



UNIVERSIDADE  
ESTADUAL DE LONDRINA

---

MARIELLEN CRISTINE ANDRADE RIBEIRO

**PREDIÇÃO DA QUALIDADE NUTRICIONAL DA  
PASTAGEM FRESCA E SECA DE *Brachiaria brizantha* CV.  
PIATÃ PELA ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO  
PRÓXIMO**

MARIELLEN CRISTINE ANDRADE RIBEIRO

**PREDIÇÃO DA QUALIDADE NUTRICIONAL DA  
PASTAGEM FRESCA E SECA DE *Brachiaria brizantha* CV.  
PIATÃ PELA ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO  
PRÓXIMO**

Dissertação apresentada ao Programa de Ciência Animal da Universidade Estadual de Londrina, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre.

Orientadora: Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Odimári Pricila Prado Calixto

Co-orientadora: Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Ivone Yurika Mizubuti

Londrina  
2019

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UEL

Ribeiro, Mariellen Cristine Andrade.

PREDIÇÃO DA QUALIDADE NUTRICIONAL DA PASTAGEM FRESCA E SECA DE *Brachiaria brizantha* CV. PIATÃ PELA ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO PRÓXIMO / Mariellen Cristine Andrade Ribeiro. - Londrina, 2019.  
58 f. : il.

Orientador: Odimári Pricila Prado Calixto.

Coorientador: Ivone Yurika Mizubuti.

Dissertação (Mestrado em Ciência Animal) - Universidade Estadual de Londrina, Centro de Ciências Agrárias, , 2019.

Inclui bibliografia.

1. Composição nutricional - Tese. 2. Curvas de predição - Tese. 3. Estimativas bromatológicas *Brachiaria brizantha* cv. Piatã - Tese. 4. NIRS - Tese. I. Prado Calixto, Odimári Pricila . II. Yurika Mizubuti, Ivone. III. Universidade Estadual de Londrina. Centro de Ciências Agrárias. . IV. Título.

MARIELLEN CRISTINE ANDRADE RIBEIRO

**PREDIÇÃO DA QUALIDADE NUTRICIONAL DA  
PASTAGEM FRESCA E SECA DE *Brachiaria brizantha* CV.  
PIATÃ PELA ESPECTROSCOPIA DE INFRAVERMELHO  
PRÓXIMO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência Animal da Universidade Estadual de Londrina como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Orientadora: Prof<sup>a</sup> Dr<sup>a</sup> Odímári Pricila Prado Calixto  
Universidade Estadual de Londrina – UEL

---

Prof. Dr. Pedro Rodolfo Siqueira Vendrame  
Universidade Estadual de Londrina – UEL

---

Prof. Dr. Osmar Rodrigues Brito  
Universidade Estadual de Londrina – UEL

Londrina, 4 de fevereiro de 2019.

### ***Dedicatória***

*Dedico este trabalho aos meus pais, que não mediram esforços e sempre me apoiaram durante minha trajetória até aqui.*

## **AGRADECIMENTOS**

*Agradeço em primeiro lugar à Deus, que iluminou o meu caminho, para que eu conseguisse chegar até aqui.*

*Ao meu pai José Carlos Ribeiro e à minha mãe Eloisa Aparecida Andrade Ribeiro, por todo amor, carinho, dedicação e apoio incondicional.*

*À minha família, que mesmo longe, com muito carinho, sempre me incentivaram a seguir em frente.*

*Aos meus amigos que estiveram comigo por esses anos, Camila Rogel, Guilherme Agostinis, Luiza Hoffmann, Nínive Corletto e especialmente minha companheira de trabalho Larissa Nóbrega de Carvalho por compartilhar todos momentos, sendo eles, alegres ou tristes.*

*À Geisi Guerra, pelo grande apoio na realização deste trabalho, sempre disposta a ajudar.*

*À minha orientadora Prof<sup>a</sup> Odimári Pricila Prado Calixto e co-orientadora Prof<sup>a</sup> Ivone Yurika Mizubuti, quero expressar o meu reconhecimento e admiração pela competência profissional de cada uma e minha gratidão pelos ensinamentos e por me orientarem.*

*Aos professores Pedro Rodolfo Siqueira Vendrame e Osmar Rodrigues Brito, obrigada pela atenção e pelo aceite para participarem como banca de avaliação.*

*À CAPES pela concessão da bolsa de estudos.*

RIBEIRO, Mariellen Cristine Andrade. **Predição da qualidade nutricional da pastagem fresca e seca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã pela espectroscopia de infravermelho próximo.** 2019. 58 f. Dissertação (Mestrado em Ciência Animal) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2019.

## RESUMO

Objetivou-se gerar curvas de calibração para estimar a composição química de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã fresca e seca por meio de espectrômetro de infravermelho próximo (NIRS). Foram coletadas 84 amostras de forragem de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, em uma propriedade na cidade de Santa Fé – Paraná. Foram realizadas análises químicas para determinação da amostra seca ao ar (ASA), amostra seca em estufa (ASE), matéria seca total (MST), proteína bruta (PB), fibra em detergente neutro (FDN), fibra em detergente ácido (FDA), lignina e celulose. E foram estimados os teores de nutrientes digestíveis totais (NDT). Para a coleta dos espectros, utilizou-se o espectrômetro VIS-NIR marca Foss NIRSystems XDS (Silver Spring, MD, USA) com reflectância entre 400 a 2500 nm e resolução a cada 2 nm. A faixa espectral utilizada foi de 1100 ao 2500 nm. Os espectros foram coletados a partir de amostras da forragem fresca e seca e, por meio do banco de dados formado foram utilizadas diferentes porcentagens entre dados de amostras frescas e secas para geração dos modelos de predição (100% frescas; 100% secas; 25% frescas:75% secas; 50% frescas: 50% secas e 75% frescas: 25% secas). Foi realizada a análise de Componentes Principais (PCA) nos dados espectrais, e para calibração, a regressão pelos Mínimos Quadrados Parciais modificada (mPLS). Para normalizar e eliminar tendências não-lineares dos espectros, tratamentos matemáticos foram aplicados aos espectros brutos. O modelo gerado com 100% de amostras frescas apresentou bons resultados de coeficiente de determinação da calibração ( $R^2c$ ) e de taxa de desvio de performance da calibração (RPDc) para as variáveis: ASA ( $R^2c:0,83$ ); PB ( $R^2c:0,85$ ); FDN ( $R^2c:0,78$ ); FDA ( $R^2c:0,84$ ); lignina ( $R^2c:0,83$ ); NDT ( $R^2c:0,78$ ) / ASA (RPDc:2,54); PB (RPDc:3,02); FDN (RPDc:2,59); FDA (RPDc:2,80); lignina (RPDc:2,56); NDT (RPDc: 2,58). Embora o modelo contendo 100% de forragem fresca tenha apresentado bons resultados para grande parte das variáveis na calibração, não foi satisfatório na validação. No modelo com 100% secas foram encontrados melhores valores para coeficiente de determinação da calibração ( $R^2c$ ) e taxa de desvio de performance da calibração (RPDc) para as variáveis: ASE ( $R^2c:0,87$ ); PB ( $R^2c:0,92$ ); FDN ( $R^2c:0,90$ ); FDA ( $R^2c:0,81$ ); lignina ( $R^2c:0,86$ ); NDT ( $R^2c: 0,90$ ) / ASE (RPDc:2,98); PB (RPDc:4,21), FDN (RPDc:3,31); FDA (RPDc:2,33);lignina (RPDc:2,83); NDT (RPDc:3,33), na validação todas as variáveis para coeficiente de determinação da validação ( $R^2v$ ): ASA ( $R^2v:0,75$ ); ASE ( $R^2v:0,85$ ); MST ( $R^2v:0,75$ ); PB ( $R^2v:0,94$ ); FDN ( $R^2v:0,92$ ); FDA ( $R^2v:0,85$ ); lignina ( $R^2v:0,85$ ); celulose ( $R^2v:0,77$ ); NDT ( $R^2v: 0,90$ ) e para taxa de desvio de performance da validação (RPDv) somente: ASE (RPDv: 2,60); PB (RPDv:3,98); FDN (RPDv:3,49); FDA (RPDv:2,56); lignina (RPDv:2,59) e NDT (RPDv:3,12). O modelo desenvolvido com amostras 100% secas foi superior àqueles desenvolvidos com amostras 100% frescas e diferentes porcentagens destas (25% frescas: 75% secas; 50 % frescas: 50% secas;75% frescas: 25% secas). Apesar do banco de dados contendo 100% de amostras frescas ter apresentado bons parâmetros de calibração, considerando os critérios e padrões adotados neste estudo, não foi possível validar um modelo adequado para prever as características e componentes da forragem fresca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, utilizando a espectroscopia do infravermelho próximo. Entretanto, o modelo pode ter aplicação prática para atender a demanda imediata de pequenos e médios produtores, que desejam apenas avaliar a qualidade da forragem produzida. O modelo utilizando 100% secas foi adequado para predição das variáveis avaliadas, exceto para ASA, MST e celulose.

**Palavras-chave:** composição nutricional; curvas de predição; estimativas bromatológicas; forragem. NIRS.

RIBEIRO, Mariellen Cristine Andrade. **Prediction of the nutritional quality of fresh and dry pasture of *Brachiaria brizantha* cv. Piatã by near infrared spectroscopy.** 2019. 58 p. Dissertation (Master's Degree in Animal Science) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2019.

## ABSTRACT

The objective of the study was to generate calibration curves to estimate the chemical composition of *Brachiaria brizantha* cv. Piatã by means of near infrared spectrometer (NIRS). Forage samples of 84 *brachiaria brizantha* cv. Piatã, on a farm in the city of Santa Fé - Paraná, with beef cattle exploitation and under continuous grazing. Chemical analyzes were performed to determine the dry air sample (DAS), dry matter in the greenhouse (DMG), total dry matter (TDM), crude protein (CP), neutral detergent fiber (NDF), acid detergent fiber), lignin, cellulose and total digestible nutrients (NDT). Spectroscopy was used to collect the spectrometer VIS-NIR, brand Foss NIRSystems XDS (Silver Spring, MD, USA), with a reflectance between 400 to 2500 nm and resolution every 2 nm. The spectral range used was from 1100 to 2500 nm. The spectra were collected from samples of fresh and dry forage and by means of the database formed were used different percentages between data of fresh and dry samples for generation of prediction models (100% fresh; 100% dry; 25% fresh: 75% dry; 50% fresh: 50% dry and 75% fresh:25% dry). We performed the Principal Component Analysis (PCA) in the spectra, and for calibration, the regression by the Modified Partial Least Squares (mPLS). In order to normalize and eliminate nonlinear trends of the spectra, mathematical treatments were applied to the raw spectra. The model generated with fresh samples (100% fresh) presented better calibration coefficient ( $R^2c$ ) and calibration performance deviation (RPDc) with values for ASA ( $R^2c:0.83$ ); PB ( $R^2c:0.85$ ); FDN ( $R^2c:0.78$ ); FDA ( $R^2c:0.84$ ); lignin ( $R^2c:0.83$ ); NDT ( $R^2c:0.78$ ) / ASA (RPDc:2.54); PB (RPDc:3.02); FDN (RPDc:2.59); FDA (RPDc:2.80); lignin (RPDc:2.56); NDT (RPDc:2.58) Although the model containing 100% fresh forage presented good results for most of the variables in the calibration, it was not satisfactory in the validation. In the 100% dry model, better values were found for the coefficient of determination of the calibration ( $R^2c$ ) and the rate of deviation of the performance of the calibration (RPDc) for the variables: ASE ( $R^2c:0.87$ ); PB ( $R^2c:0.92$ ); FDN ( $R^2c:0.90$ ); FDA ( $R^2c:0.81$ ); lignin ( $R^2c:0.86$ ); NDT ( $R^2c:0.90$ ) / ASE (RPDc:2.98); PB (RPDc: 4.21), FDN (RPDc:3.31); FDA (RPDc:2.33); lignin (RPDc:2.83); NDT (RPDc: 3.33) in the calibration, and validation of all variables for the coefficient of determination of the validation  $R^2v$ : ASA ( $R^2v: 0.75$ ); ASE ( $R^2v:0.85$ ); MST ( $R^2v: 0.75$ ); PB ( $R^2v: 0.94$ ); FDN ( $R^2v: 0.92$ ); FDA ( $R^2:0.85$ ); lignin ( $R^2:0.85$ ); cellulose ( $R^2:0.77$ ); NDT ( $R^2v: 0.90$ ) and for performance deviation rate of the RPDv-only ASE validation (RPDv:2.60); PB (RPDv:3.98); FDN (RPDv:3.49); FDA (RPDv: 2.56); lignin (RPDv:2.59) and NDT (RPDv:3.12). The model developed with 100% dry samples was superior to those developed with 100% fresh samples and different percentages (25% fresh: 75% dry; 50% fresh: 50% dry;75% fresh:25% dry). Although the database containing 100% fresh samples presented good calibration parameters, considering the criteria and standards adopted in this study, it was not possible to validate an adequate model to predict the characteristics and components of fresh forage of *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, using near infrared spectroscopy. However, the model may have practical application to meet the immediate demand of small and medium producers, who only wish to evaluate the quality of the fodder produced. The model using 100% dried was adequate for prediction of the evaluated variables, except for ASA, MST and cellulose.

**Key words:** bromatological estimates; forage; NIRS; nutritional composition; prediction curves.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

- Figura 1** – Análise de componentes principais de amostras frescas das estruturas de planta inteira, lâmina foliar e colmo+bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã ..... 43
- Figura 2** – Análise de componentes principais de amostras secas das estruturas de planta inteira, lâmina foliar e colmo + bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã ..... 44
- Figura 3** – Espectros brutos médios de amostras frescas e secas de planta inteira, lâmina foliar, colmo + bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã ..... 45
- Figura 4** – Espectros médios tratados das amostras frescas e secas de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã. .... 46
- Figura 5** – Validação dos modelos desenvolvidos a partir das amostras de forragem fresca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã. .... 53
- Figura 6** – Validação dos modelos desenvolvidos a partir das amostras de forragem seca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã. .... 55

## LISTA DE TABELAS

- Tabela 1** – Valores médios e desvios-padrão de planta inteira, lâmina foliar e colmo + bainha, obtidos pelas análises químico- bromatológicas convencionais..... 42
- Tabela 2** – Modelos de predição gerados a partir de diferentes porcentagens de amostras frescas e secas de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã ..... 48
- Tabela 3** – Comparação entre valores de referência e valores preditos por espectroscopia de infravermelho próximo para amostras 100% frescas de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã..... 52

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<b>ACP</b>	Análise de Componentes Principais
<b>ASA</b>	Amostra Seca ao Ar
<b>ASE</b>	Amostra Seca em Estufa
<b>CP</b>	Componente Principal
<b>D</b>	Detrend
<b>FDA</b>	Fibra Insolúvel em Detergente Ácido
<b>FDN</b>	Fibra Insolúvel em Detergente Neutro
<b>mPLS</b>	Regressão Modificada dos Mínimos Quadrados Parciais
<b>MST</b>	Matéria Seca Total
<b>NDT</b>	Nutrientes Digestíveis Totais
<b>NIRS</b>	Espectroscopia de Infravermelho Próximo
<b>PB</b>	Proteína Bruta
<b>PLS</b>	Regressão por Mínimos Quadrados Parciais
<b>R<sup>2</sup></b>	Coefficiente de Determinação
<b>R<sup>2</sup>c</b>	Coefficiente de Determinação da Calibração
<b>R<sup>2</sup>v</b>	Coefficiente de Determinação de Validação
<b>RPD</b>	Taxa de Desvio de Performance
<b>RPDc</b>	Taxa de Desvio de Performance da Calibração
<b>RPDv</b>	Taxa de Desvio de Performance da Validação
<b>SEC</b>	Erro Padrão da Calibração
<b>SEP</b>	Erro Padrão da Predição
<b>SNVD</b>	Transformação Normal de Variação com Remoção de Tendência
<b>SNV</b>	Transformação Normal de Variação

## SUMÁRIO

<b>1.</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> .....	13
<b>2.</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	15
2.1	A PECUÁRIA BRASILEIRA .....	15
2.1.1	Uso De Gramíneas Na Pecuária Brasileira.....	15
2.1.2	<i>Brachiaria brizantha</i> cv. Piatã .....	17
2.2	ANÁLISES QUÍMICAS DE FORRAGENS .....	18
2.3	ESPECTROSCOPIA DE REFLECTÂNCIA DE INFRAVERMELHO PRÓXIMO (NIRS) .....	19
2.3.1	Equipamento.....	19
2.3.2	Técnica .....	20
2.3.3	Uso de Forragem Fresca no NIRS.....	21
2.4	QUIMIOMETRIA .....	22
2.4.1	Pré-Tratamentos Espectrais .....	23
2.4.2	Análise de Componentes Principais .....	24
2.4.3	Regressão por Mínimos Quadrados Parciais.....	25
2.4.4	Calibração e Validação de Modelos Preditivos.....	25
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	27
<b>3.</b>	<b>OBJETIVOS</b> .....	34
3.1	OBJETIVO GERAL .....	34
3.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	34
<b>4.</b>	<b>ARTIGO</b> .....	35

## 1. INTRODUÇÃO

A vasta extensão territorial e a diversidade de clima e de solo garantem ao Brasil uma posição privilegiada em relação aos outros países do mundo. Uma das suas principais atividades econômicas é a pecuária, onde, predominantemente a fonte de alimento mais utilizada para os ruminantes são as pastagens tropicais, devido às suas condições favoráveis para o cultivo. Esses fatores contribuem para que o país tenha um papel relevante no âmbito internacional, sendo um dos maiores exportadores de carne bovina do mundo (DIAS FILHO, 2014).

De acordo com o Governo do Brasil (2018), atualmente o país detém cerca de 217 milhões de cabeças de gado. Entretanto, na maioria das propriedades rurais, os índices zootécnicos dos rebanhos ainda deixam a desejar, por falta de manejo adequado das pastagens.

Com a alta produção de carne à pasto no Brasil, o sistema solo-planta-animal passa a ser mais exigido. As pastagens, são muitas vezes implantadas inadequadamente e exploradas de forma extrativista, o que acelera a degradação, e conseqüentemente resultam em baixa produtividade e baixa qualidade das forragens oferecidas aos animais (ZIMMER et al., 2012).

