

# **Desenvolvimento de um modelo de regressão multivariado para determinação do teor de matéria seca em braquiária empregando espectroscopia no infravermelho próximo (NIR)<sup>1</sup>**

**Rafaela Chaves de Oliveira Lopes<sup>2</sup>, Maria Lúcia Ferreira Simeone<sup>3</sup>, Miguel Marques Gontijo Neto<sup>3</sup>, Cristiane de Carvalho Guimarães<sup>4</sup>, Priscila Cordeiro Gomes<sup>5</sup>, Everaldo Paulo de Medeiros<sup>6</sup>**

<sup>1</sup> Trabalho financiado pela Fapemig

<sup>2</sup> Estudante do Curso Técnico em Química da Escola Técnica Municipal de Sete Lagoas – Bolsista BIC-JR do Convênio Fapemig - Embrapa

<sup>3</sup> Pesquisador da Embrapa Milho e Sorgo

<sup>4</sup> Técnico da Embrapa Milho e Sorgo

<sup>5</sup> Analista da Embrapa Milho e Sorgo

<sup>6</sup> Pesquisador da Embrapa Algodão

## **Introdução**

Na região tropical, as pastagens constituem-se na mais abundante e econômica fonte de nutrientes para os bovinos, em virtude da habilidade destes em ingerir e digerir alimentos fibrosos. Todavia, a vantagem de perenidade da maioria das pastagens tropicais traz consigo um desafio: a persistência a longo do prazo com manutenção de um valor nutritivo adequado para garantir o bom desempenho das gerações sucessivas de animais que as pastejem.

A análise química do alimento é fundamental quando o objetivo é a avaliação da sua qualidade, pois a partir de informações sobre os teores de nutrientes é possível viabilizar dietas balanceadas. A determinação da matéria seca é importante, porque os resultados da composição química são corrigidos e fornecidos com base na matéria seca (NOGUEIRA; SOUZA, 2005)

Uma das técnicas analíticas que possibilita a realização de análises químicas com precisão, rapidez, baixo custo e pouca manipulação de amostras é a espectroscopia no infravermelho próximo – NIRS (Near Infrared Spectroscopy) (SHENK; WESTERHAUS, 1994).

A reflectância no infravermelho próximo é um método espectroscópico, rápido, que surgiu como alternativa aos métodos analíticos tradicionais (PIONEER, 1995).

O objetivo do trabalho é o desenvolvimento de um modelo multivariado empregando a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) para a determinação do teor de matéria seca em amostras de braquiárias.

## **Material e Métodos**

As amostras foram coletadas no ano de 2012 em ensaios localizados em diferentes Unidades da Embrapa. As amostras utilizadas neste trabalho foram selecionadas a partir de diversas cultivares de braquiárias (*Brachiaria brizantha* cvs. Marandú, Xaraés e Piatã; *B. ruziziensis* e *B. decumbens*).

Assim, foram selecionadas 147 amostras de capins do gênero Braquiária buscando-se maior representatividade das amostras para a realização das análises do teor de matéria seca. As amostras de braquiária constituídas por lâminas foliares foram coletadas a 20 cm do solo e secas a 65 °C até peso constante. Em seguida, foram trituradas em moinho de facas tipo Willey, utilizando a peneira de 2 mm.

As amostras foram então analisadas pelo método de referência descrito por Nogueira e Souza (2005), que consiste na determinação do teor de matéria seca a 105 °C.

Os espectros das amostras foram obtidos em espectrômetro marca Buchi, modelo NIRFlex 500 (Buchi Labortechnik, Flawil, Switzerland), equipado com detector de InGaAs, utilizando como porta-amostra uma placa de Petri de vidro borossilicato. O equipamento foi calibrado utilizando o padrão Spectralon®. Os espectros das amostras de braquiária foram obtidos em triplicata, na região 4.000 a 10.000  $\text{cm}^{-1}$  (1000 a 2500 nm), com resolução de 4  $\text{cm}^{-1}$  e 32 varreduras por espectro.

Para a construção do modelo, os espectros coletados foram associados aos valores das metodologias de referência. Nesse processo utilizou-se o software NIRCal® versão 5.2 (Buchi Labortechnik, Flawil, Switzerland). Como pré-tratamento, os espectros foram centrados na média e convertidos em primeira derivada.

