



Avaliação da espectroscopia no infravermelho próximo para previsão da composição químico-bromatológica da silagem de sorgo¹. Evaluation of near infrared spectroscopy for predicting the chemical-bromatological composition of sorghum silage¹.

[Valcicleide Oliveira dos Santos](#)^{1,2}, [Marco Aurélio Delmondes Bomfim](#)³, [Sueli Freitas dos Santos](#)⁴, [Rafael Gonçalves Tonucci](#)³, [Ana Clara Rodrigues Cavalcante](#)³, [Igor Cassiano Saraiva Silva](#)², [Ana Karina de Lima Chaves](#)², [Patrício Leandro Pereira](#)²

¹ Parte do trabalho de mestrado da primeira autora; Projeto financiado pela Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária – Embrapa

² Mestre em Zootecnia – Universidade Estadual Vale do Acaraú, Sobral – CE, Brasil. E-mail: valcicleideoliveira@hotmail.com, cassianoigor1@hotmail.com, karinachaves15@yahoo.com.br, patricio123leandro@gmail.com

³ Pesquisador, Embrapa Caprinos e Ovinos, Sobral – CE, Brasil. E-mail: marco.bomfim@embrapa.br, rafael.tonucci@embrapa.br, ana.clara@embrapa.br

⁴ Pós Doutora, Embrapa Caprinos e Ovinos, Sobral – CE, Brasil. E-mail: sfsantoszootecnia@gmail.com

Resumo

Objetivou-se avaliar adequação da espectroscopia no infravermelho próximo para a previsão da composição químico-bromatológica da silagem de sorgo BRS 658 e BRS Ponta Negra, em minissilos de PVC, ensilados nos estádios de maturação dos grãos E7 ou leitoso; E8 ou pastoso e farináceo duro. O modelo usando a 1ª derivada *Savitzky-Golay* para DIVMS apresentou menor RMSEC, RMSECV e RMSEP (5,96, 7,42, 6,96) respectivamente. Para DIVMO, o modelo Correção Multiplicativa de Sinal (MSC) + 1ª derivada *Savitzky-Golay* com duas janelas apresentou maior desempenho, com maior R² na calibração, validação e predição (0,82, 0,72, 0,56) respectivamente. Na validação independente dos modelos, não se observou diferença significativa entre os valores preditos e de referência para as variáveis PB, DIVMS e DIVMO. A metodologia NIRS é capaz de predizer com acurácia os teores de proteína, digestibilidade *in vitro* da matéria seca e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica da silagem de sorgo.

Palavras-chave: Acurácia. Calibração. Gramíneas. NIRS.

Abstract

The objective was to evaluate the adequacy of near-infrared spectroscopy for predicting the chemical-bromatological composition of sorghum BRS 658 and BRS Ponta Negra silage, in PVC mini-silos, ensiled at grain maturation stages E7 or milky, E8 or pasty and hard mealy. The model using the *Savitzky-Golay* 1st Derivative for DIVMS showed lower RMSEC, RMSECV and RMSEP (5.96, 7.42, 6.96) respectively. For DIVMO, the Multiplicative Signal Correction (MSC) + *Savitzky-Golay* 1st Derivative model with two windows showed better performance, with higher R² in calibration, validation and prediction (0.82, 0.72, 0.56) respectively. In the independent validation of the models, no significant difference was observed between the predicted and reference values for the BP, IVMSD and IVMOD variables. The NIRS methodology is capable of accurately predicting the protein content, *in vitro* digestibility of dry matter and *in vitro* digestibility of organic matter in sorghum silage.

Keywords: Accuracy. Calibration. Grasses. NIRS.

Introdução

No Brasil, as pastagens constituem a principal e mais barata fonte de alimentação dos rebanhos (BARROS et al., 2009). Grande parte da produção de pequenos ruminantes no semiárido nordestino, é feita em pastagem nativa. Entretanto, a produção animal é afetada pelas épocas de estiagens que proporcionam uma variação tanto na disponibilidade como na qualidade do pasto ao longo do ano (GLADSTON, 2007).

Assim, alternativas tecnológicas como a produção de silagem devem ser integradas ao sistema de produção como forma de garantir sua eficiência e reduzir os custos com alimentação. Dentre as principais culturas utilizadas para a produção de silagem, destaca-se o sorgo, devido a vantagens como a elevada produção de forragem, menor exigência em fertilidade do solo e alta tolerância ao déficit hídrico (REZENDE et al., 2011).

Além da produção, é necessário conhecer a composição bromatológica dos alimentos fornecidos aos animais para posteriormente definir as estratégias de manejo alimentar. A análise de alimentos é um importante ponto para conhecer a composição química dos alimentos, na determinação do teor de substâncias nutritivas através da análise centesimal (SILVA e QUEIROZ, 2006).

A análise de alimento tradicional é considerada onerosa por parte dos produtores. É também demorada e sofre críticas com relação aos resíduos decorrentes do uso de reagentes. Nesse contexto a utilização da espectroscopia de reflectância do infravermelho próximo (NIRS), vem sendo aplicada com sucesso como uma alternativa as metodologias analíticas de composições bromatológicas (ONÓRIO et al., 2010).

A tecnologia NIRS permite a obtenção de forma não destrutiva da amostra, com informações sobre a composição química, sem gerar resíduos para o meio ambiente com obtenção dos resultados em menor tempo. E com potencial de previsão quantitativa de parâmetros principais, como proteínas, gorduras, umidade, relacionados à qualidade dos produtos agrícolas como grãos, farinhas, forragem, sementes oleaginosas, carnes e laticínios (WILLIAMS, 2001).

Portanto, objetivou-se avaliar a espectroscopia no infravermelho próximo para a previsão da composição em proteína bruta e digestibilidades *in vitro* da matéria seca e matéria orgânica da silagem de sorgo – BRS Ponta Negra e o BRS 658.

Materia e métodos

Desenho experimental

Foram utilizadas duas cultivares de sorgo – BRS Ponta Negra e o BRS 658, as mais recomendadas para o Nordeste brasileiro, cultivadas na safra 2018 e 2019, provenientes de unidades de referência tecnológica do projeto “Forrageiras para o semiárido”, parceria Embrapa/CNA, em diferentes municípios nos Estados de Alagoas, Paraíba, Sergipe, Ceará (Sobral e Ibareta), Bahia (Baixa Grande e Itapetinga) e Minas Gerais (Carlos Chagas e Montes Claros). As cultivares foram ensiladas, em cada um dos municípios, quando atingiram o período de maturação do grão farináceo duro, com quatro repetições, totalizando 72 minissilos.

