

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS

Instituto de Ciências Exatas

Programa de Pós-Graduação em Química

Vinícius Fernandes Salvo

**EMPREGO DA ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E
QUIMIOMETRIA NA AVALIAÇÃO DE GRÃOS DE SORGO PARA A PRODUÇÃO
DE RAÇÃO ANIMAL**

Belo Horizonte

2025

UFMG/ICEX/DQ. 1.695

D. 926

Vinícius Fernandes Salvo

**EMPREGO DA ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E
QUIMIOMETRIA NA AVALIAÇÃO DE GRÃOS DE SORGO PARA A PRODUÇÃO
DE RAÇÃO ANIMAL**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre(a) em Química.

Orientador(a): Prof^a Dra. Mariana Ramos de Almeida

Coorientador(a): Prof^o Dr. Marcelo Martins de Sena

Belo Horizonte

2025

Ficha Catalográfica

S186e Salvo, Vinícius Fernandes.
2025 Emprego da espectroscopia no infravermelho próximo e quimiometria na
avaliação de grãos de sorgo para a produção de ração animal [manuscrito] /
D Vinícius Fernandes Salvo. 2025.
71 f. : il., gráfs., tabs.

Orientadora: Mariana Ramos de Almeida.
Coorientador: Marcelo Martins de Sena.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais –
Departamento de Química.
Bibliografia: f. 60-71.

1. Química analítica – Teses. 2. Alimentos – Análise – Teses. 3. Quimiometria
– Teses. 4. Espectroscopia de infravermelho – Teses. 5. Sorgo – Qualidade – Teses.
6. Sorgo como ração – Teses. 7. Cereais – Armazenamento – Doenças e danos –
Teses. 8. Análise discriminante – Teses. 9. Mínimos quadrados – Teses. I.
Almeida, Mariana Ramos de, Orientadora. II. Sena, Marcelo Martins de,
Coorientador. III. Título.

CDU 043



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS



"Emprego da Espectroscopia no Infravermelho Próximo e Quimiometria na Avaliação de Grãos de Sorgo para a Produção de Ração Animal"

Vinicius Fernandes Salvo

Dissertação aprovada pela banca examinadora constituída pelos Professores:

Profa. Mariana Ramos de Almeida - Orientadora
UFMG

Prof. Marcelo Martins de Sena - Coorientador
UFMG

Profa. Maria Lúcia Ferreira Simeone
EMBRAPA

Prof. Bruno Gonçalves Botelho
UFMG

Belo Horizonte, 17 de dezembro de 2025.



Documento assinado eletronicamente por **Mariana Ramos de Almeida, Professora do Magistério Superior**, em 17/12/2025, às 11:41, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Bruno Gonçalves Botelho, Professor do Magistério Superior**, em 22/12/2025, às 15:34, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Marcelo Martins de Sena, Professor do Magistério Superior**, em 22/12/2025, às 16:14, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Maria Lúcia Ferreira Simeone, Usuária Externa**, em 30/12/2025, às 11:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **4824211** e o código CRC **225A4724**.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, antes de tudo, a Deus e à espiritualidade que me guia, pela luz, proteção e presença nos momentos mais difíceis.

À prof.^a Dr.^a Mariana Ramos de Almeida, sou imensamente grato por todo o cuidado e apoio que me ofereceu ao longo desta trajetória de trabalho e estudos. Sua compreensão e dedicação não apenas como orientadora, mas como pessoa, foram fundamentais para mim.

Ao coorientador prof.^o Dr.^o Marcelo Martins de Sena, agradeço pelo apoio e pelo tempo que dedicou à construção deste trabalho. Sua orientação foi essencial para o meu desenvolvimento e aprendizado.

À prof.^a Dr.^a Denise Sande, minha professora da graduação e uma biomédica inspiradora, agradeço por ser fonte constante de inspiração. Sua presença em minha trajetória ao longo desses anos significam muito para mim.

Ao Departamento de Química da UFMG e ao meu grupo de pesquisa GQQATE, agradeço a oportunidade de aprendizado e crescimento.

Aos meus familiares, que, sinceramente, não têm ideia do que seja um mestrado, mas que sempre falam com tanto orgulho dos meus estudos, agradeço do fundo do meu coração. Ser o primeiro da família a ter uma graduação é uma honra que carrego com muito amor e gratidão.

Por fim, agradeço aos meus líderes do trabalho, que não apenas me incentivaram, mas também me proporcionaram todo o suporte necessário para que eu pudesse conciliar o trabalho e o mestrado.

“As dificuldades preparam pessoas comuns para destinos extraordinários.”

C.S. Lewis

RESUMO

Este trabalho investigou o uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) combinada com modelos de classificação multivariada para desenvolver um método de triagem capaz de distinguir grãos de sorgo (*Sorghum bicolor* (L.) Moench) infestados por insetos daqueles não infestados, com foco na produção de ração animal. A pesquisa foi motivada pela importância do sorgo como cereal de alto valor econômico e produtivo, utilizado na alimentação humana e na nutrição animal, e pela necessidade de métodos rápidos para detectar infestações iniciais na pós-colheita. Foram analisadas 101 amostras de grãos de sorgo infestadas com insetos adultos não sexados da espécie *Sitophilus zeamais*, mantidas por períodos entre 7 e 70 dias, além de outras 95 amostras não infestadas, todas provenientes de diferentes cidades dos estados de Minas Gerais, Bahia e Goiás. Os espectros NIR foram coletados em um equipamento portátil e os dados espectrais foram empregados para a construção de modelos de classificação supervisionada baseado na análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) e na modelagem independente flexível por analogia de classe (SIMCA). O modelo PLS-DA apresentou melhor desempenho com sensibilidade de 94,1%, especificidade de 100%, concordância e acórdância de 100% para o conjunto teste. Os resultados obtidos mostram que a combinação entre espectroscopia NIR e análise quimiométrica representa uma alternativa eficaz, rápida, econômica e não destrutiva para detectar infestações em grãos de sorgo, contribuindo para a preservação da qualidade dos grãos armazenados.

Palavras-chave: NIR; grãos de sorgo infestados; triagem não destrutiva; *Sitophilus zeamais*; análise discriminante de mínimos quadrados parciais (PLS-DA).

ABSTRACT

This study investigated the use of near-infrared (NIR) spectroscopy combined with multivariate classification models to develop a screening method capable of distinguishing sorghum grains (*Sorghum bicolor* (L.) Moench) infested by insects from non-infested grains, with a focus on animal feed production. The research was motivated by the importance of sorghum as a cereal of high economic and productive value, used in human food, animal nutrition, and by the need for rapid methods to detect early post-harvest infestations. A total of 101 sorghum grain samples infested with unsexed adult insects of the species *Sitophilus zeamais*, maintained for periods ranging from 7 to 70 days, were analyzed, along with 95 non-infested samples, all originating from different cities in the states of Minas Gerais, Bahia and Goiás. Spectra were collected using a portable NIR device, and the spectral data were used to build supervised classification models based on PLS-DA (partial least squares discriminant analysis) and SIMCA (soft independent modeling of class analogy). The PLS-DA model showed better performance, with 94.1% sensitivity, 100% specificity, 100% concordance, and 100% accordance for the test set. The results demonstrate that combining spectroscopy with chemometric analysis provides an effective, rapid, economical, and non-destructive alternative for detecting infestations in sorghum grains, contributing to the preservation of the quality of stored grains.

Key-words: NIR; infested sorghum grains; non-destructive screening; *Sitophilus zeamais*; partial least squares discriminant analysis (PLS-DA).

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Tipos de sorgos.....	18
Figura 2 - Estrutura do grão de sorgo	20
Figura 3 - Produção de grãos de sorgo no Brasil	22
Figura 4 - Sitophilus zeamais adulto	26
Figura 5 - Macho de Sitophilus zeamais (A); fêmea de Sitophilus zeamais (B)	26
Figura 6 - Vial de vidro com sorgo não infestados (A); Vial de vidro com sorgo infestados 70 dias (B).....	42
Figura 7 - Suporte 3D (A); Suporte acoplado ao espectrofotômetro (B).....	43
Figura 8 - Espectros NIR brutos (A) e pré-processados com SNV combinado à primeira derivada e à suavização de Savitzky-Golay - janela de 15 pontos e polinômio de segunda ordem (B).....	46
Figura 9 - Modelo PCA construídos com espectros NIR pré-processados. Gráfico de escores de CP1 versus CP2. Os triângulos invertidos vermelhos (▼) são as amostras de sorgos infestadas e os não infestados são representados pelo asterisco verde (✱)	48
Figura 10 - Gráfico de pesos da CP2 do modelo PCA.....	49
Figura 11 - Previsões do modelo PLS-DA para discriminar amostras de grãos infestados (triângulos invertidos vermelhos, ▼) e não infestados (asteriscos verdes, ✱). A linha horizontal vermelha indica o limite estimado	51
Figura 12 – Probabilidade de classificação das amostras de grãos infestados (triângulos invertidos vermelhos, ▼), amostras de grãos não infestados (asteriscos verdes, ✱).....	52
Figura 13 - Gráfico dos VIP Escores obtido no modelo PLS-DA para discriminar as amostras de grãos de sorgo infestados e não infestados.....	54
Figura 14 - Vetor de coeficientes de regressão do modelo PLS-DA	55
Figura 15 - Previsões do modelo SIMCA, asteriscos verdes (✱) representam a classe não infestada e triângulo invertido vermelho (▼) a classe infestada	57

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Produção de grãos de sorgo mundialmente 2024/ 2025.....	21
Tabela 2 - Resultados da aplicação de diferentes combinações de pré- processamento espectral na otimização do modelo PLS-DA, com base nas taxas de classificação correta.	50
Tabela 3 - FOM qualitativo estimado para o modelo PLS-DA.	52
Tabela 4 - Desempenho do modelo SIMCA em função das diferentes combinações de pré-processamento espectral aplicadas durante sua otimização.	56

LISTA DE ABREVIATURAS

ACO – Acordância

AOAC – *Association of Official Analytical Chemists* (Associação de Químicos Analíticos Oficiais)

CARS-SPA-LR – *Competitive Adaptive Reweighted Sampling – Successive Projections Algorithm – Linear Regression* (Amostragem Adaptativa Competitiva – Algoritmo de Projeções Sucessivas – Regressão Linear)

CON – Concordância

CONAB – Companhia Nacional de Abastecimento

CP – *Principal Component* (Componente principal)

EFC – Eficiência

EMBRAPA – Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária

ESP – Especificidade

FAO – *Food and Agriculture Organization of the United Nations* (Organização das Nações Unidas para Alimentação e a Agricultura)

FN – Falso negativo

FOM – *Figures of Merit* (Figuras de Mérito)

FP – Falso positivo

GC-FID – *Gas Chromatography With Flame Ionization Detection* (Cromatografia gasosa e detecção por ionização de chama)

GC-MS – *Gas Chromatography-Mass Spectrometry* (Cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas)

MSC – *Multiple Scatter Correction* (Correção do Espalhamento Multiplicativo)

NIR – *Near Infrared Spectroscopy* (Espectroscopia no infravermelho próximo)

OCPLS – *One-Class Partial Least Squares* (Mínimos Quadrados Parciais de Classe Única)

PCA – *Principal Component Analysis* (Análise de Componentes Principais)

PCR – *Polymerase Chain* (Reação em Cadeia da Polimerase)

PLS-DA – *Partial Least Squares Discriminant Analysis* (Análise Discriminante por Mínimos Quadrados Parciais)

PNAS – Polissacarídeos Não Amiláceos

RMSEP – *Root Mean Square Error of Prediction* (Raiz do Erro Quadrático Médio de Previsão)

RPD – *Ratio of Performance to Deviation* (Razão de Desempenho do Desvio)

SEN – Sensibilidade

SIMCA – *Soft Independent Modeling of Class Analogies* (Modelagem Independente Suave de Analogia de Classe)

SNV – *Standart Normal Variation* (Variação Normal Padrão)

SPME – *Solid Phase Microextraction* (Microextração em Fase Sólida)

USDA – *United States Department of Agriculture* (Departamento de Agricultura dos Estados Unidos)

VIP Scores – *Variable Importance in Projection Scores* (Importância das Variáveis na Projeção dos Escores)

VL – Variável latente

VN – Verdadeiro negativo

VP – Verdadeiro positivo

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
2	CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DA LITERATURA.....	17
2.1	SORGO	17
2.1.1	ASPECTOS GERAIS	17
2.1.2	ESTRUTURA E COMPOSIÇÃO DO GRÃO.....	19
2.1.3	PRODUÇÃO MUNDIAL E NO BRASIL	21
2.1.4	USO NA ALIMENTAÇÃO	23
2.1.5	QUALIDADE DOS GRÃOS DE SORGO GRANÍFEROS ARMAZENADOS	25
2.2	ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO	27
2.3	QUIMIOMETRIA.....	29
2.3.1	PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS.....	30
2.3.2	ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS (PCA)	32
2.3.3	ANÁLISE DISCRIMINANTE POR MÍNIMOS QUADRADOS PARCIAIS (PLS-DA).....	33
2.3.4	MODELAGEM INDEPENDENTE SUAVE DE ANALOGIA DE CLASSE (SIMCA)	35
2.3.5	VALIDAÇÃO DE MODELOS DE CLASSIFICAÇÃO MULTIVARIADA	36
2.4	APLICAÇÕES DA NIRS E QUIMIOMETRIA NA IDENTIFICAÇÃO DE INFESTAÇÃO EM GRÃOS	38
3	OBJETIVOS.....	40
3.1	OBJETIVO GERAL	40
3.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	40
4	PARTE EXPERIMENTAL	41
4.1	AMOSTRAS DE SORGO E INFESTAÇÃO	41
4.2	EQUIPAMENTOS E <i>SOFTWARES</i>	42
4.3	AQUISIÇÃO DOS ESPECTROS NIR	42
4.4	ANÁLISE MULTIVARIADA DE DADOS	43
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	45
5.1	ESPECTROS NIR DAS AMOSTRAS DE SORGO INFESTADAS E NÃO INFESTADAS.....	45
5.2	ANÁLISE EXPLORATÓRIA	47
5.3	MODELO PLS-DA.....	49

5.4 MODELO SIMCA	55
6 CONCLUSÕES.....	59
REFERÊNCIAS.....	60

1 INTRODUÇÃO

O sorgo é considerado um dos cereais mais importantes do mundo, ocupando o patamar de quinto cereal em produção mundial, após o trigo, o arroz, o milho e a cevada, sendo cultivado em regiões tropicais e semiáridas, e o quarto no *ranking* da produção brasileira. Na América do Sul, o Brasil e a Argentina, foram os principais produtores de sorgo nos últimos anos (Food And Agriculture Organization Of The United Nations, 2019).

Amplamente empregado na alimentação, na produção de ração e de etanol, esse cereal tem a maior parte da sua produção destinada à alimentação animal em países como Austrália, Estados Unidos e Brasil. Quantidades menores são utilizadas na alimentação humana, principalmente em países africanos e asiáticos, fornecendo uma fonte de energia dietética, proteínas, vitaminas e minerais para a população (Waniska; Rooney; Mcdonough, 2016).

Este cereal, valorizado por suas propriedades nutricionais, tem sido fundamental na formulação de dietas sem glúten para indivíduos com doença celíaca ou com intolerância ao glúten (Taylor; Schober; Bean, 2006; Ferreira *et al.*, 2016). Estudos correlacionam o consumo deste cereal a uma série de benefícios à saúde, incluindo digestibilidade lenta, diminuição dos níveis de colesterol, presença de antioxidantes, propriedades anti-inflamatórias e anticarcinogênicas (Dykes *et al.*, 2011).

Na alimentação animal, o grão de sorgo é uma alternativa ao milho, com um custo médio em torno de 25% menor. Seu valor biológico, em termos de energia metabolizável, atinge 95% do valor do milho. Devido às suas características nutricionais, o sorgo tem sido pesquisado como um ingrediente energético alternativo ao milho, representando uma opção importante para o fornecimento no mercado de grãos (Menezes *et al.*, 2021). Portanto, a necessidade de avaliar a qualidade e integridade dos grãos deste cereal tem se intensificado, tornando-se um requisito crucial para sua aplicação.

A Comissão Codex Alimentarius (norma Codex 172-1989) estabelece os parâmetros de qualidade do sorgo (Codex Alimentarius Commission, 1995), incluindo recomendações sobre as condições de higiene para o armazenamento, que são essenciais para manter os padrões de qualidade e evitar a infestação de insetos,

considerada um dos fatores mais importantes de degradação dos grãos (Codex Alimentarius Commission, 1995).

A cada ano, danos causados por insetos e roedores resultam na perda de aproximadamente 10% a 30% da produção mundial de grãos (Singh *et al.*, 2010). Esses danos não apenas reduzem o peso e os nutrientes dos grãos, mas também aumentam a suscetibilidade à contaminação por fragmentos de fungos e insetos, bem como seus subprodutos metabólicos (Mishra *et al.*, 2018).

Os cereais desempenham um papel fundamental como fonte primária de alimento e insumo para a criação de animais (Scolari, 2006). Isso ressalta a importância de evitar perdas econômicas por meio da prevenção de infestações e outros contaminantes na pós-colheita. No entanto, apesar dos esforços na prevenção, as infestações por insetos podem levar a perdas significativas de grãos durante o armazenamento. Diante deste fato, métodos de análise rápida, simples e eficazes são essenciais para detectar a presença de insetos em grãos, especialmente se eles foram armazenados previamente em condições inadequadas (Lorini, 2018).

Existem muitos métodos disponíveis usados para detectar infestação de insetos em grãos, sendo os mais utilizados a inspeção manual, peneiramento e funil de Berlese (Neethirajan *et al.*, 2007). No entanto, esses métodos são trabalhosos, demorados e pouco eficientes, pois não conseguem detectar infestações internas de insetos na fase de larvas e pupa (Singh *et al.*, 2010).

A Portaria MAPA nº 268/1984 estabelece o padrão oficial de classificação do sorgo no Brasil ao definir as classes do produto segundo a cor predominante dos grãos e ao fixar quatro tipos baseados em limites de defeitos, como avariados, ardidos, brotados, carunchados, impurezas, fragmentos e matérias estranhas, além da umidade máxima. A norma também institui as categorias “abaixo do padrão”, aplicável quando os limites do tipo 4 são excedidos, e “desclassificado”, destinada a produtos com deterioração grave ou características que comprometem seu uso. Dessa forma, a portaria visa a padronização da avaliação da qualidade do sorgo, promovendo uniformidade nos procedimentos de comercialização e armazenamento em todo o país.

