



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CAMPUS I - CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INDUSTRIAL
CURSO DE GRADUAÇÃO EM BACHARELADO EM QUÍMICA INDUSTRIAL**

LAÍS MEDEIROS DA SILVA

**ESPECTROSCOPIA NIR PORTÁTIL E A QUIMIOMETRIA
PARA AUXILIAR NA MELHORIA DA NUTRIÇÃO DE CAPRINOS
E OVINOS NA SEMIÁRIDO NORDESTINO**

CAMPINA GRANDE

2025

LAÍS MEDEIROS DA SILVA

**ESPECTROSCOPIA NIR PORTÁTIL E A QUIMIOMETRIA
PARA AUXILIAR NA MELHORIA DA NUTRIÇÃO DE CAPRINOS
E OVINOS NA SEMIÁRIDO NORDESTINO**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Coordenação do Curso de Química Industrial
da Universidade Estadual da Paraíba, como
requisito parcial à obtenção do título de
Química Industrial.

Área de concentração: Química Analítica.

Orientadora: Prof. Dr. Simone da Silva Simões.

CAMPINA GRANDE

2025

É expressamente proibida a comercialização deste documento, tanto em versão impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que, na reprodução, figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

S586e Silva, Laís Medeiros da.

Espectroscopia nir portátil e quimiometria para auxiliar na melhoria da nutrição de caprinos e ovinos na semiárido nordestino [manuscrito] / Laís Medeiros da Silva. - 2025.
48 f. : il. color.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Química industrial) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2025.

"Orientação : Prof. Dra. Simone da Silva Simões, Departamento de Química - CCT".

1. Poincianella pyramidalis. 2. Catingueira. 3. Nutrição Animal. 4. Quimiometria. I. Título

21. ed. CDD 543

LAIS MEDEIROS DA SILVA

ESPECTROSCOPIA NIR PORTÁTIL E QUIMIOMETRIA PARA AUXILIAR NA
MELHORIA DA NUTRIÇÃO DE CAPRINOS E OVINOS NA SEMIÁRIDO
NORDESTINO

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado à Coordenação do Curso
de Química Industrial da Universidade
Estadual da Paraíba, como requisito
parcial à obtenção do título de Química
Industrial.

Aprovada em: 11/06/2025.

BANCA EXAMINADORA

Documento assinado eletronicamente por:

- **Simone da Silva Simões** (***.089.104-**), em **20/06/2025 10:51:49** com chave **b6b47fb64ddd11f092ed1a1c3150b54b**.
- **WELMA THAÍSE SILVA VILAR** (***.560.824-**), em **20/06/2025 10:50:04** com chave **77ed2d324ddd11f08b1a2618257239a1**.
- **Pablicia Oliveira Galdino** (***.689.894-**), em **20/06/2025 15:09:08** com chave **a8d8adee4e0111f0a07d06adb0a3afce**.

Documento emitido pelo SUAP. Para comprovar sua autenticidade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse https://suap.uepb.edu.br/comum/autenticar_documento/ e informe os dados a seguir.

Tipo de Documento: Folha de Aprovação do Projeto Final

Data da Emissão: 20/06/2025

Código de Autenticação: d53f11



Dedico este trabalho com todo meu amor e gratidão, à minha mãe, Adriana, pela sua incansável dedicação, apoio e por ser meu exemplo de força e perseverança.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, em primeiro lugar, ao meu Deus, que é tudo na minha vida. Sem ele nada disso seria possível e nada seria realizado.

Agradeço aos meus pais, Marcílio e Adriana, que, sem dúvida, são os principais responsáveis para que eu esteja aqui hoje. Muito obrigado por todo amor ao longo da vida e esforço para a realização dessa graduação no decorrer desses cinco anos.

A meus amigos que a graduação me deu em especial Karina, Andyara, Maria da Guia, Nalanda, Matheus e Jasiel, que de uma forma ou de outra me ajudaram a chegar até aqui, a universidade fica mais leve quando você encontra as pessoas certas para dividir o peso com você e também à minha querida gata, Lalinha, que, com sua companhia silenciosa e carinhosa, trouxe conforto e alegria nos momentos de maior tensão. Sua presença doce e fiel me deu a força necessária para continuar, mesmo nos dias mais difíceis.

Agradeço à minha orientadora Professora e Doutora Simone da Silva Simões, que me orientou neste trabalho com dedicação e paciência. Sua generosidade em compartilhar seu vasto conhecimento e sua disponibilidade em todos os momentos foi fundamental para o meu desenvolvimento, seus ensinamentos deixarão um impacto profundo na minha trajetória acadêmica e profissional.

Agradeço banca examinadora a Professora e Doutora WelmaThaise Silva Vilar e à Professora e Doutora Pablicia Oliveira Galdinopor se prontificar na avaliação, trazendo contribuições valiosas para melhoria do meu trabalho.

A todos que de uma forma ou de outra me auxiliaram no decorrer do curso de Química Industrial. Muito Obrigada.

“Um cientista não é um mero técnico: é também uma criança que confronta os fenômenos naturais que o impressionam como faziam os contos de fadas. ”

(Marie Curie)

RESUMO

A "catingueira" é uma espécie do bioma Caatinga e serve como alimento para caprinos e ovinos. Suas folhas permanecem verdes durante parte da estação seca, permitindo que sejam consumidas pelos animais durante o período chuvoso ou no início da seca. Neste trabalho investigo-se a influência da sazonalidade nos parâmetros bromatológicos da *Poincianella pyramidalis* (catingueira), na qual impacta na alimentação desses rebanhos no semiárido nordestino. O estudo utilizou a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) portátil aliada a quimiometria com aplicação de técnicas de inteligência artificial (IA) e para analisar a composição química das folhas da catingueira em diferentes épocas do ano, correlacionando-a com os índices pluviométricos da região de São João do Cariri, Paraíba. Foram coletadas amostras mensais durante um ano, submetidas a análises bromatológicas convencionais e espectroscopia NIR. Os dados obtidos foram processados utilizando técnicas quimiométricas, como Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise Hierárquica de Agrupamento (HCA), para identificar padrões e agrupamentos relacionados à sazonalidade. Os resultados demonstraram que os períodos chuvosos e secos influenciam os teores de matéria seca, proteína bruta, fibra em detergente neutro e outros parâmetros nutricionais, com implicações na qualidade da forragem. A fusão de dados bromatológicos e espectrais permitiu uma distinção mais clara entre amostras coletadas em diferentes condições climáticas, destacando o potencial da espectroscopia NIR portátil como ferramenta rápida e não destrutiva para monitorar a qualidade nutricional da catingueira. A PCA da fusão de dados indicou uma tendência de agrupamento que distingue as amostras coletadas nos meses secos e chuvosos. E além disso, mostrou que as amostras também podem se agrupar com base e características hormonais como a floração e frutificação. Deste modo, pode-se concluir que a combinação de NIR, IA e quimiometria pode auxiliar no manejo sustentável da espécie, indicando os períodos ideais para coleta e armazenamento da forragem, contribuindo para a melhoria da nutrição animal no semiárido.

Palavras-chave: *Poincianella pyramidalis*; catingueira; nutrição animal; quimiometria.

ABSTRACT

The "catingueira" is a species from the Caatinga biome and serves as food for goats and sheep. Its leaves remain green during part of the dry season, allowing them to be consumed by animals during the rainy season or at the beginning of the dry season. This study investigated the influence of seasonality on the bromatological parameters of *Poincianella pyramidalis* (catingueira), which impacts the feeding of these herds in the semiarid region of the Northeast. The study used portable near-infrared spectroscopy (NIR) combined with chemometrics with the application of artificial intelligence (AI) techniques to analyze the chemical composition of catingueira leaves at different times of the year, correlating it with rainfall indices in the region of São João do Cariri, Paraíba. Monthly samples were collected for one year and subjected to conventional bromatological analyses and NIR spectroscopy. The data obtained were processed using chemometric techniques, such as Principal Component Analysis (PCA) and Hierarchical Cluster Analysis (HCA), to identify patterns and clusters related to seasonality. The results demonstrated that rainy and dry periods influence the contents of dry matter, crude protein, neutral detergent fiber and other nutritional parameters, with implications for forage quality. The fusion of bromatological and spectral data allowed a clearer distinction between samples collected under different climatic conditions, highlighting the potential of portable NIR spectroscopy as a fast and non-destructive tool for monitoring the nutritional quality of catingueira. The PCA of the data fusion indicated a clustering trend that distinguishes the samples collected in the dry and rainy months. In addition, it showed that the samples can also be grouped based on hormonal characteristics such as flowering and fruiting. Thus, it can be concluded that the combination of NIR, AI and chemometrics can assist in the sustainable management of the species, indicating the ideal periods for collection and storage of forage, contributing to the improvement of animal nutrition in the semiarid region.

Keywords: *Poincianella pyramidalis*; catingueira, Animal Nutrition, Chemometrics.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 –	<i>Poincianella pyramidalis</i> (Tul.) L. P. Queiroz.....	13
Figura 2 –	localização do Município de São João do Cariri no Estado da Paraíba.....	24
Figura 3 –	Equipamentos utilizados para preparação das amostras.....	25
Figura 4 –	NIR portátil.....	26
Figura 5 –	Gráfico ilustrativo da variação pluviométrica anual em São João do Cariri.	27
Figura 6 –	Variação anual das propriedades bromatológicas (normalizadas).....	28
Figura 7 –	Variação dos parâmetros bromatológicos ao longo do ano, (a) e (b).....	29
Figura 8 –	Espectros NIR (Processados) do pó da folha de catingueira.....	30
Figura 9 –	Dendograma para os dados bromatológicos. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	31
Figura 10 –	Gráfico de pesos de PC1, PC2 e PC3 para os dados bromatológicos.....	32
Figura 11 –	Gráficos de escores de PC1 x PC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para os dados bromatológicos. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	34
Figura 12 –	Dendograma para os dados espectrais. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	35
Figura 13 –	Gráfico de pesos de PC1 e PC2 para os dados espectrais.....	36
Figura 14 –	Gráficos de escores de PC1 x PC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para os dados espectrais. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	37
Figura 15 –	Dendograma para a fusão de dados. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	39
Figura 16 –	Gráfico de pesos de PC1 e PC2 para a fusão de dados.....	40
Figura 17 –	Gráficos de escores de PC1 x PC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para a fusão de dados. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.....	41

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	10
2	OBJETIVOS.....	12
2.1	2.1 Objetivos Geral.....	12
2.2	2.2 Objetivos Específicos.....	12
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	13
3.1	Espécie <i>Poincianella Pyramidalis</i> (Tul.) L. P. Queiroz	13
3.1.1	<i>Influência da Sazonalidade nos Parâmetros Bromatológicos.....</i>	16
3.2	Espectrometria NIR.....	18
3.3	Inteligência Artificial e Quimiometria.....	20
3.3.1	<i>Técnicas de Reconhecimento de Padrões (PCA).....</i>	21
3.3.2	Fusão de Dados.....	22
4	METODOLOGIA	24
4.1	Local da coleta das amostras.....	24
4.2	Preparo e análise das amostras.....	26
4.3	Construção do modelo e análise em Componentes Principal.....	26
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	27
5.1	Avaliação Sazonal e Bromatológica.....	27
5.2	Estudos dos Espectros NIR.....	30
5.2.1	<i>Análise de Reconhecimento de Padrões para os dados Bromatológicos.....</i>	31
5.2.2	<i>Análise de Reconhecimento de Padrões para os dados Espectrais.....</i>	35
5.2.3	<i>Análise de Reconhecimento de Padrões para a Fusão de dados.....</i>	38
6	CONCLUSÃO	43
7	PERSPECTIVAS.....	44
	REFERÊNCIAS	45

1 INTRODUÇÃO

A espécie florestal *P. pyramidalis* (Tul.)L. P. Queiroz, conhecida como catingueira pertence à família Fabaceae e é típica do bioma Caatinga, podendo ser encontrada em diversos estados do Nordeste e na região Norte do Brasil (Maia, 2004). Essa planta é amplamente utilizada como fonte de alimentação para caprinos, bovinos e ovinos, além de possuir aplicações medicinais e energéticas (Chaves *et al.*, 2015). As folhas secas da catingueira podem representar até 35% da dieta alimentar desses animais (Araújo *et al.*, 2019). No semiárido brasileiro, a catingueira é valorizada por seu potencial de produção de forragem de baixo custo e alta qualidade como suplemento animal, especialmente durante a estação seca (Araújo Filho, 2013). Na Paraíba, por exemplo, esse feno chega a compor até 12,5% da dieta de caprinos na região do Cariri durante o período seco (Leite e Viana, 1986; Lima Júnior, 2006).

A catingueira possui características adaptativas importantes para sobreviver em condições adversas, como escassez de chuva, o que afeta diretamente sua composição metabólica e o teor de óleos essenciais (Andrade *et al.*, 2006). Além disso, fatores sazonais como a precipitação pluviométrica influenciam significativamente a qualidade das folhas consumidas pelos animais (Nascimento; Ribeiro *et al.*, 2002).

