

NATHÁLIA VELOSO TRÓPIA

**MODELOS DE CALIBRAÇÃO PARA PREDIÇÃO DOS CONSTITUINTES DA
CANA-DE-AÇÚCAR, FARELO DE SOJA, FUBÁ DE MILHO E TECIDOS DA
CARÇA DE BOVINOS POR NIR PORTÁTIL**

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do programa de Pós-Graduação em Zootecnia, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

Orientador: Sebastião de Campos Valadares Filho

Coorientador: Mario Luiz Chizzotti

**VIÇOSA - MINAS GERAIS
2022**

**Ficha catalográfica elaborada pela Biblioteca Central da Universidade
Federal de Viçosa - Campus Viçosa**

T

Trópia, Nathália Veloso, 1996-

T856m
2022

Modelos de calibração para predição da composição dos
constituintes da cana-de-açúcar, farelo de soja, fubá de milho e
tecidos da carcaça de bovinos por NIR portátil / Nathália Veloso
Trópia. – Viçosa, MG, 2022.

1 dissertação eletrônica (76 f.): il. (algumas color.).

Orientador: Sebastião de Campos Valadares Filho.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Viçosa,
Departamento de Zootecnia, 2022.

Inclui bibliografia.

DOI: <https://doi.org/10.47328/ufvbbt.2022.298>

Modo de acesso: World Wide Web.

1. Bovinos - Nutrição. 2. Carne de boi - Qualidade.
3. Quimiometria. 4. Espectroscopia de infravermelho. I. Filho,
Sebastião de Campos Valadares, 1955-. II. Universidade Federal
de Viçosa. Departamento de Zootecnia. Programa de
Pós-Graduação em Zootecnia. III. Título.

CDD 22. ed. 636.20852

Bibliotecário(a) responsável: Bruna Silva CRB6/2552

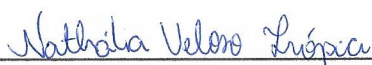
NATHÁLIA VELOSO TRÓPIA

**MODELOS DE CALIBRAÇÃO PARA PREDIÇÃO DOS CONSTITUINTES DA
CANA-DE-AÇÚCAR, FARELO DE SOJA, FUBÁ DE MILHO E TECIDOS DA
CARCAÇA DE BOVINOS POR NIR PORTÁTIL**

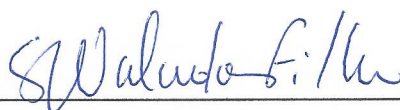
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do programa de Pós-Graduação em Zootecnia, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

APROVADA: 21 de fevereiro de 2022.

Assentimento:



Nathália Veloso Trópia
Autora



Sebastião de Campos Valadares Filho
Orientador

AGRADECIMENTOS

A minha família, Mônica, Camila, Edelweiss e Heitor por sempre me incentivar e acreditarem que eu seria capaz de superar os obstáculos.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pela concessão da bolsa de estudos.

À Universidade Federal de Viçosa, pela oportunidade de realizar a pós-graduação.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

Ao meu professor e orientador, Sebastião de Campos Valadares Filho pelas valiosas contribuições dadas durante todo o processo do mestrado.

Aos membros da banca, Flávia Sales, Diego Zanetti, Mario Luiz Chizzotti e Jussara Roque pelo aceite de participar da banca e auxílio durante a correção desta dissertação.

A Rizielly Vilela por conduzir as análises e fornecer os dados de qualidade da carne e carcaça utilizados nesta dissertação.

Aos meus amigos, Dhones, Jardeson, Flávia, Éllem, Paulo, Yuri, Cecilia e Luiz pela amizade, irmandade, risadas, descontração e ajuda. Além de atenção sempre quando precisei.

A Flávia pelo apoio durante minha passagem pelo Departamento de Zootecnia e pela ajuda durante o desenvolvimento desta dissertação.

Aos meus amores Frederico, Valquíria, Theodoro, Maria Benedita e Oliver, por me proporcionarem momentos de paz e alegria e ao Bento pela oportunidade de aprendizado.

A equipe do LabNUR (estudantes de pós-graduação, bolsistas e estagiários), por contribuir com a minha pesquisa ao auxiliar com a condução das análises que permitiram os resultados, auxiliar com problemas técnicos diários no laboratório e sempre sanar dúvidas quando precisei.

Também agradeço aos funcionários do DZO-UFV Mauro, Pinguim e Edson que contribuíram direta e indiretamente para a conclusão deste trabalho, sempre disponíveis para auxiliar quando necessário.

BIOGRAFIA

NATHÁLIA VELOSO TRÓPIA, filha de Mônica Veloso Lio Trópia e Eduardo Augusto Lio Trópia, nasceu em Belo Horizonte, Minas Gerais, em 20 de setembro de 1996.

Em janeiro de 2020, graduou-se em Zootecnia pela Universidade Federal de Viçosa.

Em março de 2020, iniciou o curso de Mestrado em Zootecnia, pelo Departamento de Zootecnia da Universidade Federal de Viçosa, concentrando seus estudos na área de Avaliação de Alimentos e Produção e Nutrição de Ruminantes, submetendo-se à defesa da dissertação em 21 de fevereiro de 2022.

RESUMO

TRÓPIA, Nathália Veloso, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, fevereiro de 2022. **Modelos de calibração para predição dos constituintes da cana-de-açúcar, farelo de soja, fubá de milho e tecidos da carcaça de bovinos por NIR portátil.** Orientador: Sebastião de Campos Valadares Filho. Coorientador: Mario Luiz Chizzotti.

Os objetivos deste estudo foram desenvolver e avaliar modelos para a predição da composição química de cana-de-açúcar, farelo de soja, fubá de milho e da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de fêmeas Nelore, bem como os parâmetros de qualidade de carcaça de bovinos a partir da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas por NIR portátil comparando com técnicas quimiométricas. Foram utilizadas 95 amostras de cana-de-açúcar, 92 amostras de farelo de soja, 120 amostras de fubá de milho e 60 amostras da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de bovinos abatidos no Frigorífico Escola do Departamento de Zootecnia da Universidade Federal de Viçosa. Os valores referência foram obtidos através de análises químicas convencionais. Para a construção dos modelos as amostras foram secas e moídas. Após o processamento, foi realizada aquisição dos espectros de cada amostra de alimentos. Os espectros das seções compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de bovinos foram obtidos um dia após ao abate e em dois pontos (P1 contendo apenas carne e P2 apenas gordura) *in natura*. Para construção dos modelos de regressão foi utilizada a regressão por quadrados mínimos parciais e a validação cruzada *leave one out*. Os modelos com menor raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada foram submetidos a validação externa. Para avaliar a qualidade de ajuste dos modelos, os atributos estimados pelo NIR portátil e pelos métodos laboratoriais convencionais foram comparados utilizando-se o *software Model Evaluation System*. Os modelos construídos para todos os constituintes de todos alimentos avaliados estimaram corretamente os conteúdos propostos, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,056$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição. Os modelos construídos para predição da composição química da seção compreendida entre as 9ª e a 11ª costelas de fêmeas Nelore a partir de espectro NIR obtido a partir de diferentes pontos em amostras *in natura* apresentaram alta precisão para determinação dos componentes químicos das frações carne+gordura e seção completa (carne + gordura + ossos; $R^2 \geq 0,056$). Os modelos de regressão construídos para predição dos parâmetros de qualidade de carne e carcaça de bovinos a partir da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas estimaram corretamente os atributos propostos, com exceção daqueles para predição de intensidade de

vermelho e intensidade de amarelo a partir de P1 e espessura de gordura subcutânea a partir de P2, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,083$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição. Os modelos de regressão por NIR portátil estimaram acuradamente a composição química dos alimentos assim como dos atributos de qualidade de carne e carcaça e, portanto, são recomendados para estimar os componentes propostos. Adicionalmente, o espectro NIR obtido a partir de diferentes pontos em amostras *in natura* tem potencial para ser utilizado como uma ferramenta para predição da composição química da seção compreendida entre as 9ª e a 11ª costelas de fêmeas Nelore.

Palavras-chave: Alimentos. Carne. Quimiometria.

ABSTRACT

TRÓPIA, Nathália Veloso, M.Sc., Universidade Federal de Viçosa, February 2022. **Calibration models for predicting the constituents of sugarcane, soybean meal, cornmeal and bovine carcass tissues by portable NIR.** Adviser: Sebastião de Campos Valadares Filho. Co-adviser: Mario Luiz Chizzotti.

The aim of this study was to develop and evaluate models to predict the composition and chemistry of sugarcane, soybean meal, soybean cornmeal, integration between the 9th and 11th ribs of Nellore females, as well as carcass quality parameters. of cattle from the section comprised between the 9th and 11th ribs by portable NIR comparing with chemometric techniques 95 samples of sugarcane-used-sugar, 92 samples of soybean meal, 120 samples of cornmeal, and 60 samples of the integrated section between the 9th and 11th ribs of bovines slaughtered at the Frigorífico Escola of the Animal Science Department of the Federal University of Viçosa. They were produced using The default reference values. For the construction of the models, samples were dried and ground. After processing, the spectra of each food sample were acquired. The sections selected between two spectra the 9th and 11th ribs of cattle were obtained one day after slaughter and one day after collection (P1 containing only meat and P2 only fat) in natura. For building toolsets and combo models of models leave out one. Models with the smallest root-mean-square validation error were protected by external validation. To evaluate the goodness of fit of the models, the attributes by the best portable and experimental methods for the NIR software compared with the use of the model evaluation system. The models built for all elements of all foods correctly estimated the proposed contents since they do not reject equal ($P \geq 0.056$) as a hypothesis of interception at zero and equal to one, indicating predictive capacity. Models built from different points of the chemical composition of the section and prediction between the 9th rib of Nellore females from specific points in exact natura analysis to determine the chemical components of the meat+gor section and complete fractions (meat + fat + bones; $R^2 \geq 0.056$). The 9 original and robust quality models for the built quality and original quality models among the 11th correctly designed construction models for the correctly designed attributes, except the original quality and robustness models from the P1 strength and thickness of subcutaneous fat from P2, since they do not reject one ($P \geq 0.083$) as zero interception and equal slope hypotheses, indicating good predictive ability. The chemical and quality models proposed by portable NIR are designed as a composition of the food and as well as the carcass and carcass attribute recommended to estimate the components. Additionally, the NIR from different points in the sample was used

as a tool to predict the chemical composition of the section comprising the 9th and 11th ribs of Nellore females.

Keywords: Chemometrics. Feed. Beef.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO GERAL	10
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	13
CAPÍTULO 1 - Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição da composição da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho.....	16
RESUMO	16
INTRODUÇÃO	17
MATERIAL E MÉTODOS	18
RESULTADOS	21
DISCUSSÃO.....	23
CONCLUSÃO	25
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	26
CAPÍTULO 2 - Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição da composição de tecidos e de parâmetros de qualidade de carne da carcaça de bovinos.....	45
RESUMO	45
INTRODUÇÃO	47
MATERIAL E MÉTODOS	48
RESULTADOS E DISCUSSÃO	52
CONCLUSÃO	58
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	59
CONCLUSÃO GERAL	76

INTRODUÇÃO GERAL

Devido as condições edafoclimáticas assim como extensão territorial, o Brasil é considerado o celeiro mundial. Grande parte dos alimentos produzidos no país são direcionados para a alimentação animal, como para a produção de carne bovina. A indústria brasileira de carne bovina se destaca mundialmente.

O Brasil é o país com o segundo maior rebanho bovino no planeta, além de ser o segundo maior produtor e maior exportador de carne (ANUALPEC, 2020). Grande parcela da produção de bovinos de corte está centralizada na produção a pasto (Martins et al., 2021), na qual as forrageiras são utilizadas como principal fonte de alimentos. As plantas nestas condições estão sujeitas às variações climáticas ocorrentes entre as estações do ano e, assim, a estacionalidade produtiva.

Nesse sentido, outros alimentos são geralmente necessários para a produção eficiente de carne bovina, sejam eles utilizados como fonte primária de alimento ou utilizado apenas em épocas em que há escassez de pastagens. A cana-de-açúcar é uma opção para suprir forragem nas épocas de escassez, tendo como principais características: baixo custo por tonelada de matéria seca produzida; elevada produção de MS e energia por área; boa disponibilidade; e a manutenção de seu valor nutricional durante a estação seca do ano (Moreira, 1983). Ainda, para que os animais produzam de maneira mais eficiente, as dietas devem ser balanceadas e, em geral, necessitam de ser compostas não apenas por alimentos volumosos, mas também, concentrados. Foi observado no último levantamento sobre as recomendações nutricionais adotadas por nutricionistas que a cana-de-açúcar é um dos alimentos mais utilizados como fonte de volumoso, enquanto o fubá de milho e o farelo de soja foram os alimentos mais utilizados como concentrados energéticos e proteicos, respectivamente, em confinamentos brasileiros (Silvestre e Millen, 2021).

No entanto, a correta formulação de dietas ainda é um grande entrave na pecuária de corte, visto que para uma produção mais eficiente e assim, sustentável, seria necessário que a dieta fosse ajustada para cada animal que vai consumi-la. Para formular uma dieta, é necessário conhecer a composição química dos alimentos fornecidos e as exigências nutricionais da categoria animal a ser atendida. As exigências nutricionais são definidas como a quantidade diária de nutrientes para se atingir um determinado nível de produção e dependem diretamente da composição química corporal dos animais.

Existem dois métodos para a determinação da composição da corporal, o direto e o indireto. O método direto consiste na dissecação completa de todos os componentes corporais

e suas análises físicas e químicas individuais. Este método, apesar de ser o mais acurado, possui alguns entraves por ser um método muito laborioso, demorado e caro (Valadares Filho et al., 2016). Existem também métodos indiretos para a determinação da composição da corporal, destacando-se o método desenvolvido por Hankins e Howe (1946), que através da correlação entre a composição da seção compreendida entre a nona e décima primeira costelas (seção HH) é possível estimar a composição física e química da carcaça de bovinos. Este método, além de ser menos oneroso, já que metade da carcaça não precisa ser descartada, é menos trabalhoso e demanda um tempo menor de amostragem e análise. Dessa forma, é crucial a determinação da composição química dessa seção.

Nesse contexto, a composição química de alimentos e de tecidos de bovinos pode ser obtida através de análises químicas convencionais. Porém, apesar dos métodos convencionais estimarem as composições químicas próximas às reais, esses são onerosos, laboriosos e demorados, além de poderem ser destrutivos e poluentes. Portanto, desenvolvimento de métodos alternativos que sejam rápidos, acurados e robustos é necessário.

Por conseguinte, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) em conjunto a técnicas quimiométricas surge como método alternativo aos métodos de análises convencionais. De acordo Blanco and Villarroya (2002), dentre as vantagens de utilizar a técnica espectroscópica NIR, destacam-se: não invasivo e não destrutivo, exige preparo mínimo da amostra, rápido, menor custo, com apenas uma medida é possível realizar diversas análises simultaneamente e é um método não poluente. Existem diferentes modelos de equipamentos NIR no mercado, sendo eles aparelhos de bancada ou até mesmo versões portáteis. Os aparelhos NIR portáteis vêm criando espaço, já que apresentam menor custo de aquisição e manutenção quando comparados as versões de bancada.

De fato, o NIR vem sendo utilizado para criar modelos de predição capazes de fornecer a composição de alimentos para animais de produção (Thomson et al., 2018) e tecidos animais em diversos países, como por exemplo: predição da composição química, física e de parâmetros de qualidade de carne (Dixit et al., 2017); determinação do teor de fibra em detergente ácido em palha de milho (Li et al., 2020); predição do teor de lignina em cana-de-açúcar (Assis et al., 2017); predição do teor de amido em fubá de milho (Jiang e Lu, 2018) e predição da composição química de forragens (Vranić et al., 2020). Contudo, diversos fatores podem alterar a composição química das amostras avaliadas, podendo modelos produzidas em outros países não serem adequados às condições brasileiras.

O desenvolvimento de modelos de predição a partir do NIR baseia-se no princípio da absorção de radiação por moléculas orgânicas. Isto ocorre porque os átomos de uma molécula apresentam movimentos vibracionais específicos para cada tipo de ligação covalente, podendo vibrar em frequências específicas para cada tipo de ligação. A frequência de vibração é dependente da massa dos átomos envolvidos na ligação e da força da ligação. Devido a estas características, quando as moléculas orgânicas são submetidas à radiação, elas se tornam susceptíveis aos efeitos das ondas eletromagnéticas, como: absorção, refração, reflexão e espalhamento. Esses efeitos dependem dos átomos ligantes e da faixa do espectro envolvido e a partir disso, é possível a identificação dos compostos (Silverstein et al., 2000).

A aquisição dos espectros se dá a partir da incidência de uma radiação, que no caso do NIR, é realizada na faixa de 750 a 2500 nm sobre a amostra (Pasquini, 2003). Após a incidência, um receptor capta a resultante da interação da radiação com os constituintes da amostra, registrando a refletância e transformando em absorbância (log/Refletância; Pasquini, 2018). Dessa forma, é gerado um banco de dados com a absorbância de cada faixa do espectro obtida pelo instrumento.

Para o desenvolvimento de modelos de predição é necessário aliar os espectros obtidos pelo equipamento NIR com técnicas quimiométricas. A quimiometria pode ser descrita como um ramo da química que utiliza modelos matemáticos e estatísticos para selecionar os melhores métodos de obtenção de dados multivariados (Hopke, 2003). Os dados são organizados em matrizes, sendo gerados: matriz X_{ij} com i linhas e j colunas, composta de variáveis independentes ou propriedades de interesse (sendo que cada linha corresponde a uma das amostras e as colunas às variáveis) e vetores y contendo as variáveis dependentes. Após realizar os primeiros passos, pode-se seguir para a realização de pré-tratamentos, calibração multivariada e validação.

Os pré-tratamentos são processos para a correção dos erros aleatórios e sistemáticos gerados (Pasquini, 2003) com objetivo de diminuir a variabilidade indesejada dos dados. Existem duas denominações para pré-tratamentos realizados: transformação e pré-processamento. Quando o pré-tratamento é realizado nas linhas de uma matriz, o procedimento é chamado transformação e nas colunas, pré-processamento. Para que seja possível a obtenção dos melhores resultados, devem ser aplicados diferentes transformações e pré-processamentos (pré-tratamentos).

Por fim, após o uso dos pré-tratamentos, procede-se com a calibração multivariada. Para a construção de modelos de predição, o método mais utilizado é o de calibração

multivariada através da regressão dos quadrados mínimos parciais (PLS). Neste método, o número de variáveis latentes (VL) do modelo é determinado por meio da validação cruzada, em que, o número de VL que apresentar menor erro de previsão é o ideal (Souza et al., 2013).

Alguns modelos de predição da composição química de alimentos usados para compor dietas de animais de produção já podem ser encontrados na literatura internacional. Contudo, a autora não está ciente da descrição de nenhum modelo para a predição da composição química de cana-de-açúcar, farelo de soja, fubá de milho ou de tecidos da carcaça de bovinos por NIR portátil na literatura nacional consultada. Mediante o exposto, assume-se como hipótese que modelos de predição da composição química por NIR portátil podem substituir os métodos convencionais de análise para predição da composição da cana-de-açúcar, farelo de soja, fubá de milho e tecidos da carcaça de bovinos. Dessa forma, propõe-se desenvolver e avaliar modelos para a predição da composição química de farelo de soja, fubá de milho e tecidos da carcaça de bovinos por NIR portátil.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANUALPEC. 2020. 20th ed. IS Markit, São Paulo.

Assis, C., R. S. Ramos, L. A. Silva, V. Kist, M. H. P. Barbosa, and R. F. Teófilo. 2017. Prediction of Lignin Content in Different Parts of Sugarcane Using Near-Infrared Spectroscopy (NIR), Ordered Predictors Selection (OPS), and Partial Least Squares (PLS). *Appl. Spectrosc.* 71:2001–2012. doi:10.1177/0003702817704147.

Blanco, M., and I. Villarroya. 2002. NIR spectroscopy: A rapid-response analytical tool. *TrAC - Trends Anal. Chem.* 21:240–250. doi:10.1016/S0165-9936(02)00404-1.

Dixit, Y., M. P. Casado-Gavaldà, R. Cama-Moncunill, X. Cama-Moncunill, M. Markiewicz-Keszycka, P. J. Cullen, and C. Sullivan. 2017. Developments and Challenges in Online NIR Spectroscopy for Meat Processing. *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* 16:1172–1187. doi:10.1111/1541-4337.12295.

Hankins, O. G., and P. E. Howe. 1946. Estimation of the composition of beef carcasses and cuts. US Department of Agriculture.

Hopke, P. K. 2003. The evolution of chemometrics. *Anal. Chim. Acta.* 500:365–377.

Jiang, H., and J. Lu. 2018. Using an optimal CC-PLSR-RBFNN model and NIR spectroscopy

for the starch content determination in corn. *Spectrochim. Acta - Part A Mol. Biomol. Spectrosc.* 196:131–140. doi:10.1016/j.saa.2018.02.017. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2018.02.017>

Li, J., L. Sun, R. Li, and Y. Lu. 2020. Application of siSVR-Vis/NIR to the nondestructive determination of acid detergent fiber content in corn straw. *Optik (Stuttg)*. 202:163717. doi:10.1016/j.ijleo.2019.163717. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163717>

Martins, M. M., H. F. S. Spolador, and E. Njuki. 2021. Production environment and managerial techniques in explaining productivity growth in Brazilian beef cattle production. *Agribusiness*. 1–15. doi:10.1002/agr.21722.

Moreira, H. A. 1983. Cana-de-açúcar na alimentação de bovinos. *Inf. Agropecuário*. v.9, n.108:14–16.

Pasquini, C. 2003. Near infrared spectroscopy: Fundamentals, practical aspects and analytical applications. *J. Braz. Chem. Soc.* 14:198–219. doi:10.1590/S0103-50532003000200006.

Pasquini, C. 2018. Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review. *Anal. Chim. Acta*. 1026:8–36. doi:10.1016/j.aca.2018.04.004. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004>

Silverstein, R. M., F. X. Webster, and D. J. Kiemle. 2000. *Identificação Espectrométrica de Compostos Orgânicos*. 6th ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora SA, Rio de Janeiro.

Silvestre, A. M., and D. D. Millen. 2021. The 2019 Brazilian Survey On Nutritional Practices Provided By Feedlot Cattle Consulting Nutritionists. *Rev. Bras. Zootec.* 50:1–25. doi:10.37496/RBZ5020200189.

Souza, A. M. De, M. C. Breikreitz, P. R. Filgueiras, J. José, R. Rohwedder, and R. J. Poppi. 2013. *Educação*. 36:1057–1065.

