



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

KARINA ARAUJO DO PRADO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS BROMATOLÓGICOS
DA CATINGUEIRA UTILIZANDO ESPECTROMETRIA NIR PORTÁTIL
E MÉTODOS MULTIVARIADOS

CAMPINA GRANDE

2025

KARINA ARAUJO DO PRADO

**DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS BROMATOLÓGICOS
DA CATINGUEIRA UTILIZANDO ESPECTROMETRIA NIR PORTÁTIL
E MÉTODOS MULTIVARIADOS**

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

Orientadora: Prof. Dra. 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.

P896d Prado, Karina Araujo do.

Determinação de parâmetros bromatológicos da catingueira utilizando espectrometria nir portátil e métodos multivariados [manuscrito] / Karina Araujo do Prado. - 2025.

36 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. Espectroscopia NIR. 2. Quimiometria. 3. Nutrição animal. 4. Poincianella pyramidalis. 5. Catingueira. I. Título

21. ed. CDD 664

KARINA ARAUJO DO PRADO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS BROMATOLÓGICOS DA CATINGUEIRA
UTILIZANDO ESPECTROMETRIA NIR PORTÁTIL E MÉTODOS
MULTIVARIADOS

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 10:15:03** com chave **93c204f64dd811f0a7641a1c3150b54b**.
- **Elainy Virginia dos Santos Pereira** (***.653.314-**), em **20/06/2025 15:19:40** com chave **21ba377c4e0311f0986a1a1c3150b54b**.
- **Sara Regina Ribeiro Carneiro de Barros** (***.724.884-**), em **21/06/2025 14:46:01** com chave **989a45c04ec711f080b806adb0a3afce**.

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: 21/06/2025

Código de Autenticação: dda4e8



Dedico esse trabalho às minhas avós,
Azul Carli e Maria das Neves, que
mesmo após suas partidas, seguem
em meu coração.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus, por me conceder força, sabedoria e resiliência para enfrentar os desafios dessa jornada. Sem Sua luz e amparo, esse momento não seria possível.

À minha família, mais especificamente aos meus pais e irmã, pelo amor incondicional, pelo apoio em todos os momentos e por acreditarem em mim. Vocês foram minha base e minha maior motivação para seguir em frente, mesmo diante das dificuldades.

Aos meus amigos Luan, Alyssandro, Neto, Laís, Nathalia e Andressa que estiveram ao meu lado nessa caminhada, compartilhando desafios, conquistas e aprendizados. Agradeço também ao meu gato, Black, por ser meu fiel companheiro desde sempre e me mostrar o mais puro amor. Obrigada a todos por cada palavra de incentivo, pela companhia e por tornarem essa fase mais leve e especial.

À minha orientadora, professora Simone da Silva Simões, pelo conhecimento compartilhado, pela paciência, pelas orientações valiosas e pelo incentivo constante. Sua dedicação foi essencial para a realização deste trabalho, e sou imensamente grata por todo o apoio.

Agradeço banca examinadora a Professora e Doutora Sara Regina Ribeiro Carneiro de Barros e Professora e Doutora Elaine Virgínia dos Santos Pereira por terem aceitado fazer parte da minha banca e estarem presentes.

E, por fim, quero agradecer a mim mesma. Se cheguei até aqui, foi porque fui resiliente, determinada e incrível o suficiente para não desistir quando tudo parecia impossível. Aguentei noites sem dormir, prazos apertados e uma montanha-russa de emoções, mas aqui estou: vitoriosa. Agradeço à minha própria força, à minha disciplina (ou à falta dela, compensada por doses cavalares de café e determinação de última hora), e ao meu talento em transformar caos em conhecimento. Obrigada, eu, por não surtar completamente (ou, pelo menos, por me recompor depois de cada surto). Se este trabalho está pronto, é porque eu fui lá e fiz acontecer.

“A vida não é fácil para nenhum de nós.
Temos que ter persistência e, acima de
tudo, confiança em nós mesmos.”

Marie Curie.

RESUMO

A catingueira, espécie endêmica do bioma Caatinga, é amplamente utilizada como forragem para caprinos e ovinos, especialmente em períodos de estiagem, devido à sua resistência às condições climáticas adversas. Este trabalho de conclusão de curso teve como objetivo avaliar a qualidade nutricional da *Poincianella pyramidalis* (catingueira) utilizando espectrometria no infravermelho próximo (NIR) portátil combinada com métodos quimiométricos multivariados. Para isto, foram coletadas amostras mensais das folhas de catingueira ao longo de 12 meses na região de São João do Cariri, Paraíba. As amostras foram submetidas a análises bromatológicas convencionais para determinar parâmetros como matéria seca (MS), matéria mineral (MM), extrato etéreo (EE), proteína bruta (PB), carboidratos totais (CT) e fibra em detergente neutro (FDN). Paralelamente, os espectros NIR das amostras foram registrados utilizando um espectrômetro portátil na faixa de 900 a 1700 nm. Os dados espectrais foram processados com técnicas de pré-processamento, como derivadas, suavização, SNV e MSC e analisados por meio de modelos de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) e algoritmos de seleção de variáveis (iSPA-PLS). Os resultados demonstraram que os modelos desenvolvidos apresentaram alta capacidade preditiva, com coeficientes de determinação (R^2) próximos a 1 e erros reduzidos (RMSEP e RMSEC), validando a eficácia da espectroscopia NIR como alternativa rápida e não destrutiva às análises convencionais. Os modelos PLS mostraram-se robustos, com desempenho satisfatório para todos os parâmetros analisados, especialmente para MS, PB e EE. Concluiu-se que a combinação da espectroscopia NIR portátil com métodos quimiométricos é uma ferramenta promissora para a avaliação bromatológica da catingueira, oferecendo vantagens como rapidez, redução de custos e menor impacto ambiental. Este estudo contribui para o manejo sustentável da espécie e para a melhoria da nutrição animal no semiárido nordestino, além de abrir caminho para futuras aplicações em outras forrageiras.

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

ABSTRACT

Poincianella pyramidalis (Catingueira), an endemic species of the Caatinga biome, is widely used as forage for goats and sheep, especially during drought periods, due to its resistance to adverse climatic conditions. This undergraduate thesis aimed to evaluate the nutritional quality of *Poincianella pyramidalis* (catingueira) using portable near-infrared (NIR) spectroscopy combined with multivariate chemometric methods. To this end, monthly leaf samples of catingueira were collected over a 12-month period in the region of São João do Cariri, Paraíba. The samples were subjected to conventional bromatological analyses to determine parameters such as dry matter (DM), ash (ASH), ether extract (EE), crude protein (CP), total carbohydrates (TC), and neutral detergent fiber (NDF). Simultaneously, the NIR spectra of the samples were recorded using a portable spectrometer in the range of 900 to 1700 nm. Spectral data were processed with preprocessing techniques such as derivatives, smoothing, standard normal variate (SNV), and multiplicative scatter correction (MSC), and analyzed using partial least squares (PLS) regression models and variable selection algorithms (iSPA-PLS). The results showed that the developed models exhibited high predictive capacity, with coefficients of determination (R^2) close to 1 and low errors (RMSEP and RMSEC), validating the effectiveness of NIR spectroscopy as a fast and non-destructive alternative to conventional analyses. The PLS models proved robust, with satisfactory performance for all analyzed parameters, especially for DM, CP, and EE. It was concluded that the combination of portable NIR spectroscopy with chemometric methods is a promising tool for evaluating the nutritional quality of catingueira, offering advantages such as speed, cost reduction, and lower environmental impact. This study contributes to the sustainable management of the species and the improvement of animal nutrition in the northeastern semi-arid region, as well as paving the way for future applications in other forage species.

Keywords: nir spectroscopy; chemometrics; animal nutrition; *Poincianella pyramidalis*; catingueira.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
2.1	<i>Catingueira</i>	11
2.1.1	<i>Métodos Convencionais para Análise de Parâmetros Bromatológicos</i>	12
2.2	<i>Espectrometria NIR</i>	15
2.3	<i>Quimiometria</i>	16
2.3.1	<i>Calibração Multivariada</i>	17
2.3.2	<i>Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)</i>	18
3	METODOLOGIA	20
3.1	<i>Registro dos espectros NIR</i>	21
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	23
5	CONCLUSÃO	30
6	SUGESTÕES E PESPPECTIVAS DO ESTUDO	31
	REFERÊNCIAS	32

1 INTRODUÇÃO

A catingueira, *P. pyramidalis*, é uma espécie endêmica do bioma Caatinga, suas folhas maduras são utilizadas como forrageira, fazendo parte da dieta de caprinos, ovinos e bovinos, principalmente no período de estiagem. Já quando jovens, apresentam odor desagradável, sendo desprezadas pelos animais (Pereira-Filho *et al.*, 2018). Esta espécie possui ampla distribuição geográfica no Nordeste brasileiro, onde é encontrada em diversos ambientes (Maia, 2012; Carvalho, 2014). Adapta-se muito bem aos diferentes tipos de solos, incluindo os mais pobres, presente em alta densidade em diferentes locais de Caatinga (Maia, 2012). Apresenta resistência aos déficits hídricos e salino (Souza; Madari; Guimarães, 2012).