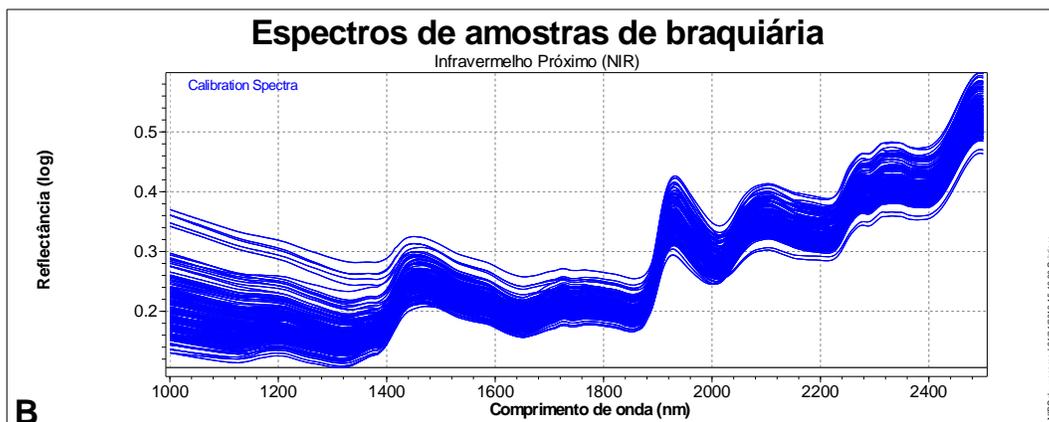
As amostras foram divididas em dois conjuntos (calibração e validação), sendo que a validação consistiu na utilização do modelo de calibração para a previsão da propriedade analisada.

O teor de matéria seca obtido pelo método de referência foi utilizado para desenvolver o modelo de regressão otimizado. Nesse processo, utilizou-se o software NIRCal® versão 5.2, (Buchi Labortechnik, Flawil, Switzerland). Como pré-tratamento dos espectros, eles foram convertidos em logaritmo ( $\log_{10} = 1/R$ , sendo R a intensidade obtida para cada comprimento de onda), centrados na média e convertidos em primeira derivada. Em seguida aplicou-se o modelo de calibração multivariada por mínimos quadrados parciais (PLS). Após a detecção e retirada de amostras anômalas (*outliers*), os modelos foram avaliados quanto à faixa de concentração, coeficientes de determinação ( $R^2$ ) e desvios padrão da calibração e da validação.

## **Resultados e Discussão**

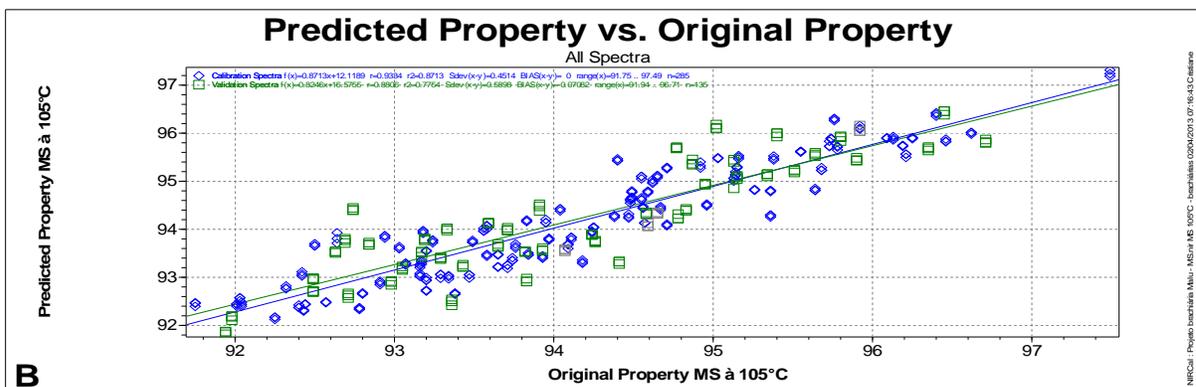
Os resultados obtidos para o teor de matéria seca a 105 °C variaram entre 91,75 e 97,49%, com valores médios de 94,18% cujos valores representaram a faixa de amostragem para o desenvolvimento do modelo de calibração multivariada. Os espectros das amostras de braquiária estão representados na Figura 1.