Thomson, A. L., D. J. Humphries, C. Rymer, J. E. Archer, N. W. Grant, and C. K. Reynolds. 2018. Assessing the accuracy of current near infra-red reflectance spectroscopy analysis for fresh grass-clover mixture silages and development of new equations for this purpose. *Anim. Feed Sci. Technol.* 239:94–106. doi:10.1016/j.anifeedsci.2018.03.009. Available

from: <https://doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2018.03.009>

Valadares Filho, S. de C., L. F. C. e Silva, M. P. Gionbelli, P. P. Rotta, M. I. Marcondes, M. L. Chizzotti, and L. F. Prados. 2016. Exigências Nutricionais de Zebuínos Puros e Cruzados - BR-CORTE. Editora Federal de Viçosa. Available from: http://editorascienza.com.br/pdfs/br_corte_tabela_brasileira_de_exigencias_nutricionais_pt.pdf

Vranić, M., K. Bošnjak, I. Rukavina, S. Glavanović, N. Pintić Pukey, A. Babić, and I. Vranić. 2020. Prediction of forage chemical composition by NIR spectroscopy. *J. Cent. Eur. Agric.* 21:554–568. doi:10.5513/JCEA01/21.3.2839. Available from: <https://jcea.agr.hr/en/issues/article/2839>

CAPÍTULO 1 - Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição da composição da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho

RESUMO – Esse trabalho teve como hipótese que as análises obtidas pelos métodos laboratoriais podem ser substituídas pelo NIRS. Objetivou-se desenvolver e avaliar modelos de regressão para a predição da composição química da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho por NIR portátil aliado a técnicas quimiométricas. Foram utilizadas 95 amostras de cana-de-açúcar, 92 amostras de farelo de soja e 120 amostras de fubá de milho. Os valores referência foram obtidos através de análises químicas convencionais e para isso, todas as amostras de alimentos foram secas e moídas a 1mm?. Após o processamento foi realizada aquisição dos espectros de cada amostra. Para construção dos modelos foi utilizada a regressão por quadrados mínimos parciais e a validação cruzada *leave one out*. Os modelos com menor raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada foram submetidos a validação externa. Para avaliar a qualidade de ajuste dos modelos, a composição química estimada pelo NIR portátil e pelos métodos laboratoriais convencionais foi comparada utilizando-se o *Model Evaluation System*. Os modelos construídos para todos os constituintes avaliados da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho estimaram corretamente os conteúdos propostos, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,056$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição. Os modelos de regressão construídos para predição dos teores de amostra seca em estufa a 55°C (ASA), e a 105°C (ASE), matéria seca (MS), matéria orgânica (MO), fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), FDN corrigida para cinzas e proteína (FDNcp), proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), proteína bruta (PB), carboidratos não fibrosos (CNF), e nutrientes digestíveis totais (NDT) da cana-de-açúcar; ASE, matéria mineral (MM), MO, FDN, FDA, FDN indigestível (FDNi), PB, NDT e amido de farelo de soja; e ASE, MM, PB do fubá de milho apresentaram elevada acurácia e precisão ($R^2 \geq 0,50$ e $CCC \geq 0,60$). Contudo os modelos de regressão construídos para predição dos teores de cinzas insolúveis em detergente neutro (CIDN) da cana-de-açúcar; extrato etéreo (EE) e CIDN do farelo de soja; e FDN, FDNi, CIDN, CNF e EE estimaram acuradamente os teores propostos, , porém foram pouco precisos ($R^2 \geq -0,04$ e $CCC \geq 0,03$). Conclui-se que os modelos de regressão por NIR portátil estimaram acuradamente e, portanto, são recomendados para estimar a composição química da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho.

Palavras-chave: Quimiometria. Espectroscopia. PLS.

INTRODUÇÃO

A cana-de-açúcar é uma das principais fontes de volumosos utilizada em confinamentos (Pinto e Millen, 2019; Silvestre e Millen, 2021); e sistemas de produção de leite brasileiros (Silva et al., 2019). Esta fonte de volumoso é importante devido principalmente ao seu baixo custo por tonelada de matéria seca (MS) produzida e sua disponibilidade e a manutenção de seu valor nutricional durante a estação seca (Moreira, 1983). Além dos alimentos volumosos, os alimentos concentrados também são fundamentais na alimentação animal, principalmente em sistemas produtivos mais intensivos (Millen et al., 2009; Pinto e Millen, 2019). Nesse sentido, o farelo de soja e o fubá de milho são frequentemente usados para compor as rações concentradas, além de serem produzidos em larga escala no país (CONAB, 2021).

Para o balanceamento de dietas é necessário o conhecimento da composição química dos alimentos. A composição química é tradicionalmente obtida através de análises químicas convencionais, que permitem estimar as composições químicas consideradas próximas às reais. Porém, a realização de análises químicas convencionais apresenta alguns pontos negativos como, por exemplo, o elevado custo, são geralmente laboriosas e podem ser inviáveis devido ao tempo demandado. Além disso, as análises químicas são destrutivas e poluentes devido à utilização de diversos reagentes químicos.

Nesse contexto, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) surge como uma alternativa aos métodos de análises químicas convencionais, visto que tem sido utilizada para criar modelos de predição capazes de fornecer a composição de alimentos para animais de produção (Thomson et al., 2018). Ainda, modelos de equipamentos NIR portáteis importados já podem ser encontrados no mercado, permitindo a aplicação da tecnologia a campo. No entanto, tendo em vista que a composição química dos alimentos pode variar de acordo com a região em que são produzidos, devido a fatores como tipo de solo, precipitação, utilização de fertilizantes e radiação, modelos de predição gerados em outros países podem não ser adequados às condições tropicais.

Assim, hipotetiza-se que modelos de predição por NIR portátil podem substituir os métodos convencionais de análise para predição da composição química da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho. Dessa forma, objetivou-se desenvolver e avaliar modelos de regressão para a predição dos teores de matéria seca em estufa a 55°C (ASA), matéria seca em estufa a 105°C (ASE), matéria seca (MS), matéria mineral (MM), matéria orgânica (MO), proteína bruta (PB), fibra insolúvel em detergente neutro (FDN), proteína insolúvel em detergente neutro (PIDN), cinzas insolúvel em detergente neutro (CIDN), FDN corrigida para

cinzas e proteína (FDN_{cp}), fibra insolúvel em detergente ácido (FDA), proteína insolúvel em detergente ácido (PIDA), extrato etéreo (EE), FDN indigestível (FDN_i), carboidratos não fibrosos (CNF), lignina (LIG), amido e nutrientes digestíveis totais (NDT) da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho por NIR portátil aliado à técnicas quimiométricas.

MATERIAL E MÉTODOS

Obtenção e preparo das amostras

Foram coletadas 95 amostras de cana-de-açúcar de diferentes cultivares (RB097021, RB107221, RB107414, RB867515, RB966928, RB107264, RB087218, RB057310, RM107418, RB107277, RB107235, RB107070, RB097012, RB107306, RB107020, RB107382, RB107210, RB107247, RB107060, RB107224, RB037059, CTC4, CTC9001, RB107076, RB987935, RB991532 e RB037076) e provenientes de diferentes municípios de Minas Gerais (Porto Firme, Timóteo, Barra Longa, Viçosa, Coimbra, Divinésia, Paula Candido, Ouro Preto, Felixlândia, Mariana e Oratórios).

Foram coletadas 120 amostras de fubá de milho de diferentes estados e municípios brasileiros, sendo eles: Ceará (Sertão Central), Distrito Federal (Brasília), Goiás (Mossâmedes, Caiapônia, Santa Fé de Goiás e Goianira), Maranhão (Balsas), Minas Gerais (Acaiaca, Aguanil, Alfenas, Alvinópolis, Barra Longa, Campo Belo, Coimbra, Contagem, Ervália, Fazenda Pimenta de Cima, Felixlândia, Formiga, Formoso, Granja Lago, Itatinga, Lagoa Dourada, Manga, Nazareno, Oratórios, Paraíba do Sul, Passos, Patos de Minas, Paula Cândido, Piranga, Porto Firme, Pratápolis, Rio Pomba, Santa fé de Minas, Timóteo, Tupaciguara, Uberlândia, Unai e Viçosa), Pará (Canoa do Pará), Piauí (Baixa grade), Paraná (Itatuba) e Rio de Janeiro (Três Rios).

Foram coletadas 92 amostras de farelo de soja, provenientes de diferentes estados e municípios brasileiros, sendo eles: Minas Gerais (Viçosa, Porto Firme, Piranga, Felixlândia, Coimbra, Alvinópolis, Formoso, Uberlândia, Primavera do leste, Rio Pomba e Oratórios), Goiás (Rio Verde, Palmeiras Goiás e Anápolis), Piauí (Uruçuí) e Maranhão (Porto Franco). As amostras foram coletadas em diferentes regiões, a fim de garantir suficiente variação da composição química para desenvolvimento e avaliação dos modelos.

Após a coleta, as amostras foram congeladas e imediatamente encaminhadas para o Laboratório de Nutrição de Ruminantes (LabNUR) da Universidade Federal de Viçosa (UFV) e conservadas em câmara fria (-10°C) para posteriores análises laboratoriais.

Composição das Amostras

Para obtenção dos dados de referência, uma amostra de aproximadamente 500 g de cada amostra de cana-de-açúcar foi seca a 55 °C por 72 horas em estufa de circulação de ar forçada. Em seguida, todos os alimentos foram moídos em moinho de facas a 1 e 2 mm para posteriores análises laboratoriais de ASA, ASE e MS (métodos INCT G-001/2, INCT G-003/1); PB (método INCT N-001/2); MM (método INCT M-001/2); EE (método INCT G-004/1); FDN (método INCT F-001/2); FDA (método INCT F-003/2) e as respectivas correções para cinzas (CIDN) e proteína (PIDN e PIDA; métodos INCT M-002/2, INCT M-003/2, INCT N-004/2, INCT N-005/2, respectivamente); FDN_i; e LIG (INCT F-008/2 e INCT F-005/02), segundo (Detmann et al., 2021).

O teor de amido foi obtido de acordo com (Silva et al., 2019). A quantificação dos CNF foi realizada de acordo com (Detmann et al., 2021), em que: $CNF = 100 - (\%PB + \%FDN_{cp} + \%EE + \%MM)$. O teor de NDT foi determinado a partir de equações propostas pelo (Valadares Filho et al., 2016): $NDT = PB_{vd} + CNF_{vd} + FDN_d + 2.25 \times EE_{vd} - FM_{NDT}$, em que PB_{vd} , CNF_{vd} e EE_{vd} são as frações verdadeiramente digestíveis de PB, CNF e EE, respectivamente; FDN_d é a fração digestível da FDN; FM_{NDT} a fração metabólica fecal total para o computo de NDT (que para bovinos de corte em crescimento e terminação adota-se valor igual a 7,13); e 2,25 a constante de Atwater para equações entre lipídeos e carboidratos.

A fração verdadeiramente digestível da PB (PB_{vd}) foi calculada como:

$$PB_{vd} = 0,95 \times (PB - PIDN) + \frac{kd}{kd+kp} \times \{PIDN \times [1 - e^{-(0,8188+1,1676 \times PIDA)}]\},$$

em que kd é a taxa de degradação da FDN potencialmente digestível (FDN_{pd} ; h^{-1}) e kp a taxa de passagem ruminal da FDN_{pd} (h^{-1}). Os valores de kd e kp estimados pelo CQBAL 4.0 (Valadares Filho et al., 2018) foram utilizados. A fração verdadeiramente digestível do CNF (CNF_{vd}) foi calculada como: $CNF_{vd} = 0,95 \times CNF$. A fração digestível da FDN foi calculada como:

$$FDN_d = \left[\frac{kd}{kd+kp} \times (FDN_{cp} - FDN_i) \right] \times FAI,$$

em que FAI é o fator de ajuste para digestibilidade intestinal ($FAI = 1,12$). A fração verdadeiramente digestível do EE foi calculada como: $EE_{vd} = 0,86 \times EE$.

Análises com NIR portátil

As amostras processadas a 1 mm foram homogeneizadas e cada uma delas foram divididas em três sub-amostras. As sub-amostras foram acondicionadas em placas de *petri* para subsequente leitura espectral (Figura 1). Os espectros das sub-amostras foram obtidos a partir

da leitura pontual das mesmas pelo NIR portátil (ITPhotonics S.r.l., modelo poliSPECNIR 900-1700, Breganze, Itália) com auxílio do *software* poliDATA (ITPhotonics S.r.l, Breganze, Itália). A coleta dos espectros ocorreu em sala climatizada, ajustada para manter a temperatura ambiente em 21°C. Assim, três espectros por amostra foram obtidos e registrados como absorbância, sendo absorbância igual a $\log(1/R)$, onde R é a refletância da amostra, na faixa de 884,9 e 1702,9 nm, medidos em intervalos de 3,2 nm. Por fim, foi realizada a média dos três espectros de cada amostra para posteriores análises dos dados. Os espectros utilizados para construção dos modelos estão apresentados na Figura 2.

Análises estatísticas

A partir das médias dos espectros coletados foi construída uma matriz denominada de matriz X para cada tipo de alimento avaliado, a qual comporta as informações das variáveis independentes do conjunto de dados. Cada linha da matriz X corresponde a uma amostra e cada coluna corresponde a um valor de absorbância para um determinado comprimento de onda. Foi criado também um segundo conjunto de informações, os vetores. Os vetores contêm as informações das propriedades químicas avaliadas (variáveis dependentes), sendo elas: ASA, ASE, MS, MO, PB, PIDN, CIDN, PIDA, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, LIG, CNF e NDT para a cana-de-açúcar; ASE, MM, MO, PB, PIDN, CIDN, PIDA, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, amido, CNF, e NDT para o fubá de milho; e ASE, MM, MO, PB, PIDN, CIDN, PIDA, EE, FDN, FDNcp, FDNi, FDA, amido, CNF, e NDT para o farelo de soja.

Inicialmente, foi realizada a remoção de *outliers* através dos testes T^2 de Hotelling, Q residual reduzido, Leverage e Y residual de *Student*. Após isto, as amostras foram divididas em dois conjuntos (75% calibração e 25% avaliação externa) usando o algoritmo de Kennard-Stone (Kennard e Stone, 1969), que seleciona as amostras com base em suas distâncias. Os arquivos contendo as médias dos espectros de cada amostra que foram utilizadas para a calibração foram importados para o software PLS-toolbox 8.2.1, que opera em ambiente Matlab 2019b (Math Works, Natick, USA) para subsequente tratamento matemático e/ou desenvolvimento dos modelos. O método de calibração multivariado através da regressão dos quadrados mínimos parciais (PLS) foi utilizado para o desenvolvimento dos modelos de calibração para cada constituinte químico.

Para a escolha da quantidade de variáveis latentes foi realizada a validação cruzada *leave one out*. Foram testados os tratamentos de correção de espalhamento multiplicativo, normalização, suavização, primeira e segunda derivada, correção da linha de base, centragem na média, normalização padronizada do sinal, Autoescalamento, detrend (Ferreira, 2015) e suas

combinações. Dentre os modelos gerados com os espectros que foram tratados, aqueles que apresentaram o menor valor para raiz do quadrado médio do erro da validação cruzada (RMSECV) foram submetidos à avaliação externa, sendo:

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n-1} (y_c - y_{cp})^2}{nc}};$$

em que: em que y_c representa os valores obtidos através de análises químicas de referência de cada uma das amostras na validação cruzada e y_{cp} os valores estimados para cada amostra na validação cruzada, e nc o número de amostras da validação cruzada.

As amostras do conjunto de validação cruzada (não selecionadas para o desenvolvimento dos modelos de predição) foram utilizadas para testar a qualidade de ajuste dos modelos gerados para estimar a composição química dos alimentos avaliados. Para isso, as composições químicas estimadas pelo NIR portátil e pelos métodos laboratoriais convencionais foram comparadas utilizando-se o *Model Evaluation System* (MES; Tedeschi, 2006).

A estimativa dos valores preditos foi comparada com os valores observados usando o seguinte modelo de regressão linear: $y = \beta_0 + \beta_1 \times X$, no qual X = valores preditos; y = valores observados; β_0 e β_1 = intercepto e inclinação. A regressão foi avaliada de acordo com as seguintes hipóteses: $H_0: \beta_0 = 0$ e $H_0: \beta_1 = 1$, e H_a : não H_0 . Os modelos foram considerados bons estimadores, quando o intercepto e a inclinação da regressão entre os valores preditos e observados foram iguais a zero e um, respectivamente. A qualidade de ajuste dos modelos de calibração também foi avaliada através do coeficiente de determinação (R^2), coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade (CCC) e quadrado médio do erro da predição (QMEP; Tedeschi, 2006) e de seus componentes: viés (Q_v), magnitude de flutuação aleatória (Maf) e flutuação aleatória do modelo (Mof; Kobayashi e Salam, 2000).

RESULTADOS

Os valores observados para a composição dos alimentos neste estudo foram condizentes com as relatados por Valadares Filho et al., (2018) para amostras de cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de milho coletadas em todo o Brasil.

Calibração

Nas Tabela 1, 2, e 3 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises químicas realizados nas amostras de cana-de-açúcar, fubá de milho e farelo de soja para os conjuntos de calibração e avaliação externa dos modelos para predição de todas as propriedades avaliadas,

bem como o número de amostras utilizadas em cada conjunto. Os valores de RMSECV, o coeficiente de determinação da validação cruzada (RVC), o número de variáveis latentes (nVL) para os modelos de predição gerados, o tamanho das matrizes e os tratamentos utilizados para construção dos modelos de predição da composição da cana-de-açúcar, fubá de milho e farelo de soja para cada constituinte químico analisado estão disponíveis nas Tabelas 4, 5 e 6. Menores valores de RMSECV e maiores valores de RVC foram observados para todos os modelos gerados que passaram por tratamentos em comparação aos não tratados.

O pré-tratamento segunda derivada foi utilizado em 7 modelos construídos para predição da composição química da cana-de-açúcar e em 7 modelos de fubá de milho. Suavização foi utilizada em 7 modelos para predição da composição química de cana-de-açúcar, 4 dos modelos para predição da composição química de farelo de soja e fubá de milho. Autoescalamento sozinho ou em combinação com outro tratamento foi utilizado em 9 dos modelos gerados para predição da composição química do farelo de soja. Além disso, em 5 dos modelos gerados para predição da composição química do farelo de soja foi aplicada a transformação da correção de espalhamento multiplicativo.

Avaliação externa

Cana-de-açúcar

Os resultados da avaliação externa da cana-de-açúcar para cada constituinte encontram-se nas Tabelas 7 e 8. Ao avaliar a regressão entre os valores preditos e observados (Figura 3), os modelos gerados estimaram acuradamente os conteúdos de todos os constituintes avaliados para a cana-de-açúcar, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,056$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição.

Os modelos gerados para predição dos conteúdos de ASA, ASE, MS, MO, FDN, FDNcp, PIDN, FDA, PB, CNF e NDT da cana-de-açúcar apresentaram elevada acurácia e precisão ($CCC \geq 0,60$), enquanto os modelos gerados para predição dos teores de FDNi, PIDA, EE e LIG apresentaram precisão intermediária ($R^2 \geq 0,43$ e $CCC \geq 0,42$). O modelo gerado para predição de CIDN da cana-de-açúcar estimou acuradamente os teores propostos, porém foi pouco preciso ($R \geq 0,06$ e $CCC \geq 0,29$).

Farelo de soja

Os resultados da avaliação externa dos constituintes do farelo de soja encontram-se nas Tabelas 9 e 10. Ao avaliar a regressão entre os valores preditos e observados (Figura 4), os modelos gerados estimaram acuradamente os conteúdos de todos os constituintes avaliados do

farelo de soja visto que não rejeitaram ($P \geq 0,098$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição.

Os modelos gerados para predição dos conteúdos de ASE, MM, MO, FDN, FDA, FDNi, PB, NDT e amido de farelo de soja apresentaram boa acurácia e precisão ($R^2 \geq 0,50$ e $CCC \geq 0,61$) enquanto os modelos gerados para predição de FDN, PIDN, FDNcp, PIDA e CNF apresentaram precisão intermediária ($R^2 \geq 0,41$ e $CCC \geq 0,42$). Os modelos gerados para predição de EE e CIDN do farelo de soja estimaram acuradamente os teores propostos, porém foram pouco precisos ($R^2 \geq 0,01$ e $CCC \geq 0,26$).

Fubá de Milho

Os resultados da avaliação externa para cada constituinte do fubá de milho encontram-se nas Tabelas 11 e 12. Ao avaliar a regressão entre os valores preditos e observados (Figura 5), os modelos gerados estimaram acuradamente os conteúdos de todos os constituintes avaliados do fubá de milho visto que não rejeitaram ($P \geq 0,105$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição.

Os modelos gerados para predição dos conteúdos de ASE, MM, PB do fubá de milho apresentaram boa acurácia e precisão ($R^2 \geq 0,51$ e $CCC \geq 0,62$) enquanto os modelos gerados para predição de MO, FDNcp, PIDA, PIDN, FDA, amido e NDT do fubá de milho apresentaram precisão intermediária ($R^2 \geq 0,42$ e $CCC \geq 0,43$). Os modelos gerados para predição de FDN, FDNi, CIDN, CNF e EE estimaram acuradamente os teores propostos, porém com baixa precisão ($R^2 \geq -0,04$ e $CCC \geq 0,03$).

DISCUSSÃO

De acordo com Fernández-Cabanás et al. (2007) o uso de um ou mais pré-tratamentos espectrais combinados durante a modelagem é uma prática regular no desenvolvimento de modelos de predição NIR, visto que algumas transformações reduzem significativamente os erros observados. Em modelos gerados para predição da composição química de cana-de-açúcar e de fubá de milho houve frequente utilização do tratamento segunda derivada (cana-de-açúcar = 50% e fubá de milho = 44%). O tratamento segunda derivada atua corrigindo a inclinação da linha de base dos espectros utilizados para construção dos modelos (Ferreira, 2015). Essa correção pode ter sido necessária devido a razões inerentes ao instrumento NIR ou a amostragem (Ferreira, 2015). Além da segunda derivada, em modelos de predição da composição química de cana-de-açúcar também foi frequente a utilização do tratamento

suavização (44%), que reduz distúrbios causados por ruídos (contribuições estocásticas; Ciurczak et al., 2021).

