

Avaliando a Fertilidade do Solo com Imagens Digitais

Pedro A. de O. Morais, Diego M. de Souza, Beata E. Madari
& Anselmo E. de Oliveira

Imagens digitais de 177 amostras de solo de três regiões do Brasil foram utilizadas para desenvolver uma metodologia de análise dos parâmetros de fertilidade do solo: carbono orgânico total e textura. As imagens, obtidas com um scanner de mesa, foram correlacionadas com os parâmetros experimentais de fertilidade por meio de calibração multivariada. LSSVMR apresentou os melhores resultados para estimar os teores de areia, argila e carbono orgânico. Em seguida, a classificação textural das amostras com imagens digitais apresentou 90,6% de concordância com o método convencional. A metodologia proposta por imagens digitais, além de determinar os parâmetros de fertilidade de forma simultânea e em poucos minutos, dispensa o uso de reagentes químicos. A aplicação desse método de química verde minimiza o risco de acidentes, preserva a amostra para análises futuras e abre caminho para implementação on line de análises de solo.

Palavras-chave: *textura; carbono orgânico; química verde.*

A set of 177 soil samples from three Brazilian regions were digitally scanned and its images were correlated to soil's fertility parameters using multivariate calibration methods. The LSSVMR presented the best sand, clay, and organic carbon content estimates. The textural classification using digital images matched 90.6%. The proposed method can determine sand, clay, and silt contents simultaneously in a few minutes. The method does not require the use of chemicals and it is in accordance with green chemistry lab analysis.

Keywords: *texture; organic carbon; green chemistry.*

Introdução

A textura e o carbono orgânico do solo (COS) são parâmetros essenciais na caracterização do solo, especialmente, para fins agrícolas. O COS compreende todos os compostos orgânicos presentes em restos de vegetais e animais independentes do estado de decomposição, assim como nos organismos vivos¹. Ele está relacionado a fatores do solo como o armazenamento hídrico², estrutura^{3,4}, disposição de nutrientes⁵ e cor^{6,7}. Já a textura, representa a distribuição das partículas físicas do solo com diâmetros de até 2 mm (i.e. argila, silte e areia)⁸ e está interligada aos processos no solo como a retenção de água⁹, teores de matéria orgânica¹⁰, disponibilidade de nutrientes¹¹ e a cor do solo^{6,12}.

A determinação do COS é realizada, geralmente, com os métodos titulométricos Walkley-Black¹³ e Mebius¹⁴. Nos dois casos, o carbono orgânico é convertido a CO₂ pela ação oxidante dos íons Cr₂O₇²⁻ em condições ácidas. Em seguida, determina-se o excesso de Cr₂O₇²⁻ por titulação com Fe(II). Por fim, determina-se a quantidade de Cr₂O₇²⁻ que reagiu com o carbono orgânico, subtraindo do total de Cr₂O₇²⁻ adicionado o excesso determinado na titulação. Por meio desse resultado, determina-se o teor de carbono orgânico total, i.e. COS, o qual pode ser convertido em teores de matéria orgânica do solo (MOS) por meio do fator de van Bemmelen¹⁵. Já a quantificação da textura do solo é realizada, de forma geral, pelo método da Pipeta⁸ com dispersões física e química da amostra de solo em meio aquoso básico. Em seguida, efetuam-se a separação e a determinação das partículas físicas.

Considerando o tempo gasto com o preparo de soluções e com a lavagem de vidrarias, estima-se, em um laboratório de análises de solo, cerca de 100 amostras/dia. Além disso, a análise de uma única amostra pelo método Walkley-Black consome 10 mL de K₂Cr₂O₇ 0.1667 mol L⁻¹, 20 mL de H₂SO₄ P.A. e 10 mL de H₃PO₄ P.A. resultando 40 mL de resíduo sulfocrômico. Isso significa que a análise de 100 amostras/dia produz mais de 4 L de resíduo sulfocrômico. Vale ressaltar que os ácidos utilizados são oxidantes fortes e o cromo é um metal cancerígeno^{16,17}. Devido a essa alta

toxicidade, a legislação brasileira¹⁸ recomenda o descarte em aterro industrial, elevando o custo da análise.