Visando aumentar o número de amostras, e adicionar mais variação aos dados para geração de modelos com maior faixa de amplitude, aumentando sua robustez, além das 72 amostras de silagem provenientes dos nove municípios acima mencionados, foram adicionadas 33 amostras de silagens de sorgo BRS Ponta Negra e BRS 658 de um ensaio realizado na Fazenda Três Lagoas, pertencente à

Embrapa Caprinos e Ovinos, em Sobral/CE, em que as plantas foram colhidas e ensiladas nos estádios – E7 ou leitoso; E8 ou pastoso (PINHO,2014), assim como no estádio de grão duro (quando o grão estava passado da maturidade fisiológica), com cinco repetições. Com isso, o banco foi composto por 105 amostras de silagens de sorgo provenientes de minissilos de PVC.

As plantas de sorgo foram cultivadas em uma área de 6,5 x 6,0m conforme o período chuvoso de cada região. Na (Figura 1), podem ser observadas as precipitações pluviométricas acumulada correspondente aos municípios onde foram instaladas as áreas de cultivo.

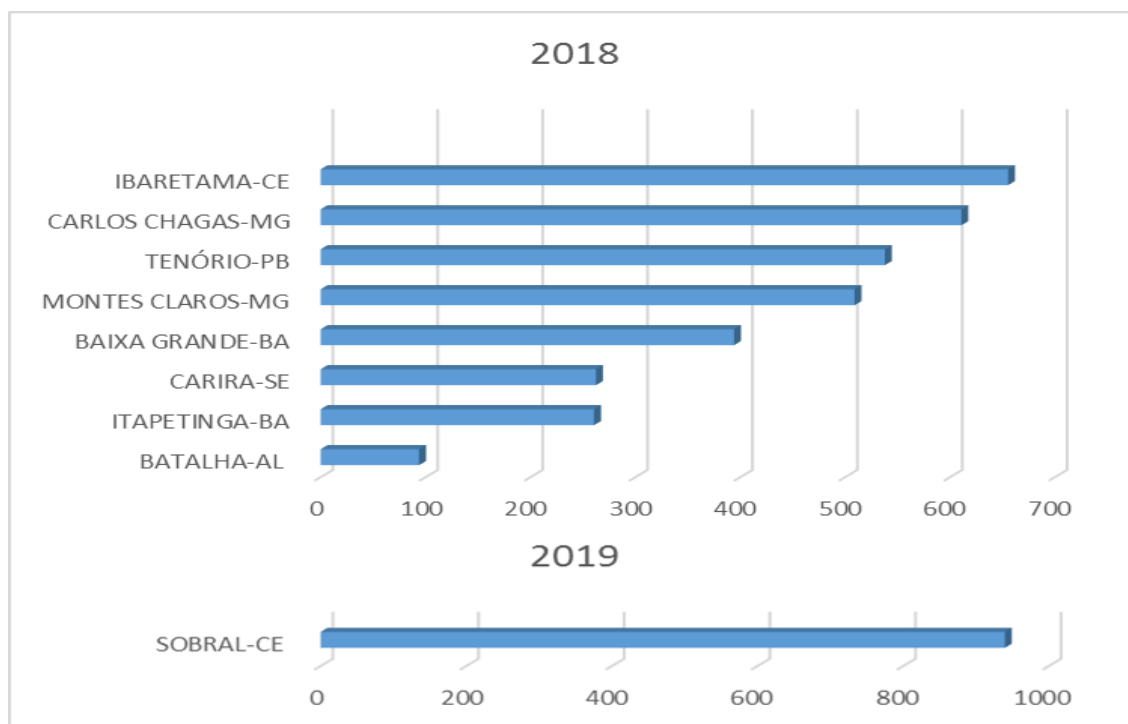


Figura 1 – Precipitação pluviométrica em municípios do Nordeste brasileiro e Norte de Minas Gerais conforme o período chuvoso de cada região em meses dos anos de 2018 e 2019. Fonte: Dados da Rede do Instituto Nacional de Meteorologia (INMET, 2019) e estações meteorológicas nos municípios de Batalha – AL, Tenório – PB, Carira – SE, Baixa Grande – BA, Itapetinga – BA, Carlos Chagas – MG, Montes Claros – MG, Ibaretama – CE (2018).

Colheita e ensilagem

O corte das plantas foi realizado a uma altura de 20 cm do solo. A planta inteira foi posteriormente picada em picadeira estacionária em partículas entre 2 e 3 cm. A ensilagem foi realizada em minissilos de PVC, com tampas tipo Bunsen adaptadas para permitir o escape dos gases provenientes da fermentação. Em cada minissilo foi colocado 1,963 kg da massa picada, possuíam volume aproximado (3,927 dm³) com densidade de compactação média de 500 kg.m³.

Para deposição dos efluentes, na base dos minissilos continham 200g de areia, a qual foi separada por telas para impedir contato direto com a massa ensilada. A compactação foi realizada com êmbolo de madeira.

Composição físico-química e análises de referência

Todos os minissilos produzidos em outros municípios foram enviados à Embrapa Caprinos e Ovinos para, que junto com os minissilos produzidos na própria unidade, serem destinados a

realização dos procedimentos analíticos no Laboratório de Nutrição Animal (LANA) e no Laboratório de NIR (LABNIR).

Logo após abertura de cada minissilo, a massa ensilada foi homogeneizada e retirada uma alíquota para mensuração do pH (SILVA, 1990). Para obtenção dos valores de referência, outra alíquota de cada minissilo, foi pré-seca e moída em moinho tipo Willey (1 mm) (SILVA e QUEIROZ, 2006) para determinação dos teores de matéria seca (MS) (AOAC, 2010), fibra em detergente neutro (FDN) (SENGER et al., 2008). O teor de nitrogênio total (N) foi determinado em sistema de combustão segundo método AOAC, (2010), utilizando um analisador de N LECO® CN628 (Leco Corp. St. Joseph, MI, EUA). Para conversão dos valores de N em proteína bruta (PB) usou-se a correção 6,25. A digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica (DIVMO) das amostras foram determinadas utilizando incubadora automática tipo MA443 (MA443, Marconi Instrumentos para Laboratórios Ltda., Piracicaba, SP, Brasil), conforme princípios de técnica já estabelecida (TILLEY e TERRY, 1963), com segundo estágio feito em solução de FDN (SENGER et al., 2008).

Coleta dos espectros

As amostras secas e moídas, antes de terem seus espectros coletados foram para estufa de ventilação forçada a 55°C até que suas massas se estabilizassem (LYONS e STUTH, 1992). A coleta dos espectros foi realizada em instrumento NIR FOSS® 5000 (Foss NIR Systems Inc., Silver Spring, MD, USA), com comprimento de onda de 1100 a 2500 nm e intervalo espectral de 2 nm.

