



PREDIÇÃO DAS COORDENADAS DE COR CIELAB EM GRÃOS DE SORGO VIA ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO (NIRS) E QUIMIOMETRIA

Amanda S. Cardoso¹; Thais F. SILVA²; Christiano, V. PIRES³; Edmilson T. V. JUNIRO⁴; Cícero B. de Menezes⁵; Izadora C. M⁶. Oliveira, Maria Lúcia F. SIMEONE^{6*}

¹Estudante, Departamento de Engenharia de Alimentos/UFSJ-CSL

²Mestranda, Departamento de Agronomia/UFSJ-CSL

³Professor, Departamento de Engenharia de Alimentos/UFSJ-CSL

⁴Técnico de laboratório, Departamento de Engenharia de Alimentos/UFSJ-CSL

⁵Pós-doutoranda, Embrapa Milho e Sorgo

⁶Pesquisador, Embrapa Milho e Sorgo

⁶Pesquisadora, Embrapa Milho e Sorgo

*amandacardoso844@gmail.com

RESUMO: O sorgo (*Sorghum bicolor* L. Moench) é uma cultura estratégica para a segurança alimentar devido à sua resiliência climática e versatilidade nutricional. A cor do grão é um atributo essencial de qualidade e aceitabilidade, contudo, sua classificação atual é predominantemente visual, o que gera subjetividade. Este estudo objetivou desenvolver modelos matemáticos, utilizando espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) e quimiometria, para prever numericamente as coordenadas de cor do sistema CIE L*a*b (L, a e b) em grãos de sorgo. Foram analisados 25 genótipos (em triplicata) provenientes do programa de melhoramento da Embrapa. As amostras moídas foram submetidas à colorimetria instrumental e à aquisição de espectros NIR (10.000–4000 cm⁻¹). Os modelos de calibração foram construídos via regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) no software Unscrambler. Os melhores ajustes para as coordenadas L* e b* foram obtidos com o pré-processamento SNV combinado à primeira derivada, alcançando coeficientes de determinação de calibração R² de 0,802 e 0,887, respectivamente. Para a coordenada a*, o melhor desempenho foi observado sem pré-tratamento (R² = 0,697). Os erros médios de calibração (RMSEC) e validação cruzada (RMSECV) foram baixos, indicando precisão na estimativa. Os resultados demonstram que a tecnologia NIRS, aliada à quimiometria, possui alto potencial para fornecer dados de cor de forma rápida e simultânea às análises bioquímicas tradicionais. Esta abordagem inova ao substituir a avaliação visual por um método numérico, robusto e sem geração de resíduos, contribuindo para a padronização e controle de qualidade na cadeia produtiva do sorgo.

Palavras-chave: *Sorghum bicolor*, NIRS, CIELAB, Quimiometria, Alimento funcional.

INTRODUÇÃO

O sorgo (*Sorghum bicolor* L. Moench) tem se destacado como uma cultura estratégica diante dos impactos das mudanças climáticas sobre os alimentos. Esse cereal apresenta eficiência no uso da água, capacidade de desenvolvimento em regiões semiáridas e estabilidade produtiva em condições ambientais adversas, características que favorecem sua expansão em sistemas agrícolas mais resilientes e sustentáveis. Além de ser empregado na alimentação humana e animal, bem como na produção de biocombustíveis, em razão da composição química de seus grãos Hassain et al. (2022).

Além da composição química, características físicas como a coloração dos grãos podem estar relacionadas às propriedades nutricionais e estruturais dos cereais, possibilitando aplicações na

classificação, qualidade e padronização de matérias-primas. Por esses motivos, a cor é um importante fator de classificação da maioria dos produtos alimentícios, incluindo carnes e culturas como sorgo, canola, arroz e trigo. Atualmente a avaliação de cor de grãos de sorgo, são regidos pela Portaria 268/1984, sendo feita somente de forma visual, o que pode gerar inconsistências ou variações na classificação dos grãos.

Nesse contexto, técnicas analíticas inovadoras têm sido amplamente utilizadas para caracterização química de cereais. A Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIRS) baseia-se na absorção de radiação eletromagnética na região do infravermelho próximo a faixa de 800–2.500 nm. Os espectros obtidos são tratados por métodos quimiométricos, como regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS) e análise multivariada, permitindo a construção de modelos matemáticos através de um software capaz de prever parâmetros físico-químicos de forma rápida, simultânea e com mínima preparação da amostra, sem gerar resíduos Fodor et al. (2024). Dessa forma, o estudo teve como objetivo criar um modelo baseado em dados de espectroscopia NIR e quimiometria para fornecer dados numéricos da cor baseado na análise colorimétrica do sistema CIELAB.