Para a determinação da textura do solo, considerando todas as etapas da análise como preparo das soluções, limpeza e organização das vidrarias, pesagem das amostras e dispersões física e química, estimam-se cerca de 30 amostras/dia. E, ao final de cada ensaio, é gerado, por amostra, cerca de 1 L de resíduo. Esse resíduo é de caráter básico e necessita ser neutralizado antes do descarte.

Metodologias que empregam imagens possuem, de forma geral, baixo custo, alta eficiência e baixa geração de resíduos. Imagens digitais podem ser adquiridas por máquinas fotográficas, scanners e smartphones. Essas metodologias também são desenvolvidas para a agricultura, como na avaliação da qualidade de algodão¹⁹, mamona²⁰, girassol²¹ e café²², por exemplo. Imagens digitais também foram empregadas análises de solo para quantificar Cr(VI)²³, Fe²⁴, além de argila e areia²⁵.

Dessa forma, este estudo propõe um método para determinação da textura do solo e dos teores de carbono orgânico em amostras de solo por meio de imagens digitais obtidas utilizando um scanner de mesa. Além da quantificação simultânea dos parâmetros de fertilidade, o método desenvolvido não requer a utilização de reagentes químicos, e emprega equipamentos de baixo custo para a análise de imagens digitais de amostras de solo.

O trabalho apresenta o processo de amostragem, incluindo a obtenção das imagens digitais a partir das amostras de solo secas e peneiradas. Em seguida, as informações extraídas dessas imagens serão correlacionadas com os teores de COS, argila e areia, obtidos experimentalmente, utilizando três métodos de calibração: PLS, SPA-MLR e LSSVMR. Por fim, a classificação textural é apresentada.

Materiais e Métodos

AMOSTRAGEM

Neste estudo, 177 amostras de solo foram coletadas em três regiões do país: Norte, Nordeste e Centro-Oeste. Após a coleta, essas amostras de solo foram secas ao ar durante 48 horas, moídas, utilizando um moinho para solo tipo

martelo (Tecnal, TE-330) e peneiradas em malhas de 2 mm.

DETERMINAÇÃO DO CARBONO ORGÂNICO DO SOLO

A determinação do carbono orgânico do solo foi realizada utilizando o método Walkley-Black espectrofotométrico adaptação do método original¹³. Inicialmente, 4,0 mL de $K_2Cr_2O_7$ 0.167 mol L^{-1} e 8,0 mL de H_2SO_4 P.A são adicionados em 0,2 g de amostra de solo. Após o resfriamento dessa mistura, adicionam-se 12 mL de água deionizada. Ao final de dois dias de decantação, 5 mL do sobrenadante são transferidos para uma cubeta cilíndrica de 16 mm de diâmetro para a determinação espectrofotométrica ($\lambda = 590$ nm).

DETERMINAÇÃO DA TEXTURA DO SOLO

A determinação da textura do solo foi realizada por meio do método da Pipeta: 10 mL de hidróxido de sódio 1 mol L^{-1} , 10 mL de hexametafosfato de sódio 1 mol L^{-1} e 2 mL de peróxido de hidrogênio 9% são adicionados a 10 g de amostra de solo fina e seca. A mistura é colocada em um processador ultrassônico Hielscher UP400S (400W 24 kHz) para a dispersão física da amostra. Após essa dispersão da areia, a mistura é peneirada (malha 0,05 mm), secada em estufa e quantificada por pesagem. A mistura de solo que passou pela peneira, é transferida para uma proveta, completando-se o volume de 1,0 L com água destilada. Após homogeneização e decantação, coleta-se uma alíquota de 50 mL a uma profundidade de 5 cm, seguido de sua quantificação por gravimetria para quantificação da argila. O teor de silte e determinado de forma indireta, descontando 100% das porcentagens, em massa, de areia e argila. Em sequência, a determinação dos teores de argila, areia e silte, a classificação textural das amostras é feita utilizando o diagrama textural apresentado na Figura 1.