Análises quimiométricas

Logo após a coleta dos espectros das amostras, foi empregado um pré-tratamento matemático para correção de espalhamento pela técnica de Correção Multiplicativa de Sinal (MSC) (CHEN et al., 2013). Assim como também, utilizou-se a técnica multivariada de reconhecimento padrão não supervisionada, a análise de componentes principais (PCA), para a análise exploratória das amostras, a fim de avaliar a formação de grupos (LYRA et al., 2010) nas amostras de silagens de sorgo BRS 658 e BRS Ponta Negra.

Desenvolvimento dos modelos

Previamente ao desenvolvimento dos modelos os dados passaram por análises exploratórias utilizando a técnica de Análise de Componentes Principais (PCA) na elipse de Hotelling (estatística T2 de Hotelling), visando detectar amostras anômalas (outliers), utilizando o *software The Unscrambler* versão 10.2 (Camo Inc, AS, Norway).

Em seguida, observando a maior variabilidade entre as amostras, usou-se a ferramenta de seleção “*Evenly Distributed Samples*, do *software The Unscrambler*® versão 10.2 (Camo Inc), selecionando amostras para compor o banco de calibração (75% das amostras) para construção dos modelos e o banco de validação (25% das amostras) para validação independente.

Para cada constituinte, os espectros das amostras coletadas foram submetidos a diferentes pré-tratamentos matemáticos, isolados ou combinados, como a MSC, variação normal padrão (SNV), transformação pela primeira ou segunda derivadas de *Savitzky-Golay* (BROWN et al., 2000).

Os modelos de calibração multivariada foram desenvolvidos pela regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS). O número de fatores PLS foi determinado pela validação cruzada (*cross-*

validation) procedimento “*leave-one-out*” (GELADI e KOWALSKI, 1986). Na validação independente foi utilizado o banco de dados separado (25% das amostras). Após os modelos serem gerados para todos os pré-tratamentos empregados, procedeu-se a seleção dos mais ajustados para cada variável dependente.

Os desempenhos dos modelos desenvolvidos foram determinados de acordo com a raiz quadrada média do erro da calibração (RMSEC), da validação cruzada (RMSECV) e da predição (RMSEP), bem como o coeficiente de determinação (R^2) dos valores previstos e de referência (WILLIAMS e SOBERING, 1993; WILLIAMS, 2001) e o número de fatores aplicados na calibração, como propôs (PASQUINI, 2003).

Análises estatísticas

Os dados de composição bromatológica das cultivares foram analisados por meio de análise de variância (teste F) e de teste de comparação de médias. O delineamento experimental utilizado foi inteiramente casualizado, em um arranjo fatorial 2 x 9 (duas cultivares versus 9 municípios) com 4 repetições. As médias foram comparadas pelo teste de Tukey ($p < 0,05$). Como ferramenta de auxílio às análises estatísticas, utilizou-se o programa computacional SAS[®] (SAS[®] Institute, 2002).

Para validação, as médias dos valores de PB, DIVMS e DIVMO, previstos pelo modelo e observados na análise laboratorial, foram comparados por meio de análise de variância (teste F), com auxílio do *software* estatístico SPSS, versão 22 (IBM Corporation, New York, EUA) e para análise estatística descritiva utilizou-se o *software The Unscrambler* versão 10.2 (Camo Inc, AS, Norway).

Resultados e discussão

Valores médios de pH, teores de MS e FDN da silagem de sorgo em municípios nos Estados do Nordeste brasileiro e Norte de Minas Gerais

Os resultados apresentados na (Tabela 1), mostram que não houve interação entre as cultivares e os municípios. Porém, para os valores de pH verificou-se efeito significativo do município sobre a cultivar BRS 658, com maior valor observado para a silagem produzida no município de Ibaretama - CE (4,23). Também houve diferença para os valores de pH entre os municípios para a cultivar BRS Ponta Negra, com maior valor para o município Batalha – AL. Verificou-se ainda, diferença entre as cultivares BRS 658 e BRS Ponta Negra nos diferentes municípios (Batalha – AL, Tenório – PB, Carira – SE, Itapetinga – BA, Carlos Chagas – MG e Ibaretama – CE). Apesar das diferenças observadas, os valores de pH registrados nas mensurações (3,55 e 4,38) são indicativos de que houve uma adequada fermentação. Esses valores encontrados no presente estudo, se enquadram no intervalo determinado de 3,6 a 4,2, para silagens bem conservada (McDONALD et al., 1991; RIBEIRO et al., 2007).

Para os teores de MS (Tabela 1), observou-se diferença para as silagens da cultivar BRS 658 nos diferentes municípios, com maiores teores observados para Carira – SE e Tenório – PB, 42,23% e 42,11%, respectivamente. A cultivar BRS 658 apresentou maior teor de MS da silagem em todos os municípios em relação a cultivar BRS Ponta Negra, variando de 29,89% a 42,23%.

Tabela 1 – Valores médios de pH e composição bromatológica das silagens de sorgo BRS 658 e BRS Ponta Negra nos municípios de Batalha – AL, Tenório – PB, Carira – SE, Baixa Grande – BA, Itapetinga – BA, Carlos Chagas – MG, Montes Claros – MG, Ibaretama – CE e Sobral – CE, com épocas de colheita definida no estágio dos grãos farináceo duro

	BA-AL	TE-PB	CA-SE	BG-BA	IT-BA	CC-MG	MC-MG	IB-CE	SO-CE	
Cultivar										Média
	pH									
BRS 658	3.84Bbc	3.94Ab	3.94Ab	3.95Ab	3.73Ac	3.82Abc	3.68Ac	4.23Aa	3.65Ac	3.86
BRS PN	4.38Aa	3.68Bde	3.73Bcd	3.82Abc	3.55Be	3.58Be	3.65Ade	3.92Bb	3.71Acde	3.78
Média	4.11	3.81	3.84	3.89	3.64	3.70	3.67	4.07	3.68	
	MS%									Média
BRS 658	36.92Ac	42.11Aa	42.23Aa	41.58Aab	30.58Ad	38.11Abc	29.89Ad	39.56Aabc	31.68Ad	36.96
BRS PN	30.25Bb	34.06Ba	26.14Bc	34.96Ba	27.02Bbc	26.03Bc	26.18Bc	22.36Bd	20.82Bd	27.53
Média	33.58	38.08	34.19	38.27	28.80	32.07	28.04	30.96	26.25	
	FDN%									Média
BRS 658	52.08Ad	71.52Aa	56.64Acd	63.45Ab	61.61Abc	74.04Aa	70.63Aa	64.01Ab	59.12Bbc	63.55
BRS PN	47.55Ac	49.86Bbc	55.04Ab	65.56Aa	64.81Aa	65.59Ba	66.01Aa	67.49Aa	65.15Aa	60.90
Média	49.81	60.69	55.84	64.50	63.21	69.81	68.32	65.75	62.14	

pH – potencial hidrogeniônico; MS – Matéria seca; FDN – fibra em detergente neutro. Médias seguidas por letras maiúsculas distintas na coluna diferem ($P < 0,05$) entre si pelo teste de Tukey; Médias seguidas por letras minúsculas diferentes na linha diferem ($P < 0,05$) entre si pelo teste de Tukey.

