, no caso de 6 para 3, sem comprometimento da correlação entre os dados modelados e os respectivos parâmetros de interesse.

Comparando-se os modelos da tabela 7.13 com os respectivos modelos da tabela 7.10, pode-se observar que os modelos apresentados, selecionados segundo o PRESS, também tendem a reduzir o número de variáveis latentes quando do emprego da correção do espalhamento de luz (MSC).

No caso da previsão do teor de proteína, apesar dos modelos DRIFTS-A2 e DRIFTS-B2 apresentarem menor correlação e maior SEC, apresentam menor SEV, se comparados aos modelos DRIFTS-A1 e DRIFTS-B1 que não empregam MSC.

Tabela 7.13 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFTS somente com correção do espalhamento de luz (MSC).

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda		
	Modelo	A2	B2	A2	B2	A2	B2
R²		0,837	0,837	0,844	0,844	0,045	0,021
Variáveis Latentes		6	6	6	6	2	1
SEC		0,401	0,400	0,085	0,084	43,75	44,29
SEV		0,249	0,258	0,055	0,053	20,88	21,68
Centrados na média		sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância		não	sim	não	sim	não	sim

Tabela 7.14 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFTS com primeira derivada e correção do espalhamento de luz (MSC).

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda	
	D2	E2	D2	E2	D2	E2
R²	0,866	0,919	0,822	0,906	0,322	0,876
Variáveis Latentes	3	3	3	3	1	3
SEC	0,362	0,282	0,090	0,066	36,85	15,71
SEV	0,311	0,328	0,049	0,055	21,41	21,99
Centrados na média	sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância	não	sim	não	sim	não	sim

Os dados de DRIFTS também foram submetidos a um conjunto de tratamentos, conforme apresentado na figura 6.12, e que foram modelados empregando dois métodos para a seleção de variáveis. Os principais modelos empregando seleção via método das variáveis importantes são apresentados na tabela 7.15. Na tabela 7.16 são apresentados os resultados dos modelos empregando seleção via método da subtração dos espectros.

Os modelos relacionados na tabela 7.15 têm correlações equivalentes aos apresentados pelos análogos anteriores, enquanto que os relacionados na tabela 7.16, apresentam baixas correlações. Apesar disto, os modelos de ambas as tabelas (7.15 e 7.16) apresentam valores de SEV semelhantes.

Os principais resultados foram plotados e são mostrados nas figuras 7.10, 7.11 e 7.12. Estes gráficos permitiram selecionar os melhores modelos, com base nos valores de SEV e que serão comparados empregando o teste F, conforme apêndice C.

Tabela 7.15 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT e seleção de variáveis via método das variáveis mais importantes.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	E4	E4	H4
R²	0,894	0,895	0,427
Variáveis Latentes	4	4	2
SEC	0,309	0,069	32,89
SEV	0,415	0,083	27,30
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

Tabela 7.16 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT e seleção de variáveis via método da subtração dos espectros.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	H5	H5	H5
R²	0,780	0,803	0,547
Variáveis Latentes	1	2	1
SEC	0,465	0,088	30,11
SEV	0,362	0,084	30,96
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

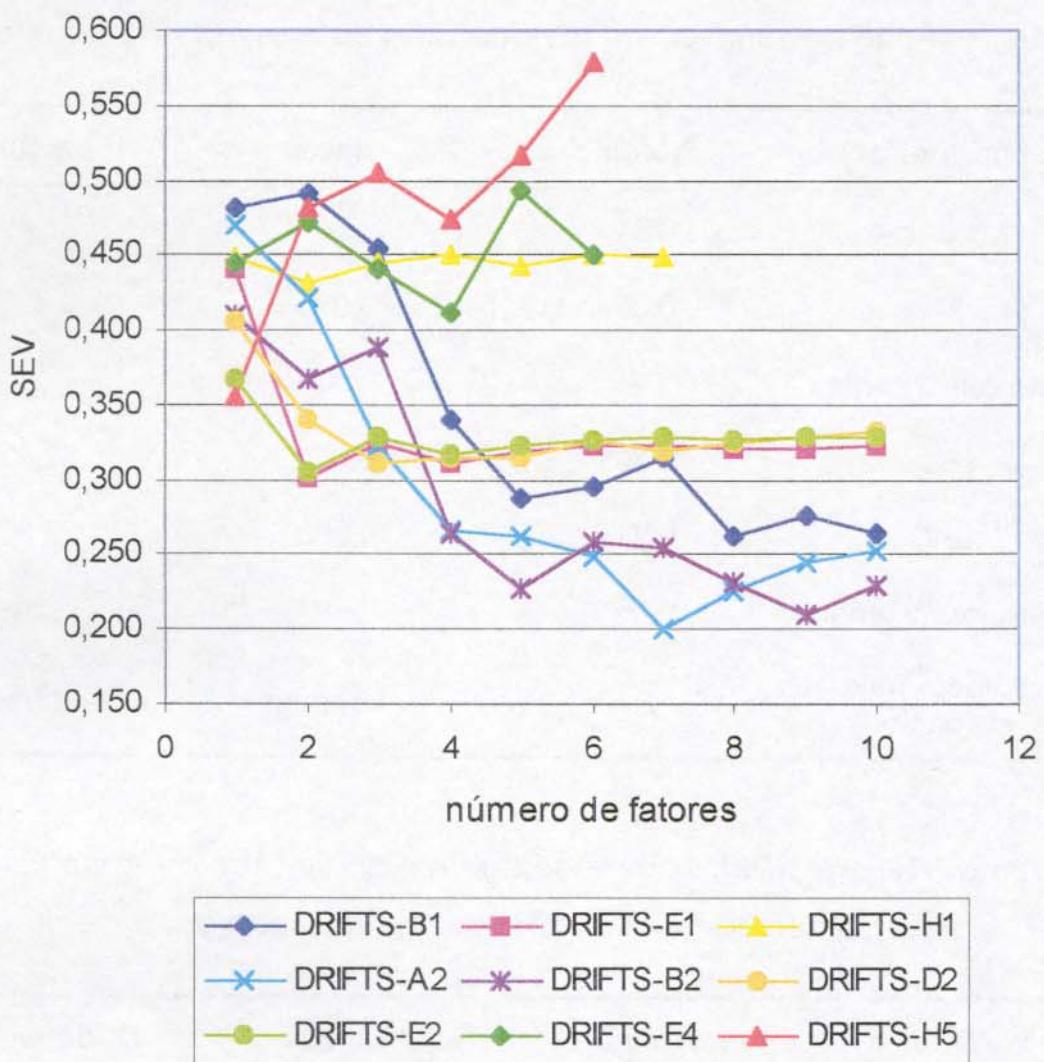


Figura 7.10 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de DRIFTS para o teor de proteína.

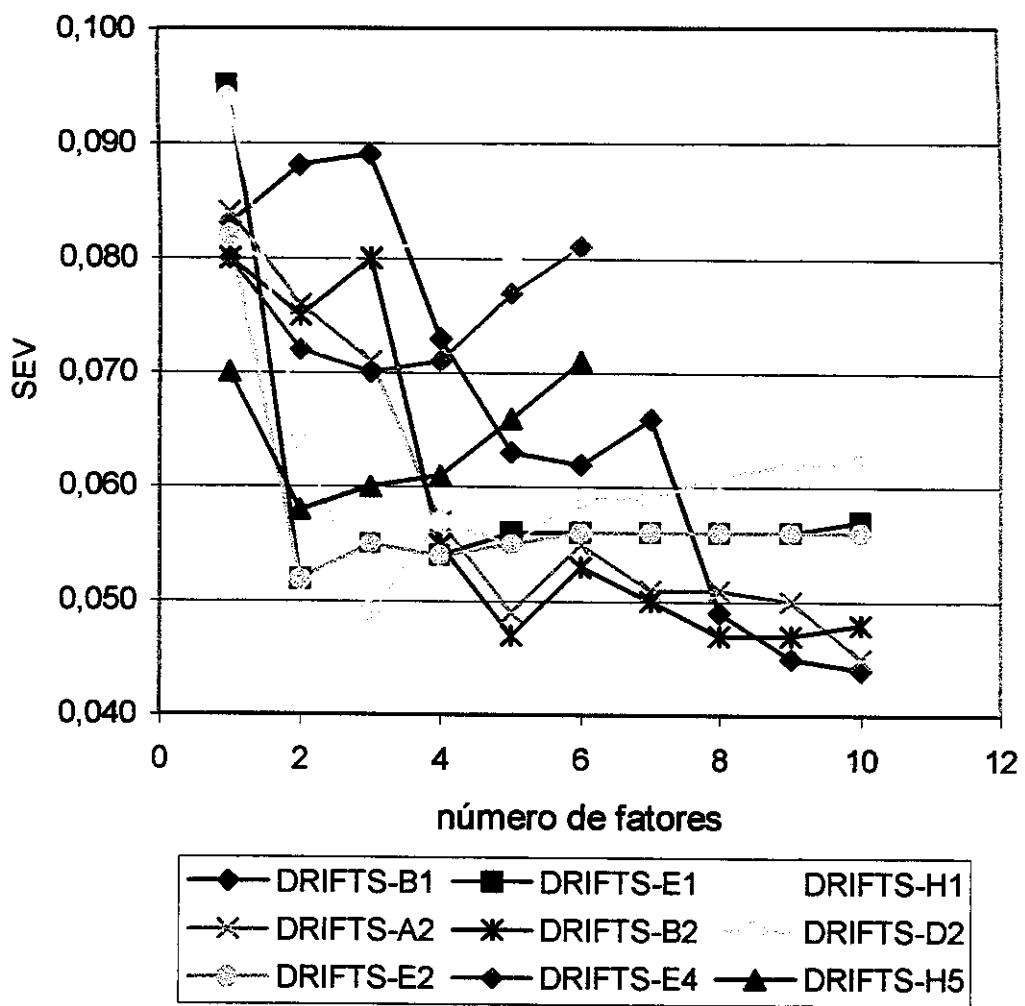


Figura 7.11 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de DRIFTS para o teor de cinza.

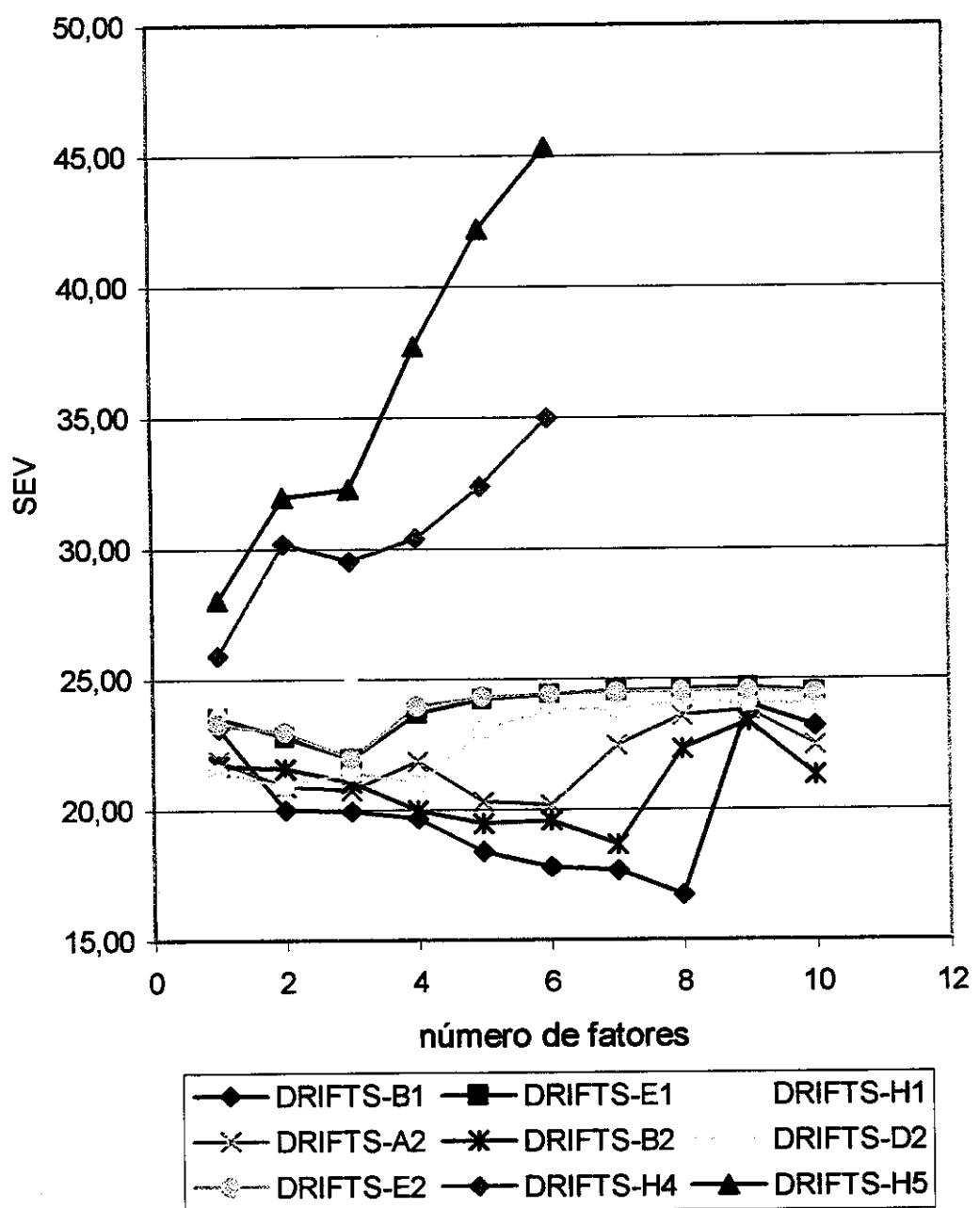


Figura 7.12 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de DRIFTS para o número de queda.

7.3 Técnica de NIR

Nas tabelas 7.17, 7.18 e 7.19 são apresentados os resultados encontrados para os valores de R^2 , SEC e SEV, para os três parâmetros empregando os dados de NIR, sendo o número de variáveis latentes (ou fatores) utilizado, correspondente ao menor PRESS.

Todos os modelos apresentados, apesar de empregarem diferentes pré-processamentos nos dados, apresentam boa correlação e desempenho semelhantes. Já quando os dados são tratados com primeira e segunda derivadas, a redução de variáveis latentes não é tão acentuada como aquela verificada para os modelos que empregam dados no infravermelho médio (HATR e DRIFTS). Uma exceção é observada para o número de queda, onde se verifica diminuição no número de variáveis latentes, sem perda da correlação.

Os resultados aqui apresentados, mostram um comportamento distinto para os dados NIR, para os quais são possíveis excelentes correlações para todos os parâmetros, quando os modelos são selecionados pelo menor PRESS.

Os dados de NIR também foram empregados na construção de modelos de calibração com correção do espalhamento de luz (MSC), sendo os modelos que empregam somente MSC apresentados na tabela 7.20, enquanto que os modelos que empregam dados com primeira derivada são apresentados na tabela 7.21.

Comparando-se os modelos das tabelas 7.20 e 7.21 com os análogos das tabelas 7.17 e 7.18, pode-se observar que o emprego da correção do espalhamento de luz (MSC) pouco influenciou o desempenho dos modelos de calibração construídos com dados NIR.

Tabela 7.17 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIRR.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
Modelo	A1	B1	C1	A1	B1	C1	A1	B1	C1
R²	0,928	0,909	0,907	0,993	0,918	0,913	0,996	0,980	0,978
Variáveis Latentes	7	7	7	12	7	7	14	11	11
SEC	0,265	0,299	0,302	0,017	0,062	0,063	2,65	6,19	6,64
SEV	0,339	0,406	0,391	0,060	0,085	0,078	22,21	24,89	24,44
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.18 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIRR com primeira derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
Modelo	D1	E1	F1	D1	E1	F1	D1	E1	F1
R²	0,997	0,998	0,998	0,995	0,997	0,997	0,998	0,996	0,996
Variáveis Latentes	7	6	7	6	5	6	7	5	6
SEC	0,049	0,035	0,039	0,014	0,011	0,010	2,09	2,66	2,70
SEV	0,446	0,426	0,435	0,079	0,075	0,076	20,49	20,88	19,54
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.19 – Resultados da modelagem empregando os espectros DRIFT com segunda derivada.

Parâmetro	Proteína			Cinzas			Nº de Queda		
	G1	H1	I1	G1	H1	I1	G1	H1	I1
R²	0,994	0,998	0,995	0,995	0,997	0,997	0,991	0,996	0,996
Variáveis Latentes	6	6	6	6	5	6	5	5	6
SEC	0,072	0,040	0,070	0,015	0,011	0,012	4,16	2,63	2,78
SEV	0,466	0,456	0,460	0,090	0,084	0,085	20,93	21,46	21,58
Centrados na média	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim	não
Escalados pela variância	não	sim	sim	não	sim	sim	não	sim	sim

Tabela 7.20 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIRR somente com correção do espalhamento de luz (MSC).

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda	
	A2	B2	A2	B2	A2	B2
R²	0,930	0,994	0,926	0,996	0,979	0,997
Variáveis Latentes	8	13	8	13	11	15
SEC	0,261	0,070	0,058	0,013	6,36	2,09
SEV	0,339	0,340	0,068	0,072	22,67	24,19
Centrados na média	sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância	não	sim	não	sim	não	sim

Por outro lado, o emprego da primeira derivada (tabela 7.21) reduziu o número de variáveis latentes necessárias na modelagem quando comparados com os modelos onde somente os dados são tratados com o emprego da correção do espalhamento de luz (tabela 7.20).

Um novo conjunto de dados NIR, também foi obtido empregando-se o conjunto de tratamentos (apresentados no fluxograma da figura 6.12), e que foi modelado empregando dois métodos para a seleção de variáveis. Os principais modelos empregando seleção via método das variáveis importantes são apresentados na tabela 7.22, e empregando seleção via método da subtração dos espectros são apresentados na tabela 7.23.

Os principais resultados também foram plotados e são apresentados nas figuras 7.13, 7.14 e 7.15.

Tabela 7.21 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIR com primeira derivada e correção do espalhamento de luz (MSC) .

Parâmetro	Proteína		Cinzas		Nº de Queda		
	Modelo	D2	E2	D2	E2	D2	E2
R²		0,997	0,998	0,995	0,996	0,997	0,996
Variáveis Latentes		7	6	6	5	7	5
SEC		0,051	0,039	0,014	0,013	2,19	2,82
SEV		0,454	0,429	0,080	0,075	21,55	20,83
Centrados na média		sim	sim	sim	sim	sim	sim
Escalados pela variância		não	sim	não	sim	não	sim

Tabela 7.22 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIR e seleção de variáveis via método das variáveis mais importantes.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	E4	E4	H4
R²	0,998	0,997	0,824
Variáveis Latentes	6	5	4
SEC	0,046	0,011	18,74
SEV	0,308	0,081	36,72
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

Tabela 7.23 – Resultados da modelagem empregando os espectros NIR e seleção de variáveis via método da subtração dos espectros.

Parâmetro	Proteína	Cinzas	Nº de Queda
Modelo	H5	H5	H5
R²	0,953	0,995	0,999
Variáveis Latentes	3	6	6
SEC	0,212	0,014	1,37
SEV	0,437	0,102	43,19
Centrados na média	sim	sim	sim
Escalados pela variância	sim	sim	sim

No apêndice C deste trabalho, encontram-se apresentados alguns dos melhores modelos, agora selecionados segundo os valores de SEV, e que são comparados empregando o teste F.

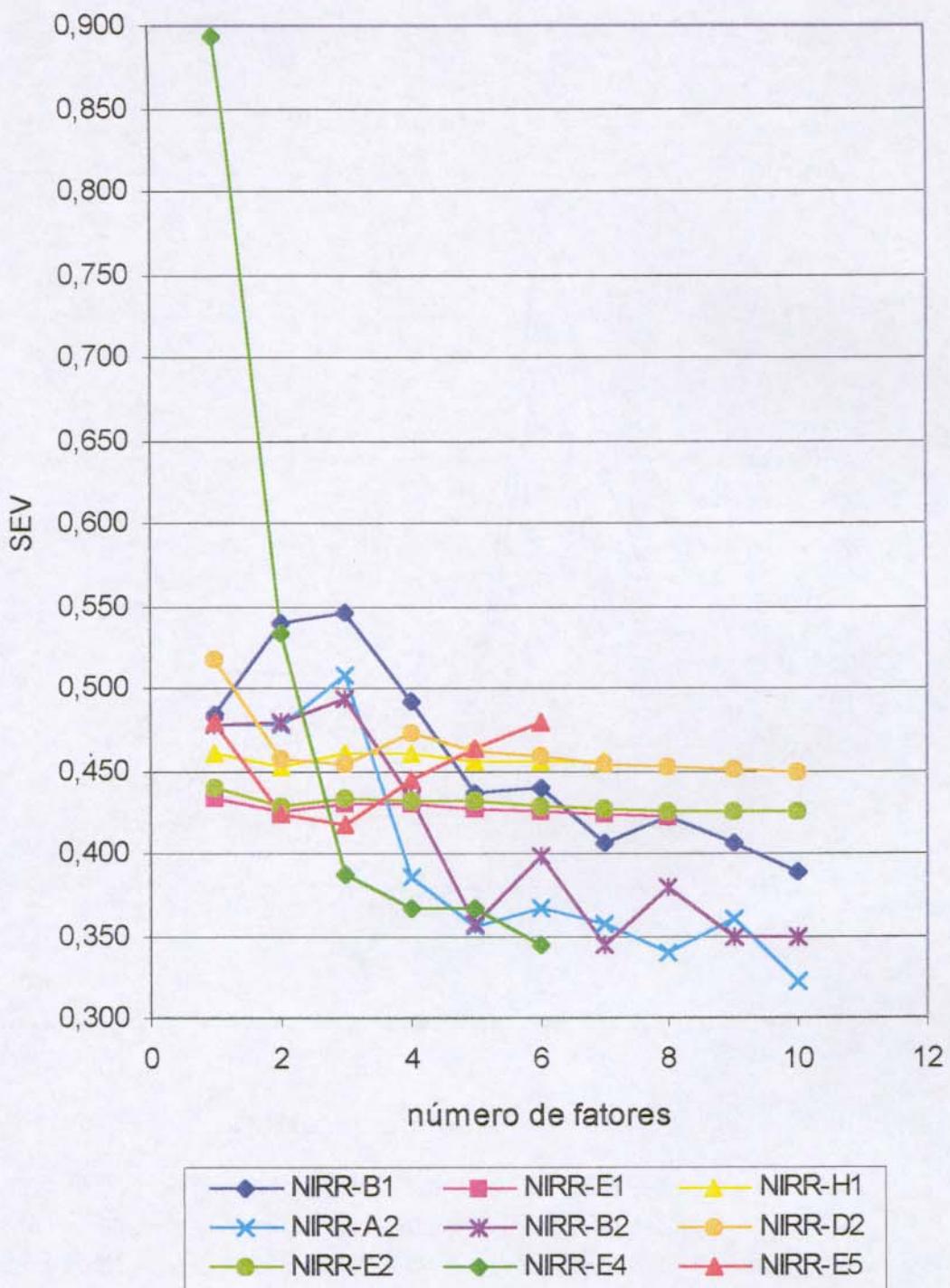


Figura 7.13 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de NIRR para o teor de proteína.