A sazonalidade exerce uma influência significativa sobre os parâmetros bromatológicos da catingueira, uma vez que fatores como variações na temperatura, precipitação e disponibilidade de nutrientes no solo afetam a composição química da planta. Essas mudanças podem impactar diretamente os teores de proteína bruta, fibra, lignina se caracteriza uma fibra insolúvel e outros componentes essenciais à nutrição animal, tornando necessária uma análise periódica para garantir a qualidade da forragem ao longo do ano (Giombelli, 2018).

As análises bromatológicas são fundamentais para avaliar a composição química da catingueira, garantindo que ela atenda às necessidades nutricionais dos animais. Entretanto, os métodos convencionais de análise em laboratório são demorados, requerem o uso de reagentes químicos e podem ser prejudiciais ao meio ambiente e à saúde humana.

Diante dessas limitações dos métodos convencionais, o uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) tem se destacado como uma alternativa promissora na agricultura. A disseminação dos instrumentos portáteis, contribui para a popularização

desta técnica, que permite a avaliação rápida e não destrutiva da composição química de diferentes materiais agrícolas.

Na análise bromatológica, a espectrometria NIR possibilita a determinação de parâmetros nutricionais de forma eficiente, auxiliando na tomada de decisões relacionadas à alimentação animal e ao manejo da vegetação nativa (Massignani *et al.*, 2020). No entanto, por ser composto por bandas largas e sobrepostas, o sinal NIR necessita do uso algoritmos de inteligência artificial (IA) para que possa ser usado analiticamente. O uso de métodos de IA, como o aprendizado de máquinas em química pode ser associado a área de quimiometria (Amigo, 2021).

Nesse contexto, a técnica de NIR, aliada à quimiometria, surge como uma alternativa promissora para análise rápida e não destrutiva das folhas de catingueira (Pasquini, 2018). Essa metodologia permite a obtenção de dados químicos em tempo real por meio de modelos de reconhecimento de padrões (Ferreira; Tobyn, 2015).

Diante do contexto, o presente trabalho visa investigar a correlação entre fatores sazonais (como pluviosidade e estação climática) e os parâmetros bromatológicos da catingueira, utilizando a espectroscopia NIR portátil e quimiometria. O estudo realizado pode ser utilizado para prever o momento ideal de coleta das folhas destinadas à alimentação animal para armazenamento e posterior administração aos animais. Esse conhecimento poderá contribuir para um manejo mais eficiente da espécie e para a melhoria da nutrição de caprinos e ovinos na região semiárida.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivos Geral

Investigar a relação entre fatores sazonais e os parâmetros bromatológicos das folhas da catingueira (*Poincianella Pyramidalis*) para nutrição de caprinos e ovinos no semiárido nordestino (cidade São João do Cariri no estado da Paraíba), usando espectroscopia NIR portátil e quimiometria.

2.2 Objetivos Específicos

- Registrar os espectros NIR do material vegetal das folhas da catingueira, utilizando equipamento portátil;
- Aplicar técnicas quimiométricas como Análise de Componentes Principais (PCA) e Análise Hierárquica de Agrupamento (HCA), para identificar padrões nos dados e fazer a interpretação dos resultados;
- Correlacionar as variações sazonais, especificamente a pluviosidade, com os parâmetros bromatológicos para avaliar a influência desta nas mudanças da composição química das folhas da catingueira e assim determinar o melhor período para utilizar essas folhas na alimentação animal.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 ESPÉCIE *POINCIANELLA PYRAMIDALIS* (TUL.) L. P. QUEIROZ

A *Poincianella Pyramidalis* (Tul.) L. P. Queiroz (Figura 1), conhecida popularmente como catingueira-verdadeira, é uma espécie pertencente à família Leguminosae e amplamente distribuída no bioma Caatinga. Apresenta porte variando de arbustivo a arbóreo, com copa arredondada e baixa, e ausência de espinhos. Suas folhas são compostas bipinadas e coriáceas, com um comportamento decíduo na estação seca. Durante os primeiros estágios de brotação, suas folhas possuem coloração rosada e não exalam odor; no entanto, ao amadurecerem e adquirirem tonalidade verde, passam a emitir um odor característico e desagradável. As inflorescências são racemos terminais e subterminais, compostas por flores de coloração amarela, sendo que a pétala central apresenta pontuações avermelhadas que servem como guia de néctar para polinizadores (Matias *et al.*, 2017).

Figura 1: *Poincianella pyramidalis* (Tul.) L. P. Queiroz.



Fonte: Souza *et. al* (2021).

A distribuição geográfica da *Poincianella pyramidalis* é ampla dentro do bioma Caatinga, sendo encontrada desde várzeas úmidas, onde pode atingir até 10 metros de altura e 50 cm de diâmetro, até áreas semiáridas, onde assume forma arbustiva, com menos de dois metros de altura e poucos centímetros de diâmetro. Essa capacidade de adaptação demonstra sua resiliência em diferentes condições edafoclimáticas,

especialmente em solos pobres e pedregosos (Matias *et al.*, 2017). Além disso, a espécie apresenta alta resistência ao déficit hídrico e à salinidade, características fundamentais para sua sobrevivência no semiárido brasileiro (Santos *et al.*, 2020).

O bioma Caatinga é caracterizado por sua vegetação xeromórfica adaptada a condições climáticas extremas, como baixa disponibilidade hídrica e altas temperaturas. Nesse contexto, a catingueira destaca-se como uma das espécies-chave desse ecossistema, sendo amplamente distribuída e possuindo um importante papel ecológico. A correta identificação e classificação das espécies presentes na Caatinga são essenciais para a conservação do bioma, e as chaves de identificação dendrológicas baseadas em caracteres vegetativos desempenham um papel crucial nesse processo, permitindo a identificação das espécies mesmo em períodos de seca, quando os caracteres reprodutivos não estão disponíveis (Aguilar, 2021).

A nomenclatura popular da catingueira-verdadeira varia conforme a região. No Piauí, é chamada de canela-de-velho e pau-de-rato, enquanto no Ceará recebe o nome de catingueira-de-porco. Nos estados do Rio Grande do Norte, Pernambuco, Alagoas e Minas Gerais, é conhecida simplesmente como catingueira. Em outros estados nordestinos, como Paraíba, Sergipe e Bahia podem ser referidas como catingueira-de-mulata, catingueira-grande e mussitaíba (Matias *et al.*, 2017). Essa diversidade de nomes reflete a ampla presença da espécie no semiárido e sua importância para as populações locais.

A madeira da planta catingueira é amplamente utilizada na Caatinga, sendo valorizada por sua alta densidade e resistência. Seu cerne escuro e durabilidade fazem com que seja empregada na produção de lenha e carvão vegetal, fundamentais para a economia das comunidades do semiárido, onde o acesso a outras fontes energéticas é limitado (Santos *et al.*, 2020). Além disso, a resistência mecânica dessa madeira permite sua utilização na construção civil e na fabricação de estacas e mourões.

Outro aspecto relevante da espécie é seu potencial forrageiro. As folhas e ramos finos da catingueira-verdadeira são utilizados na alimentação animal, podendo ser consumidos diretamente no campo ou armazenados na forma de feno para suplementação alimentar no período seco do ano (Santos *et al.*, 2020). Esse fator é de extrema importância para a pecuária do semiárido, onde a escassez de forragem durante a estiagem compromete a manutenção dos rebanhos.

A qualidade nutricional da forragem da catingueira atende às necessidades de caprinos e ovinos, fornecendo nutrientes essenciais e reduzindo a dependência de

suplementos alimentares comerciais. Além disso, estudos indicam que a produtividade da espécie pode ser maximizada por meio do manejo adequado da poda, sem comprometer o crescimento das plantas ao longo dos anos (Santos *et al.*, 2020). Assim, a catingueira-verdadeira se apresenta como uma alternativa sustentável para a suplementação alimentar de rebanhos na Caatinga.

A *P. Pyramidalis* também desempenha um papel fundamental na recuperação de áreas degradadas no bioma Caatinga. Sua capacidade de crescimento em solos pobres e sua resistência a longos períodos de estiagem tornam-na uma espécie recomendada para programas de revegetação e manejo sustentável de ecossistemas semiáridos. Além disso, sua presença favorece a biodiversidade local, oferecendo abrigo e alimento para diversas espécies da fauna regional (Aguiar, 2021).

A conservação da planta catingueira é essencial para a manutenção do equilíbrio ecológico da Caatinga, garantindo que os serviços ambientais proporcionados por essa espécie continuem beneficiando tanto a fauna quanto as populações humanas que dependem dos recursos naturais desse bioma. O manejo sustentável da espécie, aliado a práticas de conservação ambiental, pode contribuir significativamente para a proteção da Caatinga e para o desenvolvimento de atividades econômicas sustentáveis na região (Aguiar, 2021).

Diante de sua importância ecológica, econômica e social, torna-se fundamental aprofundar os estudos sobre a biologia, ecologia e manejo da catingueira. Pesquisas futuras podem fornecer subsídios para políticas públicas voltadas à conservação e uso sustentável dessa espécie, garantindo que sua exploração ocorra de maneira responsável e alinhada às necessidades ambientais e produtivas do semiárido brasileiro (Santos *et al.*, 2020).

A utilização de chaves de identificação baseadas em caracteres vegetativos representa uma estratégia eficiente para a correta identificação de espécies arbóreas e arbustivas da Caatinga. Essas ferramentas permitem que pesquisadores e técnicos possam reconhecer e catalogar espécies mesmo em períodos de estiagem, quando os caracteres florais não estão disponíveis, contribuindo para um melhor entendimento da biodiversidade do bioma e auxiliando na elaboração de estratégias de conservação (Aguiar, 2021).

A planta catingueira exemplifica a riqueza da Caatinga e sua capacidade de adaptação a condições adversas. Sua presença em diferentes habitats, sua resistência a fatores ambientais extremos e sua ampla utilização por comunidades locais reforçam sua

relevância dentro do bioma. A adoção de práticas de manejo sustentável e conservação permitirá que essa espécie continue desempenhando seu papel ecológico e socioeconômico por muitas gerações (Santos *et al.*, 2020).

3.1.1 INFLUÊNCIA DA SAZONALIDADE NOS PARÂMETROS BROMATOLÓGICOS

A Caatinga é um bioma caracterizado por condições climáticas adversas, com longos períodos de estiagem intercalados por chuvas irregulares. Essa sazonalidade afeta diretamente a composição bromatológica das plantas, impactando a disponibilidade e a qualidade nutricional da forragem consumida pelos ruminantes. A catingueira (*Poincianella Pyramidalis* (Tul.) L. P. Queiroz), uma das espécies nativas mais representativas da região, apresenta adaptações fisiológicas que lhe permitem resistir a condições de estresse hídrico, influenciando sua composição metabólica ao longo do ano (Barbosa *et al.*, 2019).

As análises bromatológicas são fundamentais para determinar a composição química das forrageiras e avaliar sua adequação às exigências nutricionais dos animais. Dentre os principais parâmetros analisados, destacam-se a matéria seca (MS), essencial para estimar a quantidade real de nutrientes consumidos; a matéria mineral (MM), que indica a presença de elementos inorgânicos necessários para o metabolismo animal; o extrato etéreo (EE), relacionado ao teor de lipídeos e óleos essenciais; a proteína bruta (PB), componente fundamental para o crescimento e desenvolvimento dos animais; os carboidratos totais (CT), principais fontes energéticas; e a fibra em detergente neutro (FDN), que influencia a digestibilidade e o consumo da forragem pelos ruminantes (Kunz *et al.*, 2023).

A variação sazonal tem um impacto significativo na qualidade nutricional da catingueira. Durante o período seco, a redução da umidade disponível no solo provoca uma diminuição na taxa de crescimento das plantas, resultando em uma maior concentração de matéria seca e fibra bruta. Essa mudança afeta diretamente a digestibilidade da forragem, tornando-a menos palatável e dificultando seu aproveitamento pelos animais. Por outro lado, no período chuvoso, a rebrota da catingueira favorece o aumento dos teores de proteína bruta e carboidratos solúveis, melhorando o valor nutricional da planta (Lima *et al.*, 2021).

Os fatores sazonais também influenciam a disponibilidade e concentração dos minerais presentes na catingueira. A matéria mineral, composta por macro e micronutrientes essenciais ao metabolismo animal, pode sofrer variações ao longo do ano devido à lixiviação promovida pelas chuvas e à baixa absorção em períodos de estiagem. Dessa forma, a suplementação mineral pode ser necessária em determinadas épocas do ano para garantir o equilíbrio nutricional da dieta animal (Barbosa *et al.*, 2019).

O extrato etéreo, que compreende lipídios e compostos bioativos, também apresenta variação sazonal. Durante os períodos secos, o estresse hídrico pode levar a um aumento na concentração de compostos secundários, como taninos e flavonoides, que possuem propriedades antioxidantes e podem influenciar o metabolismo animal. No entanto, em excesso, esses compostos podem reduzir a digestibilidade da forragem, impactando o desempenho dos ruminantes (Kunz *et al.*, 2023).

Além dos aspectos nutricionais, a sazonalidade influencia a produção de biomassa da catingueira. Em anos de precipitação abaixo da média, a taxa de crescimento da planta é reduzida, resultando em menor disponibilidade de forragem para os animais. Isso pode comprometer a sustentabilidade dos sistemas de produção pecuária na Caatinga, exigindo a adoção de estratégias como o armazenamento de forragem ou a suplementação alimentar durante os períodos críticos (Lima *et al.*, 2021).