A análise de parâmetros bromatológicos em forragens é fundamental para assegurar a qualidade nutricional e a saúde dos animais. Esses estudos fornecem dados sobre a composição química dos alimentos, como teores de proteínas, lipídios, fibras, vitaminas e minerais, sendo essenciais para a formulação de dietas balanceadas que atendam às exigências nutricionais de diferentes espécies (Virginio Júnior, 2023). Além disso, permitem o monitoramento contínuo da qualidade das forragens, possibilitando ajustes no manejo e na alimentação para garantir a oferta de alimentos adequados.

Entre os anos de 1860 e 1864 houve o surgimento de um método de análise bromatológica: a metodologia de Weende. Desde então, ela é bastante usada na determinação de matéria seca, matéria mineral e extrato etéreo. Ademais, se o parâmetro de interesse for a fibra de detergente neutro é comum usar o método de Van Soest na sua determinação, esse método utiliza reagentes conhecidos como detergentes neutros para fracionar os nutrientes presentes nos tecidos vegetais. O método do digestor de Kjeldahl auxiliou na determinação do nitrogênio contido na matéria orgânica, incluindo o nitrogênio proteico propriamente dito e outros compostos nitrogenados não proteicos, neste caso, o resultado foi dado como Proteína Bruta (Beraldo; Araújo, 2012). Apesar de bem estabelecidos, os métodos convencionais, apresentam desafios, como a necessidade de longos processos laboratoriais, o uso de reagentes químicos potencialmente prejudiciais e a destruição das amostras analisadas.

É nesse contexto que a espectroscopia de reflectância no infravermelho próximo (NIRS) se destaca em relação às análises convencionais já conhecidas, que tendem a ser demoradas, com gasto de reagentes químicos, além de uma série de questões financeiras envolvidas, e com o agravante de prejudicar a saúde do ser humano e poluir o meio ambiente (Gonçalves *et al.*, 2018). A combinação de técnicas espectroscópicas e métodos quimiométricos tem sido usada em diversas áreas incluindo a área agrícola e pecuária. Com o avanço da tecnologia no decorrer dos anos é comum haver a busca por alternativas mais práticas em laboratório, a fim de ter uma maior agilidade nas análises.

Neste trabalho foram construídos modelos PLS para a determinação de 6 parâmetros bromatológicos (matéria seca, matéria mineral, extrato etéreo, proteína bruta, carboidratos totais, fibra em detergente neutro) da catingueira utilizando um espectrômetro portátil NIR e métodos de calibração multivariada.

Deste modo, o objetivo desse trabalho é desenvolver um método rápido, não destrutivo e alinhado com os princípios da química verde para a quantificação de parâmetros nutricionais em forragem animal a base de folhas de catingueira utilizando a espectroscopia NIR portátil e calibração multivariada.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 *Catingueira*

O semiárido do Nordeste do Brasil abriga uma ampla variedade de espécies vegetais distribuídas nos estratos herbáceo, arbustivo e arbóreo. Entre as espécies que ainda necessitam de mais pesquisas está a catingueira, *Poincianella pyramidalis*, planta endêmica da Caatinga e com diversas aplicações, incluindo uso madeireiro, medicinal, veterinário, na recuperação de áreas degradadas, como forragem para os caprinos e em processos industriais (Maia, 2004).

Em relação às suas características ecológicas, a catingueira-verdadeira é considerada uma espécie pioneira (Maia, 2012). É uma espécie que pode apresentar porte arbustivo ou arbóreo, com copa baixa e arredondada, sem a presença de espinhos. Suas folhas são compostas bipinadas, com textura coriácea, e a planta apresenta comportamento decíduo durante a estação seca. As primeiras folhas surgem com coloração rosada e, nessa fase, ainda não exalam o odor característico, que só se manifesta quando ficam verdes (Maia, 2012; Carvalho, 2014). Suas flores se organizam em racemos terminais e subterminais (Lorenzi, 2009), possuem um aroma levemente adocicado, pétalas amarelas e uma pétala central com manchas avermelhadas que funcionam como guias para o néctar (Maia-Silva *et al.*, 2012).

Além disso, é uma das primeiras espécies a rebrotar com o início das chuvas, após perder suas folhas durante a seca. Sua floração ocorre na transição entre a estação seca e o início da estação chuvosa, estendendo-se ao período chuvoso, sendo seguida pela frutificação (Maia, 2012).

A catingueira-verdadeira possui múltiplas aplicações, suas folhas representam uma importante fonte de forragem para a alimentação animal. Além disso, é amplamente empregada na restauração florestal devido à sua alta adaptabilidade a diferentes tipos de solo e condições ambientais, boa produção de sementes, germinação rápida e resistência ao transplante (Maia, 2012; Carvalho, 2014).

2.1.1 Métodos Convencionais para Análise de Parâmetros Bromatológicos

O estudo dos alimentos é uma área importante no ensino das ciências relacionadas à alimentação, pois oferece instrumentos e fundamentos essenciais para diversas etapas do controle de qualidade, do processamento e da conservação de alimentos processados. Além disso, representa um dos aspectos mais relevantes a serem considerados na nutrição animal (Detmann *et al.*, 2012).

A pecuária atual busca fontes alimentares suplementares mais econômicas para compor dietas animais. Para isso, é essencial conhecer a composição química e o valor nutricional dos alimentos (Azevedo *et al.*, 2006). Subprodutos ainda não utilizados devem ser analisados previamente, já que nutrientes como proteínas, fibras, carboidratos e minerais são fundamentais, principalmente para ruminantes. Avaliar esses componentes é decisivo para garantir que o alimento seja seguro e eficaz na alimentação animal (Barcelos *et al.*, 2002)

Entender o valor nutricional de um alimento utilizado na alimentação animal é fundamental, pois além de ser a maneira mais eficaz de determinar a quantidade de nutrientes presentes, também é essencial para implementar práticas de manejo que visem melhorar a produtividade dos animais (Genro; Orqis, 2008). Conforme (Gonçalves *et al.*, 2009) e (Salman *et al.*, 2010), os alimentos geralmente são classificados com base nos níveis de fibra bruta (FB) e proteína bruta (PB) em três categorias: volumosos, concentrados proteicos e concentrados energéticos. Alimentos com mais de 18% de FB são chamados de volumosos, como pastagens, forragens e silagens. Já os concentrados têm menos de 18% de FB e se dividem em: concentrados proteicos, com mais de 20% de PB, como farelo de soja, algodão, girassol etc., e concentrados energéticos, com menos de 20% de PB, como milho e sorgo.

Fontaneli *et al.*, (2012) definem o valor nutritivo como a composição química dos nutrientes presentes nos alimentos e a digestibilidade desses nutrientes, sendo um aspecto crucial da qualidade alimentar. Por outro lado, a qualidade do alimento pode ser medida pela produção por animal, quando tanto a disponibilidade do alimento quanto o potencial do animal não são limitantes. Assim, os resultados de uma análise química são essenciais para ajustar

adequadamente a dieta dos animais, promovendo melhores resultados na produção de leite e carne (Serafim *et al.*, 2017).

Para a determinação da composição química dos alimentos, são mais utilizados basicamente dois métodos de análise, que são a análise centesimal ou proximal de Weende (1864) e o método de Van Soest (1964). O método de Weende foi criado por Stohmann e Henneberg entre 1860 e 1864, na estação experimental de Weende, na Alemanha. Esse método é amplamente utilizado para determinar a composição química aproximada dos alimentos, separando-os em frações que contêm substâncias com características semelhantes. Por meio da análise aproximativa de Weende, é possível identificar seis principais componentes químicos dos alimentos forrageiros: A matéria seca, matéria mineral, proteína bruta, extrato etéreo, fibra bruta e extrato não nitrogenado são os componentes analisados. As técnicas utilizadas são semelhantes às originais, com exceção da determinação do nitrogênio, que é realizada pelo método Kjeldahl (AOAC, 1990).