Métodos instrumentais, como ensaios imunoenzimáticos (ELISA) (Atui *et al.*, 2007; Dunn *et al.*, 2008), reação em cadeia da polimerase (PCR) (Solà; Riudavets; Agustí, 2018), microextração em fase sólida (SPME) acoplada à cromatografia gasosa

e detecção por ionização de chama (GC-FID) e cromatografia gasosa acoplada à espectrometria de massas (GC-MS) (Niu *et al.*, 2016), são utilizados para identificar a infestação de insetos em grãos por meio de marcadores químicos associados à presença do inseto ou aos compostos liberados durante a deterioração do grão. Em contraste, métodos de imagens hiperespectrais (Singh *et al.*, 2010; Kaliramesh *et al.*, 2013; Chelladurai *et al.*, 2014) e imagens de raios X (Atui *et al.*, 2007; Chelladurai *et al.*, 2014; Karunakaran; Jayas; White, 2003), detectam a infestação pela visualização direta do inseto ou pela identificação de danos internos característicos. Apesar de eficazes, essas técnicas podem ser trabalhosas, destrutivas, consumir solventes, gerar resíduos e apresentar custos elevados de análise (Santos, *et al.*, 2019).

Uma alternativa para uma detecção simples, rápida, não destrutiva, não invasiva e ambientalmente correta (sem consumo de reagentes/solventes nem geração de resíduos) é baseada no uso da espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS) combinada com análise multivariada. A NIRS tem sido utilizada para avaliar a qualidade geral de muitos grãos de cereais e para determinar sua composição química (Santos, *et al.*, 2019). Apesar da relevância, apenas uma quantidade limitada de estudos explorou a aplicação de técnicas analíticas diretas e rápidas para identificar infestações de insetos em grãos e outros produtos agrícolas.

Atualmente, a indústria de alimentos, especialmente a voltada à nutrição animal, depende de métodos eficazes para garantir qualidade e reduzir perdas. Para atender a essa necessidade, este trabalho traz contribuições para resolver um problema atual nas indústrias de alimentação animal, desenvolvendo um método rápido, não destrutivo e não invasivo, através da NIRS e da quimiometria, para discriminar grãos de sorgo infestados de não infestados utilizados na produção/desenvolvimento de ração animal, com utilização de um espectrômetro NIR portátil, que permite aplicações *in loco*.

Esta dissertação está organizada em seis seções: Introdução, Conceitos Gerais e Revisão da Literatura, Objetivos, Parte Experimental, Resultados e Discussão e Conclusões, além das Referências que fundamentam o trabalho.

2 CONCEITOS GERAIS E REVISÃO DA LITERATURA

2.1 Sorgo

2.1.1 Aspectos gerais

O sorgo (*Sorghum bicolor* (L.) Moench) é um cereal com alto potencial produtivo e econômico. Sua origem é atribuída ao continente africano, especificamente à África Oriental, que é considerada o berço de muitas gramíneas, incluindo os diversos tipos de sorgos existente hoje. Muitos estudos sugerem que o sorgo pode ter se originado na Abissínia, atualmente conhecida como Etiópia, que é o centro de várias culturas comerciais, como o milheto (*Pennisetum glaucum*), o café (*Coffea robusta*) e a mamona (*Ricinus communis*) (Das; Lima, 2020).

O cereal é cultivado mundialmente, servindo de alimento básico para milhões de pessoas em cerca de 30 países da África e da Ásia. Embora desempenhe papel essencial na segurança alimentar dessas regiões, a maior parte da produção global, especialmente nos países ocidentais, é destinada à alimentação animal (Khoddami *et al.*, 2023). No Brasil, o sorgo granífero é cultivado principalmente para esse fim, sendo uma fonte relevante de proteína na dieta de aves, suínos e bovinos (Menezes *et al.*, 2020).

O sorgo pertence à família Poaceae e ao gênero *Sorghum*, sendo cultivado principalmente na forma da espécie *Sorghum bicolor* (L.) Moench. Essa espécie é uma planta C4 autopolinizada, destacando-se por sua elevada eficiência fotossintética (Gomez-Martinez; Culham, 2000; Goyal *et al.*, 2020). A via fotossintética, é altamente eficiente em condições de alta luminosidade e temperaturas elevadas, minimizando a fotorrespiração e otimizando o uso de água, sendo uma vantagem adaptativa em climas quentes e secos (Akman *et al.*, 2021).

Além de tolerar a seca, o sorgo também resiste a temperaturas baixas, entre 12 e 15 °C, e condições de solo encharcado por curtos períodos, desenvolvendo-se inclusive em áreas de alta pluviosidade (Lim, 2012). Essa ampla adaptabilidade permite seu cultivo em regiões áridas e semiáridas da África Subsaariana, Ásia, Oriente Médio, América Central e do Norte e na Austrália (Wagaw, 2019).

O sorgo é classificado em seis tipos comerciais distintos: granífero, forrageiro, sacarino, vassoura, pastejo e biomassa. O sorgo granífero, foco deste estudo, apresenta porte baixo a médio, entre 1,2 e 1,5 metros, e tem como principal produto os grãos localizados na panícula, utilizados principalmente na alimentação. O sorgo forrageiro, com porte médio a alto, variando de 2 a 3 metros, é amplamente utilizado para corte e pastejo. O sorgo sacarino, semelhante à cana-de-açúcar, possui colmos suculentos ricos em açúcares fermentescíveis, sendo empregado na produção de etanol de primeira geração. O sorgo vassoura, como o nome indica, é utilizado na fabricação de vassouras, devido às características de suas panículas, que são laxas, com ráquis curtas e longas. O sorgo pastejo possui muitas folhas, panículas com poucas sementes, elevada produção de forragem e é uma excelente alternativa para o verão. Por fim, o sorgo biomassa, surge como uma alternativa viável para fornecer matéria prima ao setor de bionergia, tanto na forma de biocombustível líquido, quanto na produção de etanol de segunda geração (Figura 1) (Pereira Filho e Rodrigues, 2015; Almeida *et al.*, 2019).



Figura 1 - Tipos de sorgos. Fonte: Menezes, C. B. de (2021)

Amplamente adaptável, o sorgo cresce em diferentes altitudes, variações climáticas, níveis de precipitação e temperaturas. Por essa razão, trata-se de uma cultura que prospera em diversas regiões, mesmo sob condições adversas (Akman *et al.*, 2021; Lim, 2012).

2.1.2 Estrutura e composição do grão

A cariopse de sorgo em geral é essencialmente composta por três partes: pericarpo, endosperma e gérmen (Rooney; Rooney; Serna-Saldivar, 2016), como mostrado na Figura 2. O pericarpo, tegumento externo que representa de 3% a 6% da massa do grão, subdivide-se em epicarpio, mesocarpo (que pode conter amido) e endocarpo; sua espessura influencia o processamento e a coloração, devido à presença de pigmentos e taninos (Sedghi *et al.*, 2012). A testa, camada intermediária localizada abaixo do endocarpo, apresenta variação genética quanto à pigmentação e também contém taninos (Wu *et al.*, 2012). O endosperma, principal tecido de armazenamento (84% a 90% dos grãos), inclui a camada de aleurona (rica em minerais, enzimas e lipídeos) e as zonas periférica, córnea e farinácea, compostas por grânulos de amido e matriz proteica; sua proporção é determinante para a textura e digestibilidade (Reichert; Youngs; Oomah, 1982). Por fim, o gérmen (5% a 10% do grão), eixo embrionário formado por radícula, plúmula e escutelo, é rico em óleo, proteínas e minerais (Rooney; Rooney; Serna-Saldivar, 2016; Waniska; Rooney, 2000).

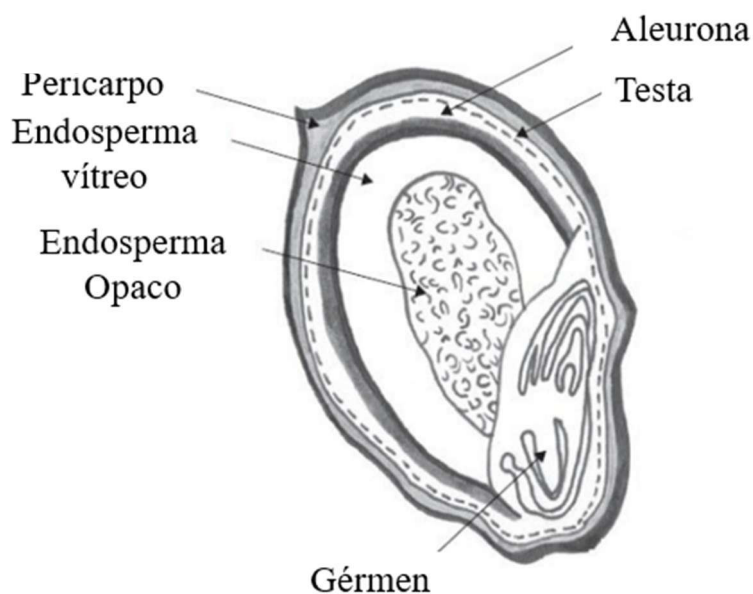


Figura 2 - Estrutura do grão de sorgo. Fonte: Adaptado de Arendt e Zannini, (2013)

A composição do grão de sorgo revela um cereal com potencial nutricional e funcional. Os carboidratos, principal componente energético, são compostos pelo amido (55,6% a 70,0% do peso seco), cuja digestibilidade é influenciada pela estrutura e proporção de amilose e amilopectina (Khan *et al.*, 2013; Sang *et al.*, 2008; Sikabubba, 1989). O teor de açúcares livres é baixo (1% a 2%) (Shin, 1986), e os polissacarídeos não amiláceos (PNAs) contribuem para a resistência estrutural dos carboidratos presentes no grão (Hoseney, 1984). As proteínas (7% a 15%), concentradas no endosperma, são predominantemente kafirinas (50% a 80%). A sua digestibilidade, embora relativamente baixa, pode ser aprimorada por processamento (Axtell *et al.*, 1981; Maclean *et al.*, 1983), mas não formam massa viscoelástica para panificação (Taylor; Dewar, 2001). O sorgo contém cerca de 3% de lipídeos, localizados principalmente no escutelo, e é fonte de vitaminas, como β -caroteno e tocoferóis, e minerais (magnésio, ferro, zinco, cálcio, fósforo e potássio), embora a decorticação possa reduzir esses micronutrientes (Dykes; Rooney, 2006; Martino *et al.*, 2012; Anglani, 1998). Por fim, os compostos fenólicos presentes no grão como os flavanoides, ácidos fenólicos e taninos, apresentam propriedades antioxidantes e potenciais benefícios à saúde, como prevenção de doenças cardiovasculares,

redução de inflamação e menos incidência de câncer e diabetes (Awika, 2003; Dai; Mumper, 2010; Zhang *et al.*, 2011; Scalbert *et al.*, 2005).

2.1.3 Produção mundial e no Brasil

O sorgo é uma cultura de grande relevância econômica e social. A produção mundial tem apresentado crescimento, e os principais países produtores são os Estados Unidos, Nigéria e o Brasil. O Brasil está entre os três maiores produtores de sorgo do mundo (Tabela 1) (USDA, 2025).

Tabela 1 - Produção de grãos de sorgo mundialmente 2024/ 2025.

País	Produção de sorgo (1000 toneladas métricas)
	2024–2025
EUA	8.734
Nigéria	6.417
Brasil	6.102
Índia	6.000
México	4.200

Fonte: USDA, 2025

No Brasil, os principais estados produtores são Goiás, Minas Gerais, São Paulo e Mato Grosso do Sul. Destaca-se o estado de Goiás, que lidera a produção nacional, seguido por Minas Gerais e São Paulo (IBGE, 2023), conforme ilustrado na Figura 3.

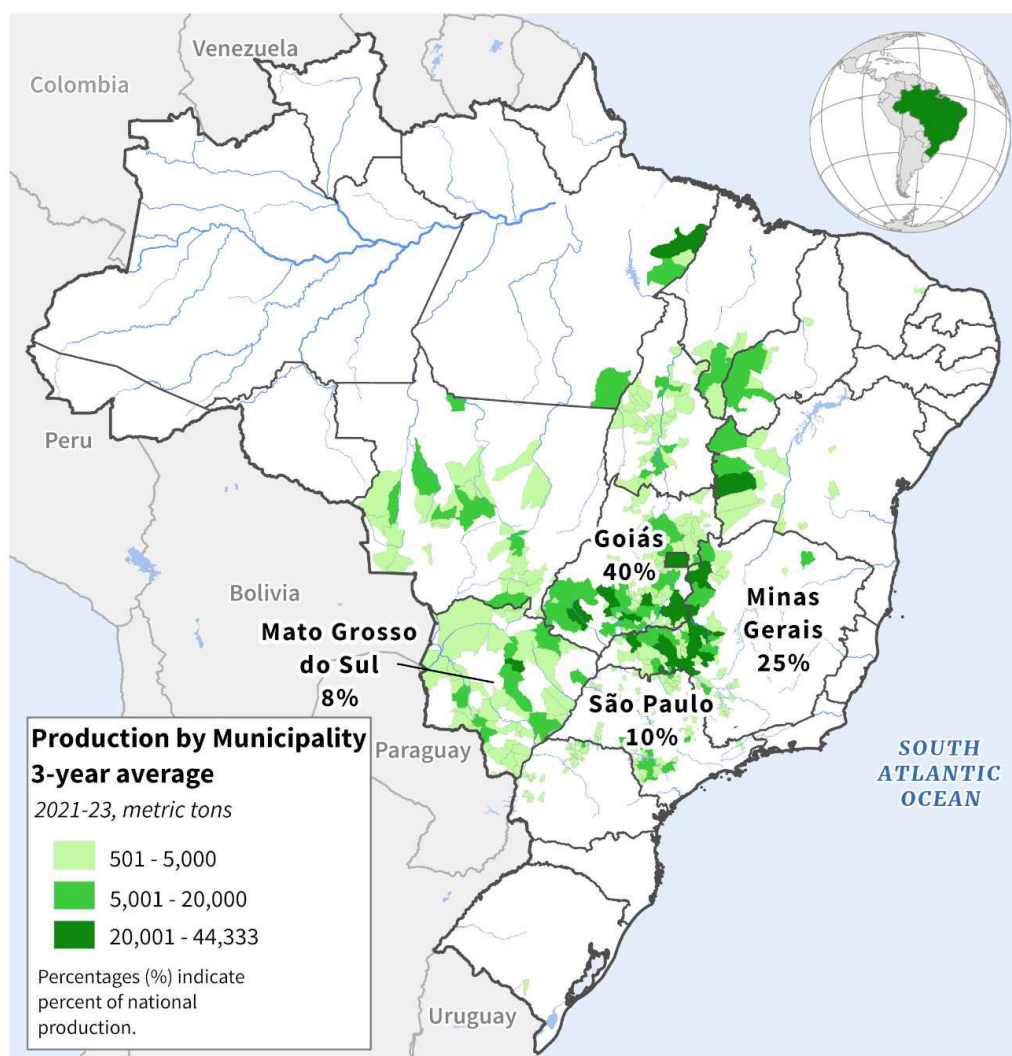


Figura 3 - Produção de grãos de sorgo no Brasil. Fonte: IBGE (2023) - Produção Agrícola Municipal

A área destinada ao plantio do sorgo granífero, cultivado para a produção de grãos, tem aumentado nos últimos anos. Em 2021, foram registrados 979 mil hectares destinados ao cultivo, e em 2024, esse número chegou a 1,5 milhão de hectares e o país atingiu uma produção de 5 milhões de toneladas na safra (CONAB, 2024).

A área dedicada ao cultivo do sorgo, tem apresentado crescimento significativo no país. Parte do crescimento recente da cultura do sorgo granífero no Brasil pode ser devido aos impactos das mudanças climáticas e ao aumento da incidência de enfezamentos na cultura do milho. Outro fator relevante é o fortalecimento da cadeia produtiva, impulsionado pelo maior interesse de empresas do setor em adquirir sorgo para uso na alimentação animal (Menezes *et al.*, 2021). A constituição química do sorgo por ser muito semelhante à do milho, o torna principal substituto do cereal na

segunda safra. Além disso, o sorgo apresenta mecanismos fisiológicos que conferem maior resistência a condições climáticas adversas, favorecendo seu cultivo em ambientes onde o milho se torna mais vulnerável.

2.1.4 Uso na alimentação

O sorgo granífero representa uma excelente alternativa ao milho devido às suas características nutricionais e ao potencial de redução dos custos da ração, como evidenciado em estudos anteriores (Fernandes *et al.*, 2014; McCuistion *et al.*, 2019). Esse cereal se destaca como fonte energética em rações animais por apresentar maior concentração de amido, fornecendo aproximadamente 95% da energia metabolizável do milho para aves e galinhas e 100% para suínos, porcas e ruminantes (Rostagno *et al.*, 2024). Além disso, ele apresenta menor susceptibilidade à contaminação por micotoxinas (Weber *et al.*, 2018), contribuindo para a segurança alimentar dos animais. A utilização de grãos de sorgo na dieta animal, não gera prejuízos ao desempenho zootécnico e permite aos produtores aumentarem seus lucros pela redução do custo final (Fernandes *et al.*, 2014; Carvalho *et al.*, 2015). Esses fatores têm impulsionado a comercialização de grãos de sorgo no mercado de alimentação animal.

O uso de grãos de sorgo na ração para aves permite rendimento equivalente na produção de carnes e ovos em comparação com a ração à base de milho, devido à similaridade da composição nutricional. Aves alimentadas com sorgo sem taninos, proporcionam desempenho e rendimento de carcaça equivalentes aos alimentados com dieta à base de milho, o que viabiliza sua substituição total (Scheuermann, 1998; Fernandes *et al.*, 2014), podendo o grão ser ofertado inteiro ou moído.

Na alimentação de suínos, o sorgo granífero pode substituir totalmente o milho, promovendo desempenho semelhante ou superior (Rostagno *et al.*, 2024), com estudos indicando até 6% de ganho de peso na fase de terminação. A moagem fina dos grãos de sorgo é essencial para a digestibilidade, evitando a eliminação de grãos não digeridos. Comparando a alimentação de suínos com milho e sorgo, a ração à base de sorgo influencia positivamente na qualidade da carne, resultando em gordura mais firme e melhor qualidade da carcaça (Benz *et al.*, 2010).

