PREDIÇÃO DO TEOR DE CINZAS EM RAÍZES DE MANDIOCA VIA ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO (NIR)

[1]Lidiane dos Santos Gomes Oliveira, [2] Diego Pereira do Couto, [1]Jônatas Gomes Santos, [1]Ramon Azevedo Braz, [1]Sérgio Henriques Saraiva, [1]Marcia Flores da Silva Ferreira, [1]Adesio Ferreira

[1] Universidade Federal Espírito Santo/ Departamento de Agronomia, Alto Universitário, s/n, Guararema - 29500-000 - Alegre-ES, Brasil, lidianegomes31@gmail.com, gomesjonatas21@gmail.com, ramon_gdr@hotmail.com, sergiohsaraiva@gmail.com, marcia.ferreira@ufes.br, adesioferreira@gmail.com.
[2] Instituto Federal do Espirito Santo, Rive - Alegre-ES, Brasil, diego_couto@hotmail.com

Resumo
O teor de cinzas é um parâmetro pouco explorado na aplicação da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) à mandioca (*Manihot esculenta* Crantz), os estudos são concentrados em quantificar teor de amido e matéria seca, apesar da crescente demanda por métodos mais ágeis de avaliação em programas de melhoramento que analisam centenas de genótipos a cada ciclo de seleção. Este trabalho teve como objetivo avaliar o teor de cinzas genótipos de mandioca por meio do NIR. Entre os cinco pré-processamentos espectrais testados, o modelo com correção de espalhamento multiplicativo (MSC) apresentou o melhor desempenho, com correlação de 0,84 na validação externa. O resultado demonstra que o NIR é capaz de discriminar genótipos de mandioca com diferentes teores de cinzas, consolidando-se como ferramenta de triagem viável para acelerar a seleção de materiais superiores em programas de melhoramento da cultura.
Palavras-chave: Composição mineral. *Manihot esculenta*. Melhoramento genético. Qualidade.

Área do Conhecimento: Ciências Agrárias – Agronomia

Introdução

A mandioca (*Manihot esculenta* Crantz) desempenha um papel importante na segurança alimentar mundial, sendo cultivada principalmente em regiões tropicais e subtropicais (Borku, 2025). Em comparação a outras culturas alimentares, a mandioca apresenta vantagens como tolerância à seca, propagação vegetativa simples, ampla diversidade genética e rendimento satisfatório mesmo em solos pouco férteis (Borku, 2025; Xiao *et al*., 2025). Suas raízes possuem alto teor de carboidratos e são utilizadas para diversos fins, como alimentação humana, ração animal e matéria-prima para produtos industriais, incluindo farinha, amido e etanol (Chamorro *et al*., 2025).

O teor de cinzas de uma raiz corresponde à quantidade total de minerais nela presentes e é um dos parâmetros usados para avaliar a qualidade nutricional da mandioca, sendo um caráter de interesse em programas de melhoramento genético voltados à seleção de genótipos mais produtivos e de melhor qualidade (Borku, 2025). Os minerais são compostos inorgânicos fortemente relacionados ao tipo de solo e às condições de cultivo, além de desempenharem funções essenciais na manutenção dos processos fisiológicos da planta (Araújo *et al*., 2020). Sua determinação tradicional é feita em laboratório, por incineração da amostra em mufla, um processo lento e destrutivo que dificulta a avaliação de um grande número de genótipos. Por isso, este trabalho utilizou a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) para predizer o teor de cinzas a partir de raízes de mandioca moídas e secas.

A espectroscopia NIR pode ser utilizada para determinar as concentrações de macro e microelementos em diferentes matrizes, sejam elas de origem alimentar ou não (Araújo *et al*., 2020). No melhoramento genético de mandioca, essa tecnologia é utilizada para predizer atributos como amido e matéria seca, e se mostrou eficiente para predição de cinzas em farinha de mandioca (Pompeu *et al*., 2021). O presente trabalho teve como objetivo avaliar o teor de cinzas em genótipos de mandioca através da espectroscopia no infravermelho próximo.

Metodologia

No presente estudo, foram consideradas amostras de mandioca, totalizando cento e seis amostras. As amostras foram obtidas em diferentes municípios do estado do Espírito Santo, localizado na região Sudeste do Brasil. As amostras foram moídas em moinho de facas, em seguida foram embaladas separadamente em sacos de papel e acondicionados em estufa a 60 °C, por 72 horas.