Por outro lado, o tratamento autoescalamamento sozinho ou em combinação com outro tratamento foi utilizado em 60% dos modelos gerados para predição da composição química do farelo de soja. Este tratamento é realizado nas colunas da matriz espectral e representa a combinação de centrar na média e escalar pela variância (Ferreira, 2015) e permite o foco na variação espectral, já que todas as variáveis têm variância igual antes da modelagem (Ciurczak et al., 2021). Além disso, o uso deste pré-tratamento (autoescalamamento) pode ter sido frequente nos modelos de predição da composição química devido a pequena variação da composição entre as amostras de farelo de soja, sendo necessário destacar a variação para possibilitar a distinção entre as amostras.

Ainda, em 33% dos modelos gerados para predição da composição química do farelo de soja foi aplicada a transformação correção de espalhamento multiplicativo, que é utilizada para corrigir os efeitos dos fenômenos físicos (Ferreira, 2015), reduzindo as variações espectrais de linha de base e multiplicativas e assim, preservando as formas da banda espectral (Ciurczak et al., 2021). Diferentemente de um equipamento NIR de bancada em que as amostras são depositadas em um compartimento vedado, as leituras dos espectros nesta pesquisa foram coletadas com um NIR portátil que está mais alheio aos efeitos dos fenômenos físicos (alterações de temperatura, pressão, umidade, etc.), visto que esse apresenta poucas proteções contra aos efeitos ambientais. Dessa forma, é possível que a persistente seleção desses tratamentos possa ter ocorrido devido a problemas relacionados à reduzida variação espectral, já que o uso dos tratamentos autoescalamamento e/ou correção de espalhamento multiplicativo ocorreu em 73% dos modelos gerados para predição da composição química de farelo de soja.

No conjunto de dados utilizado para a desenvolvimento e avaliação dos modelos de precisão da composição química da cana-de-açúcar foi observado um elevado coeficiente de variação para todos os constituintes avaliados ($CV = \text{coeficiente de variação}$; $13,33 \leq CV \leq 56,20$), com exceção dos teores de ASE, MO e NDT, o que pode ser decorrente dos diferentes graus de maturação da planta de cana-de-açúcar, quando as amostras foram coletadas e consequentemente, resultando em diferentes concentrações de cada constituinte. De acordo com Muraro (2014), a idade ao corte pode influenciar a composição química da planta. Além disso, com o aumento da idade da planta pode ocorrer redução dos constituintes da parede celular, em virtude do acúmulo de carboidratos solúveis (Muraro, 2014).

Baixa precisão foi observada para os modelos desenvolvidos para determinação dos teores de CIDN da cana-de-açúcar ($R^2 \geq 0,06$), CIDN e EE do farelo de soja ($R^2 \geq 0,01$), CIDN

do fubá de milho ($R^2 \geq -0,04$), o que pode ter sido ocasionado pela baixa concentração desses constituintes nas amostras analisadas, dificultando a utilização da técnica NIR (Sarraguça e Lopes, 2009). Além disso, a baixa amplitude de variação dos teores mínimos e máximos de alguns constituintes da cana-de-açúcar (PIDA = 0,16 a 0,66; CIDN = 0,10 a 1,10; LIG = 3,05 a 5,95), farelo de soja (CIDN = 0,25 a 1,20; EE = 1,02 a 3,33) e fubá de milho (FDN = 10,17 a 16,27; FDNi = 1,04 a 2,47; PIDA = 0,11 a 0,62; CIDN = 0,26 a 1,36; e EE = 2,54 a 5,90), pode ter proporcionado uma baixa capacidade de predição nos extremos dos valores estudados (Sarraguça e Lopes, 2009). Ainda, a menor qualidade de predição do modelo gerado para a predição dos teores de CNF em amostras de fubá de milho pode estar associada ao acúmulo de erros sistemáticos inerentes a este constituinte, já que este é estimado a partir de pelo menos seis análises diferentes ($CNF = 100 - (\%PB + \%FDNcp + \%EE + \%MM)$; Detmann et al., 2021).

Os modelos gerados para a predição da composição química da cana-de-açúcar apresentaram valores de QMEP baixos (QMEP < 13,2% que as médias observadas para ASE, MO, FDN, FDNcp, PIDA, CIDN, FDA, FDA, PB, EE, LIG e NDT) a moderados (QMEP < 39,6% que as médias observadas para MS, FDNi e CNF), enquanto os modelos gerados para a predição de todos os constituintes do fubá de milho apresentaram valores baixos de QMEP (QMEP < 14,9% que as médias observadas). Além disso, o QMEP para as estimativas de todos os parâmetros da cana-de-açúcar e fubá de milho foi associado principalmente aos erros aleatórios (Mof ≥ 71 % do QMEP), indicando que estes não estão associados, em sua maioria, a estrutura dos modelos.

Com relação ao farelo de soja, os modelos gerados para a predição dos teores de ASE, MM, MO, CIDN, FDNi, FDA, PIDA, EE, PB e NDT apresentaram valores baixos de QMEP (QMEP < 9% que as médias observadas), enquanto os modelos para predição dos teores de FDN, FDNcp, PIDN, CNF e amido apresentaram valores de QMEP proporcionalmente maiores (QMEP < 30% que as médias observadas), sendo esses, com exceção do PIDN, associados principalmente aos erros aleatórios (Mof $\geq 78,7$ % do QMEP). O QMEP observado para a predição do teor de PIDN do farelo de soja apresentou uma contribuição maior de erros viés (QV = 55,56%), indicando problemas de ajuste desse modelo.

CONCLUSÃO

Os modelos de regressão por NIR portátil estimaram acuradamente e, portanto, são recomendados para estimar a composição química da cana-de-açúcar, farelo de soja e fubá de

milho. Assim, esse método poderá substituir o uso de análises laboratoriais convencionais para a determinação da composição desses alimentos, diminuindo custo, labor, tempo para obtenção dos resultados e geração de potenciais poluentes.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Ciurczak, E. W., B. Igne, J. Workman, and D. A. B. Jr., eds. 2021. Handbook of Near-Infrared Analysis. 4th ed. CRC Press.
- CONAB. 2021. Acompanhamento da safra brasileira de grãos, 11^o Levantamento - Safra 2020/21, junho 2020. Available from: <https://www.conab.gov.br/info-agro/safras/graos/boletim-da-safra-de-graos>
- Detmann, E., L. F. C. Silva, G. C. Rocha, M. N. N. Palma, and J. P. P. Rodrigues. 2021. Métodos para análise de alimentos. 2nd ed. (Suprema: Visconde do Rio Branco, editor.). Visconde do Rio Branco.
- Fernández-Cabanás, V. M., A. Garrido-Varo, J. G. Olmo, E. De Pedro, and P. Dardenne. 2007. Optimisation of the spectral pre-treatments used for Iberian pig fat NIR calibrations. Chemom. Intell. Lab. Syst. 87:104–112. doi:10.1016/j.chemolab.2006.10.005. Available from: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0169743906002188>
- Ferreira, M. M. C. 2015. Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações. Editora da Unicamp. Available from: <http://books.scielo.org/id/2nc9y>
- Kennard, R. W., and L. A. Stone. 1969. Computer Aided Design of Experiments. Technometrics. 11:1:137–148.
- Kobayashi, K., and M. U. Salam. 2000. Comparing simulated and measured values using mean squared deviation and its components. Agron. J. 92:345–352. doi:10.2134/agronj2000.922345x.
- Millen, D. D., R. D. L. Pacheco, M. D. B. Arrigoni, M. L. Galyean, and J. T. Vasconcelos. 2009. A snapshot of management practices and nutritional recommendations used by feedlot nutritionists in Brazil. J. Anim. Sci. 87:3427–3439. doi:10.2527/jas.2009-1880.
- Moreira, H. A. 1983. Cana-de-açúcar na alimentação de bovinos. Inf. Agropecuário. v.9, n.108:14–16.

- Muraro, G. B. 2014. Impacto do espaçamento número de cortes e da idade de corte na produção e composição bromatológica de cana-de-açúcar para silagem. Universidade Federal do Paraná, PR, Curitiba.
- Pinto, A. C. J., and D. D. Millen. 2019. Nutritional recommendations and management practices adopted by feedlot cattle nutritionists: The 2016 Brazilian survey. *Can. J. Anim. Sci.* 99:392–407. doi:10.1139/cjas-2018-0031.
- Sarraguça, M. C., and J. A. Lopes. 2009. Quality control of pharmaceuticals with NIR: From lab to process line. *Vib. Spectrosc.* 49:204–210. doi:10.1016/j.vibspec.2008.07.013.
- Silva, B. de C., L. A. Godoi, S. de C. Valadares Filho, D. Zanetti, P. D. B. Benedeti, and E. Detmann. 2019. A suitable enzymatic method for starch quantification in different organic matrices. *MethodsX.* 6:2322–2328. doi:10.1016/j.mex.2019.09.040.
- Silva, D. P., A. M. Pedroso, M. C. S. Pereira, G. P. Bertoldi, D. H. M. Watanabe, A. C. B. Melo, and D. D. Millen. 2019. Survey of management practices used by brazilian dairy farmers and recommendations provided by 43 dairy cattle nutritionists. *Can. J. Anim. Sci.* 99:890–904. doi:10.1139/cjas-2018-0004.
- Silvestre, A. M., and D. D. Millen. 2021. The 2019 Brazilian Survey On Nutritional Practices Provided By Feedlot Cattle Consulting Nutritionists. *Rev. Bras. Zootec.* 50:1–25. doi:10.37496/RBZ5020200189.
- Tedeschi, L. O. 2006. Assessment of the adequacy of mathematical models. *Agric. Syst.* 89:225–247. doi:10.1016/j.agsy.2005.11.004.
- Thomson, A. L., D. J. Humphries, C. Rymer, J. E. Archer, N. W. Grant, and C. K. Reynolds. 2018. Assessing the accuracy of current near infra-red reflectance spectroscopy analysis for fresh grass-clover mixture silages and development of new equations for this purpose. *Anim. Feed Sci. Technol.* 239:94–106. doi:10.1016/j.anifeedsci.2018.03.009. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2018.03.009>
- Valadares Filho, S. de C., S. A. Lopes, B. de C. Silva, and M. L. L. Z. B. Chizzotti. 2018. CQBAL 4.0. Tabelas Brasileiras de Composição de Alimentos para Ruminantes. Available from: www.cqbal.com.br
- Valadares Filho, S. de C., L. F. C. e Silva, M. P. Gionbelli, P. P. Rotta, M. I. Marcondes, M. L.

Chizzotti, and L. F. Prados. 2016. Exigências Nutricionais de Zebuínos Puros e Cruzados - BR-CORTE. Editora Federal de Viçosa. Available from: http://editorascienza.com.br/pdfs/br_corte_tabela_brasileira_de_exigencias_nutricionais_pt.pdf



Figura 1 – Processo de aquisição de espectros e obtenção da matriz X.

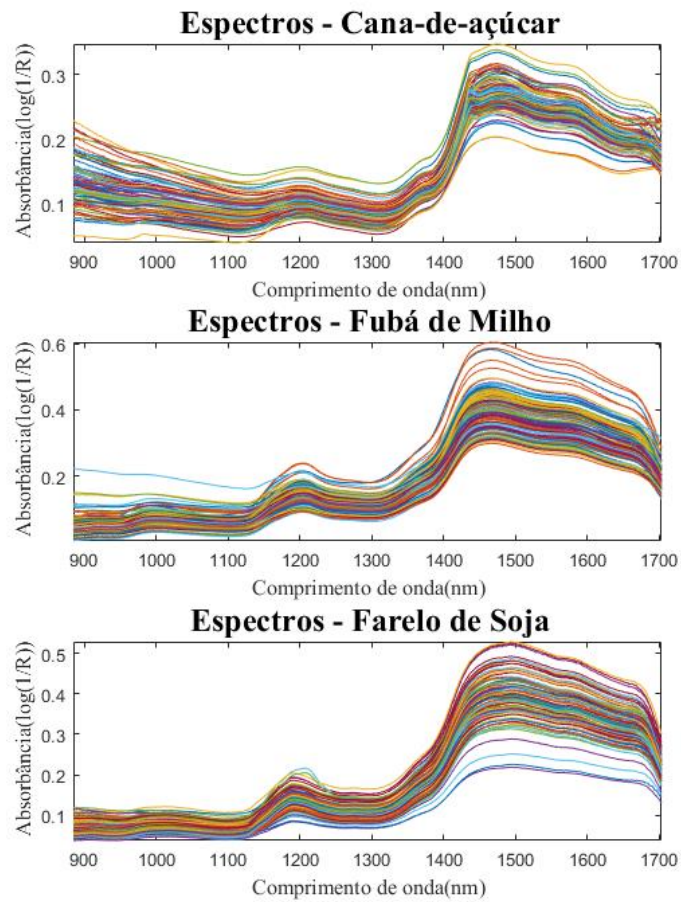


Figura 2 - Espectros utilizados para construção de modelos da composição química de amostras de cana-de-açúcar, fubá de milho e farelo de soja obtidos por NIR portátil.

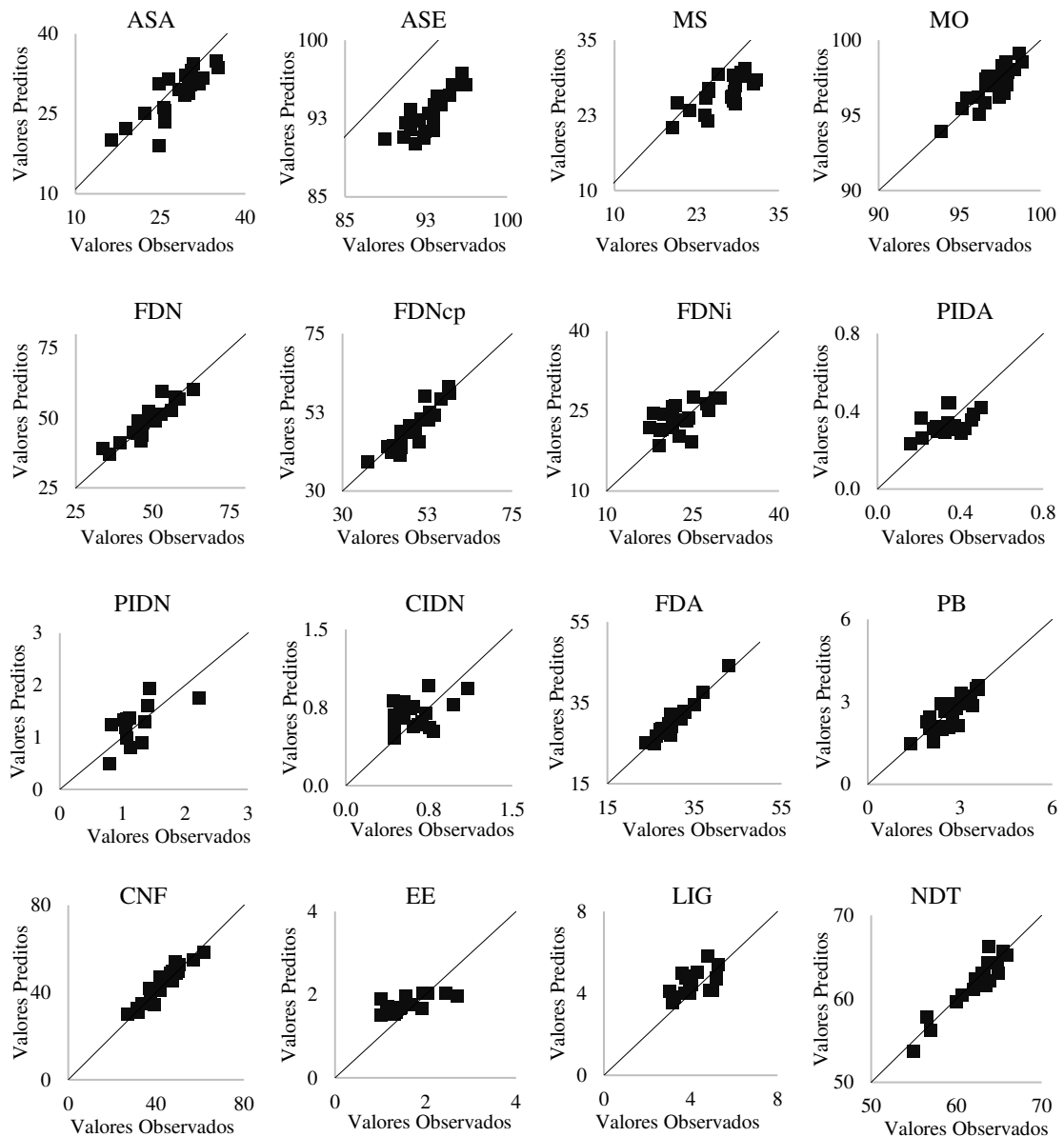


Figura 3 Relação entre os teores de ASA, ASE, MS, MO, FDN, FDNcp, FDNi, PIDA, PIDN, CIDN, FDA, EE, PB, CNF, EE, LIG e NDT obtidos através de análises químicas tradicionais e preditos a partir do modelo construído para predição da composição química de cana-de-açúcar. ASA= matéria seca em estufa a 55°C, ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MS = matéria seca total, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo LIG = lignina e NDT = nutrientes digestíveis totais.

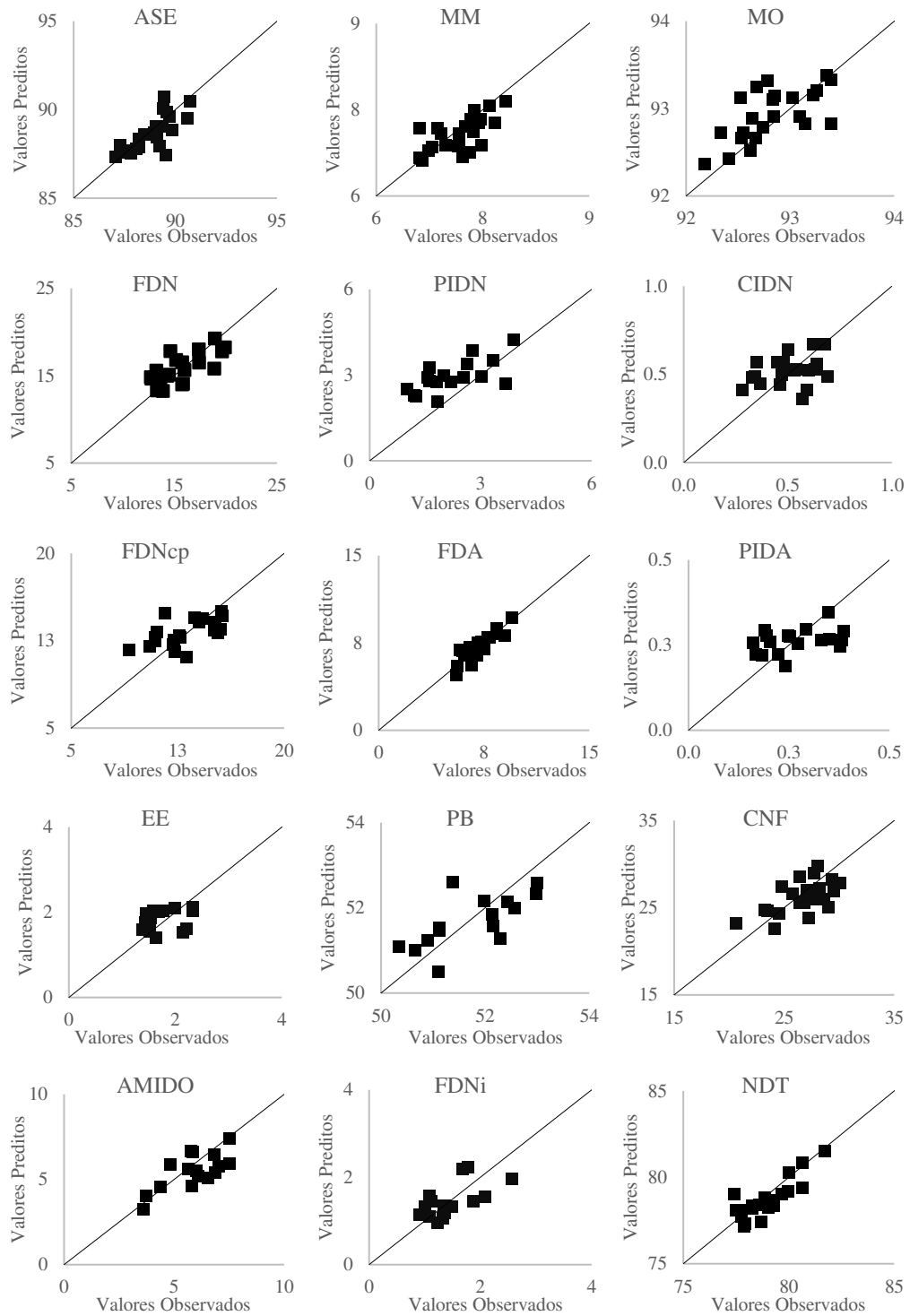


Figura 4 - Relação entre os teores de ASE, MM, MO, FDN, FDNcp, FDNi, PIDA, PIDN, CIDN, FDA, EE, PB, CNF, EE, amido e NDT obtidos através de análises químicas tradicionais e preditos a partir do modelo construído para predição da composição química de farelo de soja. ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo e NDT = nutrientes digestíveis totais.