Na alimentação de ruminantes, o grão de sorgo pode ser incluído na dieta sem prejuízo ao desempenho produtivo, com valor energético de 95% a 100% do milho (Valadares Filho *et al.*, 2006; Igarasi *et al.*, 2008). No entanto, o processamento adequado é essencial para garantir a eficiência da digestibilidade do alimento, pois o amido do sorgo possui um envoltório proteico que dificulta a digestão. Técnicas como moagem, silagem de grãos úmidos e floculação são utilizadas para melhorar a digestibilidade, palatabilidade e aproveitamento dos nutrientes (Owens *et al.*, 1997).

O sorgo também tem se mostrado um ingrediente promissor na alimentação de animais de estimação. Estudos indicam que o sorgo integral pode ser utilizado de forma equivalente ao milho integral, com índices semelhantes de digestibilidade aparente da matéria seca, matéria orgânica, proteína bruta e gordura em hidrólise ácida. Por exemplo, o sorgo integral apresentou 86,43% da matéria seca, matéria orgânica 87,48%, proteína bruta 71,01% e gordura em hidrólise ácida de 86,88%, sem diferenças significativas em relação ao milho, que apresentou matéria seca de 86,28%, matéria orgânica 87,19%, proteína bruta 73,28% e gordura em hidrólise ácida de 88,72% (Duarte *et al.*, 2006). No entanto, o processo de extrusão, comum na fabricação de rações pets, melhora a digestibilidade da proteína do sorgo (Fapojuwo *et al.*, 1987), apesar da digestão do amido do sorgo ser mais lenta que a do milho (Borges, 2002), a extrusão otimiza sua utilização.

Na alimentação humana, o uso do sorgo tem se intensificado em razão da ausência de glúten na sua composição, característica que o torna segura para indivíduos celíacos, além de apresentar sabor neutro e elevado teor de compostos bioativos, como antocianinas e ácidos fenólicos. Esses compostos exercem ação antioxidante capazes de eliminar radicais livres e modular vias de sinalização associadas à prevenção de doenças crônicas não transmissíveis, incluindo obesidade, inflamação, câncer, doenças cardiovasculares e diabetes (Yang *et al.*, 2012; Girard; Awika, 2018). A presença de taninos e de altos níveis de fenóis totais reforça essa capacidade antioxidante, atributo valorizado na formulação de alimentos funcionais e isentos de glúten. Pesquisas da Embrapa Milho e Sorgo buscam identificar genótipos com maiores concentrações desses compostos a fim de atender à demanda crescente por ingredientes nutricionalmente superiores. Nesse contexto, o sorgo consolida-se como alternativa relevante para diversificar produtos alimentícios

e substituir o trigo em diferentes preparações, o que amplia seu potencial de uso na dieta humana (Silva *et al.*, 2025).

2.1.5 Qualidade dos grãos de sorgo graníferos armazenados

Uma vantagem dos grãos de sorgo é o armazenamento por longo período. No entanto, a qualidade está diretamente relacionada às condições de armazenamento, conforme observado por Elias *et al.* (2008), que ressaltam a influência da temperatura e da umidade sobre a integridade físico-química dos grãos. Ambientes quentes e úmidos aceleram a deterioração e, conseqüentemente, favorecem a proliferação de microrganismos e insetos-praga, comprometendo a qualidade do cereal, conforme apontado por Lorini *et al.* (2015). Estudos recentes reforçam essa relação e destacam que práticas como controle de umidade e monitoramento constante são fundamentais para a preservação da qualidade durante o armazenamento (Elias *et al.*, 2024)

Uma das principais pragas de grãos armazenados é o *Sitophilus zeamais* (Coleoptera: Curculionidae), conhecido como caruncho do milho, e o sorgo granífero está entre os cereais mais afetados. Esses insetos se desenvolvem e se alimentam no interior dos grãos, levando à redução da sua qualidade, e prejudicando a sua comercialização (Chuck-Hernández *et al.*, 2013, Mendes *et al.*, 2014; Lorini, 2018; Pimentel *et al.*, 2019). Os insetos adultos medem entre de 2,0 a 3,5 mm de comprimento, apresentam coloração castanho escura e manchas mais claras nos élitros (asas anteriores) (Figura 4). A cabeça é projetada para a frente, apresentando um rostro curvado, no macho mais curto e robusto (Figura 5 A), enquanto nas fêmeas mais longo e afilado (Figura 5 B) (Lorini; Schneider, 1994; Loeck, 2002). As larvas possuem coloração amarelo claro, com formato curculioniforme com a cabeça de cor marrom escura e as pupas brancas (Mound, 1989; Booth *et al.*, 1990).



Figura 4 - *Sitophilus zeamais* adulto. Fonte: Antunes, L. E. G., 2010.



Figura 5 - Macho de *Sitophilus zeamais* (A); fêmea de *Sitophilus zeamais* (B). Fonte: Antunes, L. E. G., 2010.

O desenvolvimento do *S. zeamais* ocorre totalmente no interior do grão, passando pelos estágios de ovo, larva, pupa e adultos. A fêmea perfura a casca do grão com seu rostró, deposita um único ovo e sela a abertura com um tampão gelatinoso, garantindo a proteção da progênie durante o desenvolvimento. O período de incubação do ovo varia de 3 a 7 dias, conforme as condições ambientais e as características físicas e químicas do grão. Após a eclosão, a larva ápoda alimenta-se do endosperma, atravessando quatro instares larvais ao longo de aproximadamente 22 dias. A cada muda, observa-se o aumento progressivo da cápsula cefálica, obedecendo à regra de Dyar, a qual descreve que, o crescimento da cabeça ocorre de maneira constante e proporcional entre os instares (Ojo; Omoloye, 2016).

Após os quatros instares larvais, o inseto entra na fase de pupa, que ocorre dentro da cavidade do grão e dura, em média, de 6 a 7 dias. Ao final desse processo, o adulto formado perfura a superfície do grão e emerge, completando seu ciclo de vida em aproximadamente 34 dias. Esse tempo de desenvolvimento pode ser prolongado em função da dureza do pericarpo e da presença de taninos nos grãos de sorgo, fatores que dificultam a oviposição e o desenvolvimento larval (Ojo; Omoloye, 2016).

Quanto ao controle do inseto em unidades de armazenamento, este começa na recepção, com a verificação da qualidade do grão, temperatura e presença de fungos ou contaminantes. Para garantir eficiência, realiza-se a limpeza completa do armazém e dos equipamentos, seguida da eliminação de frestas e possíveis abrigos. Em seguida, recomenda-se pulverizar ou nebulizar o ambiente e os equipamentos (Elias *et al.*, 2008). A principal estratégia de controle durante o armazenamento no Brasil é a aplicação de inseticidas, fumigantes ou protetores diretamente nos grãos; contudo, para o sorgo existem poucos produtos registrados (Brasil, 2003; Mendes *et al.*, 2014; Pimentel, 2015).

Técnicas complementares auxiliam na detecção e avaliação da infestação, como pré-limpeza, amostragens periódicas, observações visuais, armadilhas físicas e com feromônios, monitoramento da temperatura, análise por flotação, corantes ou raio-X (Loeck, 2002). Para a amostragem e identificação visual dos insetos, utilizam-se equipamentos como caladores, sondas, peneiras manuais e mecânicas (Elias *et al.*, 2008).

Quando chegam às indústrias de produção de ração, grãos infestados representam um sério problema, podendo causar perdas significativas na qualidade do produto final. Além da redução do valor nutricional, a presença de insetos e de suas impurezas pode comprometer a segurança alimentar e contaminar lotes inteiros. Esses prejuízos mostram a importância da identificação precoce da infestação em grãos.

2.2 Espectroscopia no Infravermelho Próximo

A Espectroscopia no Infravermelho Próximo (NIRS) é uma técnica analítica resultante da interação da radiação eletromagnética com os constituintes da amostra, na faixa de comprimento de onda de 750 a 2500 nm (13300 a 4000 cm^{-1}). A partir da

transferência de energia eletromagnética da radiação NIR para os sistemas vibracionais das moléculas é possível obter informações quantitativas e qualitativas sobre os grupos funcionais presentes na amostra. (Zareef *et al.*, 2020).

O espectro NIR de uma amostra pode ser obtido utilizando diferentes modos de aquisição, como a transmitância, reflectância difusa, transmitância difusa, interatância e transfectância. A escolha do modo de aquisição depende do tipo de amostra e de outros fatores, sendo o modo de reflectância difusa o mais utilizado, especialmente em análises diretas e não destrutivas. Neste modo, a radiação NIR incide sobre a amostra, penetra alguns microns, é parcialmente absorvida e a radiação não absorvida é refletida, coletada e analisada (Pasquini, 2018, 2003).

As bandas de absorção nos espectros NIR originam-se principalmente de sobretons e combinações de modos vibracionais, exigindo variação no momento de dipolo para que ocorra a absorção da radiação. A intensidade de uma determinada banda de absorção depende da mudança de dipolo durante a transição vibracional na região do infravermelho e do grau de anarmonicidade em grupos funcionais envolvendo o hidrogênio (elemento mais leve) e átomos como carbono, enxofre, nitrogênio e oxigênio (mais pesados), correspondendo a ligações, C-H, S-H, N-H, O-H (Pasquini, 2018, 2003).

Os espectros obtidos são complexos e auto correlacionados, geralmente inadequados para calibrações univariadas, pois raramente há um comprimento de onda seletivo, especialmente em amostras complexas. Os sinais observados no NIR apresentam ampla sobreposição, exigindo o uso de estatística multivariada, conhecida na química como Quimiometria. A espectroscopia no infravermelho próximo, associada a ferramentas quimiométricas possui grande simbiose e uma ampla gama de aplicações, da academia ao setor produtivo (Davies, 1998; Pasquini, 2003, 2018).

Com o avanço na instrumentação, surgiram espectrofotômetros portáteis, que oferecem vantagens como a realização de análises em diferentes locais, eliminando a necessidade de transporte da amostra ao laboratório. Isso contribui para maior eficiência no processo analítico, redução no consumo de energia, menores custos operacionais e sem o uso de reagentes.

Espectrofotômetros NIR portáteis têm apresentado resultados semelhantes aos obtidos por equipamentos de bancada, embora alguns desafios ainda devam ser

superados, como a menor resolução e a utilização de faixa espectral reduzida durante as medições (Crocombe, 2018). Ainda assim, estudos recentes indicam que a espectroscopia NIR é a técnica vibracional mais bem adaptada a equipamentos portáteis (Zhu *et al.*, 2022).

2.3 Quimiometria

Em 1971, o químico orgânico Svante Wold criou o termo “quimiometria”. No ano seguinte, em 1972, ele publicou o primeiro artigo que mencionava este termo. Dois anos depois, em colaboração com Bruce Kowalski, fundaram a *International Chemometric Society* (ICS), com o objetivo de fortalecer a conexão entre as áreas de química, matemática e estatística. Desde então, a quimiometria tem se expandido e sido aplicada em diversas áreas, facilitando a extração de informações relevantes de um conjunto de dados químicos para fins qualitativos ou quantitativos (Cornejo-Báez *et al.*, 2020).

Entre as técnicas quimiométricas, destacam-se os métodos de reconhecimento de padrões e calibração multivariada, amplamente utilizados no processamento de dados analíticos. Dos métodos de reconhecimento de padrões não supervisionados, a análise de componentes principais (PCA, do inglês *principal component analysis*) é a abordagem mais comum e fundamental, servindo de base para a compreensão de outros métodos quimiométricos. O propósito da PCA é identificar a presença ou ausência de algum agrupamento natural dentro do conjunto de dados analisado, sem utilizar informações previamente conhecidas (Kowalsky, 1975; Beeb, 1998; Hotelling, 1993).

As técnicas de reconhecimento de padrões supervisionados, como SIMCA (do inglês, *soft independent modeling of class analogy*) e PLS-DA (do inglês, *partial least square discriminant analysis*), são empregadas para atribuir amostras desconhecidas a categorias previamente definidas. Nesses métodos, informações sobre as categorias das amostras são fornecidas na etapa de treinamento do modelo, tornando a classificação supervisionada mais precisa e oferecendo uma abordagem sistemática para classificar novas amostras (Ferreira, 2015).

Em determinadas situações, é necessário aplicar técnicas de pré-processamento aos dados antes da análise quimiométrica. A escolha adequada do

método de pré-processamento é essencial para garantir a eficácia da aplicação quimiométrica.

2.3.1 Pré-processamento dos dados

O pré-processamento dos dados tem como objetivo reduzir a variabilidade aleatória, assim como as fontes de variação indesejadas que não estão ligadas à propriedade de interesse. Em análises espectroscópicas, especialmente em espectros na região do infravermelho próximo (NIR), são comuns variações sistemáticas indesejáveis, influenciadas por características físicas da amostra, como diferenças no tamanho e distribuição das partículas, além de variações na densidade. Essas interferências, devem ser eliminadas ou atenuadas, uma vez que a ausência de correlação com as propriedades químicas pode comprometer a capacidade preditiva dos modelos quimiométricos. Assim, a escolha de técnicas de pré-processamento contribui para minimizar os efeitos físicos e realçar os sinais químicos relevantes, favorecendo a construção de modelos mais robustos (Tibola *et al.*, 2018; Huang; Romero-Torres; Moshgbar, 2010).

Na espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), os principais métodos utilizados no pré-processamento dos dados são: alisamento/suavização do espectro, que é aplicado para reduzir ruídos; cálculo das derivadas, que é utilizado para corrigir desvios aditivos e multiplicativos no espectro; e a correção de linha base, que visa eliminar variações indesejadas (Ferreira, 2015; Sena *et al.*, 2017). Além disso, a correção do espalhamento multiplicativo (MSC, *multiplicative scatter correction*) e a variação normal padrão (SNV, *standard normal variate*), são frequentemente utilizadas para mitigar os efeitos de dispersão da luz em amostras sólidas (Engel *et al.*, 2013; Rinnan *et al.*, 2009). A centragem dos dados na média é utilizada para evidenciar as diferenças entre os espectros, garantindo que a estrutura dos dados seja preservada.

Em relação às ferramentas de alisamento, o filtro polinomial Savitzky-Golay é o mais utilizado. Este método ajusta um polinômio de uma determinada ordem aos dados dentro de uma janela com um número específico de pontos, realizando uma média ponderada desses pontos. Assim, a resposta alisada é obtida pelo valor do polinômio ajustado e é colocada no ponto central da janela. O filtro de Savitzky-Golay

depende integralmente do tamanho da janela selecionada e do grau do polinômio a ser aplicado, de modo que a alteração nesses parâmetros impacta significativamente o perfil do espectro alisado. Alisamentos realizados com polinômios de maior grau e janelas pequenas são recomendadas quando se deseja preservar a forma do espectro. Por outro lado, alisamentos com polinômios de menor grau, mas com janelas maiores, são aconselháveis quando a redução do ruído é mais importante do que manter a forma dos espectros (Ferreira, 2015).

As derivadas são ferramentas matemáticas úteis para ajustar o desvio da linha de base dos espectros, pois eliminam deslocamentos constantes e lineares, além de resolver sobreposições de picos, permitindo uma melhoria na resolução dos picos presentes nos sinais originais. A primeira derivada é utilizada para remover desvios aditivos da linha de base, enquanto a segunda derivada elimina também efeitos multiplicativos (Manley; Baeten, 2018; Tibola *et al.*, 2018). Ferramentas de pré-processamento espectral podem aplicar simultaneamente a derivada e a suavização pelo método de Savitzky-Golay porque esse procedimento ajusta, em cada janela móvel, um polinômio aos pontos do espectro. A partir desse ajuste, obtêm-se tanto os valores suavizados quanto as derivadas, o que reduz ruídos de alta frequência, corrige variações de linha de base e realça características espectrais relevantes.

O MSC é um método empregado para corrigir problemas relacionados ao espalhamento de luz resultantes de fenômenos físicos. A normalização MSC é obtida por meio de regressão linear, que estima os coeficientes linear e angular entre o espectro médio e o espectro que precisa ser corrigido. O espectro corrigido é calculado pela subtração do coeficiente linear de cada comprimento de onda original (para corrigir os efeitos aditivos) e, em seguida, divide-se este valor pelo coeficiente angular (para corrigir os efeitos multiplicativos) (Ferreira, 2015; Tibola *et al.*, 2018).

A correção por SNV apresenta similaridades com o MSC, já que ambos os métodos atuam eliminando os efeitos multiplicativos e interferências de espalhamento. Entretanto, enquanto o MSC requer um espectro médio como parâmetro, o SNV funciona pela normalização de cada espectro pelo seu respectivo desvio padrão (Oliveri; Simonetti, 2016; Manley; Baeten, 2018).

No método de centragem dos dados na média (*mean center*) o valor médio é calculado para cada variável, e a partir disso, é subtraído para cada elemento da respectiva coluna. Cada variável passa a ter uma média igual a zero, ou seja, o centro

das coordenadas é deslocado da sua posição natural para a média multivariada dos dados (Tibola *et al.*, 2018).

A escolha adequada dessas técnicas é fundamental, pois um pré-processamento dos dados inadequado pode eliminar informações relevantes, prejudicando a qualidade do modelo quimiométrico (Ferreira, 2015; Sena *et al.*, 2017).

2.3.2 Análise de componentes principais (PCA)

A análise de componentes principais (PCA) é considerada um método exploratório e não supervisionado, ou seja, utiliza exclusivamente as características dos dados químicos para obter as informações sobre o comportamento das amostras. Essa abordagem é empregada para extrair informações de dados ao projetá-los em um espaço reduzido, diminuindo a dimensionalidade do espaço original do conjunto de dados sem comprometer as relações entre as amostras e mantendo a maior parte da variância (Ferreira, 2015).

O funcionamento da PCA fundamenta-se na transformação dos dados originais, que consistem em várias variáveis correlacionadas, em um novo conjunto de variáveis não correlacionadas, denominadas componentes principais (CP). Essas novas variáveis são criadas de modo a capturar a maior parte da variância presente nos dados, sendo que a primeira componente principal é responsável por capturar a maior quantidade possível de variação. As componentes principais subsequentes são ortogonais entre si, ou seja, independentes, e capturam a variância remanescente em ordem decrescente de relevância (Bro; Smilde, 2014).