AQUISIÇÃO DAS IMAGENS DIGITAIS

Amostras de solo (20 g) secas ao ar e moídas em moinho foram colocadas em uma placa de Petri para registro das imagens em um scanner de mesa HP Scanjet G4050, Figura 2. Para cada amostra de solo, 3 imagens foram capturadas

no sistema de cor RGB (Red, Green, Blue), com resolução de 300 dpi e formato TIFF.

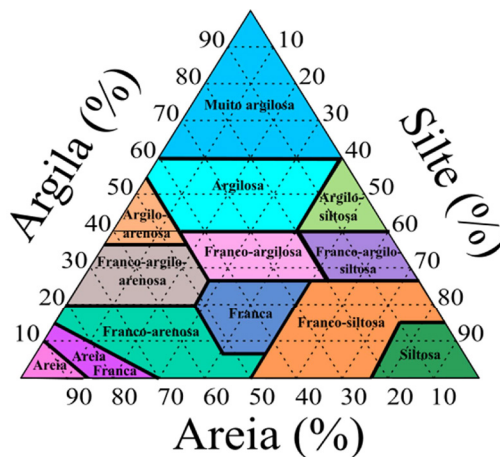


Figura 1. Diagrama triangular utilizado na classificação textural do solo.

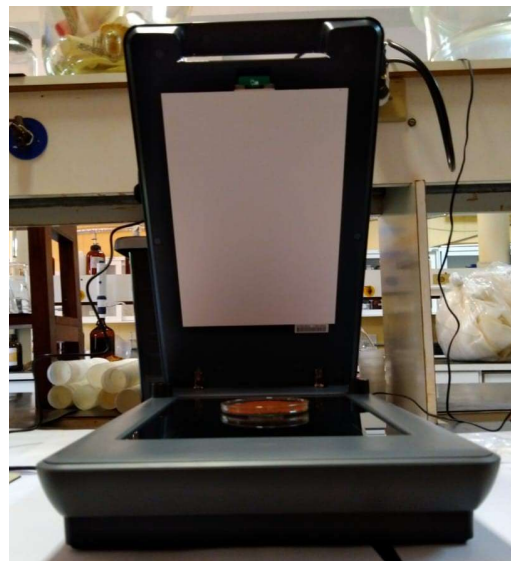


Figura 2. Aquisição das imagens das amostras de solo utilizando Scanner

ANÁLISE DE IMAGENS

Para cada imagem digitalmente capturada, foi selecionada a região central que continha somente a imagem da amostra, denominada de região de interesse (ROI). Essa

ROI foi decomposta em três imagens monocromáticas referentes aos canais de cores R, G e B (Figura 3).

