

Previsão de BRIX em caldo de sorgo sacarino utilizando NIR, PLS e seleção de variáveis por OPS

Camila Assis^{1*}(PG), Cristiane C. Guimarães^{1,2*}(PG), Maria Lúcia F. Simeone²(PQ), Marcelo M. Sena¹(PQ). camilassis@gmail.com

¹Departamento de Química, ICEX, UFMG, Av. Antônio Carlos 6627, 31270-901, Belo Horizonte/MG, Brasil.

²Embrapa Milho e Sorgo, MG 424, km 45, Caixa postal 285, 35701-970, Sete Lagoas/MG, Brasil.

Palavras Chave: sorgo, etanol, NIR, seleção das variáveis ordenadas.

Introdução

As últimas décadas têm sido marcadas por um aumento acentuado do interesse mundial pelo desenvolvimento dos biocombustíveis, devido à maior preocupação com problemas ambientais. Nesse sentido, o sorgo sacarino (planta de origem africana muito utilizada na alimentação animal) tem-se destacado, com um grande potencial para produção de etanol nos períodos de entressafra da cana-de-açúcar¹. Para a utilização do sorgo, a estimativa do Brix (sólidos solúveis) de seu caldo é essencial para tomadas de decisão em relação ao melhoramento genético.

O objetivo deste trabalho é a construção de um modelo para previsão do Brix em caldo de sorgo sacarino usando NIR e PLS, uma vez que esta análise é rápida, limpa, confiável e de baixo custo. O algoritmo OPS² foi utilizado como técnica de seleção de variáveis.

Resultados e Discussão

Para realização do trabalho, 539 amostras de caldo foram obtidas de diferentes genótipos de sorgo sacarino, pertencentes ao Centro Nacional de Pesquisas de Milho e Sorgo da Embrapa. As amostras foram submetidas à prensa hidráulica para extração do caldo. Para obtenção dos espectros, as amostras foram filtradas e transferidas para placas de Petri. A determinação do Brix foi realizada adicionando-se cerca de 0,5 mL de amostra na superfície do prisma do refratômetro digital.

Os parâmetros estatísticos obtidos para os modelos (espectro completo e OPS) são mostrados na Tabela 1. Nota-se que o modelo PLS-OPS apresentou melhor capacidade preditiva em relação ao completo. Para o conjunto de previsão foram selecionadas 161 amostras. A média dos erros relativos de previsão foi igual a 3,12%. A Figura 1 mostra que o modelo está apto a realizar previsões do Brix a partir do caldo. Os resultados sugerem que o método padrão pode ser substituído pelo método indireto, usando espectroscopia NIR e quimiometria.

Tabela 1. Parâmetros para os modelos completo e utilizando OPS.

	Completo	OPS
Vetor		Reg.
hOPS		13
hMod.	6	6
nVars	1501	80
RPD	7,2	10,0
RMSECV	0,50	0,38
RMSEC	0,48	0,37
RMSEP	0,51	0,48
Rp	0,98	0,98

Vetor Reg: vetor de regressão usado no algoritmo OPS; h: número de VLs para o OPS (hOPS) e para o modelo (hMod); nVars: número de variáveis usadas; RPD: razão de desempenho do desvio; RMSE: Raiz do erro quadrático médio para a validação cruzada (CV) e para a previsão (P); R: coeficiente de correlação para a validação cruzada (CV) e a previsão (P).

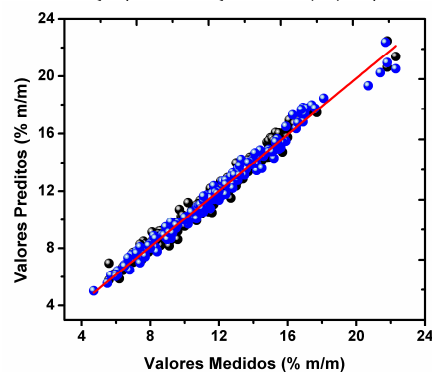


Figura 1. Valores medidos vs Valores preditos (Bolas pretas - calibração, azuis - previsão).

Conclusões

A análise dos parâmetros estatísticos indica diminuição no número de variáveis, nos erros de validação cruzada e de previsão, para o modelo OPS. Dessa forma, o método PLS-OPS proporciona a construção de modelos mais simples, interpretáveis e preditivos.

Agradecimentos

A R.F. Teófilo (UFV) pela rotina OPS, e a CAPES.

¹ Guimarães, C.C.; Simeone, M.L.F.; Parrella, R.F.A.; Sena, M.M. *Microchem. J.* **2014**, 117, 194.

² Teófilo, R.F.; Martins, J.P.A.; Ferreira, M.M.C. *J. Chemometr.* **2008**, 23, 32.