FIGURA 1–Espectros das amostras de braquiária.



As amostras foram divididas em dois conjuntos: 95 para calibração e 45 para validação. Sete amostras foram consideradas como *outliers*, após a avaliação do gráfico de resíduos, sendo que estas amostras foram retiradas do processo de construção do modelo (Figura 2) Obteve-se uma boa correlação entre os valores previstos pelo modelo e os valores do método de referência para os teores de MS a 105 °C, tanto para as amostras do conjunto de calibração como para as do conjunto de validação. Essa correlação é dada pelos valores de  $R^2$  próximos a 0,90 (Tabela 1).

FIGURA 2– Gráfico de calibração e validação para análise de matéria seca a 105 °C em amostras de braquiária.



Houve ainda uma boa distribuição das amostras nos conjuntos de calibração e validação, sendo que o conjunto de validação está igualmente distribuído em toda a faixa na qual o modelo foi calibrado.

A Figura 1 mostra o modelo de calibração obtido para MS. Em azul, estão as amostras de calibração e em verde, as de validação.

**TABELA 1 – Parâmetros de qualidade do modelo de calibração e validação para matéria seca em amostras de braquiária.**

<b>Parâmetro estatístico</b>	<b>Resultados matéria seca à 105 °C</b>
Desvio padrão Calibração	1,25%
R <sup>2</sup> Calibração	0,87
Desvio padrão Validação	1,24%
R <sup>2</sup> Validação	0,78

Os coeficientes de determinação (R<sup>2</sup>) obtidos para o parâmetro MS indicam que o modelo possui alta correlação entre os dados preditos e de referência, com valores de desvio padrão para os conjuntos de amostras de calibração e validação muito próximos.

Esses dados são comparáveis aos de outros trabalhos de pesquisa utilizando a técnica de espectroscopia no infravermelho próximo para a realização da análise do teor de matéria seca em braquiária, os quais também obtiveram R<sup>2</sup> próximos a 0,90. (SHENK; WESTERHAUS, 1994; Del SANTO, et al., 2010).

### **Conclusão**

Foram obtidos coeficientes de determinação de aproximadamente R<sup>2</sup> 0,90, tanto para o modelo multivariado de calibração como de validação, para o parâmetro MS a 105 °C.

É importante ressaltar que estes modelos são preliminares, mas poderão trazer grandes melhorias para a realização da análise de MS a 105 °C, como a redução do tempo de análise e a economia de recursos (energia elétrica). Entretanto, a utilização destes modelos na previsão de amostras de rotina está condicionada às melhorias pelas quais eles devem ser submetidos no intuito de aumentar a robustez da previsão.

### **Agradecimentos**

Agradecemos à FAPEMIG e Embrapa pelo apoio.

### **Referências**

Del SANTO, V.; SOUZA, G. B.; NOGUEIRA, A. R. A.; PICCHI, C. M. C.; GARCIA, C. H. Determinação das propriedades das forrageiras por meio de espectroscopia de

infravermelho próximo (NIRS). In: ENCONTRO NACIONAL SOBRE MÉTODOS DOS LABORATÓRIOS DA EMBRAPA, 2010, Pelotas, RS. **Novas perspectivas para os laboratórios da Embrapa**. Pelotas: Embrapa Clima Temperado, 2010.

NOGUEIRA, A. R. A.; SOUZA, G. B. **Manual de laboratório**: solo, água, nutrição vegetal, nutrição animal e alimentos. São Carlos: Embrapa Pecuária Sudeste, 2005. 334 p.

PIONEER. **Pioneer forage manual**: a nutritional guide. Iowa: Pioneer Hi-Bred International, 1995. 54 p.

SHENK, J. S.; WESTERHAUS, M. O. The application of Near Infrared Reflectance Spectroscopy (NIRS) to forage analysis. In: FAHEY JR., G. C. **Forage quality evaluation and utilization**. Madison: American Society of Agronomy, 1994. p. 406-449.

VAN SOEST, P. J. **Nutritional ecology of the ruminant**. Corvallis: O & B Books, 1982.