A PCA é matematicamente expressa como:

$$X = TP^t + E \quad (\text{Equação 1})$$

Isso significa que a matriz de dados originais $X_{n \times m}$, composta por n amostras e m variáveis, é decomposta em duas matrizes menores, uma em matriz de escores $T_{n \times a}$, composta por n amostras e a componentes principais, que representa as projeções das amostras no novo espaço das componentes principais, e uma em matriz de pesos/ *loadings* $P_{a \times m}$, composta por a componentes principais e m variáveis, que é determinada pelo cosseno dos ângulos formados entre as variáveis originais e as

novas componentes principais. O símbolo t sobrescrito indica uma matriz transposta. A matriz $\mathbf{E}$ é composta pelos resíduos, que contêm a variação residual que não foi explicada por nenhuma das componentes principais selecionadas (Ferreira, 2015).

Graficamente, na PCA, algumas ferramentas de diagnóstico são empregadas para analisar os conjuntos de dados, como: o gráfico de variância explicada em função do número de componentes principais, ou o gráfico de autovalores, ambos empregados para estimar o número ideal de CPs; gráficos de escores, que revelam possíveis agrupamentos entre as amostras e permitem identificar amostras anômalas; e o gráfico de pesos/*loadings*, que permite identificar variáveis influentes na formação de agrupamentos no gráfico de escores (Souza; Poppi, 2012; Allegreta *et al.*, 2020).

2.3.3 Análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA)

O PLS-DA é um método de discriminação de dados multivariados baseado na regressão por mínimos quadrados parciais. Este método busca estabelecer uma relação entre as variáveis independentes, ou respostas instrumentais ($\mathbf{X}$), e as variáveis dependentes (matriz $\mathbf{Y}$ ou vetor $\mathbf{y}$), que codificam a classe da amostra. Essas classes podem assumir os valores 1 ou 0, indicando se a amostra pertence ou não à classe correspondente (Santana *et al.*, 2020).

O modelo PLS-DA pode ser descrito matematicamente a partir das equações abaixo:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{L}^t + \mathbf{E} \quad (\text{Equação 2})$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{U}\mathbf{q}^t + \mathbf{f} \quad (\text{Equação 3})$$

Onde $\mathbf{X}$ representa a matriz dos dados instrumentais, $\mathbf{y}$ é o vetor que contém as variáveis categóricas, $\mathbf{T}$ é a matriz de escores, $\mathbf{L}$ e $\mathbf{q}$ contêm os pesos de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{y}$, respectivamente, e $\mathbf{E}$ e $\mathbf{f}$ são respectivamente, matriz e vetor de resíduos de $\mathbf{X}$ e $\mathbf{y}$ (Ferreira, 2015).

Para a construção do modelo, as amostras são divididas em dois conjuntos: treinamento e teste. O conjunto de treinamento é utilizado para construir o modelo, enquanto o conjunto de teste serve para avaliar seu desempenho de forma independente. Assim, o modelo estima um valor para $\mathbf{y}$, podendo ou não ser exatamente igual a 0 ou 1. Um limite de decisão (*threshold*) deve ser estabelecido,

podendo arbitrariamente ser fixado em um valor, como 0,5, ou, mais comumente, estimado pela teoria *Bayesiana*. Valores de y acima desse limite indicam que a amostra pertence à classe alvo, enquanto valores abaixo indicam que não pertence à classe alvo (Ferreira, 2015; Brereton; Lloyd, 2014).

No PLS-DA, diferentemente da PCA, a decomposição de X é orientada de modo a maximizar a covariância entre X e y . As componentes estimadas são nomeadas de variáveis latentes, que não são necessariamente ortogonais e são calculadas para capturar as direções em X que melhor explicam a separação entre as classes (Brereton; Lloyd, 2014).

Uma etapa essencial da construção de um modelo de PLS-DA é a validação cruzada. Nessa etapa, uma fração das amostras (ou apenas uma) é removida do conjunto de treinamento, e o modelo é construído com as amostras restantes. Em seguida, são calculados os erros de previsão para as amostras que foram separadas. Esse procedimento é repetido até que todas as amostras tenham ficado de fora. Essa etapa é realizada para determinar o número de variáveis latentes do modelo (Ferreira, 2015).

Uma ferramenta empregada na interpretação espectral de modelos PLS-DA são os vetores informativos, como os coeficientes de regressão e os vetores de Importância das Variáveis na Projeção dos Escores (*Variable importance on projection – VIP scores*). Esses vetores avaliam a relevância de cada variável na construção do modelo (Tran *et al.*, 2014). Por meio do gráfico de VIP scores é possível estimar a importância de cada variável na projeção do modelo em valores absolutos, enquanto os coeficientes de regressão mostram qual a intensidade e direção/significância (positiva ou negativa) das variáveis que mais contribuíram para a previsão do modelo. Essa contribuição pode ser relacionada à classe 1 (positiva) ou à classe 0 (negativa).

Por fim, a identificação de *outliers* também é uma etapa importante na construção de modelos de classificação multivariada, pois a presença de amostras anômalas compromete a capacidade preditiva do modelo. A detecção de *outliers* é realizada ao se observar os valores dos resíduos Q , bem como os valores de *leverage* para a matriz X . O *leverage* é uma medida que indica a importância da amostra dentro do modelo, assim, quanto maior o *leverage*, maior será o peso dessa amostra para o modelo. Quando uma amostra apresenta um elevado valor de resíduo e um alto valor

de *leverage*, ela é classificada como um *outlier* e deve ser excluída do modelo (Ferreira, 2015).

2.3.4 Modelagem Independente Suave de Analogia de Classe (SIMCA)

O método de modelagem de classe SIMCA, representa uma das abordagens pioneiras de classificação supervisionada na área de Quimiometria. Este método assume que os valores experimentais obtidos para um conjunto de amostras seguem uma distribuição normal e são modeláveis, caracterizando-se como um modelo paramétrico e preditivo. Cada classe, previamente definida para o conjunto de amostras em análise, é descrita por um sistema de componentes principais (CPs). As classes e suas respectivas CPs são representadas em um novo espaço multidimensional, como dimensões definidas pelo número de componentes principais em cada classe. Os limites de cada classe são delineados com base no valor absoluto do escore máximo de cada componente principal, resultando na definição de um hiperplano e, posteriormente, uma hipercaixa que contém os resíduos com as informações que não foram modeladas. Essas classes podem ou não se sobrepor no espaço em que ocupam, de maneira que o espaço de cada classe estabelece o poder de classificação do modelo SIMCA construído (Ferreira, 2015).

Os limites da classe de interesse são estabelecidos com base nos valores de T^2 de Hotelling e de resíduos Q , calculados a partir das equações 4 e 5:

$$T^2 = xP\Lambda^{-1}p^T x^T \quad (\text{Equação 4})$$

$$Q = ||x^T(I - PP^T)||^2 \quad (\text{Equação 5})$$

Onde x^T (1x J) representa o vetor de medidas de uma amostra, enquanto a matriz $\Lambda = T^T T = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_A)$ representa a diagonal com os elementos λ_A , que, então, correspondem aos autovalores de $X^T X$ dispostos em ordem decrescente. A matriz p^T é a transposta da matriz de pesos P , que inclui os autovalores associados aos autovalores λ_A da matriz $X^T X$. Os valores de T^2 Hotelling fornecem informações sobre a adequação das características da amostra em relação ao modelo, enquanto os resíduos Q indicam ajuste do modelo ao conjunto de dados. Para um modelo

SIMCA bem ajustado, espera-se que as amostras modeladas apresentem baixos valores de T^2 de Hotelling e de resíduos Q (Márquez *et al.*, 2016).

Após a projeção das classes em um novo espaço multidimensional, a amostra teste é atribuída a uma das classes com base na distância até as fronteiras da classe. Quando o modelo apresenta baixo poder de classificação ou quando a amostra teste é anômala em relação ao conjunto treinamento, pode ocorrer que a amostra teste pertença simultaneamente a duas classes ou a nenhuma delas. Uma amostra teste é considerada representativa de sua classe quando a sua variância residual é menor ou igual a variância residual média da classe. Se variância residual for significativamente maior, a amostras estará distante da classe avaliada ou poderá ser considerada anômala em relação ao modelo construído. Para analisar a relevância da variância residual da amostra teste, utiliza-se um teste F. A estatística F também pode ser empregada para estabelecer um valor de limite para a variância residual de uma amostra, de forma que ela se encaixe na classe definida pelo modelo SIMCA (Ferreira, 2015). Com o valor de $F_{\text{crítico}}$ tabelado para um determinado nível de confiança e a variância residual média da classe, é viável determinar a distância limite no espaço multidimensional para que uma amostra seja reconhecida naquela classe.

2.3.5 Validação de modelos de classificação multivariada

Para avaliar o desempenho dos modelos de classificação multivariada, são consideradas suas taxas de acerto e de erro. A classe de interesse ou classe alvo é denominada positiva, e a classe que não é de interesse, de negativa. Os valores de verdadeiro positivo (VP) representam o número de amostras positivas classificadas corretamente na classe positiva e os verdadeiros negativos (VN) correspondem às amostras negativas classificadas na classe negativa. Da mesma forma, os valores de falso positivo (FP) e falso negativo (FN) referem-se às amostras que foram classificadas incorretamente em ambas as classes (Gondim *et al.*, 2014).

Com base nesses valores, são calculados os parâmetros que expressam a veracidade do modelo, a sensibilidade (SEN) (Equação 6), a especificidade (ESP) (Equação 7) e a eficiência (EFC) (Equação 8) do modelo, que serão utilizadas para o cálculo das figuras de mérito empregadas neste trabalho.

$$SEN (\%) = \left(\frac{VP}{VP+FN} \right) \times 100 \quad (\text{Equação 6})$$

$$ESP (\%) = \left(\frac{VN}{VN+FP} \right) \times 100 \quad (\text{Equação 7})$$

$$EFC (\%) = \sqrt{SEN \times ESP} \quad (\text{Equação 8})$$

A sensibilidade indica a capacidade do modelo de classificar corretamente as amostras da classe positiva (classe de interesse, classe alvo), enquanto a especificidade avalia a correta classificação das amostras da classe negativa (classe de não interesse, classe não alvo). A eficiência representa a média geométrica entre os valores de sensibilidade e especificidade, avaliando a taxa de acerto total do modelo (Gondim *et al.*, 2014).

A precisão do modelo pode ser avaliada por meio dos parâmetros acordância (ACO) (Equação 9) e concordância (CON) (Equação 10), que também serão utilizadas para o cálculo das figuras de mérito empregadas neste trabalho.

$$ACO (\%) = \frac{\{k(k-1) + (n-k)(n-k-1)\}}{n(n-1)} \times 100 \quad (\text{Equação 9})$$

$$CON (\%) = \frac{2[k(k-nb)] + nb(nb-1) - ACO[nb(n-1)]}{n^2b(b-1)} \times 100 \quad (\text{Equação 10})$$

Nas equações utilizadas para os cálculos de acordância e concordância, n representa o número de replicatas analisadas, k é o número de classificações corretas para cada lote analítico, e b é o número de lotes analisados, indicando diferentes dias e/ou analistas (Gondim *et al.*, 2014). A acordância mede a probabilidade de que amostras idênticas sejam classificadas da mesma maneira quando analisadas sob as mesmas condições experimentais, e é análoga à repetibilidade em modelos quantitativos. Já a concordância mede a probabilidade de que duas amostras iguais sejam classificadas na mesma classe, mesmo diante de variações nas condições experimentais, como dia, analista ou laboratório, em condições de precisão

intermediária. Valores de ACO e CON próximos a 100% indicam modelos com alta precisão.

2.4 Aplicações da NIRS e Quimiometria na Identificação de Infestação em Grãos

A detecção de infestação por insetos em grãos é um desafio relevante na pós-colheita e armazenamento, principalmente devido à limitação dos métodos convencionais, sendo os mais utilizados a inspeção manual, peneiramento e funil de Berlese (Neethirajan *et al.*, 2007). A espectroscopia no infravermelho próximo (NIRS), associada à quimiometria, tem se destacado como uma alternativa para análise rápida e não destrutiva da qualidade de grãos, em relação à infestação, conforme evidenciado em estudos na literatura.

Wang *et al.* (2023), demonstraram o uso de um sistema NIRS online, com faixa espectral de 900 – 1700 nm, combinado com métodos de classificação multivariada (PLS-DA, máquinas de vetores de suporte (SVM) e regressão logística (LR)) e de seleção de variáveis (amostragem adaptativa competitiva reponderada (CARS) e algoritmo de projeções sucessivas (SPA)), que permitiu identificar sementes de milho infestadas. O modelo de classificação CARS-SPA-LR alcançou acurácia de 83% para identificar a infestação nos grãos utilizando 7 variáveis espectrais.

Santos *et al.* (2019) avaliaram a aplicação da NIRS, empregando um equipamento FT-NIR de bancada, associada à análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) para detectar infestação por *Sitophilus zeamais* em sorgo no período de 70 dias. Os espectros NIR foram obtidos na faixa espectral de 1000 a 2500 nm. O modelo PLS-DA desenvolvido apresentou sensibilidade e especificidade de 100% no conjunto teste, indicando a capacidade total de discriminação entre as amostras infestadas e não infestadas, mesmo diante da diversidade genética.

Souza *et al.* (2019) utilizaram espectros NIR obtidos em um equipamento FT-NIR modular na região entre 1000 e 2500 nm para identificar a infestação por *Sitophilus zeamais* em milho. Modelos de classificação PLS-DA foram construídos com 100% de acerto na classificação das amostras com infestação superior a 4%.

Em outro trabalho também empregando o método de classificação PLS-DA, Biancolillo *et al.* (2019) desenvolveram uma metodologia baseada em NIRS e

quimiometria para detectar infestação por *Plodia interpunctella* em arroz armazenado. Neste trabalho também foi empregado um equipamento de bancada e os espectros foram coletados na faixa entre 1000 e 2500 nm. O modelo PLS-DA classificou corretamente 95,6% dos grãos próprios para consumo e 97,5% dos grãos infestados no conjunto de validação externa. O método de modelagem de classe SIMCA também foi avaliado no estudo. O modelo SIMCA construído para a classe não infestada apresentou uma especificidade alta (97%), mas uma baixa sensibilidade (60%) para o conjunto teste.

Os estudos mencionados anteriormente evidenciam o potencial da espectroscopia NIR associada a ferramentas quimiométricas para a detecção de infestações em grãos armazenados, sobretudo quando se utilizam equipamentos FT-NIR de bancada. No presente estudo, a proposta foi avaliar o desempenho de um equipamento NIR portátil, com faixa espectral de 900 a 1700 nm, na caracterização de grãos de sorgo expostos a diferentes tempos de infestação e destinados à fabricação de ração animal. Para o tratamento dos dados espectrais, foram adotadas duas abordagens quimiométricas: a análise discriminante baseada em PLS-DA e a modelagem de classes por meio do método SIMCA para autenticar as amostras não infestadas.

A detecção precoce de infestação em grãos é um desafio, pois os métodos tradicionais apresentam limitações para identificar o problema nas fases iniciais do processo de infestação. Grãos infestados comprometem a qualidade do produto, reduzem o valor nutricional e representam riscos à segurança alimentar, além de poderem contaminar lotes inteiros e causar perdas industriais significativas. Nesse contexto, é essencial desenvolver métodos rápidos, não destrutivos e aplicáveis *in loco* para identificar a infestação antes que ela se torne visível. Além disso, existe uma lacuna na literatura, uma vez que não foram encontrados estudos que tenham acompanhado de forma contínua, como a infestação evoluiu ao longo do ciclo do inseto dentro do grão, o que reforça a necessidade de pesquisas que investiguem essa dinâmica.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo geral

Desenvolver um método analítico empregando um espectrofotômetro NIR portátil e classificação multivariada (PLS-DA e SIMCA) para a detecção de infestação em grãos de sorgo granífero, usados como matéria prima na produção de ração animal.

3.2 Objetivos específicos

- Obter os espectros NIR de grãos de sorgo destinados à produção de ração animal, contemplando amostras sem infestação e amostras infestadas, mantidas por períodos entre 7 a 70 dias;
- Construir modelos não supervisionados, com base na PCA, com o objetivo de observar diferenças e padrões naturais entre as amostras, destacando a relação entre as variáveis e as classes de amostras;
- Construir modelos de classificação supervisionada, empregando abordagem discriminante PLS-DA e de modelagem de classe SIMCA visando classificar amostras de sorgo não infestadas e infestadas.

4 PARTE EXPERIMENTAL

4.1 Amostras de sorgo e infestação

As amostras de sorgo granífero foram obtidas em uma indústria de desenvolvimento de alimentos para animais de estimação e de criação, localizada em Santa Luzia, Região Metropolitana de Belo Horizonte, Minas Gerais. Ao todo, foram adquiridos 196 diferentes lotes de grãos de sorgo, com umidade variando entre 13,2% e 13,8%, entre os meses de dezembro de 2024 e março de 2025. As amostras foram coletadas em diferentes municípios: Monte Carmelo, Guarda Mor, Pirapora, Perdizes, Romaria, Paracatu, Patos de Minas, Serra do Salitre, Unaí, Sacramento, todos localizados em Minas Gerais, além de Roda Velha, na Bahia e Água Fria, Cristalina, Bonfinópolis, em Goiás.

No estudo, foram analisadas 101 amostras infestadas e 95 não infestadas. A condição das amostras não infestadas foi assegurada por um período de quarentena seguido de reavaliação, que comprovou a ausência de infestação. As amostras infestadas foram preparadas com 100 gramas de sorgo inteiro, armazenadas juntamente com 15 insetos adultos não sexados de *S. zeamais* em sacos plásticos estéreis selados, sob condições de laboratório, no Departamento de Química (laboratório 271) da UFMG. Das 101 amostras, 41 foram mantidas por 70 dias (período típico de armazenamento de sorgo na entressafra em fazendas). Outras seis amostras foram monitoradas ao longo do tempo por espectroscopia no infravermelho próximo (NIR), sendo avaliadas após 7, 14, 21, 28, 35, 42, 49, 56, 63 e 70 dias de armazenamento. Cada uma dessas amostras gerou dez leituras, tratadas como amostras analíticas independentes, totalizando 60 amostras. Após os 70 dias, foram avaliados o número de insetos e a perda de peso dos grãos. A Figura 6 mostra a imagem dos grãos de sorgo não infestados e após 70 dias de infestação.