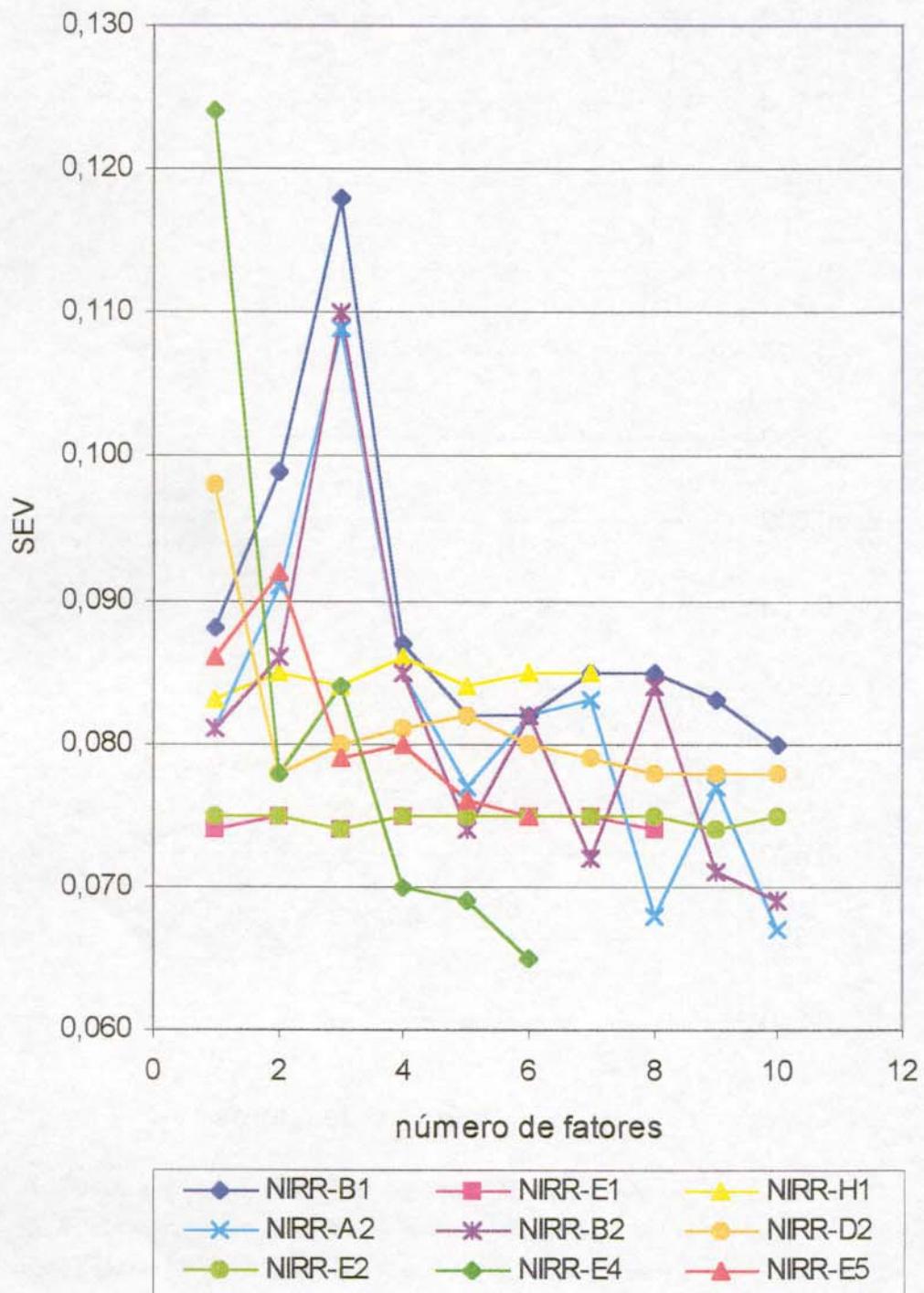


Figura 7.14 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de NIRR para o teor de cinza.

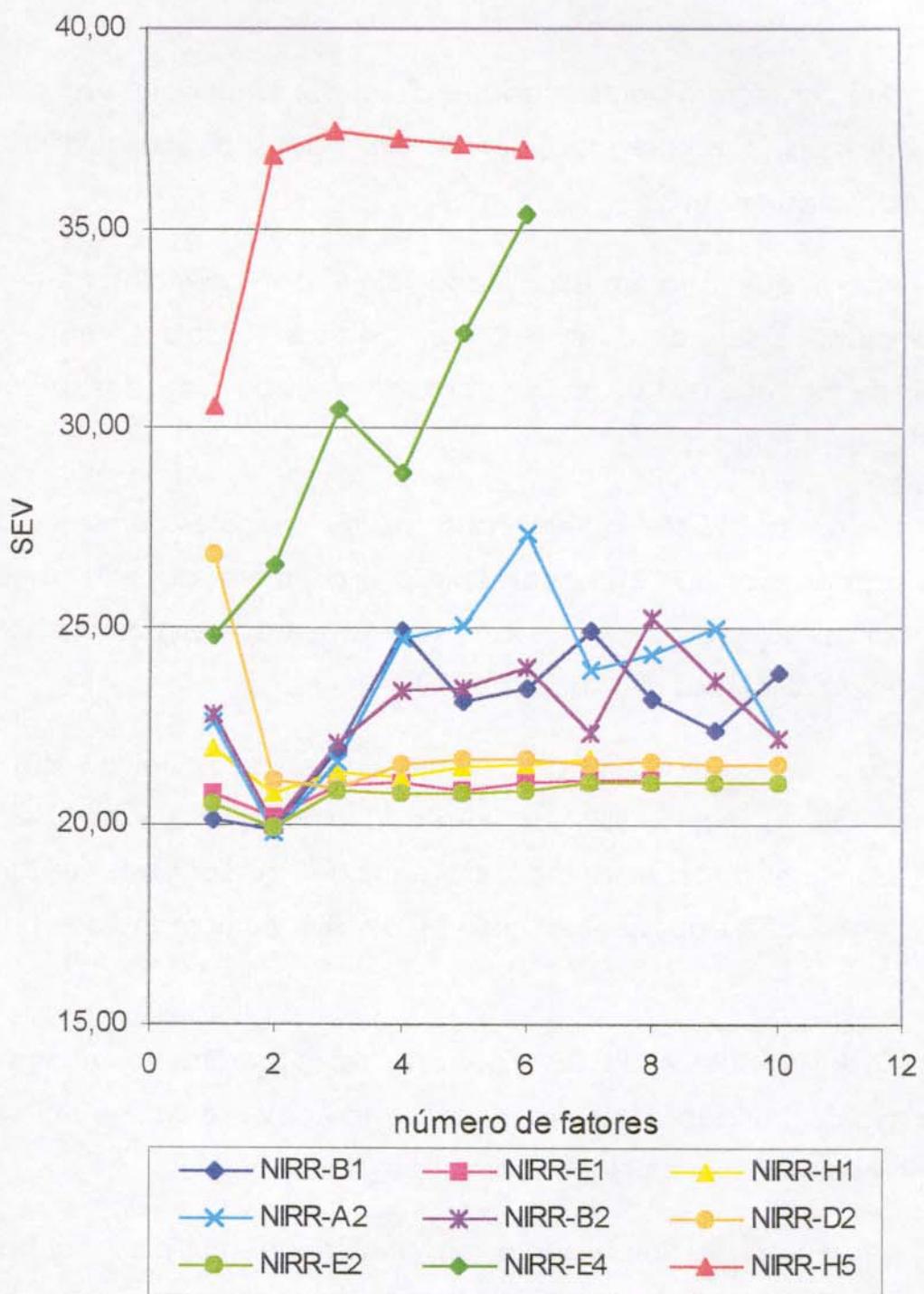


Figura 7.15– Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de NIRR para o número de queda.

7.4 Modelagens para Estimar o Teor de Proteína

Até aqui foram apresentados e discutidos os modelos segundo a técnica espectroscópica empregada, sendo explorados diversas variantes para a construção dos mesmos.

Agora, que já foram examinadas algumas tendências, frente aos dados modelados, pode-se comparar as diversas técnicas em função do desempenho que estas apresentam para cada um dos parâmetros de qualidade estudados.

Na figura 7.16 são apresentados os três melhores conjuntos de modelos para cada técnica espectroscópica experimentada. Os modelos mais significativos de cada conjunto, são aqueles que apresentam menores erros na previsão das amostras de validação (SEV).

Com relação as estimativas para o teor de proteína, estes resultados mostram que a técnica NIRR apresenta modelos com SEV maiores, na ordem de 0,350, que as técnicas no infravermelho médio (HATR e DRIFTS), cujos melhores modelos apresentam valores de SEV compreendidos entre 0,150 e 0,250.

Todavia, apesar do SEV figurar entre os parâmetros mais significativos para avaliar a eficiência de um modelo, não deve-se unicamente inferir sobre o desempenho das modelagens com base nele.

Uma proposta interessante de análise de múltiplos parâmetros para avaliar os modelos de regressão foi apresentada por Mello [307], que emprega a própria análise por componentes principais para agrupar os modelos que apresentam comportamento semelhante.

Na figura 7.17 são apresentados os gráficos bi-variados para a análise por componentes principais de alguns dos modelos aqui estudados, sendo simultaneamente modelados os valores de R^2 , VL, SEC e SEV.

Nesta modelagem PCA a variância explicada para as componentes principais foram 56% (PC1), 30% (PC2) e 13% (PC3).

Uma tabela mais completa, contendo os valores modelados no PCA é apresentada no apêndice D deste trabalho, bem como exemplos de curvas de regressão para alguns dos modelos são apresentadas no apêndice E.

Estes resultados separam os modelos em 2 grupos: O grupo dos modelos com maior SEV (NIRRS-B1(10), NIRRS-A2(10), NIRRS-B2(7), NIRRS-E1(8) e DRIFTS-E1(2) e o grupo dos modelos com menor SEV (HATR-B1(9), HATR-A2(7), HATR-B2(10), DRIFTS-B1(12), DRIFTS-A2(7) e DRIFTS-B2(9)).

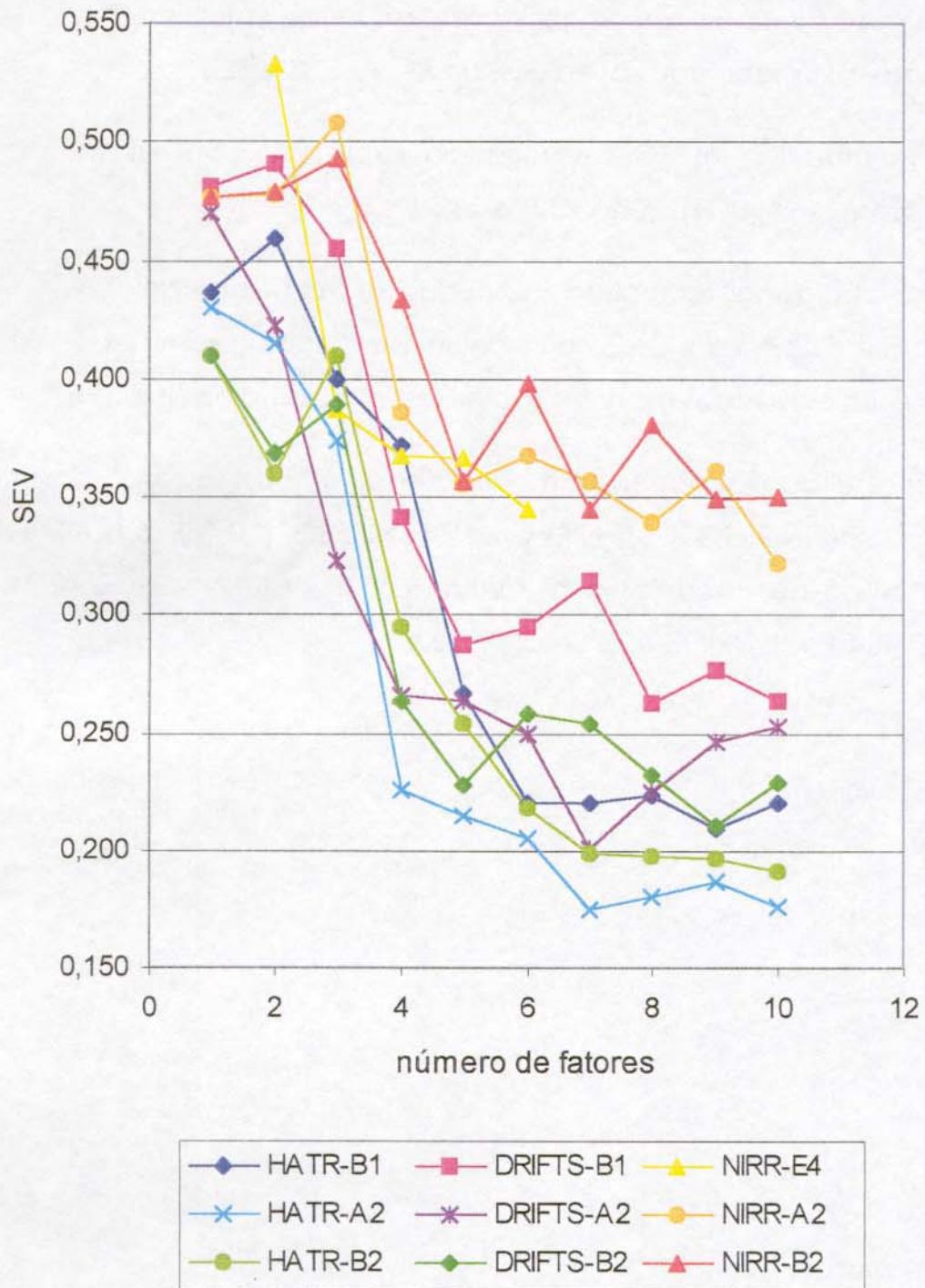


Figura 7.16 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR, DRIFTS e NIRRR para estimar o teor de proteína.

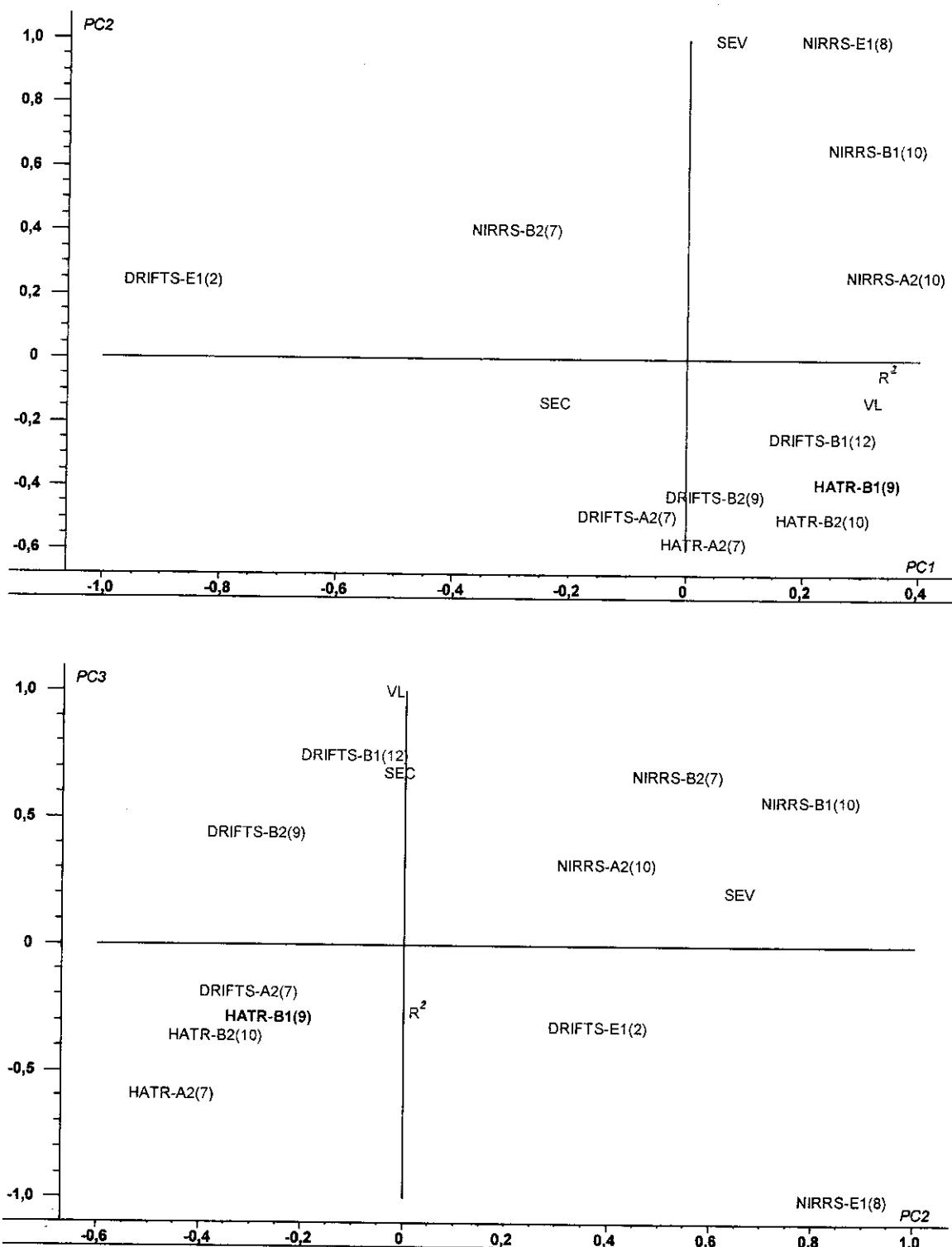


Figura 7.17 – Gráficos bi-variados do PCA com os valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRR para estimar o teor de proteína.

7.5 Modelagens para Estimar o Teor de Cinza

O comportamento dos modelos observado para as estimativas do teor de cinza foram bastante semelhantes ao observados para as estimativas do teor de proteína.

Na figura 7.18 são também apresentados três conjuntos de modelos para cada técnica espectroscópica experimentada.

Com relação as estimativas para o teor de cinza, estes resultados mostram que a técnica NIRR apresenta modelos com SEV maiores, na ordem de 0,070, que as técnicas no infravermelho médio (HATR e DRIFTS), cujos melhores modelos apresentam valores compreendidos entre 0,030 e 0,050.

Nas figuras 7.19, 7.20 e 7.21 são apresentados os gráficos bi-variados para a análise por componentes principais de alguns dos modelos aqui estudados para estimar o teor de cinza em amostras de farinha de trigo. Na figura 7.22 é apresentado o gráfico PC1xPC2xPC3 (tridimensional) para enriquecer esta análise.

Nesta modelagem PCA a variância explicada para as componentes principais foram 60% (PC1), 35% (PC2) e 2% (PC3).

A tabela completa, contendo os valores modelados no PCA é apresentada no apêndice D deste trabalho, bem como exemplos de curvas de regressão para alguns dos modelos são apresentadas no apêndice E.

O resultados também tendem a separar os modelos em 2 grupos. O grupo dos modelos com maior SEV (NIRRS-A2(10), NIRRS-B2(7) e NIRRS-H1(6) e o grupo dos modelos com menor SEV (HATR-B1(13), HATR-B2(6), DRIFTS-B1(10), DRIFTS-A2(10) e DRIFTS-B2(9)).

Ainda são observadas três modelos com comportamentos singulares: os modelos HATR-A2(4), HATR-B2(6) e o modelo DRIFTS-E1(2) que apresentam baixa correlação, poucas variáveis latentes na modelagem e maior SEC.

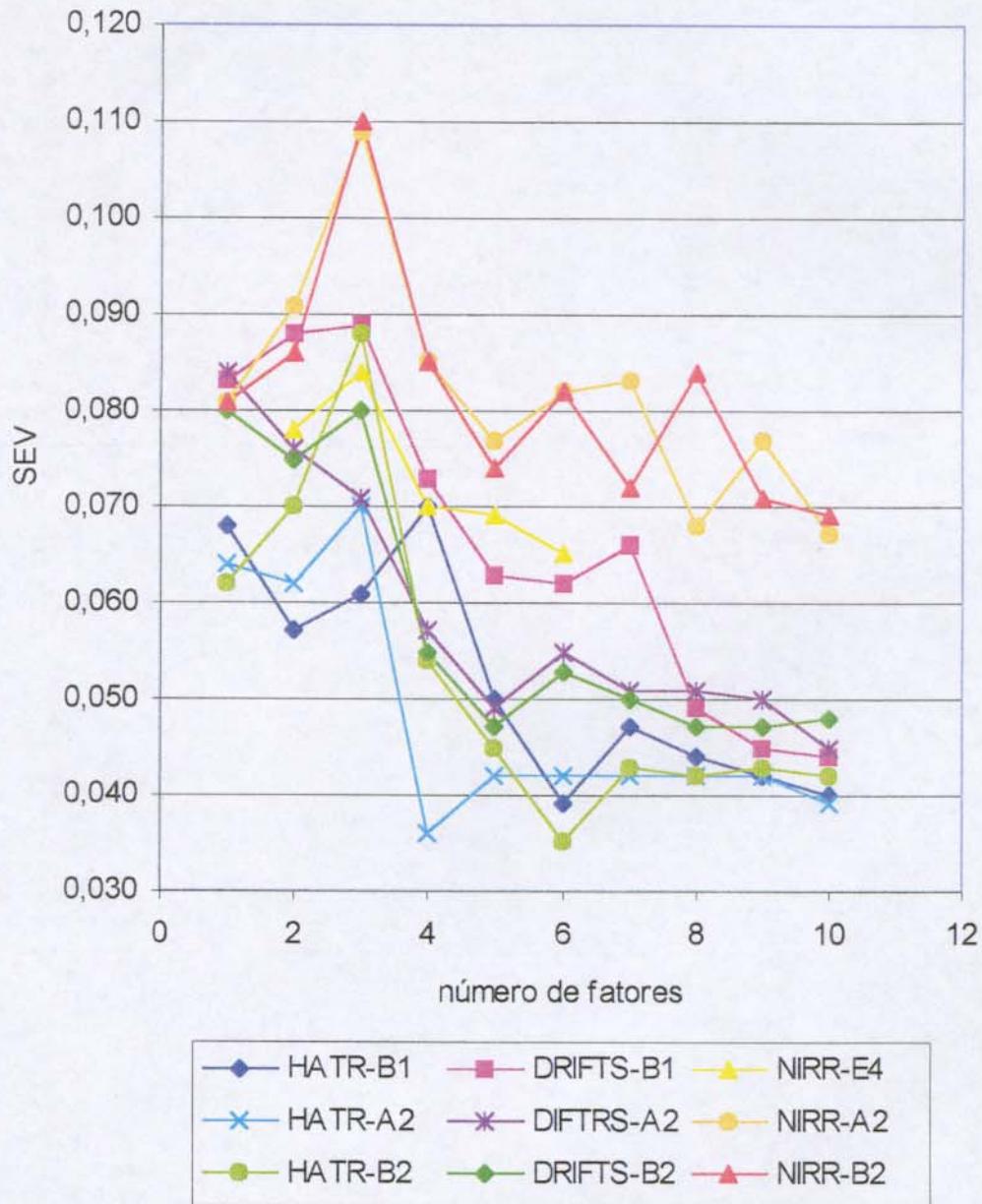


Figura 7.18 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR, DRIFTS e NIRRR para estimar o teor de cinza.