Dentre as forrageiras tropicais mais utilizadas no Brasil, e no estado do Paraná, em particular, destacam-se as do gênero das *Brachiaria*. As plantas do gênero *Brachiaria* são gramíneas perenes originárias da África tropical, apresentam ótima adaptação, e vêm sendo utilizadas em todo território nacional; incluem as cultivares mais importantes para a produção de carne bovina no país e apresentam excelente adaptabilidade à solos ácidos e às mudanças de temperatura (RIBEIRO JUNIOR et al., 2015).

Um dos cultivares mais utilizados da *Brachiaria brizantha* é o Piatã, que foi lançado pela Embrapa e parceiros em 2006, e desenvolvido a partir de uma coleção de materiais coletados pelo Centro Internacional de Agricultura Tropical (CIAT), entre os anos de 1984 e 1985, em vários países do Leste da África. Apesar das boas características nutricionais e da adaptabilidade, a qualidade dessa forrageira depende muito dos fatores ambientais e da fertilidade do solo, o que exige avaliações constantes do valor nutricional da forragem produzida (ALMEIDA et al., 2009; MONRROY et al, 2017).

Em vista disso, a melhoria da qualidade das pastagens brasileiras deve ser sempre priorizada. Os sistemas devem ser produtivos e eficientes, o que requer investimentos em novas tecnologias e processos de produção ambientalmente viáveis.

Sabendo-se que a qualidade da forragem se relaciona diretamente com a eficiência produtiva dos animais, o conhecimento prévio do seu conteúdo de nutrientes permite formular adequadamente as dietas.

As avaliações químicas da forragem auxiliam nas tomadas de decisões, que visam intensificar a produção pecuária e atingir níveis produtivos satisfatórios e rentáveis. Como os métodos tradicionais de avaliação dos teores de nutrientes de alimentos envolvem processos físico-químicos que são caros e demorados, há uma procura por novos métodos de avaliação, como a espectroscopia de reflectância no infravermelho próximo (NIRS). Este método além de ser rápido e preciso, possibilita análise múltipla dos constituintes dos alimentos, não destrói as amostras e não gera resíduos que possam poluir o meio ambiente (FONTANELI et al, 2004; FREITAS et al., 2016).

O uso da forragem fresca para predição do seu valor nutricional no NIRS é uma possibilidade muito interessante, pois dispensaria o pré-processamento da amostra gerando resultados em tempo real. Para que isso ocorra, há a necessidade de geração de curvas de calibração, principalmente para *Brachiaria brizantha*, uma das forrageiras mais utilizadas no país.

Dentro deste contexto, o trabalho foi desenvolvido visando gerar e validar modelos preditivos para estimar a composição química da *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, por meio da espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS) a partir de amostras de forragem fresca e seca para a criação de diferentes modelos, para auxiliar na formulação de dietas e ajustes das taxas de lotação para animais ruminantes.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

### 2.1. A IMPORTÂNCIA DA PECUÁRIA BRASILEIRA

A bovinocultura brasileira vem atingindo um papel de destaque no cenário do agronegócio nacional e internacional desde o final da década de 1990. O país dispõe de um extenso território agriculturável, o clima é tropical e apresenta abundante quantidade de fontes de água, fatores indispensáveis a criação de animais à pasto. Assim, torna-se possível obter menores custos de produção comparados com outros países (BRAGA et al., 2015).

O Brasil abriga hoje o maior rebanho bovino comercial do mundo segundo a Associação Brasileira das Indústrias Exportadoras de Carne (2018). Em 2017 o país tinha aproximadamente 221,8 milhões de cabeças, o que correspondia a 13,6% do total mundial, com representatividade do estado do Paraná de 9,7 milhões de cabeças, correspondente a 4,36% do rebanho nacional. A bovinocultura de corte está distribuída em todo o estado, porém com maior concentração nas regiões Norte e Noroeste (SEAB, 2008).

Em quase uma década, o montante de recursos financeiros gerado pela cadeia produtiva da pecuária de corte aumentou em mais de 80%. E em 2017, o PIB da pecuária cresceu 0,69% equivalendo a R\$ 433 bilhões, que correspondeu a 31% do PIB do agronegócio brasileiro. As exportações de carne bovina, representaram 3,2% de tudo o que o Brasil exportou, sendo fundamentais para a manutenção de um saldo comercial positivo (ABIEC, 2018).

As exportações brasileiras de carne bovina *in natura* cresceram tanto em volume (31,1%) como em faturamento (20,5%) em comparação com o 1º trimestre de 2017. O abate de 323,46 mil cabeças de bovinos a mais no 1º trimestre de 2018, em relação ao mesmo período do ano anterior, foi impulsionado por aumentos em vários estados, entre eles o Paraná que abateu 48,64 mil cabeças a mais (IBGE, 2018).

Apesar dos avanços observados nos últimos anos no cenário mundial, quando os índices do sistema de produção da pecuária brasileira são comparados com os dos demais países produtores de carne bovina, notoriamente percebe-se que o país tem muito a desenvolver (CARVALHO, 2018).

### 2.1.1. USO DE GRAMÍNEAS NA PECUÁRIA BRASILEIRA

O aumento de produtividade da pecuária brasileira nos últimos anos, pode também ser relacionada ao fato de que áreas naturais de pastagens foram substituídas por pastagens cultivadas de melhor qualidade nutricional. A produção de ruminantes atualmente, está baseada no uso de gramíneas tropicais, que apresentam alta produção forrageira no verão e baixa no inverno. Nas regiões Nortes e Noroestes do Paraná, assim como em boa parte do Brasil, as espécies mais utilizadas são gramíneas do gênero *Brachiaria* (DIAS FILHO, 2016; GOBBI et al., 2018).

No cenário da pecuária brasileira o sistema de exploração mais utilizado é o extensivo. Cerca de 95% da produção de carne no país é produzida sob pastagens, e somente 5% é sob confinamento. Deste modo, a atividade caracteriza-se pela predominância de uso de pastagens. Esse tipo de produção de carne apresenta um dos menores custos do mundo, estimado em 60% e 50% dos custos da Austrália e Estados Unidos, respectivamente, onde a produção de carne é feita sob sistema de confinamento (NOGUEIRA, 2013; SOARES, 2015).

Sendo assim, as gramíneas desempenham papel fundamental na pecuária do país, e o seu uso permite a competitividade do Brasil no mercado internacional, devido ao um menor custo de produção. Além, de evitar a competição por insumos utilizados na alimentação humana, evita-se também riscos associados ao uso de proteína animal na alimentação de ruminantes, garantido qualidade e segurança alimentar da carne bovina brasileira (VENTURIERI, 2014; ARAÚJO et al., 2017).

De acordo com o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (2017), aproximadamente 160 milhões de hectares do território brasileiro são ocupados por pastagens (naturais e plantadas), sendo que cerca de 12 milhões de hectares, são de pastagens degradadas. No estado do Paraná, próximo à 4 milhões de hectares são cobertos com pastagem, sendo aproximadamente 3,2 milhões de hectares plantadas em boas condições e somente 82 mil ha apresentam algum grau de degradação.

Embora os sistemas de produção à pasto, sejam ambientalmente e economicamente benéficos, a baixa produção das pastagens no Brasil devido manejos inadequados, ainda é uma realidade (MONTAGNER & EUCLIDES, 2016).

O clima tropical do Brasil, influencia na produção de pastagens, onde há alterações qualitativas e quantitativas das plantas nas diferentes estações do ano. Isso resulta em oscilações no peso dos animais entre os períodos das águas e da seca (SILVA et al., 2017).

O processo de degradação de pastagens também é um agravante, onde o manejo incorreto leva à gradativa diminuição da capacidade de suporte das pastagens (NOGUEIRA, 2013).

### 2.1.2. *Brachiaria brizantha* cv. Piatã

O gênero *Brachiaria* é originário da África Tropical e África do Sul, onde os solos apresentam bons níveis de fertilidade, é formado por cerca de 100 espécies e foi descrito primeiramente por Trinius em 1834, que o classificou como uma subdivisão de *Panicum* e, mais tarde em 1853, Grisebach o elevou à categoria de gênero. No Brasil, há presença de 16 espécies do gênero, entre exóticas e nativas. As principais espécies de importância econômica são: *B. arrecta* (*B. radicans*); *B. brizantha*; *B. decumbens*; *B. dictyoneura*; *B. humidicola*; *B. mutica* e *B. ruziziensis* (VALLE; JANK; RESENDE, 2009; MACHADO et al., 2010).

As gramíneas forrageiras do gênero *Brachiaria* alcançaram grande importância econômica no país nos últimos 30 anos, viabilizando a atividade pecuária nos solos intemperizados e ácidos, criando novos polos de desenvolvimento, além de elevarem a produção por animal por área, em comparação às forrageiras nativas e naturalizadas utilizadas até a década de 1980 (MACHADO et al., 2010). Têm sido consideradas adaptadas para as épocas mais secas do ano no Brasil, por apresentar boa produtividade de forragem, baixo acúmulo de colmos e boa retenção de folhas verdes (SILVA et al., 2009).

A *Brachiaria brizantha* ‘BRS Piatã’ foi lançada em 2006 e é resultado de uma seleção de 16 anos conduzida pela Embrapa, utilizando materiais coletados na década de 1980, na África. O nome Piatã é de origem tupi-guarani e significa fortaleza. O cultivar recebeu esse nome devido às características de robustez e produtividade. É o primeiro cultivar de *Brachiaria* brasileira, protegida no Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento (MAPA). É adaptado a solos de média e boa fertilidade e resistente às cigarrinhas de pastagens. Apresenta comportamento e produtividade que se assemelham aos cultivares Xaraés e Marandu, porém, com características diferenciadas em diversos aspectos, o que o torna uma importante alternativa para a diversificação de pastagens. Sua produção total média de forragem é de 9,5 t/ha de matéria seca ao ano com 57% de folhas, sendo que 36% dessa produção se dá durante o período seco do ano, favorecendo o desempenho animal nesse período (ALMEIDA et al, 2009; EMBRAPA, 2014).

## 2.2. ANÁLISES QUÍMICAS DE FORRAGENS

Conhecer a composição química da forragem é imprescindível para a escolha de estratégias de manejo e formulação de dietas para os animais, o que ajudará alcançar maior eficiência alimentar e econômica.

A caracterização do conteúdo de nutrientes de forrageiras é baseada, principalmente em análises laboratoriais. Um dos métodos mais utilizados foi desenvolvido em 1864 por Henneberg na Estação Experimental de Weende, na Alemanha. Onde as análises estimam os componentes presentes na forragem como: matéria seca (MS), matéria mineral (MM), proteína bruta (PB), extrato etéreo (EE), fibra bruta (FB) e extrativos não nitrogenados (ENN). Neste método, os carboidratos são separados em duas frações: carboidratos mais digestíveis que se encontram no ENN e menos digestíveis que estão na FB, porém, nestas análises, as frações do alimento não são compostos quimicamente definidos e sim grupos de compostos químicos (ARAÚJO; DEMINICIS; OLIVEIRA, 2008; SALMAN et al., 2010).

A determinação da matéria seca (MS) é o princípio da análise dos alimentos. Os valores em tabelas nutricionais, cálculos alimentares e consumo animal são frequentemente expressos em MS. Sua concentração é determinada por pré-secagem e secagem definitiva da amostra da forragem. A pré-secagem é feita em uma estufa de circulação forçada a 65°C durante 72h, e a secagem em estufa a 105°C durante 24 horas, o material seco é levado à incineração em mufla a 600° C por 4 horas, para a determinação da matéria mineral (MM). A MM contém os macro e micro minerais

A proteína bruta (PB) indica o conteúdo de compostos nitrogenados proteicos (proteínas e aminoácidos) e não proteicos (uréia, ácido úrico, aminas, amidas, lecitinas, nitrilas e aminoácidos livres). A determinação da PB consiste na digestão ácida, destilação e titulação da amostra. É determinada por meio do teor de nitrogênio (N) e corrigida pelo método de Kjeldahl (A.O.A.C, 1970), que é realizado considerando que 100 g de proteína contém 16 g de N. Assim, determina-se a o nitrogênio total contido na matéria seca da amostra, cujo o valor é multiplicado por 6,25.

O extrato etéreo (EE) consiste em substâncias de natureza lipídica, que são extraídas pelo uso de solventes orgânicos como o éter. A extração dura de 4-6 horas no extrator “Soxhlet”; o resíduo resultante é pesado e o extrato etéreo é determinado pela diferença de peso inicial e final da análise.

A fibra bruta (FB) é determinada por meio de fervura da amostra em álcalis e ácidos fracos, seus resíduos são retidos em cadinhos filtrantes e queimados em mufla 600° C,

calcula-se a diferença de peso inicial e final para sua determinação. O extrato não nitrogenado (ENN), é calculado pela equação:  $100 - [(\%) \text{ PB} + (\%) \text{ EE} + (\%) \text{ FB} + (\%) \text{ MM} + (\%) \text{ água}]$  (GENRO & ORQIS, 2008; MIZUBUTI et al., 2009).

Em vista disso, a metodologia de Weende, não consegue identificar as diversas frações dos carboidratos, com características de solubilidade e suas degradações, e, não promove o fracionamento da fibra. Para elucidar melhor essa divisão, em 1960 na Cornell University, o pesquisador Van Soest propôs um método mais adequado para análise das frações fibrosas, que utiliza detergentes neutros e ácidos no tratamento da fibra, buscando determinar de forma mais apurada esta fração. Permitindo identificar os constituintes vegetais em conteúdo celular e parede celular, obtendo-se a fibra solúvel em detergente neutro (FDN), fibra em solúvel em detergente ácido (FDA), hemicelulose, celulose e lignina (ARAÚJO; DEMINICIS; OLIVEIRA, 2008; SALMAN et al., 2010).

A fibra solúvel em detergente neutro (FDN) é determinada a partir da digestão da amostra por 1 hora em uma solução de detergente neutro, onde o conteúdo celular+ pectina são solubilizados. Assim, prossegue-se a digestão em solução de detergente ácido por mais 1 hora, onde a hemicelulose é solubilizada, restando somente a celulose e lignina. O resíduo é digerido em uma solução de ácido sulfúrico (72%) ou por permanganato de potássio, que solubiliza a celulose. O conteúdo restante é levado à mufla 600°C, onde a lignina é perdida por incineração, restando as cinzas (GENRO & ORQIS, 2008; MIZUBUTI et al., 2009).

Mesmo com a consolidação desses métodos químicos, a adoção de novas tecnologias para estimar a composição dos alimentos se faz necessária, pois nos métodos tradicionais as análises são demoradas e utilizam-se muitos equipamentos e reagentes de alto custo, que quando descartados ainda podem poluir o ambiente.

A técnica da espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS - Near Infrared Spectroscopy) se torna uma alternativa aos métodos químicos, já que as análises no NIRS não utilizam reagentes químicos, normalmente não há necessidade de demoradas preparações das amostras e por isso a análise é mais simples, o tempo de leitura e obtenção do espectro dura entre 15 a 90 s, e permite que vários constituintes do alimento sejam avaliados simultaneamente (OSBORNE, 2006).

## 2.3. ESPECTROSCOPIA DE REFLECTÂNCIA DE INFRAVERMELHO PRÓXIMO (NIRS)

### 2.3.1. Equipamento

O "Near Infrared Spectroscopy" (NIRS), é um equipamento de alta precisão,

que por meio da emissão de radiação eletromagnética pode realizar análises alimentos, mensurando compostos orgânicos e alguns inorgânicos (SALMAN et al., 2010).

É composto por: uma fonte de luz; um seletor de comprimento de onda; um recipiente para amostra; um detector de fótons para conversão da energia radiante em sinal elétrico e um leitor do sinal (medidor). A cubeta transparente para acomodação da amostra é feita de quartzo ou sílica fundida; a fonte de luz (uma lâmpada de halogéneo de tungstênio); os componentes ópticos, como detector (sulfeto de chumbo (PbS) é usado na faixa 1100-2500nm e arseneto de índio-gálio (InGaAs) acima de 800-1700nm até 2500nm), fibras ópticas e lentes, também feitas de quartzo; monocromador, que tem a função de selecionar e transmitir uma faixa específica de comprimentos de ondas de luz, e colimadores usados para direcionar e suavizar feixes de radiação (NICOLAÏ et al., 2007).

Resumidamente, o aparelho emite a luz infravermelha, que é fracionada pelo monocromador, dirigindo o comprimento de onda selecionado para a cubeta que contém a amostra. Parte da luz é absorvida e parte é transmitida, a intensidade luminosa é medida pelo detector, gerando uma leitura, resultando no espectro NIR da amostra, para cada comprimento de onda.

A câmara de leitura ótica é acoplada a um *software* matemático e as leituras obtidas são comparadas e ao banco de dados, que por meio de curvas calibradas que permitem a qualificação e quantificação da composição dos alimentos (CAMPESTRINI, 2005).

### 2.3.2. Técnica

As regiões de infravermelho existentes situam-se entre a região visível e as micro-ondas e são: infravermelho próximo (NIR: 700–2500 nm), infravermelho médio (MIR: 2500-5000 nm) e infravermelho distante (FIR: 5000-100.000 nm). O infravermelho próximo (NIR) corresponde a região do infravermelho “mais próxima” da região visível (LIMA; BAKKER, 2011).

O método NIRS, consiste basicamente em utilizar o espectrômetro, que analisa as amostras por meio da emissão de radiação eletromagnética. A radiação incidida na amostra é um feixe de luz infravermelho (IV), de comprimento de onda que varia de 700–2500 nm (SALMAN et al., 2010).

Os alimentos são constituídos por compostos orgânicos, que absorvem energia eletromagnética na região do infravermelho. Cada molécula dos compostos por sua vez responde de forma particular à luz incidente, podendo sofrer estiramentos ou deformações angulares, simétricas ou assimétricas nas suas ligações químicas. As ondas eletromagnéticas

causam efeitos particulares nas moléculas, e de acordo com o comportamento de cada uma delas, podem apresentar diferentes condições de absorção, refração, reflexão e espalhamento da energia incidente. A quantidade de radiação refletida, comparada a quantidade de radiação incidente sobre a amostra fornece a medida de reflectância, a qual é captada pelos sensores para a construção da curva espectral (SANTOS, SANTOS, KORNDÖRFER, 2012).