Para a silagem da cultivar BRS Ponta Negra, observou-se diferença nos teores de MS nos diferentes municípios, com maiores teores observados para Baixa Grande – BA e Tenório – PB. Infere-se que os resultados obtidos estejam relacionados a fatores edafoclimáticos (Figura 1) de cada região, com conseqüente impacto na fisiologia e bioquímica da planta (NEUMANN et al., 2008), mas sem impacto relevante para a qualidade das silagens produzidas.

Em relação aos valores de FDN das silagens, verificou-se efeito significativo dos municípios para cultivar BRS 658 (Tabela 1), com maiores teores observados para Tenório – PB, Carlos Chagas – MG e Montes Claros – MG. Também houve diferença significativa para BRS Ponta Negra nos diferentes municípios, com maiores teores observados para Baixa Grande – BA, Itapetinga – BA, Carlos Chagas – MG, Montes Claros – MG, Ibaretama – CE e Sobral – CE. Assim como também, houve diferença entre as cultivares nos municípios Tenório – PB, Carlos Chagas – MG e Fazenda Três Lagoas – CE para teores de FDN. Apesar das diferenças verificadas, os teores de FDN das silagens estão em conformidade com os relatados na literatura, onde pesquisadores avaliando híbridos de sorgos forrageiros (AGX-213 e AG2002), observaram teores de FDN entre 66,62% e 73,66% (NEUMANN et al., 2004).

No geral, as diferenças observadas entre as cultivares e municípios na composição bromatológica e pH, são importantes para o presente estudo, por adicionar a variabilidade desejada para o desenvolvimento de modelos NIR. Dado que fatores como o local de plantio e, conseqüentemente, as condições edafoclimáticas alteram o perfil físico-químico da planta, mesmo colhidas em estágio semelhante de maturação dos grãos, contemplando uma variação espacial, geográfica, tornando os modelos mais robustos.

Modelos NIR para previsão de proteína bruta (PB), digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica (DIVMO)

Variações sistemáticas nos espectros brutos da silagem de sorgo são observadas (Figura 2A), especialmente devido tamanho de partícula, espalhamento de luz no momento da coleta dos espectros. A fim de reduzir estes efeitos, foi aplicado a MSC, pode-se observar semelhanças no perfil espectral após aplicação do pré-tratamento (Figura 2B).

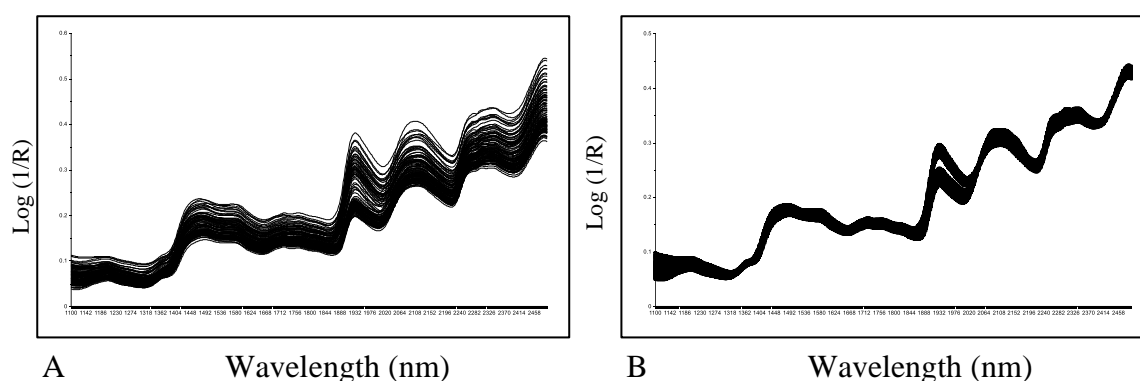


Figura 2 - Distribuição do perfil espectral das 105 amostras de silagens de sorgo, (A) Espectros brutos e (B) espectros aplicando o tratamento com MSC.

As amostras não foram consideradas significativamente diferentes dentro dos limites da elipse de Hotelling (estatística T2 de Hotelling), possibilitando que sejam trabalhadas em um único grupo no desenvolvimento de modelos para silagem de sorgo (Figura 3).