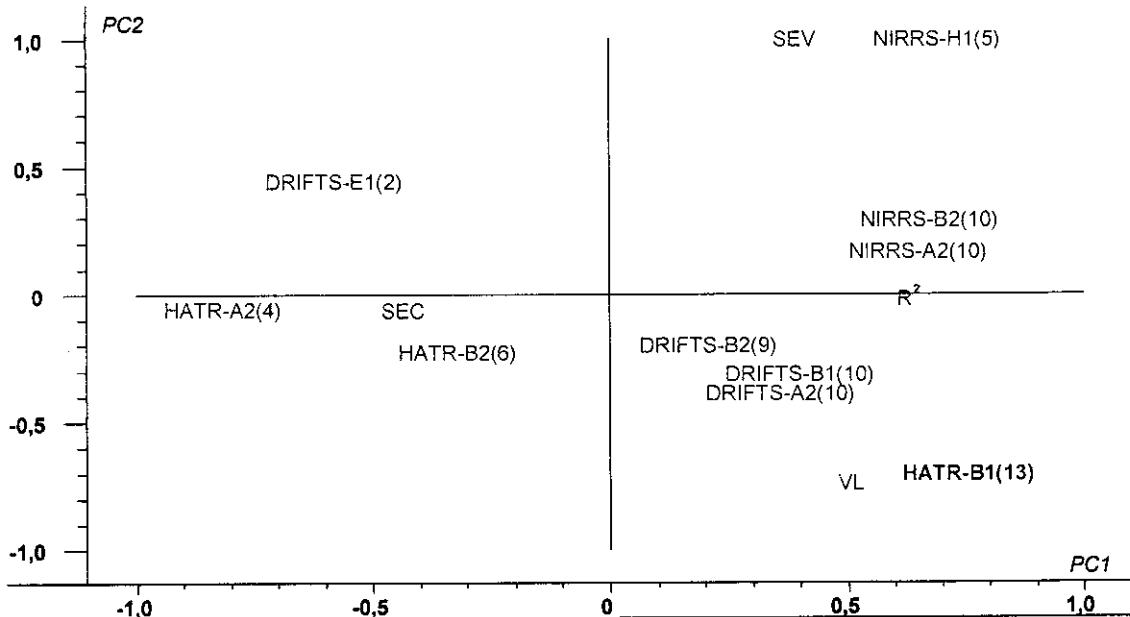


Figura 7.19 – Gráfico bi-variado (PC1xPC2) para o PCA dos valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRRR para o teor de cinza.

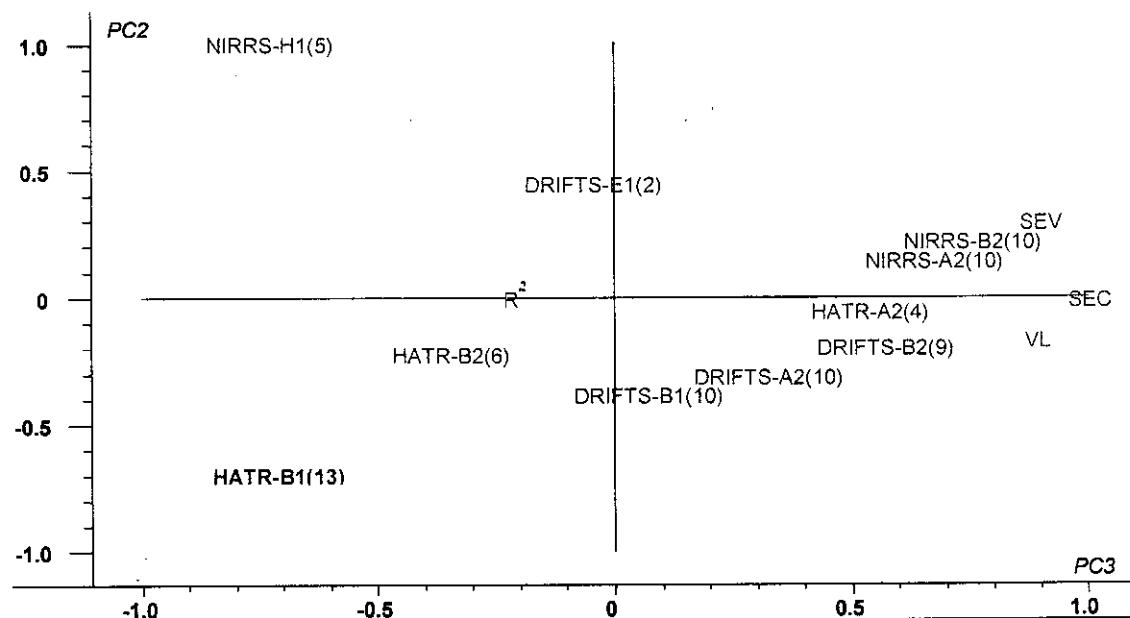


Figura 7.20 – Gráfico bi-variado (PC3xPC2) para o PCA dos valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRRR para o teor de cinza.

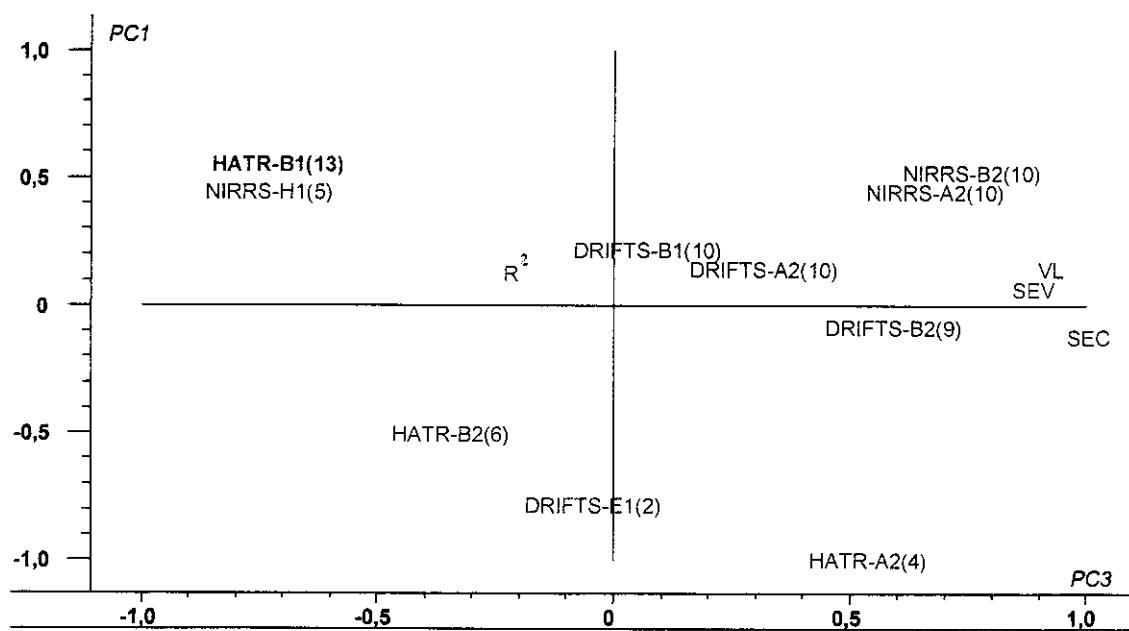


Figura 7.21 – Gráfico bi-variado ($PC3 \times PC1$) para o PCA com os valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRR para o teor de cinza.

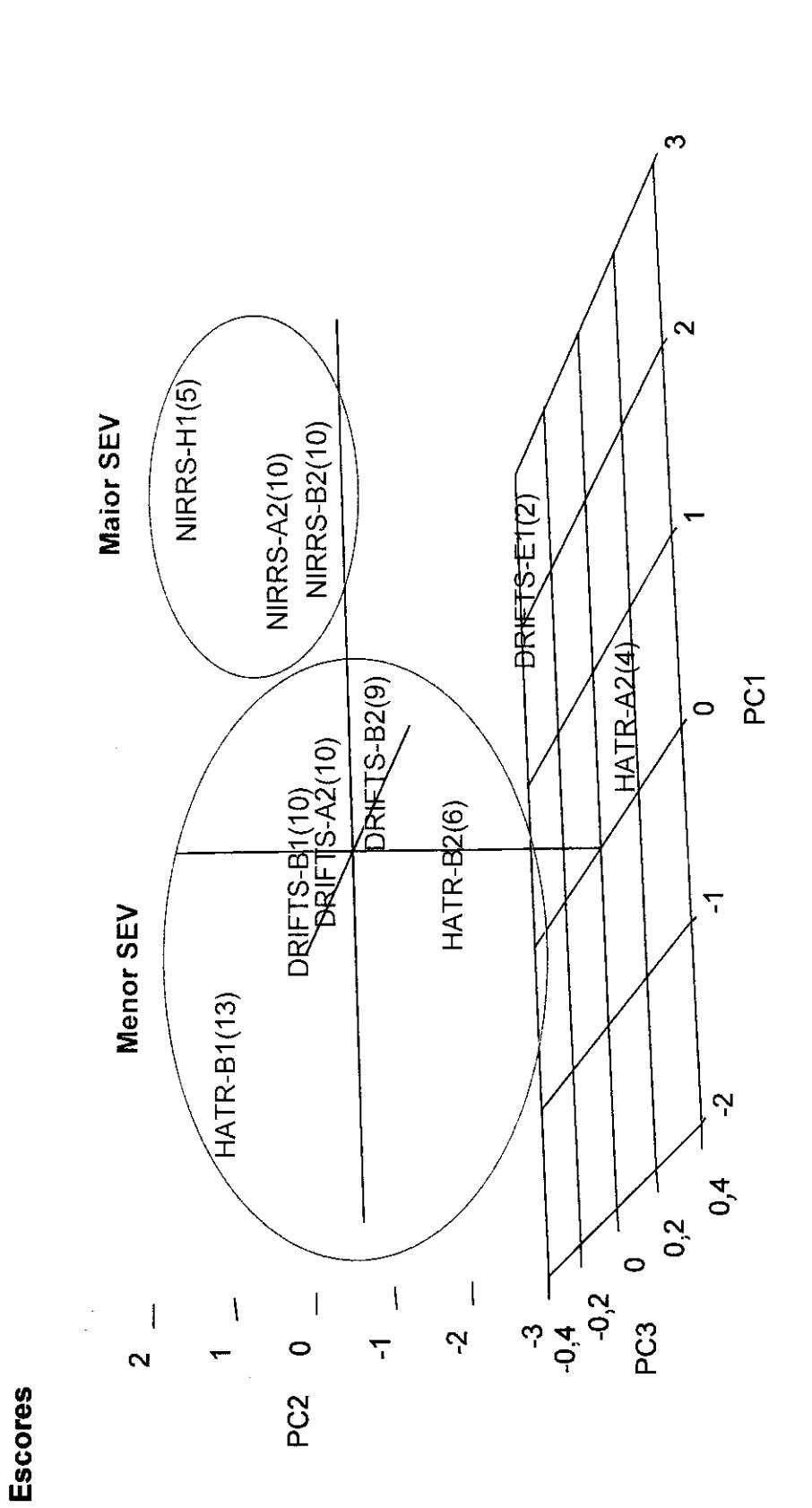


Figura 7.22 – Gráfico 3D para o PCA dos valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRRS para estimar o teor de cinza.

7.6 Modelagens para Estimar o Número de Queda

Na figura 7.23 são apresentados os gráficos de SEV em função do número de variáveis latentes de três conjuntos de modelos para cada técnica espectroscópica experimentada.

Com relação às estimativas para o número de queda, estes resultados mostram que a técnica NIRR apresenta modelos com SEV ligeiramente maiores, na ordem de 20,00, que as técnicas no infravermelho médio (HATR e DRIFTS), cujos melhores modelos apresentam valores compreendidos entre 16,00 e 20,00.

Na figura 7.24 são apresentados os gráficos bi-variados para a análise por componentes principais de alguns dos modelos aqui estudados. Nesta modelagem PCA, a variância explicada para as componentes principais foram 39% (PC1), 54% (PC2) e 7% (PC3).

Os resultados tendem a separar os modelos em 3 grupos. O grupo dos modelos com maior número de variáveis latentes (HATR-B1(6), HATR-A2(7), DRIFTS-B1(8) e DRIFTS-B2(7)); e os grupos dos modelos com menor número de variáveis latentes que se subdividiram em: o com R^2 elevado (NIRRS-E1(2), NIRRS-E2(2) e DRIFTS-E2(3)) e o com R^2 muito baixo (NIRRS-B1(2), NIRRS-A2(2)).

O comportamento apresentado com relação a este parâmetro ilustra claramente a tendência que a técnica NIRRS apresenta em superavaliação dos modelos quando são modelados pela matrix \mathbf{Y} os valores de número de queda.

Dá mesma forma que para os parâmetros descritos anteriores, a tabela completa, contendo os valores modelados no PCA é apresentada no apêndice D, bem como exemplos das curvas de regressão para alguns dos modelos são apresentadas no apêndice E.

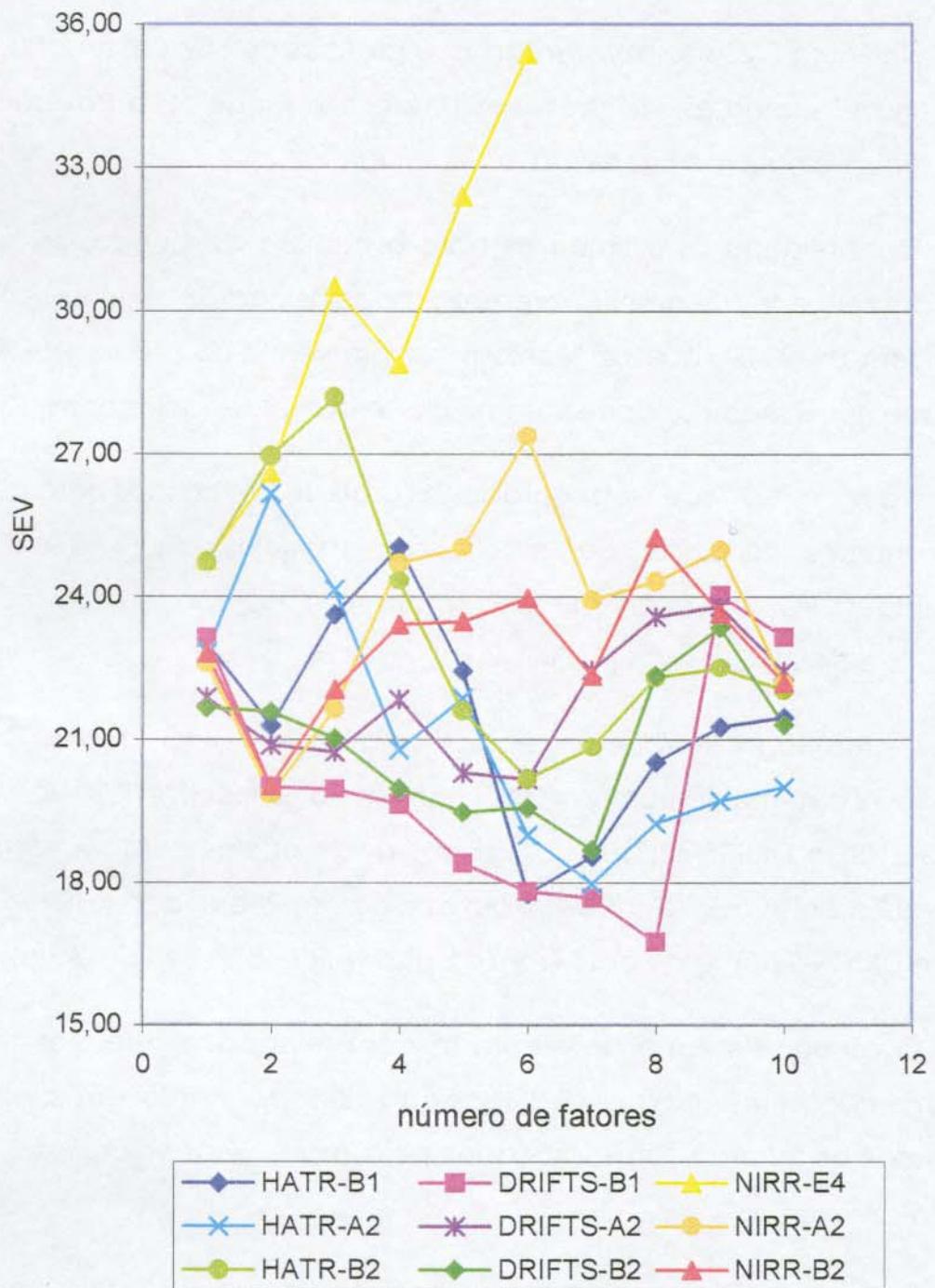


Figura 7.23 – Gráfico dos valores de SEV em função do números de fatores com dados de HATR, DRIFTS e NIRR para estimar o número de queda.

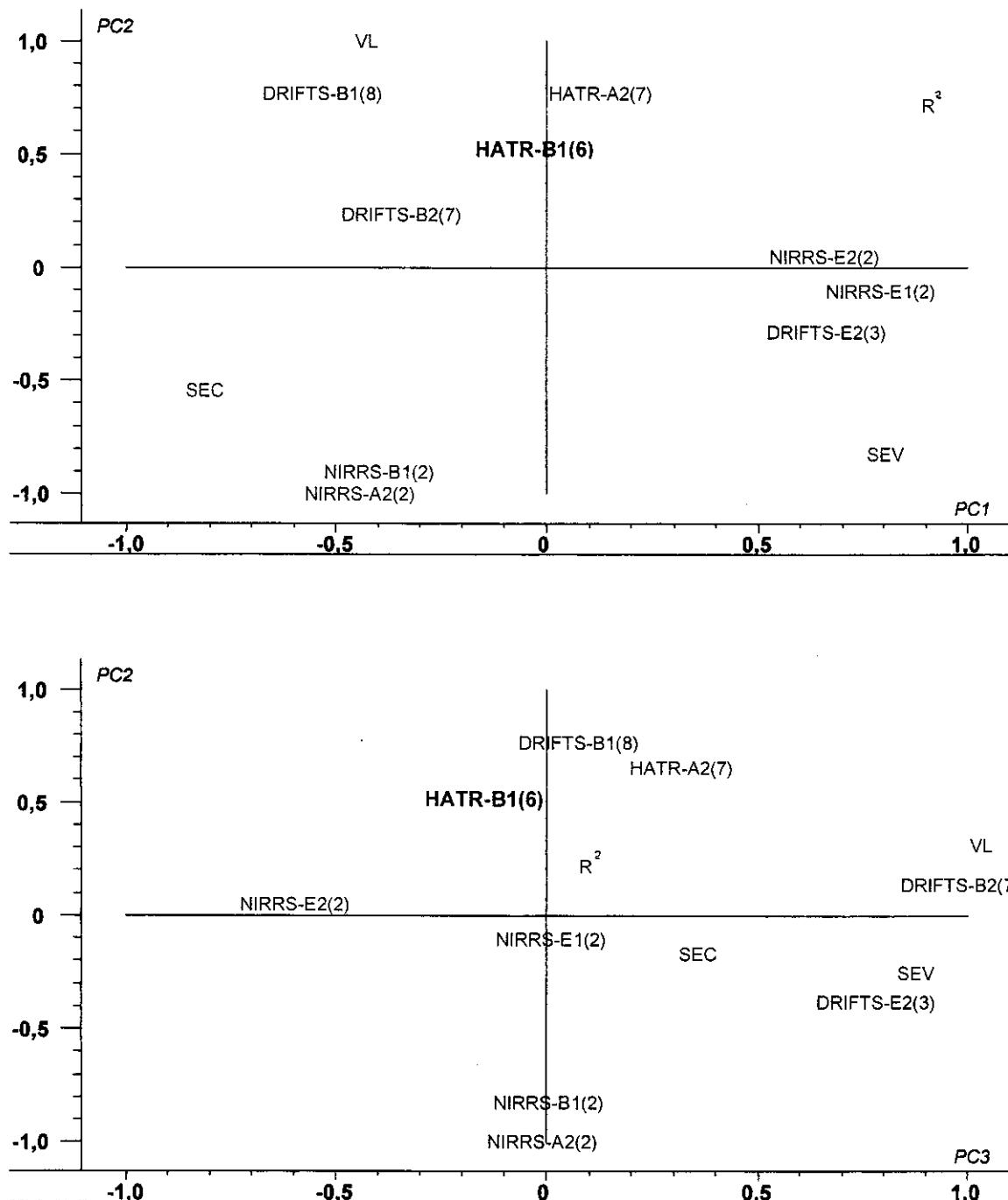


Figura 7.24 – Gráficos bi-variados dos para o PCA dos valores de R^2 , VL, SEC e SEV para os modelos de HATR, DRIFTS e NIRR para estimar o número de queda.