A fibra em detergente neutro (FDN) é um dos parâmetros mais impactados pelas variações sazonais. No período seco, a maior lignificação dos tecidos vegetais resulta no aumento dos teores de FDN, reduzindo a digestibilidade da forragem. Já no período chuvoso, a renovação foliar e o crescimento de novas brotações promovem uma redução da FDN, tornando a forragem mais palatável e facilitando o consumo pelos ruminantes (Barbosa *et al.*, 2019).

A importância das análises bromatológicas na avaliação da qualidade nutricional da catingueira é reforçada pela necessidade de um manejo eficiente da alimentação animal. A compreensão das variações sazonais na composição química da planta permite que produtores adotem estratégias mais eficazes para minimizar os impactos da seca sobre a nutrição animal, garantindo melhor desempenho produtivo e reprodutivo dos rebanhos (Kunz *et al.*, 2023).

A adaptação da catingueira às condições áridas da Caatinga inclui mecanismos como a queda de folhas para reduzir a perda de água e a presença de sistemas radiculares profundos, que permitem a extração de umidade do solo mesmo em períodos de estiagem

prolongada. Essas características garantem sua sobrevivência, mas também afetam sua composição bromatológica ao longo do ano (Lima *et al.*, 2021).

A sazonalidade também pode influenciar a aceitação da catingueira pelos animais, especialmente devido à variação nos compostos voláteis que conferem aroma e sabor à forragem. Durante o período seco, o aumento na concentração de metabólitos secundários pode reduzir a palatabilidade da planta, enquanto no período chuvoso, a menor presença desses compostos favorece o consumo pelos ruminantes (Barbosa *et al.*, 2019).

A interação entre fatores climáticos e manejo pode potencializar ou atenuar os efeitos da sazonalidade na qualidade da catingueira. Práticas como o consórcio com outras espécies forrageiras, a adubação orgânica e o uso racional do pastejo podem contribuir para a manutenção da qualidade nutricional da forragem ao longo do ano, reduzindo os impactos negativos das variações sazonais sobre a alimentação animal (Kunzet *et al.*, 2023). Estudos indicam que a irrigação suplementar pode mitigar os efeitos negativos da seca, promovendo maior estabilidade na produção de biomassa e na qualidade nutricional da planta ao longo do ano (Lima *et al.*, 2021).

Portanto, a compreensão da influência da sazonalidade nos parâmetros bromatológicos da catingueira é essencial para otimizar o manejo da alimentação animal na Caatinga. Estratégias baseadas em dados científicos sobre a composição química da planta e sua variação ao longo do ano podem contribuir para um sistema de produção pecuária mais eficiente e sustentável (Barbosa *et al.*, 2019).

Estudos mais aprofundados podem contribuir para o desenvolvimento de tecnologias e práticas que permitam melhor aproveitamento da catingueira como recurso forrageiro. O monitoramento contínuo da qualidade nutricional da planta e a implementação de práticas de manejo adaptativas são fundamentais para garantir a resiliência dos sistemas pecuários na Caatinga (Kunzet *et al.*, 2023).

3.2 ESPECTROMETRIA NIR

A espectrometria no infravermelho próximo (NIR) é uma técnica analítica que tem demonstrado grande potencial, principalmente em áreas como a agricultura e a segurança alimentar. O NIR baseia-se na interação da radiação infravermelha com as moléculas presentes nas amostras, resultando em um espectro que reflete as características dos grupos funcionais dessas moléculas, como os grupos C-H, O-H e N-H. A técnica permite a análise de materiais de forma rápida, não destrutiva e sem a

necessidade de reagentes químicos, o que a torna ideal para aplicações em ambientes de campo e para a análise de produtos alimentícios. Ao contrário das análises convencionais, que muitas vezes exigem a preparação e o transporte de amostras para laboratórios, a espectrometria NIR proporciona a análise diretamente no local de cultivo ou processamento, acelerando os resultados e facilitando o acompanhamento contínuo da qualidade do produto (Martins *et al.*, 2023).

A aplicação da espectrometria NIR na agricultura tem se expandido significativamente, principalmente por sua capacidade de determinar a composição química e nutricional de uma forma rápida e eficiente. O uso de espectrômetros NIR portáteis, que podem ser levados diretamente para o campo, tem permitido a realização de medições em tempo real, fornecendo dados que auxiliam na tomada de decisões imediatas para o manejo de cultivos (Evangelista, 2025). Por exemplo, na análise de folhas de mandioca, a espectrometria NIR tem sido empregada para avaliar não apenas a qualidade das folhas, mas também a presença de compostos tóxicos, como o ácido cianídrico, que podem ser perigosos para a saúde humana e animal. Além disso, essa técnica também tem sido útil na avaliação de produtos agrícolas, como azeitonas em conserva, permitindo a caracterização de compostos bioativos e antinutrientes, oferecendo dados valiosos para a indústria alimentícia (Santos *et al.*, 2022).

Outro grande benefício da espectrometria NIR é a sua capacidade de fornecer resultados sem a necessidade de grandes preparações de amostras. Isso significa que os agricultores e pesquisadores podem realizar análises de forma contínua e prática, sem interromper o processo de produção ou processamento. A utilização dessa tecnologia no monitoramento da qualidade do solo e na avaliação da saúde das plantas tem sido fundamental para garantir a sustentabilidade e a eficiência na produção agrícola. Além disso, a espectrometria NIR tem se mostrado eficaz na detecção de contaminantes, como micotoxinas, que podem afetar a qualidade dos alimentos e representar riscos à saúde pública (Martins *et al.*, 2023).

A capacidade da espectrometria NIR de fornecer análises não invasivas e rápidas também está permitindo um avanço significativo em áreas como o controle de qualidade de alimentos, especialmente na agropecuária em análises de forragem, na qual pode ser monitorada continuamente a composição nutricional desse alimento animal, sem sua destruição. Ao permitir a análise de grande quantidade de amostras de forma ágil, a espectrometria NIR não só facilita o controle da qualidade, mas também reduz os custos associados a métodos convencionais de análise laboratorial. Essa abordagem se traduz

em uma maior eficiência e economia para os agricultores, produtores e indústria alimentícia como um todo (Santos *et al.*, 2022; Martins *et al.*, 2023).

3.3 QUIMIOMETRIA E A INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Os métodos de inteligência artificial, como o aprendizado de máquina, abrangem a possibilidade de algoritmos serem capazes de realizar raciocínio lógico e interação de forma a melhorar os resultados dos modelos. Tem sido usados em muitas áreas de aplicação para resolver tarefas práticas, como o reconhecimento de objetos em imagens ou textos, para auxiliar no diagnóstico em diversos campos. Além disso, pode ser aplicado a diferentes tipos de dados, como exemplo: dados contínuos ou discretos, mas também dados instrumentais (NIR, Raman, etc.). Neste sentido, a quimiometria pode ser definida como a aplicação de Inteligência Artificial (Mineração de Dados, Aprendizado de Máquina, Redes Neurais Artificiais e Aprendizado Profundo) a dados provenientes de Sistemas Naturais (Amigo, 2021).

Essa abordagem é fundamental em situações em que os dados coletados são grandes e complexos, como ocorre nas análises espectrais. Em vez de tratar os dados individualmente, a quimiometria permite realizar uma análise multivariada, onde as informações de várias variáveis são consideradas simultaneamente, identificando correlações e padrões ocultos nos dados. Esse processo tem sido amplamente utilizado para melhorar a precisão das medições e otimizar os métodos de análise, especialmente no campo da agricultura, onde é crucial avaliar diferentes variáveis, como a qualidade do solo, o estado nutricional das plantas e a presença de contaminantes (Martins *et al.*, 2023). A quimiometria também tem se mostrado crucial na melhoria da eficiência dos processos agrícolas. Ao integrar os dados espectrais com modelos matemáticos, é possível prever com maior precisão características de interesse, como a concentração de nutrientes, a presença de substâncias tóxicas e até mesmo o impacto de tratamentos específicos sobre a qualidade do produto (Pereira, 2022). Por exemplo, a combinação de quimiometria e espectrometria NIR tem sido utilizada para prever a qualidade de colheitas e melhorar os processos de processamento de alimentos, garantindo que os produtos atendam aos padrões exigidos sem a necessidade de métodos destrutivos.

A integração da quimiometria com a espectrometria NIR tem permitido aos pesquisadores desenvolverem métodos mais rápidos e menos onerosos para a análise de alimentos e produtos agrícolas. Ao invés de realizar testes químicos complexos e

demorados, os dados espectrais obtidos podem ser processados por modelos quimiométricos para extrair informações relevantes de forma mais eficiente e com menos erro. Este avanço tem contribuído para a criação de ferramentas analíticas que são cada vez mais acessíveis para agricultores, indústrias alimentícias e pesquisadores, ampliando as possibilidades de aplicação da quimiometria no campo (Pereira, 2022).

3.3.1 TÉCNICAS DE RECONHECIMENTO DE PADRÕES (PCA E HCA)

Dentre as diversas técnicas quimiométricas disponíveis, a Análise de Componentes Principais (PCA) e a Análise de Cluster Hierárquico (HCA) são duas das mais utilizadas. A PCA é uma técnica estatística que visa reduzir a dimensionalidade dos dados, identificando os principais componentes que explicam a maior parte da variabilidade observada nas amostras. Com isso, a PCA permite uma análise mais simplificada e eficiente, proporcionando uma visão mais clara sobre os padrões existentes nos dados. Essa técnica tem sido amplamente utilizada para a análise de dados espectrais obtidos por espectrometria NIR, permitindo que os pesquisadores identifiquem relações importantes entre as variáveis, como a composição nutricional das plantas ou a presença de compostos tóxicos (Martins *et al.*, 2023).

Um exemplo claro de aplicação da PCA pode ser encontrado no trabalho de Santos *et al.*, (2022), que usaram essa técnica para avaliar a composição das folhas de mandioca e de azeitonas em conserva. Ao aplicar a PCA, os pesquisadores conseguiram identificar facilmente as diferenças entre as amostras, demonstrando como os tratamentos térmicos e fermentativos influenciam a composição química dos produtos. A PCA, nesse caso, possibilitou a redução de dados complexos, facilitando a análise e a interpretação dos resultados, o que é particularmente importante em contextos em que uma grande quantidade de dados precisa ser processada rapidamente.

Por outro lado, a Análise de Cluster Hierárquico (HCA) é uma técnica que agrupa amostras com base em suas semelhanças, criando uma estrutura hierárquica, geralmente representada por um dendrograma. Essa análise é útil para detectar padrões e agrupamentos naturais nas amostras, sem a necessidade de uma definição prévia de categorias. Em um estudo de Mendes (2022), a HCA foi aplicada para analisar a concentração de nutrientes em amostras de plantas, utilizando dados espectrais obtidos por meio do satélite Sentinel-2. A técnica permitiu a identificação de grupos de amostras

com características nutricionais semelhantes, o que foi fundamental para a avaliação da qualidade do cultivo.

A combinação das técnicas PCA e HCA tem se mostrado particularmente eficaz, pois enquanto a PCA é usada para reduzir a dimensionalidade dos dados e destacar as variáveis mais importantes, a HCA permite a organização das amostras em grupos de acordo com suas características. Esse duplo uso dessas técnicas pode proporcionar uma análise mais profunda e detalhada, especialmente quando associada a outras ferramentas analíticas, como a espectrometria NIR e os modelos de quimiometria, resultando em uma compreensão mais precisa da qualidade e composição dos produtos agrícolas. Essa abordagem, como demonstrado nos estudos de Santos *et al.*, (2022) e Mendes (2022), tem mostrado ser extremamente útil para otimizar o processo de análise e para fornecer informações valiosas aos profissionais da agricultura, indústria alimentícia e pesquisa.

3.3.2 FUSÃO DE DADOS

A fusão de dados pode ser realizada para integração de múltiplas fontes de informação e surgiu como uma estratégia promissora para superar as limitações individuais de técnicas analíticas como espectroscopia UV-Vis, NIR e MIR, quando utilizadas de forma independente. Nesse contexto, a fusão de dados representa uma abordagem inovadora para aprimorar modelos de calibração multivariada, combinando sinais complementares de diferentes espectros ou instrumentos analíticos. Essa técnica permite uma análise mais abrangente e robusta de amostras complexas, como produtos naturais, melhorando a precisão da quantificação de metabólitos e fornecendo insights mais profundos sobre a composição química da amostra. A sinergia entre métodos espectroscópicos e fusão de dados, portanto, marca um avanço significativo no desenvolvimento de ferramentas quimiométricas sofisticadas.

Instrumentos analíticos não destrutivos, particularmente a espectroscopia de infravermelho, podem gerar informações químicas valiosas. A integração de diferentes medições analíticas da mesma amostra, conhecida como fusão de dados (DF), provou ser uma estratégia poderosa para a construção de modelos mais robustos e eficientes.