Proposto em 1964 por Van Soest, esse método considera que os constituintes das plantas podem ser divididos em conteúdo celular e parede celular. O principal diferencial em relação ao método de Weende é com relação à análise de fibra (Van Soest, 1994), a qual é subdividida em: Fibra em detergente neutro e Fibra em detergente ácido.

A determinação do nitrogênio total, proposta por Johann Kjeldahl em 1883, continua amplamente utilizada devido à sua confiabilidade, com procedimentos bem estabelecidos, e ao longo do tempo sofreu poucas modificações (Vogel, 1992). Essa técnica permite a determinação indireta de proteínas em diversas amostras biológicas, assim como a medição do nitrogênio em plantas para avaliar o estado nutricional (Yasuhara e Nokihara, 2001; Nogueira e Souza, 2005). O método desenvolve-se em três etapas distintas: digestão da amostra por ação de ácido sulfúrico concentrado (utilizando catalisador para acelerar esta etapa) destilação do nitrogênio e titulação ácida (Associação de Químicos Analíticos Oficiais, 1984).

A determinação da composição dos alimentos envolve metodologias específicas que permitem quantificar os principais nutrientes com base na matéria seca (MS). O teor de MS é obtido pela eliminação da água presente no

alimento, realizada por evaporação em estufa de ar forçado a 105 °C (Prates, 2007). Esse valor é essencial, pois o consumo alimentar dos animais é expresso em quilogramas de MS por animal por dia (Rodrigues, 2010), e todas as análises nutricionais são feitas com base nessa matéria (Salman *et al.*, 2010).

A matéria mineral (MM), também chamada de cinzas, representa o resíduo obtido após aquecimento da amostra em mufla a 550–600 °C, sendo usada para estimar os minerais presentes (Fick, 1976). A matéria orgânica (MO), por sua vez, é determinada por diferença entre a MS e a MM (Prates, 2007).

A análise de extrato etéreo (EE) é feita com uso de um aparelho do tipo Soxhlet, que utiliza solventes orgânicos para extrair a fração gordurosa do alimento. Após a evaporação do solvente, o resíduo é pesado e chamado de extrato etéreo ou gordura bruta (AOAC, 1990). O EE é importante por representar uma fonte energética, de ácidos graxos essenciais e de vitaminas lipossolúveis.

A proteína bruta (PB) é estimada indiretamente pela concentração de nitrogênio (N) utilizando o método de Kjeldahl (1883), considerando-se um teor médio de 16% de N nas proteínas e aplicando-se o fator de conversão 6,25 (Silva; Queiroz, 2002). A PB inclui diferentes compostos nitrogenados com estruturas semelhantes, mas funções diversas.

Os carboidratos totais (CT) são estimados por diferença, a partir da equação proposta por Sniffen *et al.*, (1992):

$$CT = 100 - (PB\% + EE\% + MM\%).$$

Eles podem ser fracionados em açúcares solúveis de rápida degradação ruminal, amido e pectina, componentes da fibra potencialmente degradável com taxa de degradação mais lenta e uma fração de indigestibilidade (Sniffen *et al.*, 1992).

A fibra em detergente neutro (FDN) é determinada por meio de uma solução que remove o conteúdo celular (proteínas, carboidratos solúveis e gorduras), restando celulose, hemicelulose e lignina - componentes de lenta ou difícil digestão. A FDN está diretamente relacionada ao consumo de matéria seca e influencia a digestibilidade dos alimentos.

2.2 *Espectrometria NIR*

A descoberta da radiação no infravermelho aconteceu em 1800, por William Herschel, um astrônomo britânico. Durante seus experimentos com a luz solar, ele usou um prisma para decompor a luz em várias cores, criando um espectro. Com termômetros de bulbo escurecido, ele mediu a temperatura de cada faixa colorida da luz. O que chamou atenção foi que, ao posicionar um dos termômetros logo além da região vermelha do espectro, onde não havia luz visível, essa temperatura registrada foi ainda maior do que nas cores visíveis (Oliveira; Silva, 2014). Esse resultado levou Herschel a concluir que havia um tipo de radiação invisível, capaz de aquecer objetos, mesmo sem ser percebida pelos olhos humanos. Ele chamou esse fenômeno de “raios caloríficos”, o que hoje conhecemos como radiação infravermelha. Apesar de algumas limitações experimentais e críticas na época, a descoberta foi um passo decisivo para a compreensão do espectro eletromagnético. Mostrou que existiam formas de radiação além da luz visível, mudando a forma como os cientistas entendiam a energia e a propagação do calor (Oliveira; Silva, 2014; Brandão, 2012).

A espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) surge como uma opção aos métodos analíticos mais convencionais na hora de estimar, com bastante precisão, os níveis de nutrientes presentes em tecidos de origem vegetal (Van Maarschalkerweerd; Husted, 2015). Os espectros NIR apresentam bandas de moléculas ou átomos de C, O, N ou S ligados ao átomo de hidrogênio. Esta técnica tem uma vasta aplicação nos estudos de compostos orgânicos que estão presentes em suas estruturas molecular ligações CH, N-H, O-H, S-H (Pasquini; 2018). Apesar de conseguir um sinal proveniente desses compostos, as informações adquiridas com o NIR apresentam bandas amplamente sobrepostas, de difícil interpretação e atribuição, fazendo com que o seu uso dependa de recursos matemáticos e/ou estatísticos para contornar esses problemas e obter dados confiáveis para realizar as análises (Vilar, 2018).

2.3 Quimiometria

A Quimiometria tem se mostrado uma solução para diversos desafios científicos (Ferreira, 2015) e pode ser dividida em quatro grandes áreas: o processamento dos sinais analíticos, otimização para planejamento de experimentos, a classificação de dados a partir do reconhecimento de padrões e a calibração multivariada (Mazur, 2012).

O que a torna essencial em para o tratamento de dados químicos, e em especial os obtidos na região do infravermelho próximo, é a capacidade de possibilitar a classificação de amostras com base em suas propriedades, e a possibilidade de quantificação de variáveis e a previsão de resultados (Williams, 2015). Foi impulsionada pelo avanço dos instrumentos como espectrômetros e cromatógrafos, pois a grande quantidade de dados gerada por esses instrumentos, necessitava de métodos que auxiliassem a processá-los e utilizá-los analiticamente (Sousa, 2016), o que deu origem a análise multivariada. As análises multivariadas possuem como princípio fundamental a utilização de muitas variáveis, como por exemplo valores de absorbância, para muitos comprimentos de onda, possibilitando a quantificação de outra variável de interesse (Sena *et al.*, 2000).

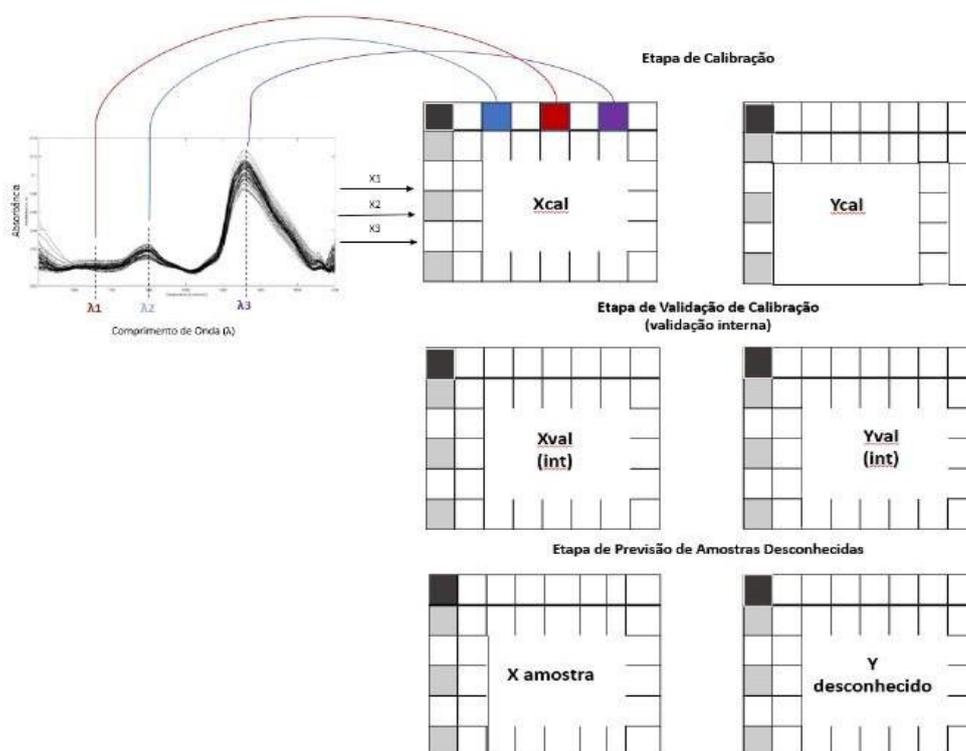
Os dados obtidos por espectroscopia de infravermelho geralmente são compostos por uma grande quantidade de dados que podem tornar difícil o entendimento das informações geradas e também o seu uso analítico. Por isso, ferramentas matemáticas e estatísticas precisam ser utilizadas para extrair a informação de interesse. A Quimiometria pode então ser definida como uma técnica que utiliza ferramentas estatísticas e matemáticas para auxiliar no tratamento de dados de base química (Dias, 2011). Essa ciência tem sido aplicada na criação de modelos para prever propriedades químicas, como a Regressão em Componentes Principais (PCR) e a Regressão por Quadrados Mínimos Parciais (PLS), que permitem a criação de modelos quantitativos (Mazur, 2012). Nesses modelos, os valores obtidos da propriedade de interesse, obtidas por metodologias padrão, são representadas no formato vetor (y), enquanto a resposta instrumental é fornecida como uma matriz (X) (Valderrama, 2007).

