



simpósio estadual de **AGROENERGIA**

IV reunião técnica de agroenergia - RS

PREDIÇÃO DE BRIX DE CANA-DE-AÇÚCAR POR ESPECTROMETRIA DE INFRAVERMELHO PRÓXIMO.

Juliana Silva Lemões¹, Bianca Aguiar Oliveira², Raquel Bartz Kneib³, Sabrina Peres Farias⁴; Sérgio Delmar dos Anjos e Silva⁵.

INTRODUÇÃO

O uso da espectroscopia de infravermelho próximo (NIR) para a identificação e quantificação de moléculas apresenta grandes vantagens em relação a técnicas de análise tradicionais, pois trata-se de uma técnica rápida, não destrutiva, sem a necessidade de preparo de amostras, de baixo custo de análise além de ser capaz de determinar vários constituintes de uma só vez (PASQUINI, 2003).

Para a utilização da técnica de infravermelho próximo é necessário a construção de um modelo que inclua a curva de calibração utilizando conjunto de amostras representativas e os respectivos valores de referência. A relação matemática entre dados espectrais e valores de referência para uma determinada propriedade deve ser estabelecida com a utilização de ferramentas quimiométricas (REICH, 2005).

Para aplicações quantitativas, o modelo construído para análise por infravermelho próximo deve ser capaz de prever valores confiáveis, com alta correlação com o método de referência, para que a técnica possa ser utilizada (MORGANO et al., 2007).

O objetivo deste trabalho foi construir modelo de calibração para predição de Brix em cana-de-açúcar por espectroscopia de infravermelho próximo, bem como comparar os valores preditos através do modelo com o método de referência.

MATERIAL E MÉTODOS

Para a construção do modelo de calibração foram coletadas amostras de cinco experimentos de cana-de-açúcar implantados na Embrapa Clima Temperado, nos anos de 2010 e 2011 (conjunto 1). Para a predição de valores de brix utilizando o modelo construído, foram coletadas amostras de dois experimentos também implantados na Embrapa Clima Temperado, no ano de 2012 (conjunto

¹ MSc. Química / Bolsista CNPq - Embrapa Clima Temperado. julianalemoes@yahoo.com.br

² Graduando Bacharelado Química / UFPel. biaoliw@yahoo.com.br

³ Graduando Agronomia / UFPel. raquelkneib@yahoo.com.br

⁴ Acadêmica do curso de Engenharia Química – FURG. s.pfarias@yahoo.com.br

⁵ DSc. Fitotecnia / Pesquisador Embrapa Clima Temperado. sergio.anjos@cpact.embrapa.br

2). De cada genótipo foram coletados três colmos, o número de amostras coletados em cada experimento está apresentado na Tabela 1.

Tabela 1. Conjunto, experimento e número de amostras de cana-de-açúcar coletadas para construção do modelo de calibração e predição de valores de brix.

Conjunto	Experimento	Nº de amostras
1	110 genótipos (2010)	59
	220 genótipos (2010)	47
	25 genótipos (2010)	24
	Crioulas (2011)	479
	Tardios (2011)	334
2	30 genótipos (2012)	90
	Ridesa 2º Fase (2012)	117

Os colmos de cana-de-açúcar foram rachados sendo que metade foi utilizada para determinação de brix através de refratômetro digital ATAGO PAL-3 e a outra metade utilizada para a leitura por espectrometria de infravermelho próximo (modelo NIR FLEX N500, BÜCHI) utilizando acessório XL.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Construção do modelo de calibração para brix: os valores obtidos pelo método de referência do conjunto de amostras 1 foram introduzidos para construção da curva de calibração. Os espectros com os respectivos valores de referência foram interpretados, avaliados e processados com o auxílio de ferramentas quimiométricas do software NIRCal 5.2 (Buchi).

Os espectros obtidos foram separados em dois conjuntos para a construção das curvas de calibração (1802 espectros) e curva de validação (1040 espectros). Para o projeto de calibração construído com 2842 espectros (referentes a 947 amostras) foi utilizado análise por componentes principais (14 componentes principais primários) e o procedimento de cálculo PLS (*Partial Least Squares Regression*), os espectros foram pré-tratados por SNV (*Standard Normal Variate*). Na Tabela 2 são apresentados o número de espectros, as equações da reta, os coeficientes de correlação (r) e determinação (r^2) e o desvio padrão (Sdev (x-y)) das curvas de calibração e validação.

Para o modelo construído, os coeficientes de determinação foram maiores que 0,80, porém foram obtidos desvios padrão superiores a 0,85.

Para determinação da correlação dos valores preditos pelo modelo e os valores de referência foram utilizados os dois conjuntos de dados, o conjunto 1 com amostras utilizadas para a construção das curvas de calibração e validação e o conjunto 2 com amostras não utilizadas nas curvas.

Tabela 2. Modelos de calibração para brix de cana-de-açúcar.

	Calibração	Validação
Nº espectros	1802	1040
Equação da reta	$f(x)=0,8115x + 3,3662$	$f(x)=0,7965x + 3,6502$
r=	0,9008	0,8993
r ² =	0,8115	0,8088
Sdev (x-y)	0,8504	0,8929

A correlação entre os resultados preditos e os valores de referência foi obtida pela comparação dos valores obtidos para cada amostra utilizando o software *Unscrambler X 10.2*. Os resultados da análise estão apresentados na Tabela 3.

Tabela 3. Análise de correlação entre os valores de brix preditos pelo NIR e valores de referência obtidos por refratômetro digital.

	Conjunto 1		Conjunto 2	
	Predito	Referência	Predito	Referência
Número de Amostras	947		307	
Média	17,9	17,9	18,8	19,0
Máximo	23,5	23,0	22,9	23,3
Mínimo	12,6	10,4	14,2	13,7
Variação	10,9	12,6	8,7	9,6
Desvio Padrão	1,6	1,8	1,8	1,9
Variância	2,6	3,5	3,3	3,6
Coefficiente de correlação	0,89		0,88	

A média dos valores de brix obtidos para as amostras do conjunto 1 foi a mesma nos dois métodos, porém, a variância dos valores preditos pelo NIR foi de 2,6, menor que a do método de referência de 3,5. Para o segundo conjunto de amostras, as quais não foram utilizadas para a construção do modelo, a média dos variou de 18,8 (valores preditos) a 19,0 (valores de referência).

Os coeficientes de correlação entre os métodos foram de 0,89 e 0,88, para os conjuntos 1 e 2, respectivamente. A pequena variação entre os coeficientes de correlação para os dois conjuntos

mostra que o modelo de calibração construído pode ser utilizado para prever os valores de brix de amostras de diferentes safras e experimentos.

CONCLUSÕES

O modelo de calibração construído pode ser utilizado para prever brix de cana-de-açúcar por espectroscopia de infravermelho próximo.

REFERÊNCIAS

PASQUINI, Célio. Near Infrared Spectroscopy: Fundamentals, Practical Aspects and Analytical Applications. **J. Braz. Chem. Soc.** V.14, n.2, p. 198-219, 2003.

REICH, Gabriele. Near-infrared spectroscopy and imaging: Basic principles and pharmaceutical applications. **Advanced Drug Delivery Reviews**, v.52, p. 1109 - 1143, 2005.

MORGANO, M. A.; FARIA, C. G.; FERRÃO, M. F.; FERREIRA, M. M. C. Determinação de açúcar total em café cru por espectroscopia no infravermelho próximo e regressão por mínimos quadrados parciais. **Química Nova**, v. 30, n. 2, p. 346-350, 2007.

AGRADECIMENTOS

À FINEP e ao CNPq