A fusão de dados permite a análise simultânea de múltiplas matrizes de dados que descrevem variáveis distintas relacionadas ao mesmo conjunto amostral (Zhou *et al.*, 2022; Lia *et al.*, 2020). No entanto, essa abordagem apresenta desafios, principalmente devido às diferenças na natureza e dimensionalidade dos dados de diferentes

instrumentos. A fusão pode ser implementada em três níveis principais (Biancolillo *et al.*, 2014):

- Nível baixo: Integração direta de dados brutos.
- Nível médio: Combinação de variáveis específicas extraídas de cada conjunto de dados.
- Nível alto: Integração de resultados analíticos ou modelos separados.

A escolha da estratégia de fusão depende de fatores como correlações de variáveis entre instrumentos e interações entre conjuntos de dados, tornando essencial a compreensão da estrutura dos dados antes de selecionar o método mais apropriado (Azcarate *et al.*, 2021).

As estratégias de fusão têm sido amplamente aplicadas em áreas como análise de alimentos e fitofármacos (Hong; Wang, 2014). Para produtos naturais, a complexidade intrínseca da amostra torna a fusão de dados particularmente vantajosa, permitindo a integração de múltiplas fontes de informação para aprimorar a análise. Essa abordagem promete avanços significativos em aplicações como controle de qualidade e descoberta de compostos bioativos.

4 METODOLOGIA

4.1 COLETAS DAS AMOSTRAS

A coleta do material botânico as folhas da espécie *P. pyramidalis*, foi realizado em São João do Cariri, Paraíba (figura 2), suas coordenadas geográficas são aproximadamente 7° 23' 27" latitude e longitude 36° 32' 2" oeste, na região do cariri paraibano. O município está situado a uma altitude média 449 metros de altitude em relação ao nível do mar, mais especificamente na fazenda experimental do Centro de Ciências Agrárias (CCA/UFPB).

Figura 2: Localização do Município de São João do Cariri no Estado da Paraíba.



Fonte: researchgat (2025).

A amostra estudada são as folhas da espécie *Poincianella pyramidalis* (catingueira). As etapas da coleta e processamento das amostras foram respectivamente: coleta; Identificação e Armazenamento Inicial, Preparação para Secagem, Secagem das Folhas, Trituração e Peneiramento, Armazenamento do Pó Vegetal, conforme (Figura 3).

Figura 3: Equipamentos utilizados para preparação das amostras.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Os dados AESA (Agência Executiva de Gestão das Águas do Estado da Paraíba) como precipitação, que diz respeito à estação climática de São João do Cariri – PB, foram utilizados para o estudo de sazonalidade.

A coleta das amostras foi realizada mensalmente durante o período de maio 2023 a abril de 2024, na fazenda experimental do Centro de Ciências Agrárias (CCA/UFPB). Em seguida foi feita a identificação e armazenamento inicial depois da coleta, uma exsicata foi preparada e validada no Herbário Jaime Coelho de Moraes (CCA/UFPB) para garantir a correta identificação da espécie. Em seguida, as folhas foram armazenadas no Laboratório de Química Orgânica e Produtos Naturais (LQOP-UFPB, Campus II) em um freezer a aproximadamente $-20\text{ }^{\circ}\text{C}$, permanecendo nesse ambiente por 12 meses. Ouve uma preparação para a secagem a fim de evitar que as folhas ficassem sobrepostas e garantir uma secagem uniforme, cada amostra foi organizada separadamente em caixas de origami feitas com folhas de papel A4.

As folhas foram submetidas à secagem em uma estufa de circulação de ar, mantida a uma temperatura aproximada de $40\text{ }^{\circ}\text{C}$, por um período de cerca de seis horas. Após a secagem, as folhas foram trituradas em um moinho de facas (SL 30 SOLAB) e passaram por um processo de peneiramento, sendo ajustadas a uma granulometria de 200 mesh. O material pó vegetal obtido foi repartido em cinco parte e armazenado em sacos plásticos devidamente identificados conforme o mês de coleta. Para garantir a estabilização antes

da análise, as amostras foram mantidas em dessecador por 24 horas antes do registro dos espectros NIR.

4.2 PREPARO E ANÁLISE DAS AMOSTRAS

As análises bromatológicas das folhas da Catingueira foi realizado no laboratório de Alimentos e Nutrição Animal da Universidade Federal da Paraíba (Departamento de Zootecnia, Campus II - Areia, PB), seguindo as metodologias convencionais (Prado e Simões, 2024, p. 2). Foram determinadas variáveis de consumo e digestibilidade como matéria seca (MS), matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE), proteína bruta (PB), carboidratos totais (CT) e fibra em detergente neutro (FDN).

As mesmas amostras também tiveram seus espectros NIR registrados utilizando um espectrômetro portátil da marca InnoSpectra Corporation, com faixa espectral de 900 a 1700 nm (Figura 4).

Figura 4: NIR portátil.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

4.3 CONSTRUÇÃO DO MODELO DE ANÁLISE EM COMPOPENTE PRINCIPAL

A análise exploratória foi realizada a partir da Análise em componente principal (PCA) e análise hierárquica de clusters (HCA), para isto utilizou-se o pacote PLS toolbox® da Eingevector, em ambiente matlab® 7.10. Os modelos de análise não supervisionada, HCA e PCA, foram desenvolvidos a partir de 3 abordagens a) dados bromatológicos, b) dados NIR e c) fusão dos dois bancos de dados. Para isto, os dados foram normalizados pela unidade.

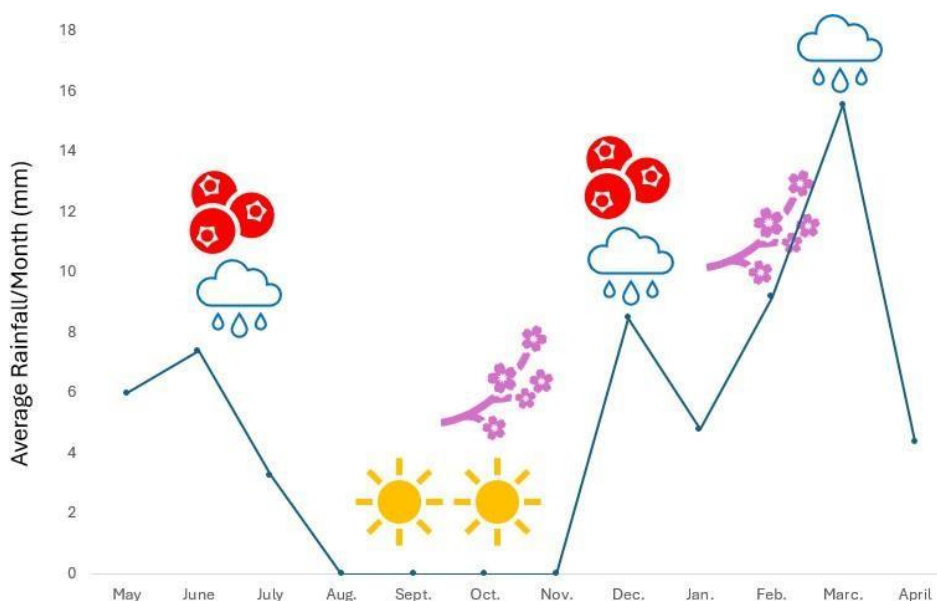
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 AVALIAÇÃO SAZONAL E BROMATOLÓGICA

No Nordeste do Brasil, as estações do ano não seguem o padrão clássico de quatro estações bem definidas, como ocorre em regiões de clima temperado. No entanto, é possível observar duas estações predominantes que são a estação chuvosa e a estação seca, que variam de acordo com a localização específica na região. De forma geral, a estação chuvosa (outono/inverno) ocorre entre fevereiro e agosto, com os meses de maior concentração de chuvas variando conforme o estado. Na Paraíba o período chuvoso mais forte acontece entre março e maio. Já a estação seca (primavera/verão) predomina de setembro a janeiro. Durante esse período, os meses de dezembro a fevereiro costumam ser mais quentes, caracterizando o verão. Já em setembro e outubro, há uma transição para o período mais seco, que se estende até o início do ano seguinte.

A avaliação dos dados de pluviosidade da região estudada para plantio da catingueira, no período de maio de 2023 a abril de 2024, mostrou que os meses de agosto, setembro, outubro e novembro são períodos de escassez de chuva; enquanto os meses de fevereiro, março e junho mostram maiores índices de pluviosidade, conforme (Figura 5).

Figura 5: Gráfico ilustrativo da variação pluviométrica anual em São João do Cariri.



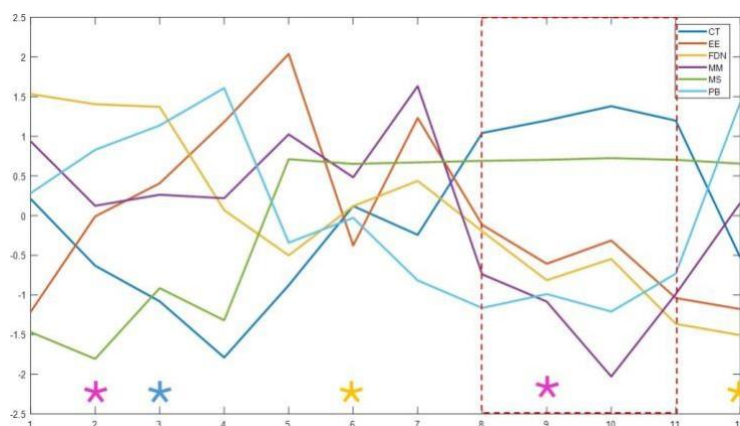
Fonte: Própria com base em dados da agência Executiva de Gestão das Águas (2024).

A catingueira tem seu período de floração nos meses de outubro e fevereiro, já nos meses de junho e dezembro tem a sua frutificação (Souza *et al.*, 2021).

Como discutido anteriormente, a variação sazonal tem um impacto significativo na qualidade nutricional das folhas da catingueira. De acordo com a avaliação dos parâmetros bromatológicos as características para uma boa forragem são alto valor de MS, PB, CT, MM e EE; e baixos teores de FDN. Espera-se que nos períodos secos sejam obtidos alto teores de MS, um aumento nos de EE e uma diminuição do FDN. Já nos períodos chuvosos as folhas possuam um maior teor de PB e CT devido a rebrota. Por outro lado, nesta época podem ocorrer diminuição nos teores de MM devido a lixiviação. As figuras 6 (dados normalizados) e 7 (dados sem pré-processamento) foram utilizadas para avaliar a variação dos parâmetros bromatológicos ao longo do ano. Houve a necessidade de normalizar os dados para que a variação dos parâmetros ao longo do ano ficasse mais evidente, sem a influência da ordem de grandeza.

A figura 6, resume as propriedades bromatológicas (normalizadas), as estrelinhas significam os meses e a partir dela podemos inferir quais seriam os melhores meses para realização de coleta para posterior armazenamento da forragem, bem como para extração de metabólitos. Neste sentido, o mês de dezembro seria o melhor por apresentar alta porcentagem de PB e MS, PB aceitável, indicando alto valor nutritivo, e baixo teor de FDN, indicando alta digestibilidade. O mês de maio seria ideal para coleta com fins farmacêuticos por apresentarem um alto teor de EE, o que está relacionado a concentração de metabólitos. Neste mês também poderiam ser realizadas coletas para fins de armazenamento de forragem por apresentar baixo FDN, alto MS e CT aceitável.

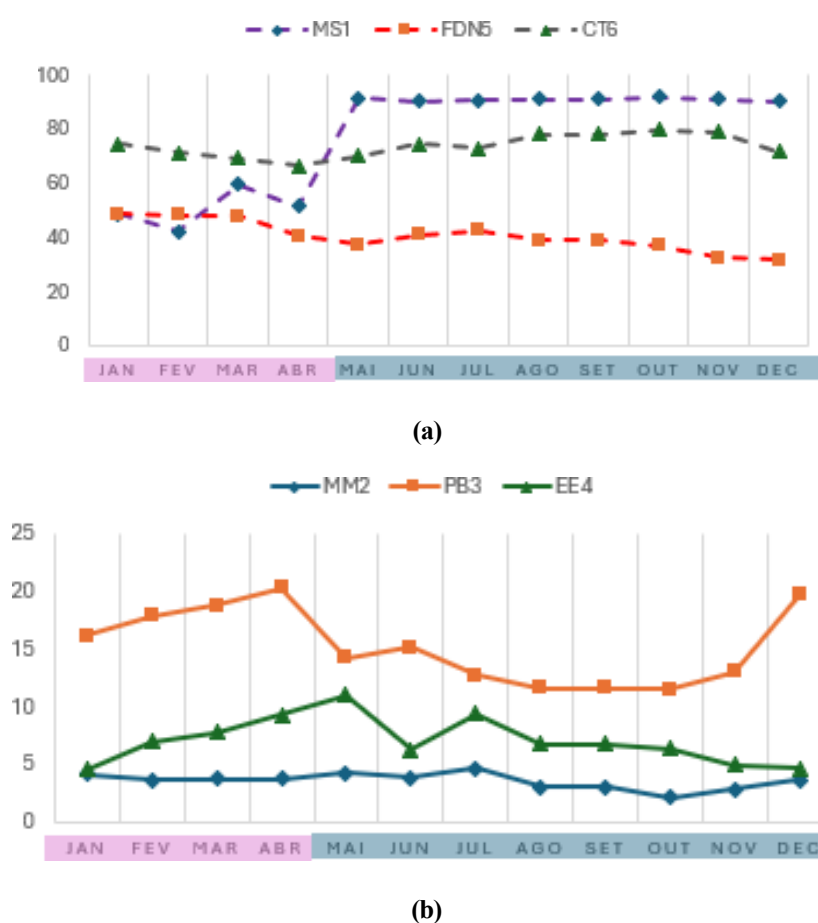
Figura 6: Variação anual das propriedades bromatológicas (normalizadas).