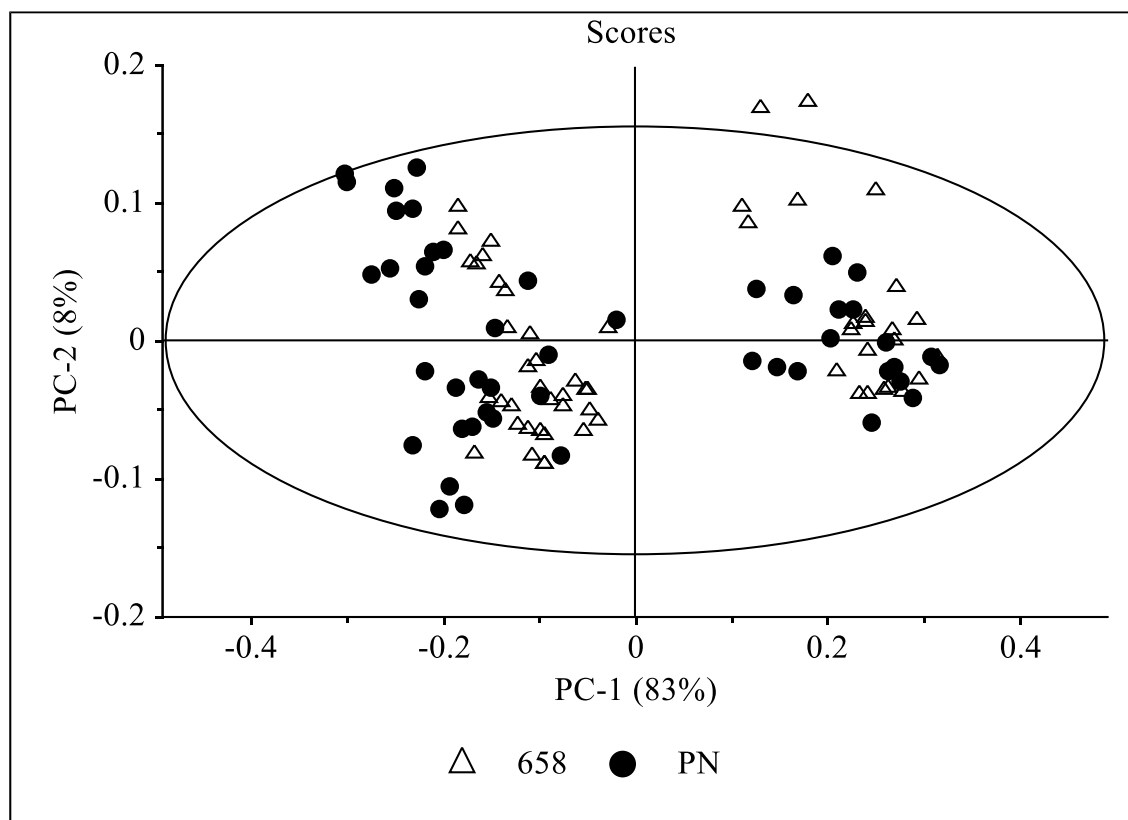


Figura 3 - Análise exploratória dos espectros de amostras de silagem de sorgo BRS 658 e BRS Ponta Negra, cultivadas em diferentes estados do Nordeste brasileiro e Norte de Minas Gerais com época de corte definida quanto ao estágio de maturação dos grãos (farináceo duro), e cultivadas no município de Sobral/CE, com épocas de corte definidas pelos estádios de maturação dos grãos (leitoso, pastoso e duro) PC1 (83%) versus PC2 (8%). Limites estabelecidos por elipse Hotelling (estatística T2 de Hotelling).

O valor médio observado para PB (8,04%) e valor mínimo (5,70%) (Tabela 2) está dentro da faixa de 4,5 a 8,2% registrada para silagens de sorgo (WHITE et al., 1988; LIMA et al., 2017). Verificou-se valor máximo de (13,59%) para PB. O sorgo pode conter teor de proteína de até 18% em seus grãos (ANTUNES et al., 2007). Deste modo, genótipos com maior quantidade de panículas também serão mais ricos em PB.

Para as digestibilidades (Tabela 2), observou-se que o valor médio de DIVMS (58,41%) e DIVMO (59,17%) das silagens de sorgo deste estudo, estão dentro do intervalo de 44,6 a 62,1%. Intervalo esse relatado na literatura na avaliação de diferentes cultivares de sorgo (WHITE et al., 1998; NEUMANN et al., 2002; ANTUNES NETO et al., 2016;). A maior amplitude nos valores de referência, tanto de proteína bruta, quanto de digestibilidade, indica que a estratégia empregada para formar o banco de dados foi satisfatória por obter uma ampla variação, o que contribui para acurácia e robustez dos modelos.

Tabela 2 - Estatística descritiva dos parâmetros de proteína bruta (PB), digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica (DIVMO) da silagem de sorgo

Parâmetro	N	Média (%)	Min/Máx (%)	DP
PB	105	8.04	5.70-13.59	1.52
DIVMS	105	58.41	33.90-79.14	12.73
DIVMO	105	59.17	35.17-80.17	12.31

N (número de amostras); Min/Máx (média mínima e máxima); DP (desvio padrão).

Os melhores modelos para PB foram aqueles que utilizaram a MSC + 1ª derivada *Savitzky-Golay* com 2 janelas (MSC + 1 Der 2), SNV e SNV + 2ª derivada *Savitzky-Golay* com 1 janela (SNV + 2 Der 1) (Tabela 3). Os parâmetros para avaliação de desempenho do melhor modelo para PB foram baseados nos valores mais altos de R² para calibração, validação e predição (0,78, 0,65 e 0,68 - SNV) respectivamente e menor RMSEC (0,68), RMSECV (0,87) e RMSEP (0,93), além do número de fatores (7).

Tabela 3 - Modelos de calibração e validação utilizando a regressão PLS para proteína bruta (PB), digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica (DIVMO) de silagens de sorgo utilizando diferentes tratamentos matemáticos

Pré-tratamentos	Calibração			Validação		Predição	
	N	R ²	RMSEC	R ²	RMSECV	R ²	RMSEP
PB							
MSC	5	0.68	0.83	0.58	0.96	0.50	1.15
SNV	7	0.78	0.68	0.65	0.87	0.68	0.93
MSC + 1 Der	4	0.68	0.83	0.58	0.98	0.48	1.18
MSC + 1 Der 2	5	0.70	0.80	0.57	0.99	0.57	1.08
SNV + 2 Der 1	3	0.72	0.78	0.58	0.96	0.52	1.13
DIVMS							
SG1.1	7	0.79	5.96	0.69	7.42	0.58	6.96
SG1.2	7	0.74	6.71	0.63	8.07	0.64	6.40
MSC + 1 Der 2	5	0.70	7.27	0.61	8.35	0.54	7.22
MSC + 2 Der 2	3	0.66	7.67	0.57	8.73	0.62	6.63
MSC + 2 Der 4	3	0.66	7.75	0.58	8.62	0.50	7.55
DIVMO							
SNV	4	0.65	7.67	0.60	8.36	0.68	5.57
SG2.2	4	0.72	6.84	0.61	8.18	0.48	7.09
MSC + 1 Der 3	6	0.82	5.36	0.72	6.68	0.56	6.54
MSC + 1 Der 4	3	0.63	7.93	0.58	8.55	0.58	6.38
SNV + 1 Der 4	5	0.71	6.95	0.61	8.34	0.49	7.01

N = Número de fatores; R² = coeficiente de determinação; RMSEC = erro da raiz quadrada média da calibração; RMSECV = erro da raiz quadrada média da validação cruzada; RMSEP = erro da raiz quadrada média da predição. MSC= Correção Multiplicativa de Sinal; SNV= Variação Normal Padrão; 1 Der = 1ª derivada; 2 Der = 2ª derivada. SG1 – Derivadas *Savitzky-Golay*, primeira derivada.

Na avaliação do desempenho dos modelos de DIVMS os parâmetros para avaliação foram baseados no equilíbrio dos valores mais altos de R² para calibração, validação e predição (0,79, 0,69, 0,58 SG+1Der) e menor RMSEC, RMSECV e RMSEP (5,96, 7,42, 6,96) respectivamente.

Para DIVMO o modelo MSC + 1ª derivada *Savitzky-Golay* com 3 janelas (MSC+1Der3) foi o que apresentou maior desempenho por ter apresentado maior R² e menor erro na calibração, validação e predição.