Conclusões

- As técnicas espectroscópicas de reflexão no infravermelho, experimentadas para estimar parâmetros de qualidade de farinha de trigo, apresentam como vantagens sobre os métodos de referência (oficiais) o baixo tempo de análise, a não destruição da amostra, a não agressão ao ambiente por não gerar resíduos, além do baixo custo visto sua utilização diária em análises de rotina. Estas vantagens às tornam adequadas para o emprego em sistemas de qualidade a serem implementados em Empresas do ramo alimentício, em particular aquelas que produzem macarrão, biscoitos e outros tipo de produtos basicamente constituídos de farinha de trigo;
- Os resultados apresentados, utilizando calibração por mínimos quadrados parciais (PLS), ratificam a potencialidade das técnicas de reflexão que empregam regiões no infravermelho médio (HATR e DRIFTS) para a construção de modelos de previsão, que visem a quantificação de parâmetros de qualidade de farinhas de trigo;
- A avaliação do desempenho de modelos, que baseia-se exclusivamente no coeficiente de correlação (R^2) e respectivo PRESS (ou SEC), pode induzir a escolha de modelos que apresentem elevada correlação, porém, capacidade de previsão questionável. Para modelos que visem uma melhor avaliação de amostras externas ao modelo, devemos empregar preferencialmente o SEV para discriminar os modelos mais robustos em conjunto com um teste de significância estatística, a exemplo do teste F empregado neste trabalho;

- Os modelos de regressão multivariados visando a determinação do teor de proteína que empregam dados HATR ou DRIFTS, apresentam melhor desempenho quando é empregada a correção para o espalhamento de luz (MSC). Nesta determinação os modelos tendem a formar dois grupos distintos: um conjunto com os modelos que empregam dados no infravermelho médio com valores de correlação elevados e baixos valores de SEV; e outro conjunto com os modelos com dados no infravermelho próximo que apresentam valores de SEV superiores aos demais;
- Os resultados aqui apresentados também mostram ser possível a construção de bons modelos para a previsão da proteína, mesmo quando são utilizadas poucas variáveis latentes, enquanto que até o presente momento trabalhos com dados DRIFTS têm utilizado elevado número de variáveis latentes [38];
- Na determinação do teor de cinza, bons modelos de regressão multivariados empregando poucas variáveis latentes podem ser construídos, entretanto melhores modelos são obtidos quando são empregadas em torno de 10 variáveis latentes. Nestas modelagens também foi observada a tendência dos dados no infravermelho próximo poduzirem modelos com habilidade de previsão inferior (maior SEV) àqueles que empregam dados no infravermelho médio;
- De uma forma geral, pode-se employar qualquer um dos conjuntos de modelos que utilizam dados no infravermelho médio (HATR ou DRIFTS), desde que seja utilizada a correção do espalhamento de luz nos dados espectrais e que preferencialmente sejam empregados, simultaneamente, as ferramentas de centrar os dados na média e escalar os dados pela variância;

- Apesar de não terem sido obtidos modelos de calibração que apresentem boa correlação entre as técnicas espectroscópicas e o número de queda (falling number), quaisquer um modelos com menor valor de SEV pode ser utilizado para estimar este parâmetro, pois os erros de previsão são da mesma ordem que aos erros de execução do ensaio [1, 2, 8]. Atribuí-se a baixa correlação encontrada ao elevado desvio padrão resultante da baixa reproducibilidade e baixa precisão do método de referência empregado.

Sugestões Para Trabalhos Futuros

- Outros parâmetros de interesse, como por exemplo os parâmetros obtidos pela farinografia, pela extensiografia e pela alveografia, podem ser avaliados e incorporados aos modelos de regressão multivariados desenvolvidos, pois uma das vantagens apresentadas por estas rotinas é a sua flexibilidade quanto a incorporação, bem como remoção de amostras ou variáveis de interesse;
- Sugere-se a construção de modelos de classificação via análise discriminante ou SIMCA para o conjunto de medidas de número de queda, esperando-se que esta nova abordagem venha a possibilitar uma melhor interpretação dos resultados obtidos por técnicas espectroscópicas de reflexão no infravermelho;
- Podem ser experimentados outros procedimentos para a seleção dos comprimentos de onda (ou freqüências) a serem modelados, como por exemplo o algoritmo genético [290], as transformadas wavelet [292] e as redes neurais [307], que devem conferir aos modelos de regressão multivariada maior estabilidade;
- Os parâmetros de qualidade aqui avaliados podem ser combinados e modelados permitindo a construção de um sistema de classificação das farinhas e/ou subprodutos com elas processados. Assim, determinada farinha pode ser indicada ou desaconselhada por um modelo quimiométrico, para sua utilização ou não em uma determinada planta de processo alimentício.

Referências Bibliográficas

1. GERMANI,R.; BENASSI,V.T.; CARVALHO,J.L.V.; WATANABE,E.; CAMPOS,J.E. & CARVALHO,C.W.P. - *Curso de controle de qualidade tecnológica do grão e da farinha de trigo* - Rio de Janeiro: Embrapa,1997.
2. POMERANZ,Y. - *Modern cereal science and technology* - New York: VCH Publishers, 1987.
3. BRASIL. Ministério da Agricultura, do Abastecimento e da Reforma Agrária - Portaria nº167, de 29 de julho de 1994. Diário Oficial, Brasília,147, 11640-11642, ago. 1994, Seção 1.
4. FARFÁN,J.A. - *Química de proteínas aplicada à ciência e tecnologia dos alimentos* - Campinas: Editora da Unicamp, 1990.
5. LASZLO,H.; BASSO,L.M. & COELHO,C.M.L. - *Química de alimentos: Alteração dos componentes orgânicos* - São Paulo: Nobel, 1986.
6. BOBBIO,F.O. & BOBBIO,P.A. - *Introdução à química de alimentos* - São Paulo: Varela, 1989.
7. BRASIL. Ministério da Saúde – Portaria nº 354, de 18 de julho de 1996. Diário Oficial, Brasília,140, 13557-13558, jul. 1996, Seção 1.
8. American Association of Cereal Chemists - *Approved methods of the american association of cereal chemists* - St. Paul: American Association of Cereal Chemists, 1983.
9. LAW,D.P. & TKACHUK,R. - *Determination of moisture content in wheat by near-infrared diffuse reflectance spectrophotometry* - Cereal Chem., **54**, 874-881, 1977.
10. WILLIAMS,P.C. & THOMPSON,B.N. - *Influence of whole meal granularity on analysis of HRS wheat for protein and moisture by near-infrared reflectance spectroscopy* - Cereal Chem., **55**, 1014-1037, 1978.
11. DIACHUK,V.R.; HAMILTON,E.; SAVCHUK,N. & JACKEL,S.S. - *Bakery flour control using near-infrared reflectance analysis* - Bakers Dig., **55**, 72-75, 1981.

12. WILLIAMS,P.C.; THOMPSON,B.N.; WETZEL,D.; MCLAY,G.W. & LOEWEN,D. - Near-infrared instruments in flour mill quality control - Cereal Food. World, **26**, 234-237, 1981.
13. OSBORNE,B.G. - Principles and practice of near-infrared (NIR) reflectance analysis - J. Food Technol., **16**, 13-19, 1981.
14. OSBORNE,B.G.; DOUGLASS,S. & FEARN,T. - The application of near-infrared reflectance analysis to rapid flour testing - J. Food Technol., **17**, 355-363, 1982.
15. WILLIAMS,P.C.; NORRIS,K.H. & ZAROWSKI,W.S. - Influence of temperature on estimation of protein and moisture in wheat by near-infrared reflectance - Cereal Chem., **59**, 473-477, 1982.
16. OSBORNE,B.G. & FEARN,T. - Collaborative evaluation of universal calibrations for the measurement of protein and moisture in flour by near-infrared reflectance - J. Food Technol., **18**, 453-460, 1983.
17. OSBORNE,B.G. & FEARN,T. - Collaborative evaluation of near-infrared reflectance analysis for the determination of protein, moisture and hardness in wheat - J. Sci. Food Agr., **34**, 1011-1017, 1983.
18. OSBORNE,B.G. - Determination of moisture in white flour, ground wheat and whole wheat by near-infrared reflectance using a single calibration - J. Sci. Food Agr., **38**, 341-346, 1987.
19. FORINA,M.; DRAVA,G.; BOGGIA,R.; LANTERI,S. & CONTI,P. - Validation procedures in near-infrared spectrometry - Anal. Chim. Acta, **295**, 109-119, 1994.
20. HONG,J.H.; IKEDA,K.; KREFT,I. & YASUMOTO,K. - Near-infrared diffuse reflectance spectroscopic analysis of the amounts of moisture, protein, starch, amylose and tanin in buckwheat flours - J. Nutr. Sci. Vitaminol. - **42**, 359-366, 1996.
21. GAINES,C.S. & WINDHAM,W.R. - Effect of wheat moisture content on meal apparent particle size and hardness scores determined by near-infrared reflectance spectroscopy - Cereal Chem., **75**, 386-391, 1998.
22. MUNSINGER,R. - Kjeldahl nitrogen analysing systems - Cereal Food. World, **25**, 52-53, 1980.
23. TELLEFSON,J.R. - Calibration in Kjeldahl protein analysis - Cereal Food. World, **25**, 54-55, 1980.
24. WILES,P.G.; GRAY,I.K. & KISSLING,R.C. - Routine analysis of proteins by Kjeldahl and Dumas methods: Review and interlaboratory study using dairy products - J. AOAC Int., **81**, 620-632, 1998.

25. WILLIAMS,P.C. - Screening wheat for protein and hardness by near-infrared reflectance spectroscopy - Cereal Chem., **56**, 166-172, 1979.
26. NORRIS,K.H. & WILLIAMS,P.C. - Optimization of mathematical treatments of raw near-infrared signal in the measurement of protein in hard red spring wheat. I. influence of particle size - Cereal Chem., **61**, 158-165, 1984.
27. WATSON,C.A.; SHUEY,W.C.; BANASIK,O.J. & DICK,J.W. - Effect of wheat class on near-infrared reflectance - Cereal Chem., **54**, 1264-1269, 1977.
28. HUNT,W.H.; FULK,D.W.; THOMAS,T. & NOLAN,T. - Effect of type of grinder on protein values of hard red winter wheat when analyzed by infrared reflectance devices - Cereal Food. World, **23**, 143-144, 1978.
29. MILLER,B.S.; POMERANZ,Y.; THOMPSON,W.O.; NOLAN,T.W.; HUGUES,J.W.; DAVIS,G.; JACKSON,N.G. & FULK,D.W. - Interlaboratory and intralaboratory reproducibility of protein determination in hard red winter wheat by Kjeldahl and near-infrared procedures - Cereal Food. World, **23**, 198-201, 1978.
30. TKACHUK,R. - Protein analysis of whole wheat kernels by near-infrared reflectance - Cereal Food. World, **26**, 584-587, 1981.
31. CZUCHAJOWSKA,Z. & POMERANZ,Y. - Changes in maturing wheat as determined by near-infrared reflectance spectroscopy - Cereal Chem., **66**, 432-435, 1983.
32. OSBORNE,B.G. - Investigation of the performance of an improved calibration for the determination of protein in UK home-grown wheat by near-infrared reflectance analysis - J. Sci. Food Agr., **34**, 1441-1443, 1983.
33. WILLIAMS,P.C. & KRISCHENKO,V.P. - A comparative study of two computerized spectrophotometers for the near-infrared analysis of wheat for protein - Appl. Spectrosc., **40**, 785-790, 1986.
34. BARTON II,F.E. & WINDHAM,W.R. - Determination of acid-detergent fiber and crude protein in forages by near-infrared reflectance spectroscopy: Collaborative study - J. Assoc. Off. Ana. Chem., **71**, 1162-1167, 1988.
35. DELWICHE,S.R.; PIERCE,R.O.; CHUNG,O.K. & SEABOURN,W.- Protein content of wheat by near-infrared spectroscopy of whole grain: Collaborative study - J. AOAC Int., **81**, 587-603, 1998.
36. WILLIAMS,P.C.; NORRIS,K.H. & SOBERING,D.C. - Determination of protein and moisture in wheat and barley by near-infrared transmission - J. Agr. Food Chem., **33**, 239-244, 1985.

37. REEVES III,J.B. - Near- versus mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for the quantitative determination of the composition of forages and by-products - J. Near-infrared Spec., **2**, 49-57, 1994.
38. REEVES III,J.B. & DELWICHE,S.R.- Determination of protein in ground wheat samples by mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy - Appl. Spectrosc., **51**, 1200-1204, 1997.
39. REEVES III,J.B. - Concatenation of near- and mid-infrared spectra to improve calibrations for determining forage composition - J. Agr. Food Chem., **45**, 1711-1714, 1997.
40. REEVES III,J.B. - Mid- versus near-infrared spectroscopic analysis of diversely treated feedstuffs - J. Near-infrared Spec., **7**, 89-100, 1999.
41. SGRULLETTA,D. & DE STEFANIS,E. - Simultaneous evaluation of quality parameters of durum wheat (*Triticum durum*) by near-infrared reflectance spectroscopy - Ital. J. Food Sci., **4**, 295-301, 1997.
42. SGRULLETTA,D. & DE STEFANIS,E. - Simultaneous evaluation of quality parameters of durum wheat (*Triticum durum*) by near-infrared reflectance spectroscopy - Ind. Aliment. - Italy, **11**, 17-24, 1998.
43. GUARIENTI, E.M. - Qualidade industrial de trigo - Passo Fundo: Embrapa - CNPT, 1996.
44. PERTEN,H. - Rapid measurement of wet gluten quality by the gluten index - Cereal Food. World, **35**, 401-402, 1990.
45. ROBERT,P; BERTRAND,D.; DEVAUX,M.F. & SIRE,A. - Identification of chemical constituents by multivariate near-infrared spectral imaging - Anal. Chem., **64**, 664-667, 1992.
46. MORTENSEN,A.B. & WALLIN,H. - Gravimetric determination of ash in foods: NMKL collaborative study - J. Assoc. Off. Ana. Chem., **72**, 481-483, 1989.
47. POSNER,E.S. - Wheat and flour ash as a measure of millability - Cereal Food. World, **36**, 626-629, 1991.
48. IWAMOTO,M.; KONGSERRE,N.; UOZUMI,J. & SUZUKI,T. - Determination of ash content in home-grown wheat flour in Japan by near-infrared diffuse reflectance analysis - J. Jpn. Soc. Food Sci., **33**, 842-847, 1986.

49. SZALÁNCZY,E. - Application of near-infrared reflection (NIR) spectroscopy for the rapid determination of the nutrient content of mixed feeds and raw materials for mixed feed production - *Acta Chim. Hung.*, **124**, 813-817, 1987.
50. ACQUISTUCCI,R.; BUCCI,R.; MAGRI,A.D. & MAGRI,A.L. - Evaluation of the moisture and ash contents in wheat mills by multistep programmed thermogravimetry - *Thermochim. Acta*, **188**, 51-62, 1991.
51. SYMONS,S.J. & DEXTER,J.E. - Computer analysis of fluorescence for the measurement of flour refinement as determined by flour ash content, flour grade color, and tristimulus color measurements - *Cereal Chem.*, **68**, 454-460, 1991.
52. SYMONS,S.J. & DEXTER,J.E. - Estimation of milling efficiency: Prediction of flour refinement by the measurement of pericarp fluorescence - *Cereal Chem.*, **69**, 137-141, 1992.
53. DE ALDANA,B.R.V.; GARCÍA-CRIADO,B.; GARCÍA-CIUDAD,A. & PÉREZ-CORONA,M.E. - Non-destructive method for determining ash content in pasture samples: Application of near-infrared reflectance spectroscopy - *Commun. Soil Science Plant. Anal.*, **27**, 795-802, 1996.
54. BRUNO-SOARES,A.M.; MURRAY,I.; PATERSON,R.M. & ABREU,J.M.F. - Use of near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for the prediction of the chemical composition and nutritional attributes of green crop cereals - *Anim. Feed Sci. Tech.*, **75**, 15-25, 1998.
55. PERTEN, H. - Application of the falling number method for evaluating alpha-amylase activity - *Cereal Chem.*, **41**, 127-140, 1964.
56. ASP,E.H. - Laboratory methods for alpha-amylase analysis - *Cereal Food. World*, **35**, 941-946, 1990.
57. MATHEWSON,P.R. & POMERANZ,Y. - Detection of sprout wheat by rapid colorimetric determination of alpha-amylase - *J. Assoc. Off. Ana. Chem.*, **60**, 16-20, 1977.
58. MATHEWSON,P.R. & POMERANZ,Y. - Modified chromogenic α -amylase assay for sprouted wheat - *J. Assoc. Off. Ana. Chem.*, **62**, 198-200, 1979.
59. MATHEWSON,P.R.; FAHRENHOLZ,C.H.; BOOTH,G.D.; MILLER,B.S. & POMERANZ,Y. - Colorimetric alpha-amylase, falling number, and amylograph assays of sprouted wheat: Collaborative study - *J. Assoc. Off. Ana. Chem.*, **64**, 1243-1251, 1981.
60. KRUGER,J.E.; RANUM,P.M. & MACGREGOR,A.W. - Note on the determination of alpha-amylase with the Perkin Elmer model 191 grain amylase analyzer - *Cereal Chem.*, **56**, 209-212, 1979.

61. CAMPBELL,J.A. - Measurement of alpha-amylase in grains - *Cereal Food. World.*, **25**, 46-49, 1980.
62. KRUGER,J.E. & TIPPLES,K.H. - Modified procedure for use of the Perkin-Elmer model 191 grain amylase analyzer in determining low levels of alpha-amylase in wheats and flours - *Cereal Chem.*, **58**, 271-274, 1981.
63. MAILHOT,W.C. - The falling number method - *Cereal Food. World.*, **24**, 50-51, 1980.
64. LORENZ,K. & WOLT,M. - Effect of altitude on falling number values of flours - *Cereal Chem.*, **58**, 80-82, 1981.
65. FINNEY,P.L. - Effect of wheat variety on the relationship between falling numbers and alpha-amylase activity - *Cereal Chem.*, **62**, 258-262, 1985.
66. STONE,M.; EOFL,L.; LORENZ,K.; HABERLI,G. & ALLVIN,B. - Correction equation development for falling number values from ground wheat meals - *Cereal Chem.*, **71**, 269-271, 1994.
67. PRASAD,K.; WATSON,C.A. & CARNEY JR.,J.B. - Rapid nephelometric determination of alpha-amylase activity in sprouted wheat kernels - *Cereal Chem.*, **56**, 43-44, 1979.
68. O'CONNELL,B.T.; RUBENTHALER,G.L. & MURBACH,N.L. - Evaluation of nephelometric method for determining cereal alpha-amylase - *Cereal Chem.*, **57**, 411-415, 1980.
69. OSBORNE,B.G.; DOUGLASS,S.; FEARN,T.; MOORHOUSE,C. & HECKLEY,M.J. - Collaborative evaluation of a rapid nephelometric method for the measurement of alpha-amylase in flour - *Cereal Chem.*, **58**, 474-476, 1981.
70. MATHEWSON,P.R.; FAHRENHOLZ,C.H.; BOOTH,G.D.; POMERANZ,Y. & MILLER,B.S. - Results of collaborative testing using a simplified, rapid colorimetric alpha-amylase assay for evaluation of sprouted wheat - *Cereal Chem.*, **59**, 108-112, 1982.
71. D'APPOLONIA,B.L.; MACARTHUR,L.A.; PISESOOKBUNTERNG,W. & CIACCO,C.F. - Comparison of the grain amylase analyser with the amylograph and falling number methods - *Cereal Chem.*, **59**, 254-257, 1982.
72. ROSS,A.S.; WALKER,C.E.; BOOTH,R.I.; ORTH,R.A. & WRIGLEY,C.W. - The rapid visco-analyzer: A new technique for the estimation of sprout damage - *Cereal Food. World.*, **32**, 827-829, 1987.
73. BATEY,I.L.; CURTIN,B.M. & MOORE,S.A. - Optimization of rapid-visco analyser test conditions for predicting Asian noodle quality - *Cereal Chem.*, **74**, 497-501, 1997.

74. RIDGWAY,C. & CHAMBERS,J. - Detection of external and internal insect infestation in wheat by near-infrared reflectance spectroscopy - *J. Sci. Food. Agr.*, **71**, 251-264, 1996.
75. DOWELL,F.E.; THRONE,J.E. & BAKER,J.E. - Automated nondestructive detection of internal insect infestation of wheat kernels by using near-infrared reflectance spectroscopy - *J. Econ. Entomol.*, **91**, 899-904, 1998.
76. WILLIAMS,P.C. & SOBERING,D.C. - Attempts at standardization of hardness testing of wheat. II. The near-infrared reflectance method - *Cereal Food. World*, **31**, 417-420, 1986.
77. WINDHAM,W.R.; GAINES,C.S. & LEFFLER,R.G. - Effect of wheat moisture content on hardness scores determinated by near-infrared reflectance and on hardness score standardization - *Cereal Chem.*, **70**, 662-666, 1993.
78. DELWICHES.R.; CHEN,Y.R. & HRUSCHKA,W.R. - Differentiation of hard red wheat by near-infrared analysis of bulk samples - *Cereal Chem.*, **72**, 243-247, 1995.
79. DOWELL,F.E. - Automated color classification of single wheat kernels using visible and near-infrared reflectance - *Cereal Chem.*, **75**, 142-144, 1998.
80. OSBORNE,B.G. & DOUGLAS,S. - Measurement of the degree of starch damage in flour by near-infrared reflectance analysis - *J. Sci. Food. Agr.*, **32**, 328-332, 1981.
81. FINNEY,P.L.; KINNEY,J.E. & DONELSON,J.R. - Prediction of damaged starch in straight-grade flour by near-infrared reflectance analysis of whole ground wheat - *Cereal Chem.*, **65**, 449-452, 1988.
82. ORMAN,B.A. & SCHUMANN JR.,R.A. - Comparison of near-infrared spectroscopy calibration methods for the prediction of protein, oil and starch in maize grain - *J. Agr. Food. Chem.*, **39**, 883-886, 1991.
83. DELWICHES.R. & WEAVER,G. - Bread quality of wheat flour by near-infrared spectrophotometry: Feasibility of modeling - *J. Food Sci.*, **59**, 410-415, 1994.
84. MORGAN,J.E. & WILLIAMS,P.C. - Starch damage in wheat flours: A comparison of enzymatic, iodometric, and near-infrared reflectance techniques - *Cereal Chem.*, **72**, 209-212, 1995.
85. GUY,R.C.E.; OSBORNE,B.G. & ROBERT,P. - The application of near-infrared reflectance spectroscopy to measure the degree of processing in extrusion cooking processes - *J. Food Eng.*, **27**, 241-258, 1996.

86. ZENG,W.; ZHANG,H.Z. & LEE,T.C. - Direct determination of the starch content in gravy by near-infrared spectroscopy - *J. Agr. Food. Chem.*, **39**, 883-886, 1996.
87. MILLAR,S.; ROBERT,P.; DEVAUX,M.F.; GUY,R.C.E. & MARIS,P. - Near-infrared spectroscopic measurement of structural changes in starch-containing extruded products - *Appl. Spectrosc.*, **50**, 1134-1139, 1996.
88. KALASINSKY,K.S. - Industrial applications of Vib. Spec. - *Trend. Anal. Chem.*, **9**, 83-89, 1990.
89. DURIG,J.R. & SULLIVAN,J.F. - Vib. Spec., Fourier transforms and analytical chemistry - *Trend. Anal. Chem.*, **9**, 104-106, 1990.
90. EIKREM,L.O. - Process Fourier transform infrared spectroscopy - *Trend. Anal. Chem.*, **9**, 107-109, 1990.
91. COATES,J. - Vibrational Spectroscopy: Instrumentation for infrared and Raman spectroscopy - *Appl. Spectrosc. Rev.*, **33**, 267-425, 1998.
92. WILSON,R.H. - Fourier transform mid-infrared spectroscopy for food analysis - *Trend. Anal. Chem.*, **9**, 127-131, 1990.
93. VAN DE VOORT,F.R. & ISMAIL,A.A. - Proximate analysis of foods by mid-FTIR spectroscopy - *Trend. Food Sci. Technol.*, **2**, 13-17, 1991.
94. VAN DE VOORT,F.R. - Fourier transform infrared spectroscopy applied to food analysis - *Food Res. Int.*, **25**, 397-403, 1992.
95. REEVES III,J.B. & ZAPF,C.M. - Mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for discriminant analysis of food ingredients - *J. Agr. Food Chem.*, **46**, 3614-3622, 1998.
96. WILSON,R.H. & TAPP,H.S. - Mid-infrared spectroscopy for food analysis: Recent new applications and relevant developments in sample presentation methods - *Trend. Anal. Chem.*, **18**, 85-93, 1999.
97. HART,J.R.; NORRIS,K.H. & GOLUMBIC,C. - Determination of the moisture content of seeds by near-infrared spectrophotometry of their methanol extracts - *Cereal Chem.*, **39**, 94-99, 1962.
98. WATSON,C.A. - Near-infrared reflectance spectrophotometric analysis of agricultural products - *Anal. Chem.*, **49**, 835A-840A, 1977.
99. HOOTON,D.E. - The versatility of near-infrared reflectance devices - *Cereal Food. World*, **23**, 176-179, 1978.