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

De acordo com as figuras, durante o período de maio a dezembro ocorreu uma maior concentração de MS (7a) e fibra bruta. De acordo com a literatura, este comportamento é esperado para meses mais secos, o que não é o caso dos meses de maio a junho e dezembro. Em relação a melhoria do valor nutricional da planta no período chuvoso, os valores de PB caíram drasticamente no período seco, o que não foi observado para CT. No entanto, foi observado uma diminuição nos teores de CT no mês de abril, onde houve uma diminuição de pluviosidade média em relação aos meses anteriores. Já para PB a diminuição deste parâmetro nutricional é apreciável nos períodos secos.

Figura 7: Variação dos parâmetros bromatológicos ao longo do ano.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Apesar do teor de MM (7b) poder sofrer influência da sazonalidade devido a lixiviação para os dados obtidos não foi verificada esta variação, na verdade o que foi observado foi uma diminuição dos teores de MM no período seco.

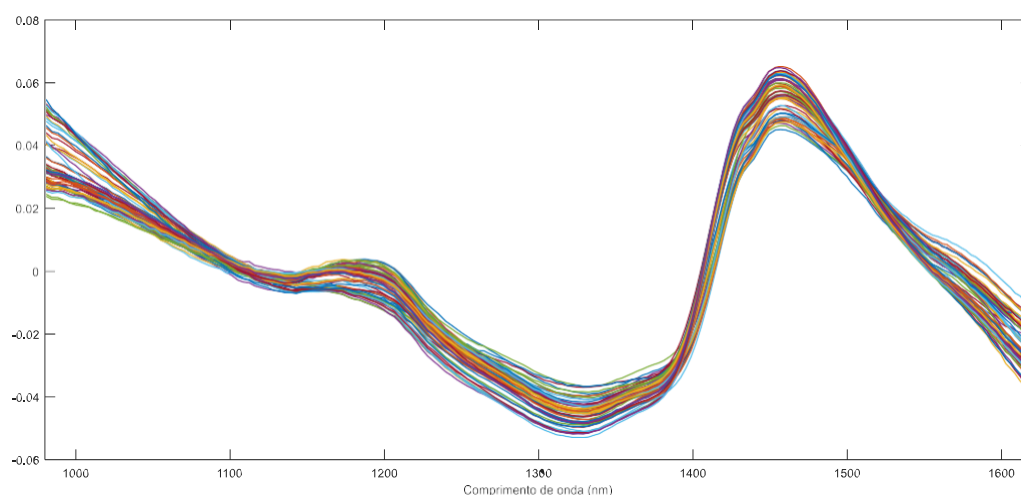
Em relação ao EE foram verificados dois picos de aumento desta propriedade, nos meses de maio e julho, e não nos períodos secos como esperado.

Em relação a FDN observou-se que os maiores valores destes parâmetros foram observados nos meses de janeiro a março, não estando de acordo com o esperado; julho também houve aumento, neste caso estando de acordo com o esperado para períodos de menor pluviosidade. Os menores valores de FDN foram registrados para novembro e dezembro, como esperado para períodos chuvosos.

5.2 ESTUDOS DOS ESPECTROS NIR E CONSTRUÇÃO DOS MODELOS

A figura 8 mostra os espectros brutos do pó das folhas de catingueira. A banda mais proeminente localizada na região entre 1428 a 1600 nm podem ser atribuídas a vibrações OH, CH e CH₂ relacionadas a compostos fenólicos, alcaloides, proteínas, ácidos e compostos aromáticos (Carvalho *et al.*, 2021; Aenugu *et al.*, 2021).

Figura 8: Espectros NIR (Processados) do pó da folha de catingueira.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

A avaliação da relação entre fatores sazonais e a composição nutricional e química das folhas de catingueira, foi realizada com base na HCA e PCA dos dados bromatológicos como MS, MM, EE, PB, CT e FDN; com os espectros NIR e a fusão dos dois bancos de dados.

Para corrigir a diferença de ordens de grandeza entre os parâmetros bromatológicos, que poderia comprometer a construção dos modelos, foi realizada a normalização pelo vetor unitário. Já em relação aos espectros NIR, para corrigir o efeito de deslocamento de linha de base e o ruído espectral, foram testados diversos pré-

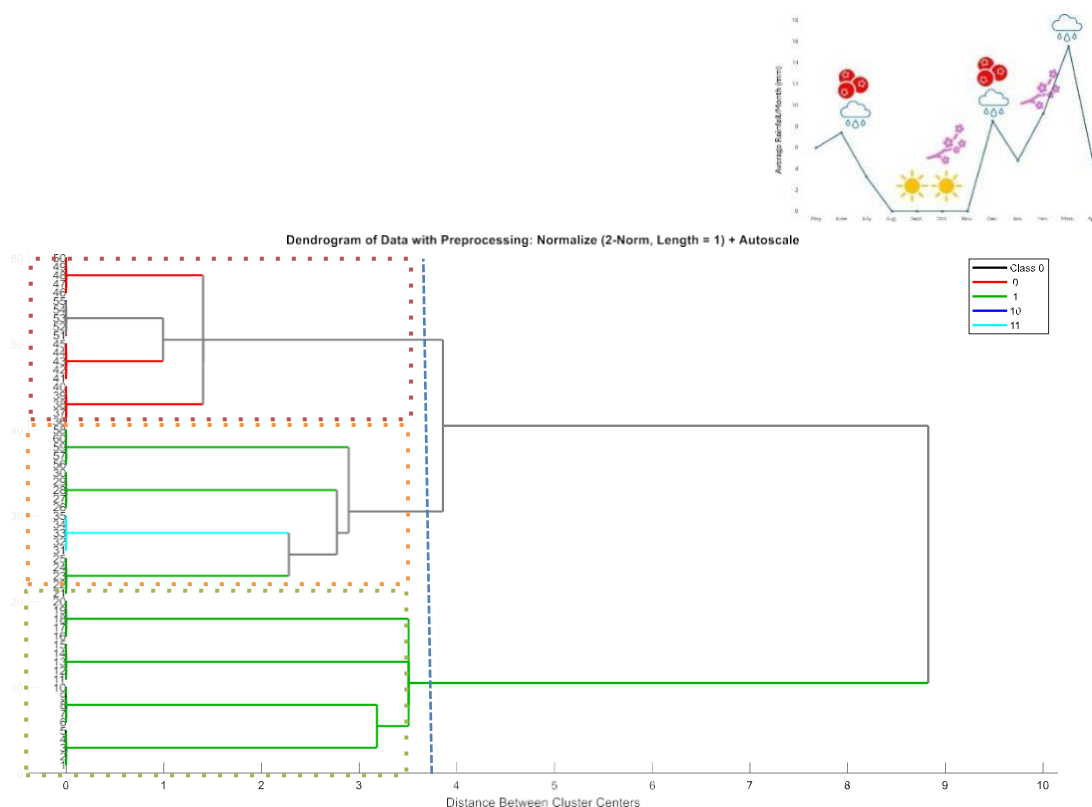
processamentos espectrais como normalização, variação normal padrão (SNV), correção do sinal multiplicativo (MSC), suavização e derivação com janelas variáveis. A fusão de dados de baixa ordem foi realizada concatenando horizontalmente as duas matrizes de dados e depois aplicando-se o pré-processamento normalização por vetor unitário.

5.2.1 ANÁLISE DE RECONHECIMENTO DE PADRÕES PARA OS DADOS BROMATOLÓGICOS.

5.2.2

Inicialmente foi feito o estudo de relação entre os fatores sazonais e os dados bromatológicos utilizado a HCA utilizando método de agrupamento hierárquico centroide e a distância de Manhattan, como mostra a figura 9.

Figura 9: Dendrograma para os dados bromatológicos. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica anual.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Nesta figura, as linhas em vermelho representam as amostras coletadas em períodos secos; as em verde, coletadas em períodos chuvosos; em ciano, a transição do

período chuvoso para o período seco e as em azul escuro, a transição do período chuvoso para o seco.

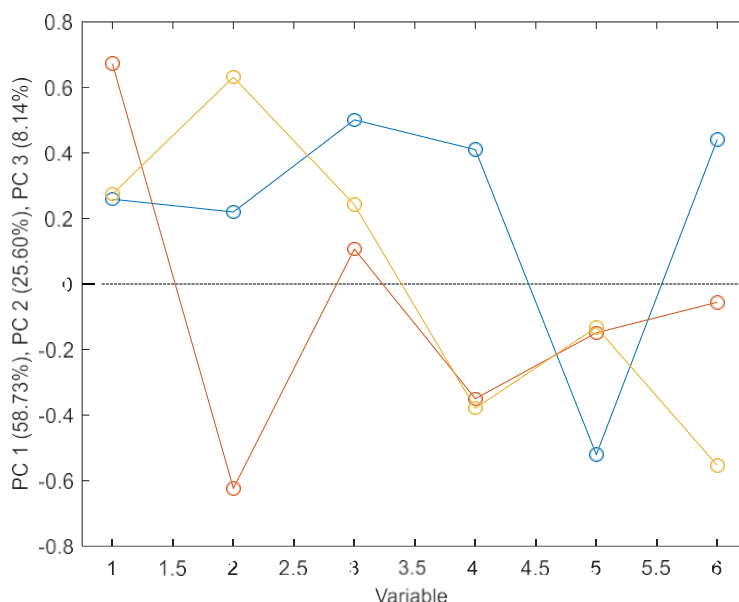
Analisando o dendrograma da figura 9, na distância de 3,8, indicada pela linha horizontal tracejada em azul, pode-se observar três agrupamentos.

O primeiro agrupamento (tracejado em verde) pode ser atribuído as amostras coletadas no período chuvoso. O segundo grupamento (tracejado em laranja) contém os meses de maio e junho que são considerados meses chuvosos; e também os meses de dezembro e julho, que além de serem chuvosos ainda tem em comum ser a época de frutificação da espécie estudada. O terceiro agrupamento (tracejado em vermelho) traz os meses de agosto, setembro, outubro e novembro, notadamente de baixa pluviosidade.

Com o objetivo de reafirmar e/ou complementar as informações obtidas na HCA realizou-se uma PCA, Figura 10 e 11. O modelo PCA foi construído com 3 PCs que explicam 90.7% da variância dos dados.

A figura 10 apresenta o gráfico de pesos de PC1, PC2 e PC3, nele podemos ver que ambas as componentes são importantes para a distinção dos agrupamentos. E que PC1 (azul) e PC3 (vermelho) tem comportamento antagônico a PC2 (amarelo).