MATERIAL E MÉTODOS

Obtenção das amostras

Foram analisados 25 genótipos de sorgo granífero provenientes do programa de melhoramento de sorgo da Embrapa, em triplicata, cultivados na região de Goiânia-GO. As amostras de grãos de diferentes cores foram encaminhadas para a Embrapa Milho e Sorgo, localizada em Sete Lagoas, MG. Na unidade, os grãos foram processados em um moedor portátil Cadence MDR302 para a obtenção dos espectros NIR e realização das análises colorimétricas.

Avaliação de cor

A análise de cor instrumental foi realizada na Universidade Federal de São João del-Rei campus Sete Lagoas no Laboratório de Análise de Alimentos. Utilizou-se na caracterização um colorímetro portátil Minolta Chroma CR-210 em escala L^* , a^* e b^* , calibrado, referente a luminosidade (variando de 0 a 100), os tons vermelhos (+) e verde (-), e do amarelo (+) ao azul (-).

Obtenção dos espectros NIR e construção do modelo de calibração

Os espectros NIR foram obtidos em equipamento NIRFlex 500 (Buchi) utilizando como porta-amostras uma placa de Petri de 9 cm. Os dados de cor foram associados aos respectivos espectros NIR no software The Unscrambler® (10.3) para avaliar o desempenho por meio do pré processamento utilizando o método de Variação Normal Padrão (SNV) e primeira derivada Savitzky-Golay, para corrigir os desvios e reduzir o espalhamento de luz. Em seguida, foi aplicado o modelo de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) para avaliar o ajuste dos parâmetros de qualidade do modelo criado: Raiz Quadrada do Erro Médio de Previsão (RMSEP), a Raiz Quadrada do Erro Médio de Calibração (RMSEC), a Raiz Quadrada do Erro Médio de Calibração Cruzada (RMSECV) e o Coeficiente de Determinação (R^2) (calibração/validação).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram obtidos os espectros NIR médios de 75 amostras de sorgo moídas e para cada espectro, foram associados os resultados das coordenadas Cielab. Os espectros pré-tratados com os métodos SNV e primeira derivada apresentaram os melhores resultados para a obtenção do modelo PLS na construção dos modelos de calibração para as coordenadas L^* , e b^* com 7 e 5 variáveis latentes, respectivamente

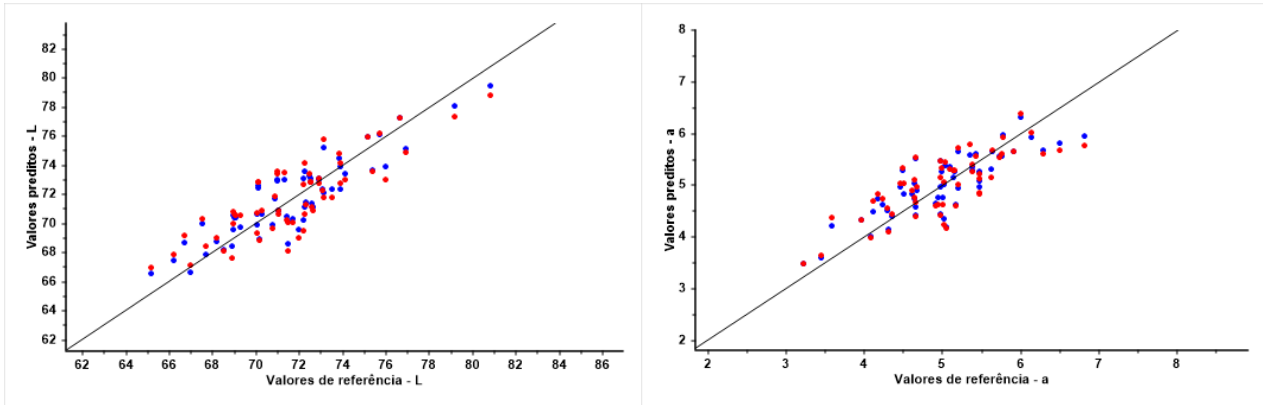
para a coordenada, a* o melhor resultado foi obtido sem o pré-tratamento dos espectros NIR, com 7 variáveis latentes, conforme apresentado na Tabela 1.