O espectro adquirido é caracterizado por sobretons e combinações das vibrações moleculares das ligações de O-H, C-H, N-H, C=O, C-N, N=O e C=C contida nos compostos dos alimentos. O espectro isoladamente não especifica a composição do alimento, quanto as concentrações de água, proteína, gordura e carboidratos. Como não existe um modelo matemático para descrever a distribuição heterogênea de substâncias químicas, se faz necessário a criação de um banco de dados espectrais de grande variedade de amostras, para posteriormente compará-lo com valores provenientes de análises químicas convencionais, permitindo identificar e quantificar diferentes constituintes da amostra analisada (OSBORNE, 2006; SALMAN, et al., 2010). Deste modo, para calibrar o equipamento e gerar modelos de validação, usa-se um vasto número de amostras, pois é preciso ter uma grande variabilidade e representatividade das variáveis que se pretende avaliar nas amostras analisadas via NIRS.

Portanto, a técnica da espectroscopia do infravermelho próximo é um método secundário, que requer calibração usando amostras de composição química conhecidas e determinadas por métodos químicos convencionais, a fim de comparar com os espectros obtidos. Isso se consegue com o emprego de procedimentos quimiométricos (OSBORNE, 2006).

### 2.3.3. Uso de Forragem Fresca no NIRS

O método da espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS), foi desenvolvido primeiramente para a predição de teor de umidade, óleo e proteína de grãos e sementes de oleaginosas. O emprego desta técnica vem crescendo desde a década de 1970 e nos últimos anos tem sido amplamente utilizada na análise de forragem, em razão do grande progresso dos procedimentos quimiométricos utilizados para a calibração dos equipamentos (WILLIAMS, 1975; NORRIS et al. 1976; DE JONG, 1990).

Entretanto, curvas de calibração para forragens tropicais ainda são escassas no Brasil. Considerando que o país é um grande produtor de carne sob pastagens, é necessário o desenvolvimento de curvas de calibração para as diferentes forrageiras tropicais existentes, principalmente aquelas do gênero *Brachiaria*, que são as mais utilizadas no país.

Cereais e forragens são geralmente secos e moídos para serem analisados pela espectroscopia NIRS. Uma das vantagens potenciais da utilização do método em plantas é a análise de materiais vegetais frescos sem a necessidade de secagem ou moagem. A avaliação do material fresco pode reduzir o tempo de preparação da amostra para análise. No entanto, o material úmido pode influenciar os modelos de calibração desenvolvidos, pois a água tem uma ampla faixa de absorção, o que pode mascarar outras características associadas a constituintes como: nitrogênio; lignina; açúcares e celulose. Pouca atenção tem sido dada ao uso da espectroscopia NIRS para determinar parâmetros de qualidade em forrageiras frescas e não moídas (MORÓN et al., 2007; COZZOLINO, 2014; LUGASSI et al., 2015).

Com os avanços tecnológicos dos últimos anos, permitiu-se o desenvolvimento de dispositivos portáteis com base na espectrometria de infravermelho próximo. Sendo assim, a possibilidade de calibração do NIRS para a predição da qualidade nutricional das forragens frescas, também tornaria viável a análise diretamente no campo em tempo real, diminuindo cada vez mais o tempo de análise de amostras de forragem (SALGADO et al., 2012).

#### 2.4. QUIMIOMETRIA

A quimiometria é a ciência resultante da união entre química e a estatística. Os dados espectrais obtidos pela espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS), consistem em muitas variáveis, assim, é necessário realizar uma análise multivariada do conjunto para melhorar a compreensão da informação de interesse, e diminuir as informações indesejáveis dos espectros. Desse modo, as análises relacionam os espectros obtidos com os dados determinados pelo método químico convencional, por meio da aplicação de métodos matemáticos e/ou estatísticos e computacionais, facilitando a interpretação dos dados adquiridos e melhorando a precisão e robustez dos modelos de calibração e validação (ALANDER et al., 2013; PEREIRA et al., 2014; LOHUMI et al., 2015).

Os principais passos para interpretação dos dados obtidos pela espectrometria são: (i) pré-processamento de dados para reduzir e corrigir interferência, como variação de comprimento de onda, dispersão, desvio de linha de base e bandas sobrepostas, (ii) seleção de boas variáveis a partir de uma grande quantidade de dados espectrais, para desenvolver um modelo eficiente e robusto, e (iii) validação do modelo e interpretação dos resultados (LOHUMI et al., 2015).

Após a coleta, os espectros necessitam ser organizados, quando há um grande número de amostras, podem ser distribuídos em grupos, para que as ferramentas de regressão multivariada possam ser aplicadas e validadas. Os dados podem ser separados por exemplo através do algoritmo Kennard-Stone, que utiliza 2/3 como grupo de calibração e 1/3 como grupo de validação (SOUSA et al., 2011; MAZUR et al., 2014).

Os métodos multivariados mais utilizados para a construção de modelos são a análise de componentes principais (PCA) e métodos de regressão, como por exemplo: a regressão por mínimos quadrados parciais (mPLS). A escolha do método adequado irá depender do tipo de variação presente nos dados espectrais.

Desta forma, com a combinação da espectroscopia NIR e a análise multivariada, os espectros são pré-tratados antes de serem usados para fins qualitativos ou quantitativos. Esses pré-tratamentos são empregados a fim de excluir informações não desejadas, como correções para granulometria, linha de base e ruído, e devem ser aplicados com o devido cuidado, uma vez que informações espectrais importantes sobre o parâmetro de interesse podem ser removidas (PASQUINI, 2003; BURNS e CIURCZAK, 2008; RAMBO & FERREIRA, 2018).

#### 2.4.1. Pré-Tratamentos Espectrais

Normalmente, para a construção de modelos é preciso a aplicação de pré-tratamentos matemáticos nos espectros, para remover informações indesejáveis, como influências de natureza física da amostra e/ou instrumentais que não são pertinentes à composição química das amostras, que podem ser empregados isoladamente ou simultaneamente (SOUZA et al., 2013).

Os pré-tratamentos matemáticos frequentemente utilizados são: filtro de Savistky-Golay, primeira e segunda derivadas, variação padrão normal (SNV), com ou sem remoção de tendência (Detrend).

O filtro de Savistky-Golay, com primeira e segunda derivadas tem como princípio a eliminação de ruído, onde a primeira derivada retira deslocamentos da linha de base (“offsets”), evidenciando pequenas características, e a segunda derivada elimina erros de sobreposições da linha de base. Os métodos derivativos podem piorar a relação sinal/ruído, que é suavizado pelo filtro de Savitzky- Golay (HONORATO et al., 2007).

A transformação padrão normal de variação (SNV - *Standard Normal Variate*) é aplicado quando se tem um conjunto reduzido ou diversificado de espectros, pois

trata cada espectro individualmente. Normaliza o espectro, amenizando problemas de dispersão de luz, muito comum em coletas de espectros que sofrem interferências causadas pelo tamanho das partículas ou de diferenças de densidade da amostra. Pode-se também utilizá-lo juntamente com o Detrend, que elimina tendências não-lineares nos espectros, como deslocamento, inclinação e/ou curvatura (SOUZA; MADARI; GUIMARÃES et al., 2012; RAMBO; FERREIRA 2018).

#### 2.4.2. Análise de Componentes Principais

A análise de componentes principais (ACP) ou Principal Component Analysis (PCA) é uma ferramenta para condensação dos dados, que reduz a dimensionalidade da matriz de dados originais (COSCIONE et al., 2014).

A ACP agrupa os dados de acordo com seu comportamento dentro da população, ou seja, segundo as variações de suas características. Transforma a matriz de dados espectrais, em outro conjunto de variáveis com menor número e de mesma característica, por meio da representação do conjunto de dados em um novo sistema de eixos, denominadas de componentes principais (CP). Exclui os dados redundantes e seleciona os relevantes com máxima variação, preservando o máximo de informações de interesse. É normalmente empregada na identificação de grupos distintos e na escolha de amostras para a construção de modelos de calibração (SOUZA; MADARI; GUIMARÃES et al., 2012; HONGYU et al., 2016).

Portanto, os componentes principais são as novas variáveis geradas por meio de uma modificação matemática realizada sobre os dados originais. Assim, a componente principal 1 (CP1) corresponde a maior porcentagem de explicação dos dados, no gráfico da ACP, e representa a direção que descreve a máxima variabilidade das amostras. No entanto, apenas esta componente principal normalmente não é suficiente para explicar o comportamento completo do conjunto de dados, e a componente principal 2 (CP2) é traçada de modo perpendicular à primeira, descrevendo os dados não explicados pela PC1 (SOUZA; POPPI, 2012).

A redução do espaço dimensional em consequência da seleção de poucos componentes principais, tem como vantagem a eliminação ou minimização de ruídos, e de informações redundantes (TOZZETO et al., 2007).

### 2.4.3. Regressão por Mínimos Quadrados Parciais

A regressão por mínimos quadrados parciais ou Partial Least Square (PLS) é um método estatístico robusto, onde seus parâmetros praticamente não se alteram com a inclusão de novas amostras. É o método mais utilizado para calibração do NIRS, porque considera dados das matrizes  $x$  e  $y$  (SENA; POPPI, 2000).

A PLS correlaciona os valores de referência obtidos pelas análises laboratoriais e os valores preditos determinados pelo NIRS, e explica a máxima variância conjunta nos dados, permitindo diagnosticar de forma fácil a existência de outliers. Após a redução de dimensão dos dados pela PCA, o método PLS cria vetores de informações da matriz  $x$ , referentes aos valores de referência, e  $y$ , aos valores preditos. Gerando vetores não correlacionados, que explicam a variação dos dados de cada matriz, essas novas variáveis chamadas variáveis latentes (VL), seria o equivalente na PCA aos componentes principais (CP) (KOURTI & MACGREGOR, 1995; SOUZA et al., 2013).

Shenk e Westerhaus (1991), propuseram uma modificação da PLS. A regressão modificada dos mínimos quadrados parciais- mPLS, seleciona amostras com base em seus espectros, eliminando amostras com espectros extremos e amostras que foram espectralmente semelhantes. O método trata com mais eficácia as interferências não analíticas. Primeiro, os espectros são transformados por um tratamento matemático derivativo e por componentes principais. Em seguida, a distância de Mahalanobis é aplicada. Se a distância entre dois espectros for menor que a distância mínima pré-determinada, um dos espectros é eliminado. O processo então avalia todas as amostras para identificar quais tem mais espectros semelhantes. Tem o objetivo de padronizar os resultados adquiridos entre o método de referência e os dados de reflectância para cada comprimento de onda. A mPLS normalmente é escolhida por apresentar resultados superiores quando comparada à PLS (SHENK & WESTERHAUS, 1991; MARCHÃO; BECQUER; BRUNET, 2011).

### 2.4.4. Calibração e Validação de Modelos Preditivos

O objetivo da calibração é obter um algoritmo matemático que relacione os dados espectrais gerados com os dados de referência obtidos no laboratório. Sendo assim, depois da criação dos modelos de calibração, a acurácia e precisão destes necessitam ser avaliadas através da validação. A calibração deverá ser muito bem executada, pois o sucesso do

método depende das etapas de construção dos modelos (pré-tratamento corretos) e da capacidade preditiva destes (MARTENS & NAES, 1996).

A capacidade do modelo de prever com precisão as características de amostras é idealmente determinada aplicando o modelo a um conjunto de amostras que não foi usado para desenvolver o modelo de calibração. Sendo assim, para validação, outro conjunto de amostras, que não os da calibração, é utilizado. Tal procedimento constitui em uma validação externa de um conjunto de testes (SOUSA et al., 2011; LEVASSEUR-GARCIA, 2018;).

Portanto, para avaliar a acurácia e precisão dos modelos gerados pela calibração e validação vários parâmetros podem ser utilizados para a escolha do modelo mais adequado à predição dos parâmetros esperados.

Os parâmetros estatísticos utilizados para avaliação dos modelos de predição são: coeficiente de determinação ( $R^2$ ), erro padrão da calibração (SEC), erro padrão da predição (SEP) e a taxa de desvio de performance ou “Ratio of Performance to Deviation” (RPD).

O  $R^2$  indica a correlação entre os espectros gerados pelo NIR e os valores de referência. Quanto mais perto de 1, maior será a linearidade e melhor a acurácia do modelo. O RPD é utilizado para avaliar os modelos desenvolvidos para calibração e validação. Segundo Goldshleger et al. (2013), quando obtiverem valores de RPD entre 2,5 e 3, são considerados bons modelos e excelentes para valores maiores que 3. É calculado através da relação entre o desvio padrão e o erro padrão da calibração (SEC) ou da predição (SEP) (SOUSA et al 2011; ANDERSON et al., 2018).

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALANDER, J. T.; BOCHKO, V.; MARTINKAUPPI, B.; SARANWONG, S.; MANTERE, T. A review of optical non destructive visual and near-infrared methods for food quality and safety. **International Journal of Spectroscopy**, London, v.2013,p.1-35, jan, 2013.

ALMEIDA, R. G. de; COSTA, J. A. A.; KICHEL, A. N.; ZIMMER, A. H. **Taxas e métodos de semeadura para Brachiaria brizantha cv. BRS Piatã em safrinha**. Comunicado Técnico,113, Embrapa, Campo Grande, nov, 2009.

ANDERSON, W. F.; DIEN, B. S.; MASTERSON, S. D.; MITCHEL, R. B. Development of near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) calibrations for traits related to ethanol conversion from genetically variable napier grass (*Pennisetum Purpureum* Schum.). **BioEnergy Research**, Tifton, out, 2018.

ARAÚJO, F. R.; ROSINHA, G. M. S.; BIER, D.; CHIARI, L.; FEIJÓ, G.L.D.; GOMES, R. C. **Segurança do alimento carne**. Embrapa Gado de Corte, Campo Grande, mar, 2017.

ARAÚJO, S.A.C.; DEMINICIS, B.B.; OLIVEIRA, V.C. Sistema CNCPS para avaliação da qualidade de forrageiras tropicais. **Revista Pubvet**, Maringá, v.2, n.10, mar, 2008.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DAS INDÚSTRIAS EXPORTADORAS DE CARNE - ABIEC. **Perfil da pecuária no Brasil. Relatório Anual**. 2018. Disponível em: <<http://abiec.siteoficial.ws/images/upload/sumario-pt-010217.pdf>> Acesso em: 12/11/2018.

ASSOCIATION OF OFFICIAL ANALYTICAL CHEMISTS - A.O.A.C. **Official method of analysis XI Edn. Association of official Analytical chemists**, Washington D. C., 1970.

BRAGA, G. B.; NETO, J.S. F.; FERREIRA, F.; AMAKU, M.; DIAS, R. A. Caracterização dos sistemas de criação de bovinos com atividade reprodutiva na região Centro-Sul do Brasil. **Brazilian Journal of Veterinary Research and Animal Science**, São Paulo, v. 52, n. 3, p. 217-227, jul, 2015.

BURNS, D.A.; CIURCZAK, E.W. **Handbook of near-infrared analysis**. 3.ed., Boca Ranton, 2008. p. 808.

CAMPESTRINI, E. Utilização de equipamento NIRS (Near Infrared Reflectance Spectroscopy) nos estudos de valores nutricionais (composição química e digestibilidade) de alimentos para não ruminantes. **Revista Eletrônica Nutritime**, Viçosa, v.2, n.5, p.240-251, set/out, 2005.

CARVALHO, T. B. **A importância do Brasil na produção mundial de carne bovina.** Cepea- ESALQ-Usp, fev, 2018. Disponível em: < <https://www.cepea.esalq.usp.br/br/opiniaocpepea/a-importancia-do-brasil-na-producao-mundial-de-carne-bovina.aspx>> Acesso em: 12/11/2018.

COSCIONE, A. R.; SILVA, L. F. M.; MARIA, I. C.; ANDRADE, C. A.; FERRACINI, V. L. Solução do solo e análise de componentes principais para monitoramento da aplicação de lodo de esgoto. **Revista Brasileira Ciência do Solo**, Viçosa, v. 38, n. 5, p. 1654-1662, out, 2014.

COZZOLINO, D. Use of infrared spectroscopy for in-field measurement and phenotyping of plant properties: instrumentation, data analysis, and examples. **Applied Spectroscopy Reviews**, Philadelphia, v.49, n.7, p.564–584, mar, 2014.

DE JONG, S. Book review - multivariate calibration, H. Martens and T. Naes, **Journal of Chemometrics**, Netherlands, v.4, p.441, 1990.

DIAS-FILHO, M. B. **Diagnóstico das pastagens no Brasil.** Embrapa Amazônia Oriental, Belém, mai, 2014. 36p.

DIAS-FILHO, M. B. **Uso de pastagens para a produção de bovinos de corte no Brasil: passado, presente e futuro.** Embrapa Amazônia Oriental, Belém, mar, 2016. 42 p.

EMPRESA BRASILEIRA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA- EMBRAPA. **Folder *Brachiaria brizantha* ‘BRS Piatã’.** Embrapa Gado de Corte, Campo Grande, abr, 2014.

FONTANELI, R. S.; SCHEFFER-BASSO, S. M.; DÜRR, J. V.; APPELT, J. V.; BORTOLINI, F.; HAUBERT, F. A. Predição da composição química de bermudas (*Cynodon* spp.) pela espectroscopia de reflectância no infravermelho proximal. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v.33, n.4, p.838-842, ago, 2004.

FREITAS J.C.; SANTOS, S. A.; TOMICH, T. R.; FRANCO, G. L. Predição do valor nutritivo de gramínea nativa e exótica no pantanal por meio do método de reflectância no infravermelho próximo. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, Belo Horizonte, v. 23, n. 2, p. 251-259, jun, 2016.

GENRO, T. C. M; ORQIS, M. G. **Informações básicas sobre coleta de amostras e principais análises químico-bromatológicas de alimentos destinados à produção de ruminantes.** Embrapa Pecuária Sul, Bagé, dez, 2018. 24p.