Figura 10: Gráfico de pesos de PC1, PC2 e PC3 para os dados bromatológicos

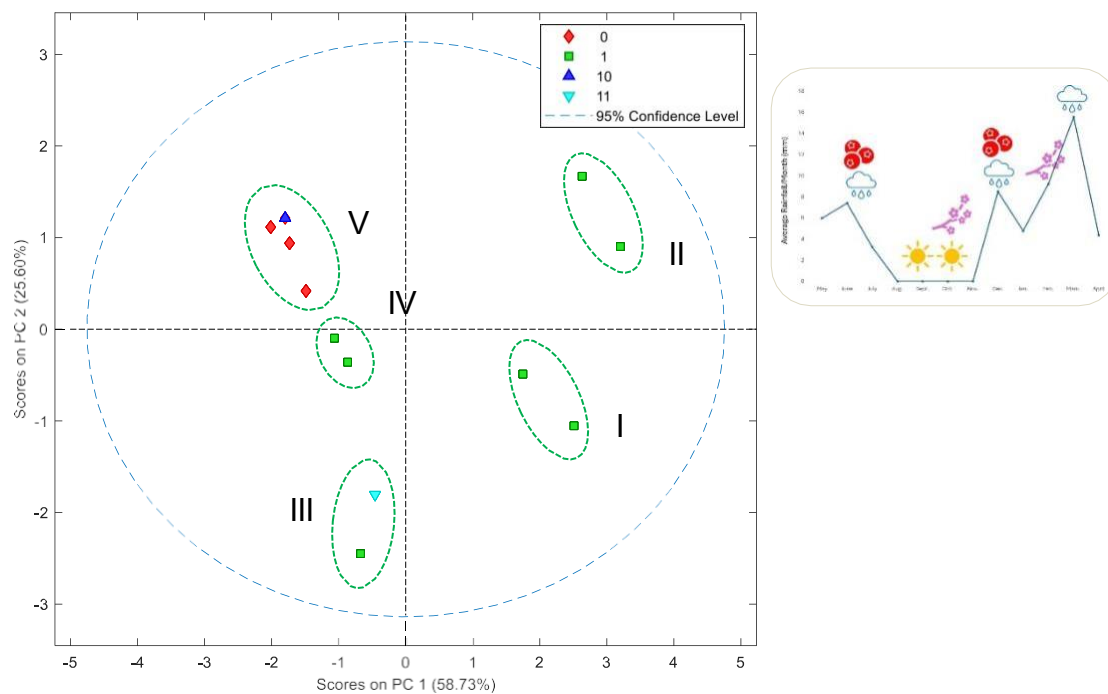


Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

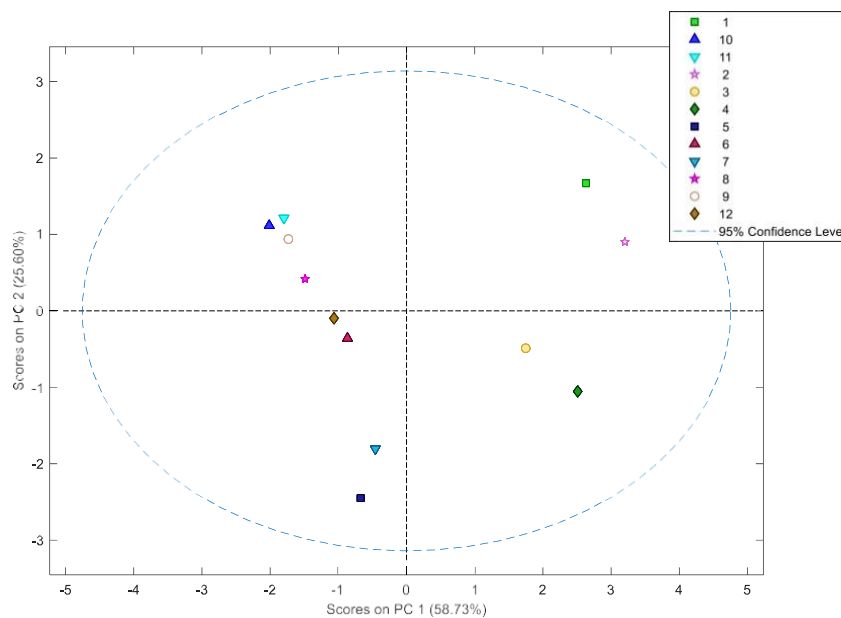
Na figura 11a pode ser observado o gráfico de escores de PC1xPC2 onde as amostras estão identificadas com cores relacionadas ao índice de pluviosidade no mês de coleta, sendo verde para meses considerados chuvosos, vermelho meses com escassez de chuvas, azul ciano e escuro, as transições do período chuvoso para o seco e vice-versa, respectivamente. Já no gráfico de escores da figura 11b, as amostras estão rotuladas com cores referentes ao mês de coleta (onde o mês 1 se refere a janeiro e 12 a dezembro, para a legenda de cores). O agrupamento I (março e abril) se refere a meses chuvosos, assim como o agrupamento 2 (janeiro e fevereiro) e 3 (maio e julho). Esse método de rotulação das amostras será utilizado ao longo de todo texto.

O agrupamento V é composto por amostras coletadas nos meses de escassez de chuva (agosto, setembro, outubro e novembro) e próximo a este se encontra o agrupamento IV que (junho e dezembro) que são amostras coletadas em épocas de maior pluviosidade, no entanto tem em comum serem períodos de frutificação da espécie estudada. Os agrupamentos visualizados na PCA corroboram os resultados do HCA para os dados bromatológicos.

Figura 11: Gráficos de escores de PC1xPC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para os dados bromatológicos. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.



(a)



(b)

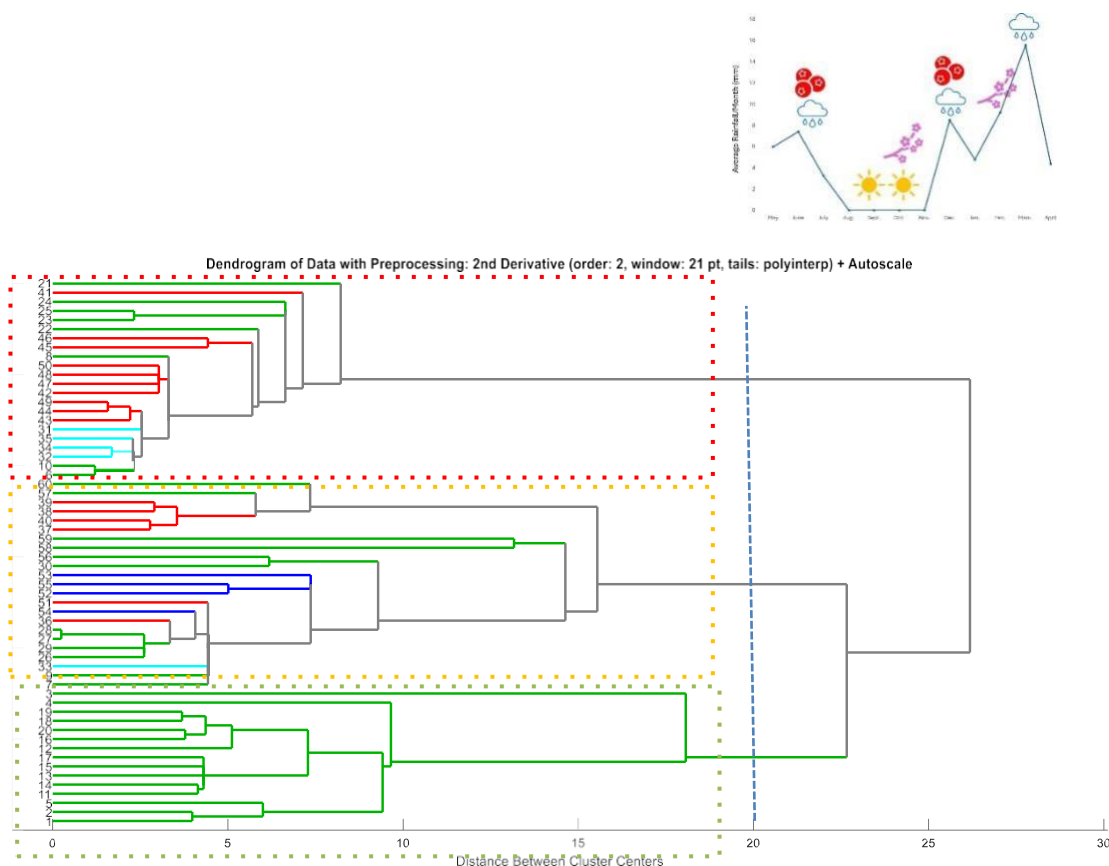
Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

5.2.3 ANÁLISE DE RECONHECIMENTO DE PADRÕES PARA OS DADOS ESPECTRAIS.

Para avaliar a relação entre as propriedades químicas e a sazonalidade, foi realizada a análise de agrupamentos hierárquicos com os dados espectrais, utilizando os dados pré-processados com segunda derivada, polinômio de segunda ordem e janela de vinte e pontos.

Como método de agrupamento hierárquico foi usado o centroide e os agrupamentos foram realizados nos escores da PCA em vez das variáveis X originais. Na distancia de 20 podem ser observados 3 agrupamentos. O dendograma resultante é mostrado na Figura 12.

Figura 12: Dendograma para os dados espectrais. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.



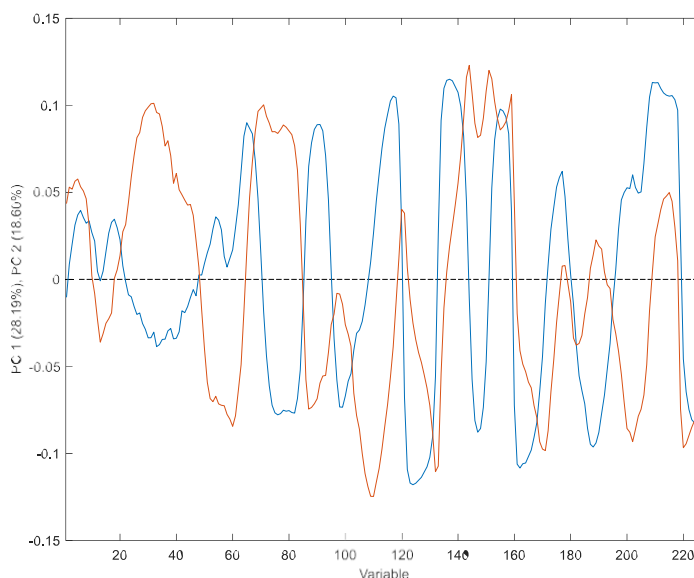
Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

O primeiro agrupamento (tracejado em verde) pode ser atribuído as amostras coletadas no período chuvoso de janeiro a abril. O segundo grupamento (tracejado em laranja) contém os meses de junho que é considerado um mês chuvoso; dezembro e julho que além de serem chuvosos ainda tem em comum ser a época de frutificação da espécie estudada; e agosto que é um mês de transição entre o período chuvoso e o seco. O terceiro agrupamento (tracejado em vermelho) traz os meses de setembro e outubro, notadamente de baixa pluviosidade; além dos meses fevereiro que é o mês da floração e maio.

Com o objetivo de reafirmar e/ou complementar as informações obtidas na HCA realizou-se uma PCA, Figura 13 e 14. O modelo PCA foi construído com 6 PCs que explicam 81.06% da variância dos dados.

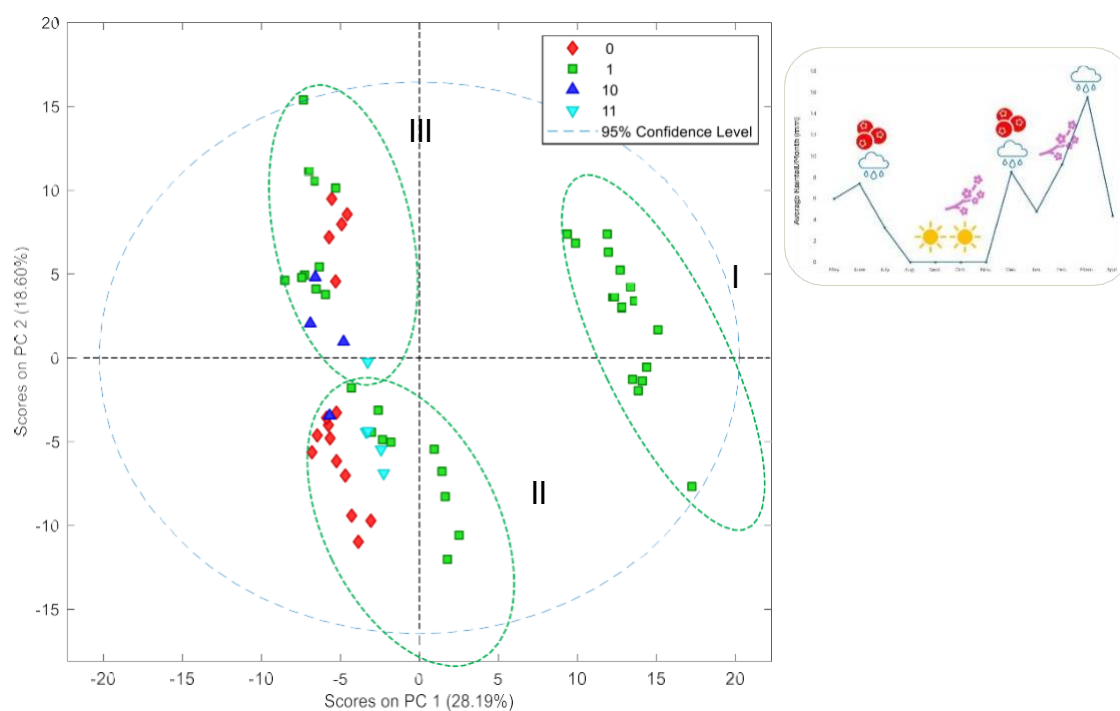
A figura 13 apresenta o gráfico de pesos de PC1 e PC2, nele podemos ver que ambas as componentes são importantes para a distinção dos agrupamentos e que diversas regiões espectrais são informativas para o modelo.

Figura 13: Gráfico de pesos de PC1 e PC2 para os dados espectrais.

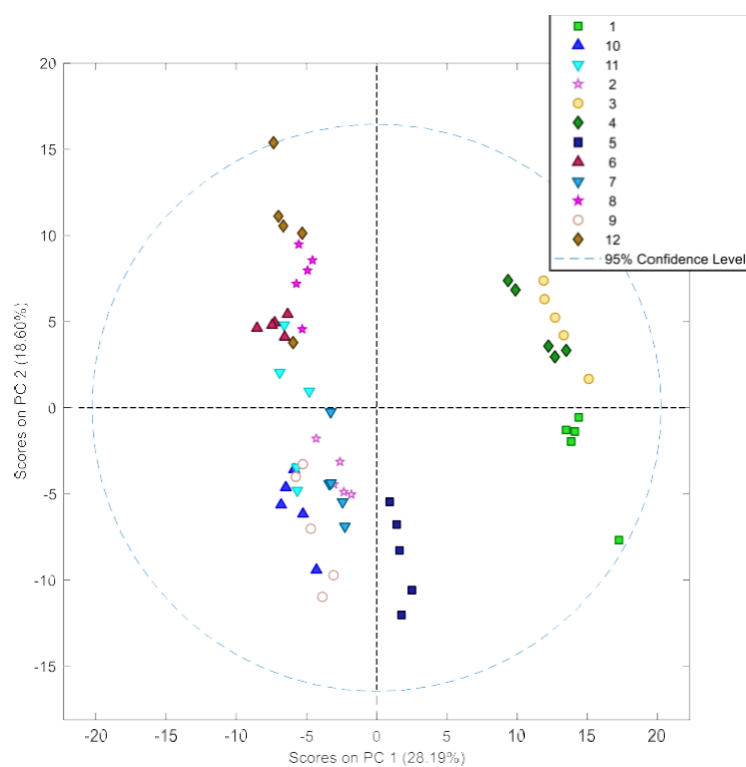


Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Figura 14: Gráficos de escores de PC1xPC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para os dados espectrais. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.