2.3.1 Calibração Multivariada

Na maioria dos casos, as análises químicas têm como objetivo identificar e/ou quantificar certos componentes presentes em amostras. No entanto, os equipamentos de laboratório não são capazes de fornecer essas respostas de forma direta. Por isso, é necessário desenvolver um método empírico que permita extrair essas informações a partir dos dados obtidos pelos instrumentos. Nesse contexto, a calibração multivariada se apresenta como uma ferramenta fundamental, ao utilizar um algoritmo matemático que estabelece uma relação matemática entre as análises realizadas pelo método de referência e as medições fornecidas pelos instrumentos (Valderrama, 2005; Barros Neto; Pimentel; Araújo, 2002).

A calibração multivariada envolve, basicamente, duas fases principais: a construção do modelo e a sua validação (Naes *et al.*, 2002). Durante a etapa de calibração, são estabelecidas relações entre os sinais analíticos e as concentrações dos analitos, que são estimadas com base na análise de padrões representativos do conjunto de amostras em estudo (Borges Neto, 2005). De modo geral, o sucesso no desenvolvimento do modelo de calibração depende diretamente da correlação entre esses dois conjuntos de dados, especialmente quando as propriedades envolvidas estão inter-relacionadas (Silva, 2020). Os sinais analíticos são organizados em forma de matriz, como mostra a figura 1.

Figura 1 – Representação de uma Calibração em Forma de Matriz



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

Existem muitos algoritmos para aplicações de análises multivariadas na quantificação de propriedades de interesse, entre eles se destacam regressão em mínimos quadrados parciais, PLS (Silva, 2020).

2.3.2 Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS)

O método de mínimos quadrados parciais foi desenvolvido por Herman Wold na década de 1960 para aplicações em econometria e posteriormente difundiu-se, com o apoio de Swante Wold (Geladi; Kowalski, 1986), tornou-se a técnica de calibração mais usada em análises multivariadas, especialmente em espectroscopia no infravermelho (Ferreira, 2015). Destaca-se por sua eficácia mesmo quando o equipamento não é específico para a substância-alvo, ao permitir a extração de informações por meio da relação entre os dados espectrais e a propriedade analisada. O método se baseia na vantagem do uso multicanal, que surge quando são empregadas duas ou mais variáveis que apresentam correlação entre si. Dessa forma, mesmo que essas variáveis sejam afetadas por interferências como ruídos, ainda é possível extrair a informação desejada devido à redundância de dados entre

elas. Isso torna o método mais robusto, pois as distorções provocadas por interferentes são reduzidas graças à presença de informações repetidas, já que todas as variáveis são consideradas no cálculo do modelo (Naes *et al.*, 2002).

Outra etapa do método envolve o cálculo realizado que resume a grande quantidade de informações, possibilitando que a matriz original seja representada por um número reduzido de variáveis latentes. Esse processo atua como um filtro, eliminando parte das interferências, como os ruídos provenientes dos instrumentos (Ferreira, 2015).

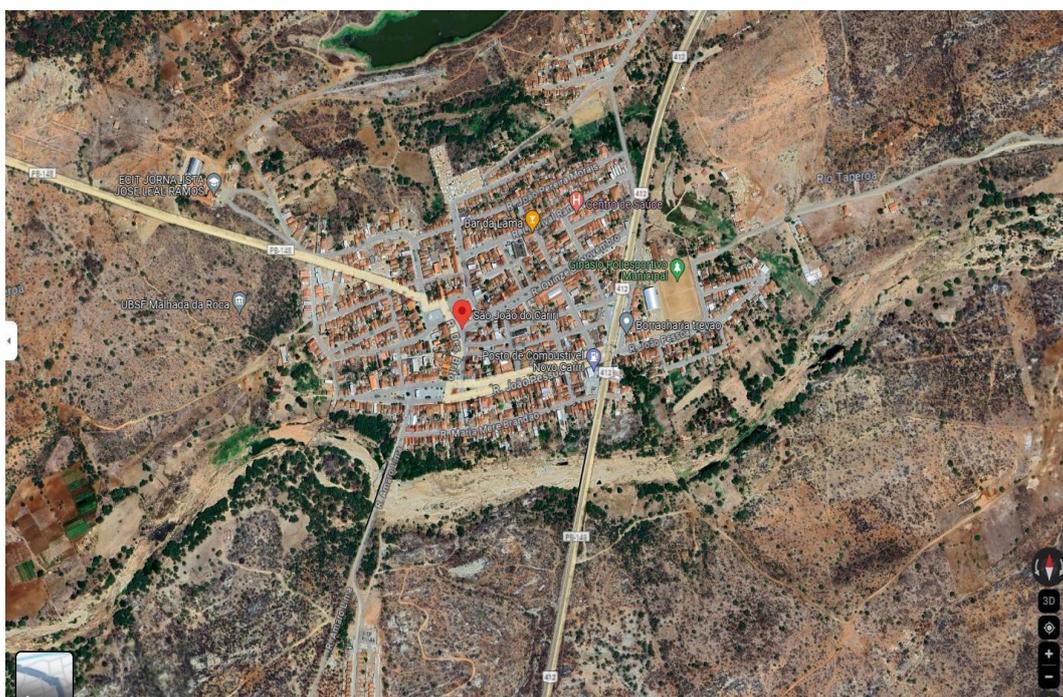
No processamento das matrizes, as variações espectrais e os valores de referência são convertidos em duas matrizes, gerando vetores chamados variáveis latentes (VLs). Essas VLs são usadas para prever concentrações, já que os espectros NIR contêm todas as informações relevantes. A decomposição em fatores permite comprimir essas informações, facilitando sua aplicação na calibração (Almeida, 2009). O modelo de calibração PLS realiza a decomposição simultânea das matrizes X (espectros) e Y (concentrações), buscando a maior covariância entre as variáveis latentes e suas matrizes. Existem duas variantes: PLS1, que relaciona uma propriedade por vez aos componentes, e PLS2, que permite correlacionar múltiplas propriedades ao mesmo tempo (Ferreira, 2015).

A utilização da metodologia PLS possibilita ainda, o emprego de diferentes algoritmos como o SVD (Singular Value Decomposition), e o NIPALS (Nonlinear Iterative Partial Squares), que geram modelos mais robustos e precisos, mas demandam algum tipo de pré-processamento para o melhoramento dos resultados (Silva, 2020).

3 METODOLOGIA

A coleta das folhas da espécie *P. pyramidalis*, foi realizada mensalmente ao longo de 12 meses de maio/2023 a abril/2024 na fazenda experimental do Centro de Ciências Agrárias (CCA/UFPB), 07°23'27" de latitude sul e 36°31'58" de longitude oeste, localizada em São João do Cariri – PB.

Figura 2 - Localização de São José do Cariri - PB



Fonte: Imagem extraída do Software Google Earth® em 26 jun. 2024.

As folhas de catingueira coletadas foram armazenadas no freezer ($\pm 20^{\circ}\text{C}$) do Laboratório de Química Orgânica e Produtos Naturais (LQOP-UFPB-Campus II) por um período de 12 meses. Uma exsicata foi identificada e autenticada no Herbário Jaime Coelho de Moraes (CCA/UFPB). As amostras coletadas mensalmente passaram por análises bromatológicas convencionais no Departamento de Zootecnia da UFPB (Campus II - Areia - PB), no Laboratório de Análises de Alimentos e Nutrição Animal (Soares e Oliveira, 2002; Rodrigues, 2010), além de terem seus espectros NIR registrados.

Para cada mês foram separadas porções de folhas, das quais foram registrados os espectros NIR e as análises de parâmetros bromatológicos.