Figura 6 - Vial de vidro com sorgo não infestados (A); Vial de vidro com sorgo infestados 70 dias (B).
Do autor (2025)

4.2 Equipamentos e *softwares*

Para obtenção dos espectros de infravermelho próximo, utilizou-se um espectrofotômetro portátil MicroNIR® 1700 (Viavi Solutions, Milpitas, CA, EUA), que abrange uma faixa espectral de 908 nm a 1676 nm e passo de 6,2 nm, totalizando 125 variáveis. As medições foram realizadas no modo reflectância, e cada espectro foi obtido com uma média de 20 varreduras (*scans*). O tratamento de dados foi realizado com o *software* MATLAB®, versão 7.11 (MathWorks, EUA) e o pacote PLS_Toolbox® versão 5.2.2 (Eigenvector Technologies, EUA) e o *software* Excel.

4.3 Aquisição dos espectros NIR

Para a análise no espectrofotômetro NIR portátil, as amostras de sorgo foram analisadas diretamente, sem qualquer pré-tratamento, transferindo-as para um *vial* de vidro de 2 mL, que foi inserido em um suporte construído com impressora 3D (Creality

Ender 3, Shenzhen, China), em acrilonitrila-butadieno-estireno, revestido internamente com uma fita de cobre (Figura 7 A). O suporte foi colocado sobre o espectrofotômetro (Figura 7 B).

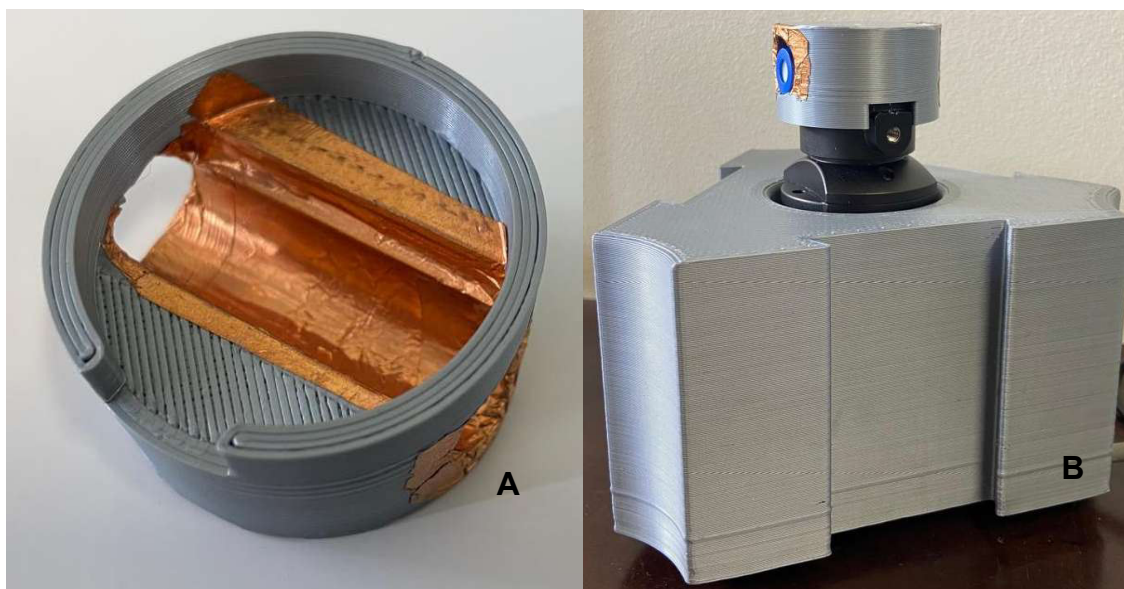


Figura 7 - Suporte 3D (A); Suporte acoplado ao espectrofotômetro (B). Fonte: Do autor (2025)

4.4 Análise multivariada de dados

Inicialmente, foi realizada uma análise exploratória não supervisionada através da construção de um modelo PCA, com o objetivo de identificar padrões naturais entre as amostras, além de destacar as relações entre as variáveis e classes. Em seguida, aplicou-se o método PLS-DA para construir um modelo de classificação supervisionado, capaz de discriminar amostras de sorgo infestadas das não infestadas. Os dados espectrais foram sistematicamente divididos em dois subconjuntos (treinamento e teste), utilizando o algoritmo Kennard-Stone aplicado em separado para o conjunto de amostras de cada classe. Para o conjunto de treinamento, foram selecionadas 130 amostras (63 não infestadas e 67 infestadas) enquanto para o conjunto teste, foram selecionadas 66 amostras (32 não infestadas e 34 infestadas). O primeiro subconjunto (conjunto treinamento), compreendendo dois terços das amostras, foi utilizado para a construção e validação interna do modelo. Nesse processo de seleção das amostras, a amostra que apresenta maior distância

em relação à média no espaço multivariado é selecionada inicialmente, seguida pela amostra que apresenta a maior distância em relação à anterior. Após a seleção das amostras mais representativas para o conjunto treinamento, as amostras restantes, um terço, compuseram o conjunto de teste, utilizado para a validação externa do modelo (Kennard; Stone, 1969). O método SIMCA foi empregado para modelar às amostras de grãos de sorgo não infestados, utilizando a abordagem rigorosa (*rigorous approach*). Para isso, 63 amostras foram selecionadas para o conjunto treinamento. As 32 amostras restantes dos grãos não infestados foram combinadas às 101 amostras infestadas, formando o conjunto de teste.

Os espectros das amostras foram pré-processados para corrigir desvios não lineares na linha de base, causados pelo espalhamento multiplicativo da luz, frequentes em espectros de reflectância difusa de sólidos. Com o objetivo de melhorar o desempenho dos modelos preditivos, foram testados diversos pré-processamentos, incluindo a correção do espalhamento multiplicativo (MSC), a variação normal padrão (SNV), a primeira e segunda derivadas aliadas ao alisamento de Savitzky-Golay e suas combinações. Após cada pré-processamento, os espectros foram centralizados na média. Para a validação interna dos modelos, utilizou-se o método de validação cruzada das venezianas (*venetian blinds*), com 10 divisões e 20 iterações e a seleção do número de variáveis latentes foi feita com base no menor erro de classificação da validação cruzada (CVCE). O melhor pré-processamento foi escolhido considerando as taxas de classificação corretas obtidas para o conjunto de treinamento.

O desempenho dos modelos construídos foi avaliado por meio da estimativa das figuras de mérito sensibilidade, especificidade e eficiência, descritas na Seção 2.3.5. As medidas para os cálculos da ACO e CON foram realizadas com as amostras não infestadas e infestadas por 70 dias, em sextuplicadas para cada amostra variando o dia da leitura para as medições de CON.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Espectros NIR das amostras de sorgo infestadas e não infestadas

Os espectros NIR, brutos e pré-processados, referentes às 196 amostras de sorgo infestadas e não infestadas, estão apresentados na Figura 8. A composição química dos grãos, constituída principalmente por água, amido e proteínas, é responsável pelos sinais dos espectros NIR, conforme relatado por estudos anteriores (Mishra *et al.*, 2018; Agha *et al.*, 2017; Holse *et al.*, 2011). As bandas de absorção situadas entre 1350 -1550 nm estão relacionadas, predominantemente, ao primeiro sobretom e às bandas de combinação de estiramento da ligação O-H da água livre e ligada (Agha *et al.*, 2017; Workman; Weyer, 2008). As vibrações decorrentes do estiramento C-H manifestam-se como segundo sobretom na região de 1100-1200 nm, com possíveis contribuições de sobretons e bandas de combinações do estiramento O-H, associadas a constituintes como carboidratos e lipídeos, além de grupos hidroxila da matriz dos grãos (Holse *et al.*, 2011; Workman; Weyer, 2008).

Após 70 dias de armazenamento, a população final de insetos vivos nas amostras infestadas variou entre 3 e 7 vezes o número inicial, com perda média de peso dos grãos de 9%. Em estudos anteriores da literatura, essa população variou entre 2 e 10 vezes, com perda de peso média dos grãos de 14% (Santos *et al.*, 2019).

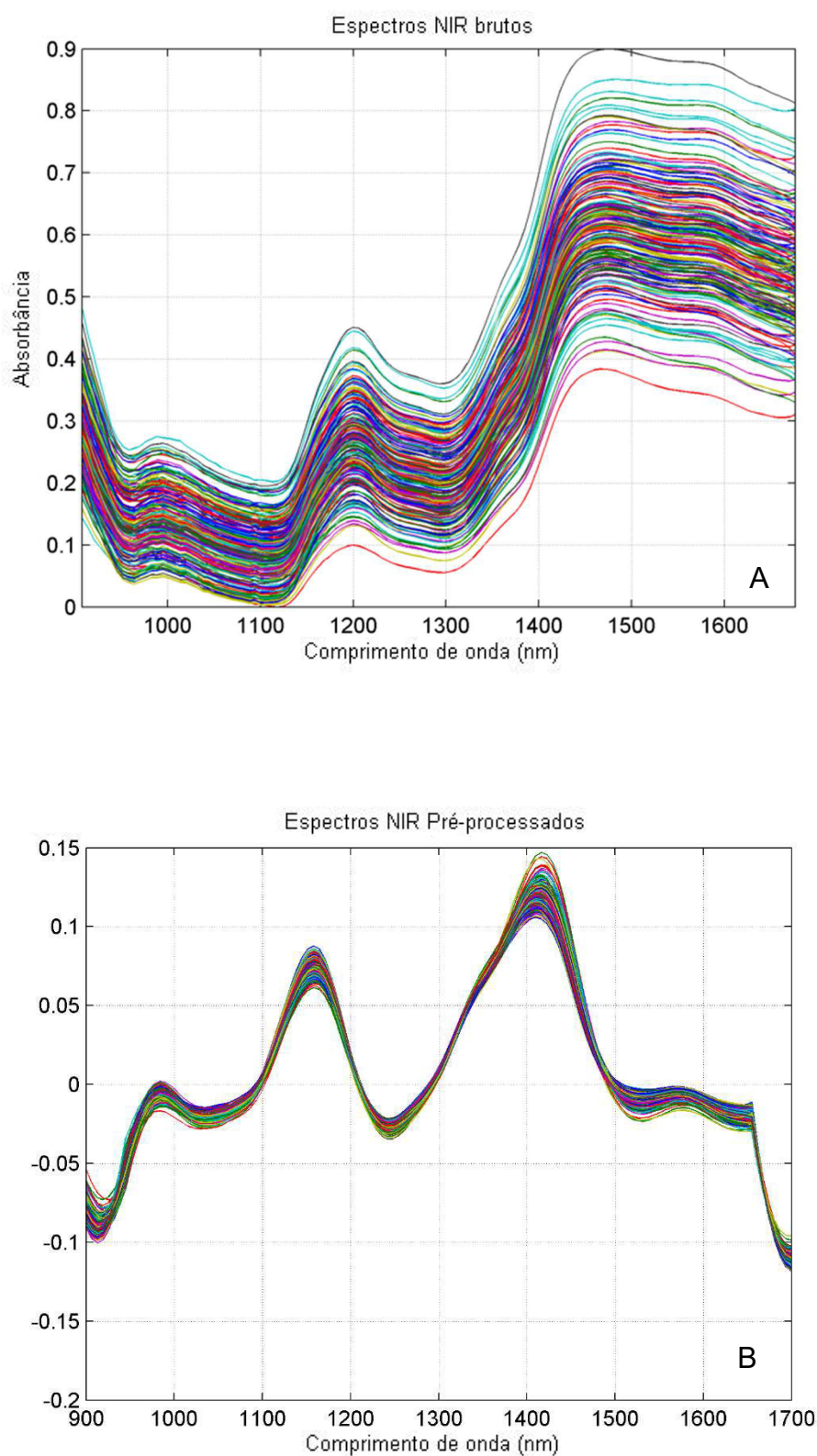


Figura 8 - Espectros NIR brutos (A) e pré-processados com SNV combinado à primeira derivada e à suavização de Savitzky-Golay - janela de 15 pontos e polinômio de segunda ordem (B). Fonte: Do autor (2025)

5.2 Análise exploratória

Conforme ilustrado na Figura 8 (A), os espectros brutos das amostras de sorgos apresentam elevada similaridade, o que dificulta a distinção visual entre os grãos infestados e não infestados. A presença de espalhamento multiplicativo pode ser observada por meio da dispersão espectral e de variações não lineares na linha de base, que comprometem a interpretação direta dos dados espectrais.

Para contornar essas distorções e revelar padrões latentes, foi realizada uma análise exploratória através da PCA, utilizando os espectros NIR pré-processados por SNV, primeira derivada com alisamento Savitzky-Golay (janela de 15 pontos, polinômio de segunda ordem) e centralizados na média.

A Figura 9 apresenta o gráfico de escores da CP1 *versus* CP2, as quais explicam 88,37% da variação total dos dados, sendo 58,60% atribuídos à CP1 e 29,77% à CP2. A primeira componente principal (CP1) representou 58,60% da variância, associada aos diferentes tempos de infestação e localidades. A distribuição dos escores evidencia uma tendência de separação entre as classes: amostras não infestadas concentram-se predominantemente na região negativa de CP2, enquanto as infestadas se distribuem majoritariamente na região positiva de CP2. Embora haja sobreposição entre as classes, esse padrão sugere que a CP2 contribui para uma discriminação preliminar entre as categorias, reforçando a viabilidade de abordagens supervisionadas de classificação.

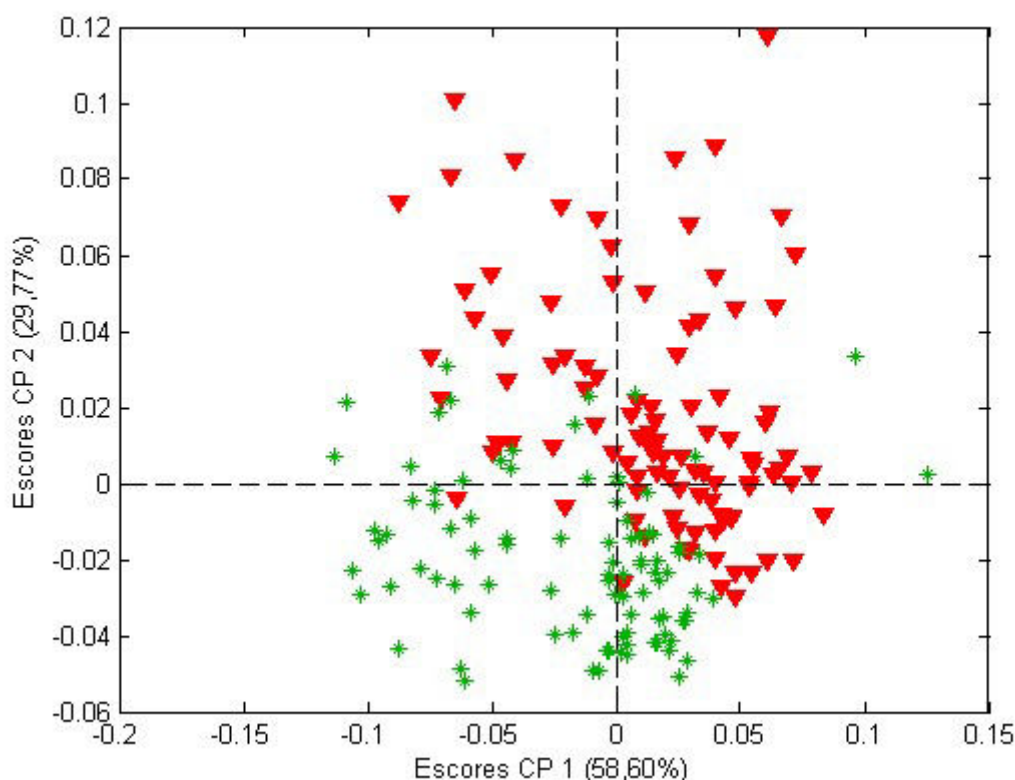


Figura 9 - Modelo PCA construídos com espectros NIR pré-processados. Gráfico de escores de CP1 versus CP2. Os triângulos invertidos vermelhos (▼) são as amostras de sorgos infestadas e os não infestados são representados pelo asterisco verde (*). Fonte: Do autor (2025)

A separação observada na figura 9 está associada às alterações físico-químicas que ocorrem nos grãos de sorgo ao longo do período de infestação por insetos, o qual, neste estudo, variou de 7 a 70 dias. A intensidade dessas alterações tende a aumentar com o tempo de infestação, provocando modificações estruturais e composicionais que influenciam diretamente as propriedades espectrais e contribuem para os padrões discriminatórios observados (MISHRA *et al.*, 2018).

A análise dos pesos (*loadings*) em CP2 (Figura 10) evidencia as regiões espectrais mais relevantes para a discriminação entre as amostras. A contribuição positiva, observada em 1416 nm, está associada às amostras infestadas e corresponde ao primeiro sobretom da vibração de estiramento da ligação O-H, atribuída à água ligada. Essa alteração espectral sugere modificações na retenção de umidade e na estrutura celular dos grãos, possivelmente decorrentes do processo de infestação por insetos.