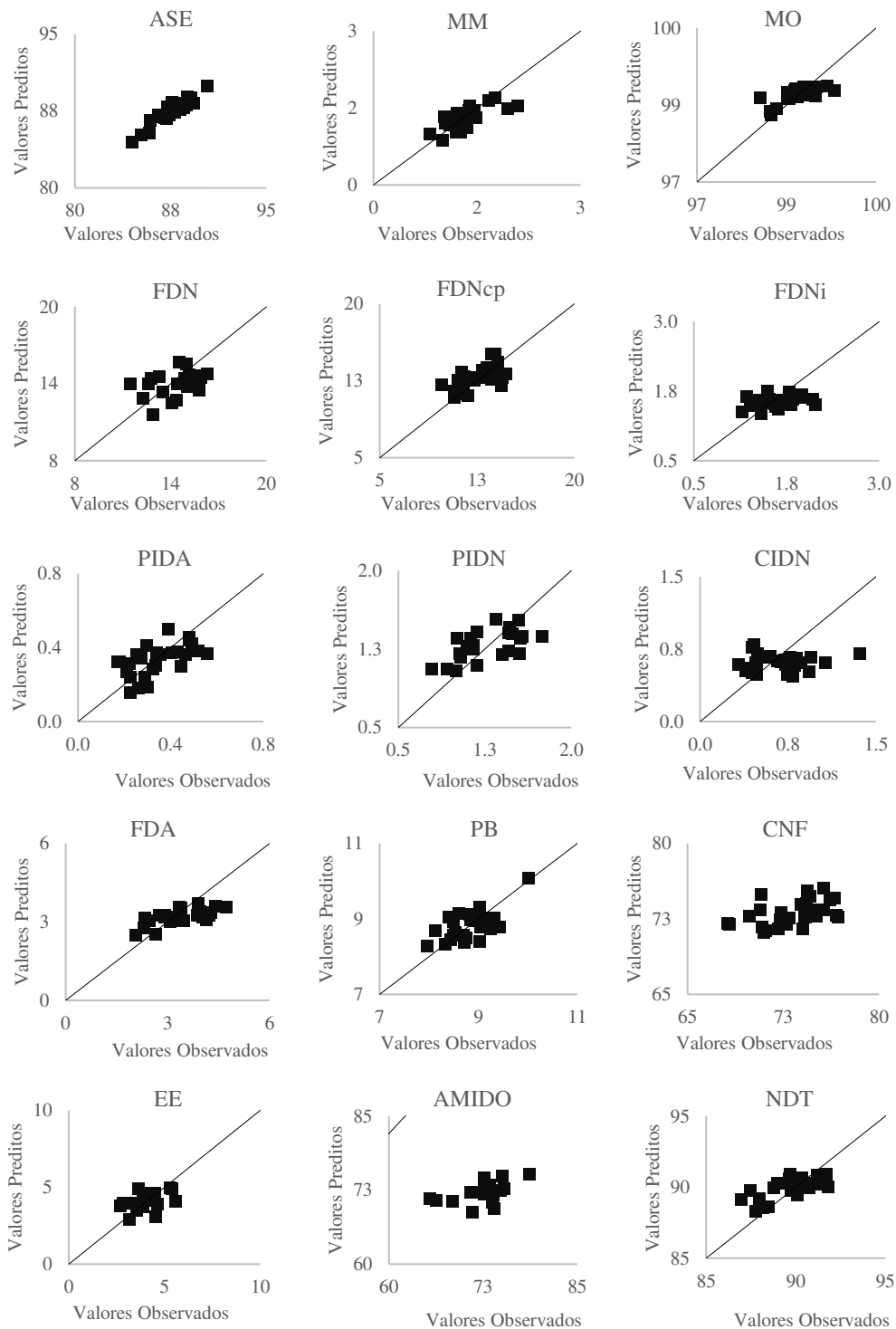


Figura 5 - Relação entre os teores de ASE, MM, MO, FDN, FDNcp, FDNi, PIDA, PIDN, CIDN, FDA, EE, PB, CNF, EE, amido e NDT obtidos através de análises químicas tradicionais e preditos a partir do modelo construído para predição da composição química de fubá de milho. ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo e NDT = nutrientes digestíveis totais.

Tabela 1. Análise descritiva da composição da cana-de-açúcar obtidos a partir de análises químicas convencionais

Parâmetros ¹	Conjuntos ²	N ³	Média	Mínimo	Máximo	DP ⁴
ASA	Cal	66	28,1	15,7	36,4	4,82
	Val	22	27,9	16,3	35,2	4,78
ASE	Cal	66	92,9	88,0	96,3	2,17
	Val	22	92,8	88,7	96,2	1,96
MS	Cal	65	25,5	14,7	32,8	4,32
	Val	21	26,4	18,9	31,6	3,68
MO	Cal	71	96,6	92,1	98,7	1,69
	Val	24	97,1	93,9	98,9	1,17
FDN	Cal	61	49,9	35,9	66,2	7,78
	Val	21	48,6	33,8	63,1	7,62
FDNcp	Cal	64	48,4	34,7	61,4	6,70
	Val	21	48,8	36,6	58,5	5,71
FDNi	Cal	63	23,4	18,3	32,2	3,04
	Val	21	22,9	17,5	29,8	3,54
PIDA	Cal	50	0,3	0,2	0,7	0,09
	Val	17	0,3	0,2	0,5	0,10
PIDN	Cal	39	1,3	0,8	2,3	0,42
	Val	13	1,2	0,8	2,2	0,38
CIDN	Cal	58	0,6	0,1	1,1	0,22
	Val	20	0,6	0,4	1,1	0,19
FDA	Cal	52	29,5	20,9	40,7	4,74
	Val	18	30,4	23,9	42,9	4,41
PB	Cal	66	2,9	1,6	5,3	0,74
	Val	22	2,7	1,4	3,6	0,62
CNF	Cal	67	44,5	23,2	61,1	8,88
	Val	22	43,7	27,0	61,8	8,75
EE	Cal	48	1,8	1,1	3,0	0,47
	Val	16	1,6	1,0	2,7	0,51
LIG	Cal	52	4,4	3,1	6,0	0,70
	Val	17	4,2	3,1	5,3	0,72
NDT	Cal	53	62,2	55,4	68,1	3,64
	Val	18	62,2	55,0	66,0	3,14

¹ASA= matéria seca em estufa a 55°C, ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MS = matéria seca total, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo, LIG = lignina, NDT = nutrientes digestíveis totais, ²Cal = conjunto de amostras de calibração e Val = conjunto de amostras de validação cruzada, ³número de amostras avaliadas e ⁴desvio padrão.

Tabela 2. Análise descritiva da composição do farelo de soja obtidos a partir de análises químicas convencionais

Parâmetros ¹	Conjunto ²	N ³	Média	Mínimo	Máximo	DP ⁴
ASE	Cal ¹⁶	69	88,9	86,6	92,3	0,89
	Val ¹⁷	23	88,8	87,1	90,7	1,02
MM	Cal	69	7,2	6,6	7,9	0,32
	Val	23	7,2	6,6	7,8	0,35
MO	Cal	69	92,8	92,1	93,4	0,32
	Val	23	92,8	92,2	93,4	0,35
FDN	Cal	59	15,4	11,1	19,4	1,89
	Val	20	15,7	12,7	19,9	2,31
FDNcp	Cal	63	13,0	9,9	16,7	1,80
	Val	21	13,0	9,1	15,6	1,94
FDNi	Cal	54	1,4	0,9	2,6	0,45
	Val	16	1,5	0,9	2,6	0,44
PIDA	Cal	60	0,3	0,2	0,7	0,11
	Val	20	0,3	0,2	0,6	0,10
PIDN	Cal	65	2,7	0,9	6,4	1,45
	Val	17	2,2	1,0	3,9	0,88
CIDN	Cal	64	0,5	0,3	1,2	0,17
	Val	21	0,5	0,3	0,7	0,12
FDA	Cal	67	6,7	4,1	9,5	1,11
	Val	22	7,0	4,3	9,5	1,22
PB	Cal	65	51,7	49,1	54,0	1,29
	Val	16	51,6	49,9	53,0	0,95
CNF	Cal	67	26,1	20,9	30,8	2,51
	Val	22	26,6	20,6	30,1	2,36
EE	Cal	66	2,0	1,0	3,3	0,62
	Val	16	1,8	1,4	2,3	0,34
AMIDO	Cal	58	5,3	3,0	8,6	1,36
	Val	16	5,9	3,6	7,5	1,18
NDT	Cal	63	79,4	77,0	83,0	1,35
	Val	21	79,0	77,4	81,7	1,17

¹ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo, NDT = nutrientes digestíveis totais, ²Cal = conjunto de amostras de calibração e Val = conjunto de amostras de validação cruzada, ³número de amostras avaliadas e ⁴desvio padrão.

Tabela 3. Análise descritiva da composição do fubá de milho obtidos a partir de análises químicas convencionais

Parâmetros ¹	Conjunto ²	N ³	Média	Mínimo	Máximo	DP ⁴
ASE	Cal ⁴	86	87,6	82,1	89,4	1,12
	Val ⁵	29	87,5	84,5	90,3	1,25
MM	Cal	87	1,3	0,8	2,1	0,20
	Val	29	1,3	0,8	2,1	0,28
MO	Cal	90	98,8	97,9	99,3	0,20
	Val	30	98,7	98,1	99,3	0,27
FDN	Cal	69	14,0	10,2	16,0	1,39
	Val	23	14,5	11,5	16,3	1,34
FDNcp	Cal	77	12,4	9,3	15,0	1,35
	Val	26	12,7	9,7	14,7	1,39
FDNi	Cal	86	1,6	1,0	2,5	0,30
	Val	29	1,6	1,2	2,1	0,23
PIDA	Cal	85	0,3	0,1	0,6	0,11
	Val	28	0,3	0,2	0,6	0,11
PIDN	Cal	73	1,3	0,8	1,8	0,24
	Val	24	1,3	0,8	1,7	0,25
CIDN	Cal	84	0,6	0,3	1,1	0,16
	Val	28	0,7	0,3	1,4	0,24
FDA	Cal	79	3,2	2,1	4,6	0,58
	Val	26	3,4	2,1	4,7	0,72
PB	Cal	74	8,8	8,1	10,0	0,43
	Val	25	8,8	8,0	10,0	0,45
CNF	Cal	84	73,1	67,3	76,6	2,19
	Val	28	73,2	68,1	76,8	2,46
EE	Cal	54	4,3	2,5	5,9	0,91
	Val	18	4,1	2,7	5,6	0,79
AMIDO	Cal	52	72,0	65,7	76,5	2,84
	Val	18	72,5	65,4	78,6	3,28
NDT	Cal	77	89,9	86,3	91,9	1,12
	Val	26	89,8	87,0	91,8	1,43

¹ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo, NDT = nutrientes digestíveis totais, ²Cal = conjunto de amostras de calibração e Val = conjunto de amostras de validação cruzada, ³número de amostras avaliadas e ⁴desvio padrão

Tabela 4. Conjuntos de dados usados para o desenvolvimento e avaliação dos modelos de predição e resultados estatísticos para os modelos de predição da composição de cana-de-açúcar

Parâmetros ¹	Pré-tratamentos ²	TM ³	nVL ⁴	RMSECV ⁵	RVC ⁶
ASA	Det, + Su,	88x256	10	2,38	0,87
ASE	Det, + Norm	88x256	9	0,99	0,89
MS	MSC + 2 ^a d	86x256	8	2,14	0,87
MO	Su, + 2 ^a d	95x256	10	0,63	0,93
FDN	SNV + Su,	82x256	8	2,32	0,96
FDNcp	Su, + MSC	85x256	10	2,15	0,95
FDNi	CM + 1 ^a d	84x256	7	2,28	0,67
PIDA	2 ^a d + Det,	67x256	3	0,06	0,69
PIDN	Norm. + 1 ^a d	52x256	7	0,35	0,62
CIDN	Au, + LB	78x256	3	0,20	0,37
FDA	CM + 2 ^a d	70x256	8	1,48	0,95
PB	Su, + 2 ^a d	88x256	10	0,39	0,85
CNF	Su, + SNV	89x256	8	2,77	0,95
EE	CM + Norm,	64x256	3	0,46	0,24
LIG	2 ^a d + Au,	69x256	3	0,58	0,56
NDT	Su, + 2 ^a d	71x256	7	1,06	0,96

¹ASA= matéria seca em estufa a 55°C, ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MS = matéria seca total, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo LIG = lignina, NDT = nutrientes digestíveis totais, Det. = detrend, Su. = suavização, Norm. = normalização, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, 2^ad = segunda derivada, SNV = normalização padronizada do sinal, CM = centrar na média, 1^ad = primeira derivada, Au. = Autoescalamento, LB = correção de linha de base, ³tamanho da matriz utilizada a partir do número de amostras que possuíam resultados de análises químicas disponíveis, ⁴número de variáveis latentes selecionado, ⁵raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada, ⁶coeficiente de correlação de Person da validação cruzada.

Tabela 5. Conjuntos de dados usados para o desenvolvimento e avaliação dos modelos de predição e resultados estatísticos para os modelos de predição da composição do farelo de soja

Parâmetros ¹	Pré-tratamentos ²	TM ³	nVL ⁴	RMSECV ⁵	RVC ⁶
ASE	Au, + MSC	92x256	10	0,61	0,54
MM	Au,	92x256	11	0,21	0,57
MO	Au,	92x256	11	0,21	0,57
FDN	Au, + Det,	79x256	6	1,79	0,67
FDNcp	Norm, + Au,	84x256	3	1,49	0,56
FDNi	Au, + MSC	70x256	5	0,31	0,53
PIDA	Su, + 1 ^a d	89x256	8	0,58	0,85
PIDN	Au, + SNV	82x256	11	1,27	0,27
CIDN	2 ^a d + MSC	85x256	3	0,17	0,26
FDA	SNV + Su,	91x256	10	0,60	0,70
PB	MSC + Su,	81x256	1	1,23	0,09
CNF	CM + LB	89x256	7	2,00	0,39
EE	Au, + 2 ^a d	82x256	3	0,56	0,21
AMIDO	Au, + MSC	74x256	9	1,08	0,40
NDT	Su, + 1 ^a d	84x256	7	0,72	0,85

¹ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo, NDT = nutrientes digestíveis totais, ²Au. = autoescalamento, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, Det. = detrend, Norm. = normalização, Su. = suavização, 1^ad = primeira derivada, SNV = normalização padronizada do sinal, 2^ad = segunda derivada, CM = centrar na média, LB = correção de linha de base., ³tamanho da matriz utilizada a partir do número de amostras que possuíam resultados de análises químicas disponíveis, ⁴número de variáveis latentes selecionado, ⁵raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada e ⁶coeficiente de correlação de Person da validação cruzada.

Tabela 6. Conjuntos de dados usados para o desenvolvimento e avaliação dos modelos de predição e resultados estatísticos para os modelos de predição da composição do fubá de milho

Parâmetros ¹	Pré-tratamentos ²	TM ³	nVL ⁴	RMSECV ⁵	RVC ⁶
ASE	2 ^a d + MSC	115x256	9	0,44	0,92
MM	Su, + MSC	116x256	10	0,16	0,61
MO	MSC + Det,	120x256	5	0,19	0,35
FDN	Norm, + LB	92x256	6	1,28	0,44
FDNcp	2 ^a d + Su,	103x256	9	1,35	0,34
FDNi	Au, + SNV	115x256	3	0,27	0,43
PIDA	Su, + 2 ^a d	113x256	6	0,09	0,60
PIDN	Det, + LB	97x256	4	0,21	0,49
CIDN	2 ^a d + LB	112x256	2	0,16	0,23
FDA	Au, + Norm,	105x256	7	0,45	0,64
PB	MSC + Su,	99x256	9	0,38	0,51
CNF	2 ^a d + Au,	112x256	2	1,93	0,49
EE	2 ^a d + Au,	72x256	2	0,85	0,49
Amido	Det, + 1 ^a d	70x256	4	2,57	0,44
NDT	2 ^a d + Det,	103x256	4	1,02	0,45

¹ASE = matéria seca em estufa a 105°C, MM = matéria mineral, MO = matéria orgânica, FDN = fibra insolúvel em detergente neutro, FDNcp = fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, FDNi = fibra em detergente neutro indigestível, PIDA = proteína insolúvel em detergente ácido, PIDN = proteína insolúvel em detergente neutro, CIDN = cinzas insolúveis em detergente neutro, FDA = fibra insolúvel em detergente ácido, PB = proteína bruta, CNF = carboidratos não fibrosos, EE = extrato etéreo, NDT = nutrientes digestíveis totais, ²2^ad = segunda derivada, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, Su. = suavização, Det. = detrend, Norm. = normalização, LB = correção de linha de base, Au. = Autoescalamento, SNV = normalização padronizada do sinal, CM = centrar na média, 1^ad = primeira deriva, ³tamanho da matriz utilizada a partir do número de amostras que possuíam resultados de análises químicas disponíveis, ⁴número de variáveis latentes selecionado, ⁵raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada e ⁶coeficiente de correlação de Person da validação cruzada.

Tabela 7. Média (%) e estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores de matéria seca em estufa a 55°C, matéria seca em estufa a 105°C, matéria seca total, matéria orgânica, fibra insolúvel em detergente neutro, fibra insolúvel em detergente neutro

Item	ASA ¹		ASE ²		MS ³		MO ⁴		FDN ⁵		FDNcp ⁶		FDNi ⁷		PIDA ⁸	
	Obs, ⁹	T ¹⁰	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ¹³	Obs,	T ¹⁴	Obs,	T ¹⁵	Obs,	T ¹⁶	Obs,	T ¹⁷
Média (%)	27,9	28,9	92,8	92,9	26,4	26,2	97,1	97,0	48,6	48,9	48,8	48,1	22,9	23,7	0,30	0,30
DP ¹⁸	4,70	4,58	1,95	2,06	3,60	2,75	1,2	1,20	7,44	6,73	5,62	6,11	3,53	2,66	0,09	0,06
Máximo	35,2	35,0	96,2	96,8	31,6	30,3	98,9	99,1	63,1	60,1	58,5	59,8	29,8	27,6	0,50	0,40
Mínimo	16,3	19,1	88,7	90,1	18,9	20,4	93,9	93,9	33,8	37,0	36,6	38,4	17,5	18,5	0,20	0,20
R ² ¹⁹	-	0,68	-	0,68	-	0,48	-	0,71	-	0,84	-	0,83	-	0,27	-	0,21
CCC ²⁰	-	0,82	-	0,83	-	0,68	-	0,85	-	0,92	-	0,90	-	0,51	-	0,47
Regressão																
Intercepto																
Estimativa	-	3,19	-	19,61	-	2,15	-	18,12	-	-1,35	-	8,39	-	5,48	-	0,08
EP ²¹	-	3,69	-	10,89	-	5,58	-	10,48	-	4,81	-	4,12	-	6,04	-	0,12
P-valor ²²	-	0,398	-	0,087	-	0,704	-	0,098	-	0,782	-	0,056	-	0,376	-	0,518
Inclinação																
Estimativa	-	0,86	-	0,79	-	0,93	-	0,81	-	1,02	-	0,84	-	0,73	-	0,79
EP	-	0,13	-	0,117	-	0,21	-	0,11	-	0,10	-	0,09	-	0,25	-	0,34
P-valor ²³	-	0,27	-	0,085	-	0,738	-	0,099	-	0,825	-	0,077	-	0,306	-	0,538
QMEP ²⁴	-	7,738	-	1,317	-	6,251	-	0,409	-	7,870	-	6,341	-	9,389	-	0,006
QV ²⁵	-	0,922	-	0,019	-	0,072	-	0,005	-	0,080	-	0,541	-	0,694	-	≤0,001
MaF ²⁶	-	0,414	-	0,183	-	0,037	-	0,048	-	0,021	-	0,903	-	0,478	-	≤0,001
MoF ²⁷	-	6,402	-	1,114	-	6,141	-	0,356	-	7,767	-	4,898	-	8,217	-	0,006

corrigido para cinzas e proteína, fibra em detergente neutro indigestível e proteína insolúvel em detergente ácido de cana-de-açúcar

¹Matéria seca em estufa a 55°C, ²matéria seca em estufa a 105°C, ³matéria seca total, ⁴matéria orgânica, ⁵fibra indigestível em detergente neutro, ⁶fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, ⁷fibra indigestível em detergente neutro, ⁸proteína insolúvel em detergente ácido, ⁹valores observados, ¹⁰detrend e suavização, ¹¹detrend e normalização, ¹²correção de espalhamento multiplicativo e segunda derivada, ¹³suavização e segunda derivada, ¹⁴normalização padronizada do sinal e suavização, ¹⁵suavização e correção de espalhamento multiplicativo, ¹⁶centrar na média e primeira derivada, ¹⁷segunda derivada e detrend, ¹⁸desvio padrão, ¹⁹coeficiente de determinação, ²⁰coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ²¹erro padrão, ²²H0: $\beta_0 = 0$, ²³H0: $\beta_1 = 1$, ²⁴quadrado médio do erro de predição, ²⁵vício, ²⁶magnitude da flutuação aleatória e ²⁷flutuação aleatória do modelo.

Tabela 8. Média (%) e estatística descritiva entre os valores observados e preditos dos teores de cinzas insolúveis em detergente neutro, fibra insolúvel em detergente ácido, proteína bruta, carboidratos não fibrosos, extrato etéreo, lignina, nutrientes digestíveis totais da cana-de-açúcar

Item	PIDN ¹		CIDN ²		FDA ³		PB ⁴		CNF ⁵		EE ⁶		LIG ⁷		NDT ⁸	
	Obs ⁹	T ¹⁰	Obs	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ¹³	Obs,	T ¹⁴	Obs,	T ¹⁵	Obs,	T ¹⁶	Obs,	T ¹³
Média (%)	1,2	1,2	0,6	0,7	30,4	30,6	2,7	2,6	43,7	44,4	1,6	1,8	4,2	4,5	62,2	61,8
DP ¹⁷	0,36	0,40	0,18	0,13	4,58	4,72	0,60	0,62	8,58	8,15	0,50	0,19	0,75	0,59	3,15	3,28
Máximo	2,2	1,9	1,1	1,0	42,9	44,2	3,6	3,6	61,8	58,4	2,7	2,0	5,3	5,8	66,0	66,2
Mínimo	0,8	0,5	0,4	0,5	23,9	24,8	1,4	1,5	27,0	30,1	1,0	1,5	3,1	3,5	55,0	53,7
R ² ¹⁸	-	0,34	-	0,06	-	0,94	-	0,68	-	0,90	-	0,43	-	0,22	-	0,88
CCC ¹⁹	-	0,63	-	0,29	-	0,97	-	0,81	-	0,94	-	0,42	-	0,45	-	0,94
Regressão																
Intercepto																
Estimativa	-	0,50	-	0,30	-	1,50	-	0,63	-	-0,67	-	-1,52	-	1,19	-	6,14
EP ²⁰	-	0,28	-	0,22	-	1,80	-	0,32	-	3,34	-	0,89	-	1,27	-	4,96
P-valor ²¹	-	0,096	-	0,180	-	0,416	-	0,060	-	0,843	-	0,108	-	0,365	-	0,233
Inclinação																
Estimativa	-	0,58	-	0,46	-	0,94	-	0,80	-	1,0	-	1,77	-	0,66	-	0,91
EP	-	0,22	-	0,31	-	0,06	-	0,12	-	0,07	-	0,50	-	0,28	-	0,08
P-valor ²²	-	0,077	-	0,099	-	0,331	-	0,115	-	0,993	-	0,146	-	0,242	-	0,261
QMEP ²³	-	0,099	-	0,038	-	1,279	-	0,137	-	7,418	-	0,174	-	0,555	-	1,267
QV ²⁴	-	≤0,01	-	0,005	-	0,079	-	0,015	-	0,484	-	0,028	-	0,123	-	0,136
MaF ²⁵	-	0,025	-	0,005	-	0,071	-	0,015	-	≤0,01	-	0,021	-	0,038	-	0,089
MoF ²⁶	-	0,074	-	0,028	-	1,130	-	0,107	-	6,934	-	0,125	-	0,394	-	1,043

¹proteína insolúvel em detergente neutro ²cinzas insolúveis em detergente neutro, ³fibra insolúvel em detergente ácido, ⁴proteína bruta, ⁵carboidratos não fibrosos, ⁶extrato etéreo, ⁷lignina, ⁸nutrientes digestíveis totais, ⁹valores observados, ¹⁰Autoescalamento e linha de base, ¹¹normalização e primeira derivada, ¹²Autoescalamento e correção de linha de base, ¹³centrar na média e segunda derivada, ¹⁴suavização e segunda derivada, ¹⁵suavização e normalização padronizada do sinal, ¹⁶centrar na média e normalização, ¹⁷segunda derivada e Autoescalamento, ¹⁸desvio padrão, ¹⁹coeficiente de determinação, ²⁰coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ²¹H0: $\beta_0 = 0$, ²²H0: $\beta_1 = 1$, ²³quadrado médio do erro de predição, ²⁴vício, ²⁵magnitude da flutuação aleatória e ²⁶flutuação aleatória do modelos.