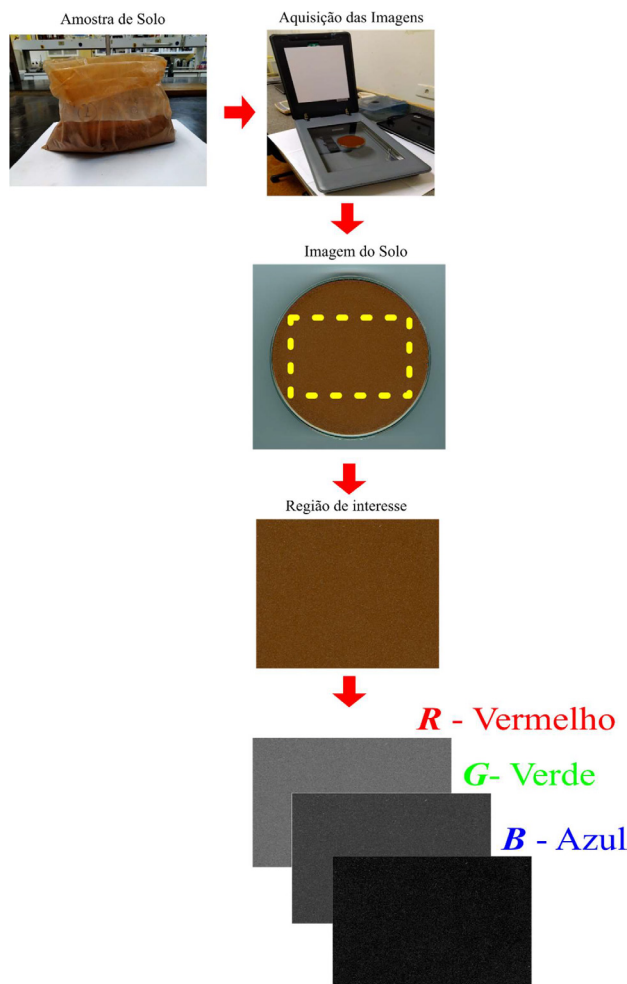


Figura 3. Primeiras etapas da análise de imagens

Em seguida, histogramas de ocorrência foram obtidos para as imagens monocromáticas. Um vetor com 768 variáveis (256 para cada canal/índice/intensidade de cor) foi gerado após justaposição dos histogramas. A Figura 4 ilustra esse processo. Por fim, histogramas médios para cada amostra, com base nas suas imagens em triplicatas, foram utilizados para construção da matriz de dados de imagens de solo (linha: amostra; coluna: índice de cor).

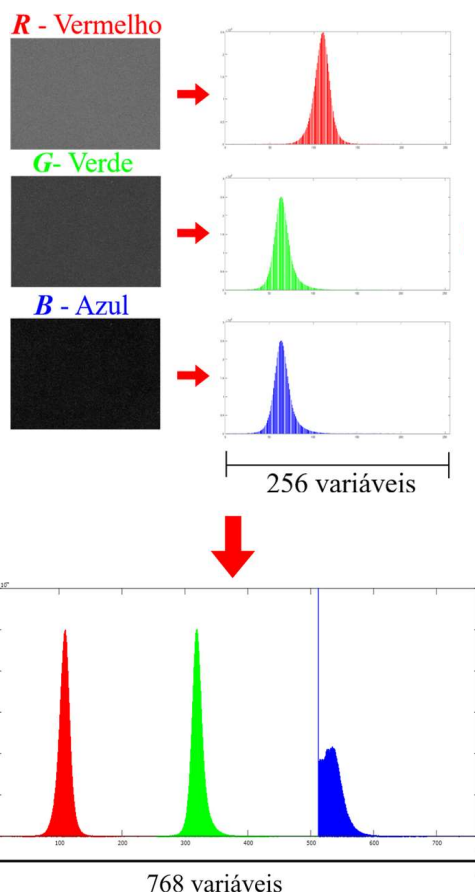


Figura 4. Esquema para obtenção dos histogramas de ocorrência

CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA

Os dados de imagens de solo foram correlacionados com os teores de carbono orgânico, argila e areia determinados experimentalmente utilizando três métodos: regressão linear múltipla (MLR), regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) e máquinas de vetor suporte por mínimos quadrados (LSSVMR).

MLR, embora seja um método simples, apresenta algumas limitações como a utilização de toda informação presente na matriz de dados o que, muitas vezes, leva a inclusão de informação de pouca significância (ruído) no modelo. Além disso, a MLR não pode ser aplicada em

sistemas com mais variáveis do que amostras (matriz de dados não pode ser invertida e o sistema não apresentará solução). Para minimizar esses efeitos, o algoritmo das projeções sucessivas (SPA)^{26,27} foi empregado juntamente com MLR como ferramenta de seleção de variáveis.

O método PLS²⁸ realiza a decomposição tanto da matriz de dados de imagens do solo, quanto dos vetores contendo os teores de COS, areia e argila, em variáveis latentes (LVs). O número ideal de LVs pode ser determinado por meio da técnica de validação cruzada (CV).

A ferramenta LSSVM²⁹ foi desenvolvida a partir da máquina de vetor de suporte (SVM) e do método dos mínimos quadrados. Diferente da PLS, a LSSVM não realiza a decomposição dos dados, isto é, toda a informação é utilizada. Neste estudo, utilizou-se a função Kernel de base radial (RBF), uma função ao gaussiana, como função núcleo, além dos parâmetros σ^2 (largura da função gaussiana) e γ (constante de regularização). A definição desses parâmetros foi realizada por meio de uma superfície de resposta que relaciona σ^2 e γ com o erro médio quadrático da validação cruzada (RMSECV). Para a construção dos modelos de calibração multivariados, as amostras foram divididas em dois conjuntos: (i) calibração, contendo 124 amostras (70% do total) e (ii) validação contendo 53 amostras (30% do total), utilizando o algoritmo SPXY (*Sample set Partitioning based on joint x-y distances*)³⁰.