Amostras de mandioca foram analisadas por espectroscopia NIR com transformada de Fourier em um espectrofotômetro AgriQuant (Q-Interline A/S, Stengårdsvej, Dinamarca) no modo de reflexão. Utilizou-se um padrão de referência interno (background). As amostras foram homogeneizadas manualmente antes da coleta de subamostras para as replicatas, que foram medidas consecutivamente. A coleta dos espectros foi realizada com raiz moída e seca, sem qualquer pré-tratamento inicial. Os dados foram registrados na faixa de 4000 a 10000 cm^{-1}, com intervalos de 8 cm^{-1} e 64 varreduras, em sala climatizada (18 °C, 65% de UR), em triplicata, calculando-se, em seguida, o espectro médio. Durante a coleta dos espectros, as amostras foram mantidas em rotação constante. O equipamento de coleta foi configurado com o software InfraQuant 3.0 (Q-Interline, Stengårdsvej, Dinamarca).

Elaboração de Modelos PLS

Na regressão de mínimos quadrados parciais (PLS), uma variável dependente é descrita em função de certas variáveis, denominadas variáveis latentes. Estas são criadas a partir dos dados originais por meio de combinações lineares que capturam a covariância máxima entre as variáveis independentes (absorbância) e dependentes (análise química) (Goodarzi *et al*. 2015). Para a regressão PLS, utilizaram-se simultaneamente os dados espectroscópicos e os dados da propriedade de interesse (teor de cinzas). Inicialmente, o conjunto total de amostras foi dividido manualmente em dois subconjuntos homogêneos: um contendo 80% e o outro, 20% das amostras. O conjunto contendo o maior número de amostras foi denominado conjunto de calibração, e o conjunto com o menor número de amostras foi denominado conjunto de validação externa. O conjunto de calibração foi utilizado para construir o modelo preditivo, enquanto o conjunto de validação externa foi empregado para testar o modelo de calibração em amostras externas e validar os resultados. A validação cruzada (do tipo leave-one-out) no conjunto de calibração foi o processo utilizado para determinar o número de variáveis latentes em cada um dos modelos de calibração, com base na minimização do erro padrão e na obtenção do maior coeficiente de correlação na validação cruzada, evitando assim o sobreajuste (overfitting) do modelo. Os modelos foram validados por meio de validação cruzada completa e validação com conjunto externo. A validação cruzada leave-one-out consiste em utilizar uma única amostra do conjunto de calibração como dado de validação e as demais como dados de treinamento. Dessa forma, cada amostra do conjunto é utilizada uma vez como dado de validação, e o processo é concluído quando todas as amostras tiverem sido utilizadas (Xie *et al*. 2007; Frizon *et al*. 2015). Além dos modelos elaborados a partir dos espectros originalmente obtidos, também foram avaliados métodos de pré-tratamento dos dados espectrais, sendo eles Spline, correção de espalhamento multiplicativo (MSC), derivada segunda e variação normal padrão (SNV). Para a variável avaliada, foram gerados e comparados cinco modelos, com seleção da região espectral mais informativa pelo método iPLS (PLS por intervalos).

Resultados

O modelo que utilizou os dados pré-processados pelo método MSC apresentou o melhor desempenho entre os cinco tratamentos avaliados, por apresentar o maior coeficiente de correlação na validação externa (r = 0,84) associado a um erro relativamente baixo (RMS = 0,24), utilizando a região espectral de 1203 a 2572 nm selecionada pelo método iPLS (Tabela 1). O teste t não indicou viés significativo para o modelo de cinzas (t = 1,30; p = 0,22), confirmando que as predições não superestimam nem subestimam sistematicamente os valores observados.

Tabela 1 - Desempenho dos modelos de calibração NIR para predição do teor de cinzas em raízes de mandioca, segundo diferentes pré-processamentos espectrais.