GOBBI, K. F.; LUGÃO, S. M.; BETT, V.; ABRAHÃO, J. J. S.; TACAIAMA, A. Massa de forragem e características morfológicas de gramíneas do gênero *Brachiaria* na região do Arenito Caiuá/PR. **Boletim de Indústria Animal**, Nova Odessa, v.75, p.1-9, jun, 2018.

GOLDSHLEGER, N.; CHUDNOVSKY, A.; BEN-BINYAM, R. Predicting salinity in tomato using soil reflectance spectra. **International Journal of Remote Sensing**, Basileia, v. 34, p. 6079-6093, 2013.

GOVERNO DO BRASIL. **Exportação de carne bovina cresceu 11% em 2018**. 2018. Disponível em: < <http://www.brasil.gov.br/noticias/economia-e-financas/2018/08/exportacao-de-carne-bovina-cresceu-11-em-2018>> Acesso em: 31/10/2018.

HONGYU, K.; SANDANIELO, V. L. M.; OLIVEIRA JUNIOR, G. J. Análise de Componentes Principais: resumo teórico, aplicação e interpretação. **Engineering and Science**, Cuiabá, v.1, n.5, p.83-90, jun, 2016.

HONORATO, F. A.; BARROS NETO, B.; MARTINS, M. N.; GALVÃO, R. K. H.; PIMENTEL, M. F. Transferência de calibração em métodos multivariados. **Química Nova**, São Paulo, v.30, n.5, p. 1301-1312, jul, 2007.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA- IBGE. **Indicadores IBGE- Estatística da produção pecuária jan-mar. 2018**. jun, 2018. Disponível em: <[ftp://ftp.ibge.gov.br/Producao\\_Pecuaria/Fasciculo\\_Indicadores\\_IBGE/abate-leite-couro-ovos\\_201801caderno.pdf](ftp://ftp.ibge.gov.br/Producao_Pecuaria/Fasciculo_Indicadores_IBGE/abate-leite-couro-ovos_201801caderno.pdf)> Acesso em: 12/11/2018.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA-IBGE. **Censo Agro 2017**. Disponível em: <[https://censoagro2017.ibge.gov.br/templates/censo\\_agro/resultadosagro/estabelecimentos.html](https://censoagro2017.ibge.gov.br/templates/censo_agro/resultadosagro/estabelecimentos.html)> Acesso em: 13/11/2018.

KOURTI, T.; MACGREGOR, J. F. Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods. **Chemometrics and Intelligent Laboratory**, New York, v. 28, n.1, p.3-21, 1995.

LEVASSEUR-GARCIA, C. Updated overview of infrared spectroscopy methods for detecting mycotoxins on cereals (corn, wheat, and barley). **Toxins**, Basel, v.10, n.1, p.38, jan, 2018.

LIMA, A.; BAKKER, J. Espectroscopia no infravermelho próximo para a monitorização da perfusão tecidual. **Revista Brasileira de Terapia Intensiva**, São Paulo, v.23, n.3, p.341-351, ago, 2011.

LOHUMI, S.; LEE, S.; LEE, H.; CHO, B. K. A review of vibrational spectroscopic techniques for the detection of food authenticity and adulteration. **Trends in Food Science & Technology**, Cambridge, v.46, p.85-98, 2015.

- LUGASSI, R.; CHUDNOVSKY, A.; ZAADY, E.; DVASH, L.; GOLDSHLEGER, N. Estimating pasture quality of fresh vegetation based on spectral slope of mixed data of dry and fresh vegetation—method development. **Remote Sensing**, Basileia, v.7, p.8045-8066, jun, 2015.
- MACHADO, L. A. Z.; LEMPP, B.; VALLE, C. B. do; JANK, L.; BATISTA, L. A. R.; POSTIGLIONI, S. R.; RESENDE, R. M. S.; FERNANDES, C. D.; VERZIGNASSI, J. R.; VALENTIM, J. F.; ASSIS, G. M. L. de; ANDRADE, C. M. S. de. Principais espécies forrageiras utilizadas em pastagens para gado de corte. In: PIRES, A. V. (Ed.). **Bovinocultura de corte**. Piracicaba: FEALQ, 2010. p. 375-417.
- MARCHÃO, R. L.; BECQUER, T. BRUNET, D. **Predição dos teores de carbono e nitrogênio do solo utilizando espectroscopia de infravermelho próximo**. Embrapa Cerrados, Planaltina, mar, 2011. 21 p.
- MARTENS, H. e NAES, T. **Multivariate calibration**. New York, Wiley, 1996. 504 p.
- MAZUR, L.; OLIVEIRA, G. A.; BICUDO, M. O. P.; RIBANI, R. H.; NAGATA, N.; ZAMORA, P. P. Multivariate calibration and moisture control in yerba mate by near infrared spectroscopy. **Acta Scientiarum Technology**, Maringá, v. 36, n. 2, p. 369-374, abr-jun, 2014.
- MIZUBUTI, I.Y.; PINTO, A. P.; PEREIRA, E. S.; RAMOS, B.M.O. **Métodos laboratoriais de avaliação de alimentos para animais**. Londrina: EDUEL, 2009. 228 p.
- MONRROY, M.; GUTIÉRREZ, D.; MIRANDA, M; HERNÁNDEZ, K.; GARCÍA, J. R. Determination of Brachiaria spp. forage quality by near-infrared spectroscopy and partial least squares regression. **Journal of the Chilean Chemical Society**, Concepción, v. 62, n. 2, p.3472-3477, 2017.
- MONTAGNER, D. B.; EUCLIDES, V. P. B. **Demandas tecnológicas dos sistemas de produção de bovinos de corte no Brasil – Forrageiras**. Embrapa Gado de Corte, Campo Grande, dez, 2016. 24p.
- MORÓN, A.; GARCÍA, A.; SAWCHIK, J.; COZZOLINO, D. Preliminary study on the use of near-infrared reflectance spectroscopy to assess nitrogen content of undried wheat plants. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, New York, v.87, p.147–152, ago, 2007.
- NICOLAÏ, B. M.; BEULLENS, K.; BOBELYN, E.; PEIRS, A.; SAEYS, W.; HERON, K. I.; LAMMERTYN, J. Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: A review. **Postharvest Biology and Technology**, New York, v. 46, p.99–118, jun, 2007.

NOGUEIRA, S. F. **A pecuária extensiva e o panorama da degradação de pastagens no Brasil**. Embrapa Monitoramento por Satélite. Artigos Especiais, mar, 2013. Disponível em: <<http://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/infoteca/handle/doc/958325>> Acesso em: 12/11/2018.

NORRIS, K. H.; BARNES, R. F.; MOORE J. E.; SHENK, J. S. Predicting forage quality by infrared reflectance spectroscopy, **Journal of Animal Science**, Oxford, v. 43, n.4, p. 889-897, 1976.

OSBORNE, B. G. **Near-infrared Spectroscopy in Food Analysis. Encyclopedia of Analytical Chemistry**. Australia: John Wiley & Sons, L, 2006.

PASQUINI, C. Espectroscopia de infravermelho próximo: fundamentos, aspectos práticos e aplicações analíticas. **Jornal da Sociedade Brasileira de Química**, Campinas, v. 14, n.2, p.198-219, 2003.

PEREIRA, P. C. S.; FREITAS, C. F.; CHAVES, C. S.; ESTEVÃO, B. M., PELLOSI, D. S.; TESSARO, A. L.; BATISTELA, V. R.; SCARMINIO, I. S.; CAETANO, W.; HIOKA, N. A quimiometria nos cursos de graduação em química: proposta do uso da análise multivariada na determinação de pka. **Química Nova**, São Paulo, v.37, n. 8, p.1417-1425, 2014.

RAMBO, M. K. D.; FERREIRA, M. M. C. Análise de resíduos lignocelulósicos por espectroscopia NIR associada a pré-tratamentos multivariados dentro do contexto de química verde. **Revista Virtual de Química**, Niterói, v.10, n.2, p. 421-431, abr, 2018.

RIBEIRO JUNIOR, M. R.; CANAVER, A. B.; RODRIGUES, A. B.; DOMINGUES NETO, F. J.; SPERS, R. C. Desenvolvimento de *Brachiaria brizantha* cv, Marandú submetidas a diferentes tipos de adubação (química e orgânica). **Unimar Ciências**, Marília, v. 24, n.1-2, p. 49-53, 2015.

SALGADO, P.; TILLARD, E.; NABENEZA, S.; BIGOT, C.E.; BARBET-MASSIN, V.; DUTREUIL, F.; BONNEFOIS, M.; DARDENNE, P.; LECOMTE, P.H. Mise au point d'outils de spectrométrie dans le proche infrarouge (SPIR) portables pour évaluer la qualité des fourrages à la ferme. **II Convención Internacional "Agrodesarrollo 2012"**, Varadero, p. 25. 2012.

SALMAN, A. K. D.; FERREIRA, A. C. D.; SOARES, J. P. G.; SOUZA, J. P. **Metodologias para avaliação de alimentos para ruminantes domésticos**. Embrapa Rondônia, Porto Velho, maio, 2010. 21 p.

SANTOS, G. A.; SANTOS, A. P. dos; KORNDÖRFER, G. H. Sistema por infravermelho próximo (NIR) para análises de nitrogênio foliar. **Bioscience Journal**, Uberlândia, v. 28, n. 1, p. 83-90, mar, 2012.

SECRETARIA DE ESTADO DA AGRICULTURA E DO ABASTECIMENTO-SEAB.  
**Análise da conjuntura agropecuária safra 2008/2009 bovinocultura de corte.** out, 2008.  
Disponível em:  
<[http://www.agricultura.pr.gov.br/arquivos/File/deral/Prognosticos/bovino\\_corte\\_0809.pdf](http://www.agricultura.pr.gov.br/arquivos/File/deral/Prognosticos/bovino_corte_0809.pdf)>.  
Acesso em: 12/11/2018.

SENA, M. M.; POPPI, R. J. Avaliação do uso de métodos quimiométricos em análise de solos. **Química Nova**, São Paulo, v. 23, n.4, p.547-556, 2000.

SHENK, J. S., & WESTERHAUS, M. O. (1991). Population definition, sample selection, and calibration procedures for near infrared reflectance spectroscopy. **Crop Science**, Madison, v.31, n.2, p. 469-474, mar, 1991.

SHENK, J. S., & WESTERHAUS, M. O. (1991). Populations structuring of near infrared spectra and modified partial least squares regression. **Crop Science**, Madison, v. 31. n.6, p.1548-1555, nov, 1991.

SILVA, F. F. da; SÁ, J. F. de; SCHIO, A. R.; ÍTAVO, L. C. V.; SILVA, R. R.; MATEUS, R. G. Suplementação a pasto: disponibilidade e qualidade x níveis de suplementação x desempenho. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v.38, p.371-389, 2009.

SILVA, L. G.; SOARES, M. S.; CAIRO, F. C.; CAIRO, F. C.; DUTRA, D. L. Frequência de suplementação a pasto. **Revista Eletrônica Nutritime**, Viçosa, v.14, n.4, p.6030-6040, jul /ago, 2017.

SOARES, C. O.; MEDEIROS, R. S.; COSTA GOMES, R. da; BUNGENSTAB, B. **Nutrição de bovinos de corte: fundamentos e aplicações.** Embrapa, Brasília, 2015. 176p.

SOUSA, L. C.; GOMIDE, J. L.; MILAGRES, F. R.; ALMEIDA, D. P. Desenvolvimento de modelos de calibração NIRS para minimização das análises de madeiras de Eucalyptus spp. **Ciência Florestal**, Santa Maria, v. 21, n. 3, p. 591-599, jul-set, 2011.

SOUZA, A. M.; BREIKREITZ, M. C.; FILGUEIRAS, P. R.; ROHWEDDER, J. J. R.; POPPI, R. J. Experimento didático de quimiometria para calibração multivariada na determinação de paracetamol em comprimidos comerciais utilizando espectroscopia no infravermelho próximo: um tutorial, parte II. **Química Nova**, São Paulo, v.36, n. 7, p. 1057-1065, abr, 2013.

SOUZA, A. M.; POPPI, R. J. Experimento didático de quimiometria para análise exploratória de óleos vegetais comestíveis por espectroscopia no infravermelho médio e análise de componentes principais: um tutorial, parte I. **Química Nova**, São Paulo, v.35, n. 1, p. 223-229, jul, 2012.

SOUZA, D. M.; MADARI, B. E.; GUIMARÃES, F. F. Aplicação de técnicas multivariadas e inteligência artificial na análise de espectros de infravermelho para determinação de matéria orgânica em amostras de solos. **Química Nova**, São Paulo, v. 35, n. 9, p. 1738-1745, ago, 2012.

TOZETTO, A.; DEMIATE, I. M.; NAGATA, N. Análise exploratória de adoçantes de mesa via espectroscopia no infravermelho (FTIR) e análise por componentes principais (ACP). **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, Campinas, v. 27, n.4, p. 723-728, out.-dez, 2007.

VALLE, C. B. do; JANK, L.; RESENDE, R. M. S. O melhoramento de forrageiras tropicais no Brasil. **Revista Ceres**, Viçosa, v. 56, n. 4, p. 460-472, jul/ago, 2009.

VENTURIERI, A.; DIAS-FILHO, M. B. **Diagnóstico das pastagens no Brasil**. Embrapa Amazônia Oriental, Belém, mai, 2014. 36p.

WILLIAMS, P. C. Application of near infrared reflectance spectroscopy to analysis of cereal grains and oilseeds. **Cereal Chemistry**, Saint Paul, v.52, n.4, p.561-576, 1975.

ZIMMER, A. H.; MACEDO, M.C.M.; KICHEL, A. N.; ALMEIDA, R.G. **Degradação, recuperação e renovação de pastagens**. Embrapa Gado de Corte, Campo Grande, nov, 2012. 42p.

### 3. OBJETIVOS

#### 3.1. OBJETIVO GERAL

- Gerar e validar modelos preditivos para estimar a composição química da *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, por meio da espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS) a partir de amostras de forragem fresca e seca para a criação de diferentes modelos, para auxiliar na formulação de dietas e ajustes das taxas de lotação de animais ruminantes.

#### 3.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Gerar, calibrar e validar modelos para avaliar o conteúdo de amostra seca ao ar (ASA), amostra seca em estufa (ASE), matéria seca total (MST), proteína bruta (PB), fibra em detergente neutro (FDN), fibra em detergente ácido (FDA), lignina, celulose e nutrientes digestíveis totais (NDT) a partir de amostras de forragem fresca e seca.

#### **4. ARTIGO**

**Predição da qualidade nutricional da pastagem fresca e seca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã pela espectroscopia de infravermelho próximo**

**Artigo escrito de acordo com as normas da Revista Semina.**

**PREDIÇÃO DA QUALIDADE NUTRICIONAL DA PASTAGEM FRESCA E SECA DE  
BRACHIARIA BRIZANTHA CV. PIATÃ PELA ESPECTROSCOPIA DE  
INFRAVERMELHO PRÓXIMO**

**PREDICTION OF THE NUTRITIONAL QUALITY OF FRESH AND DRY  
AND PASTURE OF BRACHIARIA BRIZANTHA CV. PIATÃ BY NEAR  
INFRARED SPECTROSCOPY**

**Resumo**

Objetivou-se gerar curvas de calibração para estimar a composição química de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã fresca e seca por meio de espectrômetro de infravermelho próximo (NIRS). Foram coletadas 84 amostras de forragem de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, em uma propriedade na cidade de Santa Fé – Paraná. Foram realizadas análises químicas para determinação da amostra seca ao ar (ASA), amostra seca em estufa (ASE), matéria seca total (MST), proteína bruta (PB), fibra em detergente neutro (FDN), fibra em detergente ácido (FDA), lignina e celulose. E foram estimados os teores de nutrientes digestíveis totais (NDT). Para a coleta dos espectros, utilizou-se o espectrômetro VIS-NIR marca Foss NIRSystems XDS (Silver Spring, MD, USA) com reflectância entre 400 a 2500 nm e resolução a cada 2 nm. A faixa espectral utilizada foi de 1100 ao 2500 nm. Os espectros foram coletados a partir de amostras da forragem fresca e seca e por meio do banco de dados formado foram utilizadas diferentes porcentagens entre dados de amostras frescas e secas para geração dos modelos de predição (100% frescas; 100% secas; 25% frescas:75% secas; 50% frescas: 50% secas e 75% frescas: 25% secas). Foi realizada a análise de Componentes Principais (PCA) nos dados espectrais, e para calibração, a regressão pelos Mínimos Quadrados Parciais modificada (mPLS). Para normalizar e eliminar tendências não-lineares dos espectros, tratamentos matemáticos foram aplicados aos espectros brutos. O modelo gerado com 100% de amostras frescas apresentou bons resultados de coeficiente de determinação da calibração ( $R^2c$ ) e de taxa de desvio de performance da calibração (RPDc) para as variáveis: ASA ( $R^2c:0,83$ ); PB ( $R^2c:0,85$ ); FDN ( $R^2c:0,78$ ); FDA ( $R^2c:0,84$ ); lignina ( $R^2c:0,83$ ); NDT ( $R^2c:0,78$ ) /ASA (RPDc:2,54); PB (RPDc:3,02); FDN (RPDc:2,59); FDA (RPDc:2,80); lignina (RPDc:2,56); NDT (RPDc: 2,58). Embora o modelo contendo 100% de forragem fresca tenha apresentado bons resultados para grande parte das variáveis na calibração, não foi satisfatório na validação. No modelo com 100% secas foram encontrados melhores valores para coeficiente de determinação da calibração ( $R^2c$ ) e taxa de desvio de performance da calibração (RPDc) para as variáveis: ASE ( $R^2c:0,87$ ); PB ( $R^2c:0,92$ ); FDN ( $R^2c:0,90$ ); FDA ( $R^2c:0,81$ ); lignina ( $R^2c:0,86$ ); NDT ( $R^2c: 0,90$ )/ASE (RPDc:2,98); PB (RPDc:4,21), FDN (RPDc:3,31); FDA (RPDc:2,33);lignina (RPDc:2,83); NDT (RPDc:3,33), na validação todas as variáveis para coeficiente de determinação da validação ( $R^2v$ ): ASA ( $R^2v:0,75$ ); ASE ( $R^2v:0,85$ ); MST ( $R^2v:0,75$ ); PB ( $R^2v:0,94$ ); FDN ( $R^2v:0,92$ ); FDA ( $R^2v:0,85$ ); lignina ( $R^2v:0,85$ ); celulose ( $R^2v:0,77$ ); NDT ( $R^2v: 0,90$ ) e para taxa de desvio de performance da validação (RPDv) somente: ASE (RPDv: 2,60); PB (RPDv:3,98); FDN (RPDv:3,49); FDA (RPDv:2,56); lignina (RPDv:2,59) e NDT (RPDv:3,12). O modelo desenvolvido com amostras 100% secas foi superior àqueles desenvolvidos com amostras 100% frescas e diferentes porcentagens destas (25% frescas: 75% secas; 50 % frescas: 50% secas;75% frescas: 25% secas). Apesar do banco de dados contendo 100% de amostras frescas ter apresentado bons parâmetros de calibração, considerando os critérios e padrões adotados neste estudo, não foi possível validar um modelo adequado para predizer as características e componentes da forragem fresca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, utilizando a espectroscopia do infravermelho próximo. Entretanto, o modelo pode ter aplicação prática para atender a demanda imediata de pequenos e médios produtores, que desejam apenas avaliar a qualidade da forragem produzida. O modelo utilizando 100% secas foi adequado para predição das variáveis avaliadas, exceto para ASA, MST e celulose.

