Valor nutricional del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) basada en NIRS y quimiometría

Nutritional value of Cuba grass CT-115 (*Pennisetum purpureum*) based on NIRS and chemometry

Armando Guerrero-Peña[1], Gloria Esperanza De Dios-León[2*], Francisco Anguebes-Franceschi[3], Jesús Alberto Ramos-Juárez[1]

[1]Colegio de Postgraduados, Campus Tabasco. Periférico Carlos A. Molina s/n, km 3.5. Cárdenas-Huimanguillo. 86500 Cárdenas, Tabasco, México.
[2]Universidad Veracruzana. Facultad de Ciencias Biológicas y Agropecuarias, Región Orizaba-Córdoba. Carretera Peñuelas Amatlán kilómetro 177, 94500 Córdoba, Veracruz, México.
[3]Facultad de Química, Universidad Autónoma del Carmen. Universidad 8, Petrolera, 24180 Cd del Carmen, Campeche, México.

*Autor de correspondencia: gdedios@uv.mx

Artículo científico

Recibido: 25 de agosto 2025
Aceptado: 05 de mayo 2026

RESUMEN. En este trabajo se emplearon espectros visible e infrarrojo (VIS-NIR) y la quimiometría para desarrollar ecuaciones para estimar propiedades nutricionales y la degradación *in situ* del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*). Se colectaron 134 muestras de pasto de cinco edades de rebrote y en cada una se determinó: proteína cruda (PC), fibra detergente neutro (FDN), fibra detergente ácido (FDA), contenido celular (CC), hemicelulosa (H), cenizas (C), degradación *in situ* de la materia seca (DIMS) y los espectros VIS-NIR. Con las propiedades medidas y los espectros de cada muestra se generaron las respectivas ecuaciones para la predicción de estas. Los coeficientes de determinación y correlación de la validación interna y externa obtenidos para cada modelo son excelentes, cercanos a la unidad (0.988 a 0.997), mientras que los errores estándar de calibración (SEC, 0.282 a 1.292) y de validación (SEV 0.317 a 1.383) son bajos; la relación SEC/SEV es buena (menor a la unidad, de 0.766 a 0.938). Las relaciones de desviación de la predicción (RPD) fueron aceptables para DIMS y FDA (1.41 y 1.71, respectivamente) y excelentes para PC, FDN, CC, H y C (2.33 a 7.88). Los estadísticos confirman que las ecuaciones de predicción, basadas en las combinaciones espectrales VIS-NIR, estiman cada parámetro, con precisión. Con la ventaja de que el análisis con NIRS no es destructivo, no genera residuos químicos, requiere menor tiempo analítico (minutos) y menor costo del análisis; cuando es comparada con los métodos convencionales.
Palabras clave: Forraje tropical, análisis bromatológico, regresión múltiple.

ABSTRACT. In this work, visible and infrared (VIS-NIR) spectra and chemometrics were used to develop equations to estimate nutritional properties and in situ degradation of Cuba CT-115 grass (Pennisetum purpureum). 134 grass samples of five regrowth ages were collected and in each one the following were determined: crude protein (CP), neutral detergent fiber (NDF), acid detergent fiber (ADF), cell content (CC), hemicellulose (H), ash (A), in situ dry matter degradation (ISDM) and VIS-NIR-SWIR spectrum. With the measured properties and the spectra of each sample, the respective equations for their prediction were generated. The determination and correlation coefficients, from the internal and external validation, obtained for each model are excellent, close to unity (0.988 to 0.997); while the standard errors of calibration (SEC, 0282 to 1.292) and validation (SEV 0.317 to 1.383) are low; the SEC/SEV ratio is good (less than unity, from 0.766 to 0.938). Prediction deviation (PDR) ratios are acceptable for ISDM and FDA (1.41 and 1.71) and excellent for PC, NDF and ADF (1.41 and 1.71) and excellent for PC, NDF, CC, H, and C (2.33 to 7.88). Based on the statistics, it is concluded that the prediction equations, based on the VIS-NIR-SWIR spectral combinations, estimate each parameter with precision and accuracy. With the advantages that NIRS analysis is non –destructive, does not generate chemical waste, requires less analytical time (minutes) and lower analysis cost; when compared to conventional methods.
Keywords: Tropical forage, bromatological analysis, multiple regression (PLS).