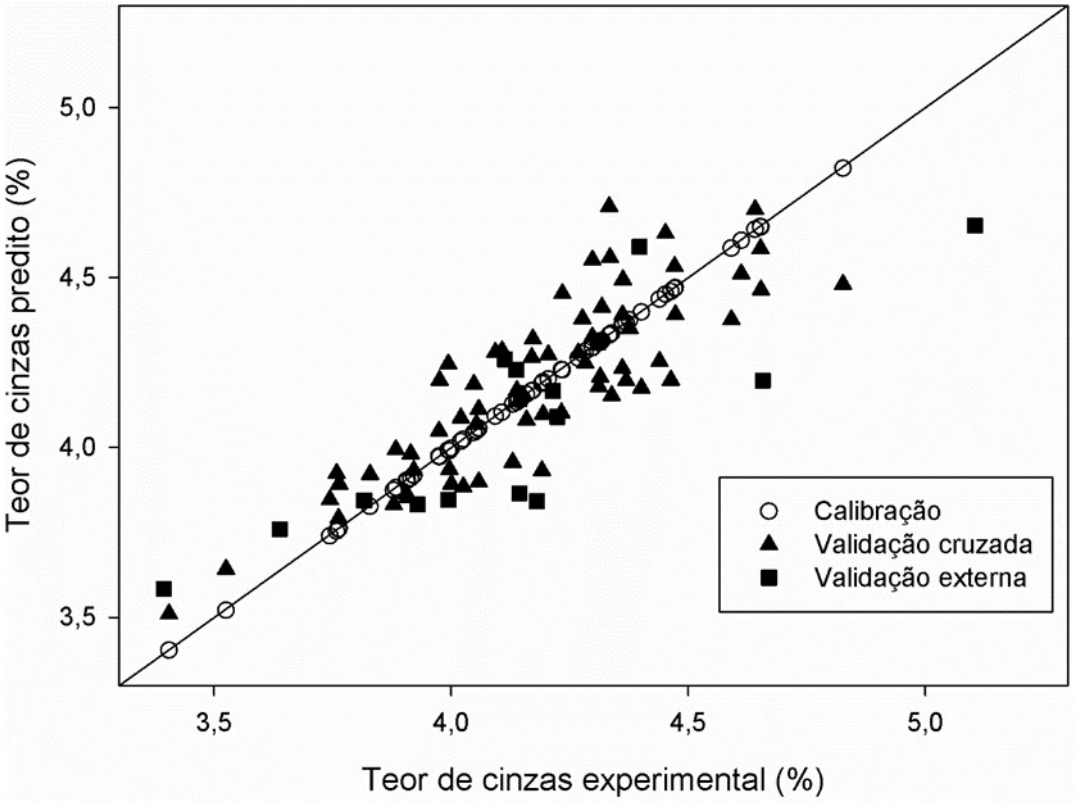
Pré- processamento	LV	Rc	RMSEC	Rcv	RMSECV	Rp	RMSEP
Espectro original	21	0,9983	0,0159	0,8645	0,1383	0,8207	0,2528
Spline	30	0,9999	0,0068	0,8570	0,1417	0,7821	0,2618
MSC	27	0,9999	0,0035	0,8472	0,1468	0,8402	0,2358
Derivada segunda	9	0,9346	0,0938	0,7872	0,1731	0,7075	0,2888
SNV	18	0,9754	0,0596	0,8513	0,1439	0,8127	0,2482

MSC: correção de espalhamento multiplicativo; SNV: variação normal padrão; var. latentes: variáveis latentes do modelo de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS); iPLS: PLS por intervalos, método usado para seleção da região espectral.

Fonte: elaborado pelo próprio autor.

A Figura 1 apresenta a relação entre os valores preditos e observados de cinzas para os três conjuntos avaliados. Os pontos de calibração (círculos) se posicionam muito próximos à reta 1:1, indicando um ajuste do modelo aos dados de treinamento (Rc = 0,9999). Já os pontos de validação cruzada (triângulos) e, de validação externa (quadrados) apresentam uma dispersão em torno da reta, especialmente nos extremos da faixa de cinzas avaliada (valores abaixo de 3,5% e acima de 4,5%), padrão consistente com o erro de predição obtido (RMSEP = 0,24).

Figura 1 - Valores preditos versus valores observados de cinzas em raízes de mandioca, modelo NIR com pré-processamento MSC (validação externa).



Fonte: elaborado pelo próprio autor.

Discussão

O desempenho satisfatório do modelo (Rp = 0,84 na validação externa) está relacionado à natureza indireta da relação entre o espectro NIR e o teor de cinzas. As cinzas de uma raiz de mandioca correspondem principalmente a minerais como cálcio, potássio, magnésio, ferro e zinco (Borku, 2025); por serem espécies inorgânicas, esses elementos não apresentam bandas de absorção características na região do infravermelho próximo, região sensível sobretudo às ligações O-H, C-H e N-H presentes na água, nos carboidratos e em outros compostos orgânicos da raiz (Araújo *et al*., 2020). A predição de cinzas pelo NIR ocorre, portanto, de forma indireta, mediada pela covariação natural entre o teor mineral e esses componentes orgânicos, como já observado entre cinzas, umidade e pH em farinha de mandioca (Pompeu *et al*., 2021). Essa natureza indireta explica por que o modelo, embora satisfatório, não atinge correlações próximas de 1.