Os parâmetros bromatológicos analisados foram avaliados em relação as 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). A análise proximal, também chamada de método de Weende, é amplamente utilizada em laboratórios para quantificar diferentes componentes dos alimentos, como matéria seca (MS), matéria mineral ou cinzas (MM), gordura ou extrato etéreo (EE), fibra bruta (FB) e extrato não nitrogenado (ENN). A determinação da proteína bruta (PB) é realizada pelo método Kjeldahl, adotado pela AOAC em 1970. Esse método envolve três etapas: digestão, destilação e titulação (Rodrigues, 2010). Por outro lado, o método de Van Soest (1964) permite separar as frações fibrosas das forrageiras por meio do uso de reagentes específicos chamados detergentes.

3.1 *Registro dos espectros NIR*

Para o registro dos espectros NIR, as amostras foram submetidas à secagem em estufa com circulação de ar a aproximadamente 40°C por 6 horas. Em seguida, as folhas secas foram trituradas em um moinho de facas (SL 30 SOLAB) e peneiradas com granulometria de 200 mesh. O pó vegetal resultante foi armazenado em sacos plásticos devidamente identificados. Antes do registro dos espectros NIR, as amostras foram mantidas em dessecador por 24 horas para ambientação.

A obtenção dos espectros NIR foi realizada em 5 porções do pó vegetal de cada amostra mensal, utilizando um espectrômetro NIR portátil para amostras sólidas da InnoSpectra Corporation no qual trabalha com uma faixa espectral de 900 a 1700nm (Figura 3). Totalizando 60 amostras.

Figura 3 - NIR portátil



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

Construção dos Modelos

O software MATLAB™ foi utilizado para a seleção das amostras de calibração e predição, pré-processamento dos dados e construção dos modelos de calibração multivariada PLS e isPLS.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Como mencionado, as amostras coletadas mensalmente passaram por análises bromatológicas convencionais. Os valores máximos e mínimos para cada um dos parâmetros estudados estão listados, bem como a média e desvio padrão, na Tabela 1. De acordo com esses valores, o parâmetro MS é o que possui a maior faixa de variação com uma amplitude de aproximadamente 50. Os demais parâmetros, por sua vez, apresentam uma faixa de variação mais restrita, cuja amplitude é de difícil manipulação devido à natureza da amostra, uma vez que se trata de um produto de origem natural.

Tabela 1 - Valores descritivos para os parâmetros bromatológicos estudados.

	Matéria Seca (%)	Matéria Mineral (%)	Extrato Etéreo (%)	Proteína Bruta (%)	Carboidratos Totais (%)	Fibra em Detergente Neutro (%)
Valor Mínimo	42,23	2,21	4,64	11,56	66,56	31,80
Valor Máximo	91,89	4,71	11,07	20,31	79,80	49,06
Média	77,68	3,60	7,04	15,32	74,04	40,37
Desvio Padrão	19,62	0,68	1,98	3,10	4,18	5,68

Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

Na Tabela 2, estão apresentados os valores das médias e dos desvios padrão para cada mês de coleta.

Confrontando-se as tabelas 1 e 2, pode-se observar que a variação intínseca mensal (Tabela 2), ou seja, entra as amostras de um mesmo mês, é pequena. Isto pode ser justificado pela proximidade entre as plantas coletadas, e conseqüentemente a baixa variabilidade de fatores que possam impactar estes parâmetros como solo e clima. Diferentemente a variação entre meses é mais proeminente para parâmetros como MS, indicando a influência da sazonalidade para este parâmetro.

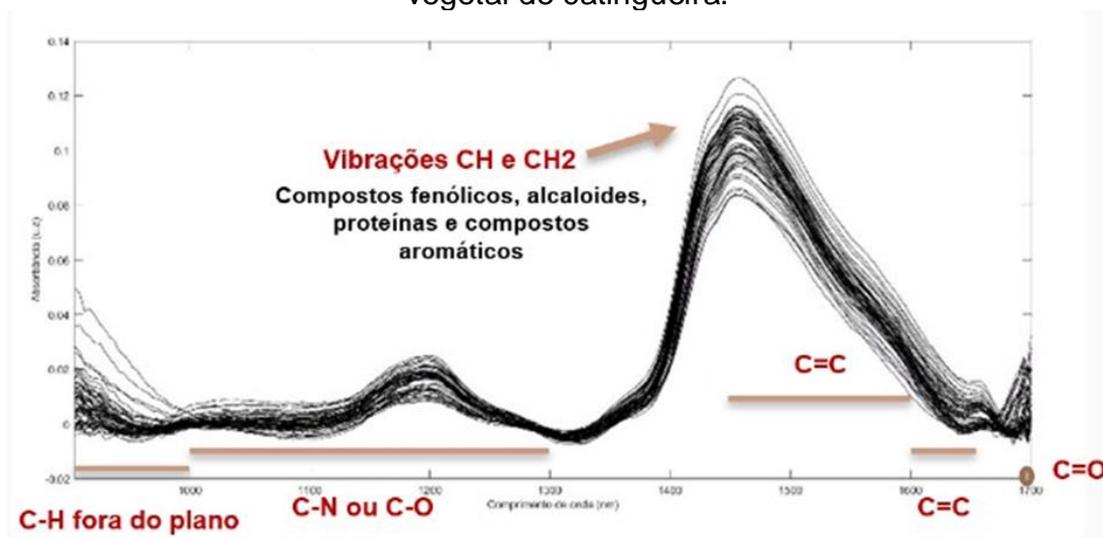
Tabela 2 – Variações Intínseca Mensal

Mês	Matéria Seca (%)		Matéria Mineral (%)		Proteína Bruta (%)		Extrato Etéreo (%)		Fibra em Detergente Neutro (%)		Carboidratos Totais (%)	
	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão	Média	Desvio Padrão
Maio	91,63	0,06	4,30	0,18	14,26	0,52	11,07	0,16	37,52	1,33	70,37	0,49
Junho	90,47	0,16	3,93	0,11	15,23	0,12	6,29	0,46	41,04	1,00	74,54	0,47
Julho	90,83	0,01	4,71	0,23	12,78	0,23	9,47	0,60	42,85	0,18	73,02	0,60
Agosto	91,21	0,01	3,09	0,02	11,70	0,25	6,81	0,48	39,24	2,12	78,39	0,71
Setembro	91,47	0,01	2,86	0,11	12,25	0,25	5,84	0,04	35,74	0,55	79,05	0,41
Outubro	91,89	0,04	2,21	0,08	11,56	0,12	6,42	0,11	37,26	1,23	79,80	0,31
Novembro	91,47	0,12	2,92	0,11	13,05	0,06	4,98	0,37	32,61	0,19	79,04	0,42
Dezembro	90,52	0,12	3,71	0,10	19,75	0,38	4,71	0,37	31,80	0,91	71,83	0,08
Jan	48,86	0,23	4,24	0,92	16,20	0,42	4,64	0,23	49,06	0,58	74,92	0,27
Fev	42,23	0,02	3,68	0,11	17,89	0,43	7,02	0,56	48,34	0,39	71,40	0,89
Mar	59,73	0,02	3,78	0,23	18,85	1,80	7,84	0,16	48,15	0,91	69,52	1,46
Abr	51,77	0,03	3,75	1,43	20,31	0,15	9,37	0,39	40,75	0,43	66,56	1,66

Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

Além de serem analisadas pelos métodos convencionais as amostras tiveram seus espectros NIR registrados (Figura 4). De acordo com a avaliação dos espectros NIR é possível observar uma banda larga proeminente em torno de 1500 nm relativa principalmente à presença de água e também de vibrações OH, CH e CH₂ presentes em compostos fenólicos, proteínas e compostos aromáticos característicos das amostras. Os principais grupos funcionais que podem estar presentes são cetonas/aldeídos (banda forte próxima a 1700 nm relacionadas sobretudo de C=O) que podem ser atribuídos a glicose e frutose, aromáticos (1600-1450 nm, C=C aromático, relacionados a taninos e flavonoides), alcenos conjugados (C=C de ácidos graxos em 1650–1600 nm), aminas e álcoois (C–N ou C–O de carboidratos e aminoácidos entre 1300–1000 nm, compostos aromáticos substituídos (C–H fora do plano) — banda entre 900–1000 nm (Workman; Weyer, 2008).

Figura 4 - Espectros brutos na região o infravermelho próximo para o pó vegetal de catingueira.



Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

Antes da construção dos modelos, diversos pré-processamentos foram avaliados para remoção de características espectrais indesejadas, como ruídos, deslocamento de linha de base e espalhamento de sinal. Aqueles que deram origem aos modelos com melhor capacidade preditiva foram a 1ª derivada com polinômio Savitzky-Golay com janela de 5 pontos, variação normal padrão (SNV) combinada com suavização Savitzky-Golay com janela de 5 pontos e

polinômio de 1ª ordem ou correção multiplicativa de sinal (SNV) combinada com suavização Savitzky-Golay com janela de 5 pontos e polinômio de 1 ordem. Após o pré-processamento o conjunto de dados foi dividido em conjunto de calibração (40 espectros) e de predição (20 espectros) utilizando o algoritmo SPXy. O modelo de calibração PLS foi construído e validado por validação cruzada completa.

Também foi testado o desenvolvimento de modelos PLS com os intervalos selecionadas pelo algoritmo das projeções sucessivas (iSPA-PLS). A capacidade preditiva dos modelos foi avaliada com as amostras do conjunto de predição (20 amostras) e as métricas que atestam a qualidade dos modelos construídos estão listadas na tabela 3.

Tabela 3 - Figuras de Mérito

	Matéria Seca	Matéria Mineral	Proteína Bruta	Extrato Etéreo	Fibra em Detergente Neutro	Carboidratos Totais
Pre-processamento	SNV+Suavpol1j5	SNV+Suavpol1j5	MSC+Suavpol1j5	Sgderpol1j5	MSC+Suavpol1j5	Sgderpol1j5
Modelo	PLS	iSPA-PLS	PLS	PLS	iSPA-PLS	PLS
No. de Amostras Anômalas	Sim (7)	N	N	N	N	Sim (11)
N. FATORES	13	8	11	11	13	5
RMSEC (%)	6.24	0.20	1.30	0.29	1.66	1.39
R ²	0.93	0.93	0.87	0.98	0.94	0.90
RMSECV (%)	10.80	0.25	2.16	0.83	2.92	1.96
RMSEP (%)	6.41	0.15	1.30	0.63	2.90	2.87
REP (%)	8.34	4.23	8.42	9.38	7.22	3.87
R ²	0.95	0.97	0.84	0.93	0.90	0.88
OUT	5	1	1	0	1	0
BIAS	N	N	N	N	N	N

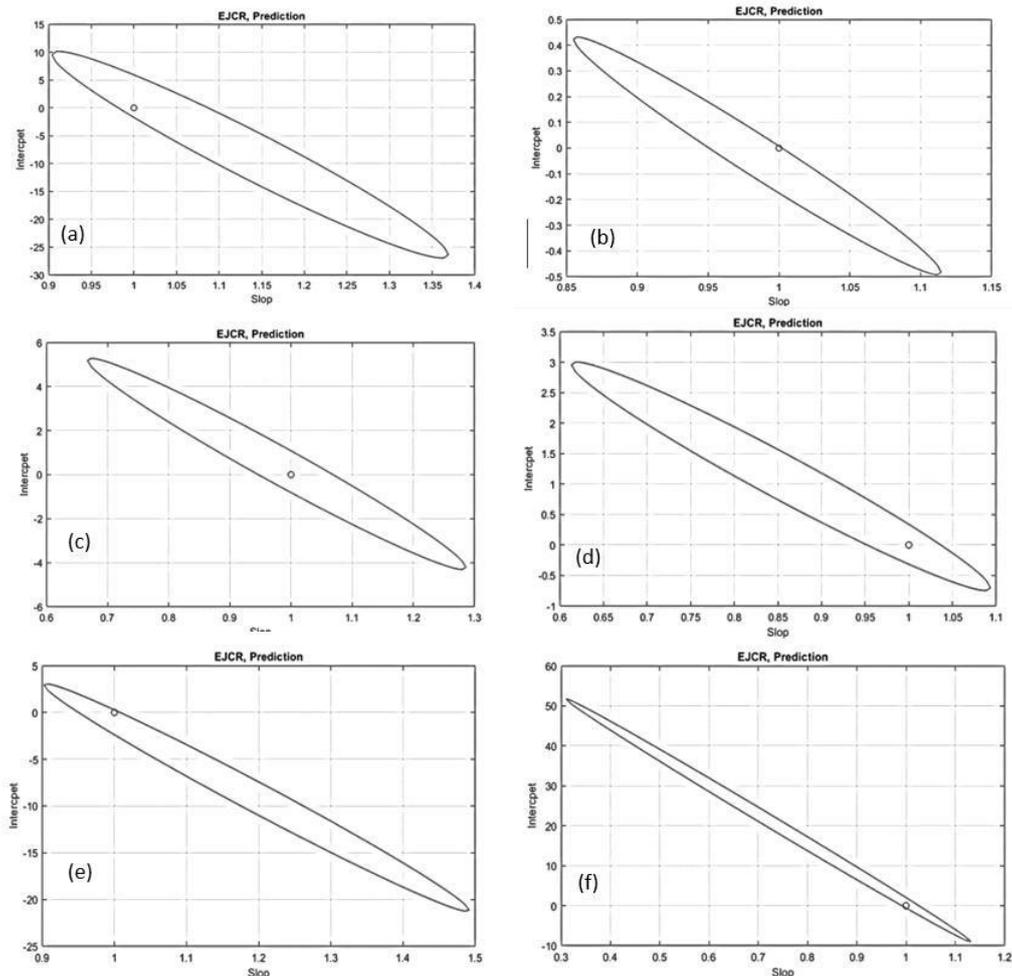
Fonte: Elaborada pelo autor, 2025

SNV+Suavpol1j5: Variação Normal Padrão com Suavização utilizando polinômio savitzky-golay de 1ª ordem e janela de 5 pontos; MSC+Suavpol1j5: Correção do Espalhamento Multiplicativo com Suavização utilizando polinômio savitzky-golay de 1ª ordem e janela de 5 pontos; Sgderpol1j5: Suavização utilizando polinômio savitzky-golay de 1ª ordem e janela de 5 pontos; OUT: Outlier; RMSEC: Erro na Etapa de Calibração; RMSECV: Erro de Validação Cruzada; RMSEP: Erro na Etapa de Predição; REP: Precisão e Exatidão dos Modelos; R2: Correlação entre os Dados Espectrais e os Dados Bromatológicos; BIAS: Tendência; N: Ausência.

De acordo com as métricas obtidas pode-se afirmar que de forma geral os modelos desenvolvidos para a predição dos parâmetros bromatológicos estudados apresentaram capacidade preditiva adequada com valores de R^2 próximos a 1, RMSEP baixos e REP inferiores a 10%. Demonstrando uma alta correlação entre os espectros NIR e o valores nutricionais quantificados.

A qualidade das respostas preditas pelos modelos é ilustrada pelas curvas EJCRC mostradas na figura 5, que atestam a ausência de tendências devido ao ponto ideal se encontrar dentro da elipse de confiança. Outrossim, a largura das elipses aponta a precisão das medidas. O número de fatores um pouco acima do que é preconizado convencionalmente pode estar relacionado à origem biológica da amostra.

Figura 5 - Elipse de confiança (EJCRC) para (a) Matéria Seca, (b) Matéria Mineral, (c) Proteína Bruta, (d) Extrato Etéreo, (e) Fibra de Detergente Neutro e (f) Carboidratos Totais.



Como pode ser observado nas elipses acima, o ponto ideal está contido dentro da elipse de cada parâmetro bromatológico analisado, então não há tendências. Em relação a largura, tivemos uma maior precisão com a Fibra de Detergente Neutro e nos Carboidratos Totais, já que as elipses estão mais estreitas. Quanto mais estreita a elipse for, mais precisas são as medidas.

Em comparação com os métodos químicos tradicionais, o NIRS apresenta diversas vantagens, como a redução do tempo de análise, menor custo por amostra, ausência de resíduos químicos e a possibilidade de analisar um grande número de amostras em um curto período. Essas características tornam essa tecnologia especialmente atraente para laboratórios de nutrição animal que precisam processar um grande volume de amostras de forragens. Por exemplo, (Berzaghi *et al.*, 2005) avaliaram a acurácia do NIRS na estimativa da composição química e digestibilidade *in vitro* da matéria seca (DIVMS) de gramíneas e leguminosas tropicais, obtendo coeficientes de determinação (R^2) superiores a 0,90 para PB, FDN e DIVMS. Resultados semelhantes foram encontrados por (Corson *et al.*, 1999) em forragens temperadas, com R^2 acima de 0,85 para PB, FDN e FDA. Além disso, o NIRS tem sido aplicado com sucesso na avaliação da qualidade de silagens. (Cozzolino *et al.*, 2006) utilizaram essa técnica para prever parâmetros fermentativos, como pH, ácido lático e ácido acético, em silagens de milho, obtendo R^2 entre 0,80 e 0,90. Essa capacidade de avaliar a qualidade da fermentação é crucial para garantir a estabilidade e o valor nutritivo das silagens fornecidas aos animais. Estudos recentes têm demonstrado a eficácia do NIRS na predição da composição química e valor nutritivo de forragens tropicais.