Como citar: Guerrero-Peña A, De Dios-León GE, Anguebes-Franceschi F, Ramos-Juárez JA (2026) Valor nutricional del pasto cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) basada en NIRS y quimiometría. Ecosistemas y Recursos Agropecuarios 13(2): e4748. DOI: 10.19136/era.a13n2.4748.

INTRODUCCIÓN

En la región tropical húmeda, la alimentación de los bovinos se basa principalmente en pastos y forrajes (Detmann *et al*. 2014) y específicamente en la República Mexicana, la superficie ocupada por praderas tropicales es la cuarta parte del territorio nacional (Bolaños *et al.* 2010). En estas regiones, la producción de biomasa y valor nutritivo de los pastos, depende de las condiciones ambientales que tienen lugar durante el año (épocas de: seca, lluvia y norte); además de considerar que el valor nutritivo de las especies forrajeras disminuye rápidamente al aumentar la edad de rebrote (Valenciaga 2006). Para evaluar la calidad de los forrajes, a la fecha, se utilizan métodos químicos convencionales de referencia que se caracterizan por ser destructivos, laboriosos, requieren mucho tiempo de análisis (desde horas a días), mano de obra y reactivos. Además, se generan residuos de laboratorios, y se utiliza casi toda la infraestructura de los laboratorios.

La tendencia actual de la química analítica es resolver el problema planteado con el menor esfuerzo y costo posible, mediante la aplicación de métodos instrumentales y técnicas quimiometría, obteniendo resultados estadísticamente iguales a los obtenidos con los métodos convencionales de referencia. La tecnología NIR tiene aplicación en estudios cuantitativos y cualitativos de la alimentación animal. Se han desarrollado modelos cuantitativos con NIRS para estudiar la composición química y parámetros biológicos de ensilados de maíz (De-Boever *et al*. 2002, Lovett *et al*. 2005), de pastos y trébol rojo (Nordheim *et al*. 2007). Al respecto, Decruyenaere *et al*. (2009) proponen calibraciones con NIRS para el estudio de ingesta y digestibilidad de forrajes verde. En los estudios cualitativos de Alomar *et al*. (1999) y Alomar *et al*. (2003) investigaron el efecto del secado al horno y liofilizado, en la composición y variación de los espectros NIRS del ensilado de pasto. Otra aplicación de NIRS fue la realizada por Jacobi *et al*. (2012) al desarrollar modelos de calibración para cuantificar la producción de biogás en el ensilado de maíz. Mientras que Ramos *et al*. (2023) proponen generar modelos de calibración basados con un espectrofotómetro de infrarrojo cercano para estimar la composición química de la digesta ileal y de heces porcinos. También Basurto *et al*. (2025) usan la tecnología NIRS para establecer ecuaciones de calibración para la composición de maíz y sorgo (en grano) y soya y canola (en polvo), con buena capacidad de predicción para materia orgánica, proteína cruda, extracto etéreo, energía bruta, y las fibras detergente ácidas y neutras. A la fecha, la espectroscopia VIS-NIR ha mejorado la capacidad de medir y monitorear los componentes de matrices complejas, como un enfoque novedoso, eficiente y rentable en comparación con métodos convencionales (Nocita *et al*. 2015).

Con la finalidad de desarrollar técnicas analíticas rápidas y confiables para evaluar la calidad de productos agropecuarios en el trópico húmedo de México, este trabajo tuvo como objetivo desarrollar y validad las ecuaciones de predicción basadas en combinaciones espectrales (VIS-NIR) y modelado quimiométrico para estimar las propiedades contenido de materia seca, proteína cruda, fibra detergente neutra, fibra detergente ácida, contenido celular, cenizas y degradación *in situ* de la materia seca del pasto *Pennisetum purpureum*, Cuba C-115.

MATERIALES Y MÉTODOS

Obtención de muestras y preparación

Las muestras proceden de un experimento para evaluar la producción y valor nutritivo del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) establecido en la región de la Chontalpa, Cárdenas, Tabasco ubicada en el sureste de México (De-Dios-León *et al*. 2022). Después de la cosecha, las muestras se colocaron en bolsas de papel perforadas; y se deshidrataron a 70 °C durante 72 h en una estufa de aire forzado. La molienda fue realizada en un molino marca Thomas Willey adaptado con un tamiz de 0.5 mm de diámetro. Las muestras se conservaron en botes de plástico con sellado hermético hasta su uso.