Em seguida, o modelo de calibração foi aplicado às amostras do conjunto de validação para determinar a robustez do modelo e sua capacidade de previsão, por meio dos seguintes parâmetros: raiz dos erros médios quadráticos de calibração (RMSEC) e previsão (RMSEP); erro padrão de previsão (SEP); e o desvio residual de previsão (RPD)^{31,32}. O RPD é uma figura de mérito que avalia as predições do modelo de calibração utilizando uma escala numérica, de tal forma que quanto maior o valor do RPD, melhor a capacidade preditiva do modelo^{31,33}.

Todos os cálculos foram realizados utilizando o software MATLAB R2014b, versão 8.4.0 (Mathworks, Natick, EUA) com os pacotes PLS Toolbox 8.1 (Eigenvector Research, EUA), LSSVMlab Toolbox versão 1.834 e SPA Toolbox³⁵.

Resultados e Discussões

A Figura 5 ilustra as etapas empregadas no método para estimar os teores de COS, argila e areia por meio da análise multivariada das imagens dos solos capturadas por um scanner de mesa. Em seguida, são apresentados os resultados para a quantificação do COS e a determinação da textura após a estimativa dos teores de areia, argila e silte.

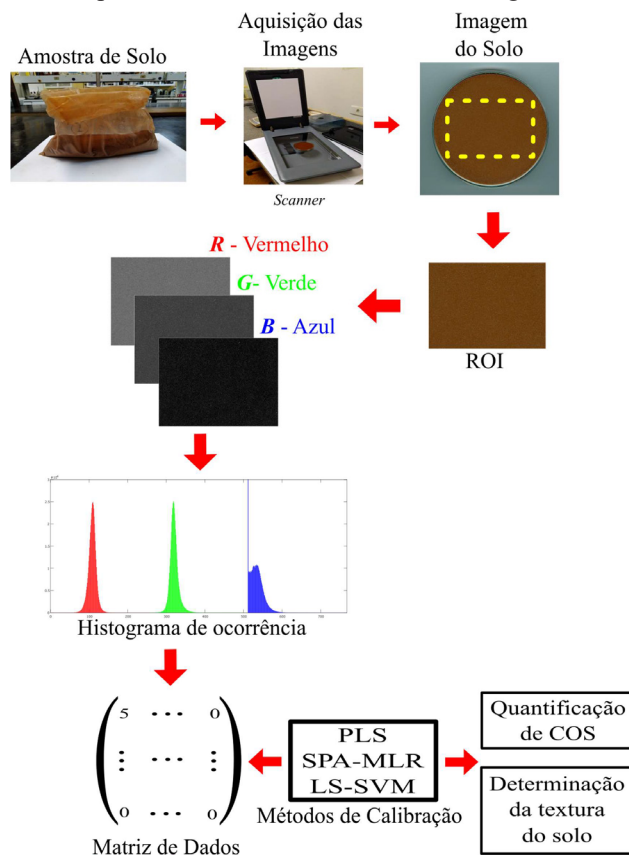


Figura 5. Esquema para análise de solo por meio de imagens digitais

QUANTIFICAÇÃO DE COS POR IMAGENS

A Tabela 1 apresenta os resultados obtidos para os métodos PLSR, SPA-MLR e LSSVMR na previsão dos teores de COS por meio de imagens digitais das amostras de solo. Os valores de RMSEP calculados para o método SPA-MLR e PLSR, Tabela 1, diferem significativamente (teste F, P=0,05), indicando que o PLSR apresenta resultados

melhores que SPA-MLR. No entanto, o RMSEP calculado para LSSVMR e significativamente inferior ao calculado para o método PLSR. Combinando essa informação ao valor de RPD obtido para LSSVMR ($> 3,0$, indicando que esse modelo de calibração apresenta excelente desempenho³⁶). Pode-se concluir que o método LSSVMR apresenta melhor desempenho para quantificação de COS em amostras de solo utilizando imagens em relação as metodologias PLSR e SPA-MLR.