100. TKACHUK,R. - Analysis of whole grains by near-infrared reflectance - in *Near-infrared technology in the agricultural and food industries* - by Phil Williams & Karl Norris, St. Paul: American Association of Cereal Chemists, 1987.
101. SCHUSTER,J.H. - Semi-automated proximate analysis - *Cereal Food. World*, **23**, 180-182, 1978.
102. OSBORNE,B.G. - Applications of NIR in the baking industry - *Anal. Proc.*, **20**, 79-83, 1983.
103. OSBORNE,B.G. - Instrumental methods of flour analysis - *Anal. Proc.*, **23**, 359-360, 1986.
104. DAVIES,A.M.C. - Progress in human food analysis by near-infrared- *Anal. Proc.*, **21**, 488-491, 1984.
105. MCSHANE,W.J. - Applying NIR to process control - *J. Am. Oil Chem. Soc.*, **66**, 641-643, 1989.
106. WILLIAMS,P.C. & STEVENSON,S.G. - Near-infrared reflectance analysis: Food industry applications - *Trend. Food Sci. Technol.*, **1**, 44-48, 1990.
107. MCQUEEN,D.H.; WILSON,R. & KINNUNEN,A. - Near and mid-infrared photoacoustic analysis of principal components of foodstuffs - *Trend. Anal. Chem.*, **14**, 482-492, 1995.
108. DUPUY,N.; HUVENNE,J.P.; LEGRAND,P. & LE BOURLOUT,R. - Application du couplage fibre optique/IRTF pour la classification d'huiles végétales par analyse en composantes principales des spectres infrarouges - *Spectra Analyse* - **186**, 36-41, 1995.
109. ARCHIBALD,D.D.; KAYS,S.E.; HIMMELSBACH,D.S. & BARTON II,F.E. - Raman and NIR spectroscopic methods for determination of total dietary fiber in cereal foods: A comparative study - *Appl. Spectrosc.*, **52**, 22-31, 1998.
110. ARCHIBALD,D.D.; KAYS,S.E.; HIMMELSBACH,D.S. & BARTON II,F.E. - Raman and NIR spectroscopic methods for determination of total dietary fiber in cereal foods: Utilizing model differences - *Appl. Spectrosc.*, **52**, 32-41, 1998.
111. POMERANZ,Y. & MELOAN,C.E. - *Food analysis: Theory and practice* - New York: Van Nostrand Reinhold Company, 1987.
112. WILLIAMS,P.C. - Commercial near-infrared reflectance analyzers - in *Near-infrared technology in the agricultural and food industries* - by Phil Williams & Karl Norris, St. Paul: American Association of Cereal Chemists, 1987.

113. KORTE,E.H. - *Infrared specular reflectance of weakly absorbing samples* - Vib. Spec., **1**, 179-185, 1990.
114. ABDULLAH,A.H. & SHERMAN,W.F. - *Kramers-Kronig type analysis of short spectral range reflection spectra* - Vib. Spec., **13**, 133-142, 1997.
115. YAMAMOTO,K. & ISHIDA,H. - *Optical theory applied to infrared spectroscopy* - Vib. Spec., **8**, 1-36, 1994.
116. YANG,P.W. & MANTSCH,H.H. - *Diffuse reflectance infrared spectrometry: Characteristics of the diffuse and specular components* - Applied Optics, **26**, 326-330, 1987.
117. HANDKE,M.; MILOSEVIC,M. & HARRICK,N.J. - *External reflection Fourier transform infrared spectroscopy: Theory and experimental problems* - Vib. Spec., **1**, 251-262, 1991.
118. MIELCZARSKI,J.A.; MILOSEVIC,M. & BERETS,S.L. - *Optical properties of strongly absorbing media determined by external reflection spectroscopy* - Appl. Spectrosc., **46**, 1040-1044, 1992.
119. YAMAMOTO,K. & ISHIDA,H. - *Kramers-Kronig analysis applied to reflection-absorption spectroscopy* - Vib. Spec., **15**, 27-36, 1997.
120. BIRTH,G.S. & HECHT,H.G. - *The physics of near-infrared reflectance* - in *Near-infrared technology in the agricultural and food industries* - by Phil Williams & Karl Norris, St. Paul: American Association of Cereal Chemists, 1987.
121. CULLER,S.R. - *Diffuse reflectance infrared spectroscopy: Sampling techniques for qualitative/quantitative analysis of solids* - in *Practical sampling techniques for infrared analysis* - by Patricia B. Coleman, Boca Raton: CRC Press, 1993.
122. OSBORNE,B.G.; FEARN,T. & HINDLE,P.H. - *Practical NIR spectroscopy with applications in food and beverage analysis* - Singapore: Longman Scientific & Technical, 1993.
123. WETZEL,D.L. - *Near-infrared reflectance analysis sleeper among spectroscopic techniques* - Anal. Chem., **55**, 1165A-1176A, 1983.
124. OLINGER,J.M. & GRIFFITHS,P.R. - *Quantitative effects of an absorbing matrix on near-infrared diffuse reflectance spectra* - Anal. Chem., **60**, 2427-2435, 1988.
125. OLINGER,J.M. & GRIFFITHS,P.R. - *Effects of sample dilution and particle size/morphology on diffuse reflection spectra of carbohydrate systems in the near- and mid-Infrared. part I: Single analytes* - Appl. Spectrosc., **47**, 687-694, 1993.

126. OLINGER,J.M. & GRIFFITHS,P.R. - Effects of sample dilution and particle size/morphology on diffuse reflection spectra of carbohydrate systems in the near- and mid-Infrared. part II: durum wheat - Appl. Spectrosc., **47**, 695-701, 1993.
127. DEVAUX,M.F.;DUFOUR,N.N.;ROBERT,P. & BERTRAND,D. - Effects of particle size on the near-infrared reflectance spectra of wheat and rape seed meal mixtures - Appl. Spectrosc., **49**, 84-91, 1995.
128. FULLER,M.P. & GRIFFITHS,P.R. - Infrared microsampling by diffuse reflectance Fourier transform spectrometry - Appl. Spectrosc., **34**, 533-539, 1980.
129. FULLER,M.P. & GRIFFITHS,P.R. - Diffuse reflectance measurements by infrared Fourier transform spectrometry - Anal. Chem., **50**, 1906-1910, 1978.
130. BOROUMAND,F.; MOSER,J.E. & VAN DEN BERGH - Quantitative diffuse reflectance and transmittance infrared spectroscopy of nondiluted powders - Appl. Spectrosc., **46**, 1874-1886, 1992.
131. TEVRUCHT,M.L.E. & GRIFFITHS,P.R. - Quantitative investigation of matrices for diffuse reflectance infrared Fourier transform spectrometry - Talanta, **38**, 839-849, 1991.
132. KRIVÁCSY,Z. & HLAVAY,J. - Method for the reliable quantitative analysis by diffuse reflectance infrared spectroscopy - J. Mol. Struct., **349**, 289-292, 1995.
133. KORTE,E.H. & OTTO,A. - Infrared diffuse reflectance accessory for local analysis on bulky samples - Appl. Spectrosc., **42**, 38-43, 1988.
134. KORTE,E.H. - Figures of merit for a diffuse reflectance accessory using an on-axis ellipsoidal collecting mirror - Appl. Spectrosc., **42**, 428-433, 1988.
135. YANG,P.W.; MANTSCH,H.H. & BAUDAIS,F. - A critical evaluation of three types of diffuse reflectance infrared accessories - Appl. Spectrosc., **40**, 974-978, 1986.
136. STERMER,R.A.; POMERANZ,Y. & MCGINTY,R.J. - Infrared reflectance spectroscopy for estimation of moisture of whole grain - Cereal Chem., **54**, 345-351, 1977.
137. OSBORNE,B.G.; DOUGLAS,S. & FEARN,T. - Assessment of wheat grain texture by near-infrared reflectance measurements on Bühler-milled flour - J. Sci. Food Agr., **32**, 200-202, 1981.
138. WILLIAMS,P.C.; PRESTON,K.R.; NORRIS,K.H. & STARKEY,P.M. - Determination of amino acids in wheat and barley by near-infrared reflectance spectroscopy - J. Food Sci., **49**, 17-20, 1984.

139. RENARD,C.; ROBERT,P.; BERTRAND,D.; DEVAUX,M.F. & ABECASSIS,J. - Qualitative characterization of the purity of milled durum wheat products by multidimensional statistical analysis of their mid-infrared diffuse reflectance spectra - Cereal Chem., **64**, 177-181, 1987.
140. HORVÁTH,L.; NORRIS,K.H.; HORVÁTH-MOSONYI,M.; RIGÓ,J. & HEGEDÜS-VÖLGYESI,E. - Study into determining dietary fiber of wheat bran by NIR-technique - Acta Aliment. Hung., **13**, 355-382, 1984.
141. DELWICHE,S.R. & NORRIS,K.H. - Classification of hard red wheat by near-infrared diffuse reflectance spectroscopy - Cereal Chem., **70**, 29-35, 1993.
142. DELWICHE,S.R. & MASSIE,D.R. - Classification of wheat by visible and near-infrared reflectance from single kernels - Cereal Chem., **73**, 399-405, 1996.
143. HARELAND,G.A. - Evaluation of flour particle size distribution by laser diffraction, sieve analysis and near-infrared reflectance spectroscopy - J. Cereal Sci., **21**, 183-190, 1994.
144. VENTURA,C. & PAPINI,M. - Analysis of the reflectance of granular materials in the near-infrared wavelength range - J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, **61**, 185-195, 1999.
145. REEVES III,J.B. & ZAPF,C.M. - Spectral library searching: Mid-infrared versus near-infrared spectra for classification of powdered food ingredient - Appl. Spectrosc., **53**, 836-844, 1999.
146. MIRABELLA JR.,F.M. - Internal reflection spectroscopy - Appl. Spectrosc. Rev., **21**, 45-178, 1985.
147. HARRICK,N.J. - Surface chemistry from spectral analysis of totally internally reflected radiation - J. Phys. Chem. - US, **64**, 1110-1114, 1960.
148. FAHRENFORT,J. - Attenuated total reflection - A new principle for the production of useful infra-red reflection spectra of organic compounds - Spectrochim. Acta, **17**, 698-709, 1961.
149. CHALMERS,J.M. & MACKENZIE,M.W. - Solid sampling techniques - in Advances in applied Fourier transform infrared spectroscopy - Chichester: John Wiley & Sons, 105-188, 1988.
150. HEISE,H.M.; MARBACH,R.; JANATSCH,G. & KRUSE-JARRES,J.D. - Multivariate determination of glucose in whole blood by attenuated total reflection infrared spectroscopy - Anal. Chem., **61**, 2009-2015, 1989.

151. WARD,K.J.; HAALAND,D.M.; ROBINSON,M.R. & EATON,R.P. - Post-prandial blood glucose determination by quantitative mid-infrared spectroscopy - *Appl. Spectrosc.*, **46**, 959-965, 1992.
152. DUPUY,N.; MEURENS,M.; SOMBRET,B.; LEGRAND,P. & HUVENNE,J.P. - Multivariate determination of sugar powders by attenuated total reflectance infrared spectroscopy - *Appl. Spectrosc.*, **47**, 252-257, 1993.
153. MIROUZE,F.L.; BOULOU,J.C.; DUPUY,N.; MEURENS,M.; HUVENNE,J.P. & LEGRAND,P. - Quantitative analysis of glucose syrups by ATR/FT-IR spectroscopy - *Appl. Spectrosc.*, **47**, 1187-1191, 1993.
154. KEMSLEY,E.K.; WILSON,R.H.; POULTER,G. & DAY,L.L. - Quantitative analysis of sugar solutions using a novel fiber-optic-based sapphire ATR accessory - *Appl. Spectrosc.*, **47**, 1651-1654, 1993.
155. BELLON-MAUREL,V.; VALLAT,C. & GOFFINET,D. - Quantitative analysis of individual sugars during starch hydrolysis by FT-IR/ATR spectrometry. Part I: Multivariate calibration study - Repeatability and reproducibility - *Appl. Spectrosc.*, **49**, 556-568, 1995.
156. CADET,F.; ROBERT,C. & OFFMANN,B. - Simultaneous determination of sugars by multivariate analysis applied to mid-infrared spectra of biological samples - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 369-375, 1997.
157. BUDÍNOVÁ,G.; SALVA,J. & VOLKA,K. - Application of molecular spectroscopy in the mid-infrared region to the determination of glucose and cholesterol in whole blood and in blood serum - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 631-635, 1997.
158. VAN DE VOORT,F.R.; SEDMAN,J.; EMO,G. & ISMAIL,A.A. - Rapid and direct iodine value and saponification number determination of fats and oils by attenuated total reflectance/Fourier transform infrared spectroscopy - *J. Am. Oil Chem. Soc.*, **69**, 1118-1123, 1992.
159. VAN DE VOORT,F.R.; SEDMAN,J.; EMO,G. & ISMAIL,A.A. - A rapid FTIR quality control method for fat and moisture determination in butter - *Food Res. Int.*, **25**, 193-198, 1992.
160. ISMAIL,A.A.; VAN DE VOORT,F.R.; EMO,G. & SEDMAN,J. - Rapid quantitative determination of free fatty acids in fats and oils by Fourier transform infrared spectroscopy - *J. Am. Oil Chem. Soc.*, **70**, 335-341, 1993.
161. VAN DE VOORT,F.R.; SEDMAN,J. & ISMAIL,A.A. - A rapid FTIR quality-control method for determining fat and moisture in high-fat products - *Food Chemistry*, **48**, 213-221, 1993.

162. VAN DE VOORT,F.R.; ISMAIL,A.A.; SEDMAN,J. & EMO,G. - Monitoring the oxidation of edible oils by Fourier transform infrared spectroscopy - J. Am. Oil Chem. Soc., **71**, 243-253, 1994.
163. SAFAR,M.; BERTRAND,P.R.; ROBERT,P.; DEVAUX,M.F. & GENOT,C. - Characterization of edible oils, butters and margarines by Fourier transform infrared spectroscopy with attenuated total reflectance - J. Am. Oil Chem. Soc., **71**, 371-377, 1994.
164. LAI,Y.W.; KEMSLEY,E.K. & WILSON,R.H. - Potential of Fourier transform infrared spectroscopy for the authentication of vegetable oils - J. Agr. Food Chem., **42**, 1154-1159, 1994.
165. LAI,Y.W.; KEMSLEY,E.K. & WILSON,R.H. - Quantitative analysis of potential adulterants of extra virgin olive oil using infrared spectroscopy - Food Chemistry, **53**, 95-98, 1995.
166. NATHIER-DUFOUR,N.; SEDMAN,J. & VAN DE VOORT,F.R. - A rapid ATR/FTIR quality control method for the determination of fat and solids in sweetened condensed milk - Milchwissenschaft, **50**, 462-466, 1995.
167. DUPUY,N.; DUPONCHELL,L.; AMRAM,B.; HUVENNE,J. & LEGRAND,P. - Quantitative analysis of latex in paper coatings by ATR-FTIR spectroscopy - J. Chemometr., **8**, 333-347, 1994.
168. BUFFETAUT,T.; DESBAT,B. & EYQUEM,D. - Attenuated total reflection Fourier transform infrared microspectroscopy: Theory and application to polymer samples - Vib. Spec., **11**, 29-36, 1996.
169. DUPUY,N.; RUCKEBUSH,C.; DUPONCHELL,L.; BEURDELEY-SAUDOU,P.; AMRAM,B.; HUVENNE,J.P. & LEGRAND,P.; - Quantitative determination of polymer and mineral content in paper coatings by infrared spectroscopy. improvements by non-linear treatments - Anal. Chim. Acta, **335**, 79-85, 1996.
170. XUL, L. & SCHLUP,J.R. - Applications of near-infrared attenuated total reflectance spectroscopy for monitoring epoxy resin/amine cure reactions - Appl. Spectrosc., **50**, 109-114, 1996.
171. ROSSI,A.V., DAVANZO,C.U. & TUBINO,M. - The structure of liquid water in aqueous solutions: A proposed model from near and mid infrared spectroscopy - J. Brazil. Chem. Soc., **7**, 403-410, 1996.
172. SCHÖNHERR,A.; HÜNING,S.L.; FERRÃO,M.F. & JANDREY,A. - Aplicação de métodos multivariados na determinação quantitativa de tíneres a partir de dados de espectroscopia na região do infravermelho com transformada de Fourier - Tecnológica, **2**, 9-31, 1998.

173. POPINEAU,Y.; BONENFANT,S.; CORNEC,M.; & PEZOLET,M. - A study by infrared spectroscopy of the conformations of gluten proteins differing in their gliadin and glutenin compositions - *J. Cereal Sci.*, **20**, 15-22, 1994.
174. BROWN,S.D. - Chemical systems under indirect observation: Latent properties and chemometrics - *Appl. Spectrosc.*, **49**, 14A-31A, 1995.
175. MARTENS,H. & NAES,T. - Multivariate calibration - New York: John Wiley & Sons, 1989.
176. MCNICOL,J.W.; COWE,I.A. & CUTHBERTSON,D.C. - What can chemometrics do for you? Principal component analysis of near-infrared spectra - *Anal. Proc.*, **25**, 360-362, 1988.
177. MARK,H. - Chemometrics in near-infrared spectroscopy - *Anal. Chim. Acta*, **223**, 75-93, 1989.
178. FEINBERG,M. & BUGNER,E. - Chemometrics and food chemistry: Data validation - *Anal. Chim. Acta*, **223**, 223-235, 1989.
179. SCARPONI,G.; MORET,I.; CAPODAGLIO,G. & ROMANAZZI,M. - Cross-validation, influential observations and selection of variables in chemometric studies of wines by principal components analysis - *J. Chemometr.*, **4**, 217-240, 1990.
180. ANAYA,M.A.M. - Review: Factors influencing the quality of wheat sourdough processes, and the use of chemometrics in quality assessment - *Rev. Esp. Ciência Tecnol. Alim.*, **34**, 469-493, 1994.
181. GRATALOUP,C.S. - La spectrométrie proche infrarouge en ligne associée à la chimiometrie: Un outil pour l'industrialisation des procédés chimiques - *Analisis*, **23**, 483-485, 1995.
182. MILLER,C.E. - The use of chemometric techniques in process analytical method development and operation - *Chemometr. Intell. Lab.*, **30**, 11-22, 1995.
183. WOLD,S. - Chemometrics: what do we mean with it, and what do we want from it? - *Chemometr. Intell. Lab.*, **30**, 109-115, 1995.
184. WORKMAN JR.,J.J.; MOBLEY,P.R.; KOWALSKI,B.R. & BRO,R. - Review of chemometrics applied to spectroscopy: 1985-95, part 1 - *Appl. Spectrosc. Rev.*, **31**, 73-124, 1996.
185. MOBLEY,P.R.; KOWALSKI,B.R. ;WORKMAN JR.,J.J. & BRO,R. - Review of chemometrics applied to spectroscopy: 1985-95, part 2 - *Appl. Spectrosc. Rev.*, **31**, 347-368, 1996.

186. BRO,R.; WORKMAN JR.,J.J.; MOBLEY,P.R. & KOWALSKI,B.R. - Review of chemometrics applied to spectroscopy: 1985-95, part 3 - multi-way analysis - *Appl. Spectrosc. Rev.*, **32**, 237-261, 1997.
187. BERGER,A.J. & FELD,M.S. - Analytical method of estimating chemometric prediction error - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 725-732, 1997.
188. NI,Y. & GONG,X. - Simultaneous spectrophotometric determination of mixtures of food colorants - *Anal. Chim. Acta*, **354**, 163-171, 1997.
189. DEFERNEZ,M. & WILSON,R.H. - Infrared spectroscopy: Instrumental factors affecting the long-time validity of chemometric models - *Anal. Chem.*, **69**, 1288-1294, 1997.
190. JACKSON,J.E. - Principal components and factor analysis: Part I - principal components, *J. Qual. Technol.*, **12**, 201-213, 1980.
191. JACKSON,J.E. - Principal components and factor analysis: Part II - additional topics related to principal components, *J. Qual. Technol.*, **13**, 46-58, 1981.
192. JACKSON,J.E. - Principal components and factor analysis: Part III - what is factor analysis?, *J. Qual. Technol.*, **13**, 125-130, 1981.
193. WOLD,S.; ESBENSEN,K. & GELADI,P. - Principal component analysis, *Chem. Intell. Lab. Sys.*, **2**, 37-52, 1987.
194. BEEBE,K.R. & KOWALSKI,B.R. - An introduction to multivariate calibration and analysis, *Anal. Chem.*, **59**, 1007A-1117A, 1987.
195. MASSART,D.L.; VANDEGIMSTE,B.G.M.; DEMING,S.N.; MICHOTTE,Y. & KAUFMAN,L. - Chemometrics: A textbook, vol.2, ed. Elsevier, 1988.
196. GELADI,P. & KOWALSKI,B.R. - Partial least-squares regression: A tutorial - *Anal. Chim. Acta*, **185**, 1-17, 1986.
197. SEASHOLTZ,M.B. & KOWALSKI,B.R. - The effect of mean centering on prediction in multivariate calibration - *J. Chemometr.*, **6**, 103-111, 1992.
198. MALINOWSKI,E.R. - Factor analysis in chemistry - New York: John Wiley & Sons, 1981.
199. STEELE,D. - Vibrational Spectroscopy - twenty years on - *Spectroscopy Europe*, **8**, 34-36, 1996.