Análisis bromatológicos de referencia

Los análisis bromatológicos de referencia fueron: proteína cruda (PC) determinada con la metodología descrita en el AOAC (2005); análisis de fibra detergente neutro (FDN) y fibra detergente ácido (FDA) analizadas con la metodología propuesta por Van-Soest *et al*. (1991). El contenido celular (CC) se calculó por diferencia 100-FDN, y la hemicelulosa (H) mediante la diferencia FDN-FDA. Para medir la degradación *in situ* de la materia seca (DIMS) se utilizó la metodología descrita por Orskov (1992) y cenizas (C) por calcinación y cuantificación gravimétrica.

Análisis NIRS

El espectrofotómetro utilizado para obtener los espectros VIS-NIR es marca FOSS NIRSystems, modelo Versatile Agri Analyzer 6500 System II Vertical Type 461008. La medición de la reflectancia fue de 400-2498 nm a intervalos de 2 nm. La celda porta muestras es rectangular de 24 cm^3 con ventana de cuarzo (el peso aproximado de la muestra fue de 5.7 g). Los registros fueron obtenidos con el programa ISISCAN de FOSS.

Validación de la calibración

La validación de la ecuación de calibración (modelo, por ser más frecuente el termino en química analítica) se realizó en dos etapas: 1) validación cruzada o interna y 2) validación externa. De las 134 muestras del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*), 121 muestras (~90%) fueron elegidas para integrar el conjunto de calibración (validación interna), y las 13 muestras restantes (~10%) se utilizaron para realizar la validación externa; las cuales fueron obtenidas mediante una selección dirigida con objeto de tener muestras en todo el intervalo de concentración del calibrado.

En la primera etapa fue seleccionado el mejor modelo de regresión por mínimos cuadrados parciales (PLS), para cada uno de los siete parámetros con base en los indicadores estadísticos de la validación interna. La segunda etapa consistió en la validación externa de cada uno de los modelos seleccionados. Para construir y validar los modelos de calibración se empleó el software Pirouette (Chemometrics Software versión 4.5 para Windows de infometrix Inc. Copyrigth 2007).

El modelo de calibración se construyó utilizando la relación existente entre la concentración de cada parámetro en cada una de las muestras y los valores obtenidos a diferentes longitudes de onda, lo cual puede representarse, en un formato simplificado en la ecuación siguiente (Infometrix.

Pirouette user guide: Pirouette multivariate analysis software. Versión 4.5. Riverside, Seattle, USA. 2011):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_{\lambda 1} + \beta_2 X_{\lambda 2} + \beta_3 X_{\lambda 3} + \ldots + \beta_n X_{\lambda n} + f$$

Donde: β_0 = es el valor de Y cuando X toma el valor de cero, β_n = es la pendiente de la recta, λ = son las longitudes de onda donde la correlación de la concentración de los componentes es máxima en forma positiva o negativa y f contiene el error descrito en la relación.

Análisis quimiométrico

Los espectros VIS-NIR fueron pretratados matemáticamente para minimizar las contribuciones no deseadas presentes en las señales como los efectos de la dispersión de la luz y las características físicas de la muestra (efecto matriz, como el color y el tamaño de partícula) (Barnes *et al*. 1989), para lo cual se emplearon diferentes combinaciones de los algoritmos: *smooth*, *normalize*, log10, *aligned* to 1, SNV, MSC, *divide by*, 2nd *derivative* y 1st *derivative*, integrados en el programa *Pirouette*.

Para seleccionar las mejores ecuaciones de NIRS de las propiedades bromatológicas descritas, fueron utilizados los calificadores estadísticos: el coeficiente de correlación múltiple (RSQ), el error estándar de calibración (SEC), el error estándar de validación (SEV), el error estándar de validación cruzada (SECV), la relación de desviación de la predicción (RDP), el error estándar de predicción (SEP), el error estándar de predicción corregido por BIAS (SEPC), la relación (SEC/SEP) y la prueba t para datos pareados.