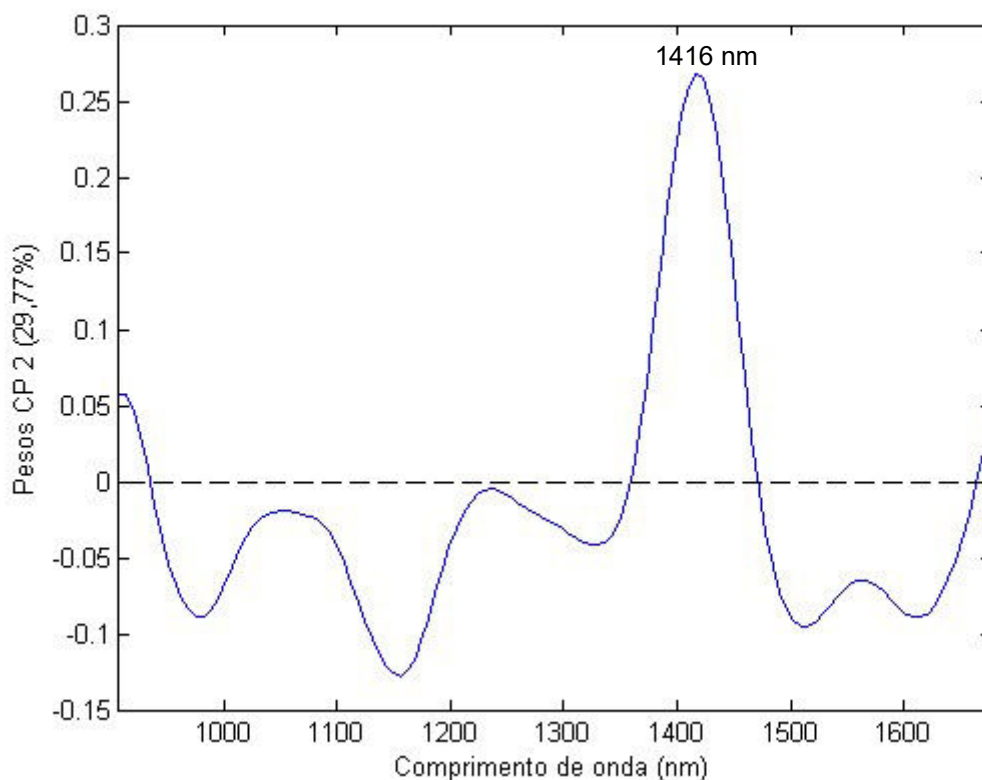


Figura 10 - Gráfico de pesos da CP2 do modelo PCA. Fonte: Do autor (2025)

5.3 Modelo PLS-DA

Após a análise exploratória dos dados empregando a PCA, foi desenvolvido um modelo PLS-DA com o objetivo de realizar a classificação supervisionada das amostras. Os valores da variável categórica/fictícia (**y**) foram treinados como 1 para a classe infestada e 0 para a classe não infestada.

Diferentes estratégias de pré-processamento foram avaliadas, incluindo MSC, SNV, suavização de Savitzky-Golay e suas combinações. A escolha do modelo final, baseou-se na maior taxa de acerto e na menor taxa de erro de classificação (Tabela 2). Todos os pré-processamentos testados resultaram em taxas de classificação superiores a 88%. Os melhores desempenhos foram obtidos com três combinações: MSC ou SNV combinados à primeira derivada e à suavização de Savitzky-Golay (janela de 15 pontos e polinômio de segunda ordem) e primeira derivada; e todas essas etapas seguidas dos dados centrados na média. Esses modelos alcançaram taxas de acerto superiores a 91% no conjunto de treinamento, utilizando 4 variáveis

latentes. Entre eles, o SNV destaca-se por apresentar maior robustez em relação ao MSC, na presença de amostras anômalas e a segunda derivada tende a amplificar o ruído, dificultando a interpretação dos vetores informativos.

Tabela 2 - Resultados da aplicação de diferentes combinações de pré-processamento espectral na otimização do modelo PLS-DA, com base nas taxas de classificação correta.

Pré-processamento	VL	Infestados		Não infestados	
		Treinamento (%)	Teste (%)	Treinamento (%)	Teste (%)
SNV + 1ª derivada	4	94,0	94,1	95,2	100,0
SNV + 2ª derivada	4	91,0	94,1	95,2	93,8
MSC + 1ª derivada	4	94,0	94,1	95,2	100,0
MSC + 2ª derivada	4	91,0	94,1	95,2	93,8
SNV	3	92,5	88,2	92,1	100,0
MSC	4	94,0	91,2	95,2	100,0
1ª derivada	4	95,5	94,1	92,1	100,0
2ª derivada	3	92,5	97,1	93,7	90,6

Fonte: Do autor (2025).

Após definição do melhor método de pré-processamento, o modelo foi submetido à detecção de *outliers* com base nos valores de T^2 de *Hotelling* e resíduos Q. Nenhuma amostra excedeu simultaneamente os limites de tolerância em ambos os critérios, desta forma nenhum *outlier* foi identificado, permitindo a construção do modelo final de PLS-DA.

Quando o modelo otimizado (SNV combinado à primeira derivada e à suavização de Savitzky-Golay - janela de 15 pontos e polinômio de segunda ordem) foi aplicado às amostras de teste externas, para a fase de validação, foram obtidas as respostas previstas, graficamente apresentadas na Figura 11. O modelo PLS-DA demonstrou boa discriminação entre as duas classes, confirmando sua eficácia na classificação supervisionada. No conjunto treinamento, foram registrados apenas um falso positivo (amostra não infestada classificada como infestada) e três falsos negativos (amostras infestadas classificadas como não infestadas). Já no conjunto de teste, não houve falsos positivos e foram observados dois falsos negativos, resultando em uma taxa de acerto de 94,1% para a classe “infestado” e 100% para a classe “não infestado”.

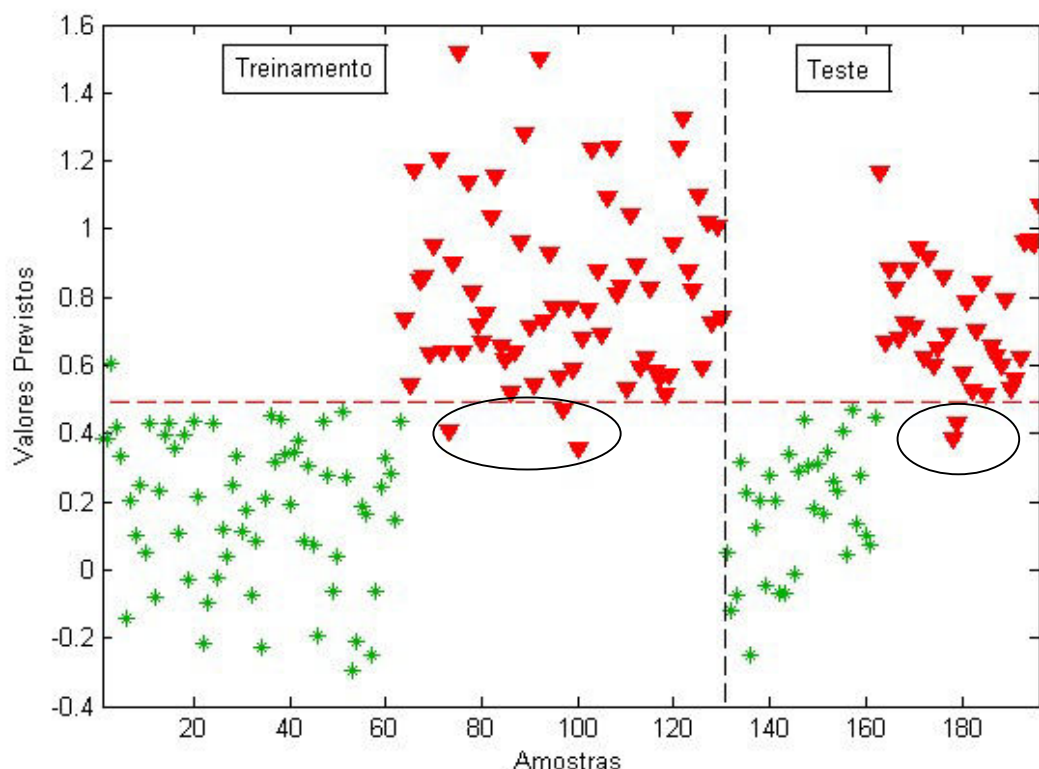


Figura 11 - Previsões do modelo PLS-DA para discriminar amostras de grãos infestados (triângulos invertidos vermelhos, ▼) e não infestados (asteriscos verdes, ✱). A linha horizontal vermelha indica o limite estimado. Fonte: Do autor (2025)

No conjunto treinamento, os três falsos negativos correspondem a amostras com 7 dias de infestação. No conjunto teste, o modelo também classificou incorretamente uma amostra com 7 dias e outra com 14 dias de infestação como não infestadas (Figura 11). Esse resultado pode ser explicado pelo ciclo de desenvolvimento do *Sitophilus zeamais* (ver sessão 2.1.5), cuja fase de incubação do ovo ocorre entre 3 e 7 dias. Durante esse período, as alterações no grão ainda são sutis, o que dificulta sua detecção empregando espectroscopia NIR. Por volta de 14 dias de infestação, as mudanças espectrais ficam mais evidentes, atribuídas ao avanço do ciclo biológico do inseto. Nessa fase, a larva ápoda já se alimenta do endosperma, passando por quatro instares larvais entre 7 e 22 dias aproximadamente. As amostras com 7, 14, 21 dias de infestação apresentaram valores de predição próximos ao limite de decisão, indicando menor confiança no modelo na distinção entre as classes, sobretudo nos estágios iniciais da infestação. Para amostras com 21

A caracterização do modelo PLS-DA foi feita por meio da interpretação espectral dos vetores informativos, como os escores de importância das variáveis na projeção (VIP Scores) (Figura 13) e os coeficientes de regressão (Figura 14). Variáveis com VIP Scores superiores a 1,0 foram consideradas relevantes para a discriminação entre as classes.

As bandas localizadas nos comprimentos de onda de 1156 nm e 1420 nm apresentaram valores elevados de VIP scores (Figura 13), indicando sua relevância na diferenciação entre grãos infestados de não infestados por *S. zeamais*. O pico em 1156 nm corresponde ao segundo sobretom das vibrações C-H, geralmente associado à presença de carboidratos e lipídios. A redução ou modificação desses componentes pode estar relacionada à atividade metabólica do inseto, que consome as reservas energéticas do grão durante o processo de infestação. Já o pico em 1420 nm está relacionado ao primeiro sobretom da ligação O-H, característico da absorção de água (Workman; Weyer, 2008; Santos *et al.*, 2019). Alterações nesse sinal sugerem variações no teor de umidade, possivelmente decorrentes da perfuração da estrutura do grão e da exposição ao ambiente, fatores que podem favorecer processos fermentativos ou a colonização por microrganismos secundários.

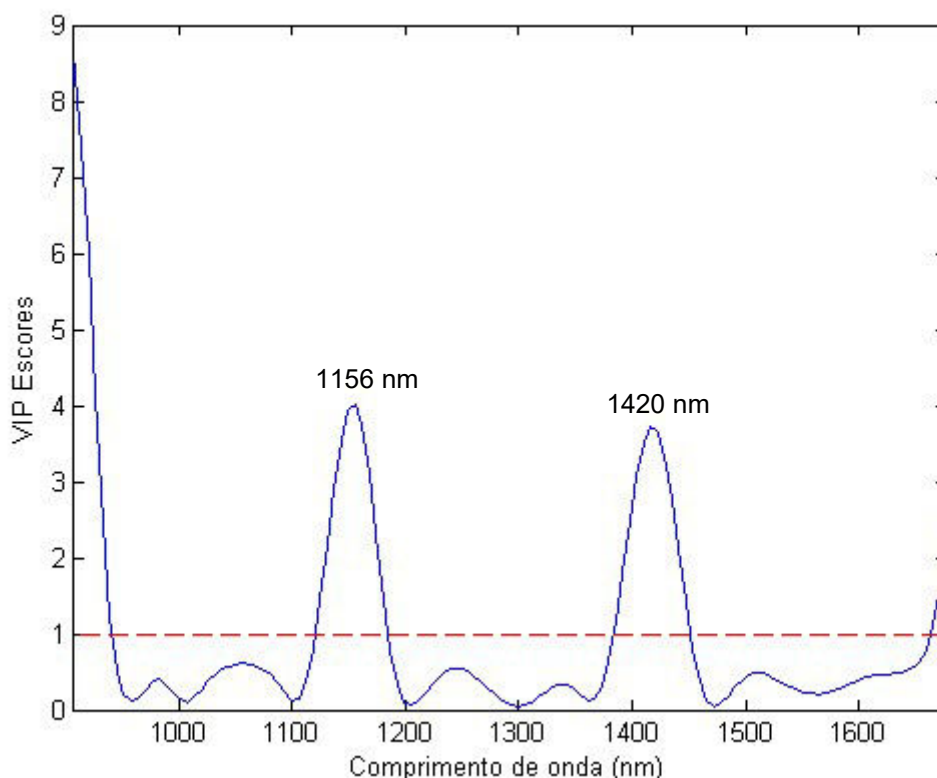


Figura 13 - Gráfico dos VIP Escores obtido no modelo PLS-DA para discriminar as amostras de grãos de sorgo infestados e não infestados. Fonte: Do autor (2025)

A análise dos coeficientes de regressão (Figura 14) revelou picos positivos em 1057 nm, 1255 nm e 1391 nm que se relacionam positivamente com a classe infestada, além de um pico negativo em 1156 nm, correlacionado com a classe não infestada. O sinal em 1057 nm está associado a bandas de combinação envolvendo ligações C-H e O-H, refletindo alterações em carboidratos e água ligada. Já o pico em 1255 nm corresponde a bandas de combinação C-H e N-H, sugerindo modificações em proteínas e lipídios, possivelmente decorrentes da atividade metabólica do inseto. O sinal em 1391 nm está relacionado ao primeiro sobretom da ligação O-H, indicando variações no teor de umidade dos grãos. Em contraste, o pico negativo em 1156 nm, correspondente ao segundo sobretom da ligação C-H, está associado à maior presença de carboidratos e lipídios, característica das amostras não infestas, o que indica a preservação dessas reservas. O pico em 1420 nm está associado ao primeiro

sobretudo da vibração O-H da água ligada, sugerindo estado de hidratação e integridade estrutural da matriz do grão. (Workman; Weyer, 2008; Santos *et al.*, 2019).

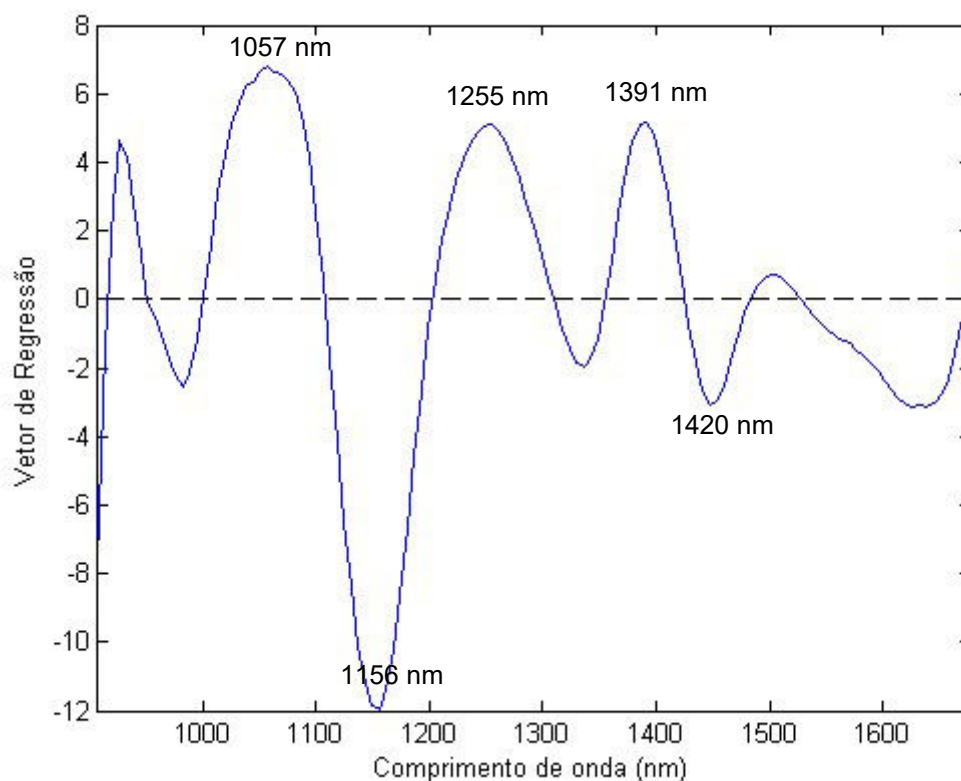


Figura 14 - Vetor de coeficientes de regressão do modelo PLS-DA. Fonte: Do autor (2025)

5.4 Modelo SIMCA

Após a análise supervisionada empregando a abordagem discriminante PLS-DA, foi desenvolvido um modelo baseado na modelagem de classe (*one-class modeling*) SIMCA. Nesta abordagem apenas a classe de interesse é modelada, neste estudo a classe não infestada foi selecionada como autêntica (classe alvo). Assim como no PLS-DA, realizou-se uma etapa de otimização de modelos, na qual foram testadas combinações de pré-processamento espectral e número de componentes principais (CPs). Os resultados dessa etapa estão apresentados na Tabela 4.

Tabela 4 - Desempenho do modelo SIMCA em função das diferentes combinações de pré-processamento espectral aplicadas durante sua otimização.

Pré-processamento	CPs	% SEN (treinamento)	% SEN (Teste)	% ESP (Teste)	% EFC (Teste)
SNV + 1ª derivada	4	98,4	96,9	43,6	64,9
SNV + 2ª derivada	4	98,4	100,0	44,6	66,7
MSC + 1ª derivada	4	98,4	96,9	43,6	64,9
MSC + 2ª derivada	4	98,4	100,0	44,6	66,7
SNV	4	98,4	96,9	49,5	69,2
MSC	4	98,4	96,9	50,5	69,9
1ª derivada	4	100,0	96,9	40,6	62,7
2ª derivada	4	100,0	100,0	37,6	61,3

SEN - taxa de sensibilidade; ESP - taxa de especificidade; EFC - taxa de eficiência. Fonte: Do autor (2025).

Os modelos SIMCA apresentaram alta sensibilidade (SEN), acima de 96% para identificar amostras não infestadas, mas baixa especificidade (ESP), inferior a 51%, para rejeitar as amostras infestadas. O modelo com maior eficiência foi obtido com o pré-processamento de MSC seguido dos dados centralizados na média. Esse modelo alcançou 96,9% de sensibilidade e 50,5% especificidade, os resultados deste modelo são apresentados na Figura 15. Esse desempenho pode estar relacionado à elevada heterogeneidade das amostras infestadas, provenientes de diferentes cidades e estados, coloração dos grãos variando entre vermelho, amarelo e castanho, e principalmente com períodos de infestações variando de 7 a 70 dias.