200. WU,W.; WALCZAK,B.; PENNINCKX,W. & MASSART,D.L. - Feature reduction by Fourier transform in pattern recognition of NIR data - *Anal. Chim. Acta*, **331**, 75-83, 1996.
201. KEMSLEY,E.K. - Discriminant analysis of high-dimensional data: A comparison of principal components analysis and partial least squares data reduction methods - *Chemometr. Intell. Lab.*, **33**, 47-61, 1996.
202. WOLD,S.; KETTANEH,N. & TJSSEM,K. - Hierarchical multiblock PLS and PC models for easier model interpretation and as an alternative to variable selection - *J. Chemometr.*, **10**, 463-482, 1996.
203. SZCZUBIALKA,K.; VERDÚ-ANDRÉS,J. & MASSART,D.L. - A new method of detecting clustering in the data - *Chemometr. Intell. Lab.*, **41**, 145-160, 1998.
204. CADET,F. - Application of legendre polynomials correction before component quantification of biological mid-infrared spectra - *Spectrosc. Lett.*, **29**, 937-951, 1996.
205. CENTNER,V.; MASSART,D.L. & DE NOORD,O.E. - Detection of inhomogeneities in sets of NIR spectra - *Anal. Chim. Acta*, **330**, 1-17, 1996.
206. STORK,C.L.; VELTKAMP,D.J. & KOWALSKI,B.R. - Detecting and identifying spectral anomalies using wavelet processing - *Appl. Spectrosc.*, **52**, 1348-1352, 1998.
207. VERDÚ-ANDRÉS,J. & MASSART,D.L. - Comparison of prediction- and correlation-based methods to select the best subset of principal components for principal component regression and detect outlying objects - *Appl. Spectrosc.*, **52**, 1425-1434, 1998.
208. WALCZAK,B. & MASSART,D.L. - Wavelet packet transform applied to a set of signals: A new approach to the best-basis selection - *Chemometr. Intell. Lab.*, **38**, 39-50, 1997.
209. WALCZAK,B. & MASSART,D.L. - Wavelets - Something for analytical chemistry? - *Trend. Anal. Chem.*, **16**, 451-463, 1997.
210. BARROS,A.S. & RUTLEDGE,D.N. - Genetic algorithm applied to the selection of principal components - *Chemometr. Intell. Lab.*, **40**, 65-81, 1998.
211. VERDÚ-ANDRÉS,J.; MASSART,D.L.; MENARDO,C. & STERNA,C. - Correction of nonlinearities in spectroscopic multivariate calibration by using transformed original variables. part II. applications to principal component regression - *Anal. Chim. Acta*, **389**, 115-130, 1999.

212. STELLMAN,C.M.; BOOKSH,K.S. & MYRICK,M.L. - Multivariate Raman imaging of simulated and "real world" glass-reinforced composites - *Appl. Spectrosc.*, **50**, 552-557, 1996.
213. HAYDEN,C.A. & MORRIS,M.D. - Effects of sampling parameters on principal components analysis of Raman line images - *Appl. Spectrosc.*, **50**, 708-714, 1996.
214. ANDREW,J.J. & HANCEWICZ,T.M. - Rapid analysis of Raman image data using two-way multivariate curve resolution - *Appl. Spectrosc.*, **52**, 797-807, 1998.
215. ARMANINO,C. & FESTA,M.R. - Characterization of wheat by four analytical parameters. a chemometric study - *Anal. Chim. Acta*, **331**, 43-51, 1996.
216. DUPUY,N.; DUPONCHELL,I.; HUVENNE,J.P.; SOMBRET,B. & LEGRAND,P. - Classification of edible fats and oils by principal component analysis of Fourier transform infrared spectra - *Food Chemistry*, **57**, 245-251, 1996.
217. DAHLBERG,D.B.; LEE,S.M.; WENGER,S.J. & VARGO,J.A. - Classification of vegetable oils by FT-IR - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 1118-1124, 1997.
218. STALLARD,B.R. - Near-IR versus mid-IR: Separability of three classes of organic compounds - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 625-630, 1997.
219. BACCI,M.; PORCINAIS, S. & RADICATI,B. - Principal component analysis of near-infrared spectra of alteration products in calcareous samples - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 700-706, 1997.
220. FISCHER,D. & EICHHORN,K.J. - Process analysis of polymers by NIR spectroscopy - *Analisis*, **26**, 58M-61M, 1998.
221. BLANCO,M.; COELLO,J.; ITURRIAGA,H.; MASPOCH,S. & DE LA PEZUELA,C. - Near-infrared spectroscopy in the pharmaceutical industry - *Analyst*, **123**, 135-150, 1998.
222. FERREIRA,M.M.C.; FARIA,C.G. & PAES,E.T. - Oceanographic characterization of northern São Paulo coast: A chemometric study - *Chemometr. Intell. Lab.*, **47**, 289-297, 1999.
223. FERREIRA,M.M.C.; MORGANO,M.A.; DE QUEIROZ,S.C.N. & MANTOVANI,D.M.B. - Relationships of the minerals and fatty acid contents in processed turkey meat products - *Food Chemistry*, **69**, 259-265, 2000.
224. PIMENTEL, M.F. & NETO, B.B. - Calibração: Uma revisão para químicos analíticos - *Quim. Nova*, **19**, 268-277, 1996.

225. HAALAND,D.M. - *Multivariate calibration methods applied to quantitative FT-IR analysis.* In FERRARO,J.R. - *Practical Fourier transform infrared spectroscopy: Industrial and laboratory chemical analysis.*, Academic Press, 1990.
226. NAES,T. & MARTENS,H. - *Principal component regression in NIR analysis: Viewpoints, background details and selection of components* - J. Chemometr., **2**, 155-167, 1988.
227. OSBORNE,C. - *Statistical calibration: A review* - Int. Stat. Rev., **59**, 309-336, 1991.
228. FERREIRA,M.M.C.; ANTUNES,A.M. MELGO,M.S. & VOLPE,P.L.O. - *Quimiometria I: Calibração multivariada, um tutorial* - Quim. Nova, **22**, 724-731, 1999.
229. HALL,J.W.; MCNEIL,B.; ROLLINS,M.J.; DRAPER,I.; THOMPSON,B.G. & MACALONEY,G. - *Near-infrared spectroscopic determination of acetate, ammonium, biomass, and glycerol in an industrial Escherichia coli fermentation* - Appl. Spectrosc., **50**, 102-108, 1996.
230. JOUAN-RIMBAUD,D.; MASSART,D.L. & DE NOORD,O.E. - *Random correlation in variable selection for multivariate calibration with a genetic algorithm* - Chemometr. Intell. Lab., **35**, 213-220, 1996.
231. CENTNER,V.; MASSART,D.L.; DE NOORD,O.E.; DE JONG,S.; VANDEGINSSTE,B.M. & STERNA,C - *Elimination of uninformative variables for multivariate calibration* - Anal. Chem., **68**, 3851-3858, 1996.
232. PASTI,L.; JOUAN-RIMBAUD,D.; MASSART,D.L. & DE NOORD,O.E. - *Application of Fourier transform to multivariate calibration of near-infrared data* - Anal. Chim. Acta, **364**, 253-263, 1998.
233. CHAMINADE,P.; BAILLET,A. & FERRIER,D. - *Data treatment in near-infrared spectroscopy* - Analusis, **26**, M33-M38, 1998.
234. WIEDEMANN,S.C.C.; HANSEN,W.G.; SNIEDER,M. & WORTEL,V.A.L. - *NIR calibration in practice* - Analusis, **26**, M38-M43, 1998.
235. SCARMINIO,I.S.; ISHIKAWA,D.N.; BARRETO,W.J.; PACZKOWSKI,E.L. & ARRUDA,I.C. - *Calibração multivariada para sistemas com bandas sobrepostas através da análise de fatores tipo Q* - Quim. Nova, **21**, 590-596, 1998.
236. GE,Z.; SCHOMACKER,K.T. & NISHIOKA,N.S. - *Identification of colonic dysplasia and neoplasia by diffuse reflectance spectroscopy and pattern recognition techniques* - Appl. Spectrosc., **52**, 833-839, 1998.

237. DELWICHES.R. - Protein content of single kernels of wheat by near-infrared reflectance spectroscopy - *J. of Cereal Science*, **27**, 241-254, 1998.
238. ADAMS,M.J. - *Chemometrics in analytical spectroscopy* - Wolverhampton: University of Wolverhampton, 1995.
239. FERRÉ,J. & RIUS,F.X. - Selection of the best calibration sample subset for multivariate regression - *Anal. Chem.*, **68**, 1565-1571, 1996.
240. XUL. & SCHECHTER,I. - Wavelength selection for simultaneous spectroscopic analysis. Experimental and theoretical study - *Anal. Chem.*, **68**, 2392-2400, 1996.
241. REEVES III,J.B. - Solid-state matrix effects on near-infrared spectra: Interactions of glucose and sucrose with amylose, amylopectin, cellulose, and starch - implications for near-infrared calibrations - *Appl. Spectrosc.*, **50**, 154-160, 1996.
242. SUN,J. - A multivariate principal component regression analysis of NIR data - *J. Chemometr.*, **10**, 1-9, 1996.
243. LORBER,A.; FABER,K. & KOWALSKI,B.R. - Net analyte signal calculation in multivariate calibration - *Anal. Chem.*, **69**, 1620-1626, 1997.
244. DÍAZ,T.G.; GUIBERTEAU,A.; BURGUILLOS,J.M.O. & SALINAS,F. - Comparison of chemometric methods: Derivative ratio spectra and multivariate methods (CLS, PCR and PLS) for the resolution of ternary mixtures of the pesticides carbofuran carbaryl and phenamifos after their extraction into chloroform - *Analyst*, **122**, 513-517, 1997.
245. XUL. & SCHECHTER,I. - A calibration method free of optimum factor number selection for automated multivariate analysis. Experimental and theoretical study - *Anal. Chem.*, **69**, 3722-3730, 1997.
246. XIE,Y.L. & KALIVAS,J.H. - Evaluation of principal component selection methods to form a global prediction model by principal component regression - *Anal. Chim. Acta*, **348**, 19-27, 1997.
247. XIE,Y.L. & KALIVAS,J.H. - Local prediction models by principal component regression - *Anal. Chim. Acta*, **348**, 29-38, 1997.
248. KALIVAS,J.H. - Two data sets of near-infrared spectra - *Chemometr. Intell. Lab.*, **37**, 255-259, 1997.
249. CENTNER,V. & MASSART,D.L. - Optimization in locally weighted regression - *Anal. Chem.*, **70**, 4206-4211, 1998.

250. FABER,N.K.M. - *Multivariate sensitivity for the interpretation of the effect of spectral pretreatment methods on near-infrared calibration model predictions* - Anal. Chem., **71**, 557-565, 1999.
251. GOICOECHEA,H.C. & OLIVIERI,A.C. - *Wavelength selection by net analyte signals calculated with multivariate factor-based hybrid linear analysis (HLA). a theoretical and experimental comparison with partial least-squares (PLS)* - Analyst, **124**, 725-731, 1999.
252. BURNHAM,A.J.; MACGREGOR,J.F. & VIVEROS,R. - *Latent variable multivariate regression modeling* - Chemometr. Intell. Lab., **48**, 167-180, 1999.
253. SCARMÍNIO,I.S.; DE OLIVEIRA,A.E. & BRUNS,R.E. - *Factorial design - principal component regression calculation of fundamental vibrational frequencies* - Theochem - J. Mol. Struc., **464**, 163-170, 1999.
254. WOLD,S. - *Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models* - Technometrics, **20**, 397-405, 1978.
255. SJÖSTRÖM,M.; WOLD,S.; LINDBERG,W.; PERSSON,J.A. & MARTENS,H. - *A multivariate calibration problem in analytical chemistry solved by partial least-squares models in latent variables*, Anal. Chim. Acta, **150**, 61-70, 1983.
256. ESPINOSA-MANSILLA,A.; SALINAS,F.; DEL OLMO,M. & PAYÁ,I.O. - *Determination of synthetic food antioxidants in multicomponent mixtures using UV-visible spectrophotometry and partial least-squares calibration* - Appl. Spectrosc., **50**, 449-453, 1996.
257. ORTIZ,M.C.; SARABIA,L.A.; SYMINGTON,C.; SANTAMARÍA,F. & ÍNIGUEZ,M. - *Analysis of ageing and typification of vintage ports by partial least squares and soft independent modelling class analogy* - Analyst, **121**, 1009-1013, 1996.
258. HAINES,E.S; WALMSLEY,A.D. & HASWELL,S.J. - *Quantitative Fourier transform infrared spectroscopy of binary mixtures of fatty acid esters using partial least squares regression* - Anal. Chim. Acta, **337**, 191-199, 1997.
259. KELLNER,R.; LENDI,B.; WELLS,I. & WORSFOLD,P.J. - *Comparison of univariate and multivariate strategies for the determination of sucrose in fruit juices by automated flow injection analysis with Fourier transform infrared detection* - Appl. Spectrosc., **51**, 227-235, 1997.
260. VAN KEMPEN,T. & BODIN,J.C. - *Near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) appears to be superior to nitrogen-based regression as a rapid tool in predicting the poultry digestible amino acid content of commonly used feedstuffs* - Animal Feed Science and Technology - **76**, 139-147, 1998.

261. DELWICHE,S.R.; GRAYBOSCH,R.A. & PETERSON,C.J. - Predicting protein composition, biochemical properties, and dough-handling properties of hard red winter wheat flour by near-infrared reflectance - *Cereal Chem.*, **75**, 412-416, 1998.
262. MELLO,C.; POPPI,R.J.; DE ANDRADE,J.C. & CANTARELLA,H. - Pruning neural network for architecture optimization applied to near-infrared reflectance spectroscopic measurements. Determination of the nitrogen content in wheat leaves - *Analyst*, **124**, 1669-1674, 1999.
263. LINDBERG,W.; PERSSON,J.A. & WOLD,S. - Partial least-squares method for spectrofluorimetric analysis of mixtures of humic acid and ligninsulfonate - *Anal. Chem.*, **55**, 643-648, 1983.
264. STONE,M. - Cross-validatory choice and assessment of statistical predictions - *J. Roy. Stat. Soc. B Met.*, **36**, 111-147, 1974.
265. HONIGS,D.E.; FREELIN,J.M.; HIEFTJE,G.M. & HIRSCHFELD,T.B. - Near-infrared reflectance analysis by Gauss-Jordan linear algebra - *Appl. Spectrosc.*, **37**, 491-497, 1983.
266. HONIGS,D.E.; HIEFTJE,G.M. & HIRSCHFELD,T. - Number of samples and wavelengths required for the training set in near-infrared reflectance spectroscopy - *Appl. Spectrosc.*, **38**, 844-847, 1984.
267. ROSSI,D.T.; DESILETS,D.J. & PARDUE,H.L. - Quantitation and identification of polynuclear aromatic hydrocarbons by liquid chromatography and multiwavelength absorption spectrometry - *Anal. Chim. Acta*, **161**, 191-199, 1984.
268. ROSSI,D.T. & PARDUE,H.L. - Effects of wavelength range on the simultaneous quantitation of polynuclear aromatic hydrocarbons with absorption spectra - *Anal. Chim. Acta*, **175**, 153-161, 1985.
269. THIJSSEN,P.C.; KATEMAN,G. & SMIT,H.C. - Optimal designs with information theory in least-squares problems - *Anal. Chim. Acta*, **157**, 99-115, 1984.
270. THIJSSEN,P.C.; VOGELS,L.J.P.; SMIT,H.C. & KATEMAN,G. - Optimal selection of wavelength in spectrophotometric multicomponent analysis using recursive least squares - *Fresen. Z. Anal. Chem.*, **320**, 531-540, 1985.
271. OTTO,M. & WEGSCHEIDER,W. - Selectivity in multicomponent analysis - *Anal. Chim. Acta*, **180**, 445-456, 1986.
272. JUHL,LL. & KALIVAS,J.H. - Evaluation of the calibration matrix condition number as a criterion for optimal derivative-spectrophotometric multicomponent quantitation - *Anal. Chim. Acta*, **187**, 347-351, 1986.

273. JUHL,L.L. & KALIVAS,J.H. - Evaluation of experimental designs for multicomponent determinations by spectrophotometry - *Anal. Chim. Acta*, **207**, 125-135, 1988.
274. KRZANOWSKI,W.J. - Selection of variables to preserve multivariate data structure, using principal components - *Appl. Stat. - J. Roy. St. C.*, **36**, 22-33, 1987.
275. KRZANOWSKI,W.J. - Cross-validation in principal component analysis - *Biometrics*, **43**, 575-584, 1987.
276. ROBERT,P.; BERTRAND,D., DEVAUX,M.F. & GRAPPIN,R. - Multivariate analysis applied to near-infrared spectra of milk - *Anal. Chem.*, **59**, 2187-2191, 1987.
277. LORBER,A. & KOWALSKI,B.R. - The effect of interferences and calibration design on accuracy: Implications for sensor and sample selection, *J. Chemometr.*, **2**, 67-79, 1988.
278. KOWALSKI,B.R. - On the predictive performance of biased regression methods and multiple linear regression, *Chem. Intell. Lab. Sys.*, **9**, 177-184, 1990.
279. KALIVAS,J.H.; ROBERTS,N. & SUTTER,J.M. - Global optimization by simulated annealing with wavelength selection for ultraviolet-visible spectrophotometry - *Anal. Chem.*, **61**, 2024-2030, 1989.
280. KALIVAS,J.H. - Generalized simulated annealing for calibration sample selection from an existing set and orthogonalization of undesigned experiments - *J. Chemometr.*, **5**, 37-48, 1991.
281. SUTTER,J.M. & KALIVAS,J.H. - Comparison of forward selection, backward elimination, and generalized simulated annealing for variable selection - *Microchem. J.*, **47**, 60-66, 1993.
282. BRENCHLEY,J.M.; HÖRCHNER,U. & KALIVAS,J.H. - Wavelength selection characterization for NIR spectra - *Appl. Spectrosc.*, **51**, 689-699, 1997.
283. LUCASIU,C.B. & KATEMAN,G. - Genetic algorithms for large-scale optimization in chemometrics: An application - *Trend. Anal. Chem.*, **10**, 254-261, 1991.
284. LUCASIU,C.B.; BECKERS,M.I.M. & KATEMAN,G. - Genetic algorithms in wavelength selection: A comparative study - *Anal. Chim. Acta*, **286**, 135-153, 1994.
285. HÖRCHNER,U. & KALIVAS,J.H. - Further investigation on a comparative study of simulated annealing and genetic algorithm for wavelength selection - *Anal. Chim. Acta*, **311**, 1-13, 1995.

286. LEARDI,R. - Application of a genetic algorithm to feature selection under full validation conditions and to outlier detection - *J. Chemometr.*, **8**, 65-79, 1994.
287. JOUAN-RIMBAUD,D.; MASSART,D.L.; LEARDI,R. & DE NOORD,O.E. - Genetic algorithms as a tool for wavelength selection in multivariate calibration - *Anal. Chem.*, **67**, 4295-4301, 1995.
288. SHAFFER,R.E.; SMAL,G.W. & ARNOLD,M.A. - Genetic algorithm-based protocol for coupling digital filtering and partial least-squares regression: Application to the near-infrared analysis of glucose in biological matrices - *Anal. Chem.*, **68**, 2663-2675, 1996.
289. BANGALORE,A.S.; SHAFFER,R.E.; SMALL,G.W. & ARNOLD,M.A. - Genetic algorithm-based method for selecting wavelengths and model size for use with partial least-squares regression: Application to near-infrared spectroscopy - *Anal. Chem.*, **68**, 4200-4212, 1996.
290. DA COSTA FILHO,P.A. & POPPI,R.J. - Algoritmo genético em química - *Quim. Nova*, **22**, 405-411, 1999.
291. FRENICH,A.G.; JOUAN-RIMBAUD,D.; MASSART,D.L.; KUTTATHARMMAKUL,S.; GALERA,M.M. & VIDAL,J.L.M. - Wavelength selection method for multicomponent spectrophotometric determination using partial least squares - *Analyst*, **120**, 2787-2792, 1995.
292. JOUAN-RIMBAUD,D.; WALCZAK,B.; POPPI,R.J.; DE NOORD,O.E. & MASSART,D.L. - Application of wavelet transform to extract the relevant component from spectral data for multivariate calibration - *Anal. Chem.*, **69**, 4317-4323, 1997.
293. TEVRUCHT,M.L.E. & GRIFFITHS,P.R. - A simple sample packing accessory for diffuse reflectance infrared spectrometry - *Appl. Spectrosc.*, **43**, 1492-1494, 1989.
294. HREBICIK,M.; BUDNOVA,G.; GODARSKA,T.; VLACIL,D.; VOGENSEH,S.B. & VOLKA,K. - Diffuse reflectance infrared Fourier transform spectroscopy: New technique of sample preparation - *J. Mol. Struct.*, **410-411**, 527-530, 1997.
295. WHITBECK,M.R. - Second derivative infrared spectroscopy - *Appl. Spectrosc.*, **35**, 93-95, 1981.
296. SOUCEK,J. & JELÍNKOVÁ,E. - Determination of phenolic antioxidants in polypropylene by derivative ultraviolet spectroscopy - *Analyst*, **107**, 623-628, 1982.
297. TOFT,J.; KVALHEIM,O.M.; KARSTANG,T.V.; CHRISTY,A.A.; KLEVELAND,K. & HENRIKSEN,A. - Analysis of nontransparent polymers: Mixture design, second-derivative attenuated total internal reflectance FT-IR, and multivariate calibration - *Appl. Spectrosc.*, **46**, 1002-1008, 1992.

298. WINDIG,W. - *The use of second-derivative spectra for pure-variable based self-modeling mixture analysis techniques* - Chemometr. Intell. Lab., **23**, 71-86, 1994.
299. GELADI,P.; MACDOUGALL,D. & MARTENS,H. - *Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance spectra of meat* - Appl. Spectrosc., **39**, 491-500, 1985.
300. MARTENS,H. & STARK,E. - *Extended multiplicative signal correction and spectral interference subtraction: New preprocessing methods for near-infrared spectroscopy* - J. Pharm. Biom. Anal., **9**, 625-635, 1991.
301. SORVANIEMI,J.; KINNUNEN,A.; MÄLKИ,Y. & TSADOS,A. - *Using partial least squares regression and multiplicative scatter correction for FT-NIR data evaluation of wheat flours* - Lebensmittel-Wissenschaft & Technologie, **26**, 251-258, 1993.
302. SAVITZKY,A. & GOLAY,M.J.E. - *Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures* - Anal. Chem., **36**, 1627-1639, 1964.
303. WORKMAN JR.,J.J. - *Interpretive spectroscopy for near-infrared* - Appl. Spectrosc. Rev., **31**, 251-320, 1996.
304. MURRAY,I. & WILLIAMS,P.C. - *Chemical principles of near-infrared technology – in Near-infrared technology in the agricultural and food industries* – by Phil Williams & Karl Norris, St. Paul: American Association of Cereal Chemists, 1987.
305. WERKEMA, M.C.C. & AGUIAR,S. - *Análise de regressão: Como entender o relacionamento entre as variáveis de um processo* - Belo Horizonte: Fundação Christiano Ottoni, 1996.
306. DE BARROS NETO,B.; SCARMINIO,I.S. & BRUNS,R.E. - *Planejamento e otimização de experimentos* - Campinas: Ed. da Unicamp, 1995.
307. MELLO,C. - *Redes neurais e técnicas de pré-processamento de sinais em espectroscopia de reflectância no infravermelho próximo* - Tese de Doutorado - Campinas: Unicamp, 1998.

Apêndice A

Método 2055 da Association of Official Analytical Chemists (1984)

Determinação do teor de proteína em amostras de farinha de trigo

Pesam-se 500 mg de amostra de farinha de trigo e transfere-se o material pesado para o tubo de digestão. Adicionam-se cerca de 0,2 g de catalisador (sulfato de sódio + sulfato de cobre + selênio, na proporção de 10:1:0,1). Acrescentam-se aproximadamente 6 mL de ácido sulfúrico concentrado.