Verifica-se que o modelo para proteína bruta utilizando o tratamento SNV, apresentou maior R² de calibração (0,78) e com maior R² de validação cruzada (0,65) e menor RMSEC (0,68), porém com um maior número de fatores utilizados (7) (Figura 4A). Na realização da predição, verificou-se um aumento do R² (0,68) e do RMSEP (0,93) demonstrando, portanto, a capacidade de predição do modelo.

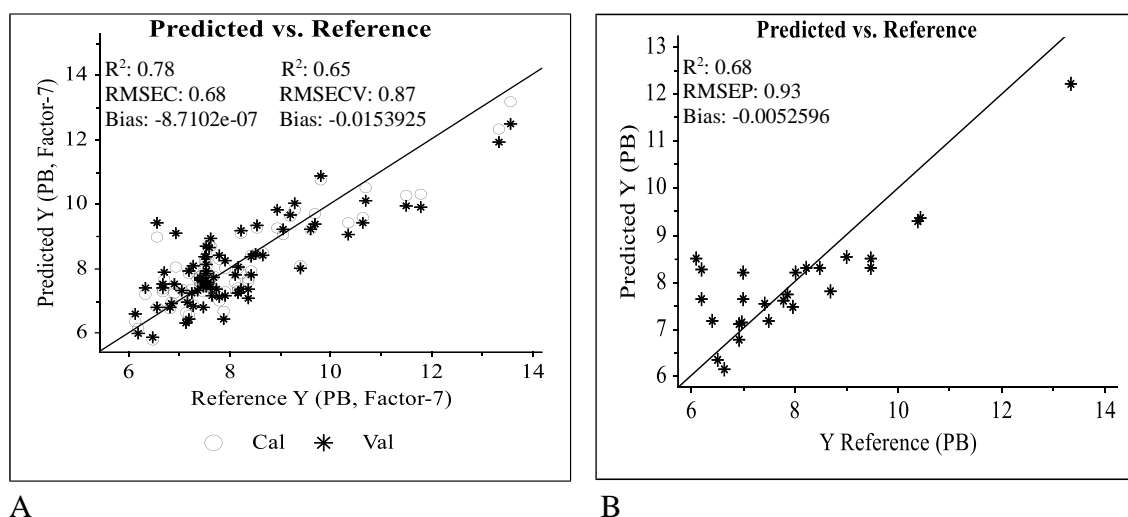


Figura 4 - Modelos de calibração e validação (validação cruzada) utilizando o tratamento SNV (A) e PLS da validação do modelo de silagem de sorgo para proteína bruta (B).

Observa-se que o modelo SG+1Der para DIVMS (Figura 5) apresentou maior R² na calibração, validação e predição (0,79, 0,69, 0,58) e menor RMSEC, RMSECV e RMSEP (5,96, 7,42, 6,96) respectivamente. Assim como o modelo MSC+1Der3 para DIVMO (Figura 6) apresentou maior R² na calibração, validação e predição (0,82, 0,72, 0,56) e menor RMSEC, RMSECV e RMSEP (5,37, 6,68, 6,54) respectivamente.

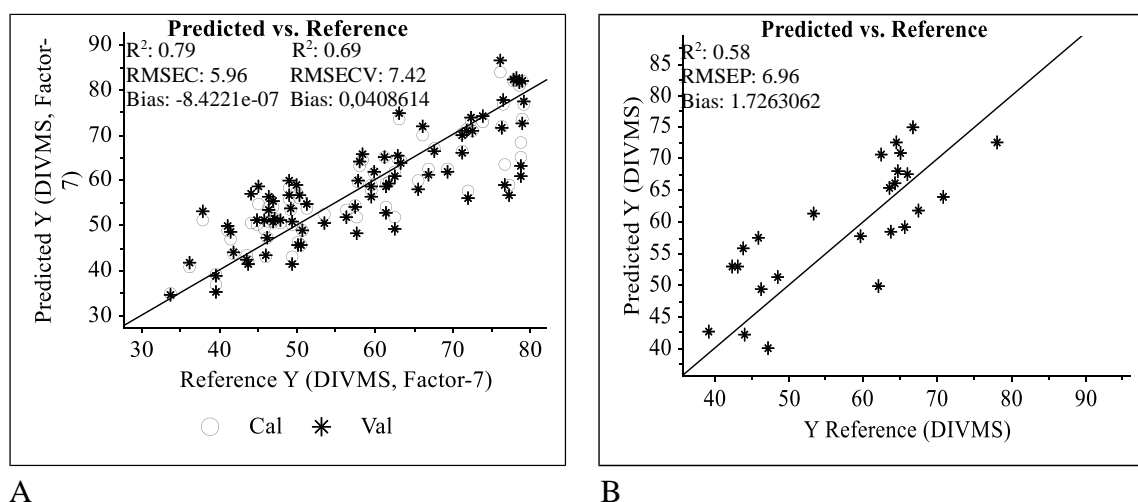
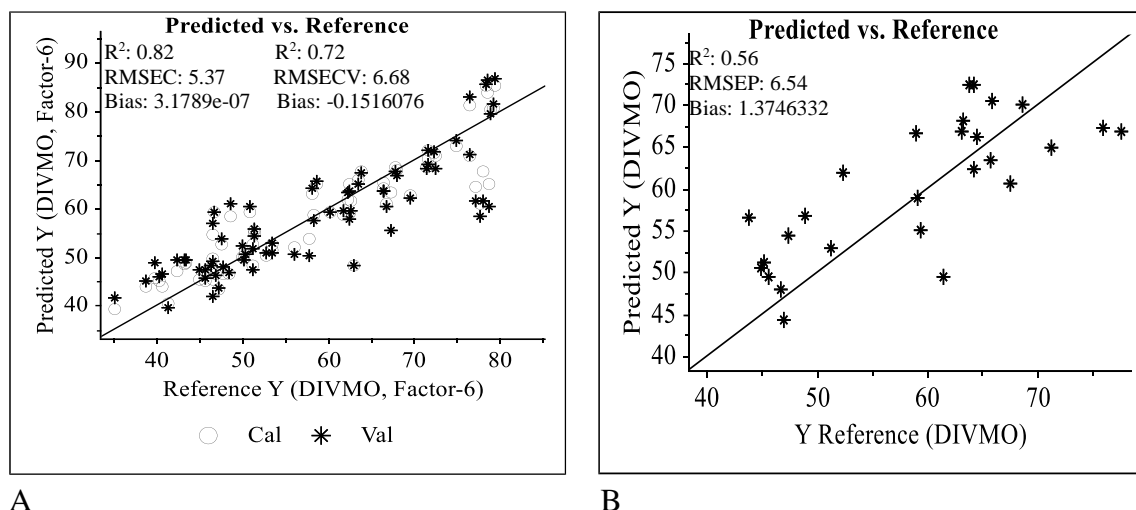


Figura 5 - Modelos de calibração e validação (validação cruzada) utilizando o tratamento SG+1Der (A) e PLS da validação do modelo de silagem de sorgo para digestibilidade *in vitro* da matéria seca (B).