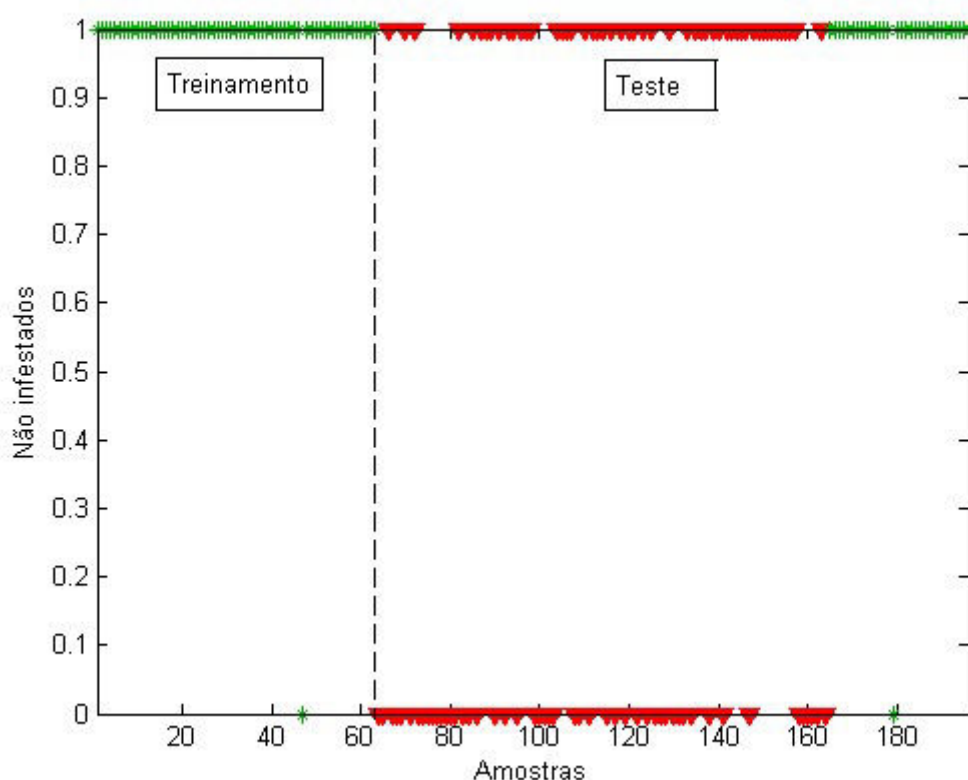


Figura 15 - Previsões do modelo SIMCA, asteriscos verdes (✱) representam a classe não infestada e triângulo invertido vermelho (▼) a classe infestada. Fonte: Do autor (2025).

Os resultados obtidos aqui estão em consonância com achados anteriores da literatura que também utilizaram a abordagem SIMCA para autenticação de amostras de cereais não infestados/infestados. Em um dos estudos, os autores desenvolveram um modelo SIMCA com alta capacidade de identificar grãos de arroz infestados, embora com desempenho limitado na discriminação de amostras não infestadas/comestíveis, definidas como classe alvo. A baixa especificidade foi atribuída à elevada heterogeneidade das amostras de arroz, coletadas em diferentes países (BIANCOLILLO *et al.*, 2019). Em outro estudo, foram desenvolvidos modelos SIMCA e OCPLS (*one-class PLS*) considerando os grãos de sorgo infestados como classe alvo. Ambos os modelos apresentaram alta sensibilidade, mas baixa especificidade, comportamento que os autores relacionaram à diversidade genética das amostras utilizadas (Santos *et al.*, 2019).

Do ponto de vista prático, modelos do tipo one-class tendem a apresentar desempenho inferior quando comparados a métodos discriminantes, como o PLS-DA.

(Rodionova et al., 2016). Essa diferença pode ser atribuída à maior capacidade dos modelos discriminantes em lidar com conjuntos de dados heterogêneos, uma vez que os limites de separação entre classes são definidos considerando simultaneamente, por exemplo, as amostras infestadas e não infestadas. Assim, o modelo consegue capturar mais informações que distinguem as diferentes classes, resultando em melhor desempenho preditivo.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia analítica empregando um equipamento NIR portátil e análise discriminante por mínimos quadrados parciais (PLS-DA) para detecção de infestações em grãos de sorgos destinados à produção de ração animal. Foram adquiridos espectros NIR de amostras infestadas e não infestadas, construídos modelos não supervisionados por meio da análise de componentes principais (PCA) e desenvolvidos modelos supervisionados com base na PLS-DA e SIMCA, com o objetivo de classificar as amostras. Os resultados confirmaram a eficácia da abordagem discriminante: o modelo PLS-DA apresentou 94,1% de sensibilidade e 100% de especificidade no conjunto teste, com previsões corretas mesmo em casos de infestações sem sinais visuais. Para o método de modelagem de classe, o modelo apresentou alta capacidade de classificar as amostras não infestadas e baixa capacidade em rejeitar as amostras infestadas.

De forma geral, o emprego do equipamento portátil NIR mostrou viabilidade prática, com aplicação rápida, econômica e não destrutiva, contribuindo para o controle e a preservação da qualidade da matéria prima. Pesquisas futuras podem ampliar o escopo da aplicação, estendendo o método a ambientes de armazenamento, como fazendas e silos, e a outras espécies de pragas, o que contribuirá para fortalecer a robustez dos modelos. O trabalho oferece soluções técnicas para o monitoramento não destrutivo de grãos armazenados, promovendo práticas sustentáveis e seguras na cadeia produtiva do sorgo.

REFERÊNCIAS

- AGHA, M. K. K.; LEE, W. S.; WANG, C.; MANKIN, R. W.; BLOUNT, A. R.; BUCKLIN, R. A.; BLIZNYUK, N. Detection and prediction of *Sitophilus oryzae* infestations in triticale via visible and near-infrared spectral signatures. **Journal of Stored Products Research**, v. 72, p. 1-10, 2017. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.jspr.2017.02.005>
- ALLEGRETTO, I.; MARANGONI, B.; MANZARI, P.; PORFIDO, C.; TERZANO, R.; DE PASCALE, O.; SENESI, G. S. Macro-classification of meteorites by portable energy dispersive X-ray fluorescence spectroscopy (pED-XRF), principal component analysis (PCA) and machine learning algorithms. **Talanta**, v. 212, p. 120785, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.120785>
- ALMEIDA, L. G. F.; PARRELLA, R. A. C.; SIMEONE, M. L. F.; RIBEIRO, P. C. O.; BARBOSA, G. M. P.; BRITO, P. L. B.; COSTA, A. S. V.; SANTOSA, A. S. Characterization of cell wall polysaccharides and cellulosic ethanol potential in genotypes of sorghum biomass. **International Journal of Development Research**, v. 9, p. 26810-26820, 2019. Disponível em: <http://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/handle/doc/1110393>.
- ANGLANI, C. Sorghum for human food—a review. **Plant Foods for Human Nutrition**, v. 52, p.85–95, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1008065519820>.
- ANTUNES, L.E.G.; DIONELLO, R.G. Bioecologia de *Sitophilus zeamais* Motschulsky 1885 (Coleoptera: Curculionidae). 2010. Artigo em Hypertexto. Disponível em: http://www.infobibos.com/Artigos/2010_2/Sitophilus/index.htm. Acesso em: setembro 2025.
- AKMAN, H.; ZHANG, C.; EJETA, G. Características fisiomorfológicas, bioquímicas e anatômicas de cultivares de sorgo tolerantes e suscetíveis à seca sob seca pré e pós-antese. **Physiologia Plantarum**, v. 172, p. 912–921, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1111/PPL.13242>.
- ARENDT, Elke K; ZANNINI, Emanuele. Sorghum. Em: ARENDT, Elke K; ZANNINI, Emanuele. **Cereal Grains for the Food and Beverage Industries**. [S. l.: s. n.], cap. 8, p. 283-305, 2013.
- ATUI, M. B.; FLINN, P. W.; LAZZARI, S. M. N.; LAZZARI, F. A. Detection of *Rhizopertha dominica* larvae in stored wheat using ELISA: the impact of myosin degradation following fumigation. **Journal of Stored Products Research**, v. 43, p. 156-159, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jspr.2006.04.001>.
- AWIKA, J. M. Antioxidant properties of sorghum. PhD Thesis., Texas A & M University: College Station, TX, 2003.
- AXTELL, J. D., A. W. KIRLEIS, M. M. HASSEN, N. D'CROZ MASON, E. T. MERTZ, AND L. MUNCK. Digestibility of sorghum proteins. **Proceedings of the National**

CHUCK-HERNÁNDEZ, C.; SERNA-SALDÍVAR, S. O.; GARCÍA-LARA, S. Susceptibility of different types of sorghums during storage to *Sitophilus zeamais* Motschulsky. **Journal of Stored Products Research**, v. 54, p. 34-40, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jspr.2013.04.003>.

CODEX ALIMENTARIUS COMMISSION. Standard for Sorghum Grains. CODEX STAN 172-1989, Rev. 1, 1995. Disponível em: http://www.fao.org/input/download/standards/57/CXS_172e.pdf. Acesso em: maio 2024.

CONAB. Boletim da safra de grãos. Disponível em: <https://www.conab.gov.br/info-agro/safras/gaos/boletim-da-safra-de-graos>. Acesso em: julho 2025.

CORNEJO-BÁEZ, A. A.; PEÑA-RODRÍGUEZ, L. M.; ALVAREZ-ZAPATA, R.; VAZQUEZ-HERNÁNDEZ, M.; SÁNCHEZ-MEDINA, A. Chemometrics: a complementary tool to guide the isolation of pharmacologically active natural products. **Drug Discovery Today**, v. 25, p. 27-37, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.drudis.2019.09.016>.

CORREIA, A. I. L. **Contribuição para a melhoria da qualidade nutricional do sorgo**, 2010 269p. Tese (doutorado) Universidade de Aveiro, Portugal.

CROCOMBE, R. A. Portable spectroscopy. **Applied Spectroscopy**, v. 72, p. 1701-1751, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1177/0003702818809719>.

DAI, J., AND R. J. MUMPER. Plant phenolics: Extraction, analysis and their antioxidant and anticancer properties. Review. **Molecules**, v. 15, p. 7313–7352, 2010. DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules15107313>.

DAS, F.; DE LIMA, C. Potencial produtivo de diferentes genótipos de sorgo. 2020. Disponível em: <https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/18816>. Acesso em: junho 2024.

DAVIES, T. The history of near infrared spectroscopic analysis: Past, present and future - "From sleeping technique to the morning star of spectroscopy". **Analisis Magazine**, v. 26, p. 17-19, 1998. DOI: <https://doi.org/10.1051/analisis:199826040017>.

DUARTE, A.; SAAD, F. M. O. B.; CORBIM, J. J.; SILVA JÚNIOR, J. W.; PEREIRA, D. A. R.; FIALHO, E. T.; RODRIGUES, P. B. Avaliação nutricional de cereais extrusados para cães. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 30, p. 1177–1183, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1590/S1413-70542006000600021>.

DUNN, J. A.; THIND, B. B.; DANKS, C.; CHAMBERS, J. Rapid method for the detection of storage mites in cereals: feasibility of an ELISA based approach. **Bulletin of Entomological Research**, v. 98, p. 207-213, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1017/S0007485308005634>.

DYKES, L.; PETERSON, G. C.; ROONEY, W. L.; ROONEY, L. W. Flavonoid composition of lemon-yellow sorghum genotypes. **Food Chemistry**, v. 128, p. 173-179, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2011.03.020>.

DYKES, L., AND L. W. ROONEY. Sorghum and millet phenols and antioxidants. **Journal of Cereal Science**, v. 44, p. 236–251, 2006. Disponível em: DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2006.06.007>.

ELIAS, M.C.; LORINI, I.; OLIVEIRA, M.; MORÁS, A.; SCHIAVON, R.A. Pragas e microorganismos no armazenamento de grãos e derivados. Em: ELIAS, Moacir Cardoso. **Manejo tecnológico da secagem e do armazenamento de grãos**. Ed. Santa Cruz. Pelotas, 2008.

ELIAS, M. C.; CRUZ, D. B.; PASA, E. H.; ELIAS, B. B.; SILVA, J. G.; OLIVEIRA, M. Efeitos da temperatura de secagem e do tempo de armazenamento na composição química de sorgo granífero. Em: **CONGRESSO BRASILEIRO DE PÓS-COLHEITA**, 2024, Londrina. Anais. Londrina: ABRAPÓS, 2024. Disponível em: http://eventos.abrapos.org.br/anais/paperfile/910_20181103_02-56-34_859.pdf. Acesso em: novembro 2025.

ENGEL, J.; GERRETZEN, J.; SZYMANSKA, E.; JANSEN, J. J.; DOWNEY, G.; BLANCHET, L.; BUYDENS, L. M. C. Breaking with trends in pre-processing? **TrAC – Trends in Analytical Chemistry**, v. 50, p. 96-106, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2013.04.015>.

FAO - Food and Agriculture Organization of the United Nations. Production crops. Roma: FAO, 2019. Disponível em: <http://www.fao.org/faostat/en/#data/QC>. Acesso em: maio 2024.

FAPOJUWO, O. O.; MAGA, J. A.; JANSEN, G. R. Effect of extrusion cooking on in vitro protein digestibility of sorghum. **Journal of Food Science**, v. 52, p. 218-219, 1987. DOI: <https://doi.org/10.1111/j.1365-2621.1987.tb14010.x>.

FERNANDES, E. A.; CARVALHO, C. M. C.; LITZ, F. H.; MARTINS, J. M. S.; SILVEIRA, M. M.; SILVA, M. C. A.; BARBERO, L. M. Viabilidades técnica e econômica da utilização de grãos de sorgo para monogástricos. **Informe Agropecuário**, v. 35, n. 278, p. 22-32, 2014.

FERREIRA, S. M. R.; MELLO, A. P.; ANJOS, M. C. R.; KRÜGER, C. C. H.; AZOUBEL, P. M.; ALVES, M. A. O. Utilization of sorghum, rice, and corn flours with potato starch for the preparation of gluten-free pasta. **Food Chemistry**, v. 191, p. 147-151, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2015.04.085>.

FERREIRA, M. M. C. **Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações**. Campinas: UNICAMP, p. 1-493, ISBN-9788526810631, 2015. DOI: <https://doi.org/10.7476/9788526814714>.

GIRARD, A. L.; AWIKA, J.M. Sorghum polyphenols and other bioactive components as functional and health promoting food ingredients. **Journal of Cereal Science**, v. 84, p. 112-124, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2018.10.009>.

GOMEZ-MARTINEZ, R.; CULHAM, A. **Phylogeny of the subfamily Panicoideae with emphasis on the tribe Paniceae: Evidence from the trnL-F cpDNA region**. Em: JACOBS, S.; EVERETT, J. (Eds.). Grasses: Systematics and evolution. Victoria: CSIRO Publishing, p. 136–140, 2000.

GONDIM, C. S.; COELHO, O. A. M.; ALVARENGA, R. L.; JUNQUEIRA, R. G.; SOUZA, S. V. C. An appropriate and systematized procedure for validating qualitative methods: Its application in the detection of sulfonamide residues in raw milk. **Analytica Chimica Acta**, v. 830, p. 11–22, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2014.04.050>.

GOYAL, M.; SOHU, R. S.; BHARDWAJ, R.; GILL, B. S.; GOYAL, M. Genetic variance and predicted response for three types of recurrent selection procedures in forage sorghum [*Sorghum bicolor* (L.) Moench]. **Range Management and Agroforestry**, v. 41, p. 43–51, 2020.

HOLSE, M.; LARSEN, F. H.; HANSEN, Å.; ENGELSEN, S. B. Characterization of marama bean (*Tylosema esculentum*) by comparative spectroscopy: NMR, FT-Raman, FT-IR and NIR. **Food Research International**, v. 44, p. 373-384, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2010.10.003>.

HOSENEY, R. **Principles of cereal science and technology**, 2nd ed. St. Paul, MN: American Association of Cereal Chemistry, 1994.

HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. **Journal of Educational Psychology**, vol. 24, p. 417, 1933. DOI: <https://doi.org/10.1037/h0071325>.

HUANG, J.; ROMERO-TORRES, S.; MOSHGBAR, M. Practical considerations in data pre-processing for NIR and Raman spectroscopy. **American Pharmaceutical Review**, v. 13, p. 116-127, 2010. Disponível em: <https://www.americanpharmaceuticalreview.com/Featured-Articles/116330-Practical-Considerations-in-Data-Pre-treatment-for-NIR-and-Raman-Spectroscopy/>. Acesso em: julho 2025.

IGARASI, M. S.; ARRIGONI, M. B.; SOUZA, A. A.; SILVEIRA, A. C.; MARTINS, C. L.; OLIVEIRA, H. N. Desempenho de bovinos jovens alimentados com dietas contendo grão úmido de milho ou sorgo. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 37, p. 513-519, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1590/S1516-35982008000300017>.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). Produção de sorgo no Brasil. Rio de Janeiro: IBGE, 2023. Disponível em: <https://www.ibge.gov.br/explica/producao-agropecuaria/sorgo/br>. Acesso em: julho 2025.

KALIRAMESH, S.; CHELLADURAL, V.; JAYAS, D. S.; ALAGUSUNDARAM, K.; WHITE, N. D. G.; FIELDS, P. G. Detection of infestation by *Callosobruchus maculatus* in mung bean using near-infrared hyperspectral imaging. **Journal of Stored Products Research**, v. 52, p. 107-111, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jspr.2012.12.005>.

KARUNAKARAN, C.; JAYAS, D. S.; WHITE, N. D. G. X-ray image analysis to detect infestations caused by insects in grain. **Cereal Chemistry**, v. 80, p. 553-557, 2003. DOI: <https://doi.org/10.1094/CCEM.2003.80.5.553>.

KENNARD, R. W.; STONE, L. A. Computer Aided Design of Experiments. **Technometrics**, v. 11, p. 137-149, 1969.

KHAN, I., A. YOUSIF, S. K. JOHNSON, AND S. GAMLATH. Effect of sorghum flour addition on resistant starch content, phenolic profile and antioxidant capacity of durum wheat pasta. **Food Research International**, v. 54, p. 578–586, 2013. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2013.07.059>.

KHODDAMI, A.; MESSINA, V.; VADABALIJA VENKATA, K.; FARAHNAKY, A.; BLANCHARD, C. L.; ROBERTS, T. H. Sorgo em alimentos: Funcionalidade e potencial em produtos inovadores. **Revisões Críticas em Ciência dos Alimentos e Nutrição**, v. 63, p. 1170-1186, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1080/10408398.2021.1960793>.

KOWALSKY, B.R. “Chemometrics: views and propositions”, **Journal of Chemical Information and Computer Sciences**, vol. 15, p.201, 1975.