**Palavras-chave:** Composição nutricional. Curvas de predição. Estimativas bromatológicas. Forragem. NIRS.

### Abstract

The objective of the study was to generate calibration curves to estimate the chemical composition of *Brachiaria brizantha* cv. Piatã by means of near infrared spectrometer (NIRS). Forage samples of 84 *brachiaria brizantha* cv. Piatã, on a farm in the city of Santa Fé - Paraná, with beef cattle exploitation and under continuous grazing. Chemical analyzes were performed to determine the dry air sample (DAS), dry matter in the greenhouse (DMG), total dry matter (TDM), crude protein (CP), neutral detergent fiber (NDF), acid detergent fiber), lignin, cellulose and total digestible nutrients (NDT). Spectroscopy was used to collect the spectrometer VIS-NIR, brand Foss NIRSystems XDS (Silver Spring, MD, USA), with a reflectance between 400 to 2500 nm and resolution every 2 nm. The spectral range used was from 1100 to 2500 nm. The spectra were collected from samples of fresh and dry forage and by means of the database formed were used different percentages between data of fresh and dry samples for generation of prediction models (100% fresh; 100% dry; 25% fresh: 75% dry; 50% fresh: 50% dry and 75% fresh:25% dry). We performed the Principal Component Analysis (PCA) in the spectra, and for calibration, the regression by the Modified Partial Least Squares (mPLS). In order to normalize and eliminate nonlinear trends of the spectra, mathematical treatments were applied to the raw spectra. The model generated with fresh samples (100% fresh) presented better calibration coefficient ( $R^2c$ ) and calibration performance deviation (RPDc) with values for ASA ( $R^2c:0.83$ ); PB ( $R^2c:0.85$ ); FDN ( $R^2c:0.78$ ); FDA ( $R^2c:0.84$ ); lignin ( $R^2c:0.83$ ); NDT ( $R^2c:0.78$ ) / ASA (RPDc:2.54); PB (RPDc:3.02); FDN (RPDc:2.59); FDA (RPDc:2.80); lignin (RPDc:2.56); NDT (RPDc:2.58) Although the model containing 100% fresh forage presented good results for most of the variables in the calibration, it was not satisfactory in the validation. In the 100% dry model, better values were found for the coefficient of determination of the calibration ( $R^2c$ ) and the rate of deviation of the performance of the calibration (RPDc) for the variables: ASE ( $R^2c:0.87$ ); PB ( $R^2c:0.92$ ); FDN ( $R^2c:0.90$ ); FDA ( $R^2c:0.81$ ); lignin ( $R^2c:0.86$ ); NDT ( $R^2c:0.90$ ) / ASE (RPDc:2.98); PB (RPDc: 4.21), FDN (RPDc:3.31); FDA (RPDc:2.33); lignin (RPDc:2.83); NDT (RPDc: 3.33) in the calibration, and validation of all variables for the coefficient of determination of the validation  $R^2v$ : ASA ( $R^2v: 0.75$ ); ASE ( $R^2v:0.85$ ); MST ( $R^2v: 0.75$ ); PB ( $R^2v: 0.94$ ); FDN ( $R^2v: 0.92$ ); FDA ( $R^2v:0.85$ ); lignin ( $R^2v:0.85$ ); cellulose ( $R^2v:0.77$ ); NDT ( $R^2v: 0.90$ ) and for performance deviation rate of the RPDv-only ASE validation (RPDv:2.60); PB (RPDv:3.98); FDN (RPDv:3.49); FDA (RPDv: 2.56); lignin (RPDv:2.59) and NDT (RPDv:3.12). The model developed with 100% dry samples was superior to those developed with 100% fresh samples and different percentages (25% fresh: 75% dry; 50% fresh: 50% dry; 75% fresh:25% dry). Although the database containing 100% fresh samples presented good calibration parameters, considering the criteria and standards adopted in this study, it was not possible to validate an adequate model to predict the characteristics and components of fresh forage of *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, using near infrared spectroscopy. However, the model may have practical application to meet the immediate demand of small and medium producers, who only wish to evaluate the quality of the fodder produced. The model using 100% dried was adequate for prediction of the evaluated variables, except for ASA, MST and cellulose.

**Key words:** Bromatological Estimates. Forage. NIRS. Nutritional composition. Prediction curves.

## Introdução

A forragem é a principal fonte de alimento utilizada na alimentação de ruminantes no Brasil, portanto, sua qualidade está relacionada à eficiência produtiva de animais criados a pasto. A maior parte das pastagens do país são constituídas por forrageiras do gênero *Brachiaria*. Dentre as diversas espécies do gênero, o cultivar Piatã é considerado um dos mais produtivos e apresenta boa aceitação pelos animais (DIAS et al., 2015).

As análises tradicionais para determinar a qualidade da forragem demandam tempo e dispendiosas técnicas de química, restringindo o número de amostras que podem ser processadas em um curto período. Assim, para aperfeiçoar os métodos utilizados convencionalmente, é indispensável o desenvolvimento de metodologias que sejam de execução mais rápidas e de custos menores (REIS et al., 2016; MONRROY et al., 2017).

A espectroscopia de infravermelho próximo (Near Infrared Spectroscopy- NIRS) é um recurso alternativo para análise da qualidade de forragens. Ao longo dos últimos anos, se mostrou como uma técnica analítica confiável, com possibilidade de analisar um grande número de amostras e diferentes compostos, sendo uma solução rápida e não poluente.

O método baseia-se no conceito da absorção da radiação no infravermelho próximo (700- 2500 nm) pela amostra. A luz infravermelha quando incidida na amostra, gera vibrações entre átomos e grupos de átomos de compostos orgânicos que compõe os alimentos (principalmente os que possuem ligações do tipo C-H, N-H e O-H) aumentando a amplitude em torno das ligações covalentes que os ligam. Desta forma, de acordo com o comportamento vibracional das moléculas e das alterações de energia, a luz pode ser absorvida, transmitida ou refletida, gerando espectros, que serão interpretados por técnicas quimiométricas (DEEPA et al., 2016).

Uma das aplicações possíveis da espectroscopia NIRS, se dá na análise de materiais vegetais frescos (frutos, folhas, plantas inteiras), descartando a necessidade de preparação de amostras (como moagem e secagem) e poupando ainda mais tempo nas análises. Geralmente, as forragens absorvem energia na faixa de absorção nos domínios que são associados à água, proteína, lipídeos, lignina, amido, açúcar, nitrogênio e celulose. Porém, em razão da água ter uma ampla faixa de absorção no infravermelho próximo, sua presença pode acarretar dificuldades na identificação de outros compostos (LUGASSI et al., 2015).

Apesar disso, o NIRS vem sendo utilizado com êxito em diversos produtos que contém alto teor de umidade, comprovando a eficácia na determinação de diferentes compostos de amostras com características físico-químicas distintas. Contudo, ainda são necessários mais estudos comparando a influência do uso de amostras de forragens frescas e secas na efetividade da calibração do equipamento, para que o método possa ser usado como rotina (MORÓN et al., 2007; GONÇALVES et al., 2018).

Nos últimos anos, novas tecnologias vêm sendo desenvolvidas visando adequações nos aparelhos e suas funcionalidades para predição da composição nutricional de diversos alimentos. O surgimento do NIRS portátil representa esse avanço, onde o aparelho pode ser utilizado para monitoramento de plantas em tempo real e em larga escala no campo. Desta forma, a possibilidade de gerar curvas de calibração para forragens frescas, viabilizaria também o uso do equipamento portátil, que poderia apresentar resultados imediatos a campo para o produtor rural, reduzindo ainda mais o tempo das análises. Podendo ser aplicado para melhorar variedades de plantas, monitorar a fertilização, e prever a composição das forragens (COZZOLINO, 2014).

Deste modo, objetivou-se com a realização deste estudo, gerar e validar modelos preditivos para estimar a composição química da *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, por meio da espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS) a partir de amostras de forragem fresca e seca para a criação de diferentes modelos, para auxiliar na formulação de dietas e ajustes das taxas de lotação para animais ruminantes.

## Material e Métodos

Foram coletadas 84 amostras de forragem de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã, a partir de pontos georreferenciados em grid, em uma área de 20 ha, de uma propriedade de criação de bovinos de corte, sob pastejo contínuo, na cidade de Santa Fé, noroeste do estado do Paraná (23° 02' 15" S, 51° 48' 19" W). Os solos da propriedade são desenvolvidos do arenito, e identificados como Latossolo Vermelho distrófico, de textura média.

A forragem foi coletada na estação de verão. Utilizou-se uma segadeira, cortando à 5 cm do solo, com o auxílio de um quadrado de área de 0,25 m<sup>2</sup>. As amostras coletadas foram acondicionadas em sacos plásticos previamente identificados, pesadas imediatamente e devidamente congeladas em freezer à -20°C, para subseqüentes análises. Posteriormente as 84 amostras foram separadas em: planta inteira (constituída por lâmina foliar e colmo + bainha); lâmina foliar e; colmo + bainha. Após a separação, os materiais frescos foram cortados (10 cm), acondicionados em sacos de papel e levados em caixa isotérmica ao Laboratório de Apoio à Pesquisa Agropecuária (LAPA), da Universidade Estadual de Londrina para coleta dos espectros.

As análises químicas foram realizadas no Laboratório de Nutrição Animal da Universidade Estadual de Londrina (LANA).

Após a leitura das amostras no espectrômetro NIRS estas foram pré-secas em estufa com circulação de ar forçada mantida à temperatura constante de 60° durante 72 horas, para determinação da amostra seca ao ar (ASA), e em seguida foram moídas, em moinho tipo "Willey" com peneira de 1 mm. Seguidamente a moagem, as amostras foram levadas à estufa 105° por 24 horas, para determinar a amostra seca em estufa (ASE). Os teores de matéria seca total (MST) e proteína bruta (PB) foram determinados por meio da metodologia AOAC (1990). As concentrações de fibra em detergente

neutro (FDN), fibra em detergente ácido (FDA) e lignina (LIG), foram determinadas segundo Detmann et al. (2012). O teor de celulose foi calculado pela diferença entre a FDA e lignina, de acordo com Van Soest et al. (1991), e os teores de nutrientes totais digestíveis (NDT), foram calculados utilizando a equação proposta por Capelle et al. (2001), onde  $NDT = 83,79 - (0,4171 * FDN)$ .

Após as determinações químicas pelos métodos convencionais, foram coletados os espectros das amostras secas e moídas.

Para a coleta dos espectros foi utilizado o espectrômetro VIS-NIR, marca Foss NIRSystems XDS (Silver Spring, MD, USA), compreendendo apenas a faixa entre 400 a 2500 nm e resolução ajustada para 2,0 nm. Os dados de refletância (R) foram transformados para absorvância (A), usando a expressão  $A = \log (1/R)$  e analisados pelo software WinISI III. A faixa espectral utilizada neste estudo foi de 1100 a 2500 nm.

Assim, os espectros se originaram dos conjuntos de amostras de planta inteira (84), lâmina foliar (83) e colmo+ bainha (82) da forragem fresca e seca. Cada amostra fresca e seca foi escaneada em duplicata, sendo o espectro médio utilizado para a construção dos modelos de predição, formando assim um conjunto com 249 espectros de forragem fresca e 249 espectros de forragem seca, totalizando 498 espectros.

A análise de componentes principais (PCA) foi aplicada aos dados espectrais, objetivando diminuir a amplitude e elucidar a variabilidade dos mesmos. O algoritmo de Kennard-Stone (KENNARD e STONE, 1969) foi utilizado para separação das amostras em dois grupos (calibração e validação), de forma a garantir a homogeneidade de distribuição dos dados.

Com o objetivo de avaliar o efeito do uso de diferentes quantidades de amostras frescas e secas no modelo de predição, por meio do banco de dados formado, foram utilizadas diferentes porcentagens entre dados de amostras frescas e secas para geração dos modelos de calibração e validação. Os conjuntos de dados foram testadas com as seguintes composições: (100% frescas= calibração: 50 frescas/ validação: 25 frescas); (100% secas= calibração: 165 secas/ validação: 84 secas); (25% frescas: 75% secas =calibração: 50 frescas/ 150 secas/ validação: 25 frescas/ 75 secas); (50% frescas: 50% secas=calibração: 50 frescas/ 50 secas/ validação: 25 frescas/ 25 secas); (75% frescas: 25% secas=calibração: 50 frescas/15 secas/ validação: 25 frescas/ 10 secas). Na construção do modelo com amostras 100% frescas, foram descartados alguns espectros por não apresentarem características espectrais aceitáveis, utilizando assim 75 amostras apenas.

Para correlacionar os valores de referência obtidos em laboratório pelos métodos convencionais com os dados espectrais obtidos pelo NIRS, utilizou-se a regressão por mínimos quadrados parciais modificada (mPLS). Os outliers foram retirados até 10% pelo operador, no momento da construção dos modelos para cada variável individual.

Visando normalizar e eliminar tendências não-lineares dos espectros, corrigindo a dispersão da luz, ruído e interferências da granulometria, foram testados nos espectros brutos os pré-

tratamentos matemáticos: transformação normal de variação com (SNV), ou sem remoção de tendência (SNVD) e apenas remoção de tendência (D), para 1,4,4,1 e 2,5,5,1, sendo que o primeiro dígito representa o nível a grau da primeira derivada, seguido pelo “gap”, terceiro e quarto dígito representam: primeiro e segundo “smoothing”, e assim selecionado o melhor tratamento para cada variável avaliada.

Os parâmetros utilizados para escolha do melhor modelo de predição foram o erro padrão da calibração (SEC) e predição (SEP), coeficiente de determinação da calibração ( $R^2c$ ) e da validação ( $R^2v$ ) e taxa de desvio de performance da calibração (RPDc) e validação (RPDv), calculados pela razão entre o desvio padrão e o erro padrão da calibração (SEC) ou da validação (SEP).

O desempenho de um modelo é normalmente avaliado levando-se em consideração o valor do coeficiente de determinação ( $R^2$ ) e o valor e taxa de desvio de performance (RPD). De acordo com Malley et al. (1999), o valor de  $R^2$  indica a correlação entre os valores de referência e os preditos, onde as predições baseadas nos valores de  $R^2$  são classificadas como: excelente ( $R^2 > 0,95$ ), e bom ( $0,80 \leq R^2 < 0,70$ ). O RPD permite a comparação de desempenho do modelo em diferentes conjuntos de dados e os valores esperados são excelente: ( $RPD > 3$ ) e bom: ( $3 \leq RPD < 2,5$ ).

## Resultados e Discussão

Os valores médios e desvios-padrão para a *Brachiaria brizanta* cv. Piatã, obtidos por meio das análises químicas convencionais das amostras de planta inteira, lâmina foliar e colmo + bainha estão apresentados na Tabela 1. Para todas as variáveis avaliadas observou-se uma elevada amplitude entre os valores obtidos, isso se deve diretamente às diferenças entre as estruturas morfológicas da forragem. Segundo Alomar et al. (2009), uma ampla distribuição dos dados, e desde que homogênea, obtidos nas análises químico-bromatológicas se torna interessante para a seleção de amostras para a calibração do NIR, onde adquire-se uma melhor representação dos dados preditos.

A composição dos tecidos da planta é diretamente ligada às suas funções. Sabe-se que a lâmina foliar apresenta menores teores de FDN e FDA, e maiores valores para NDT e PB. Pois tecidos de assimilação são constituídos por cloroplastos, células com um grande vacúolo de parede celular tênue, que servem para armazenar substâncias decorrentes do metabolismo celular. A planta inteira por conter porções representativas de lâmina foliar e colmo + bainha, tem valores intermediários em todas as variáveis. O colmo é a estrutura morfológica da forragem de menor valor nutritivo, apresenta menor média de PB e maiores valores de FDN, FDA e lignina, resultando assim em menor NDT. Visto que, tecidos de sustentação contêm células complexas, com paredes celulares mais espessas e lignificadas, e com menor disponibilidade de componentes proteicos (PACIULLO, 2002; CARVALHO & PIRES, 2008).

**Tabela 1-** Valores médios e desvios-padrão de planta inteira, lâmina foliar e colmo + bainha, obtidos pelas análises químico- bromatológicas convencionais.