A variação de desempenho entre os pré-processamentos também está ligada à estrutura física da raiz, organizada em regiões distintas - parênquima e vasos de xilema protegidos pelo câmbio (Chamorro *et al*., 2025) -, cujas diferenças de densidade e teor de água entre genótipos alteram o espalhamento da luz durante a leitura espectral; isso justifica o melhor desempenho do modelo com o pré-processamento MSC, especializado na correção desse tipo de efeito. Esse comportamento é consistente com o observado por Maraphum *et al*. (2022) para amido e matéria seca em mandioca, em que a idade da planta e a cultivar influenciaram a robustez de modelos NIRS-PLSR justamente por afetarem a composição química e a estrutura física do tecido da raiz. Soma-se a isso a base genética da própria característica: estudos de genômica funcional em mandioca já associam regiões do genoma a caracteres de qualidade e composição da raiz (Xiao *et al*., 2025), reforçando que parte da variação no teor de cinzas entre genótipos tem origem genética.

Conclusão

Os resultados obtidos nas etapas de calibração e validação demonstraram que o modelo NIR ajustado com o pré-processamento MSC foi capaz de discriminar amostras de mandioca com diferentes teores de cinzas. O ganho de desempenho do MSC em relação ao espectro original demonstra a importância da correção de efeitos físicos de espalhamento para essa característica.

Os resultados indicam que a espectroscopia NIR pode ser utilizada como ferramenta de triagem para a seleção de genótipos de mandioca com maior teor de cinzas, contribuindo para os programas de melhoramento genético voltados à qualidade da cultura.

Referências

ARAÚJO, C. da S.; VIMERCATI, W. C.; MACEDO, L. L.; FERREIRA, A.; PREZOTTI, L. C.; TEIXEIRA, L. J. Q.; SARAIVA, S. H. Predicting the electric conductivity and potassium leaching of coffee by NIR spectroscopy technique. **Food Analytical Methods**, v. 13, p. 2312-2320, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s12161-020-01843-y.

BORKU, A. W. Cassava (Manihot esculenta Crantz): its nutritional composition insights for future research and development in Ethiopia. **Discover Sustainability**, v. 6, n. 404, 2025. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s43621-025-00996-2.

CHAMORRO, A. F.; PALENCIA, M.; LERMA, T. A. Physicochemical characterization and properties of cassava starch: a review. **Polymers**, v. 17, n. 12, 2025. Disponível em: https://doi.org/10.3390/polym17121663.

FRIZON, N. T.; OLIVEIRA, G. A.; PERUSSELLO, C. A.; HOFFMANN-RIBANI, R. Determination of total phenolic compounds in yerba mate (Ilex paraguariensis) combining near infrared spectroscopy (NIR) and multivariate analysis. LWT - **Food Science and Technology**, v. 60, p. 795-801, 2015. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.lwt.2014.10.030.

GOODARZI, M.; SHARMA, S.; RAMON, H.; SAEYS, W. Multivariate calibration of NIR spectroscopic sensors for continuous glucose monitoring. **Trends in Analytical Chemistry**, v. 67, p. 147-158, 2015.

Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.trac.2014.12.005.

MARAPHUM, K. et al. Achieving robustness across different ages and cultivars for an NIRS-PLSR model of fresh cassava root starch and dry matter content. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 196, 2022. Disponível em: https://doi.org/10.1016/j.compag.2022.106872.

POMPEU, D. R.; SOUZA, J. N. S.; PENA, R. S. Fast and non-destructive determination of simultaneous physicochemical parameters of Manihot esculenta flour using FT-NIR spectroscopy and multivariate analysis. **International Journal of Food Science and Technology**, v. 56, n. 8, p. 3826-3833, 2021. Disponível em: https://doi.org/10.1111/ijfs.14998.

XIAO, L.; CHENG, D.; OU, W.; CHEN, X.; RABBI, I. Y.; WANG, W.; LI, K.; YAN, H. Advancements and strategies of genetic improvement in cassava (*Manihot esculenta* Crantz): from conventional to genomic approaches. **Horticulture Research**, v. 12, n. 3, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.1093/hr/uhae341.

XIE, L.; YING, Y.; YING, T. Quantification of chlorophyll content and classification of nontransgenic and transgenic tomato leaves using visible/near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v. 55, p. 4645-4650, 2007. Disponível em: https://doi.org/10.1021/jf063664m.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. À Fundação de Amparo à Pesquisa e Inovação do Espírito Santo (FAPES), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Universidade Federal do Espírito Santo (UFES) e aos Laboratórios de Biometria e de Genética da UFES por todo o apoio.