RESULTADOS

Análisis químico

En las Tablas 1 y 2 son presentados los resultados de análisis químicos obtenidos en las muestras de pasto Cuba CT-115, los cuales se usaron como referencia para la construcción del modelo de medición y para la validación externa de la ecuación. Las muestras presentaron un intervalo amplio para cada propiedad nutricional, como se observa en los valores mínimos y máximos; lo cual es atribuible al origen de las muestras, diferentes días de corte y tres épocas del año (lluvia, seca y norte). Con objeto de evaluar todo el intervalo de predicción del modelo, los datos del conjunto de validación externa están en el mismo intervalo que el conjunto de validación interna.

Tabla 1. Análisis químico de referencia de las propiedades del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) para la construcción del modelo de estimación y su validación interna con 121 muestras.

Parámetro	Media	Mínimo	Máximo	DE[1]
Proteína Cruda (%)	11	5	19	3.6
DIMS[2] (%)	47	33	61	6.4
Fibra Detergente Neutro (%)	69	37	90	9.4
Fibra Detergente Ácida (%)	38	18	53	7.1
Contenido celular (%)	31	10	63	9.2
Hemicelulosa (%)	32	13	45	5.0
Cenizas (%)	18	11	32	4.4

[1]DE: Desviación estándar. [2]DIMS: Degradación *in situ* de la materia seca.

Tabla 2. Análisis químico de referencia de las propiedades de trece muestras del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) para la validación externa.

Parámetro	Media	Mínimo	Máximo	DE[1]
Proteína Cruda (%)	11	5	17	4.1
DIMS[2] (%)	46	33	61	7.1
Fibra Detergente Neutro (%)	69	51	86	11.9
Fibra Detergente Ácida (%)	34	23	53	8.8
Contenido Celular (%)	29	14	49	12.9
Hemicelulosa (%)	31	21	21	6.4
Cenizas (%)	18	11	28	5.8

[1]DE: Desviación estándar. [2]DIMS: Degradación *in situ* de la materia seca.

Información espectral

En la Figura 1 se presentan los espectros NIRS obtenidos en cada una de las 134 muestras del pasto Cuba CT-115; se observa una distribución uniforme del espectro en el intervalo VIS-NIRS utilizado para la calibración de los siete parámetros estudiados.

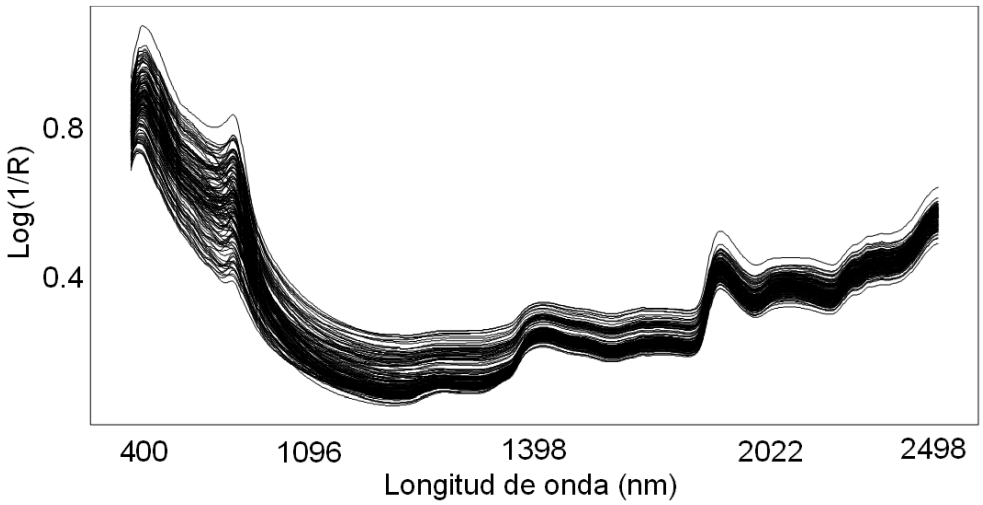


Figura 1. Espectros VIS-NIR de las 134 muestras del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*).