Amostra	ASA	ASE	MST	PB	FDN	FDA	Lignina	Celulose	NDT
Planta	44,5 a	92,4	41,1 a	6,3 b	68,2 b	33,6 b	1,9 b	31,8 b	55,3 b
Inteira	±11,5	± 1,6	±10,4	±1,3	± 3,4	± 2,7	± 0,4	± 2,6	± 1,4
Lâmina	45,8 a	92,7	42,4 a	7,9 a	64,7 c	28,5 c	0,6 c	27,9 c	56,8 a
Foliar	±12,8	±1,7	±11,8	±1,4	±2,6	±3,3	±0,1	±3,3	±1,1
Colmo+	40,3 b	92,8	37,4 b	4,2 c	72,4 a	37,5 a	3,2 a	34,3 a	53,6 c
bainha	±8,7	±2,0	±8,2	±1,0	±2,1	±3,0	±0,8	±2,8	±0,9
P valor	0.0009	0.2208	0.0013	<.0001	<.0001	<.0001	<.0001	<.0001	<.0001

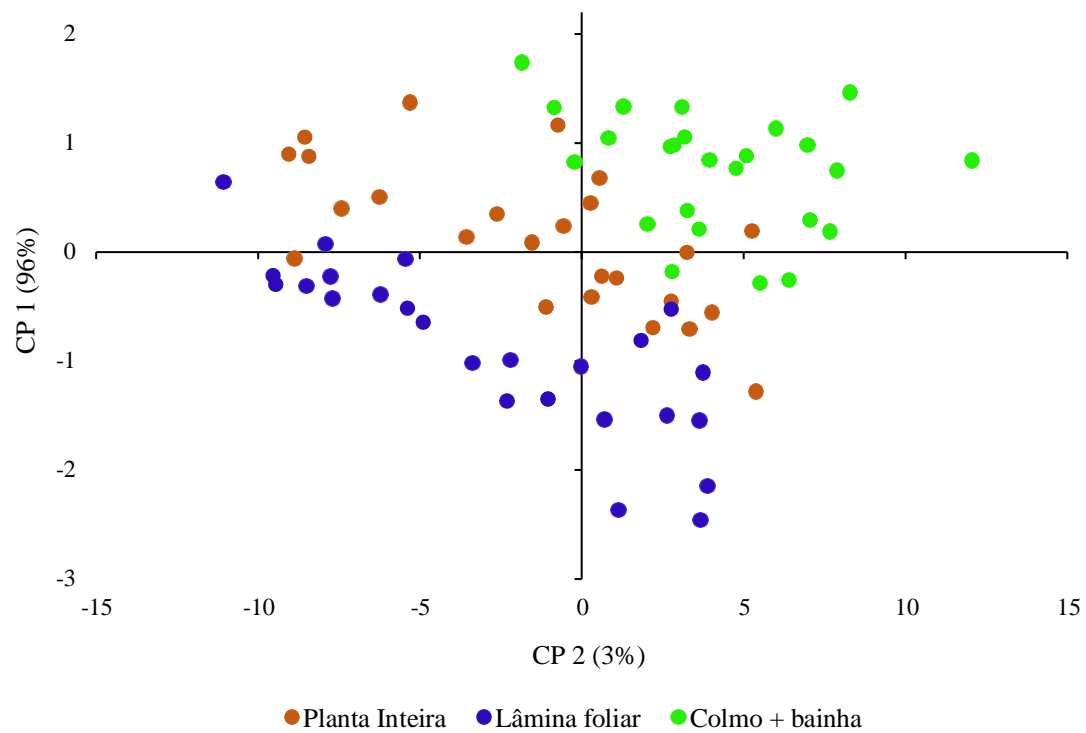
Letras iguais na mesma coluna não diferem pelo teste de Tukey à 5%

ASA: amostra seca ao ar; ASE: amostra seca em estufa; MST: matéria seca total; PB: proteína bruta; FDN: fibra em detergente neutro; FDA: fibra em detergente ácido; celulose: FDA – lignina; NDT: nutrientes digestíveis totais; NDT= 83,79 – (0,4171\* FDN).

Para analisar a variância do conjunto de dados e a existência de eventuais agrupamentos, foi utilizada a Análise de Componentes Principais (ACP) (Figuras 1 e 2). O componente principal 1 (CP1) representou 96% da variabilidade das amostras frescas, e a componente 2 (CP2), 3% (Figura 1). Para as amostras secas, o componente 1 (CP1) explicou 80%, e a componente 2 (CP2), 16% da variabilidade dos dados (Figura 2). Indicando que a CPA foi melhor para amostras frescas.

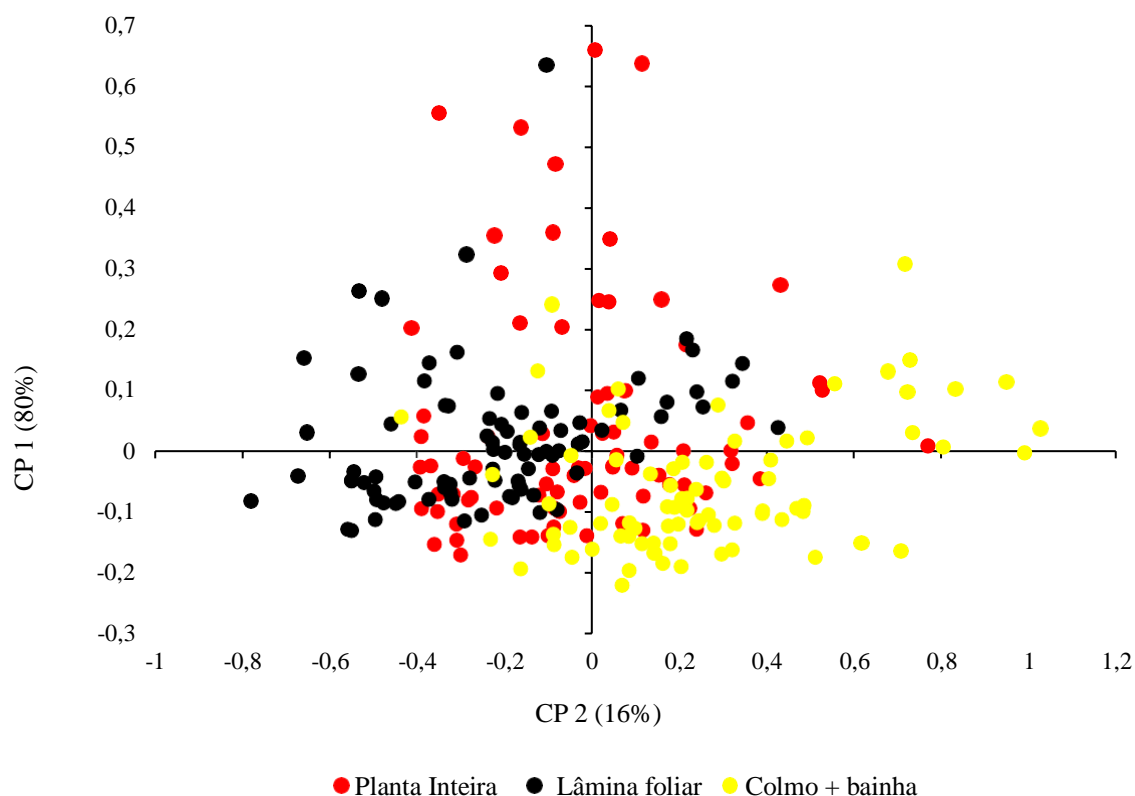
Observou-se a formação de 3 grupamentos de dados distintos, houve uma distribuição mais homogênea principalmente para amostras frescas (Figura 1), o que condiz a estrutura morfológica da forragem. A diferença na distribuição dos dados se explica porque as amostras secas (Figura 2) apresentaram valores de absorvância menor que as frescas (Figura 1). Segundo Formaggio & Sanches (2017) os espectros são fortemente influenciados pela umidade, em razão da água apresentar ampla faixa de absorvância no infravermelho próximo. O tamanho da partícula das amostras também pode influenciar o comportamento dos espectros. A característica física da amostra interfere na difusão da luz infravermelha, esse fato pode ter resultado na diferença de absorvância entre as amostras frescas e secas. Enquanto as amostras secas foram moídas, as frescas foram apenas picadas em fragmentos de aproximadamente 10 cm.

**Figura 1** - Análise de componentes principais de amostras frescas das estruturas de planta inteira, lâmina foliar e colmo + bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã



CP: componente principal.

**Figura 2** - Análise de componentes principais de amostras secas das estruturas de planta inteira, lâmina foliar e colmo+bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã



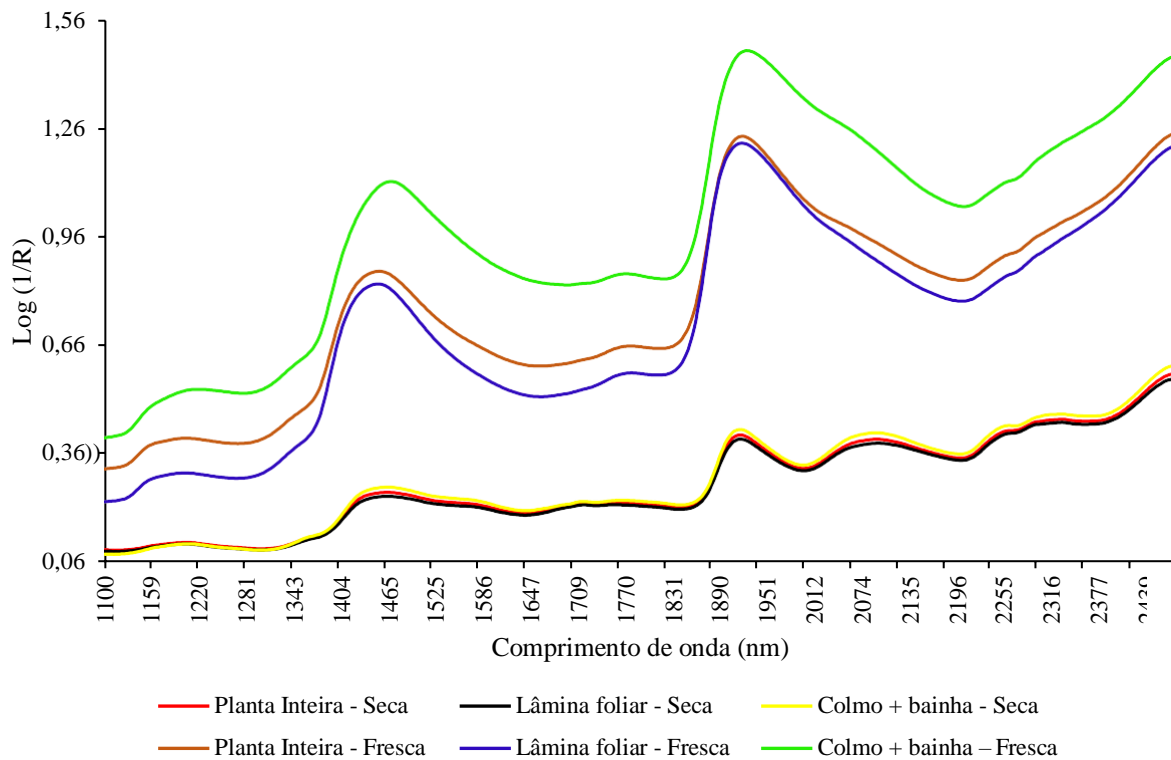
CP: componente principal.

Segundo Lugassi et al. (2015), a reflectância da forragem fresca é influenciada grandemente pelas bandas de absorção da água, que se encontram por volta de 1400 nm e 1900 nm. Essas bandas espectrais são facilmente visualizadas na Figura 3, assim, certamente a reflectância foi influenciada pela quantidade total de água presente nas amostras avaliadas. Apesar das características de absorção relativamente fortes da água, os espectros da forragem fresca e seca exibiram comportamento espectral similares, embora a absorção seja mais forte na forragem fresca, fato que se nota nos espectros obtidos e apresentados na Figura 3.

Observou-se também, que a intensidade da absorbância foi maior na curva de colmo+ bainha da forragem fresca (Figura 3). Segundo Bruker (2009), nesta região, há absorção de compostos fenólicos e carboxílicos. Esses compostos estariam então, associadas à celulose e lignina, conteúdo predominante dos tecidos de sustentação como o colmo, que estariam influenciando na assinatura espectral de cada estrutura morfológica, principalmente a de colmo + bainha da forragem fresca.

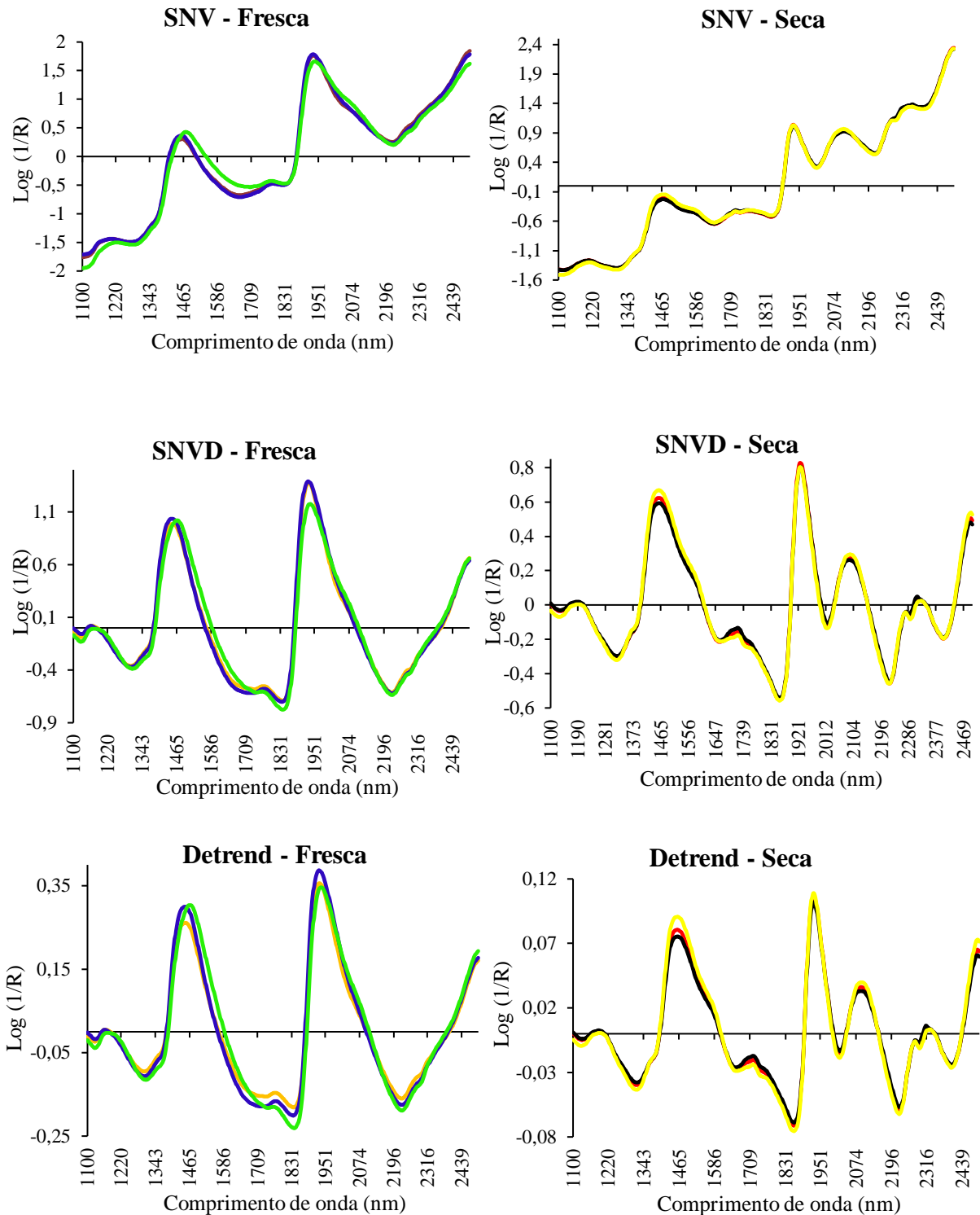
De acordo com Almeida (2009), o efeito do tamanho de partícula da amostra desloca a linha de base especialmente para comprimentos de onda em que ocorre uma elevada absorção, como observado nos espectros da forragem fresca (Figura 3). O autor ainda ressalta que em duas amostras com a mesma composição, mas granulometrias diferentes, há maior reflexão da luz nas amostras com partículas menores, em decorrência de uma melhor distribuição espacial das mesmas.

**Figura 3** - Espectros brutos médios de amostras frescas e secas de planta inteira, lâmina foliar, colmo + bainha de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã



Na Figura 4, observou-se os efeitos dos pré-tratamentos nos espectros médios brutos. A transformação padrão normal de variação (SNV - *Standard Normal Variate*) ameniza problemas de dispersão de luz, relacionados ao tamanho das partículas e densidade das amostras. Já o pré tratamento Detrend, é utilizado para remover tendências não-lineares e corrigir a linha de base (SOUZA; MADARI; GUIMARÃES, 2012).

**Figura 4** – Espectros médios tratados das amostras frescas e secas de *Brachiaria brizantha* cv. Piaã



SNV: transformação normal de variação; SNVD: transformação normal de variação + Detrend

Assim, a aplicação desses pré-tratamentos (SNV, SNVD e Detrend) nos espectros da forragem fresca (Figura 4), quando comparados aos espectros brutos médios (Figura 3) resultaram em uma diferença de comportamento espectral. Segundo Cabanas e Varo (1999), SNV e Detrend, são pré-tratamentos espectrais frequentemente usados para corrigir problemas associados ao conteúdo de umidade e tamanho de partículas de amostras e para um conjunto diversificado de espectros.

Porém, segundo Rambo e Ferreira (2018), geralmente informações espectrais importantes são removidas quando usamos tratamentos de correção de dispersão, por exemplo SNV. Na maioria das vezes, os melhores modelos são alcançados com a combinação de tratamentos. Desta forma, combinando o pré-tratamento SNV com Detrend, observa-se que a inclinação que existia nos espectros brutos médios (Figura 3) e também nos resultantes da aplicação do tratamento SNV (Figura 4), foi amenizada, tanto para forragem seca quanto para a fresca.

Quando se utilizou somente o tratamento Detrend, em comparação ao tratamento SNVD, os espectros praticamente não mudaram, para os dois estados da forragem. Observando a amplitude do gráfico, pode-se perceber que os picos diminuíram ainda mais, ocorrendo maior suavização do espectro (linha de base).

O fato de que no pré-tratamento Detrend o polinômio é proveniente de todo o espectro e não apenas de uma curta janela (cobrindo um número limitado de pontos de dados), como em outros tratamentos (RAMBO; FERREIRA, 2018), pode ter sido a razão dos melhores resultados gerados com sua utilização ou combinação.