5 CONCLUSÃO

Diante dos resultados obtidos neste trabalho, é possível concluir que a espectroscopia NIR portátil, aliada à calibração multivariada representa um método rápido, não destrutivo e alinhado com os princípios da química verde para quantificação de parâmetros bromatológicos em forragem à base de folhas de *Poincianella pyramidalis*. Os modelos PLS e iSPA-PLS apresentaram boa capacidade preditiva para os parâmetros analisados (MS, MM, PB, EE, FDN e CT), com R^2 próximos de 1 e baixos erros (RMSEC, RESECV e RMSEP). O uso combinado de pré-processamentos, como derivadas, SNV e suavização, contribuiu para melhorar a robustez dos modelos, mesmo em amostras naturais com alta variabilidade. Assim, a técnica NIR portátil mostra-se viável e vantajosa para o monitoramento nutricional da forragem em condições de campo, com redução de custos, tempo de análise e impactos ambientais.

6 SUGESTÕES E PESPPECTIVAS DO ESTUDO

A partir dos resultados obtidos neste trabalho, surgem diversas possibilidades de continuidade e aprofundamento que podem contribuir ainda mais com a área, como:

- Uma delas é aplicar essa abordagem em outras espécies nativas da Caatinga, o que permitiria comparar diferentes perfis nutricionais e fortalecer estratégias de manejo sustentável da vegetação local. Além disso, a criação de um banco de dados regional, reunindo espectros e informações nutricionais, poderia facilitar bastante o uso da técnica em campo, especialmente por produtores e técnicos que atuam no semiárido.
- Avaliar como fatores ambientais, como clima e tipo de solo, influenciam o perfil nutricional e espectral da catingueira em diferentes regiões também pode trazer informações valiosas para o uso estratégico da espécie.
- Integrar a espectroscopia NIR com outras técnicas, como a espectroscopia Raman, para ampliar o tipo de informação obtida

REFERÊNCIAS

Association of Official Analytical Chemists (**AOAC**): Official Methods of Analysis. 15th ed. Arlington, Virginia: AOAC, 2v. 1990.

Associação de Químicos Analíticos Oficiais. (**AOAC**): Métodos Oficiais de Análise. 10ª ed. AOAC; Washington, DC, EUA: p. 154–170. 1970.

Associação de Químicos Analíticos Oficiais. (**AOAC**): Standard Official Methods of Analysis of the Association of Analytical Chemists. 14th Edition, S.W Williams, Washington DC, 121 p. 1984.

ALMEIDA, Filipa Margarida Neves. **Espectroscopia de infravermelho próximo com transformada de Fourier (FT-NIR) na caracterização de farinhas para alimentação pueril**. Dissertação em engenharia biológica – Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa. 2009.

AZEVEDO, Eduardo Bohrer de; NÖRNBERG, José Laerte; KESSLER, Julcemar Dias; BRÜNING, Gilmar; DAVID, Diego Bitencourt de; FALKENBERG, Jaline Rodrigues; CHIELLE, Zeferino Genésio. **Silagem da parte aérea de cultivares de mandioca**. Ciência Rural, Santa Maria, v.36, n.6, p.1902-1908, nov-dez, 2006.

BERALDO, Ângelo Antônio; ARAÚJO, Samanta Luiza de. **Análise Bromatológica dos Alimentos Consumidos pelo Rebanho Leiteiro do Planalto Norte Catarinense – REGIÃO DE CANOINHAS – SC**. Ágora: revista de divulgação científica, [S. l.], v. 16, n. 2esp., p. p. 302–317, 2012. DOI: 10.24302/agora.v16i2esp.119. Disponível em: <https://www.periodicos.unc.br/index.php/agora/article/view/119>. Acesso em: 14 mar. 2025.

BRANDÃO, Denise Sousa. **Aplicação da espectroscopia NIR, associada a técnicas de calibração multivariada, na determinação da composição química do solvente utilizado na produção de isopreno**, 2012.

BARROS NETO, Benício; PIMENTEL, Maria Fernanda; ARAÚJO, Mário César Ugulino; **Recomendações para Calibração em Química Analítica - Parte I. Fundamentos e Calibração com um Componente (Calibração Univariada)**, Quim. Nova, Vol. 25, No. 5, 856-865, 2002.

BORGES NETO, W.; MELLO, C.; POPPI, R. J. **Adulteração de óleo de oliva por espectroscopia raman e calibração multivariada**. In: 28ª REUNIÃO ANUAL DA SOCIEDADE BRASILEIRA DE QUÍMICA, Poços de Caldas - MG. 2005.

BARCELOS, Adauto Ferreira; PAIVA, Paulo César de Aguiar; PEREZ, Juan Ramón Olalquiaga; SANTOS, Vander Bruno dos; CARDOSO, Roberto Maciel. **PARÂMETROS BROMATOLÓGICOS DA CASCA E POLPA DESIDRATADA DE CAFÉ (Coffea arabica L.)**. Ciênc. agrotec., Lavras, v.26, n.4, p.780-790, jul./ago., 2002.

BERZAGHI, Paolo; SERVA, Lorenzo; PIOMBINO, Matteo; MIRISOLA, Massimo;

BENOZZO, Francesco. **Prediction performances of portable near infrared instruments for at farm forage analysis**. Italian Journal of Animal Science, v. 4, supl. 3, p. 145–147, 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.4081/ijas.2005.3s.145>. Acesso em: 17 jun. 2025

CARVALHO, P. E. R. **Espécies arbóreas brasileiras**, v. 5. Brasília: Embrapa Informação Tecnológica, 2014.

CORSON, D. C.; WAGHORN, G. C.; ULYATT, M. J.; LEE, J. **NIRS: Forage analysis and livestock feeding**. Proceedings of the New Zealand Grassland Association, 61, 127–132, 1999.

COZZOLINO, Daniel; PARKER, Mango; DAMBERGS, Robert G.; HERDERICH, Markus; GISHEN, Mark. **Chemometrics and visible-near infrared spectroscopic monitoring of red wine fermentation in a pilot scale**. Biotechnology and Bioengineering, v. 95, n. 6, p. 1101–1107, 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/bit.21067>. Acesso em: 17 jun. 2025

DETMANN, Edenio; SOUZA, M.A.; VALADARES FILHO, S.C.; QUEIROZ, A.C.; BERCHIELLI, T.T.; SALIBA, E.O.S.; CABRAL, L.S.; PINA, D.S.; LADEIRA, M.M.; AZEVEDO, JAG. **Métodos para análise de alimentos**. Suprema, Visconde do Rio Branco, MG, 2012.

DIAS, Yuri Guimarães. **Espectroscopia NIR e calibração multivariada aplicadas ao controle de qualidade de gases combustíveis naturais e derivados do petróleo**. Dissertação (Mestrado em química) – Instituto de química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2011.

FICK, K. R.; MILLER, S. M.; FUNK, J. D.; McDOWELL, L. R.; HOUSER, R. H.; SILVA, R. M. **Método de determinação de minerais em tecidos e plantas**. Gainesville: Florida of University, 62 p. 1976.

FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria – Conceitos, Métodos e Aplicações**. 1 ed. Campinas. Unicamp, 2015.

FONTANELI, Renato Serena; FONTANELI, Roberto Serena; DÜRR, João Walter. Qualidade e valor nutritivo de forragem. **Forrageiras para integração lavoura-pecuária-floresta na região sul-brasileira**, (2), 27-49. 2012.

GENRO, Teresa Cristina Moraes; ORQUIS, Mariane Garcia. **Informações básicas sobre coleta de amostras e principais análises químico-bromatológicas de alimentos destinados à produção de ruminantes**. 2008.

GONÇALVES, Juliete de Lima; FERNANDES, Antonio Marcos Ferreira; SOUSA, Rafael Teixeira de; SANTOS, Sueli Freitas dos. **Utilização do NIRS na determinação dos parâmetros de digestibilidade e consumo em ruminantes**. Nutritime Revista Eletrônica, on-line, Viçosa, v.15, n.04, p.8200-8253, jul/ago, 2018.

GONÇALVES, Lúcio Carlos; BORGES, Iran; FERREIRA, Pedro Dias Sales.

Alimentação de gado de leite. Belo Horizonte: FEPMVZ. 2009.