Procede-se a digestão da amostra em aparelho digestor de proteína, até que a amostra se torne incolor ou levemente esverdeada (temperatura final de 350°C).

Deixa-se o material digerido atingir a temperatura ambiente e em seguida transfere-se o material para o tubo de destilação. Conecta-se o tubo no destilador de micro-Kjeldhal e adicionam-se 40 mL de solução de hidróxido de sódio a 40 % p/v.

Prossegue-se a destilação recebendo o destilado em erlenmeyer contendo 30 mL de solução de ácido bórico saturada. Terminada a destilação, adicionam-se 2 a 3 gotas de solução indicadora verde de bromocresol/vermelho de metila e titula-se com solução de ácido sulfúrico 0,1N até o volume de viragem.

A quantidade de proteína é calculada com base no nitrogênio total da amostra conforme a expressão A1.

$$\text{Proteína(\%)} = \frac{V \times N \times 14 \times 100}{P} \times 5,70 \quad (\text{A1})$$

Observa-se que o tempo aproximado de análise é de 10 horas segundo o Centro Nacional de Pesquisa de Tecnologia Agroindustrial de Alimentos da Embrapa.

Método 08-03 da American Association of Cereal Chemists (1981)

Determinação do teor de cinza em amostras de farinha de trigo

Pesam-se, com exatidão, 2000 mg de amostra de farinha de trigo e transfere-se o material pesado para um cadiño calcinado (à temperatura de 500°C) previamente tarado, a temperatura ambiente.

Leva-se o cadiño contendo a amostra de farinha para uma mufa a 550°C, por um período de 2 horas.

Retira-se o cadiño da mufa e transfere-se o mesmo para um dessecador.

Espera-se que o mesmo atinja a temperatura ambiente. Então pesam-se o cadiño contendo a cinza anotando o valor encontrado com no mínimo 4 casas decimais.

Recoloca-se o cadiño na mufa e repete-se esta operação em intervalos de 90 minutos, até peso constante.

A quantidade de cinzas é calculada com base na diferença de pesos entre a amostra antes e depois da calcinação conforme a expressão A2.

$$\text{Cinza}(\%) = \frac{PC(g)}{PA(g)} \times 100 \quad (\text{A2})$$

onde PC é o peso da cinza (peso da cinza no cadiño menos o peso do cadiño) e PA é o peso da amostra antes da calcinação.

Observa-se que o tempo aproximado de análise é de 3,5 horas segundo o Centro Nacional de Pesquisa de Tecnologia Agroindustrial de Alimentos da Embrapa.

Método 56-81B da American Association of Cereal Chemists (1982)**Determinação do número de queda em amostras de farinha de trigo**

Este método baseia-se na atividade da enzima alfa-amilase em liquefazer o gel de amido. A força da enzima é medida pelo número de queda, definido como o tempo, em segundos, necessário para se homogeneizar a suspensão e permitir que o disco percorra uma distância específica, através do gel de farinha submetido ao aquecimento.

Pesa-se, em balança analítica, 7,0 ($\pm 0,05$) g de amostra de farinha de trigo (para amostras com 14% de umidade) e transfere-se o material pesado para os tubos de ensaio específicos do aparelho. O valor a ser pesado é corrigido conforme a umidade da amostra com base na tabela de correção.

Adicionam-se 25 mL de água destilada e veda-se o tubo com uma rolha adequada.

Agita-se vigorosamente até que a farinha seja homogeneizada com a água.

Retira-se a rolha, limpando-a cuidadosamente na borda do tubo, e com a haste remove-se a suspensão formada na parte interna superior do tubo.

Transfere-se o tubo, preso no suporte e com a haste em seu interior, para o aparelho. Devendo-se, imediatamente, dar início ao aquecimento e a contagem do tempo.

Nos primeiros 60 segundos, um pistão manterá a haste suspensa. Encerrado este tempo o pistão executará um movimento oscilatório no sentido vertical, liberando em seguida a haste, para queda livre na suspensão.

Quando a haste atingir o fundo do tubo, deve-se anotar o valor dos segundos decorridos no início do ensaio, sendo este valor correspondente ao número de queda.

Quando se tratar de duplicata, o maior valor não deverá ser mais que 10% superior ao menor valor, devendo-se repetir o ensaio caso isto se verifique.

Observa-se que o tempo aproximado de análise é de 15 minutos segundo o Centro Nacional de Pesquisa de Tecnologia Agroindustrial de Alimentos da Embrapa.

Tabela de correção do peso da amostra para 14% de umidade

Umidade (%)	,0	,2	,4	,6	,8
8	6,54	6,56	6,57	6,59	6,60
9	6,62	6,63	6,64	6,66	6,67
10	6,69	6,70	6,72	6,73	6,75
11	6,76	6,78	6,80	6,81	6,83
12	6,84	6,86	6,87	6,89	6,90
13	6,92	6,94	6,95	6,97	6,98
14	7,00	7,02	7,03	7,04	7,07
15	7,08	7,10	7,12	7,13	7,15
16	7,17	7,18	7,20	7,22	7,24
17	7,25	7,27	7,29	7,31	7,32

Apêndice B

Exemplo da Aplicação do Algoritmo de Otimização

Um Modelo Desenvolvido para o Teor de Proteína com Dados HATR

Tabela de otimização com os valores de R², VL e SEV.

HATR4a	0,876	5	0,437				
HATR4b	0,851	7	0,563				
HATR4c	0,575	1	0,467				
HATR4d	0,569	1	0,464				
HATR4e	0,675	2	0,531				
HATR4f	0,765	5	0,577				
HATR4g	0,628	1	0,479				
HATR4h	0,652	1	0,451				
 HATR5a	0,894	5	0,458				
HATR5b	0,774	3	0,510				
HATR5c	0,757	2	0,422				
HATR5d	0,843	4	0,436				
HATR5e	0,888	5	0,500				
 HATR5f	0,902	5	0,405				
HATR5g	0,917	6	0,449				
 HATR6a	0,920	6	0,434				
HATR6b	0,932	8	0,479				
HATR6c	0,917	5	0,393				
HATR6d	0,926	5	0,423				
 HATR6e	0,898	5	0,366				
HATR6f	0,935	6	0,449				
 HATR7a	0,917	6	0,422				
HATR7b	0,920	6	0,391				
HATR7c	0,918	6	0,402				
HATR7d	0,916	5	0,391				
HATR7e	0,931	6	0,429				

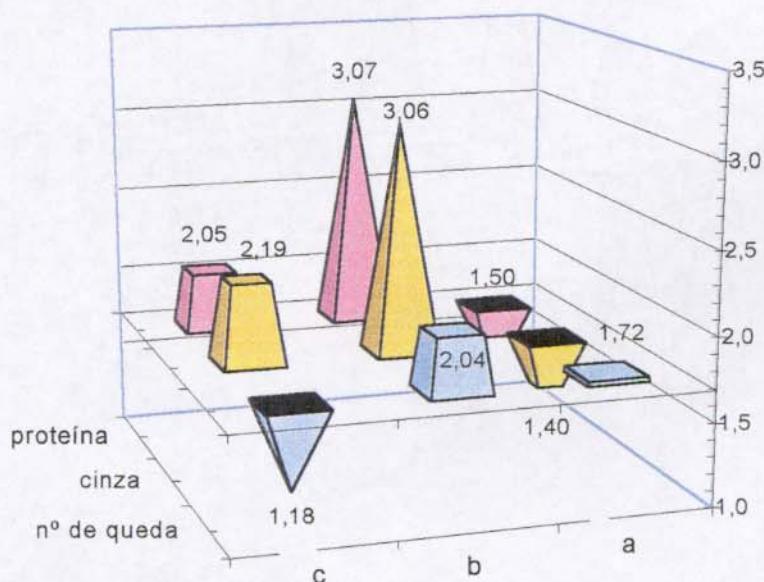
Apêndice C

Teste F para os Principais Modelos DRIFTS

Proteína	DRIFTS-B1(12)	DRIFTS-E1(2)	DRIFTS-H1(2)
DRIFTS-B1(12)	1	-	-
DRIFTS-E1(2)	1,50 (a)	1	-
DRIFTS-H1(2)	3,07 (b)	2,05 (c)	1

Cinzas	DRIFTS-B1(10)	DRIFTS-E1(2)	DRIFTS-H1(2)
DRIFTS-B1(10)	1	-	-
DRIFTS-E1(2)	1,40 (a)	1	-
DRIFTS-H1(2)	3,06 (b)	2,19 (c)	1

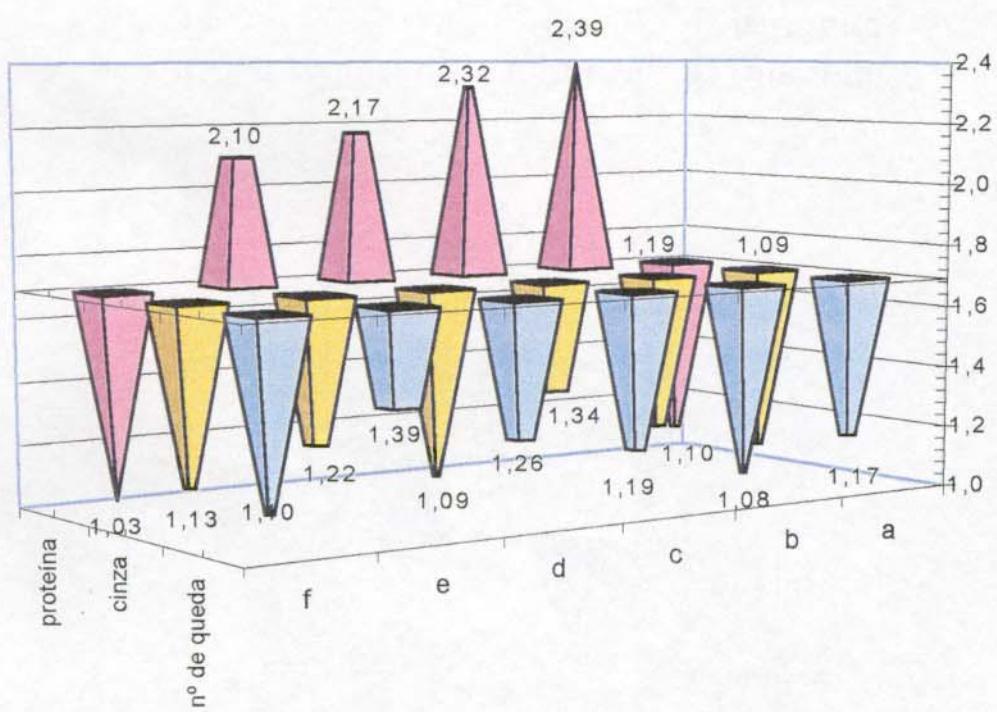
Nº de Queda	DRIFTS-B1(8)	DRIFTS-E1(3)	DRIFTS-H1(1)
DRIFTS-B1(8)	1	-	-
DRIFTS-E1(3)	1,72 (a)	1	-
DRIFTS-H1(1)	2,04 (b)	1,18 (c)	1



Proteína	DRIFTS-A2(7)	DRIFTS-B2(9)	DRIFTS-D2(3)	DRIFTS-E2(2)
DRIFTS-A2(7)	1	-	-	-
DRIFTS-B2(9)	1,10 (a)	1	-	-
DRIFTS-D2(3)	2,39 (b)	2,17 (d)	1	1,03 (f)
DRIFTS-E2(2)	2,32 (c)	2,10 (e)	-	1

Cinzas	DRIFTS-A2(10)	DRIFTS-B2(9)	DRIFTS-D2(3)	DRIFTS-E2(2)
DRIFTS-A2(10)	1	-	-	-
DRIFTS-B2(9)	1,09 (a)	1	-	-
DRIFTS-D2(3)	1,19 (b)	1,09 (d)	1	-
DRIFTS-E2(2)	1,34 (c)	1,22 (e)	1,13 (f)	1

Nº de Queda	DRIFTS-A2(6)	DRIFTS-B2(7)	DRIFTS-D2(2)	DRIFTS-E2(3)
DRIFTS-A2(6)	1	1,17 (a)	-	-
DRIFTS-B2(7)	-	1	-	-
DRIFTS-D2(2)	1,08 (b)	1,26 (d)	1	-
DRIFTS-E2(3)	1,19 (c)	1,39 (e)	1,10 (f)	1

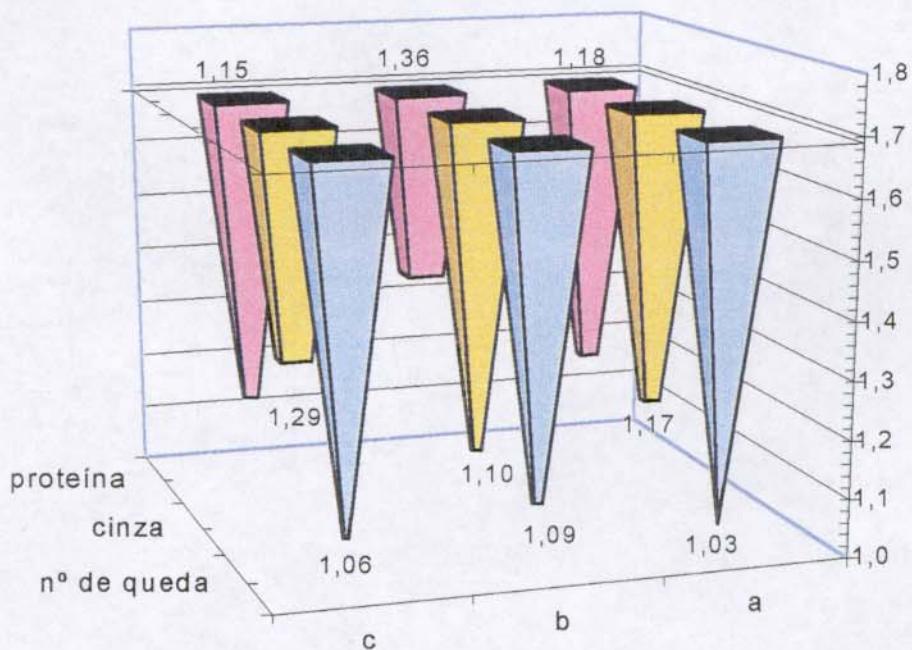


Teste F para os Principais Modelos NIRR

Proteína	NIRR-B1(10)	NIRR-E1(8)	NIRR-H1(2)
NIRR-B1(10)	1	-	-
NIRR-E1(8)	1,18 (a)	1	-
NIRR-H1(2)	1,36 (b)	1,15 (c)	1

Cinzas	NIRR-B1(10)	NIRR-E1(3)	NIRR-H1(5)
NIRR-B1(10)	1	-	1,10 (b)
NIRR-E1(3)	1,17 (a)	1	-
NIRR-H1(5)	-	1,29 (c)	1

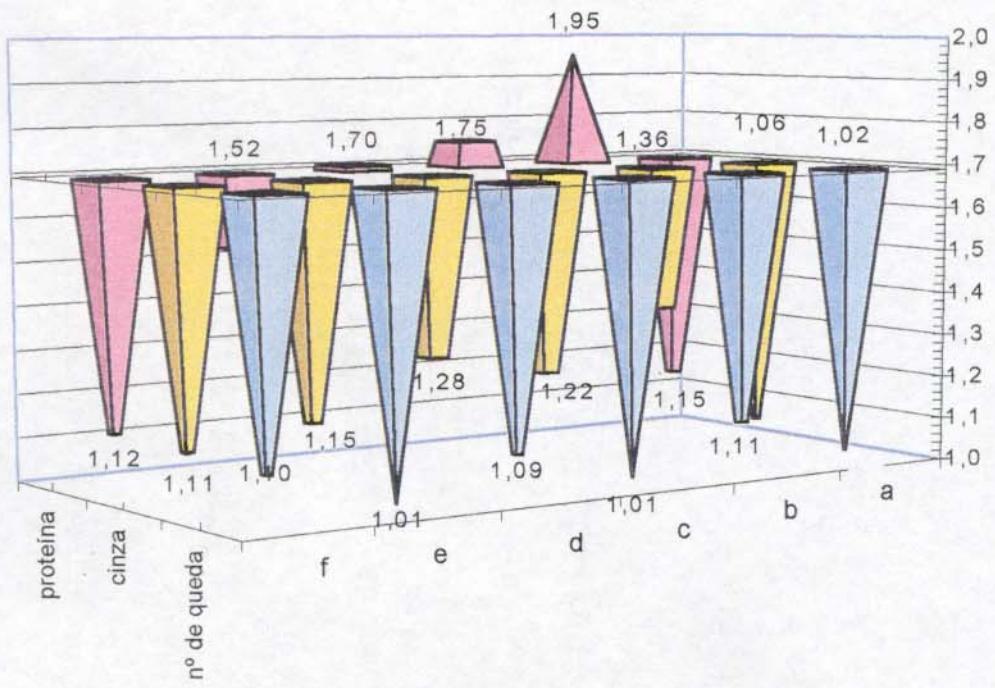
Nº de Queda	NIRR-B1(2)	NIRR-E1(2)	NIRR-H1(2)
NIRR-B1(2)	1	-	-
NIRR-E1(2)	1,03 (a)	1	-
NIRR-H1(2)	1,09 (b)	1,06 (c)	1



Proteína	NIRR-A2(10)	NIRR-B2(7)	NIRR-D2(10)	NIRR-E2(8)
NIRR-A2(10)	1	-	-	-
NIRR-B2(7)	1,15 (a)	1	-	-
NIRR-D2(10)	1,95 (b)	1,70 (d)	1	1,12 (f)
NIRR-E2(8)	1,75 (c)	1,52 (e)	-	1

Cinzas	NIRR-A2(10)	NIRR-B2(10)	NIRR-D2(8)	NIRR-E2(3)
NIRR-A2(10)	1	-	-	-
NIRR-B2(10)	1,06 (a)	1	-	-
NIRR-D2(8)	1,36 (b)	1,28 (d)	1	1,11 (f)
NIRR-E2(3)	1,22 (c)	1,15 (e)	-	1

Nº de Queda	NIRR-A2(2)	NIRR-B2(2)	NIRR-D2(3)	NIRR-E2(2)
NIRR-A2(2)	1	-	-	-
NIRR-B2(2)	1,02 (a)	1	-	1,01 (e)
NIRR-D2(3)	1,11 (b)	1,09 (d)	1	1,10 (f)
NIRR-E2(2)	1,01 (c)	-	-	1



Apêndice D

Dados Referentes aos Modelos Comparados via PCA

Modelos Desenvolvidos para as Estimativas do Teor de Proteína

Tabela dos valores de R², VL, SEC e SEV.

Modelo	R ²	VL	SEC	SEV
HATR-B1(9)	0,976	9	0,151	0,210
HATR-A2(7)	0,952	7	0,216	0,175
HATR-B2(10)	0,991	10	0,093	0,191
DRIFTS-B1(12)	0,979	12	0,142	0,246
DRIFTS-E1(2)	0,816	2	0,425	0,301
DRIFTS-A2(7)	0,929	7	0,263	0,201
DRIFTS-B2(9)	0,934	9	0,254	0,211
NIRRS-B1(10)	0,969	10	0,171	0,389
NIRRS-E1(8)	0,999	8	0,012	0,423
NIRRS-B2(7)	0,887	7	0,333	0,345
NIRRS-A2(10)	0,975	10	0,155	0,322

Modelos Desenvolvidos para as Estimativas do Teor de Cinza

Tabela dos valores de R², VL, SEC e SEV.

Modelo	R²	VL	SEC	SEV
HATR-B1(13)	0,997	13	0,010	0,037
HATR-A2(4)	0,721	4	0,113	0,036
HATR-B2(6)	0,844	6	0,085	0,035
DRIFTS-B1(10)	0,954	10	0,046	0,044
DRIFTS-E1(2)	0,786	2	0,100	0,052
DRIFTS-A2(10)	0,948	10	0,049	0,045
DRIFTS-B2(9)	0,921	9	0,060	0,047
NIRRS-H1(5)	0,997	5	0,011	0,087
NIRRS-B2(10)	0,978	10	0,031	0,069
NIRRS-A2(10)	0,978	10	0,032	0,067

Modelos Desenvolvidos para as Estimativas do Número de Queda

Tabela dos valores de R², VL, SEC e SEV.

Modelo	R²	VL	SEC	SEV
HATR-B1(6)	0,701	6	24,72	17,75
HATR-A2(7)	0,813	7	19,32	17,96
DRIFTS-B1(8)	0,552	8	29,95	16,74
DRIFTS-E2(3)	0,876	3	15,71	21,99
DRIFTS-B2(7)	0,460	7	32,87	18,67
NIRRS-B1(2)	0,102	2	42,43	19,92
NIRRS-E1(2)	0,953	2	9,64	20,91
NIRRS-E2(2)	0,953	2	9,70	19,94
NIRRS-A2(2)	0,049	2	43,64	19,85

Apêndice E

Exemplos de Curvas de Calibração para a Previsão do Teor de Proteína

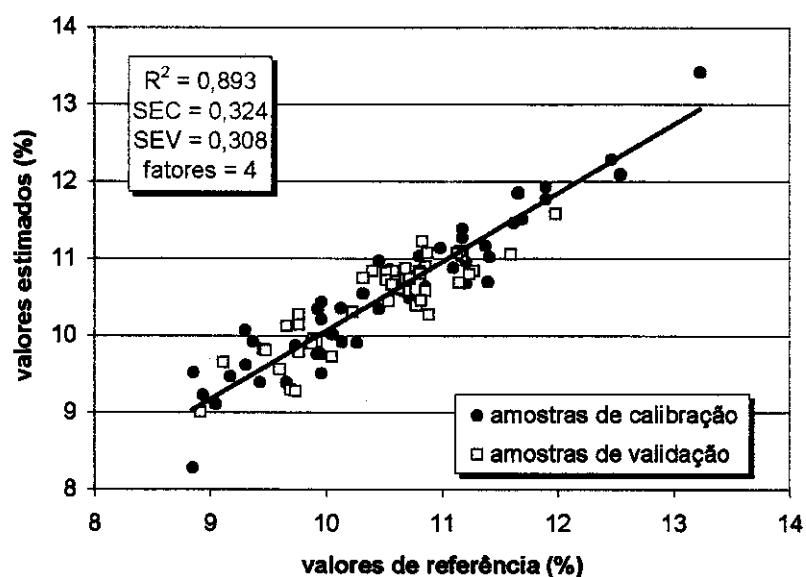


Figura E1 – Curva de calibração do modelo HATR-E4.