Observando-se o modelo gerado para forragem 100% fresca (Tabela 2), nota-se que a utilização de ferramentas, como o pré- tratamento matemático dos espectros, não o otimizou, apesar de ter havido melhoras no comportamento dos espectros brutos médios da forragem fresca. Os resultados dos parâmetros do modelo gerado foram melhores sem a utilização destes. Segundo Almeida (2009), normalmente a aplicação de tratamentos leva a melhorias significativas no desenvolvimento de modelos de calibração, o que não ocorreu, informações espectrais podem ter sido removidas. O objetivo do pré-tratamento é melhorar o modelo, mas se os parâmetros pioram, não se torna necessário o seu uso, o que ocorreu neste caso. Apesar do modelo não ter sido validado, este é um bom resultado, descartando o processamento dos dados.

Analisando o modelo construído com amostras 100% secas (Tabela 2), para todas as variáveis foram utilizados pré-tratamentos, principalmente a transformação padrão normal de variação (SNV), o que pode ter reduzido o problema de uniformidade das partículas das amostras pré-secas e moídas, gerando melhores resultados em relação aos outros modelos. Esta também pode ter sido a razão da qual os modelos gerados com as proporções 25% frescas: 75% secas; 50 % frescas: 50% secas; 75% frescas: 25% secas, não apresentaram bons resultados de predição, pois o modelo 100% frescas não necessitou de pré-tratamentos, diferente do modelo de amostras 100% secas.

**Tabela 2-** Modelos de predição gerados a partir de diferentes porcentagens de amostras frescas e secas de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã.

Amostras 100% Frescas									
Calibração (50 amostras)						Validação (25 amostras)			
Variável	Pré-tratamento	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD
ASA	SNV 1,4,4,1	41,22	3,92	0,83	2,54	42,11	6,00	0,64	1,62
ASE	Sem 0,0,1,1	92,76	1,71	0,01	1,01	92,52	1,66	0,15	1,07
MST	SNV 1,4,4,1	38,40	4,01	0,79	2,25	38,82	5,71	0,57	1,51
PB	D 1,4,4,1	5,94	0,55	0,85	3,02	6,13	0,82	0,82	1,88
FDN	Sem 0,0,1,1	68,30	1,43	0,78	2,59	68,50	1,48	0,82	2,23
FDA	Sem 0,0,1,1	33,27	1,37	0,84	2,80	33,50	1,79	0,76	2,03
Lignina	Sem 0,0,1,1	1,86	0,43	0,83	2,56	1,76	0,63	0,73	1,84
Celulose	Sem 0,0,1,1	31,35	1,27	0,78	2,27	31,68	1,82	0,58	1,53
NDT	Sem 0,0,1,1	55,30	0,60	0,78	2,58	55,22	0,62	0,82	2,23
Amostras 100% Secas									
Calibração (165 amostras)						Validação (84 amostras)			
Variável	Pré-tratamento	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD
ASA	SNVD 1,4,4,1	44,26	6,13	0,67	1,90	41,63	5,11	0,75	1,98
ASE	SNVD 1,4,4,1	92,48	0,58	0,87	2,98	92,83	0,62	0,85	2,60
MST	SNVD 1,4,4,1	40,87	5,62	0,68	1,90	38,43	4,46	0,75	2,01
PB	D 1,4,4,1	6,09	0,45	0,92	4,21	6,07	0,48	0,94	3,98
FDN	SNV 1,4,4,1	68,72	1,23	0,90	3,31	67,90	1,10	0,92	3,49
FDA	SNV 1,4,4,1	33,72	2,02	0,81	2,33	33,13	1,72	0,85	2,56
Lignina	SNV 1,4,4,1	1,84	0,40	0,86	2,83	1,77	0,44	0,85	2,59
Celulose	SNV 1,4,4,1	31,76	1,91	0,72	1,92	31,31	1,72	0,77	2,04
NDT	SNV 1,4,4,1	55,13	0,51	0,90	3,33	55,45	0,51	0,90	3,12

## Amostras 25% Frescas: 75% Secas

Calibração (50 amostras frescas/150 amostras secas)						Validação (25 amostras frescas/ 75 amostras secas)			
Variável	Pré-tratamento	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD
ASA	SNVD 1,4,4,1	43,19	5,08	0,71	2,15	43,40	7,30	0,62	1,55
ASE	SNV 1,4,4,1	92,47	0,86	0,69	1,98	92,69	1,04	0,62	1,63
MST	SNV 1,4,4,1	39,98	4,80	0,68	2,07	39,97	6,26	0,65	1,64
PB	SNVD 1,4,4,1	6,13	0,53	0,89	3,53	5,97	0,63	0,87	2,71
FDN	SNV 1,4,4,1	68,55	1,42	0,85	2,88	68,50	1,25	0,88	2,76
FDA	D 1,4,4,1	33,51	1,78	0,79	2,56	33,44	1,99	0,77	2,04
Lignina	SNV 1,4,4,1	1,88	0,49	0,82	2,45	1,75	0,48	0,84	2,21
Celulose	D 1,4,4,1	31,56	1,66	0,72	2,17	31,71	1,74	0,71	1,85
NDT	SNV 1,4,4,1	55,20	0,59	0,85	2,90	55,22	0,52	0,88	2,77

## Amostras 50% Frescas: 50% Secas

Calibração (50 amostras frescas/50 amostras secas)						Validação (25 amostras frescas/ 25 amostras secas)			
Variável	Pré-tratamento	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD
ASA	SNV 1,4,4,1	43,61	6,21	0,50	1,71	42,51	8,97	0,25	1,12
ASE	SNVD 1,4,4,1	92,54	1,27	0,34	1,41	92,43	1,39	0,36	1,22
MST	SNV 1,4,4,1	40,22	5,87	0,51	1,66	39,25	8,34	0,21	1,08
PB	SNV 1,4,4,1	6,02	0,62	0,83	3,05	6,26	0,86	0,76	2,03
FDN	D 1,4,4,1	68,67	1,59	0,77	2,46	68,47	1,48	0,85	3,49
FDA	SNV 1,4,4,1	33,43	2,15	0,73	2,12	33,60	2,12	0,74	1,94
Lignina	D 1,4,4,1	1,95	0,53	0,78	2,36	1,83	0,58	0,75	2,02
Celulose	SNV 1,4,4,1	31,64	1,73	0,69	1,95	31,56	1,67	0,72	1,90
NDT	D 1,4,4,1	55,15	0,66	0,77	2,47	55,23	0,62	0,85	2,50

Amostras 75% Frescas: 25% Secas									
Calibração (50 amostras frescas/ 15 amostras secas)						Validação (25 amostras frescas/ 10 amostras secas)			
Variável	Pré-tratamento	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD	Média	SEC	R <sup>2</sup>	RPD
ASA	SNV 1,4,4,1	42,64	4,27	0,69	2,50	41,74	8,08	0,25	1,06
ASE	Sem 0,0,1,1	92,67	1,74	0,00	1,00	92,10	1,56	0,25	1,03
MST	SNV 1,4,4,1	39,68	4,09	0,64	2,41	38,44	8,22	0,14	0,93
PB	D 1,4,4,1	6,04	0,59	0,73	2,85	6,42	1,25	0,66	1,68
FDN	D 1,4,4,1	68,36	1,38	0,75	2,75	68,55	2,06	0,73	1,75
FDA	SNV 1,4,4,1	33,48	1,74	0,70	2,32	33,99	2,38	0,64	1,65
Lignina	Sem 0,0,1,1	1,81	0,51	0,71	2,03	1,59	0,58	0,76	1,89
Celulose	SNV 1,4,4,1	31,73	1,28	0,73	2,35	32,13	1,91	0,58	1,53
NDT	D 1,4,4,1	55,28	0,57	0,75	2,77	55,20	0,86	0,73	1,76

ASA: amostra seca ao ar; ASE: amostra seca em estufa; MST: matéria seca total; PB: proteína bruta; FDN: fibra em detergente neutro; FDA: fibra em detergente ácido; NDT: nutrientes digestíveis totais; SNV: transformação normal de variação; SNVD: transformação normal de variação + Detrend: sem remoção de tendência; D: Detrend sem remoção de tendência; Sem: sem tratamento. SEC: erro padrão da calibração; SEP: erro padrão da predição; R<sup>2</sup>c: coeficiente de determinação da calibração; R<sup>2</sup>v: coeficiente de determinação da validação; RPDc: taxa de desvio de performance da calibração; RPDv: taxa de desvio de performance da validação; 1,4,4,1; 0,0,1,1: o primeiro dígito a primeira derivada, seguida pelo “gap”, terceiro e quarto dígito: primeiro e segundo “smoothing”.

Na Tabela 2, estão apresentados os modelos de predição com os pré-tratamentos utilizados e parâmetros para calibração e validação das amostras frescas e secas da *Brachiaria brizantha* cv. Piatã. Segundo Goldshleger et al. (2013), bons modelos preditivos são observados quando se têm altos valores de RPD acima de 2,5 e  $R^2$  acima de 0,70, e menores valores de SEC e SEP.

Os modelos gerados com as proporções 25% frescas: 75% secas; 50 % frescas: 50% secas; 75% frescas: 25% secas, não apresentaram bons resultados para calibração, o que não permitiu a validação de bons modelos preditivos. Em geral, a medida que maiores proporções de amostras frescas foram sendo incluídas para a construção dos modelos, a acurácia destes diminuiu.

Fernandes (2015) e Melo (2017), analisando modelos construídos com amostras pré-secas/moídas e *in natura* de vagens de algaroba, palma forrageira e feijão guandu, concluíram que alguns modelos de amostras *in natura*, mostraram-se bastante complexos, onde o baixo desempenho destes modelos pode estar associado ao elevado conteúdo de água das amostras e o tamanho de partículas das mesmas. Os autores encontraram melhores desempenhos nos modelos com amostras pré-secas e moídas, de tal modo encontrados também neste estudo. Quanto mais aspectos forem usados na construção do modelo, mais complexo e instável ele tende a ficar, e isso foi observado nos modelos em que foram utilizadas combinações de amostras frescas e secas.

Utilizando 100% das amostras frescas (Tabela 2), obteve-se valores consideráveis de  $R^2$  e RPD para o maior número de variáveis entre todos os modelos testados para calibração como: ASA, PB, FDN, FDA, LIG e NDT. Porém, embora o modelo tenha apresentado bons resultados na calibração, não foi satisfatório para validação. Os erros de validação (SEP) para todas as variáveis foram maiores do que os SEP do modelo construído com amostras 100% secas. Os valores de  $R^2$  e RPD também foram melhores para o modelo 100% secas na validação. O modelo 100% frescas tem exatidão, porém tem baixa acurácia de predição, visto que a validação é utilizada para avaliar a capacidade preditiva do modelo, a acurácia dessa etapa é de extrema importância.

Deste modo, quando apenas amostras 100% secas foram usadas para construir o modelo, obteve-se uma boa correlação entre os valores preditos e os valores de referência, exceto para as variáveis ASA e MST que apresentaram valores de  $R^2c > 0,70$ . Considerando o RPDc, as variáveis ASA, MST, FDA e celulose não atingiram valores maiores que de 2,5 na calibração. Já na validação, todas as variáveis atingiram valores  $R^2v > 0,70$  e somente para ASA, MST e celulose os valores para RPDv, foram menores que 2,5.

O desempenho do modelo 100% secas, foi melhor em relação aos outros modelos gerados, além da ausência da água, pode estar relacionado ao tamanho de partículas das amostras. A redução da partícula das amostras secas em relação a frescas pode ter resultado em espectros com características não mascaradas pela água. De acordo com Burns & Ciurczak (2008), a redução de umidade e a padronização do tamanho de partículas são fatores que influenciam diretamente nos resultados das calibrações.

Apesar do modelo gerado com amostras 100% frescas não ter atingido valores adequados de parâmetros utilizados para escolha do melhor modelo de predição, comparando-se as médias preditas (validação) com as de referência, observa-se que as mesmas se encontram próximas as médias obtidas nas análises laboratoriais de rotina (Tabela 3), indicando que o modelo obtido poderia ser utilizado para atender as necessidades imediatas dos produtores que desejam apenas avaliar a qualidade de suas pastagens mediante a utilização de espectrômetros NIRS portáteis.

**Tabela 3-** Comparação entre valores médios de referência e valores médios preditos por espectroscopia de infravermelho próximo para amostras 100% frescas de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã.

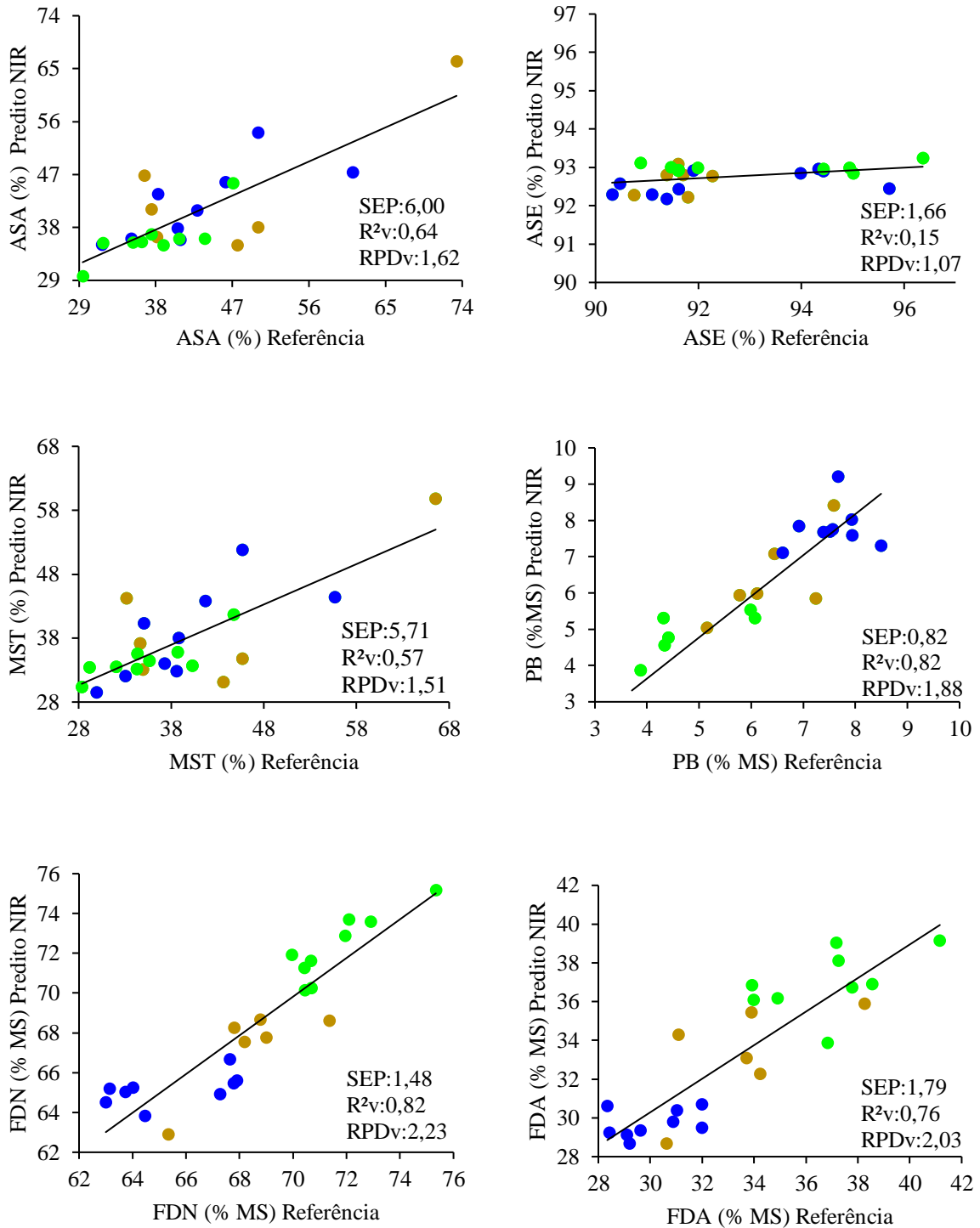
Variáveis (% MS)	Valores médios de referência	Valores médios preditos
ASA	44,5	42,11
ASE	92,4	92,52
MST	41,1	38,82
PB	6,3	6,13
FDN	68,2	68,50
FDA	33,6	33,50
Lignina	1,9	1,76
Celulose	31,8	31,68
NDT	55,3	55,22

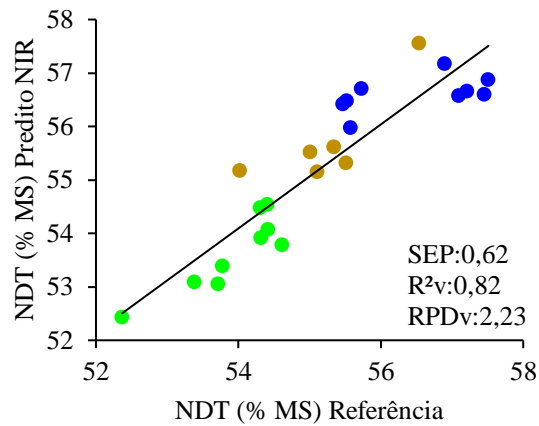
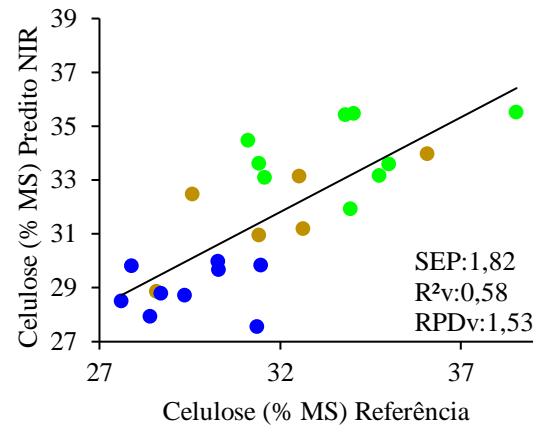
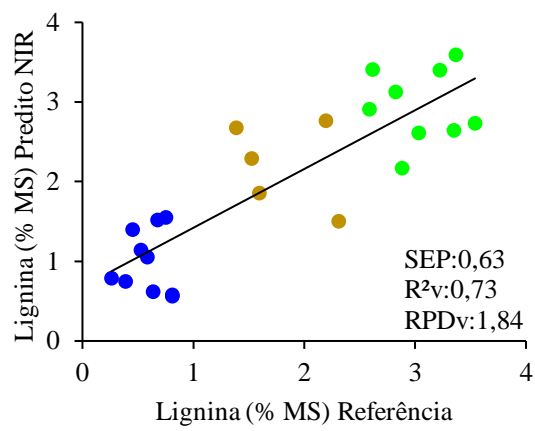
ASA: amostra seca ao ar; ASE: amostra seca em estufa; MST: matéria seca total; PB: proteína bruta; FDN: fibra em detergente neutro; FDA: fibra em detergente ácido; celulose: FDA – lignina; NDT: nutrientes digestíveis totais;  $NDT = 83,79 - (0,4171 * FDN)$ .