Tabela 1. Parâmetros estatísticos da calibração e validação na quantificação de COS por imagens utilizando os métodos SPA-MLR, PLSR e LSSVMR.

Parâmetros	SPA-MLR	PLSR	LSSVMR
r_{cal}^{2a}	0,5145	0,7543	0,9499
RMSEC ^b	7,2	5,1	2,5
r_{val}^{2c}	0,6924	0,7679	0,9287
RMSEP ^d	5,7	4,5	2,9
Nº de Variáveis ^e	16	-	-
LV ^f	-	20	-
γ^g	-	-	12,907
σ^2h	-	-	249,156
RPD ⁱ	1,7	2,1	3,3

^aCoefficiente de correlação de Pearson ao quadrado para calibração;

^bRaiz do erro médio quadrático de calibração em g/kg; ^cCoefficiente de correlação de Pearson ao quadrado para validação;

^dRaiz do erro médio quadrático de validação em g/kg; ^eNúmero de variáveis selecionadas pelo método SPA;

^fLV = número de variáveis latentes;

^gParâmetro de regularização; ^hParâmetro Kernel; ⁱDesvio residual da

predição em g/kg.

A determinação de COS com método Walkley-Black envolve várias etapas, como pesagem e decantação das amostras, resultando cerca de dois dias para emissão dos resultados. Ao final de cada análise, cerca de 30 mL de resíduo químico e gerado, em média. Em um dia de análise, para 100 amostras, cerca de 3 L desse resíduo são gerados e devem ser previamente tratados.

Percebe-se, assim, que o método proposto, baseado em imagens digitais, além de não utilizar reagentes químicos,

garantindo um ambiente de trabalho muito mais seguro, é mais rápido com emissão do resultado da análise em poucos minutos. Além disso, é um método não destrutivo, uma vez que o único resíduo gerado é a própria amostra de solo.

ANÁLISE TEXTURAL POR IMAGENS

A primeira parte da análise textural consiste na estimativa dos teores de areia e argila, por meio de imagens digitais, usando os três métodos de calibração multivariada estudados. Os parâmetros estatísticos calculados para avaliar o desempenho desses métodos são apresentados na Tabela 2.

De modo similar ao verificado para a determinação de COS por imagens digitais, Tabela 1, o RMSEP calculado para LSSVMR é estatisticamente menor que os calculados para SPA-MLR e PLSR (teste F, $P=0,05$). Não houve diferença estatística entre os RMSEPs determinados para os métodos SPA-MLR e PLSR. Valores de RPD superiores a 3,0 foram calculados para LSSVMR. Esses resultados confirmam que LSSVMR apresenta melhor desempenho, também, para a previsão de argila e areia por imagens digitais.

Em seguida, a determinação dos teores de areia e argila por imagens, usando LSSVMR, o teor de silte é calculado subtraindo 100% da soma dos teores de areia e argila. Dessa forma, a classificação textural das amostras pertencentes ao conjunto de validação foi feita usando o triângulo da Figura 1, em que as coordenadas de cada amostra são obtidas pelos teores de argila, areia e silte. Os resultados obtidos com a metodologia por imagens apresentaram concordância de 90,6% com as análises realizadas pelo método da Pipeta.

A determinação da textura do solo pelo método da Pipeta leva cerca de 3 dias para a emissão do resultado da análise. Esse método também emprega reagentes oxidantes e corrosivos de modo que, após a análise, cerca de 1 L de um resíduo básico e produzido por amostra. Esse resíduo apresenta risco químico e deve ser neutralizado previamente ao seu descarte. Já a metodologia desenvolvida com base em imagens digitais não utiliza reagentes químicos e o resultado pode ser obtido em minutos.

Tabela 2. Parâmetros estatísticos da calibração e validação na quantificação de COS utilizando os métodos SPA-MLR, PLS e LS-SVMR.