Tabela 9. Média (%) e estatística descritiva entre os valores observados e preditos dos teores de matéria seca em estufa a 105°C, matéria mineral, matéria orgânica, fibra insolúvel em detergente neutro, fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, cinzas insolúveis em detergente neutro, proteína insolúvel em detergente neutro, fibra em detergente neutro indigestível de farelo de soja

Item	ASE ¹		MM ²		MO ³		FDN ⁴		FDNcp ⁵		CIDN ⁶		PIDN ⁷		FDNi ⁸	
	Obs, ⁹	T ¹⁰	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ¹³	Obs,	T ¹⁴	Obs,	T ¹⁵	Obs,	T ¹⁰
Média (%)	88,8	88,6	7,2	7,1	92,8	92,9	15,7	15,8	13,0	13,2	0,5	0,5	2,2	3,0	1,5	1,5
DP ¹⁶	1,02	1,02	0,35	0,18	0,35	0,29	2,31	1,73	1,94	1,13	0,12	0,08	0,88	0,57	0,44	0,38
Máximo	90,7	90,7	7,8	7,6	93,4	93,4	19,9	19,3	15,6	15,0	0,7	0,7	3,9	4,2	2,6	2,2
Mínimo	87,1	87,3	6,6	6,6	92,2	92,4	12,7	13,2	9,1	11,1	0,3	0,4	1,0	2,1	0,9	1,0
R ² ¹⁷	-	0,56	-	0,38	-	0,38	-	0,46	-	0,31	-	0,06	-	0,41	-	0,34
CCC ¹⁸	-	0,74	-	0,60	-	0,60	-	0,67	-	0,51	-	0,30	-	0,42	-	0,61
Regressão																
Intercepto																
Estimativa	-	21,78	-	0,18	-	22,26	-	0,88	-	-0,33	-	0,26	-	-0,08	-	0,41
EP ¹⁹	-	12,57	-	1,41	-	18,48	-	3,58	-	4,23	-	0,17	-	0,89	-	0,37
P-valor ²⁰	-	0,098	-	0,214	-	0,242	-	0,809	-	0,939	-	0,140	-	0,383	-	0,277
Inclinação																
Estimativa	-	0,76	-	0,76	-	0,76	-	0,94	-	1,01	-	0,47	-	1,03	-	0,72
EP	-	0,14	-	0,20	-	0,20	-	0,23	-	0,32	-	0,32	-	0,30	-	0,24
P-valor ²¹	-	0,100	-	0,240	-	0,240	-	0,780	-	0,969	-	0,118	-	0,918	-	0,272
QMEP ²²	-	0,520	-	0,084	-	0,084	-	2,613	-	2,383	-	0,014	-	0,913	-	0,125
QV ²³	-	0,042	-	0,010	-	0,010	-	0,017	-	0,026	-	≤0,01	-	0,507	-	≤0,01
MaF ²⁴	-	0,059	-	0,005	-	0,005	-	0,012	-	≤0,01	-	0,002	-	≤0,01	-	0,011
MoF ²⁵	-	0,419	-	0,069	-	0,069	-	2,584	-	2,357	-	0,012	-	0,405	-	0,115

¹Matéria seca em estufa a 105°C, ²matéria mineral, ³matéria orgânica, ⁴fibra indigestível em detergente neutro, ⁵Fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, ⁶cinzas insolúveis em detergente neutro, ⁷proteína insolúvel em detergente neutro, ⁸fibra detergente neutro indigestível, ⁹valores obtidos através de análises químicas tradicionais, ¹⁰Autoescalamento e correção de espalhamento multiplicativo, ¹¹Autoescalamento, ¹²Autoescalamento e detrend, ¹³normalização e Autoescalamento, ¹⁴segunda derivada e correção de espalhamento multiplicativo, ¹⁵Autoescalamento e normalização padronizada do sinal, ¹⁶desvio padrão, ¹⁷coeficiente de determinação, ¹⁸coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ¹⁹erro padrão, ²⁰H0: $\beta_0 = 0$, ²¹H0: $\beta_1 = 1$, ²²quadrado médio do erro de predição, ²³vício, ²⁴magnitude da flutuação aleatória e ²⁵flutuação aleatória do modelo.

Tabela 10. Média (%) e estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores de fibra insolúvel em detergente ácido, proteína insolúvel em detergente ácido, carboidratos não fibrosos, extrato etéreo, proteína bruta, nutrientes digestíveis totais e amido de farelo de soja

Item	FDA ¹		PIDA ²		CNF ³		EE ⁴		PB ⁵		NDT ⁶		AMIDO	
	Obs, ⁷	T ⁸	Obs,	T ⁹	Obs,	T ¹⁰	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ⁹	Obs,	T ¹³
Média (%)	7,0	7,0	0,3	0,3	26,6	26,2	1,2	1,8	51,6	51,6	79,0	78,7	5,9	5,5
DP ¹⁴	1,22	1,21	0,10	0,05	2,36	1,89	0,94	0,24	0,95	0,63	1,17	1,10	1,18	1,06
Máximo	9,5	9,7	0,6	0,4	30,1	29,8	2,3	2,1	53,0	52,6	81,7	81,5	7,5	7,4
Mínimo	4,3	4,7	0,2	0,2	20,6	22,6	1,4	1,4	49,9	50,5	77,4	77,1	3,6	3,2
R ² ¹⁵	-	0,80	-	0,35	-	0,33	-	0,01	-	0,50	-	0,64	-	0,48
CCC ¹⁶	-	0,89	-	0,43	-	0,58	-	0,26	-	0,67	-	0,78	-	0,67
Regressão														
Intercepto														
Estimativa	-	0,65	-	-0,10	-	6,80	-	1,04	-	-4,40	-	11,44	-	1,35
EP ¹⁷	-	0,72	-	0,12	-	5,84	-	0,66	-	14,12	-	11,13	-	1,20
P-valor ¹⁸	-	0,38	-	0,4117	-	0,257	-	0,139	-	0,759	-	0,317	-	0,2789
Inclinação														
Estimativa	-	0,90	-	1,45	-	0,76	-	0,39	-	1,09	-	0,86	-	0,82
EP	-	0,10	-	0,43	-	0,22	-	0,36	-	0,27	-	0,14	-	0,21
P-valor ¹⁹	-	0,350	-	0,310	-	0,288	-	0,114	-	0,760	-	0,330	-	0,427
QMEP ²⁰	-	0,304	-	0,008	-	3,775	-	0,121	-	0,398	-	0,556	-	0,857
QV ²¹	-	0,001	-	0,001	-	0,191	-	0,004	-	≤0,001	-	0,091	-	0,148
MaF ²²	-	0,013	-	≤0,001	-	0,202	-	0,020	-	≤0,001	-	0,023	-	0,033
MoF ²³	-	0,289	-	0,007	-	3,382	-	0,097	-	0,395	-	0,441	-	0,676

¹Fibra insolúvel em detergente ácido, ²proteína insolúvel em detergente ácido, ³carboidratos não fibrosos, ⁴extrato etéreo, ⁵proteína bruta, ⁶nutrientes digestíveis totais, ⁷valores obtidos através de análises químicas tradicionais, ⁸normalização padronizada do sinal e suavização, ⁹suavização e primeira derivada, ¹⁰centrar na média e correção de linha de base, ¹¹Autoescalamento e segunda derivada, ¹²correção de espalhamento multiplicativo e suavização, ¹³Autoescalamento e correção de espalhamento multiplicativo, ¹⁴desvio padrão, ¹⁵coeficiente de determinação, ¹⁶coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ¹⁷erro padrão, ¹⁸H0: $\beta_0 = 0$, ¹⁹H0: $\beta_1 = 1$, ²⁰quadrado médio do erro de predição, ²¹vício, ²²magnitude da flutuação aleatória e ²³flutuação aleatória do modelo.

Tabela 11: Média (%) e estatística descritiva para os valores observados e preditos dos teores de matéria seca em estufa a 105°C, matéria mineral, matéria orgânica, fibra indigestível em detergente neutro, fibra insolúvel em detergente neutro corrigido para cinzas e proteína, fibra detergente neutro indigestível, proteína insolúvel em detergente ácido, proteína insolúvel em detergente neutro e amido de fubá de milho

Item	ASE ¹		MM ²		MO ³		FDN ⁴		FDNcp ⁵		FDNi ⁶		PIDA ⁷		PIDN ⁸	
	Obs, ⁹	T ¹⁰	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ¹³	Obs,	T ¹⁴	Obs,	T ¹⁵	Obs,	T ¹⁶	Obs,	T ¹⁷
Média (%)	87,5	87,4	1,3	1,3	98,7	98,7	14,5	14,0	12,7	12,9	1,6	1,6	0,3	0,3	1,3	1,3
DP ¹⁸	1,23	1,11	0,28	0,20	0,27	0,13	1,35	0,94	1,41	1,10	0,24	0,09	0,11	0,08	0,25	0,14
Máximo	90,3	90,0	2,1	1,7	99,3	98,9	16,3	15,7	14,7	15,2	2,1	1,8	0,6	0,5	1,7	1,5
Mínimo	84,5	84,5	0,8	0,9	98,1	98,3	11,5	11,6	9,7	10,9	1,2	1,3	0,2	0,2	0,8	1,0
R2 ¹⁹	-	0,88	-	0,51	-	0,47	-	0,11	-	0,36	-	0,05	-	0,29	-	0,33
CCC ²⁰	-	0,93	-	0,68	-	0,55	-	0,34	-	0,59	-	0,18	-	0,54	-	0,51
Regressão																
Intercepto																
Estimativa	-	-3,84	-	≤0,01	-	-41,42	-	6,60	-	2,41	-	0,38	-	0,09	-	-0,12
EP ²¹	-	6,43	-	0,24	-	27,19	-	403,00	-	2,66	-	0,77	-	0,07	-	0,39
P-valor ²²	-	0,555	-	0,999	-	0,139	-	0,116	-	0,374	-	0,625	-	0,256	-	0,770
Inclinação																
Estimativa	-	1,04	-	1,02	-	1,42	-	0,56	-	0,79	-	0,80	-	0,76	-	1,07
EP	-	0,07	-	0,19	-	0,28	-	0,29	-	0,20	-	0,50	-	0,22	-	0,3
P-valor ²³	-	0,549	-	0,920	-	0,139	-	0,140	-	0,326	-	0,694	-	0,274	-	0,811
QMEP ²⁴	-	0,180	-	0,035	-	0,039	-	1,826	-	1,277	-	0,058	-	0,008	-	0,039
QV ²⁵	-	0,004	-	≤0,001	-	≤0,001	-	0,186	-	0,060	-	0,006	-	≤0,001	-	≤0,001
MaF ²⁶	-	0,002	-	≤0,001	-	0,003	-	0,165	-	0,049	-	≤0,001	-	≤0,001	-	≤0,001
MoF ²⁷	-	0,173	-	0,035	-	0,036	-	1,414	-	1,168	-	0,052	-	0,008	-	0,039

¹Matéria seca em estufa a 105°C, ²matéria mineral, ³matéria orgânica, ⁴fibra indigestível em detergente neutro (FDN), ⁵FDN corrigido para cinzas e proteína, ⁶FDN indigestível, ⁷proteína insolúvel em detergente ácido, ⁹proteína insolúvel em detergente neutro, ⁹valores obtidos através de análises químicas tradicionais, ¹⁰segunda derivada e correção de espalhamento multiplicativo, ¹¹suavização e correção de espalhamento multiplicativo, ¹² correção de espalhamento multiplicativo e detrend, ¹³normalização e correção de linha de base, ¹⁴segunda derivada e normalização padronizada do sinal, ¹⁵segunda derivada e normalização padronizada do sinal, ¹⁶suavização e segunda derivada, ¹⁷detrend. e linha de base, ¹⁸desvio padrão, ¹⁹coeficiente de determinação, ²⁰coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ²¹erro padrão, ²²H0: $\beta_0 = 0$, ²³H0: $\beta_1 = 1$, ²⁴quadrado médio do erro de predição, ²⁵vício, ²⁶magnitude da flutuação aleatória e ²⁷flutuação aleatória do modelo.

Tabela 12: Média (%) e estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos teores de cinza insolúvel em detergente neutro, fibra insolúvel em detergente ácido, proteína bruta, carboidratos não fibrosos, extrato etéreo, amido e nutrientes digestíveis totais de fubá de milho

Item	CIDN ¹		FDA ²		PB ³		CNF ⁴		EE ⁵		AMIDO		NDT ⁶	
	Obs ⁷	T ⁸	Obs,	T ⁹	Obs,	T ¹⁰	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹¹	Obs,	T ¹²	Obs,	T ¹³
Média (%)	0,7	0,6	3,4	3,2	8,8	8,8	73,2	73,1	4,1	4,1	72,5	72,1	89,8	90,0
DP ¹⁴	0,23	0,08	0,71	0,30	0,45	0,38	2,45	1,24	0,83	0,60	3,20	1,78	1,43	0,73
Máximo	1,4	0,8	4,7	3,7	10,0	10,1	76,8	75,6	5,6	4,9	78,6	75,2	91,8	90,9
Mínimo	0,3	0,5	2,1	2,5	8,0	8,3	68,1	71,2	2,71	2,9	65,4	68,7	86,9	88,3
R ² ¹⁵	-	-0,04	-	0,42	-	0,37	-	0,19	-	0,11	-	0,21	-	0,46
CCC ¹⁶	-	0,03	-	0,45	-	0,62	-	0,38	-	0,38	-	0,43	-	0,55
Regressão														
Intercepto														
Estimativa	-	0,58	-	-1,71	-	2,40	-	5,88	-	1,74	-	7,18	-	-32,70
EP ¹⁷	-	0,34	-	1,17	-	1,67	-	24,96	-	1,33	-	27,86	-	26,20
P-valor ¹⁸	-	0,105	-	0,157	-	0,165	-	0,816	-	0,209	-	0,800	-	0,224
Inclinação														
Estimativa	-	0,14	-	1,59	-	0,73	-	0,92	-	0,56	-	0,91	-	1,36
EP	-	0,56	-	0,36	-	0,19	-	0,34	-	0,32	-	0,39	-	0,29
P-valor ¹⁹	-	0,132	-	0,119	-	0,164	-	0,820	-	0,187	-	0,811	-	0,227
QMEP ²⁰	-	0,060	-	0,329	-	0,127	-	4,530	-	0,620	-	7,375	-	1,129
QV ²¹	-	0,002	-	0,030	-	≤0,01	-	0,017	-	0,006	-	0,160	-	0,030
MaF ²²	-	0,005	-	0,029	-	0,015	-	0,009	-	0,065	-	0,027	-	0,066
MoF ²³	-	0,053	-	0,270	-	0,116	-	4,504	-	0,549	-	7,189	-	1,033

¹Cinzas insolúveis em detergente neutro, ²fibra insolúvel em detergente ácido, ³proteína bruta, ⁴carboidratos não fibrosos, ⁵extrato etéreo, ⁶nutrientes digestíveis totais, ⁷valores obtidos através de análises químicas tradicionais, ⁸segunda derivada e correção de linha de base, ⁹Autoescalamento e normalização, ¹⁰correção de espalhamento multiplicativo e suavização, ¹¹segunda derivada e Autoescalamento, ¹²detrend e primeira derivada, ¹³segunda derivada e detrend, ¹⁴desvio padrão, ¹⁵coeficiente de determinação, ¹⁶coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ¹⁷erro padrão, ¹⁸H₀: β₀ = 0, ¹⁹H₀: β₁ = 1, ²⁰quadrado médio do erro de predição, ²¹vício, ²²magnitude da flutuação aleatória e ²³flutuação aleatória do modelo.

CAPÍTULO 2 - Construção e validação de modelos de regressão a partir de espectros NIR para predição da composição de tecidos e de atributos de qualidade de carne da carcaça de bovinos de corte

RESUMO – Objetivou-se desenvolver e avaliar modelos para a predição da composição química seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas de fêmeas Nelore, bem como os parâmetros de qualidade de carne e carcaça de bovinos a partir da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas por NIR portátil. Foram utilizadas amostras de 60 bovinos (machos inteiros e fêmeas) para desenvolvimento e avaliação de modelos de regressão para predição de parâmetros de qualidade de carne e carcaça. No entanto, apenas 24 amostras da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas de fêmeas Nelore foram utilizadas para desenvolver os modelos para predição da composição química desta seção. Após o abate foi realizada aquisição dos espectros das seções compreendida entre a 9^a e 11^a costelas de bovinos em dois pontos (P1 contendo apenas carne e P2 contendo apenas gordura). Os valores referência foram obtidos através de análises convencionais. Para construção dos modelos de calibração foi utilizada a regressão por quadrados mínimos parciais e a validação cruzada *leave one out*. Os modelos de regressão construídos para avaliação dos parâmetros de qualidade de carne e carcaça com menor raiz quadrada do erro quadrático médio da validação cruzada foram submetidos a validação externa. Para avaliar a qualidade de ajuste dos modelos, os parâmetros estimados pelo NIR portátil e pelos métodos convencionais foram comparados utilizando-se o *Model Evaluation System*. Os modelos construídos para predição da composição química da seção compreendida entre as 9^a e a 11^a costelas de fêmeas Nelore a partir de P1 e P2 apresentaram de moderada a alta precisão para determinação dos componentes químicos das frações carne+gordura e seção completa (carne + gordura + ossos; $0,44 \leq RVC \leq 0,88$). Contudo, os modelos para predição dos conteúdos de matéria seca (MS), matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE) e proteína bruta (PB) a partir de P1 e MS, MM e EE a partir do P2 da fração ossos, bem como aquele desenvolvido para predição do teor de MM da seção completa (carne + gordura + ossos) a partir de P2, apresentaram precisão baixa ($0,04 \leq RVC \leq 0,37$). Os modelos de regressão construídos para predição parâmetros de qualidade de carne e carcaça de bovinos a partir da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas estimaram corretamente os atributos propostos, com exceção daqueles para predição de intensidade de vermelho (a^*) e intensidade de amarelo (b^*) a partir de P1 e espessura de gordura subcutânea a partir de P2, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,083$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um, indicando boa capacidade de predição. Contudo, os modelos gerados para predição dos atributos a^* , b^* , perdas por

resfriamento (Pres), perdas totais e maciez a partir do P1 e pH 24h após ao abate e Pres através do P2 foram pouco precisos ($R^2 \leq 0,27$ e $CCC \leq 0,03$). O espectro NIR obtido a partir de diferentes pontos tem potencial para ser utilizado como uma ferramenta para predição da composição química da seção compreendida entre as 9ª e a 11ª costelas de fêmeas Nelore. Os modelos de regressão desenvolvidos a partir da aquisição de espectros por diferentes pontos da seção compreendida entre as 9ª e a 11ª costelas estimaram acuradamente e, portanto, são recomendados para estimar atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte.

Palavras-chave: Espectroscopia. Exigência. Carne.

INTRODUÇÃO

Para que seja possível promover melhorias no desempenho do rebanho bovino brasileiro de forma eficiente e com qualidade, se faz necessário estudar e determinar suas exigências nutricionais. Para isso, o conhecimento da composição química dos constituintes da carcaça dos animais (ossos, carne e gordura) é indispensável. A determinação direta da composição da carcaça é o método mais acurado existente, gerando dados altamente confiáveis. Entretanto, sua adoção como rotina experimental torna-se praticamente impossível, em virtude de ser um método demorado, trabalhoso e caro, uma vez que pelo menos metade da carcaça não pode ser comercializada.

Dessa forma, é importante que métodos rápidos e econômicos, para estimar a composição física e química da carcaça, estejam disponíveis para produtores e pesquisadores (Hankins e Howe, 1946). Nesse contexto, Hankins e Howe (1946) propuseram um método indireto de estimativa da composição da carcaça de bovinos a partir da composição da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas. Dessa forma, é indispensável a determinação da composição química dessa seção.

Outro fator determinante para gerar melhorias ao mercado de carne bovina é a qualidade do produto, visto que, além de afetar diretamente o lucro de frigoríficos e produtores, também está diretamente relacionado com a percepção do consumidor. Alguns atributos podem ser obtidos para se determinar a qualidade da carcaça e de carne, como o rendimento de carcaça, espessura de gordura subcutânea (EGS), pH, perda de água durante o resfriamento, cor e maciez (Ramos e Gomide, 2009; Ponnampalam et al., 2015; Santos et al., 2018). Contudo, a determinação da composição química da carcaça bem como os atributos de qualidade de carcaça e de carne ainda dependem da retirada de amostras, que poderiam ser destinadas a venda, e a realização de análises laboratoriais convencionais. Nesse contexto, a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) em conjunto com técnicas quimiométricas surge como alternativa, visto que as análises químicas convencionais apresentam alguns pontos negativos como, o elevado custo; são laboriosas; e, podem ser destrutivas e poluentes devido à utilização de diversos reagentes químicos. Ainda, a determinação da composição e atributos de qualidade de carcaça e de carne via aquisição de espectros NIR em tecidos *in natura* podem reduzir o desperdício de carne no frigorífico e redução no tempo necessário para obtenção dos resultados.

Nesse sentido, o NIR vem sendo cada vez mais difundido e utilizado em diversas áreas do conhecimento, inclusive na estimação de propriedades dos tecidos corporais de animais de

produção. De fato, tem havido um crescente interesse no desenvolvimento de diversos modelos para predição da composição de tecidos da carcaça (Dixit et al., 2017; Barragán-Hernández et al., 2020; Lambe et al., 2021), bem como atributos de qualidade de carcaça e de carne (De Marchi, 2013; Dixit et al., 2017; Furtado et al., 2019) de diferentes espécies animais.