(a)



(b)

Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Na figura 14a pode ser observado o gráfico de escores de PC1xPC2 onde as amostras estão identificadas com cores relacionadas ao índice de pluviosidade no mês de coleta, sendo verde para meses considerados chuvosos, vermelho meses com escassez de chuvas, azul ciano e escuro, as transições do período chuvoso para o seco e vice-versa, respectivamente.

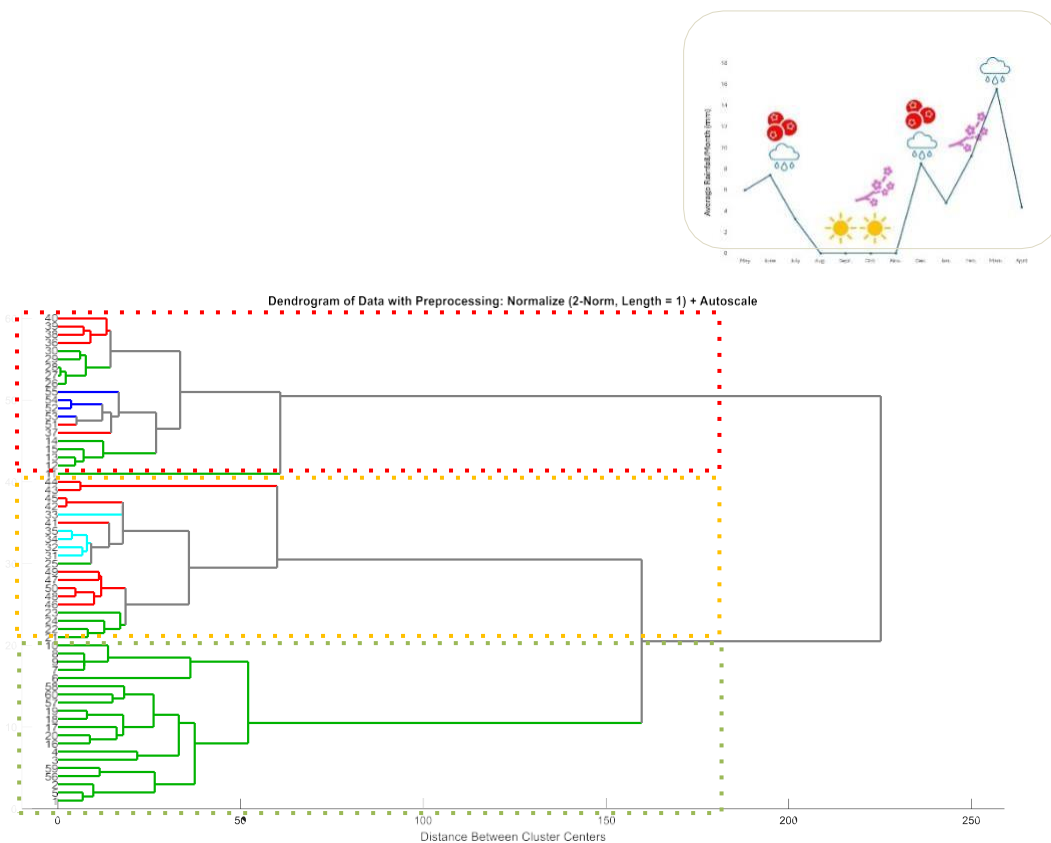
Já no gráfico de escores da figura 14b, as amostras estão rotuladas com cores referentes ao mês de coleta (onde o mês 1 se refere a janeiro e 12 a dezembro, para a legenda de cores). O agrupamento I (março e abril) se refere a meses chuvosos. Já os agrupamentos II e III parecem ser governados por metabólitos relacionados a floração (agrupamento 2) e frutificação (agrupamento 3). Deste modo, nota-se a relação entre espectros NIR e sazonalidade provavelmente é influenciada por metabólitos relacionados aos períodos de frutificação e floração da catingueira.

5.2.4 ANÁLISE DE RECONHECIMENTO DE PADRÕES PARA A FUSÃO DE DADOS.

Como não foi observada uma distinção clara entre amostras coletadas em períodos secos e chuvosos usando as estratégias anteriores, ou seja, relacionar os dados bromatológicos ou espectrais com os índices pluviométricos, uma terceira estratégia foi avaliada. Deste modo, os dados bromatológicos e espectrais foram concatenados horizontalmente. Esse método é conhecido como fusão de dados de baixa ordem.

Como método de agrupamento hierárquico foi usado o centroide e os agrupamentos foram realizados nos escores da PCA em vez das variáveis X originais. Na distancia de 20 podem ser observados 3 agrupamentos. O dendograma resultante é mostrado na Figura 15.

Figura 15: Dendrograma para a fusão de dados. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.



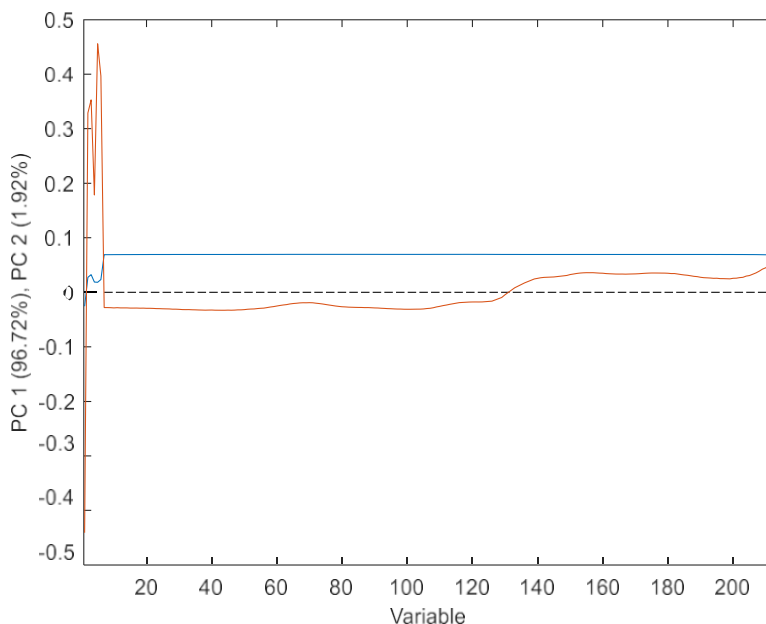
Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Analisando o dendrograma da figura 15, na distância de 100, indicada pela linha horizontal tracejada em azul, pode-se observar três agrupamentos. O primeiro agrupamento (tracejado em verde) pode ser atribuído as amostras coletadas no período chuvoso de janeiro, fevereiro, abril e dezembro. O segundo grupo (tracejado em laranja) contém os meses de julho, maio que são períodos chuvosos e setembro que é período seco. O terceiro agrupamento (tracejado em vermelho) traz os meses de março, junho meses chuvosos e agosto e novembro que possuem baixa pluviosidade. Como pode ser avaliado a análise hierárquica não obteve um bom desempenho, trazendo agrupamentos que não conseguiram ser explicado nem como base na pluviosidade, nem na composição metabólica.

Com o objetivo de reafirmar e/ou complementar as informações obtidas na HCA realizou-se uma PCA, Figura 16 e 17. O modelo PCA foi construído com 6 PCs que explicam 81.06% da variância dos dados.

A Figura 16 o gráfico de pesos de PC1 (vermelha) e PC2 (azul). Pode-se observar que a PC1 é a mais informativa para o modelo.

Figura 16: Gráfico de pesos de PC1 e PC2 para a fusão de dados.

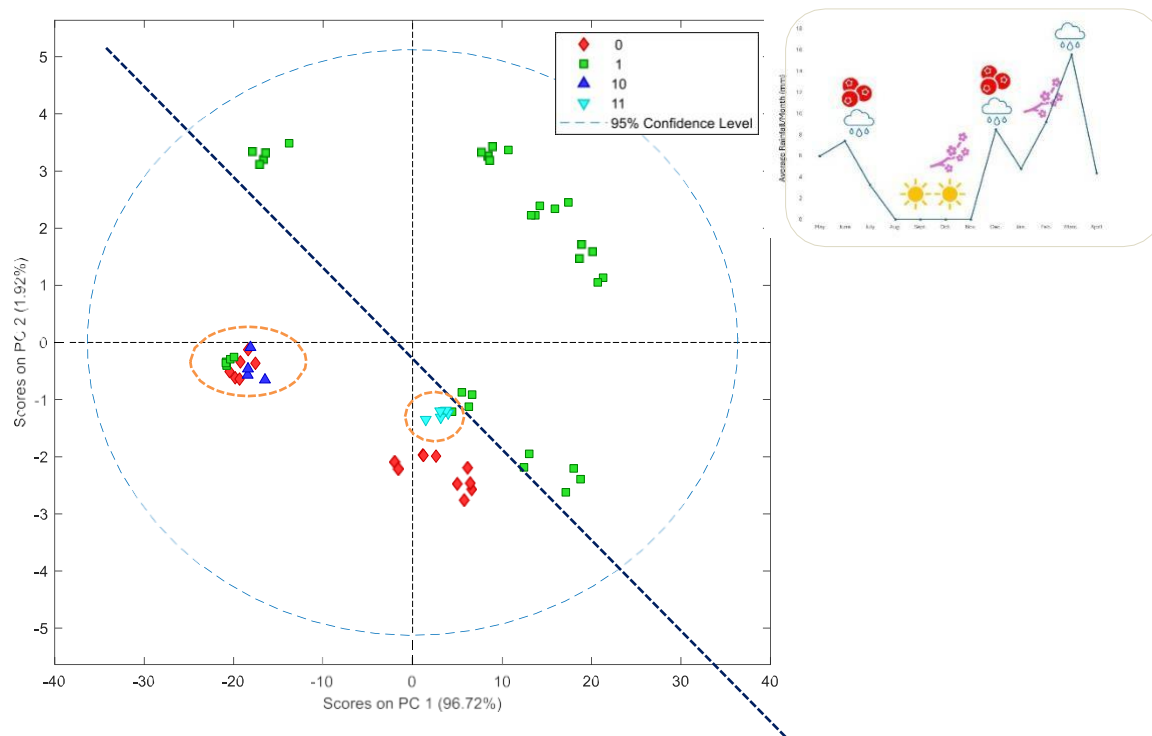


Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

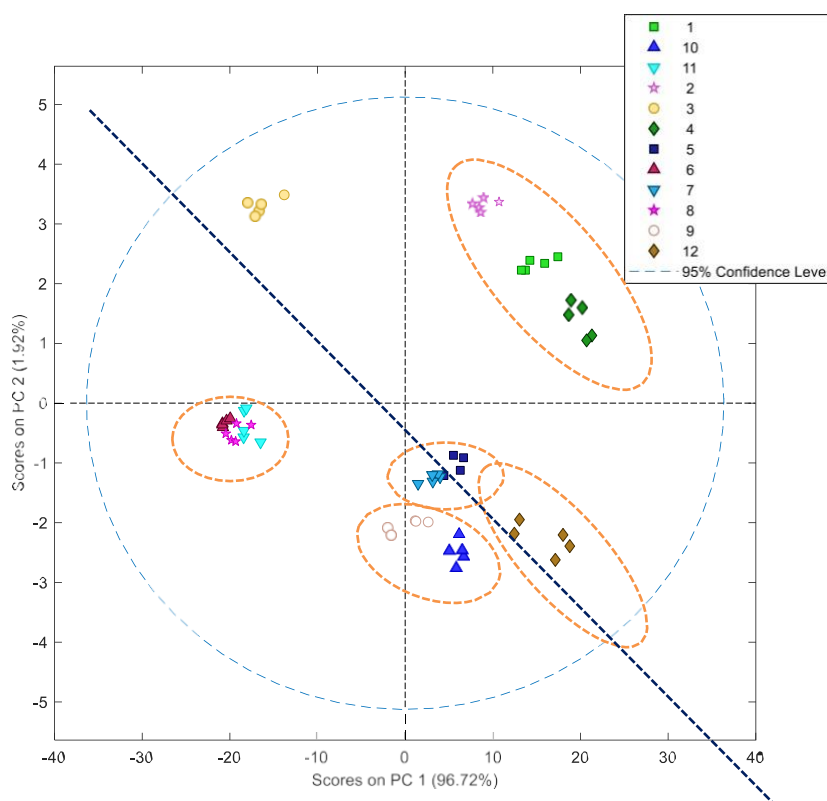
Já a Figura 17a e 17b, traz o gráfico de escores de PC1xPC2 da fusão de dados, nela é possível uma clara separação entre as amostras coletadas em períodos chuvosos e períodos secos. A linha tracejada representa um limiar de separação entre as amostras. Pode-se observar que as amostras coletadas no período de transição do período chuvoso para o período seco (em ciano, figura 17a) se encontram no limiar de separação entre as duas classes. As mostras do mês de junho (triângulos vermelhos, figura 17b) se encontram agrupadas com as amostras coletadas no período seco (agosto e novembro).