Os resultados da Tabela 2 são representados graficamente pelas Figuras 5 e 6. Encontraram-se as correlações entre as variáveis obtidas pela predição do NIRS e pelo método convencional, para cada variável analisada.

Algumas lacunas e uma maior distância dos pontos são observadas na formação dos conjuntos nos gráficos das amostras frescas (Figura 5), principalmente para ASA, ASE e MST, em comparação aos gráficos das amostras secas (Figura 6). Este fato deve-se aos efeitos causados por diferenças no teor de umidade contida nas amostras frescas, já que os espectros são influenciados pela água, em relação às secas que foram utilizadas para as análises químicas. E também a quantidade de amostras utilizadas para criação de cada modelo, onde o preenchimento destas lacunas se resolveria aumentando o banco de dados de amostras frescas para a criação de um modelo mais robusto. Já que mesmo havendo existência de lacunas, os valores de  $R^2v$  podem ser considerados satisfatórios.

**Figura 5** - Validação dos modelos desenvolvidos a partir das amostras de forragem fresca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã.



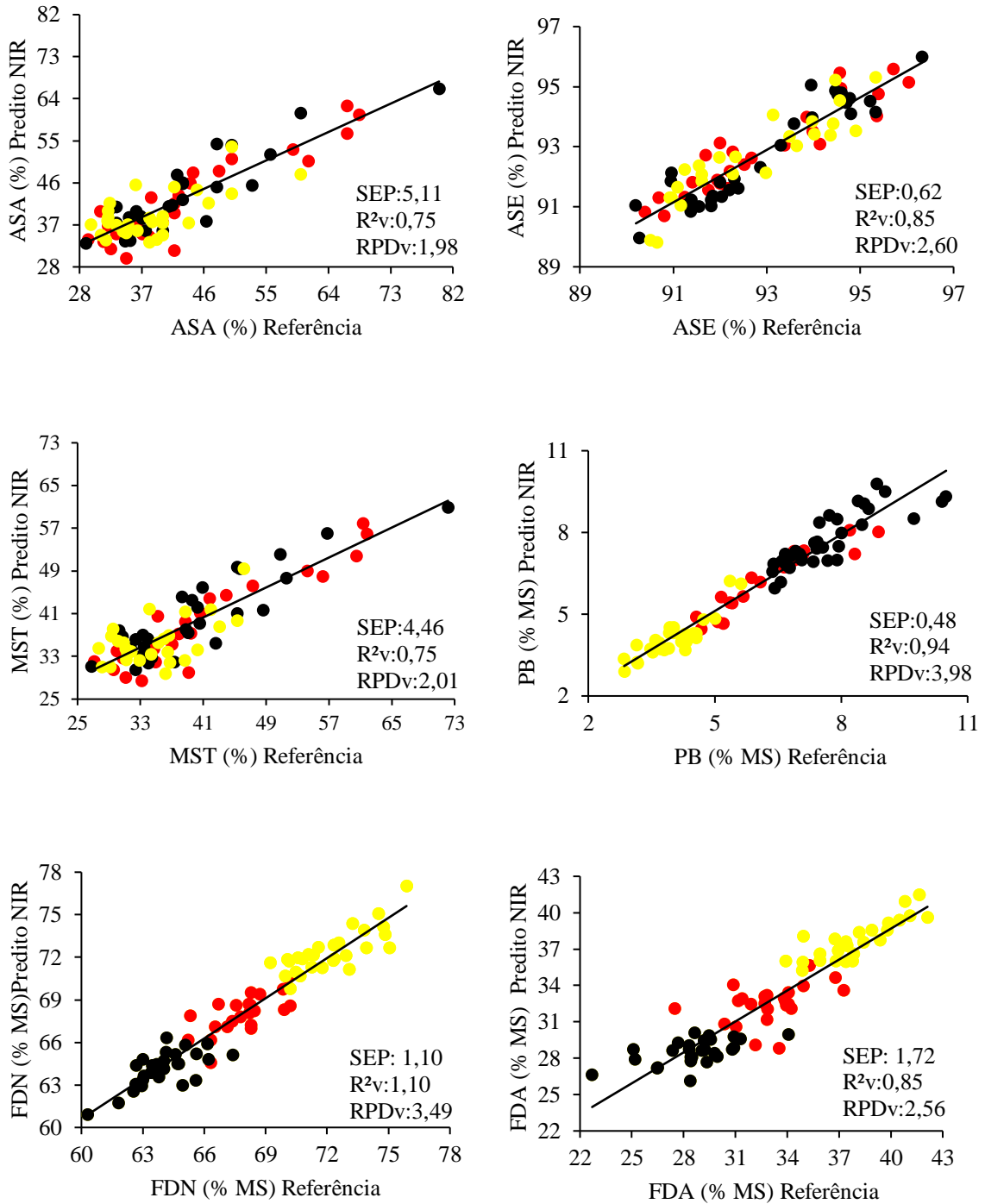


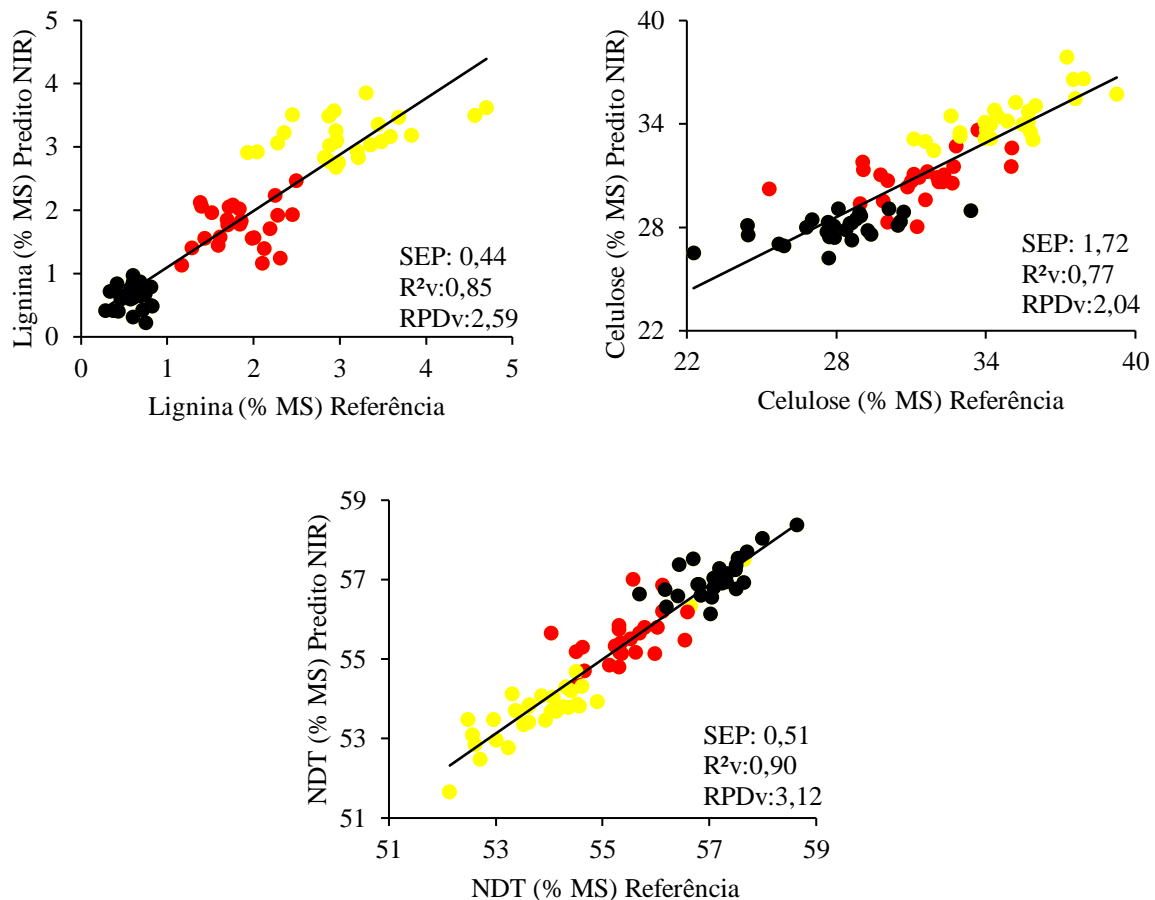
● Planta Inteira ● Lâmina foliar ● Colmo + bainha

n=25 amostras

ASA: amostra seca ao ar; ASE: amostra seca em estufa; MST: matéria seca total; PB: proteína bruta; FDN: fibra em detergente neutro; FDA: fibra em detergente ácido; NDT: nutrientes digestíveis totais; SEP: erro padrão da predição; R<sup>2</sup> v: coeficiente de determinação da validação; RPDv: taxa de desvio de performance da validação.

**Figura 6** - Validação dos modelos desenvolvidos a partir das amostras de forragem seca de *Brachiaria brizantha* cv. Piatã.





● Planta Inteira ● Lâmina foliar ● Colmo + bainha

n= 84 amostras

ASA: amostra seca ao ar; ASE: amostra seca em estufa; MST: matéria seca total; PB: proteína bruta; FDN: fibra em detergente neutro; FDA: fibra em detergente ácido; NDT: nutrientes digestíveis totais; SEP: erro padrão da predição; R<sup>2</sup> v: coeficiente de determinação da validação; RPDv: taxa de desvio de performance da validação.

## Conclusões

Utilizando amostras de forragem seca, o modelo obtido foi adequado para predição das variáveis avaliadas, exceto para ASA, MST e celulose.

Considerando os critérios e padrões adotados neste estudo, o modelo gerado com 100% amostras frescas para predição dos valores nutricionais da *Brachiaria brizantha* cv. Piatã fresca por espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS) obteve resultados satisfatórios para calibração, porém, não foi possível valida-lo. Como a validação é uma etapa importante na construção de modelos, se torna necessário o aumento do banco de dados de amostras frescas para a criação de um modelo mais robusto, que possa gerar melhores resultados. Entretanto, o modelo de calibração obtido pode ter aplicações práticas, para atender a demanda de pequenos e médios produtores relacionada a avaliação da qualidade da forragem produzida na propriedade.

## Referências Bibliográficas

- ALMEIDA, F. M. N. **Espectroscopia de Infravermelho Próximo com Transformada de Fourier (FT-NIR) na Caracterização de Farinhas para Alimentação Pueril**. 2009. 84 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Biológica) – Instituto Superior Técnico- Universidade de Lisboa, Lisboa, 2009.
- ALOMAR, D.; FUCHSLOCHER, R.; CUEVAS, J.; MARDONES, R.; CUEVAS, E. Prediction of the composition of fresh pastures by near infrared reflectance or interactance-reflectance spectroscopy. **Chilean Journal of Agricultural Research**, Chillán, v. 69, n.2 , p.198-206, abr-jun, 2009.
- ASSOCIATION OF OFFICIAL ANALYTICAL CHEMISTS- AOAC. **Official methods of analysis**. 15.ed. Washington, 1990. 1298p.
- BRUKER OPTICS. **Guide for Infrared Spectroscopy**. Cornell Center for Materials Reserarch, 2009. Disponível em: <<https://www.ccmr.cornell.edu/wp-content/uploads/sites/2/2015/11/GuideforInfraredspectroscopy.pdf> > Acesso em: 22/10/2018.
- BURNS, D. A.; CIURCZAK, E. W. **Handbook of Near- Infrared Analysis**. 3 ed, p. 800, 2008.
- CABANAS, F.; VARO, V. The use of standard normal variate and detrending as signal improvement tools for the interpretation of near infrared spectra of agro-food products. **Analytical Chemistry**, Washington, v. 18, p.113-118, 1999.
- CAPELLE, E.R. et al. Estimativa do valor energético a partir de características químicas e bromatológicas dos alimentos. **Revista Brasileira de Zootecnia**, Viçosa, v. 30, n. 6, p. 1837-1856, 2001.
- CARVALHO, G. G. P.; PIRES, A. J. V. Organização dos tecidos de plantas forrageiras e suas implicações para os ruminantes. **Archivos de Zootecnia**, Córdoba, v.57, p.13-28, out, 2008.
- COZZOLINO, D. Use of Infrared Spectroscopy for In-Field Measurement and Phenotyping of Plant Properties: Instrumentation, Data Analysis, and Examples. **Applied Spectroscopy Reviews**, Philadelphia, v.49, n.7, p.564–584, mar, 2014.
- DEEPA, K. ;SENTHILKUMAR, S.;KALPANA, K.; SUGANYA, T.; SASIKUMAR, P.;THIRUMALAISAMY, G.; SURESHKUMAR, R.; VASANTHAKUMAR, P..Nirs in animal sciences. **International Journal of Science Environment and Technology**, Índia, v. 5, n. 2, p. 605 – 610,abr, 2016.
- DETMANN, E., SOUZA, M.A., VALADARES FILHO, S.C. **Métodos para análise de alimentos**. Visconde do Rio Branco: Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2012. 214p.
- DIAS, D. G.; PEGARORO, R. F.; ALVES, D. D.; PORTO, E. M. V.; SANTOS NETO, J. A.; ASPIAZÚ, I. Produção do capim Piatã submetido a diferentes fontes de fósforo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v.19, n.4, p.330–335, mar, 2015.
- FERNANDES, A. M. F. **Uso da espectroscopia de reflectância do infravermelho próximo (NIRS) para previsão da composição bromatológica de vagens de algaroba e palma forrageira**. 2015.106 p. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) – Universidade Estadual Vale do Acaraú, Sobral, 2015.

- FORMAGGIO, A. R.; SANCHES, I. D. A. **Sensoriamento remoto em agricultura**. Editora Oficina de Textos, São Paulo, 2017.630 p.
- GOLDSHLEGER, N.; CHUDNOVSKY, A.; BEN-BINYAM, R. Predicting salinity in tomato using soil reflectance spectra. **International Journal of Remote Sensing**, Basileia, v. 34, p. 6079-6093, 2013.
- GONÇALVES, J. L.; FERNANDES, A. M. F.; SOUSA, R. T.; SANTOS, S. F. Utilização do NIRS na determinação dos parâmetros de digestibilidade e consumo em ruminantes. **Nutritime Revista Eletrônica**, Viçosa, v.15, n.4, p.8200-8253, jul/ago, 2018.
- KENNARD, R. W.; STONE, L. A. Computer Aided Design of Experiments, **Technometrics**, Reino Unido, v.11, n. 1, p. 137 -148, fev, 1969.
- LUGASSI, R.; CHUDNOVSKY, A.; ZAADY, E.; DVASH, L.; GOLDSHLEGER, N. Estimating pasture quality of fresh vegetation based on spectral slope of mixed data of dry and fresh vegetation—method development. **Remote Sensing**, Basileia, v.7, p.8045-8066, jun, 2015.
- MALLEY, D.F., HUNTER, K.N., AND WEBSTER, G.R.B. Analysis of diesel fuel contamination in soils by near-infrared reflectance spectrometry and solid phase microextraction–gas chromatography. **Journal of Soil Contamination**, England & Wales, v.8, p.481–489, 1999.
- MELO, J. C. R. **Uso da espectroscopia de reflectância do infravermelho próximo (NIRS) para previsão da composição bromatológica da torta de algodão e feijão guandu**. 2017. 68 p. Dissertação (Mestrado em Zootecnia) – Universidade Estadual Vale do Acaraú, Sobral, 2017.
- MONRROY, M.; GUTIÉRREZ, D.; MIRANDA, M.; HERNÁNDEZ, K.; GARCÍA, J. R. Determination of *Brachiaria* spp. forage quality by Near-Infrared spectroscopy and partial least squares regression. **Journal of the Chilean Chemical Society**, Concepción, v. 62, n. 2, p.3472-3477, 2017.
- MORÓN, A.; GARCÍA, A.; SAWCHIK, J.; COZZOLINO, D. Preliminary study on the use of near-infrared reflectance spectroscopy to assess nitrogen content of undried wheat plants. **Journal of the Science of Food and Agriculture**, New York, v.87, p.147–152, ago, 2007.
- PACIULLO, D. S. C. Características anatômicas relacionadas ao valor nutritivo de gramíneas forrageiras. **Ciência Rural**, Santa Maria, v.32, n.2, p.357-364, jun, 2002.
- RAMBO, M. K. D.; FERREIRA, M. M. C. Análise de resíduos lignocelulósicos por espectroscopia NIR associada a pré-tratamentos multivariados dentro do contexto de química verde. **Revista Virtual de Química**, Niterói, v.10, n.2, p. 421-431, abr, 2018.
- REIS, R. A.; BARBERO, R. P.; HOFFMANN A. Impactos da qualidade da forragem em sistemas de produção de bovinos de corte. **Informe Agropecuário**, Belo Horizonte, v.37, n.292, p.36-53, dez,2016.
- SOUZA, D. M.; MADARI, B. E.; GUIMARÃES, F. F. Aplicação de técnicas multivariadas e inteligência artificial na análise de espectros de infravermelho para determinação de matéria orgânica em amostras de solos. **Química Nova**, São Paulo, v. 35, n. 9, p. 1738-1745, ago, 2012.
- VAN SOEST, P.J.; ROBERTSON, J.B.; LEWIS, B.A. Methods for dietary fiber, neutral detergent fiber, and nonstarch polysaccharides in relation to animal nutrition. **Journal of Dairy Science**, Champaign, v.74, n.10, p.3583-3597, out, 1991.