Assim, hipotetiza-se que modelos de predição por NIR portátil podem substituir os métodos convencionais de análise da composição química da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas e de atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte. Dessa forma, objetivou-se desenvolver e avaliar modelos para a predição dos teores de matéria seca a 55°C (ASA), matéria seca (MS), matéria seca em estufa a 105°C (ASE), matéria mineral (MM), proteína bruta (PB) e extrato etéreo (EE) da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas, bem como os atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte: pH 24h após ao abate, espessura de gordura subcutânea (EGS); perda de água por resfriamento (Pres); maciez; parâmetros de coloração luminosidades (L*), intensidade de vermelho (a*), intensidade de amarelo (b*); e as perdas totais (cocção e descongelamento).

MATERIAL E MÉTODOS

Procedimento de abate e obtenção dos atributos de qualidade de carne e de carcaça

Foram utilizadas 60 amostras provenientes de bovinos Nelore de diferentes categorias (machos não castrados e fêmeas), com peso corporal em jejum médio de 389±56,2 kg para machos não castrados e 508±78,8 kg para fêmeas, abatidos do Frigorífico Escola do Departamento de Zootecnia da Universidade Federal de Viçosa (UFV), Viçosa, Minas Gerais. Sessenta amostras foram utilizadas para avaliação de atributos de qualidade de carcaça e de carne e 24 foram utilizadas para determinação da composição química da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas (Tabela 1).

Após o abate, a carcaça de cada animal foi dividida em duas metades que foram pesadas (PCQ) e, em seguida, resfriadas em câmara fria a 4°C por aproximadamente 24 h. Passado esse tempo, as carcaças foram novamente pesadas (PCF). Além disso, 24 h após o abate, foi obtido o pH (pH 24h) e a determinação das perdas por resfriamento (Pres), que representam as perdas de água por gotejamento e evaporação das carcaças na câmara fria, sendo: $Pres (\%) = [(PCQ - PCF)/PCQ] \times 100$.

As 60 amostras da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas foram coletadas de acordo com os procedimentos descritos por Hankins e Howe (1946) para posterior aquisição

dos espectros NIR e coleta de amostras para posteriores análises laboratoriais. A EGS foi medida na porção entre a 12^a e 13^a costelas com o auxílio de um paquímetro digital. Em seguida, foram retiradas, embaladas a vácuo e congeladas três amostras do músculo *Longissimus dorsi* entre a 12^a e 13^a costela da meia carcaça esquerda de todos os 60 animais para as posteriores avaliações de atributos de qualidade de carne: maciez, coloração (L*, a* e b*) e as perdas totais (congelamento e cocção). Contudo, a composição química da seção compreendida entre a 9^a e a 11^a costelas foi determinada em apenas 24 dessas amostras (correspondentes às amostras de fêmeas Nelore).

Para a avaliação da coloração da carne, os bifes foram descongelados por 16 horas à 4°C. Após descongelamento, os bifes foram retirados das embalagens a vácuo e ficaram 30 minutos em exposição ao ar à temperatura ambiente, com o objetivo de possibilitar a reoxigenação da mioglobina. Após este procedimento, a avaliação da coloração foi realizada com auxílio de colorímetro (HunterLab MiniScan EZ 45/0 LAV) ajustado à fonte iluminante D65, sendo realizadas as leituras para as faixas de L*, a* e b* conforme a escala CIELab na superfície do bife (Pearson, 1994).

As análises de perdas totais (congelamento e cocção) e força de cisalhamento (*WarnerBratzler shear force*) foram realizadas seguindo o protocolo proposto por Bruce et al. (2004). Para a determinação de perdas totais, os bifes foram congelados e em seguida cozidos. Ao final, os bifes foram pesados, sendo as perdas totais estimadas pela diferença percentual de peso entre as amostras congeladas e após o cozimento.

A força de cisalhamento foi mensurada nos mesmos bifes utilizados para as estimativas das perdas totais. Para isso, os bifes foram refrigerados por 16 horas à 4°C. Após este período, cinco amostras cilíndricas de 1,27 cm de diâmetro, foram removidas de cada bife utilizando-se um amostrador de aço inox devidamente afiado, de forma paralela à orientação das fibras musculares. As amostras cilíndricas foram cisalhadas perpendicularmente à orientação das fibras musculares, utilizando-se lâmina de corte em V, com angulação de 60° e espessura de 1,016 mm e velocidade fixa de 20 cm/minutos, acoplada ao texturômetro TA.XT2i Texture Analyser. Foram registradas as forças máximas para cisalhar as amostras cilíndricas, sendo a média de cinco repetições, o valor de força de cisalhamento atribuído a cada amostra.

Obtenção dos espectros NIR nas amostras in natura da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas

Foram tomados os espectros com um aparelho NIR portátil (ITPhotonics S.r.l., modelo poliSPECNIR 900-1700, Breganze, Itália) com auxílio do *software* poliDATA (ITPhotonics S.r.l, Breganze, Itália) das seções compreendidas entre a 9^a e 11^a costelas *in natura* dos 60 bovinos abatidos, em dois diferentes pontos (Figura 1): P1 - porção contendo apenas carne e P2 – porção contendo apenas gordura subcutânea. A coleta dos espectros ocorreu em uma sala climatizada, ajustada para manter a temperatura ambiente em 21°C. Assim, os espectros de cada ponto de avaliação em cada seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas foram obtidos e registrados como $\log(1/R)$, onde R é a refletância da amostra, na faixa de 884,9 e 1702,9 nm, medidos em intervalos de 3,2.

Processamento e obtenção da composição química das amostras da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas

As seções compreendidas entre a 9^a e 11^a costelas das 24 fêmeas Nelore foram completamente dissecadas em carne, gordura e ossos, sendo cada fração posteriormente pesada. Em seguida, as frações de carne e gordura foram homogeneizadas e moídas em conjunto para a obtenção de uma amostra composta de aproximadamente 200 g de carne + gordura de cada animal. Os ossos da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas de cada animal foram cortados em serra de fita em subseções de 1,5 cm de comprimento para obtenção de amostra de aproximadamente 200 g representativa dos ossos. As amostras de carne + gordura e ossos foram acondicionadas em bandejas de alumínio e posteriormente liofilizadas (método INCT G-002/2) e moídas em moinho de facas com peneira de malha de 1 mm com auxílio de N líquido, para posteriores análises laboratoriais. Posteriormente, as amostras de carne + gordura e de ossos foram avaliadas quanto aos conteúdos de ASE e MS (método INCT G-003/2); PB (método INCT N-001/2); MM (método INCT M-001/2) e EE (método INCT G-004/1; Detmann et al., 2021). Os teores de PB, MM e EE da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas completa (carne + gordura + ossos) foram estimados matematicamente a partir das proporções físicas de cada fração (carne + gordura e ossos) e suas respectivas composições químicas.

Análises estatísticas e quimiométricas

A partir dos espectros coletados de cada amostra foram construídas matrizes denominadas de matriz **X**, uma para cada conjunto de dados (composição química da seção compreendida entre a 9^a e 11^a costelas e atributos de qualidade de carcaça e de carne) e ponto de aquisição dos espectros (P1 e P2), as quais continhamas informações das variáveis

independentes do conjunto de dados. Cada linha das matrizes \mathbf{X} corresponde a uma amostra e cada coluna corresponde a um valor de absorvância para um determinado comprimento de onda. Foram criados também três outros conjuntos de informações para cada conjunto de dados, os vetores y , sendo: 1 conjunto de vetores, totalizando 4 vetores, para a determinação da composição química das frações carne + gordura e ossos (MS, MM, PB e EE); 1 conjunto de vetores, totalizando 3 vetores para a determinação da composição química da fração carne + gordura + ossos (PB, MM e EE); e 1 conjunto de vetores, totalizando 8 vetores, para avaliação dos atributos de qualidade de carcaça e de carne (pH24hrs, EGS, L^* , a^* , b^* , Pres perda total e maciez). Na Figura 2 é possível observar os espectros utilizados para a construção dos modelos a partir dos P1 e P2 *in natura*.

Inicialmente, foi realizada a remoção de *outliers* através dos testes T^2 de Hotelling, Q residual reduzido, Leverage e Y residual de Student. Posteriormente, as amostras do conjunto de dados destinados a avaliação de atributos de qualidade de carcaça e de carne foram divididas em dois conjuntos, sendo 75% das amostras para a calibração e 25% das amostras para avaliação externa usando o algoritmo de Kennard-Stone (Kennard e Stone, 1969), que seleciona as amostras com base em suas distâncias. Devido ao reduzido número de amostras disponíveis para o desenvolvimento de modelos de predição da composição química da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas, não foi possível a realização da avaliação externa dos respectivos modelos gerados. Assim, utilizou-se um único conjunto de dados para a determinação da composição química da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas.

Os arquivos contendo os espectros de cada amostra que foram utilizadas para a calibração foram importados para o software PLS-toolbox 8.2.1, que opera em ambiente Matlab 2019b (Math Works, Natick, USA) para subsequente tratamento matemático e/ou desenvolvimento dos modelos. O método de calibração multivariado através da regressão dos quadrados mínimos parciais (PLS) foi utilizado para o desenvolvimento de todos os modelos de calibração.

Para a escolha da quantidade de variáveis latentes foi realizada a validação cruzada *leave one out*. Foram testados os tratamentos de correção de espalhamento multiplicativo, normalização, suavização, primeira e segunda derivada, correção da linha de base, centragem na média, normalização padronizada do sinal, autoescalamento, detrend (Ferreira, 2015) e suas combinações. Dentre os modelos gerados para a estimação de atributos de qualidade de carcaça e de carne com os espectros, aqueles que apresentaram o menor valor para raiz do quadrado médio do erro da validação cruzada (RMSECV) foram submetidos à avaliação externa, sendo:

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n-1} (y_c - y_{cp})^2}{nc}}$$

em que: em que y_c representa os valores obtidos através de análises químicas de referência de cada uma das amostras na validação cruzada e y_{cp} os valores estimados para cada amostra na validação cruzada, e nc o número de amostras da validação cruzada.

As amostras do conjunto de avaliação externa (não selecionadas para o desenvolvimento dos modelos de predição) foram utilizadas para testar a qualidade de ajuste dos modelos gerados para estimar os atributos de qualidade de carcaça e de carne. Para isso, os atributos de qualidade de carcaça e de carne estimadas pelo NIR portátil e pelos métodos laboratoriais convencionais foram comparadas utilizando-se o *Model Evaluation System* (Tedeschi, 2006).

A estimativa dos valores preditos foi comparada com os valores observados usando o seguinte modelo de regressão linear: $y = \beta_0 + \beta_1 \times x$, no qual x = valores preditos; y = valores observados; β_0 e β_1 = intercepto e inclinação. A regressão foi avaliada de acordo com as seguintes hipóteses: $H_0: \beta_0 = 0$ e $H_0: \beta_1 = 1$, e H_a : não H_0 . Os modelos foram considerados bons estimadores, quando o intercepto e a inclinação da regressão entre os valores preditos e observados foram iguais a zero e um, respectivamente. A qualidade de ajuste dos modelos de calibração também foi avaliada através do coeficiente de determinação (R^2), coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade (CCC) e quadrado médio do erro da predição (QMEP; Tedeschi, 2006) e de seus componentes: magnitude de flutuação aleatória (Maf) e flutuação aleatória do modelo (Mof; Kobayashi e Salam, 2000).

RESULTADOS

Composição da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas

Na Tabela 2 estão apresentados os dados obtidos a partir de análises laboratoriais convencionais realizadas nas amostras de cada fração avaliada (carne + gordura e ossos) bem como a composição calculada da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas completa (carne + gordura + ossos) de fêmeas Nelore para desenvolvimento dos modelos de predição dos teores de MS, MM, MO, EE e PB, bem como o número de amostras utilizadas para construção dos conjuntos de calibração.

Nas Tabelas 3, 4 e 5 encontram-se os valores de RMSECV, o coeficiente de determinação da validação cruzada (RVC), o número de variáveis latentes (nVL) para os modelos gerados, o tamanho das matrizes e os tratamentos utilizados para construção dos modelos para cada constituinte de cada uma das frações analisadas (carne + gordura, ossos e

carne + gordura + ossos) obtido em cada um dos dois pontos (P1 e P2; Figura 1) de aquisição dos espectros NIR.

O pré-tratamento suavizar foi utilizado em 4 dos 8 modelos desenvolvidos para a predição da composição química da fração composta por carne + gordura da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas a partir dos espectros obtidos nos P1 e P2. Segunda ou primeira derivadas foram utilizadas em 3 dos 8 modelos desenvolvidos para a predição da composição química da fração composta por ossos da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas a partir dos espectros obtidos nos P1 e P2.

Os valores medidos através dos métodos de análises laboratoriais convencionais e os preditos na validação cruzada *leave one out* para cada fração avaliada em cada um dos pontos de aquisição dos espectros NIR podem ser observados nas Figuras 3, 4 e 5. Todos os modelos gerados para a predição da composição química de todas as frações avaliadas (carne + gordura, ossos e carne + gordura + ossos) obtidos através dos espectros adquiridos em todos os pontos avaliados (P1 e P2) da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas apresentaram baixos valores de RMSECV ($RMSECV \leq 17\%$).

Os modelos desenvolvidos para predição dos componentes MS, MM, EE e PB da fração composta por carne + gordura apresentaram precisão moderada ($0,45 \leq RVC \leq 0,58$) quando desenvolvidos a partir dos espectros obtidos no P1; enquanto aqueles desenvolvidos a partir dos P2 apresentaram alta precisão ($RVC \geq 0,78$).

Com relação a fração ossos da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas, os modelos desenvolvidos para predição dos conteúdos de MS, MM, EE e PB apresentaram precisão baixa ($0,04 \leq RVC \leq 0,37$) quando desenvolvidos a partir dos espectros obtidos no P1. O modelo desenvolvido para predição do teor de PB da fração ossos apresentou precisão moderada ($RVC = 0,40$) quando desenvolvido a partir dos espectros obtidos no P2; enquanto aqueles desenvolvidos para estimação dos teores de MS, MM e EE a partir do P2 apresentaram baixa precisão ($0,05 \leq RVC \leq 0,37$).

Os modelos desenvolvidos a partir dos espectros adquiridos em todos os pontos avaliados (P1 e P2) apresentaram precisão alta ($RVC \geq 0,67$) para a estimação do conteúdo de EE da seção completa (carne + gordura + ossos), enquanto alta precisão ($RVC \geq 0,88$) foi observada quando o teor de PB foi obtido por modelo gerado a partir dos espectros adquiridos nos P2. Moderada precisão foi observada ($0,44 \leq RVC \leq 0,54$) para os modelos desenvolvidos para a estimação dos teores de MM e PB da seção completa (carne + gordura + ossos) a partir dos espectros adquiridos no P1. O modelo desenvolvido para predição do teor de MM da seção

completa (carne + gordura + ossos) a partir dos espectros adquiridos no P2 apresentou precisão baixa ($RVC = 0,34$).

Atributos de qualidade de carcaça e de carne

Calibração

Na Tabela 6 estão apresentados atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte obtidos a partir de métodos laboratoriais convencionais utilizados para o desenvolvimento e avaliação externa dos modelos de predição.

Na Tabela 7 encontram-se os RMSECV, RVC e nVL, bem como o tamanho das matrizes e os tratamentos utilizados para o desenvolvimento de todos os modelos de predição a partir de cada ponto de aquisição dos espectros (P1 e P2) para cada atributo analisado. Menores valores de RMSECV e maiores valores de RVC foram observados para todos os modelos gerados que passaram por tratamentos em comparação aos não tratados. Autoescalamento foi utilizado em 5 dos 8 modelos construídos para predição dos atributos de qualidade de carcaça e de carne a partir dos espectros adquiridos no P1, enquanto normalização e segunda derivada foram utilizados em 3, dos 8 modelos construídos a partir dos espectros adquiridos no P2 da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas.

Os modelos gerados para a predição da EGS, a^* , b^* e maciez obtidos através dos espectros adquiridos em todos os pontos avaliados (P1 e P2), bem como aqueles gerados para a predição de Pres e perdas totais a partir dos espectros adquiridos no P1 da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas apresentaram moderados à altos valores de RMSECV em relação à média ($20\% \leq RMSECV \leq 51\%$). Os demais atributos avaliados (pH 24h e L^* a partir de P1 e P2; Pres e perdas totais a partir de P2) apresentaram baixos valores para RMSECV ($2\% \leq RMSECV \leq 19\%$).

Os modelos desenvolvidos para predição dos parâmetros de qualidade de carcaça pH 24h, EGS, L^* e a^* a partir do P1 e EGS a partir do P2 da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas apresentaram moderada a alta precisão na validação cruzada ($0,61 \leq RVC \leq 0,74$). O modelo de predição de b^* gerado a partir dos espectros adquiridos no P1 da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas apresentou moderada precisão ($0,42 \leq RVC \leq 0,53$) na validação cruzada. Ainda, baixa precisão ($RVC \leq 0,37$) foi observada para os modelos de predição de Pres, perdas totais e maciez a partir dos espectros adquiridos no P1 e pH 24h, L^* , a^* , b^* , Pres, perdas totais e maciez a partir dos espectros adquiridos no P2 da seção compreendida entre a 9ª e a 11ª costelas.

Avaliação externa

Os resultados da avaliação externa para os atributos de qualidade de carcaça e de carne estimados a partir de cada ponto de aquisição dos espectros NIR encontram-se descritos nas Tabelas 8 e 9. Os modelos gerados a partir dos espectros adquiridos no P1 estimaram acuradamente todos os atributos de qualidade de carcaça e de carne, com exceção dos atributos a^* e b^* , visto que não rejeitaram ($P \geq 0,083$) as hipóteses de intercepto igual a zero e inclinação igual a um. Por outro lado, os modelos gerados a partir dos espectros adquiridos no P2 estimaram acuradamente todos os atributos de qualidade de carcaça e de carne, exceto a EGS, visto que não rejeitaram ($P \geq 0,144$) as hipóteses de intercepto e inclinação igual a zero e um, respectivamente.

Moderada a alta precisão e acurácia ($0,40 \leq R^2 \leq 0,67$ e $0,40 \leq CCC \leq 0,81$) foram observadas para as estimativas dos atributos pH 24h, EGS e L^* obtidas a partir dos espectros adquiridos no P1 e EGS, L^* , a^* , b^* , perdas totais e maciez obtidos através dos espectros adquiridos no P2. Ainda, de acordo com os resultados apresentados nas Tabelas 8 e 9, o QMEP para as estimativas dos atributos pH 24h, EGS, L^* , Pres, perdas totais e maciez obtidas a partir do P1 e pH24hrs, L^* , a^* , b^* , Pres, perdas totais e maciez obtidos baseados no P2 foram associados principalmente (mais de 65% do QMEP) com os erros aleatórios (Mof).

Contudo, os modelos gerados para predição dos atributos a^* , b^* , Pres, perdas totais e maciez a partir do P1 e pH 24h e Pres através do P2 foram pouco precisos ($R^2 \leq 0,27$ e $CCC \leq 0,03$). Além disso maiores proporções do QMEP (mais de 68,4% do QMEP) da estimativa da EGS obtidos a partir do P2 foram associados aos QV e Maf, indicando problemas de ajuste desse modelo.

DISCUSSÃO

Composição da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas

Dentre os modelos de validação cruzada testados, destacam-se os modelos desenvolvidos através da aquisição dos espectros no P2 para determinação dos teores de todos os constituintes avaliados na fração carne + gordura, visto que estes apresentaram menor RMSECV e maior RVC em relação aos gerados a partir de P1. Com relação a fração carne + gordura + ossos, destacam-se os modelos desenvolvidos a partir dos espectros adquiridos no P2 para PB, enquanto os modelos gerados para estimação do teor de EE apresentaram qualidade de ajuste similares, independentemente do local de aquisição dos espectros. Ainda, os

resultados sugeriram problemas de ajuste dos modelos para a estimação do conteúdo de MM independentemente do local de aquisição dos espectros para todas as frações avaliadas, exceto para a fração carne + gordura.

Dixit et al. (2016) avaliaram os teores de EE, PB e MM em amostras de carne moída *in natura* de bovinos. Esses autores observaram parâmetros de qualidade de ajuste dos modelos para a estimação dos teores de EE e PB semelhantes aos encontrados no presente estudo para as frações carne + gordura e carne + gordura + ossos (RMSECV = 3,50-6,54 e RVC = 0,95-0,99 para EE e RMSECV = 1,29-2,19; RVC = 0,91-0,97 para PB; Dixit et al., 2016). Contudo, qualidade de ajuste de modelo superior foi observada para a predição do teor de MM em carne moída *in natura* por Dixit et al. (2016) quando comparado aos modelos propostos no presente estudo, principalmente para aqueles correspondentes à fração ossos e carne + gordura + ossos. O limitado número de amostras que compuseram o banco de dados do presente estudo e a ausência de processamento das amostras para aquisição dos espectros (amostras integras e *in natura*) podem ter resultado na pior qualidade de ajuste dos modelos para a predição do teor de MM no presente estudo. Além disso, fibras musculares em amostras intactas podem produzir um maior efeito de reflexão interna e maior absorção de luz (menor reflectância) do que amostras processadas e homogeneizadas (Su et al., 2014). Assim, a destruição da estrutura das fibras musculares na carne moída (Cheng et al., 2015) reduz os efeitos da reflexão em relação às fibras intactas (Prieto et al., 2009), podendo resultar em modelos com melhor qualidade de ajuste. Ainda, o NIR mede a absorção de radiação por ligações de moléculas orgânicas. Dessa forma, modelos de predição do teor de MM podem apresentar pior qualidade de ajuste em relação aos modelos de predição do teor de materiais orgânicos, como os teores de PB e EE. No entanto, a correta predição do teor de MM ou de alguns minerais específicos via NIR pode ser possível através da associação dos minerais com a matriz orgânica dos materiais (Givens e Deaville, 1999). Assim, a maior proporção de ossos, e conseqüentemente de MM, presente nas frações ossos e carne + gordura + ossos pode justificar a pior qualidade de ajuste dos modelos de predição do teor de MM para essas frações em relação a fração carne + gordura, bem como aos modelos desenvolvidos por Dixit et al. (2016) para estimação do teor de MM na carne moída *in natura* de bovinos.

Além disso, os modelos desenvolvidos para a determinação da composição química da fração ossos apresentaram-se pouco precisos, independentemente do local de aquisição dos espectros (P1 ou P2). Nesse contexto, a partir dos resultados obtidos no presente estudo, a

determinação da composição da seção completa compreendida entre a 9ª e 11ª costelas somente seria possível através dos modelos de predição da fração carne + gordura + ossos.