O mês de junho é época de frutificação da catingueira, e os meses de agosto e novembro são meses de transição de estações climáticas. As amostras do mês de março (círculos amarelos, Figura 17b) estão agrupadas em um cluster separado, provavelmente por neste mês terem ocorrido taxa de pluviosidade acima da média.

Figura 17: Gráficos de escores de PC1xPC2 a) em relação a pluviosidade e b) em relação ao mês de coleta para a fusão de dados. Em destaque o gráfico ilustrativo da variação pluviométrica.



(a)



(b)

Fonte: Elaborada pelo autor, 2025.

Nota-se que a fusão de dados capturou, além da influência da pluviosidade, a influência de processos regulados por hormônios vegetais, mas que também dependem de fatores ambientais e genéticos, como a floração e a frutificação.

6 CONCLUSÃO

Este estudo demonstrou que a sazonalidade exerce influência nos parâmetros bromatológicos da *Poincianella pyramidalis* (catingueira), afetando sua qualidade nutricional como forragem para caprinos e ovinos no semiárido nordestino. Os resultados indicaram que os períodos chuvosos e secos alteram os teores de matéria seca (MS), proteína bruta (PB), fibra em detergente neutro (FDN) e outros componentes essenciais, impactando diretamente a digestibilidade e o valor nutritivo da planta.

A espectroscopia NIR portátil, combinada com técnicas de inteligência artificial (IA) e quimiometria, mostrou-se uma ferramenta eficiente para a análise rápida e não destrutiva da composição química da catingueira. A aplicação da Análise de Componentes Principais (PCA) e da Análise Hierárquica de Agrupamento (HCA) permitiu identificar padrões sazonais e agrupar amostras com base em suas características bromatológicas e espectrais. A fusão de dados revelou-se eficaz para distinguir amostras coletadas em diferentes condições climáticas, destacando a relação entre pluviosidade, floração e frutificação da espécie.

Os melhores períodos para coleta das folhas foram identificados como sendo dezembro, por apresentar alto valor nutricional (elevada PB e MS, baixa FDN), e maio, ideal para extração de metabólitos devido ao alto teor de extrato etéreo (EE). Esses achados têm implicações práticas para o manejo sustentável da catingueira, auxiliando produtores na otimização da alimentação animal e no armazenamento estratégico de forragem durante os períodos de escassez.

Em síntese, a integração da espectroscopia NIR portátil com métodos quimiométricos com a aplicação de IA mostrou-se promissora para o monitoramento da qualidade nutricional da catingueira, oferecendo uma alternativa viável aos métodos laboratoriais tradicionais.

7 PERSPECTIVAS

- Ampliar o banco de dados espectrais e bromatológicos, coletando amostras por um maior período de tempo, para melhorar a robustez dos modelos preditivos.
- Investigar o impacto de outras variáveis ambientais (temperatura, umidade do solo) na composição da catingueira.
- Validar os modelos em diferentes regiões do semiárido para garantir sua aplicabilidade em larga escala.

REFERÊNCIAS

- AESA - AGÊNCIA EXECUTIVA DE GESTÃO DAS ÁGUAS DA PARAÍBA. **Meteorologia e Chuvas**. Disponível em: <http://www.aesa.pb.gov.br/aesa-website/meteorologia-chuvas/>. Acesso em: 21 maio 2024.
- AGUIAR, Thamiris da Silva. **Chaves de identificação de espécies arbóreas e arbustivas baseadas em caracteres vegetativos para fragmentos de Caatinga no interior do Rio Grande do Norte**. 2021.
- ALVES, Ana Catarina. **Desenvolvimento de um modelo de calibração MPLS-NIR para um alimento para animal**. 2023. Dissertação (Mestrado) – Universidade do Porto (Portugal).
- AMIGO, J. M. Data Mining, Machine Learning, Deep Learning, Chemometrics: Definitions, Common Points and Trends (Spoiler Alert: VALIDATE your models!). **Brazilian Journal of Analytical Chemistry**, v. 8, n. 32, p. 45-61, 2021. DOI: 10.30744/brjac.2179-3425.AR-38-2021.
- ANDRADE, A. P. de et al. Produção animal no bioma caatinga: paradigmas dos “pulsos-reservas”. In: SIMPÓSIOS DA 43ª REUNIÃO ANUAL DA SBZ, 2006, João Pessoa. **Anais...** João Pessoa: Sociedade Brasileira de Zootecnia, 2006. CD-ROM.
- ARAÚJO, Maurício dos Santos; LIMA, Michelle Mara de Oliveira. O uso de plantas medicinais para fins terapêuticos: os conhecimentos etnobotânicos de alunos de escolas pública e privada em Floriano, Piauí, Brasil. **Amazônia Revista de Educação em Ciências e Matemáticas**, v. 15, n. 33, p. 235-250, jan./jun., 2019.
- ARAÚJO-FILHO, J. A. **Manejo pastoril sustentável da caatinga**. Recife: Projeto Dom Helder Câmara, 2013.
- ARAUJO, Kallianna Dantas et al. USO DE ESPÉCIES DA CAATINGA NA ALIMENTAÇÃO DE REBANHOS NO MUNICÍPIO DE SÃO JOÃO DO CARIRI – PB. **RAEGA - O Espaço Geográfico em Análise**, v. 20, 2010. DOI: 10.5380/raega.v20i0.20619. Disponível em: <https://revistas.ufpr.br/raega/article/view/20619>. Acesso em: 4 mar. 2025.
- AZCARATE, S. M. et al. Data handling in data fusion: methodologies and applications. **TrAC - Trends in Analytical Chemistry**, v. 143, 116355, out. 2021.
- BARBOSA, Homero Perazzo et al. Composição bromatológica de plantas da Caatinga do Estado da Paraíba, Nordeste do Brasil. **Revista Brasileira de Gestão Ambiental e Sustentabilidade**, v. 14, p. 857-871, 2019.
- BIANCOLILLO, A. et al. Data-fusion for multiplatform characterization of an Italian craft beer aimed at its authentication. **Analytica Chimica Acta**, v. 820, p. 23–31, 2014.

CHAVES, T. P. et al. Traditional use, phytochemistry and biological activities of *Poincianella pyramidalis* (Tul.) L. P. Queiroz. **African Journal of Biotechnology**, v. 14, n. 52, 2015.

DE SOUSA, L. M. S. et al. *Poincianella pyramidalis* (Tul) L.P. Queiroz: A review on traditional uses, phytochemistry and biological-pharmacological activities. **Journal of Ethnopharmacology**, v. 264, 2021. DOI: 10.1016/j.jep.2020.113181.

EVANGELISTA, Mariane Zabotto. **Desenvolvimento de um protótipo de espectrômetro NIR portátil com análise de micotoxinas por quimiometria**. 2025.

FERNANDES, Caroline Lins et al. Vibrational spectroscopic techniques and variable selection in Linear Discriminant Analysis to geographical origin discrimination of *Jatropha mollissima* sap. **Phytochemistry Letters**, v. 64, p. 37-46, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.phytol.2024.09.007>. Acesso em: 13 maio 2025.

FERREIRA, A. P.; TOBYN, M. Multivariate analysis in the pharmaceutical industry: Enabling process understanding and improvement in the PAT and QbD era. **Pharmaceutical Development and Technology**, v. 20, n. 5, p. 513–527, 2015.

FERREIRA, Márcia Miguel Castro. Quimiometria III - Revisitando a análise exploratória dos dados multivariados. **Química Nova**, v. 45, n. 10, p. 1251-1264, 2022.

HONG, X.; WANG, J. Detection of adulteration in cherry tomato juices based on electronic nose and tongue: comparison of different data fusion approaches. **Journal of Food Engineering**, v. 126, n. 4, p. 89–97, 2014.

GIOMBELLI, L. C. D. **Monitoramento qualitativo da silagem de milho em função do descarregamento de silos tipo trincheira**. Chapecó: UDESC, 2018.

KUNZ, Douglas Wegner et al. Desempenho agrônomo e bromatológico de forrageiras solteiras e em consórcio cultivadas com diferentes adubações. **Observatorio de la Economía Latinoamericana**, v. 21, n. 7, p. 6263-6286, 2023.

LEITE, E. R.; VIANA, J. J. Avaliação do potencial forrageiro nos Cariris paraibanos. In: REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE ZOOTECNIA, 23., 1986, Campo Grande. **Anais [...]**. Campo Grande: Sociedade Brasileira de Zootecnia, 1986. p. 229.

LI, Y. et al. Quantitative analysis of honey adulteration by spectrum analysis combined with several high-level data fusion strategies. **Vibrational Spectroscopy**, v. 108, 103060, 2020.

LIMA, Maria Betânia Vieira de Souza et al. **Byrsonima tripterifolia A. Juss: ocorrência, fenologia e relação com fauna na caatinga alagoana**. 2021.

LIMA-JÚNIOR, V. **Caracterização da dieta e avaliação de métodos de estimativa de consumo em caprinos suplementados na caatinga**. 2006. 85f. Dissertação

(Mestrado em Zootecnia) - Universidade Federal da Paraíba, Centro de Ciências Agrárias, Areia-PB, 2006.

MARTINS, José Antonio et al. NIR Associado à Quimiometria: Uma Poderosa Ferramenta Analítica. **Prospectus**, v. 5, n. 2, p. 15-48, 2023.

MASSIGNANI, Caroline et al. **Qualidade de pastagens determinada por espectroscopia de infravermelho próximo e avaliada por análise multivariada: ferramentas para fomentar seu uso.** 2020.

MATIAS, J. R. et al. **Catingueira-verdadeira Poincianellapyramidalis [Tul.] L. P. Queiroz.** 2017.

MAIA, G. N. **Caatinga: árvores e arbustos e suas utilidades.** São Paulo: D&Z Computação Gráfica e Editora, 2004. 413p.

MENDES, Maria Beatriz Aresta Pires. **Utilização de dados do satélite Sentinel-2 e de espectroscopia NIR para a quantificação de nutrientes na nogueira-comum (Juglans regia L.).** 2022. Dissertação (Mestrado) – Universidade de Évora (Portugal).

PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: A mature analytical technique with new perspectives – A review. **Analytica Chimica Acta**, v. 1026, p. 8–36, 2018.

PEREIRA, Fabíola Manhas Verbi. **Quimiometria: aplicações e desafios analíticos.** 2022.

RESEARCHGATE. **Mapa.** Disponível em: https://www.researchgate.net/figure/Figura-1-Mapa-de-Sao-Joao-do-Cariri-PB-Fonte-IBGE-2004_fig1_277763806.

SANTOS, Bruna Rosa da Silva et al. **Avaliação da composição química e nutricional da folha de mandioca e azeitona em conserva empregando técnicas espectroanalíticas e quimiométricas.** 2022.

SANTOS, William de Sousa et al. Produção de lenha e forragem de Poincianellapyramidalis (Tul.) L. P. Queiroz submetida à poda anual. **Ciência Florestal**, v. 30, n. 01, p. 89-103, 2020.

SCHNEIDER, Manuella et al. Técnicas de Análise Exploratória Aplicadas ao Ensino de Espectrometria na Região do Infravermelho. **Revista Virtual de Química**, v. 10, n. 2, 2018.

SILVA, A. R. et al. Produção de lenha e forragem de Poincianellapyramidalis (Tul.) L. P. Queiroz submetida à poda anual. **Ciência Florestal**, Santa Maria, v. 30, n. 4, p. 1157-1168, out./dez. 2020. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/cflo/a/q3VFkwKM66y8PWKk4x9Vkwj/?lang=pt>. Acesso em: 04 mar. 2025.

SILVA, José Crisólogo de Sales et al. Consumo voluntário por caprinos no bioma caatingano Brasil. **Revista Diversitas**, Maceió, v. 4, p. 3211-3225, out./dez. 2020. DOI: 10.17648/diversitas-journal-v5i4-1375.

SOUZA, E. M.; et al. Fabaceae: *Cenostigmamicrophyllum* (Mart. ex G. Don) Gagnon & G. P. Lewis (catingueira, catingueira-das-folhas-miúdas, catingueira-de-porco). In: SOUZA, Elizângela Maria de (Org.). **Plantas da caatinga: um olhar multidisciplinar**. Petrolina: IF Sertão PB, 2021. Disponível em: <http://releia.ifsertao-pe.edu.br/jspui/handle/123456789/640>. Acesso em: 09 jul. 2024.

ZHOU, X. et al. Discriminant analysis of vegetable oils by thermogravimetric-gas chromatography/mass spectrometry combined with data fusion and chemometrics without sample pretreatment. *LWT - Food Science and Technology*, v. 161, 113403, 1 maio 2022.