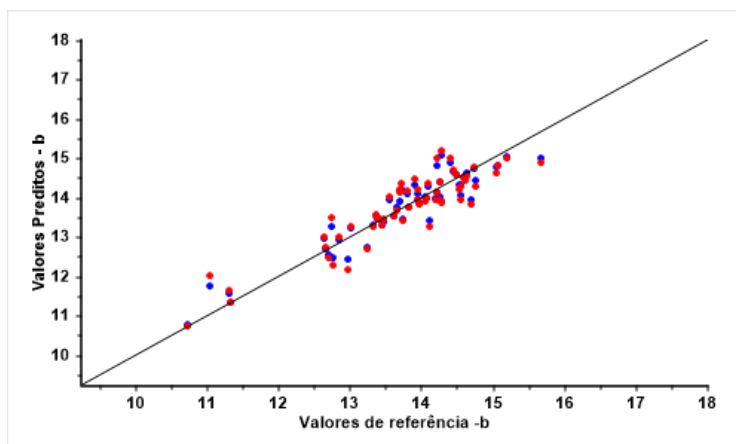
Tabela 1 – Resultados obtidos para os modelos PLS

Método de pré-processamento	Variável latente	R ²	RMSEC	R ² cv	RMSECV
Coordenada a*					
Sem pre-tratamento	7	0,697	0,39	0,618	0,45
SNV	7	0,612	0,46	0,428	0,57
Primeira derivada	7	0,632	0,42	0,431	0,52
SNV + primeira derivada	5	0,581	0,45	0,4159	0,53
Coordenada b*					
Sem pre-tratamento	7	0,749	0,52	0,659	0,61
SNV	7	0,843	0,40	0,749	0,50
Primeira derivada	7	0,7885	0,48	0,721	0,57
SNV + primeira derivada	5	0,887	0,32	0,83	0,41
Coordenada L*					
Sem pre-tratamento	5	0,582	0,48	0,424	0,57
SNV	7	0,648	1,83	0,509	2,23
Primeira derivada	7	0,748	1,57	0,643	1,90
SNV + primeira derivada	7	0,802	1,314	0,734	1,63

Como esperado, a correlação observada entre as coordenadas de cor e os espectros NIR, o modelo PLS prevê com precisão os valores observados, conforme apresentado na Figura 1. Os valores de R² ajustado obtidos são R² = 0,802 (L*), R² = 0,70 (a*) e R² = 0,887(b*) com RMSEC de 1,31, 0,39 e 0,33, respectivamente. A validação foi realizada pelo método de validação cruzada utilizando o método randômico e os resultados foram R² = 0,734 (L*), R² = 0,619 (a*) e R² = 0,833(b*) com RMSECV de 1,63, 0,46 e 0,41, respectivamente.

Figura 1- Valores de referência versus valores preditos em porcentagem para a coordenada L(i), a(ii), e b(iii) das amostras de sorgo do conjunto de calibração (azul) e validação cruzada (vermelho).





CONCLUSÃO

Os modelos NIR-PLS obtidos para as coordenadas a^* , b^* e L sugerem que a espectroscopia NIR tem um excelente potencial para fornecer informações de cor que no futuro podem complementar as informações bioquímicas normalmente fornecidas pela região NIR.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Embrapa Milho e Sorgo pelo fornecimento do material experimental (20.23.02.000.00), à CNPq pela concessão da bolsa e à FINEP pelo apoio financeiro ao projeto (20.22000980000).

REFERÊNCIAS

BRASIL. Lei nº 10.406, de 10 de janeiro de 2002. Institui o Código Civil. Diário Oficial da União: seção 1, Brasília, DF, 11 jan. 2002.

FODOR, Marietta; MATKOVITS, Anna; BENES, Eszter Luca; JÓKAI, Zsuzsa. The role of near-infrared spectroscopy in food quality assurance: a review of the past two decades. MDPI, v. 13, n. 21, p. 3501, 2024. DOI: 10.3390/foods13213501

HASSAIN, M. S.; ISLAM, M. N.; RAHMAN, M. M.; MOSTOFA, M. G. Sorghum: A prospective crop for climatic vulnerability, food and nutritional security. Elsevier, Agricultural and Food Research, v. 8, jun. 2022, 100300. DOI: 10.1016/j.jafr.2022.100300.