Atributos de qualidade de carcaça e de carne

Alguns métodos são capazes de diminuir os erros dos modelos através de operações matemáticas, melhorando assim o ajuste dos mesmos (Pasquini, 2018). Um destes métodos é o uso de tratamentos que realizam a correção de erros aleatórios e erros sistemáticos (Pasquini, 2003) e estes podem ser aplicados na construção de modelos de predição. Cerca de 75% dos modelos gerados a partir do P1 para predição de atributos de qualidade de carcaça e de carne utilizaram o tratamento autoescalamiento, sozinho ou combinado a outro tratamento. O autoescalamiento é um tratamento que atua nas colunas da matriz espectral (matriz X) e representa a combinação de centrar na média e escalar pela variância (Ferreira, 2015), destacando a variação espectral (Ciurczak et al., 2021). A utilização deste pré-tratamento pode ter ocorrido frequentemente nos modelos de predição de atributos de qualidade de carcaça e de carne devido a pequena variação da composição entre as amostras, sendo necessário destacar variações espectrais, possibilitando a distinção entre os espectros.

Os atributos a^* e b^* ; e EGS não foram corretamente estimados pelos modelos desenvolvidos através dos espectros adquiridos no P1 e P2, respectivamente. Um motivo que pode ter levado a baixa qualidade de ajuste dos modelos de predição dos atributos a^* e b^* a partir do ponto de aquisição de espectros P1 é a baixa variação nos valores observados para a^* e b^* , levando à rejeição das hipóteses de inclinação e intercepto igual a 0 e 1, respectivamente, e baixa precisão observada. A baixa variação nos valores observados para os atributos a^* e b^* foi observada somente no P1, a qual pode ter sido decorrente do processo de remoção de *outliers* e separação do banco de dados, visto que um maior número de *outliers* foram identificados e removidos nesse banco de dados (duas e uma amostras foram removidas como *outliers* para determinação de a^* e b^* em P1, respectivamente). A estimativa da EGS a partir do P2 não foi acurada, provavelmente devido as maiores proporções do QMEP (mais de 68,4% do QMEP) terem sido associadas aos QV e Maf, indicando problemas de ajuste desses modelos. Ainda, o problema de ajuste deste atributo pode ter sido atribuído à baixa associação entre a EGS e os espectros colhidos no P2 (apenas sobre a gordura).

Bonin et al. (2020) descreveram valores baixos de RMSECV (RMSECV = 1,37-1,48) e moderados de RCV (RVC = 0,36-0,51) para modelos de predição da maciez do músculo *Longissimus thoracis in natura* construídos a partir de 401 amostras de machos Nelore não

castrados. Apesar do reduzido número de amostras utilizadas no presente estudo ($n = 60$), os valores de RMSECV e RVC (RMSECV = 1,06-1,39 e RVC = 0,10-0,51) observados foram semelhantes aos reportados por Bonin et al. (2020), independentemente do ponto de aquisição dos espectros utilizados. Ainda, os resultados da avaliação externa indicaram que os modelos gerados a partir dos P1 e P2 estimaram acuradamente a maciez da carne de bovinos Nelore (machos não castrados e fêmeas), bem como alta precisão ($R^2 = 0,62$ e $CCC = 0,70$) foi observada para o modelo gerado através dos espectros adquiridos no P2.

O uso o NIR para predição da composição química e atributos de qualidade de carcaça e de carne em amostras intactas e *in natura* pode ser um importante avanço para o sistema produtivo de bovinos, em especial para a indústria de carne, visto que esse método não requer a preparação das amostras antes da realização das análises e não é necessário a retirada e perda de carne que poderia ser comercializada. Os modelos desenvolvidos no presente estudo para a predição da maioria dos constituintes químicos e atributos de qualidade de carcaça e de carne apresentaram qualidade de ajuste satisfatórias. No entanto, alguns modelos de predição desenvolvidos apresentaram baixa qualidade de ajuste quando os espectros foram obtidos em um ou dois pontos, como aqueles para a estimativa dos teores de MM nas frações ossos e carne + gordura + ossos nos P1 e P2 e perdas totais e L^* no P1. Para esses parâmetros, a capacidade preditiva dos modelos pode ser melhorada através da obtenção de um maior número de amostras e/ou aumentando a área escaneada, o que poderia aumentar a quantidade de informação adquirida.

CONCLUSÃO

O espectro NIR obtido a partir de diferentes pontos em amostras *in natura* tem potencial para ser utilizado como uma ferramenta para predição da composição química da seção compreendida entre as 9^a e a 11^a costelas de fêmeas Nelore. Ainda, a utilização deste método é importante pois pode substituir análises que são custosas, laboriosas e demoradas. Contudo, outros estudos com maior número de amostras avaliadas são necessários para melhorar a precisão e robustez das equações preditivas da composição da seção compreendida entre as 9^a e a 11^a costelas de fêmeas Nelore, bem como desenvolver equações preditivas para outras categorias animais.

Os modelos de regressão desenvolvidos a partir da aquisição de espectros por diferentes pontos da seção compreendida entre as 9^a e a 11^a costelas *in natura* estimaram acuradamente e,

portanto, são recomendados para estimar atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte. É importante ressaltar que, apesar de a EGS não ter sido acuradamente estimada a partir do P2, o uso desse ponto para aquisição dos espectros se mostra mais vantajoso, visto que não exige o corte da carcaça para que seja realizada a leitura.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Barragán-Hernández, W., L. Mahecha-Ledesma, W. Burgos-Paz, M. Olivera-Angel, and J. Angulo-Arizala. 2020. Using near-infrared spectroscopy to determine intramuscular fat and fatty acids of beef applying different prediction approaches. *J. Anim. Sci.* 98. doi:10.1093/jas/skaa342. Available from: <https://academic.oup.com/jas/article/doi/10.1093/jas/skaa342/5939743>
- Bonin, M. de N., S. da Luz e Silva, L. Bünger, D. Ross, G. L. Dias Feijó, R. da Costa Gomes, F. Palma Rennó, M. H. de Almeida Santana, F. Marcondes de Rezende, L. C. Vinhas Ítavo, F. J. de Novais, L. M. A. Surita, M. de Nadai Bonin, M. W. Filgueira Pereira, and J. B. S. Ferraz. 2020. Predicting the shear value and intramuscular fat in meat from Nellore cattle using Vis-NIR spectroscopy. *Meat Sci.* 163:108077. doi:10.1016/j.meatsci.2020.108077. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108077>
- Bruce, H. L., J. L. Stark, and S. L. Beilken. 2004. The effects of finishing diet and postmortem ageing on the eating quality of the *M. longissimus thoracis* of electrically stimulated Brahman steer carcasses. *Meat Sci.* 67:261–268. doi:10.1016/j.meatsci.2003.10.014.
- Cheng, W., J. H. Cheng, D. W. Sun, and H. Pu. 2015. Marbling Analysis for Evaluating Meat Quality: Methods and Techniques. *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* 14:523–535. doi:10.1111/1541-4337.12149.
- Ciurczak, E. W., B. Igne, J. Workman, and D. A. B. Jr., eds. 2021. *Handbook of Near-Infrared Analysis*. 4th ed. CRC Press.
- De Marchi, M. 2013. On-line prediction of beef quality traits using near infrared spectroscopy. *Meat Sci.* 94:455–460. doi:10.1016/j.meatsci.2013.03.003. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.meatsci.2013.03.003>

- Detmann, E., L. F. C. Silva, G. C. Rocha, M. N. N. Palma, and J. P. P. Rodrigues. 2021. *Métodos para análise de alimentos*. 2nd ed. (Suprema: Visconde do Rio Branco, editor.). Visconde do Rio Branco.
- Dixit, Y., M. P. Casado-Gavaldà, R. Cama-Moncuñill, X. Cama-Moncuñill, F. Jacoby, P. J. Cullen, and C. Sullivan. 2016. Multipoint NIR spectrometry and collimated light for predicting the composition of meat samples with high standoff distances. *J. Food Eng.* 175:58–64. doi:10.1016/j.jfoodeng.2015.12.004. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2015.12.004>
- Dixit, Y., M. P. Casado-Gavaldà, R. Cama-Moncuñill, X. Cama-Moncuñill, M. Markiewicz-Keszycka, P. J. Cullen, and C. Sullivan. 2017. Developments and Challenges in Online NIR Spectroscopy for Meat Processing. *Compr. Rev. Food Sci. Food Saf.* 16:1172–1187. doi:10.1111/1541-4337.12295.
- Ferreira, M. M. C. 2015. *Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações*. Editora da Unicamp. Available from: <http://books.scielo.org/id/2nc9y>
- Furtado, E. J. G., A. M. Bridi, D. F. Barbin, C. C. P. Barata, L. M. Peres, A. P. A. da C. Barbon, N. Andreo, B. de L. Giangareli, D. K. Terto, and J. P. Batista. 2019. Prediction of pH and color in pork meat using VIS-NIR near-infrared spectroscopy (NIRS). *Food Sci. Technol.* 39:88–92. doi:10.1590/fst.27417.
- Givens, D. I., and E. R. Deaville. 1999. The current and future role of near infrared reflectance spectroscopy in animal nutrition: a review. *Aust. J. Agric. Res.* 50:1131. doi:10.1071/AR98014. Available from: <http://www.publish.csiro.au/?paper=AR98014>
- Hankins, O. G., and P. E. Howe. 1946. Estimation of the composition of beef carcasses and cuts. US Department of Agriculture.
- Kennard, R. W., and L. A. Stone. 1969. Computer Aided Design of Experiments. *Technometrics.* 11:1:137–148.
- Kobayashi, K., and M. U. Salam. 2000. Comparing simulated and measured values using mean squared deviation and its components. *Agron. J.* 92:345–352. doi:10.2134/agronj2000.922345x.

- Lambe, N. R., N. Clelland, J. Draper, E. M. Smith, J. Yates, and L. Bunger. 2021. Prediction of intramuscular fat in lamb by visible and near-infrared spectroscopy in an abattoir environment. *Meat Sci.* 171:108286. doi:10.1016/j.meatsci.2020.108286. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.meatsci.2020.108286>
- Pasquini, C. 2003. Near infrared spectroscopy: Fundamentals, practical aspects and analytical applications. *J. Braz. Chem. Soc.* 14:198–219. doi:10.1590/S0103-50532003000200006.
- Pasquini, C. 2018. Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review. *Anal. Chim. Acta.* 1026:8–36. doi:10.1016/j.aca.2018.04.004. Available from: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004>
- Pearson, A. M. 1994. *Quality Attributes and their Measurement in Meat, Poultry and Fish Products.* (A. M. Pearson and T. R. Dutson, editors.). Springer US, Boston, MA. Available from: <http://link.springer.com/10.1007/978-1-4615-2167-9>
- Ponnampalam, E. N., B. Holman, and J. P. Kerry. 2015. Impact of Animal Nutrition on Muscle Composition and Meat Quality. In: *Meat Quality.* CRC Press. p. 118–163. Available from: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781482220322/chapters/10.1201/b19250-8>
- Prieto, N., D. W. Ross, E. A. Navajas, G. R. Nute, R. I. Richardson, J. J. Hyslop, G. Simm, and R. Roehe. 2009. On-line application of visible and near infrared reflectance spectroscopy to predict chemical-physical and sensory characteristics of beef quality. *Meat Sci.* 83:96–103. doi:10.1016/j.meatsci.2009.04.005. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.meatsci.2009.04.005>
- Ramos, E. M., and L. A. M. Gomide. 2009. *Avaliação da qualidade de carne: fundamentos e metodologias.* Editora UFV, Viçosa, Minas Gerais, BR.
- Santos, A. C. P., B. C. D. Silva, V. da S. Oliveira, and R. de L. Valença. 2018. Métodos de avaliação de carcaça e de carne dos animais através de predições in vivo e post mortem. *Rev. Científica Med. Veterinária.* 21.
- Su, H., K. Sha, L. Zhang, Q. Zhang, Y. Xu, R. Zhang, H. Li, and B. Sun. 2014. Development of near infrared reflectance spectroscopy to predict chemical composition with a wide range of variability in beef. *Meat Sci.* 98:110–114. doi:10.1016/j.meatsci.2013.12.019. Available from: <http://dx.doi.org/10.1016/j.meatsci.2013.12.019>

Tedeschi, L. O. 2006. Assessment of the adequacy of mathematical models. *Agric. Syst.* 89:225–247. doi:10.1016/j.agsy.2005.11.004.



Figura 1 – Representação dos pontos onde foram tomados espectros na seção HH in natura. Sendo os pontos P1 somente em carne e P2 e porção apenas com gordura.

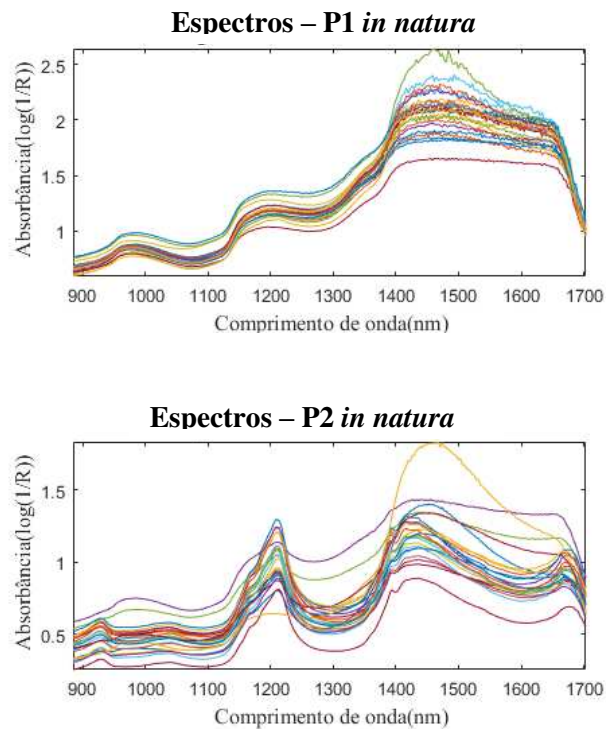


Figura 2 – Espectros utilizados para construção de modelos de predição da composição química e qualidade de carne de amostras de bovinos obtidos por NIR portátil

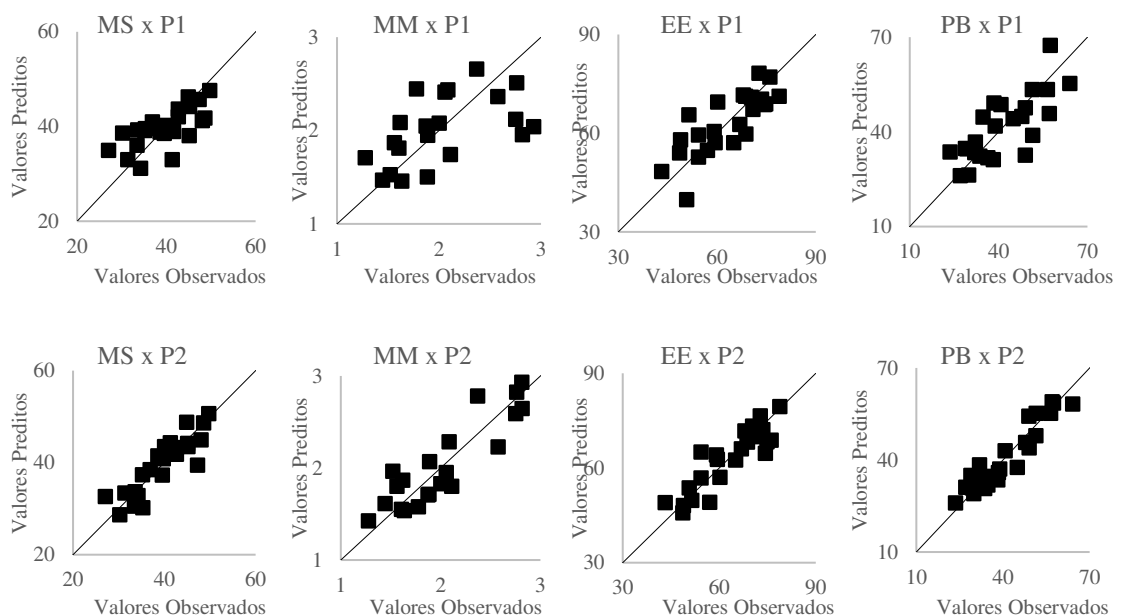


Figura 3 - Relação entre os teores de matéria seca (MS), matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE) e proteína bruta (PB) obtidos através de modelos desenvolvidos nos diferentes pontos de aquisição de espectros (P1 e P2) através de análises químicas tradicionais e preditos da validação cruzada referentes a porção composta por carne e gordura da secção HH de bovinos.

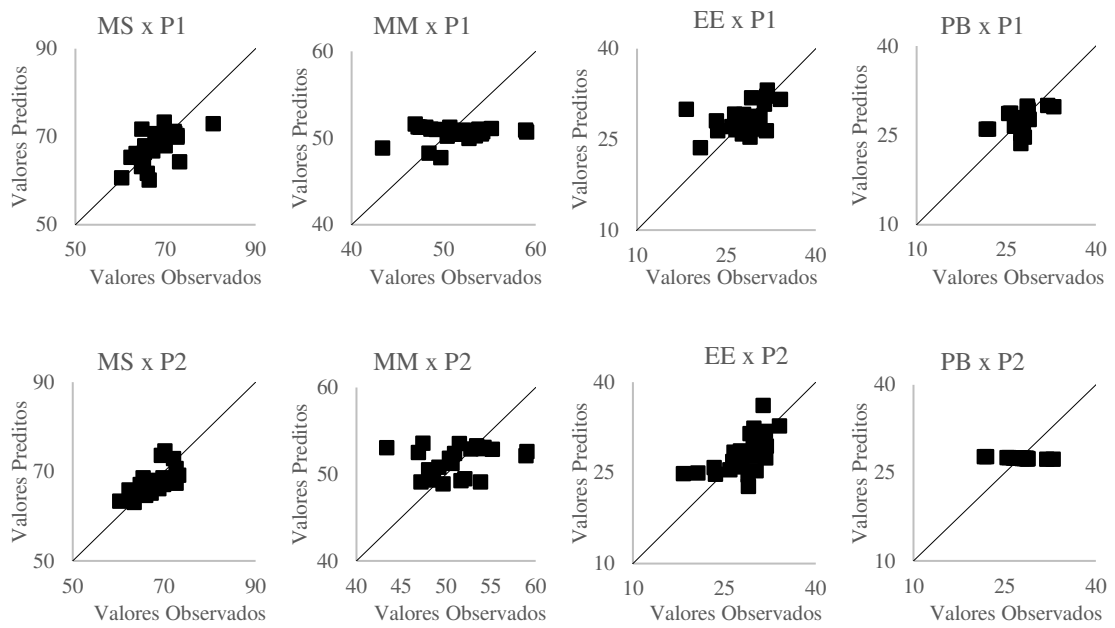


Figura 4 - Relação entre os teores de matéria seca (MS), matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE) e proteína bruta (PB) obtidos através de modelos desenvolvidos nos diferentes pontos de aquisição de espectros (P1 e P2) obtidos através de análises químicas tradicionais e preditos da validação cruzada referentes a porção composta por ossos da secção HH de bovinos.

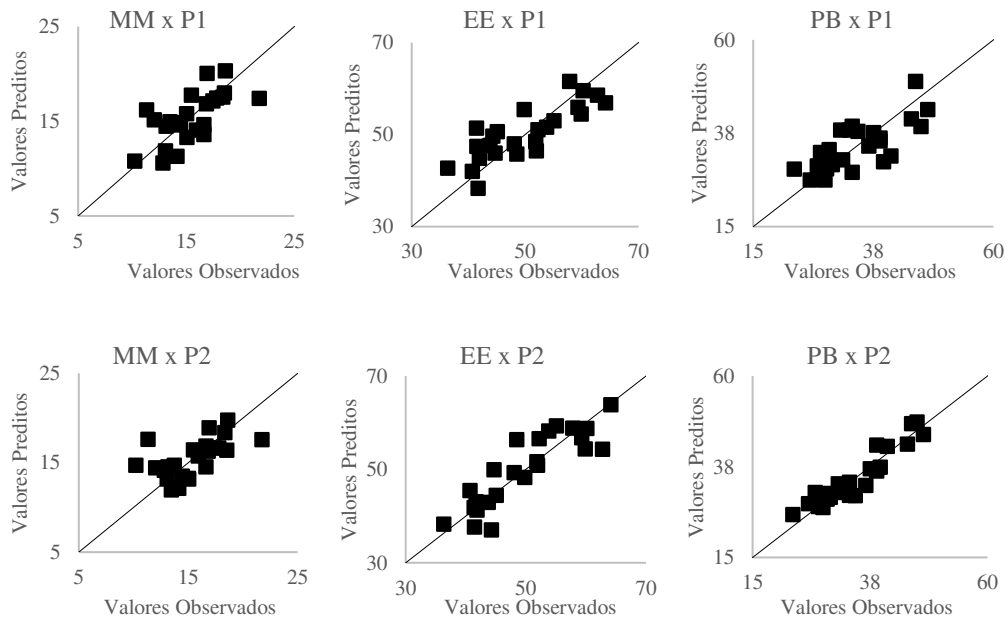


Figura 5 - Relação entre os teores de matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE) e proteína bruta (PB) obtidos através de modelos desenvolvidos nos diferentes pontos de aquisição de espectros (P1 e P2) obtidos através de análises químicas tradicionais e preditos da validação cruzada referentes a porção composta pela secção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas completa (carne, gordura e ossos) de bovinos.