A

B

Figura 6 - Modelos de calibração e validação (validação cruzada) utilizando o tratamento MSC+1Der3 (A) e PLS da validação do modelo de silagem de sorgo para digestibilidade da matéria orgânica (B).

Os modelos de previsões dos teores de digestibilidade (Figura 5 e 6), por ser uma análise mais laboriosa quando confrontada com o observado na análise de proteína bruta, em geral agregam maior erro em função da dificuldade de estimativa do teor de digestibilidade, o que resulta na inserção de erros sistemáticos e aleatórios nos modelos de previsão (OLIVEIRA, 2005). No entanto, os modelos para digestibilidade mostraram-se também coerentes, possivelmente devido ao planejamento experimental, e à análise criteriosa nos dados de referência resultando em pertinentes resultados observados nos modelos.

A análise estatística das médias dos valores preditos pelos modelos selecionados em relação aos valores de laboratório (Teste F) demonstrou não haver diferença significativa ($p < 0,05$), para nenhuma das variáveis analisadas (Tabela 4), confirmando a capacidade preditiva do modelo.

Tabela 4 - Parâmetros estatísticos de validação externa dos modelos proteína bruta (PB), digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) e digestibilidade da matéria orgânica (DIVMO) da silagem de sorgo

Silagem	Parâmetro	N	Pré-tratamento	Previsão	Referência
Sorgo	PB	26	SNV	7.95**	7.96
Sorgo	DIVMS	25	SG+1Der	59.35**	57.63
Sorgo	DIVMO	27	MSC+1Der	60.24**	58.87

N (número de amostras); MSC= Correção Multiplicativa de Sinal; SNV= Variação Normal Padrão; 1 Der= 1ª derivada; SG1 – Derivadas *Savitzky-Golay*, 1ª derivada. **Valores de previsão não diferem estatisticamente do valor de referência pelo teste de F a 5% de significância.

Conclusão

A espectroscopia no infravermelho próximo associada às técnicas de quimiometria, previu com acurácia os teores de proteína bruta, digestibilidade *in vitro* da matéria seca e digestibilidade *in vitro* da matéria orgânica de silagens de cultivares de sorgo – BRS Ponta Negra e o BRS 658.

Conflitos de interesse

Não houve conflito de interesses dos autores.

Contribuição dos autores

Valcicleide Oliveira dos Santos - trabalho da dissertação de mestrado, coleta de dados, interpretação, escrita; Marco Aurélio Delmondes Bomfim - orientador da primeira autora, ideia original, revisão e correção; Sueli Freitas dos Santos - coleta de dados, revisão e correção; Rafael Gonçalves Tonucci - revisão e correção; Ana Clara Rodrigues Cavalcante - revisão e correção; Igor Cassiano Saraiva Silva - coleta de dados; Ana Karina de Lima Chaves - coleta de dados; Patrício Leandro Pereira - coleta de dados.

Referências bibliográficas

- ANTUNES NETO, O.; CALIXTO, A. M.; CHAVES, F. F.; PESSOA, S. T. Produção de silagem de sorgo BRS Ponta Negra em pequenas propriedades no Norte de Minas Gerais. In: CONGRESSO NACIONAL DE MILHO E SORGO, 31. Bento Gonçalves. Milho e sorgo: inovações, mercados e segurança alimentar. **Anais...** Sete Lagoas: Associação Brasileira de Milho e Sorgo, 2016. <http://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/handle/doc/1055647>
- ANTUNES, R. C.; RODRIGUES, N. M.; GONÇALVES, L. C.; RODRIGUES, J. A. S.; BORGES, I.; BORGES, A. L. C. C.; SALIBA, E. O. S. Composição bromatológica e parâmetros físicos de grãos de sorgo com diferentes texturas do endosperma. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v. 59, n. 5, p. 1351-1354, 2007. <https://doi.org/10.1590/S0102-09352007000500042>
- AOAC. Association of Official Analytical Chemists. **Official Methods of Analysis**. 18th ed. Rev. Gaithersburg, Maryland, USA, 2010, 3000p.
- BARROS, C. S.; MONTEIRO, A. L. G.; POLI, C. H. E. C.; DITTRICH, J. R.; CANZIANI, J. R. F.; FERNANDES, M. A. M. Rentabilidade da produção de ovinos de corte em pastagem e em confinamento. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 38, n. 11, p. 2270-2279, 2009. <https://doi.org/10.1590/S1516-35982009001100029>
- BROWN, C. D.; VEGA-MONTOTO, L.; WENTZELL, P. D. Derivative preprocessing and optimal corrections for baseline drift in multivariate calibration. **Applied Spectroscopy**, v. 54, n. 7, p. 1055-1068, 2000. <https://doi.org/10.1366/0003702001950571>
- CHEN, Y.; XIE, M.; ZHANG, H.; WANG, Y., NIE, S; E LI, C. Quantification of total polysaccharides and triterpenoids in *Ganoderma lucidum* and *Ganoderma atrum* by near infrared spectroscopy and chemometrics. **Food Chemistry**, v. 135, p. 268-275, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2012.04.089>
- GELADI, P.; KOWALSKI, B. R. Partial least regression: a tutorial. **Analytica Chimica Acta**, v. 185, p. 1-17, 1986. [https://doi.org/10.1016/0003-2670\(86\)80028-9](https://doi.org/10.1016/0003-2670(86)80028-9)
- HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. **Journal of Educational Psychology**, v. 24, n. 6, p. 417-441, 1933. <https://doi.org/10.1037/h0071325>
- INMET. Instituto Nacional de Meteorologia. **Dados históricos de Sobral - CE, em 2019**. Disponível em: <http://www.inmet.gov.br/portal/index.php?r=home/page&page=rede_estacoes_auto_grf>. Acesso em 20 jan. 2020.
- LIMA, L. O. B.; PIRES, D. A. A.; MOURA, M. M. A.; RODRIGUES, J. A. S.; TOLENTINO, D. C.; VIANA, M. C. M. Agronomic traits and nutritional value of forage sorghum genotypes. **Acta Scientiarum. Animal Sciences**, v. 39, n. 1, p. 7-12, 2017. <https://doi.org/10.4025/actascianimsci.v39i1.32356>
- LYONS, R. K.; STUTH, J. W. Fecal NIRS equations for predicting diet quality of free-ranging cattle. **Journal of Range Management**, v. 45, n. 3, p. 238-244, 1992. <http://hdl.handle.net/10150/644711>