Parâmetros	Argila			Areia		
	SPA-MLR	PLSR	LSSVMR	SPA-MLR	PLSR	LSSVMR
r_{cal}^{2a}	0,5965	0,7690	0,9723	0,4741	0,7651	0,9563
RMSEC ^b	14,0	10,6	3,9	19,7	13,2	5,9
r_{val}^{2c}	0,6205	0,7119	0,9204	0,4942	0,5979	0,9295
RMSEP ^d	12,2	10,8	5,7	15,4	14,3	6,2
Nº de Variáveis ^e	15	-	-	7	-	-
LV ^f	-	18	-	-	18	-
γ^g	-	-	14,847	-	-	22,473
σ^{2h}	-	-	160,902	-	-	235,772
RPD ⁱ	1,6	1,8	3,4	1,4	1,5	3,5

aCoeficiente de correlação de Pearson ao quadrado para calibração; ^bRaiz do erro médio quadrático de calibração em g/kg; ^cCoeficiente de correlação de Pearson ao quadrado para validação; ^dRaiz do erro médio quadrático de validação em g/kg; ^eNúmero de variáveis selecionadas pelo método SPA; ^fLV = número de variáveis latentes; ^gParâmetro de regularização; ^hParâmetro Kernel; ⁱDesvio residual da predição em g/kg.

Conclusão

A determinação do carbono orgânico do solo, COS, bem como da sua textura pode ser realizada por um método não destrutivo, rápido e de baixo custo que emprega imagens digitais e calibração multivariada. Dos métodos de calibração multivariada testados, LSSVMR apresentou melhor desempenho em relação aos métodos PLSR e SPA-MLR.

A metodologia desenvolvida não emprega reagentes químicos, o que resulta em um ambiente de trabalho sem risco de contaminação química, quando comparado ao emprego dos métodos convencionais, além de não gerar, conseqüentemente, resíduos químicos em concordância com métodos ambientalmente amigáveis

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Goiás (FAPEG) pelo suporte financeiro.

Referências

1. Stevenson, F. J. Humus chemistry: genesis, composition, reactions, 2nd ed., Wiley: New York, **1994**.
2. Lado, M.; Paz, A.; Ben-Hur, M. Soil Sci. Soc. of Am. J. **2004**, 68, 234.
3. Oades, J.; Geoderma **1993**, 56, 377.
4. Bronick, C. J., Lal, R.; Geoderma **2005**, 124, 3.
5. Roscoe, R.; Mercante, F. M., Salton, J. C.; Dinâmica da matéria orgânica do solo em sistemas conservacionistas: modelagem matemática e métodos auxiliares, Embrapa Agropecuária Oeste: Dourados, **2006**.
6. Viscarra-Rossel, R.; Minasny, B.; Roudier, P.; McBratney, A.; Geoderma **2006**, 133, 320.
7. Baumgardner, M. F.; Kristof, S., Johannsen, C. J., Zachary, A., Purdue Univ. Agr. Exp. Station J. **1969**, 413.
8. Gee, G. W.; Bauder, J. W.; Klute, A.; Methods of soil analysis. Part 1. Physical and mineralogical methods, Am. Soc. of Agron., **1986**.
9. Salter, P.; Williams, J.; Eur. J. of Soil Sci. **1965**, 16, 1.
10. Plante, A. F.; Conant, R. T.; Stewart, C. E., Paustian, K.; Six, J.; Soil Sci. Society of Am. J. **2006**, 70, 287.