GELADI, P.; KOWALSKI, B. R. **Partial Least-Squares Regression: A tutorial.** Analytical Chimica Acta, v. 185, p. 1-17, 1986.

LORENZI, Harri. **Árvores brasileiras:** manual de identificação e cultivo de plantas arbóreas nativas do Brasil. 1. ed. Nova Odessa: Instituto Plantarum, 384 p. 2009.

MAIA, G. N. **Caatinga: árvores e arbustos e suas utilidades.** 2. ed. Fortaleza: Printcolor Gráfica e Editora, 413 p. 2012.

MAIA-SILVA, Camila; SILVA, Cláudia Inês da; HRNCIR, Michael; QUEIROZ, Rubens de Teixeira; IMPERATRIZ-FONSECA, Vera Lucia. **Guia de plantas visitadas por abelhas na Caatinga.** Fundação Brasil Cidadão, Fortaleza, 2012.

MAIA, G. N. **Caatinga: árvores e arbustos e suas utilidades.** São Paulo: Leitura e Arte, p. 159-169. 2004.

MAZUR, Larize. **Aplicação de metodologia por NIR para determinação METILXANTINAS PRESENTES NA ERVA-MATE (Ilex paraguariensis).** Dissertação de mestrado, Programa de Pós- Graduação em Engenharia de Alimentos – UFPR, Curitiba. 2012.

NOGUEIRA, Ana Rita de Araujo; SOUZA, Gilberto Batista. **Manual de Laboratórios: Solo, Água, Nutrição Vegetal, Nutrição Animal e Alimentos.** São Carlos: Embrapa Pecuária Sudeste. 313p. 2005.

NAES, Tomas; ISAKSSON, Tomas; FEARN, Tom; DAVIES, Tony. **A User-Friendly Guide to Multivariate Calibration and Classification.** NIR Publications. 2002.

OLIVEIRA, Rilavia Almeida de; SILVA, Ana Paula Bispo da. **William Herschel, os raios invisíveis e as primeiras ideias sobre radiação infravermelha.** São Paulo. Revista Brasileira de Ensino de Física, v. 36, n. 4, 4603. 2014.

PEREIRA-FILHO, José Moraes; BAKKE, Olaf Andreas; SILVA, Divan Soares da; BAKKE, Ivonete Alves; CARVALHO, Fabianno Cavalcante de. Poincianella pyramidalis catingueira. In: MINISTÉRIO DO MEIO AMBIENTE (Brasil). **Espécies nativas da flora brasileira de valor econômico atual ou potencial: plantas para o futuro – região Nordeste.** Brasília, DF: MMA, 2018. Cap. 5, p. 598-605.

PASQUINI, Celio. **Near infrared spectroscopy:** A mature analytical technique with new perspectives e a review. Analytica Chimica Acta. 1026. 8-36. 2018.

PRATES, E. R. **Técnicas de pesquisa em nutrição animal.** Porto Alegre, Editora UFRGS. 2007.

RODRIGUES, Ruben Cassel. **Métodos de análises bromatológicas de alimentos:** métodos físicos, químicos e bromatológicos. Pelotas: Embrapa Clima Temperado, 2010.

SALMAN, Ana Karina Dias; FERREIRA, Angela Cristina Dias; SOARES, João Paulo Guimarães; SOUZA, Josilane Pinto de. **Metodologias para avaliação de alimentos para ruminantes domésticos**. Porto Velho: Embrapa, 2010.

SNIFFEN, C. J.; O'CONNOR, J.D.; VAN SOEST, P.J.; RUSSELL, J. B. **Carbohydrate and Protein System for Evaluating Cattle Diets**: 11. Carbohydrate and Protein Availability. Journal of Animal Science, v.70, n.11, p.3562–3577, 1992.

SOUZA, Diego M.; MADARI, Beate E.; GUIMARÃES, Freddy F. **Aplicação de Técnicas Multivariadas e Inteligência Artificial na Análise de Espectros de Infravermelho para Determinação de Matéria Orgânica em Amostras de Solos**. Quim. Nova, Vol. 35, No. 9, 1738-1745, 2012.

SILVA, D.J.; QUEIROZ, A.C. **Análise de Alimentos: Métodos químicos e biológicos**. 3.ed. Viçosa: UFV, 235p. 2002.

SILVA, Fábio Oliveira da. **Uso da Espectroscopia Vis-Nir na Avaliação da Fertilidade dos Solos do Estado da Bahia**. Tese (Mestrado em Solos e Qualidade de Ecossistemas – Centro de Ciências Agrárias, Ambientais e Biológicas, Universidade Federal do Recôncavo da Bahia. Cruz das Almas – Bahia, p. 19. 2020.

SERAFIM, R. S.; ANTONELLI, A.; SANTOS, M. A. T. **Determinação da Matéria Seca e Proteína Bruta pelo Método Convencional e Microondas**. Zootecnia Animal Science, 1(1139–43). 2017.

SENA, Marcelo M de; POPPI, Ronei J.; FRIGHETTO, Rosa T.S.; VALARINI, Pedro J. **Avaliação do uso de métodos quimiométricos em análise de solos**. Revista Química Nova, São Paulo, V.23, p. 547-556, 2000.

SOUSA, Jonas da Silva. **Desenvolvimento de Modelos de Calibração Multivariada em Espectroscopia de Infravermelho Próximo para Ácidos Graxos em Amostras de Carne Bovina**. Dissertação (Química analítica) – Centro de ciências exatas e de tecnologia departamento de química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos. 2016.

SOARES, C. P. B.; OLIVEIRA, M. L. R. **Equações para estimar a quantidade de carbono na parte aérea de árvores de eucalipto em Viçosa, Minas Gerais**. Revista Árvore, v. 26, n. 5, p. 533-539, 2002. Disponível em: <<http://www.scielo.br/pdf/rarv/v26n5/a02v26n5.pdf>> Acesso: 30/07/2024.

VAN SOEST, Peter J. **Symposium on nutrition and forage and pastures: new chemical procedures for evaluating forages**. Journal of Animal Science, 23 (3), 838-845. 1964

VAN SOEST, Peter J. **Nutritional ecology of the ruminant**. (2aed.), Cornell University Press. 1994.

VALDERRAMA, Patrícia; BRAGA, Jez William B.; POPPI, Ronei Jesus. **Variable**

selection, outlier detection, and figures of merit estimation in a partial least-squares regression multivariate calibration model: A case study for the determination of quality parameters in the alcohol industry by Near-Infrared Spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v. 55, p. 8331-8338, 2007.

VALDERRAMA, Patrícia. **Avaliação de figura de mérito em calibração multivariada na determinação de controle de qualidade em indústria alcooleira por espectroscopia de infravermelho próximo.** Dissertação (Mestrado em Química Analítica) – Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 2005.

VOGEL, Arthur I. **Análise Química Quantitativa.** Tradução: Horácio Macedo. 5 ed. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan S. A. 712p. 1992.

VILAR, Welma Thaise Silva. **Desenvolvimento de metodologias analíticas baseadas em HPLC-DAD, espectroscopia no infravermelho e quimiometria para o controle de qualidade de repelentes de insetos.** V697. Tese (Doutorado) – PPGQ, UFPB, João Pessoa, 2018.

VIRGINIO JÚNIOR, Gercino Ferreira. Cartilha. **Importância da análise bromatológica para nutrição animal.** EPAMIG – Empresa de Pesquisa Agropecuária de Minas Gerais. Belo Horizonte: EPAMIG, 2023. Disponível em: <https://www.livrariaepamig.com.br/wp-content/uploads/2023/08/Analise-Bromatologica.pdf>. Acesso em: 12 jun. 2025.

MAARSCHALKERWEERD, Marie Van; HUSTED, Soren. **Recent developments in fast spectroscopy for plant mineral analysis.** *Frontiers in Plant Science*, v. 6, p. 169, 2015. DOI: <http://doi.org/10.3389/fpls.2015.00169>.

WILLIAMS, Patrick. **How it all began.** In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON NEAR INFRARED SPECTROSCOPY, 17. 2015, Foz do Iguassu. Proceedings. Campinas: International Council for Near Infrared Spectroscopy, 2015. p. 128-132. Disponível em: Acesso em: 24 mar. 2025.

WORKMAN, Jerry; WEYER, Lois. **Practical guide to interpretive near-infrared spectroscopy.** CRC Press Taylor & Francis Group. 2008.

YASUHARA, Tadashi; NOKIHARA, Kiyoshi. **High-throughput analysis of total nitrogen content that replaces the classic Kjeldahl method.** *Journal of agricultural and food chemistry*, v. 49, p. 4581-4583, 2001.