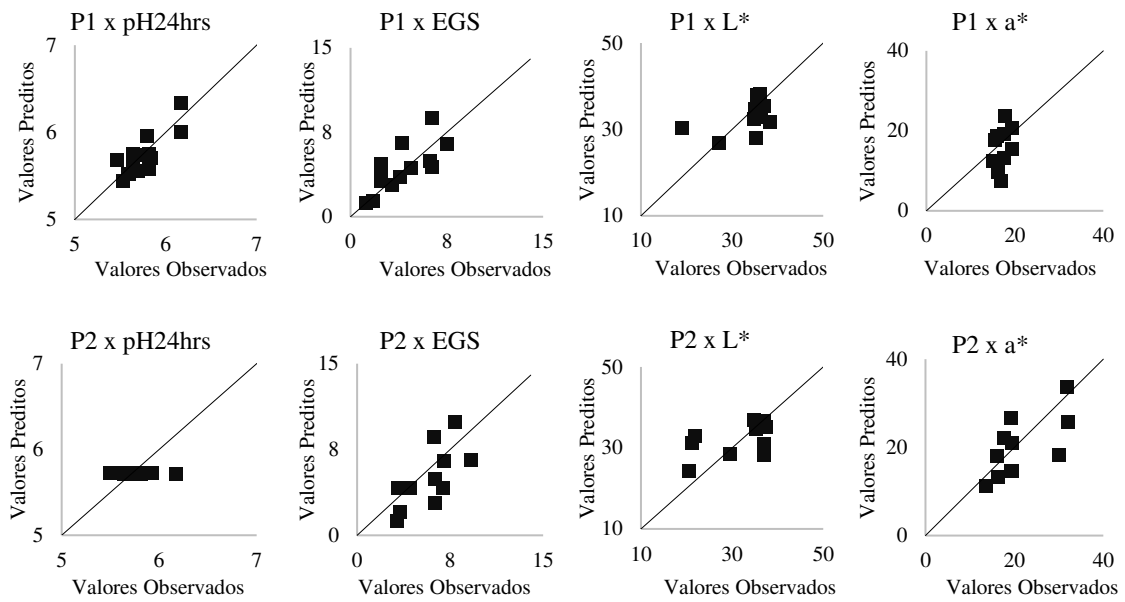


Figura 8 - Relação entre os teores de pH24hrs (pH da carcaça 24hrs após ao abate), EGS (espessura de gordura subcutânea), L* (luminosidade) e a*(intensidade de vermelho) obtidos através de métodos tradicionais e preditos a partir de modelos de predição construídos a partir de espectros obtidos nos pontos 1 (P1) e 2 (P2).

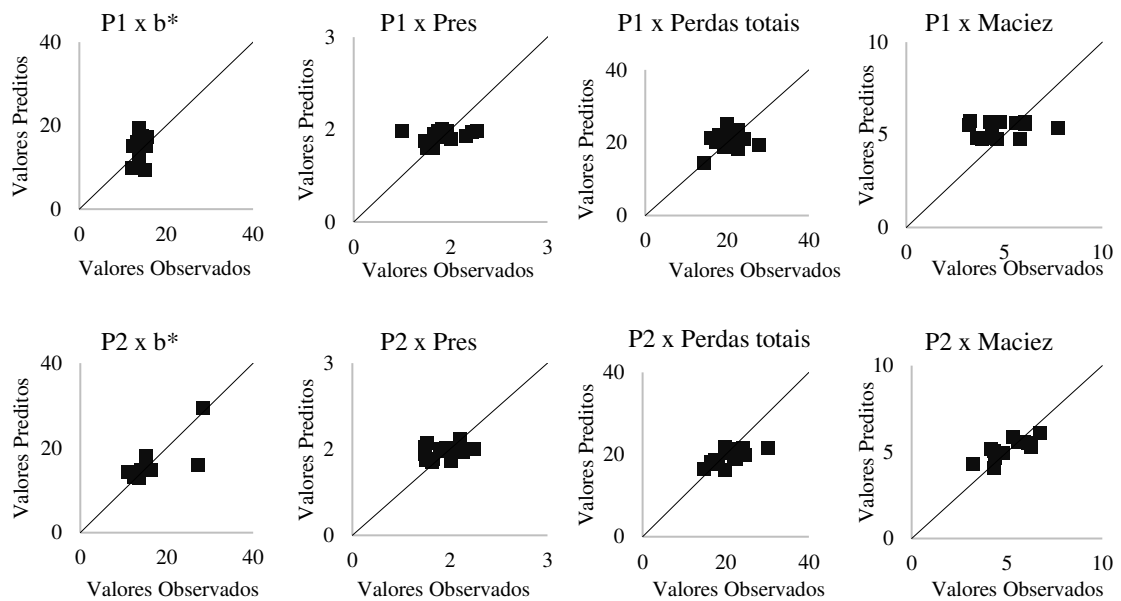


Figura 10 - Relação entre os teores de b* (intensidade de amarelo), Pres (perdas por resfriamento), perdas totais e maciez obtidos através de métodos tradicionais e preditos a partir de modelos de predição construídos a partir de espectros obtidos nos pontos 1 (P1) e 2 (P2).

Tabela 1 – Relação do número de amostras, categoria animal e pesos médio, mínimo e máximo dos animais

Banco de dados	Número de animais	Categoria	Idade média	Peso (kg)		
				Médio	Mínimo	Máximo
Parâmetros de qualidade de carcaça	36	Machos não castrado	1,3 anos	389	192	503
	24	Fêmeas	6 anos	508	389	617
Composição química da carcaça	24	Fêmeas	6 anos	508	389	617

Tabela 2 - Descrição da composição química obtida por métodos laboratoriais convencionais para os componentes carne+gordura, ossos e carne+gordura+ossos da seção compreendida entre a 9° e 11° costelas de bovinos de corte

Amostras	Parâmetros	Média	Mínimo	Máximo	Desvio padrão
C+G ¹	MS ⁶	39,7	27,1	49,8	6,23
	EE ⁷	63,2	43,2	78,9	10,27
	MM ⁸	2,2	1,3	3,2	0,61
	PB ⁹	41,4	23,7	64,1	11,23
Ossos ²	MS	68,3	60,3	80,6	4,46
	EE	28,5	20,7	34,1	3,12
	MM	51,3	43,4	59,0	3,71
	PB	27,4	21,7	33,0	2,29
C+G+O ³	EE	49,9	36,4	64,2	7,94
	MM	15,3	10,2	21,7	2,68
	PB	35,0	22,7	47,7	7,17

¹Amostra da seção HH de bovinos composta de carne e gordura, ²amostra da seção HH de bovinos composta por ossos e ³ amostra da seção HH completa (carne, gordura e ossos), ⁴matéria seca em estufa a 55°C, ⁵matéria seca em estufa a 105°C, ⁶matéria seca, ⁷extrato etéreo, ⁸matéria mineral e ⁹poteína bruta.

Tabela 3: Conjuntos de dados usados para construir os modelos de predição da composição química dos componentes carne+gordura, da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de bovinos de corte fêmeas a partir dos espectros obtidos *in natura* nos pontos 1 e 2

Itens ¹	P ²	TM ³	PT ⁴	nVL ⁵	RMSECV ⁶	RVC ⁷	RQMEC ⁸	RC ⁹
P1								
	MS	24x256	1ªd + MSC	6	4,42	0,48	1,23	0,96
	EE	24x256	CM + Su,	5	6,74	0,58	4,80	0,77
	MM	24x256	Au, + Su,	6	0,43	0,45	0,27	0,76
	PB	24x256	CM + Su,	5	7,70	0,54	4,97	0,80
P2								
	MS	24x256	Su,	7	2,95	0,78	2,08	0,88
	EE	24x256	SNV + Norm,	5	4,68	0,79	3,31	0,89
	MM	24x256	LB	8	0,22	0,84	0,15	0,93
	PB	24x256	LB + Norm,	7	3,80	0,88	2,25	0,96

¹P1 = modelos gerados a partir do ponto 1, P2 = modelos gerados a partir do ponto 2, ²ASA = amostra seca após liofilização, ASE = amostra seca em estufa a 105°C, MS = matéria seca, EE= extrato etéreo, MM = matéria mineral, PB = proteína bruta, ³tamanho da matriz utilizado para gerar os modelos, ⁴CM = centrar na média, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, Au. = autoescalamiento, Su. = suavização, 1ªd = primeira derivada, LB = correção de linha de base, SNV = normalização padronizada do sinal, Norm. = normalização, ⁵número de variáveis latentes, ⁶raiz quadrada do erro quadrado médio de validação cruzada, ⁷coeficiente de correlação da validação cruzada, ⁸raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração e ⁹coeficiente de correlação de Person da validação cruzada.

Tabela 4: Conjuntos de dados usados para construir os modelos de predição da composição química do componente ossos, da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de bovinos de corte fêmeas a partir dos espectros obtidos *in natura* nos pontos 1 e 2

Itens ¹	P ²	TM ³	PT ⁴	nVL ⁵	RMSECV ⁶	RVC ⁷	RQMEC ⁸	RC ⁹
P1	MS	24x256	1ªd + 2ªd	7	3,62	0,37	1,03	0,94
	EE	24x256	1ªd + MSC	8	3,41	0,17	0,34	0,99
	MM	24x256	Au, + LB	1	3,65	0,04	3,40	0,20
	PB	24x256	1ªd + 2ªd	11	2,14	0,24	0,07	1,00
P2	MS	23x256	CM + LB	8	2,88	0,37	1,41	0,84
	EE	22x256	Au, + Norm,	7	3,04	0,37	1,69	0,78
	MM	24x256	Au, + SNV	1	3,64	0,05	3,21	0,23
	PB	24x256	Su,	1	2,46	0,40	2,37	0,02

¹P1 = modelos gerados a partir do ponto 1, P2 = modelos gerados a partir do ponto 2, ²ASA = amostra seca após liofilização, ASE = amostra seca em estufa a 105°C, MS = matéria seca, EE= extrato etéreo, MM = matéria mineral, PB = proteína bruta, ³tamanho da matriz utilizado para gerar os modelos, 1ªd = primeira derivada, 2ªd = segunda derivada, Norm. = normalização, Su. = suavização, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, Au. = autoescalamento, LB = correção de linha de base, SNV = normalização padronizada do sinal, CM = centrar na média, ⁵número de variáveis latentes, ⁶raiz quadrada do erro quadrado médio de validação cruzada, ⁷coeficiente de correlação da validação cruzada, ⁸raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração e ⁹coeficiente de correlação de Person da validação cruzada.

Tabela 5: Conjuntos de dados usados para construir os modelos de predição da composição química dos componentes carne+gordura+ossos, da seção compreendida entre a 9ª e 11ª costelas de bovinos de corte fêmeas a partir dos espectros obtidos *in natura* nos pontos 1 e 2

Itens ¹	P ²	TM ³	PT ⁴	nVL ⁵	RMSECV ⁶	RVC ⁷	RQMEC ⁸	RC ⁹
P1	EE	24x256	CM	7	4,53	0,67	1,03	0,98
	MM	24x256	Su,	8	2,15	0,44	1,09	0,83
	PB	24x256	Au, + Su,	4	4,69	0,54	3,62	0,72
P2	EE	24x256	Au,	11	3,87	0,77	1,21	0,98
	MM	24x256	CM + LB	6	2,22	0,34	1,44	0,71
	PB	24x256	LB + Norm,	8	2,38	0,88	1,36	0,96

¹P1 = modelos gerados a partir do ponto 1, P2 = modelos gerados a partir do ponto 2, ²EE= extrato etéreo, MM = matéria mineral, PB = proteína bruta, ³tamanho da matriz utilizado para gerar os modelos, ⁴CM = centrar na média, Su. = suavização, Au. = Autoescalamento, LB = correção de linha de base, Norm. = normalização, ⁵número de variáveis latentes, ⁶raiz quadrada do erro quadrado médio de validação cruzada, ⁷coeficiente de correlação da validação cruzada, ⁸raiz quadrada do erro quadrático médio da calibração e ⁹coeficiente de correlação de Person da calibração.

Tabela 6: Análise descritiva de conjuntos de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de análises tradicionais

Parâmetros ¹	P1 ²					P2 ³				
	Conjunto	N	Média	Mínimo	Máximo	Conjunto	N	Média	Mínimo	Máximo
pH24hrs	Cal	42	5,7	5,4	6,4	Cal	43	5,7	5,4	6,4
	Val	14	5,8	5,5	6,2	Val	15	5,7	5,5	6,2
EGS	Cal	39	4,4	0,2	12,4	Cal	43	4,2	0,2	12,4
	Val	13	4,0	1,2	7,5	Val	14	5,1	1,2	9,2
L*	Cal	30	34,7	20,6	42,3	Cal	31	34,8	19,0	42,3
	Val	10	33,4	19,0	38,2	Val	11	31,6	20,6	37,5
a*	Cal	30	17,7	12,9	33,2	Cal	31	16,2	12,9	31,6
	Val	10	17,1	15,0	19,3	Val	11	21,3	13,5	32,1
b*	Cal	31	16,1	11,1	31,0	Cal	30	14,4	11,1	27,4
	Val	10	14,0	12,2	15,6	Val	10	16,5	11,1	28,5
Pres	Cal	43	1,4	0,8	2,8	Cal	43	1,4	1,0	1,9
	Val	14	1,4	0,7	1,9	Val	14	1,4	1,1	1,9
Perdas totais	Cal	41	20,0	10,1	30,2	Cal	40	19,7	10,1	27,8
	Val	14	20,4	14,3	27,8	Val	14	21,1	14,8	30,2
Maciez	Cal	41	5,2	2,9	9,0	Cal	39	5,0	2,9	7,8
	Val	14	4,8	3,2	7,8	Val	13	5,4	3,2	9,0

¹pH 24hrs = pH 24hrs após ao abate, EGS = espessura de gordura subcutânea, L* = luminosidade, a* = intensidade de vermelho, b* = intensidade de amarelo, Pres = perdas por resfriamento, ²P1 = modelos para predição da composição de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 1, Cal = conjunto de calibração, Val = conjunto de validação externa, N = número de amostras utilizadas para construção dos modelos e ³P2 = modelos para predição da composição de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 2

Tabela 7. Informações sobre conjuntos de dados usados para construir e validar os modelos de predição e resultados estatísticos para os modelos de predição de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de espectros tomados em diferentes pontos

Pontos ¹	Parâmetros ²	Pré-tratamentos ³	TM ⁴	nVL ⁵	RMSECV ⁶	RVC ⁷
P1	pH24hrs	Au, + Su,	56x256	4	0,15	0,61
	EGS	Norm, + MSC	52x256	4	1,91	0,74
	L*	Au, + Su,	40x256	6	4,08	0,70
	a*	SNV + Au,	40x256	4	3,87	0,74
	b*	Au, + Det,	40x256	3	4,98	0,45
	Pres	1 ^a d + LB	57x256	2	0,31	-0,05
	Perdas totais	Det, + CM	55x256	3	4,46	0,36
	Maciez	Au, + SNV	55x256	1	1,39	0,10
P2	pH24hrs	Norm, + 2 ^a d	58x256	1	0,20	-0,30
	EGS	Su, + 2 ^a d	57x256	7	2,30	0,63
	L*	Su,	42x256	2	5,54	0,02
	a*	Norm, + Det,	42x256	5	4,26	-0,11
	b*	MSC + Det,	41x256	3	3,44	-0,13
	Pres	Norm, + Det,	57x256	2	0,20	0,16
	Perdas totais	2 ^a d + LB	54x256	4	3,83	0,27
	Maciez	Su, + MSC	52x256	2	1,06	0,37

¹P1 = modelos para predição da composição de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 1, P2 = modelos para predição da composição de parâmetros de qualidade de carne de bovinos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 2, ²pH24hrs = pH da carcaça 24hrs após ao abate, EGS = espessura de gordura subcutânea, L* = luminosidade, a* = intensidade de vermelho, b* = intensidade de amarelo, Pres = perdas por resfriamento, ³Au. = autoescalamento, 1^ad = primeira derivada, Su. = suavização, Norm. = normalização, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, 2^ad = segunda derivada, LB = correção de linha de base, SNV = normalização padronizada do sinal, Det. = detrend, CM = centrar na média, ⁴tamanho da matriz utilizada para construção dos modelos de calibração e validação externa, ⁵número de variáveis latentes, ⁶raiz quadrada do erro quadrado médio de validação cruzada e ⁷coeficiente de correlação da validação cruzada,

Tabela 8: Médias (%) e estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos atributos pH da carcaça 24hrs após ao abate,

Parâmetros ¹	Itens ²	Média (%)	DP ³	Máximo	Mínimo	R ² ⁴	CCC ⁵	Regressão: Intercepto			Regressão: Inclinação			QMEP ⁹	QV ¹⁰	MaF ¹¹	MoF ¹²	
								Estimativa	EP ⁶	P-valor ⁷	Estimativa	EP	P-valor ⁸					
pH24hrs	P1	Obs,	5,8	0,21	6,2	5,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Au, + Su,	5,7	0,24	6,3	5,4	0,65	0,81	1,58	0,84	0,083	0,73	0,15	0,088	0,018	0,001	0,004	0,013
	P2	Obs,	5,7	0,17	6,2	5,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Norm, + 2 ^a d	5,7	≤0,01	5,7	5,7	-0,06	0,01	-19,21	60,19	0,755	4,36	10,53	0,754	0,029	0,001	≤0,001	0,028
EGS	P1	Obs,	4,0	2,03	7,5	1,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Norm, + MSC	4,3	2,09	8,7	1,2	0,52	0,74	0,88	0,92	0,359	0,73	0,19	0,190	2,04	0,08	0,30	1,67
	P2	Obs,	5,1	2,41	9,2	1,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Su, + 2 ^a d	3,7	3,56	9,9	-2,0	0,54	0,63	3,25	0,64	≤0,001	0,52	0,13	0,003	7,23	2,19	2,75	2,28
L*	P1	Obs,	33,4	5,86	38,2	19,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Au, + Su,	32,8	3,84	38,2	26,9	0,13	0,44	9,31	15,66	0,569	0,73	0,47	0,591	25,1	0,4	0,9	23,8
	P2	Obs,	31,6	7,01	37,5	20,6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Su,	32,3	4,07	36,8	24,3	0,22	0,47	1,32	15,67	0,934	0,94	0,48	0,898	32,0	0,5	0,1	31,4
a*	P1	Obs,	17,1	1,49	19,3	15,0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		SNV + Au,	15,8	5,12	23,8	7,4	0,03	0,19	15,39	1,58	≤0,001	0,11	0,10	≤0,001	22,1	1,6	18,7	1,7
	P2	Obs,	21,3	6,70	32,1	13,5	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Norm, + Det,	20,0	6,80	33,7	11,2	0,38	0,65	8,21	5,12	0,144	0,66	0,24	0,195	29,4	1,9	4,9	22,6

espessura de gordura subcutânea, luminosidade e intensidade de vermelho

¹pH24hrs = pH da carcaça 24hrs após ao abate, EGS = espessura de gordura subcutânea, L* = luminosidade, a* = intensidade de vermelho, ²P1 = modelos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 1, P2 = modelos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 2, Au. = Autoescalamento, ¹d = primeira derivada, LB = correção de linha de base, Su. = suavização, MSC = correção de espalhamento multiplicativo, Norm. = normalização, CM = centrar na média, SNV = normalização padronizada do sinal, ²d = segunda derivada, Det. = detrend, ³desvio padrão, ⁴coeficiente de determinação, ⁵coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ⁶erro padrão, ⁷H0: $\beta_0 = 0$, ⁸H0: $\beta_1 = 1$, ⁹quadrado médio do erro de predição, ¹⁰vício, ¹¹magnitude da flutuação aleatória e ¹²flutuação aleatória do modelo.

Tabela 9: Médias (%) e estatística descritiva para a relação entre os valores observados e preditos dos parâmetros intensidade de amarelo, perdas

Parâmetros ¹	Itens ²	Média (%)	DP ³	Máximo	Mínimo	R ² ⁴	CCC ⁵	Regressão: Intercepto			Regressão: Inclinação			QMEP ⁹	QV ¹⁰	MaF ¹¹	MoF ¹²	
								Estimativa	EP ⁶	P-valor ⁷	Estimativa	EP	P-valor ⁸					
b*	P1	Obs,	14,0	1,18	15,6	12,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Au, + Det,	14,8	3,28	19,5	9,5	-0,08	0,13	12,87	1,89	≤0,001	0,07	0,12	≤0,001	10,2	0,7	8,3	1,2
	P2	Obs,	16,5	6,14	28,5	11,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		MSC + Det,	16,0	4,96	29,4	12,7	0,51	0,73	1,57	4,82	0,753	0,93	0,29	0,822	15,0	0,2	0,1	14,7
Pres	P1	Obs,	1,4	0,31	1,9	0,7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		1 ^a d + LB	1,4	0,10	1,5	1,2	≤0,01	0,16	0,23	1,17	0,848	0,82	0,83	0,828	0,082	0,001	≤0,001	0,081
	P2	Obs,	1,4	0,24	1,9	1,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Norm, + Det,	1,5	0,12	1,7	1,3	-0,01	0,19	0,60	0,83	0,482	0,54	0,57	0,430	0,058	0,005	0,003	0,050
Perdas totais	P1	Obs,	20,4	3,43	27,8	14,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Det, + CM	20,4	2,56	25,2	14,3	0,03	0,22	14,11	7,74	0,093	0,31	0,38	0,091	13,3	≤0,001	2,9	10,4
	P2	Obs,	21,1	3,97	30,2	14,8	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		2 ^a d + LB	19,5	1,93	21,7	16,1	0,39	0,46	-5,50	8,70	0,539	1,37	0,45	0,424	11,4	2,8	0,4	8,2
Maciez	P1	Obs,	4,8	1,29	7,8	3,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Au, + SNV	5,3	0,42	5,7	4,8	-0,06	0,07	2,58	4,68	0,591	0,42	0,88	0,522	1,82	0,24	0,05	1,53
	P2	Obs,	4,3	2,73	7,8	1,3	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
		Su, + MSC	1,9	2,08	5,7	4,1	0,62	0,70	-2,04	1,65	0,245	1,38	0,32	0,261	0,410	0,008	0,048	0,352

por resfriamento, perda total da carcaça e maciez

¹b* = intensidade de amarelo, Pres = perdas por resfriamento, ²P1 = modelos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 1, P2 = modelos obtidos a partir de espectros tomados no ponto 2, Au. = Autoescalamento, Det. = detrend, 2^ad = segunda derivada, MSC = correção do espalhamento multiplicativo, 1^ad = primeira derivada, LB = correção de linha de base, Norm. = normalização, CM = centrar na média, Su. = suavização, SNV = normalização padronizada do sinal, ³desvio padrão, ⁴coeficiente de determinação, ⁵coeficiente de correlação e concordância ou índice de reprodutibilidade, ⁶erro padrão, ⁷H0: $\beta_0 = 0$, ⁸H0: $\beta_1 = 1$, ⁹quadrado médio do erro de predição, ¹⁰vício, ¹¹magnitude da flutuação aleatória e ¹²flutuação aleatória do modelo.

CONCLUSÃO GERAL

Os modelos de predição associados a espectroscopia NIR podem ser utilizados como ferramenta para avaliação nutricional de cana-de-açúcar, fubá de milho e farelo de soja, assim como para avaliação de atributos de qualidade de carcaça e de carne de bovinos de corte. Porém, ainda são necessários mais estudos e ampliação de bancos de dados nessas áreas visando aperfeiçoar cada vez mais os modelos.