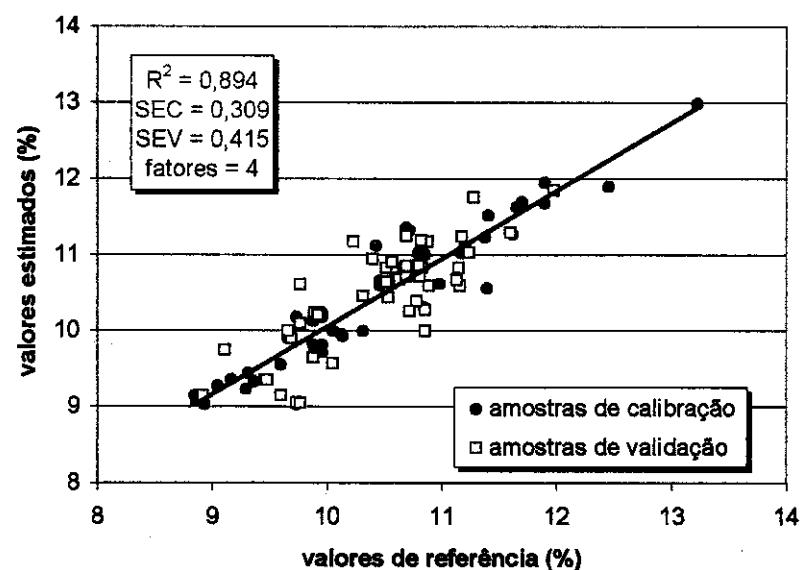


Figura E2 – Curva de calibração do modelo HATR-E5.

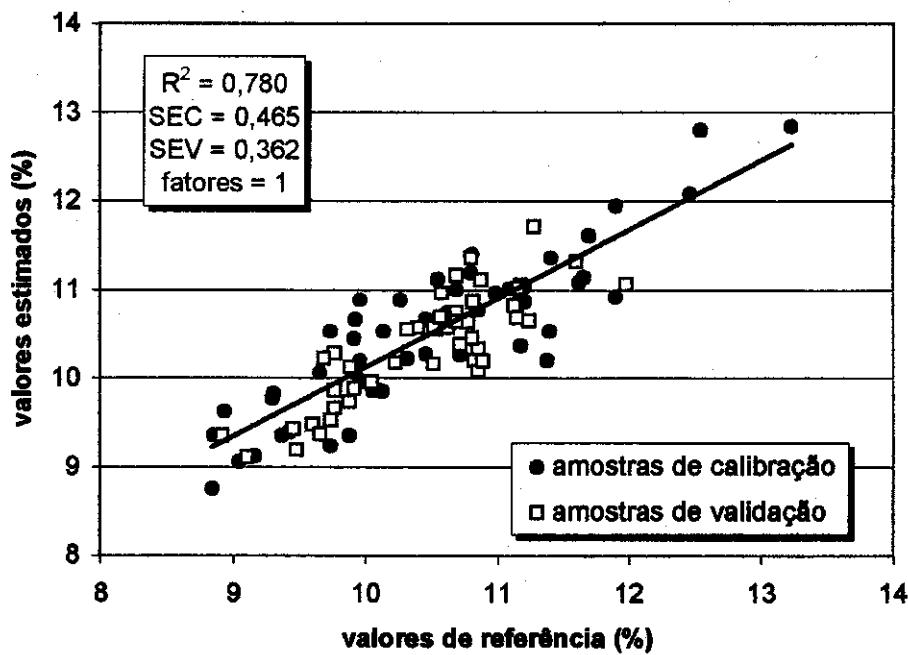


Figura E3 – Curva de calibração do modelo DRIFTS-H5.

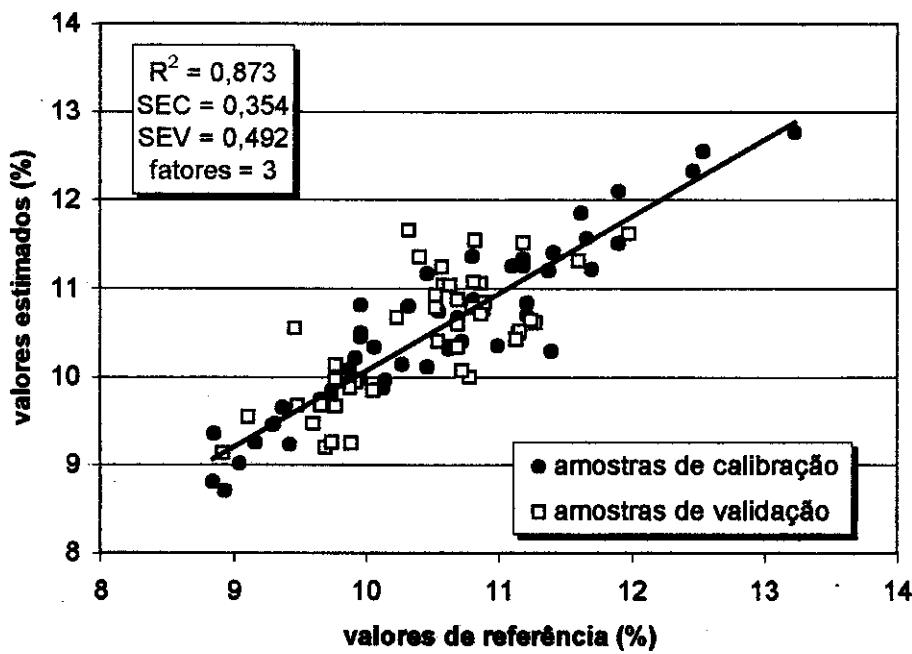


Figura E4 – Curva de calibração do modelo DRIFTS-E4.

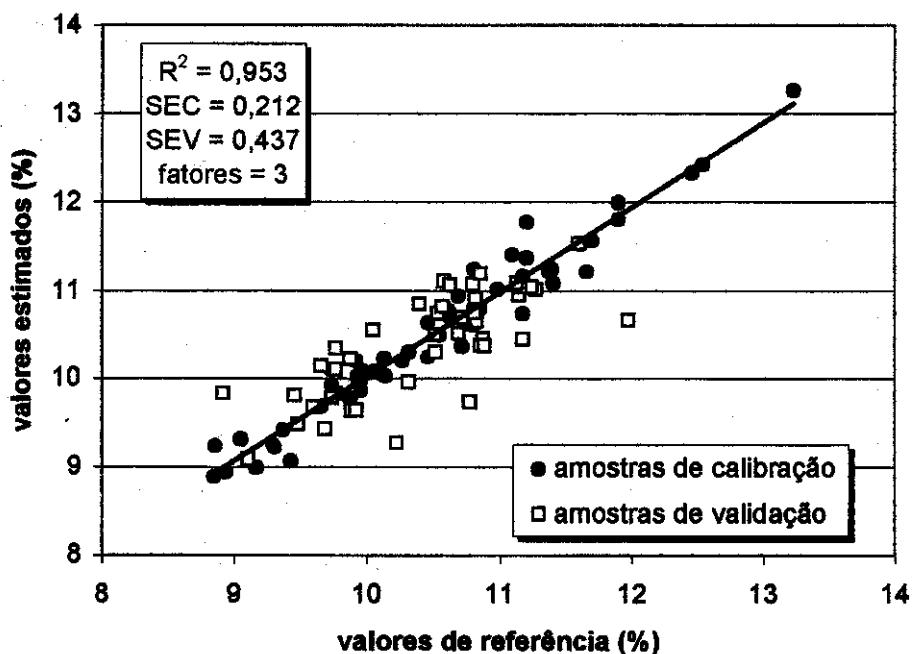


Figura E5 – Curva de calibração do modelo NIRRS-E5.

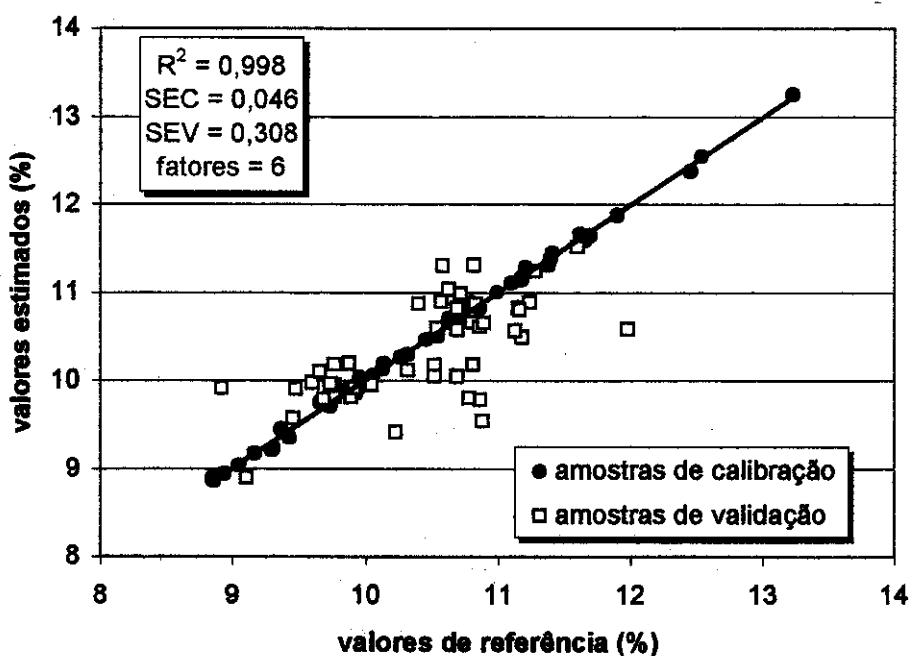


Figura E6 – Curva de calibração do modelo NIRRS-E4.

Exemplos de Curvas de Calibração para a Previsão do Teor de Cinza

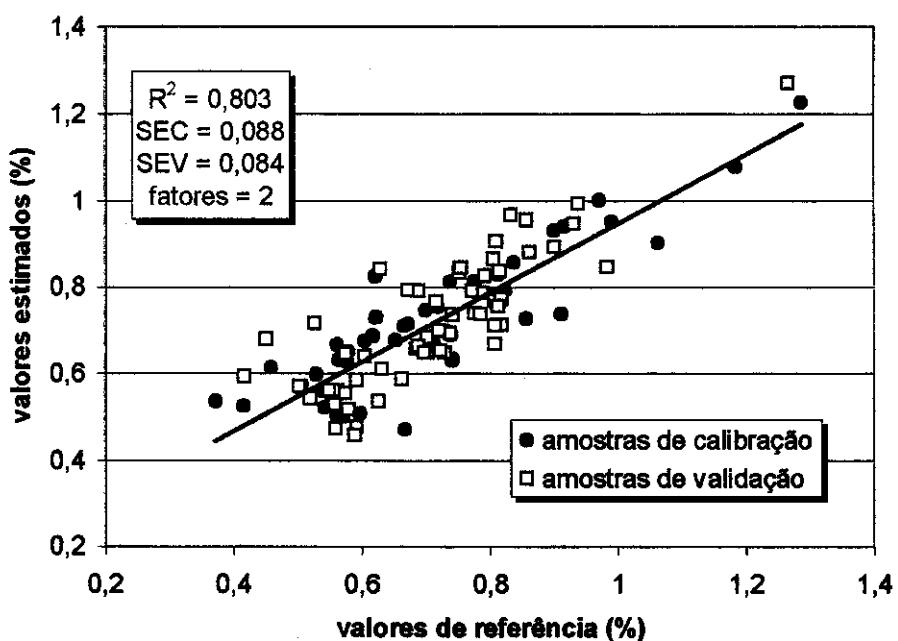


Figura E7 – Curva de calibração do modelo HATR-E5 para estimar o teor de cinza.

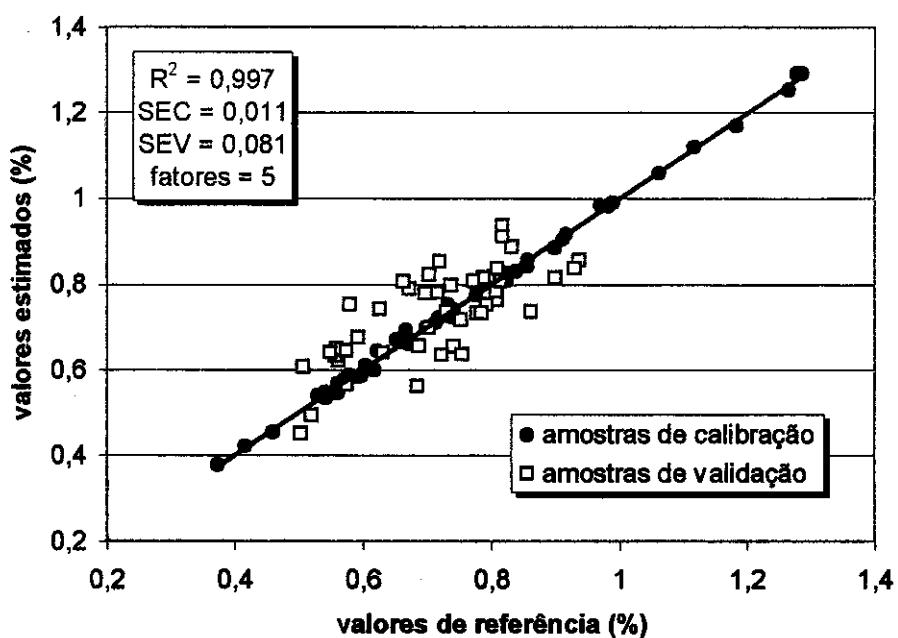


Figura E8 – Curva de calibração do modelo NIRRS-E5 para estimar o teor de cinza.

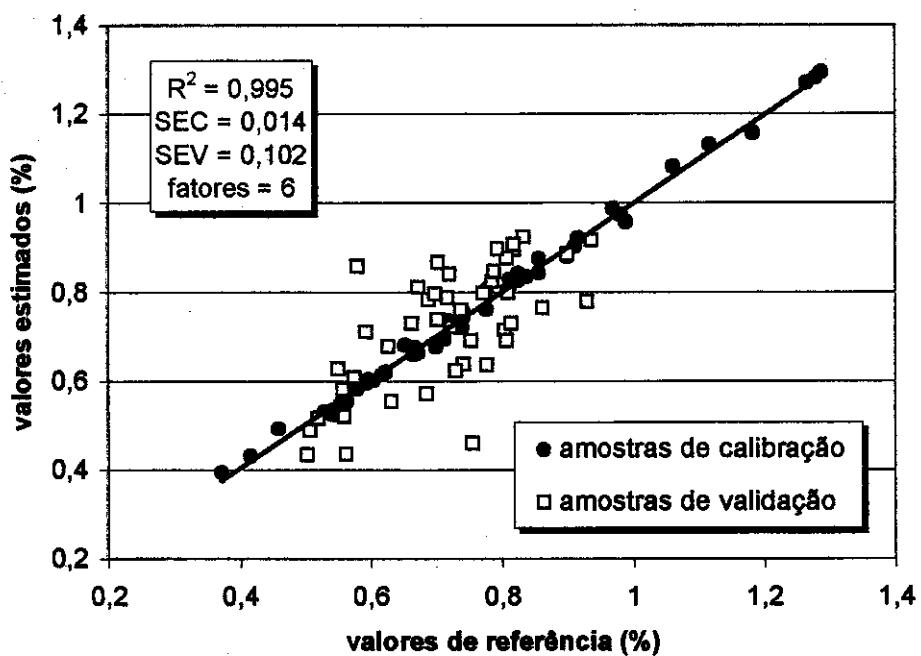


Figura E9 – Curva de calibração do modelo NIRRS-E4 para estimar o teor de cinza.

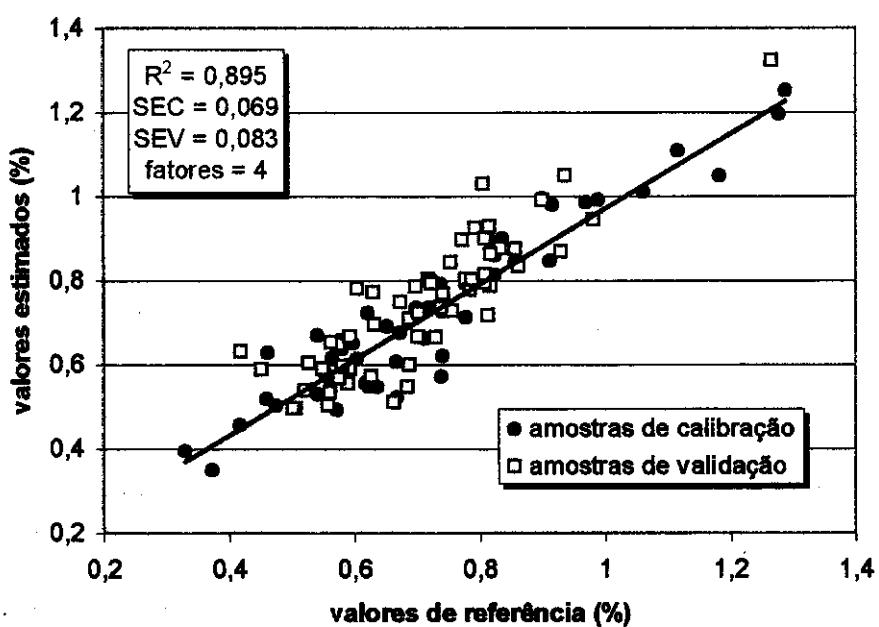


Figura E10 – Curva de calibração do modelo DRIFTS-E4 para estimar o teor de cinza.

Exemplos de Curvas de Calibração para a Previsão do Número de Queda

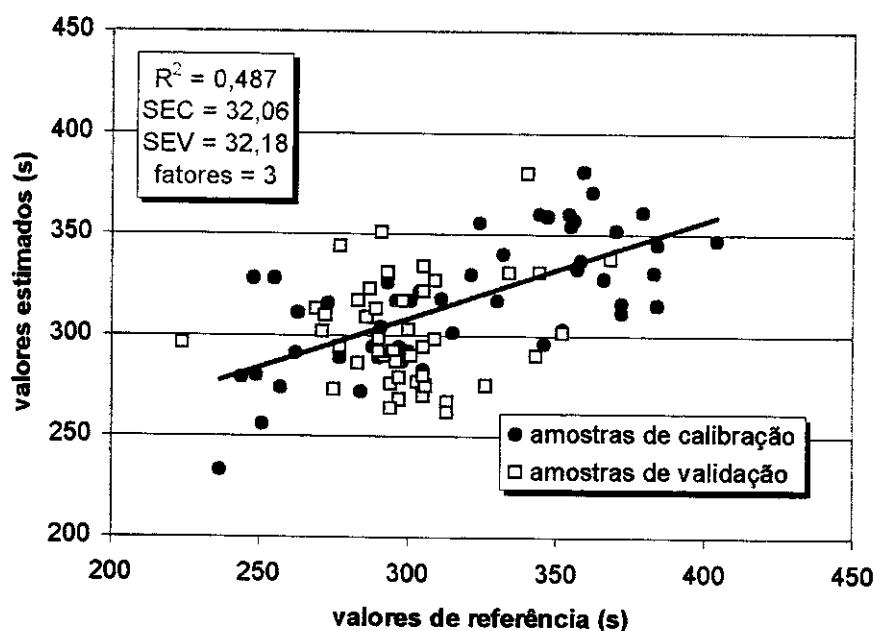


Figura E11 – Curva de calibração do modelo HATR-E4 para estimar o número de queda.

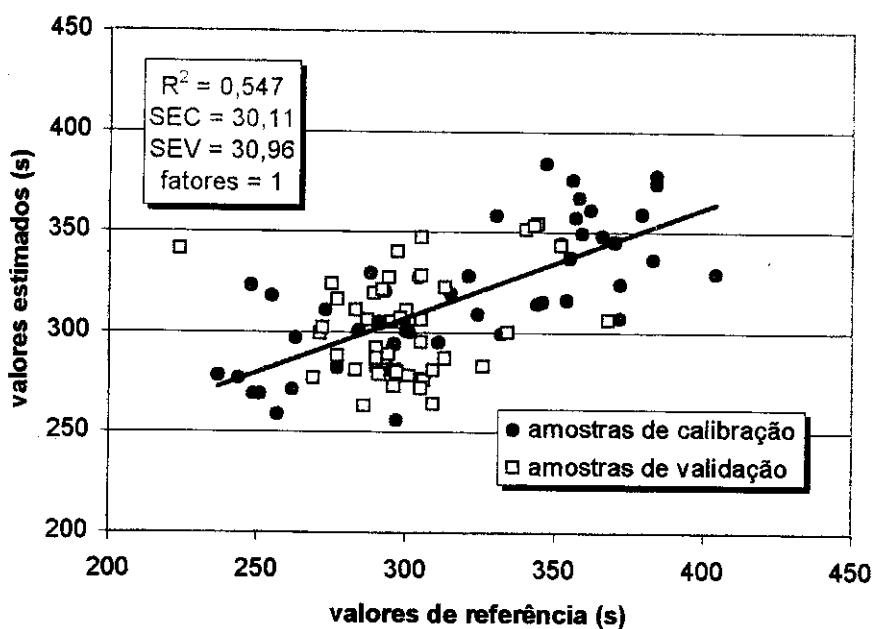


Figura E12 – Curva de calibração do modelo DRITS-H4 para estimar o número de queda.

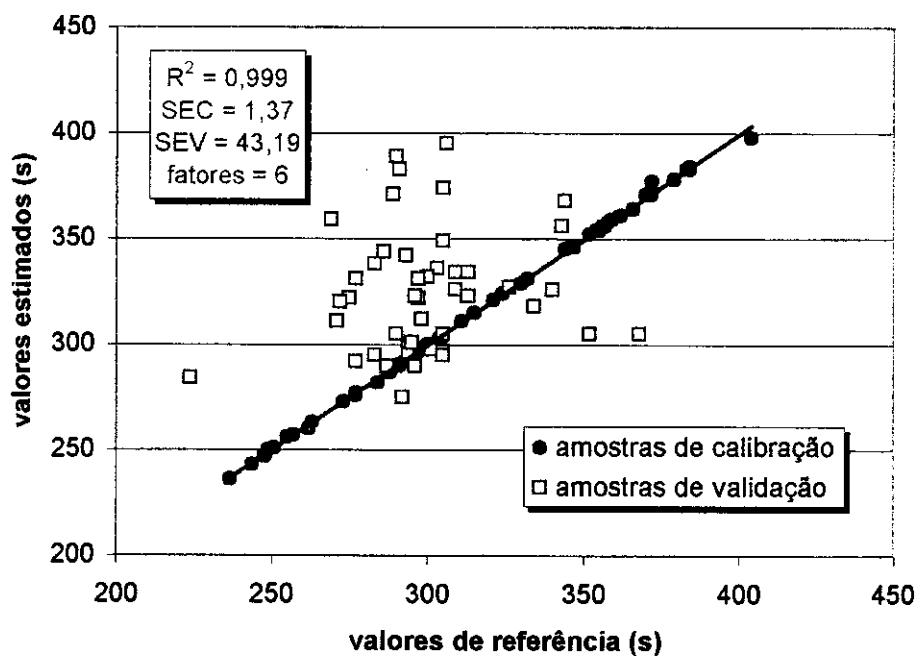


Figura E13 – Curva de calibração do modelo NIRRS-E4 para estimar o número de queda.