LIM, T. K. Plantas medicinais e não medicinais comestíveis. **Plantas medicinais e não medicinais comestíveis**, v. 2, p. 867–878, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-94-007-1764-0>.

LOECK, A. E. **Pragas de Produtos Armazenados**. Pelotas: EGUFPEL, p. 113, 2002.

LORINI, I. Descrição, biologia e danos das principais pragas de grãos e sementes armazenadas. Em: **Armazenagem de grãos**, ed. I. Lorini, L. H. Miike, V. M. Scussel & L. R. D. Faroni. Instituto Biogeneiz - IBG, Jundiaí, SP, p. 363-381, 2018.

LORINI, I.; SCHNEIDER, S. **Pragas de grãos armazenados**: resultados de pesquisa. Passo Fundo: EMBRAPA–CNPT, p. 47, 1994.

LORINI, I.; KRZYZANOWSKI, F. C.; FRANÇA-NETO, J. B.; HENNING, A. A.; HENNING, F. A. **Manejo integrado de pragas de grãos e sementes armazenadas**. Brasília, DF: Embrapa, p. 84, 2015. Disponível em: <https://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/infoteca/bitstream/doc/1022859/1/Livropragas.pdf> . Acesso em: novembro 2025.

MACLEAN, W. C., G. LÓPEZ DE ROMAÑA, A GASTAÑADUY, AND G. G. GRAHAM. The effect of decortication and extrusion on the digestibility of sorghum by

preschool children. **The Journal of Nutrition**, v. 113, p. 2071–2077, 1983.
Disponível em: DOI: <https://doi.org/10.1093/jn/113.10.2071>.

MANLEY, M.; BAETEN, V. Spectroscopic Technique: Near Infrared (NIR) Spectroscopy. **Modern Techniques for Food Authentication**, p. 51–102, 2018.
DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-814264-6.00003-7>.

MÁRQUEZ, C.; LÓPEZ, M. I.; RUISÁNCHEZ, I.; CALLAO, M. P. FT-Raman and NIR spectroscopy data fusion strategy for multivariate qualitative analysis of food fraud. **Talanta**, v. 161, p. 80–86, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2016.08.003>.

MARTINO, H. S. D.; TOMAZ, P. A. MORAES; É. A. CONCEICAO, L. L. DA OLIVERIA D. DA; S. QUEIROZ, V. A. V.; RIBEIRO S. M. R. Chemical characterization and size distribution of sorghum genotypes for human consumption Caracterização química e distribuição granulométrica de genótipos de sorgo para alimentação humana. **Revista Instituto Adolfo Lutz**, v. 71, p. 337–344, 2012. DOI: <https://doi.org/10.53393/rial.2012.v71.32433>.

McCUISTION, K. C.; SELLE, P. H.; LIU, S. Y.; GOODBAND, R. D. Sorghum as a feed grain for animal production. Em: TAYLOR, J. R. N.; DUODU, K. G. (Ed.). **Sorghum and millets: chemistry, technology, and nutritional attributes**. 2. ed. Washington: AACC International Press, p. 355-391, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-811527-5.00012-5>.

MENEZES, C. B. DE; FERNANDES, E. A.; PARRELLA, R. A. C.; SCHAFFERT, R. E.; RODRIGUES, J. A. S. Importância do sorgo para o abastecimento de grãos, forragem e bioenergia no Brasil. In: Menezes, C. B. **Melhoramento genético de sorgo**. Brasília: Embrapa, 2021. Cap.1, p.13-58, 2021.

MENEZES, J. R. et al. Perspectivas para a cultura do sorgo no Brasil. **Revista Científica de Agronomia**, v. 7, p. 233-240, 2020.

MENDES, S. M.; WAQUIL, J. M.; VIANA, P. A.; PIMENTEL, M. A. G. Manejo de pragas. Em: **Sorgo: do plantio à colheita**, ed. BORÉM, A.; PIMENTEL, L. D.; PARELLA, R. A. C. (Ed.). Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, p. 207-241, 2014.

MISHRA, G.; SRIVASTAVA, S.; PANDA, B. K.; MISHRA, H. N. Rapid assessment of quality change and insect infestation in stored wheat grain using FT-NIR spectroscopy and chemometrics. **Food Analytical Methods**, v. 11, p. 1189-1198, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12161-017-1094-9>.

MOUND, L. **Common insect pests of stored food products**. London: British Museum of Natural History, p. 68, 1989.

NEETHIRAJAN, S.; KARUNAKARAN, C.; JAYAS, D. S.; WHITE, N. D. G. Detection techniques for stored-product insects in grain. **Food Control**, v. 18, p. 157-162, 2007. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2005.09.008>.

NIU, H.; HUA, L.; HARDY, G.; AGARWAL, M.; REN, Y. Analysis of volatiles from stored wheat and *Rhyzopertha dominica* (F.) with solid phase microextraction-gas chromatography mass spectrometry. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, v. 96, p. 1697–1703, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1002/jsfa.7274>

OJO, J. A.; OMOLOYE, A. A. Development and life history of *Sitophilus zeamais* (Coleoptera: Curculionidae) on cereal crops. **Advances in Agriculture**, v. 2016, p. 7836379, p. 1-8, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1155/2016/7836379>.

OLIVERI, P.; SIMONETTI, R. Chemometrics for food authenticity applications. Em: DOWNEY, G. (Ed.). **Advances in Food Authenticity Testing**. Cambridge: Woodhead Publishing, p. 701-728. ISBN 978-0-08-100220-9, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100220-9.00025-4>.

OWENS, F. N.; SECRIST, D. S.; HILL, W. J.; GILL, D. R. The effect of grain source and grain processing on performance of feedlot cattle: a review. **Journal of Animal Science**, v. 75, p. 868-879, 1997. DOI: <https://doi.org/10.2527/1997.753868x>.

PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: a mature analytical technique with new perspectives—A review. **Analytica Chimica Acta**, v. 1026, p. 8-36, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2018.04.004>.

PASQUINI, C. Near infrared spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 14, p. 198-219, 2003. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0103-50532003000200006>.

PEREIRA FILHO, I. A.; RODRIGUES, J. A. S. (Ed.). **Sorgo: o produtor pergunta, a Embrapa responde**. Brasília, DF: Embrapa, p. 327, 2015.

PIMENTEL, M.A.G.; MENDES, S.M.; OLIVEIRA, I.R. de. **Indicações técnicas para controle de pragas e armazenamento de grãos de sorgo**. Sete Lagoas: Embrapa Milho e Sorgo, p. 38, 2019 (Embrapa Milho e Sorgo. Circular Técnica, 251).

PIMENTEL, M. A. G. Manejo integrado de pragas em grãos armazenados. In: PEREIRA FILHO, I. A.; RODRIGUES, J. A. S. (Ed.). **Sorgo: o produtor pergunta a Embrapa responde**. Brasília, DF: Embrapa, p. 213-227, 2015.

REICHERT, R. D., C. G. YOUNGS, AND B. D. OOMAH. Measurement of grain hardness and dehulling quality with a multisample, tangential abrasive dehulling device. Em: **Proceedings of the International Symposium on sorghum grain quality**, 186. Patancheru, India: ICRISAT, 1982.

RINNAN, A.; VAN DEN BERG, F.; ENGELSEN, S. B. Review of the most common pre processing techniques for near-infrared spectra. **TrAC - Trends Analytical Chemistry**, v. 28, p. 1201–22, 2009. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2009.07.007>.

RODIONOVA, O.; TITOVA, A.; POMERANTSEV, A. I. Discriminant analysis is an inappropriate method of authentication. **TrAC - Trends Analytical Chemistry**, v. 78, p. 17-22, 2016. <http://dx.doi.org/10.1016/j.trac.2016.01.010>.

ROONEY, L., W. L. ROONEY E S. SERNA-SALDIVAR. Sorghum. **Reference Module in Food Science**:1–6, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100596-5.02986-3>.

ROSTAGNO, H. S.; ALBINO, L. F. T.; CALDERANO, A. A.; HANNAS, M. I.; SAKOMURA, N. K.; PERAZZO, F. G.; ROCHA, G. C.; SARAIVA, A.; ABREU, M. L. T.; GENOVA, J. L.; TAVERNARI, F. C. **Tabelas brasileiras para aves e suínos**. 5. ed. Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, 2024.

SANG, Y.; BEAN, S.; SEIB, A., P.; PEDERSEN, J.; and Y. SHI. Structure and functional properties of sorghum starches differing in amylose content. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v. 56, p. 6680–6685, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1021/jf800577x>.

SANTANA, F. B.; SOUZA, A. M.; ALMEIDA, M. R.; BREITKREITZ, M. C.; FILGUEIRAS, P. R.; SENA, M. M.; POPPI, R. J. Experimento didático de quimiometria para classificação de óleos vegetais comestíveis por espectroscopia no infravermelho médio combinado com análise discriminante por mínimos quadrados parciais: um tutorial, parte V. **Química Nova**, v. 43, p. 371-381, 2020. DOI: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170480>.

SANTOS, P. M.; SIMEONE, M. L. F.; PIMENTEL, M. A. G.; SENA, M. M. Non-destructive screening method for detecting the presence of insects in sorghum grains using near infrared spectroscopy and discriminant analysis. **Microchemical Journal**, v. 149, p. 104057, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.104057>.

SCALBERT, A., C. MANACH, C. MORAND, C. RÉMÉSY, AND L. JIMÉNEZ. Dietary polyphenols and the prevention of diseases. **Critical Reviews in Food Science and Nutrition**, v. 45, p. 287–306, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1080/1040869059096>.

SCHEUERMANN, N. G. **Utilização do sorgo em rações para frangos de corte**. Concórdia: Embrapa CNPSA, p. 3, 1998 (Embrapa-CNPSA. Instrução Técnica para o Avicultor, 9).

SCOLARI, D. D. G. Produção agrícola mundial: o potencial do Brasil. **Revista da Fundação Milton Campos**, Brasília, DF, v. 25, p. 09-86, 2006.

SEDGHI, M., A. GOLIAN, P. SOLEIMANI-ROODI, A. AHMADI E M. AAMI-AZGHADI. Relationship between color and tannin content in sorghum grain: Application of image analysis and Artificial Neural Network. **Revista Brasileira de Ciência Avícola**, v. 14, p. 57–62, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1590/S1516-635X2012000100010>.

SENA, M. M.; ALMEIDA, M. R.; BRAGA, J. W. B.; POPPI, R. J. Multivariate statistical analysis and chemometrics. In: FRANCA, A. S.; NOLLET, L. M. L. (Org.). **Spectroscopic methods in food analysis**. Boca Raton: CRC Press, p. 273-314, 2017. DOI: <https://doi.org/10.1201/9781315152769-10>.

SHENK, J.; WESTERHAUS, M. Comments on Standardisation: Part 2. **NIR news**, v. 4, n. 5, p. 13–15, 1993. DOI: <http://dx.doi.org/10.1255/nirn.213>.

SHIN, L. **Sorghum based breakfast cereal**. Lincoln, NE: University of Nebraska-Lincoln, 1986.

SILVA, L. T.; SILVA, K. J.; MENEZES, C. B.; QUEIROZ, V. A. V.; SCHAFFERT, R. E. Seleção de cultivares de sorgo granífero para características que promovam a saúde humana. Em: **SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA EMBRAPA MILHO E SORGO** – PIBIC/CNPq, 21., 2023, Sete Lagoas. Anais. Sete Lagoas: Embrapa Milho e Sorgo, p. 92–97, 2025. Disponível em: <https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1177607/1/Selecao-de-cultivares-de-sorgo-granifero.pdf>. Acesso: dezembro 2025.

SINGH, C. B.; JAYAS, D. S.; PALIWAL, J.; WHITE, N. D. G. Identification of insect-damaged wheat kernels using short-wave near-infrared hyperspectral and digital colour imaging. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 73, p. 118–125, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compag.2010.06.001>

SIKABBUBBA, R. **The effect of alcohol soluble proteins on the digestibility of sorghum.**, Etats-Unis. Manhattan, KS: Kansas State University, 1989.

SOLÀ, M.; RIUDAVETS, J.; AGUSTÍ, N. Detection and identification of five common internal grain insect pests by multiplex PCR. **Food Control**, v. 84, p. 246–254, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2017.08.002>

SOUZA, A. M.; POPPI, R.J. Experimento didático de quimiometria para análise exploratória de óleos vegetais comestíveis por espectroscopia no infravermelho médio e análise de componentes principais: um tutorial, parte I. **Química Nova**, v. 35, p. 223–229, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422012000100039>.

SOUZA, E. A.; SIMEONE, M. L. F.; MATOS, M. V. R.; MAMEDES, A. S.; SOUZA, E. G.; TROMBETE, F. M.; PIMENTEL, M. A. G. Espectroscopia no Infravermelho Próximo como Método Alternativo para Detecção de *Sitophilus zeamais* em Milho. Em: **CONFERÊNCIA BRASILEIRA DE PÓS-COLHEITA**, 8., 2019, Anais. ABRAPOS, p. 116-121, 2019.

TAYLOR, J. R. N., AND J. DEWAR. Developments in sorghum food technologies. **Advances in Food and Nutrition Research**, v. 43, p. 217–264, 2001. DOI: [https://doi.org/10.1016/s1043-4526\(01\)43006-3](https://doi.org/10.1016/s1043-4526(01)43006-3).

TAYLOR, J. R. N.; SCHOBBER, T. J.; BEAN, S. R. Novel food and non-food uses for sorghum and millets. **Journal of Cereal Science**, v. 44, p. 252-271, 2006. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jcs.2006.06.009>.

TIBOLA, C. S.; MEDEIROS, E. P.; SIMEONE, M. L. F.; OLIVEIRA, M. A. Espectroscopia no Infravermelho próximo para avaliar indicadores de qualidade tecnológica e contaminantes em grãos. Embrapa, 2018. Disponível em:

https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1106595/1/ID445392018LVe_spectroscopia.pdf. Acesso em: janeiro 2025.

TRAN, T. N.; AFANADOR, N. L.; BUYDENS, L. M. C.; BLANCHET, L. Interpretation of variable importance in Partial Least Squares with Significance Multivariate Correlation (sMC). **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. p. 138, 153–160, 2014. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2014.08.005>.

USDA. US Department of Agriculture. Sorghum Explorer. Sorghum 2024 World Production. Disponível em: <https://ipad.fas.usda.gov/cropexplorer/cropview/commodityView.aspx?cropid=0459200>. Acessado em: julho 2025.

VALADARES FILHO, S. C.; MAGALHÃES, K. A.; ROCHA JÚNIOR, V. R.; CAPELLE, E. R. (Ed.). **Tabelas brasileiras de composição de alimentos para bovinos**. 2. ed. Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, p. 239, 2006.

WAGAW, K. Review on mechanisms of drought tolerance in *Sorghum* (*Sorghum bicolor* (L.) Moench) basis and breeding methods. **Academic Research Journal of Agricultural Science and Research**, v. 7, p. 87–99, 2019. DOI: DOI: DOI: 10.14662/ARJASR2019.007.

WANG, Z.; HUANG, W.; LI, J.; LIU, S.; FAN, S. Assessment of protein content and insect infestation of maize seeds based on on-line near-infrared spectroscopy and machine learning. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 211, p. 107969, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compag.2023.107969>.

WANISKA, R. D.; ROONEY, L. W.; MCDONOUGH, C. M. *Sorghum*: Utilization. Em: WRIGLEY, C. W.; CORK, H.; SEETHARAMAN, K.; FAUBION, J. (Eds.). **Encyclopedia of Food Grains**. Academic Press, England, p. 116-123, 2016.

WANISKA, R., AND L. ROONEY. **Structure and chemistry of the sorghum caryopsis**. New York: John Wiley and Sons, Inc., 2000.

WEBER, I. F.; FEDDERN, V.; VIEIRA, O. F. V.; VIEIRA, J. C.; LIMA, G. J. M. M. Ocorrência de micotoxinas em farelos de soja, trigo e sorgo no Brasil nos anos de 2016 e 2017. Em: **SIMPÓSIO DE SEGURANÇA ALIMENTAR**, 6., 2018, Gramado. Desvendando mitos: anais. Porto Alegre: UFRGS; Campinas: SBCTA, 2018

WORKMAN JR., J. J.; WEYER, L. **Practical guide to interpretive near infrared spectroscopy**. CRC Press, Boca Raton, 2008. DOI: <https://doi.org/10.1201/9781420018318>.

WU, Y.; LI, X.; XIANG, W.; ZHU, C.; LIN, Z.; WU, Y.; LI, J.; PANDRAVADA, S.; RIDDER, D. D.; BAI, G.; WANG, M. L.; TRICK, H. N.; BEAN, S. R.; TUINSTRA, M. R.; TESSO, T. T.; YU, J. Presence of tannins in sorghum grains is conditioned by different natural alleles of Tannin. **Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America**, v. 109, p. 10281–10286, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1073/pnas.1201700109>.

YANG, L.; ALLRED, K. F.; GEERA, B.; ALLRED, C. D.; AWIKA, J. M. Sorghum phenolics demonstrate estrogenic action and induce apoptosis in nonmalignant colonocytes. **Nutrition and Cancer**, v. 64, p. 419-427, 2012. DOI: <http://dx.doi.org/10.1080/01635581.2012.657333>.

ZAREEF, M.; CHEN, Q.; HASSAN, M. M.; ARSLAN, M.; HASHIM, M. M.; AHMAD, W.; KUTSANEDZIE, F. Y. H.; AGYEKUM, A. A. An Overview on the Applications of Typical Non-linear Algorithms Coupled with NIR Spectroscopy in Food Analysis. **Food Engineering Reviews**, v. 12, p. 173-190, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1007/s12393-020-09210-7>.

ZHANG, L., A. S. RAVIPATI, S. R. KOYYALAMUDI, S. C. JEONG, N. REDDY, P. T. SMITH, J. BARTLETT, K. SHANMUGAM, G. MÜNCH, AND M. J. WU. Antioxidant and anti-inflammatory activities of selected medicinal plants containing phenolic and flavonoid compounds. **Journal of Agricultural and Food Chemistry**, v. 59, p. 12361–12367, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1021/jf203146e>.

ZHU, C.; FU, X.; ZHANG, J.; QIN, K.; WU, C. Review of portable near infrared spectrometers: Current status and new techniques. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, v. 30, p. 51-66, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1177/09670335211030617>.