11. Silver, W. L.; Neff, J., McGroddy, M.; Veldkamp, E., Keller, M.; Cosme, R.; *Ecosystems* **2000**, 3, 193.9.
12. Konen, M.; Burras, C.; J. Sandor, *Soil Sci. Soc. of Am. J.* **2003**, 67, 1823.
13. Walkley, A.; Black, I. A.; *Soil Sci.* **1934**, 37, 29.
14. Mebius, L.; *Anal. Chim. Acta*, **1960**, 22, 120.
15. RAIJ, B.; ANDRADE, J.; Cantarella, H.; Quaggio, J.; Análise química para avaliação da fertilidade de solos tropicais, Instituto Agrônômico: Campinas, **2001**.
16. Cohen, M. D.; Kargacin, B.; Klein, C. B.; Costa, M.; *Critical reviews in toxicol.***1993**, 23, 255.
17. Nriagu, J. O.; Nioboer, E.; *Chromium in the natural and human environments*, vol. 20, John Wiley & Sons: New York, **1988**.
18. BRASIL, CONAMA - Conselho Nacional do Meio Ambiente. Resolução nº 430 de 13 de maio de 2011. Dispõe sobre as condições e padrões de lançamento de efluentes, complementa e altera a Resolução n.º 357, de 17 de março de 2005, do Conselho Nacional do Meio Ambiente-CONAMA, Diário Oficial [da] República Federativa do Brasil, Brasília, DF, **2011**.
19. Gonçalves, M. I. S.; Vilar, W. T.; Medeiros, E. P.; Pontes, M. J. C.; *Comput. and Electronics in Agriculture* **2016**, 123, 89.
20. Vilar, W. T.; Aranha, R. M.; Medeiros, E. P.; Pontes, M. J.; *J. Braz. Chem. Soc.* **2015**, 26, 102.
21. Sunoj, S.; Subhashree, S.; Dharani, S.; Franco, C., J.; Mallinger, R.; Prasiřka, J.; Archer, D.; *Comput. and Electronics in Agriculture* **2018**, 151, 403.
22. Miranda, J. R.; Alves, M. C.; Pozza, E. A.; Neto, H. S.; *Int. J. of Applied Earth Observation and Geoinformation* **2020**, 85, 101983.
23. Oliveira, L. F.; Canevari, N. T.; Jesus, A.; Pereira Filho, E. R.; *Ver. Virtual de Quím.* **2013**, 5, 169.
24. Rossel, R. V.; Fouad, Y.; Walter, C.; *Biosyst. Eng.* **2008**, 100, 149.
25. Morais, P. A. O.; Souza, D. M.; Carvalho, M.T.M.; Madari, B. E.; Oliveira, A. E.; *Microchem. J.* **2019**.
26. Galvão, R. K. H.; Araújo, M. C. U.; Silva, E. C.; José, G. E.; Soares, S. F. C.; Paiva, H. M.; *J. Braz. Chem. Soc.* **2007**, 18, 1585.
27. Galvão, A. R. Calibração multivariada empregando o algoritmo das projeções sucessivas com reamostragem e combinação de modelos, Dissertação de Mestrado, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, **2010**.
28. Wold, S.; Sjoström, M.; Eriksson, L.; *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2001**, 58, 109.
29. Sukens, J. A.; Vandewalle, J.; *Neural Process. Lett.* **1999**, 9, 293.
30. Galvão, R. K. H.; Araújo, M. C. U.; José, G. E.; Pontes, M. J. C.; Silva, E. C.; Saldanha, T. C. B.; *Talanta*, **2005**, 67, 736.
31. Igne, B.; Hurburgh, C. R.; *J. Chemom.* **2010**, 24, 75.
32. Fearn, T.; *NIR News* **2002**, 13, 12.
33. Williams, P.; Norris, K.; *Near-infrared technology in the agricultural and food industries*, American Association of Cereal Chemists: Minnesota, **1987**.
34. Suykens, J. A.; Gestel, T. V.; Brabanter, J.; Moor, B. D.; Vandewalle, J.; *Least squares support vector machines*, World Scientific: Singapore, **2002**.
35. Araújo, M. C. U.; Saldanha, T. C. B.; Galvão, R. K. H.; Yoneyama, T.; Chame, H. C.; Visani, V.; *Chemom. Intell. Lab. Syst.* **2001**, 57, 65.
36. Saeys, W.; Mouazen, A. M.; Ramon, H.; *Biosyst. Eng.* **2005**, 91, 393.

Pedro A. de O. Morais¹, Diego M. de Souza², Beata E. Madari² & Anselmo E. de Oliveira^{1*}

¹ Laboratório de Química Teórica e Computacional, Instituto de Química, UFG, Goiânia, GO, Brasil 74690-900;

² Embrapa Arroz e Feijão, Santo Antônio de Goiás, GO, Brasil 75375-000.

*E-mail: elcana@ufg.br