- LYRA, W. D. S.; SILVA, E. C. D.; ARAÚJO, M. C. U. D.; FRAGOSO, W. D.; VERAS, G. Classificação periódica: um exemplo didático para ensinar análise de componentes principais. **Química Nova**, v. 33, n. 7, p. 1594-1597, 2010. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422010000700030>
- MCDONALD, P.; HENDERSON, A. R.; HERON, S. J. E. **The Biochemistry of Silage**. 2nd ed. Aberystwyth: Chalcombe Publications, 1991, 340p.
- NEUMANN, M.; RESTLE, J.; ALVES FILHO, D. C.; BRONDANI, I. L.; PELLEGRINI, L. G.; FREITAS, A. K. Avaliação do valor nutritivo da planta e da silagem de diferentes híbridos de sorgo (*Sorghum bicolor*, L. Moench). **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 31, n. 1, p. 293-301, 2002. <https://doi.org/10.1590/S1516-35982002000200002>
- NEUMANN, M.; RESTLE, J.; NÖRNBERG, J. L.; ALVES, D. C.; MELLO, R. O.; SOUZA, A. N. M.; PELLEGRINI, L. G. Avaliação da qualidade e do valor nutritivo da silagem de híbridos de sorgo (*Sorghum bicolor*, L. Moench). **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 3, n. 1, p. 120-133, 2004. <https://doi.org/10.18512/1980-6477/rbms.v3n01p%25p>
- NEUMANN, M.; RESTLE, J.; NÖRNBERG, J. L.; OLIBONI, R.; PELLEGRINI, L. G.; FARIA, M. V.; OLIVEIRA, M. R. Efeito associativo do espaçamento entre linhas de plantio, densidade de plantas e idade sobre o desempenho vegetativo e qualitativo do sorgo forrageiro. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 7, n. 2, p. 165-181, 2008. <https://doi.org/10.18512/1980-6477/rbms.v7n02p%25p>
- OLIVEIRA, T. F. **Análise das incertezas na quantificação de fase pelo método de Rietveld em análise de pó por difração de raios X**. 161p. Tese (Doutorado). Departamento de Engenharia de Industrial, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, 2005. <https://doi.org/10.17771/PUCRio.acad.6377>
- ONÓRIO, D. F.; SEIXAS, F. A. V. Uso de FT – NIR para a identificação e quantificação de microrganismos em alimentos. **Uningá Review**, v. 3, n. 1, p. 62-70, 2010. <https://revista.uninga.br/uningareviews/article/view/495>
- PASQUINI, C. Near Infrared Spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 14, n. 2, p. 198-219, 2003. <https://doi.org/10.1590/S0103-50532003000200006>
- PEREIRA FILHO, I. A.; PARRELLA, R. A. C.; MOREIRA, J. A. A.; MAY, A.; SOUZA, V. F.; CRUZ, J. C. Avaliação de cultivares de sorgo sacarino [*Sorghum bicolor* (L.) Moench] em diferentes densidades de semeadura visando a características importantes na produção de etanol. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 12, n. 2, p. 118-127, 2013. <https://doi.org/10.18512/1980-6477/rbms.v12n2p118-127>
- PINHO, R. G.; FIORINI, I. V. A.; SANTOS, A. O. Botânica de planta do sorgo. In: BORÉM, A.; PIMENTEL, I.; PARELLA, R. (Eds.). **Sorgo do plantio à colheita**. Ed UFV, p. 37-57, 2014.
- REZENDE, G. M.; PIRES, D. A. A.; BOTELHO, P. R. F.; JÚNIOR, V. R. R.; SALES, E. C. J.; JAYME, D. G.; REIS, S. T.; PIMENTEL, L. R.; LIMA, L. O. B.; KANEMOTO, E. R.; MOREIRA, P. R. Características agrônomicas de cinco genótipos de sorgo [*Sorghum bicolor* (L.) Moench], cultivados no inverno, para a produção de silagem. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 10, n. 2, p. 171-179, 2011. <https://doi.org/10.18512/1980-6477/rbms.v10n2p171-179>
- RIBEIRO, C. G. M.; GONÇALVES, L. C.; RODRIGUES, J. A. S.; RODRIGUEZ, N. M.; BORGES, I.; BORGES, A. L. C. C.; SALIBA, E. O. S.; CASTRO, G. H. F.; RIBEIRO JUNIOR, G. O. Padrão de fermentação da silagem de cinco genótipos de sorgo. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v. 59, n. 6, p. 1531-1537, 2007. <https://doi.org/10.1590/S0102-09352007000600028>
- SANTOS, G. R. A. **Caracterização da vegetação e da dieta de ovinos em área de Caatinga no Sertão de Pernambuco**. 135f. Tese (Programa de Pós-Graduação em Zootecnia) – Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2007. <http://www.tede2.ufrpe.br:8080/tede2/handle/tede2/6819>

- SENGER, C. C. D.; KOZLOSKI, G. V.; SANCHEZ, L. M. B.; MESQUITA, F. R.; ALVES, T. P.; CASTAGNINO, D. S. Evaluation of autoclave procedures for fibre analysis in forage and concentrate feedstuffs. **Animal Feed Science and Technology**, v. 146, n. 1/2, p. 169-174, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2007.12.008>
- SILVA, D. J. **Análise de Alimentos (Métodos Químicos e Biológicos)**. 2ª ed. FV, Vicosa, MG, 1990, 165p.
- SILVA, D. J.; QUEIROZ, A. C. **Análise de Alimentos: Métodos Químicos e Biológicos**. 3ª ed. UFV, Viçosa, MG, 2006, 235p.
- TILLEY, J. M. A.; TERRY, R. A. A two-stage technique for the in vitro digestion of forage crops. **Journal of British Grassland Society**, v. 18, n. 2, p. 104-111, 1963. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2494.1963.tb00335.x>
- WHITE, J.; BOLSEN, K.; KIRCH, B. PFAFF, L. **Selecting forage sorghum cultivars for silage**. Manhattan: Kansas Agricultural Experimental Station, 1988, 8p. (KSU. Report of Progress, 539).
- WILLIAMS, P. C.; NORRIS, K. H. Implementation of near-infrared technology. *In: **Near-Infrared Technology in the Agricultural and Food Industries***. 2ª ed. St. Paul: American Association of Cereal Chemists, p. 145-169, 2001.
- WILLIAMS, P. C.; SOBERING, D. C. Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 1, n. 1, p. 25-33, 1993. <https://doi.org/10.1255/jnirs.3>

Recebido em 16 de janeiro de 2023
Retornado para ajustes em 25 de março de 2023
Recebido com ajustes em 28 de março de 2023
Aceito em 2 de abril de 2023