Validación de las ecuaciones

Se obtuvieron los modelos de medición que relacionan los espectros matemáticamente transformados y los valores de referencia de cada parámetro del pasto Cuba CT-115. Para cada ecuación fueron usados diferentes transformaciones con la finalidad de obtener los calibrados, y los mejores estimadores estadísticos (Tabla 3). Dichas ecuaciones fueron evaluadas en su linealidad y precisión; como primer criterio de selección del mejor tratamiento matemático para establecer las calibraciones. El número de factores necesarios para establecer los modelos fue entre 5 y 7.

El coeficiente de correlación múltiple (RSQ) que mide la linealidad, presentó valores altos (cercanos a 1.0), lo que indica linealidad alta entre los valores de referencia y los estimados por el cada modelo; y el error estándar de calibración (SEC) que mide la precisión en la estimación de

cada propiedad, se obtuvieron valores bajos. Así también, la calidad de los valores de referencia de cada parámetro evaluado, pudo contribuir a que se obtuvieran valores más bajos del SEC, en el presente trabajo. En la construcción de los modelos de calibración fueron eliminadas las muestras con valores atípicos, también llamadas *outliers*. Para proteína cruda fueron descartadas nueve, para degradación *in situ* de la materia seca seis, en fibra detergente neutra once, en fibra detergente ácida siete, para contenido celular cinco, para hemicelulosa catorce y para cenizas, 18.

Tabla 3. Ecuaciones de calibración del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*) a diferentes edades de rebrote.

Parámetro (%)	n[1]	Tratamiento Matemático[2]	Longitudes de onda nm[3]	SEC[4]	RSQ[5]
Proteína Cruda	112	a,b,c,f,g,h,d	400-2498	0.282	0.997
DIMS[6]	115	a,b,c,d,f,g,h	400-2498	0.926	0.988
Fibra Detergente Neutro	110	a,b,c,d,e	400-2498	0.541	0.998
Fibra Detergente Ácida	114	a,b	400-2498	0.600	0.996
Contenido celular	116	a,b	400-2498	1.291	0.989
Hemicelulosa	107	a,b,c,d	400-2498	0.383	0.995
Cenizas	103	a,b,c,d,i	400-2498	0.288	0.997

[1]Número de muestras. [2]Transformación que se realiza sobre los datos de reflectancia obtenidos originalmente, el orden es: a) *Smooth*, b) *Normalize*, c) Log10, d) *Aligned to* 1, e) SNV, f) MSC, g) *Divide by*, h) 2nd *Derivative*, i) 1st *Derivative*. [3]Nanómetros. [4]Error Estándar de Calibración. [5]Coeficiente de correlación. [6]DIMS: degradación *in situ* de la materia seca.

Validación interna

La validación cruzada fue realizada dividiendo el total de muestras de entrenamiento en 20 grupos de los cuales 19 fueron tomados para establecer una primera calibración y uno para la predicción. El proceso fue repetido para cada grupo hasta que todas las muestras pasaron por la predicción. En la Tabla 4 se observa que se obtuvieron valores altos de coeficiente de correlación (r^2), lo que significa una alta correlación entre los datos estimados con los modelos propuestos y los valores de referencia (datos químicos), lo cual significa exactitud del resultado; así como bajos errores estándar de calibración, siendo los mayores valores de 1.0 y 1.3. Estos dos, son criterios importantes para calificar como correctas las ecuaciones de calibración.

Los resultados de los métodos químicos de referencia y los estimados con las ecuaciones VIS-NIRS fueron comparados mediante la prueba *t* de *Student* para datos apareados, con la hipótesis nula (H_o), de que no existen diferencias significativas. Para efecto de este estudio, los resultados de la prueba de *t* calculada (t_c) fueron en el intervalo de 0.02 a 0.27, mientras que el valor crítico de la *t* fue 1.98; y al ser mayor el valor crítico de t que las tc en cada variable, se acepta la H_o.

En la Figura 2 se observan las correlaciones de los valores obtenidos con el método de referencia con respecto a la predicción de los modelos VIS-NIR para cada uno de los parámetros. Se muestra una correlación positiva entre los valores obtenidos en el laboratorio (valores de referencia) para cada uno de los parámetros y los valores estimados con los modelos VIS-NIR para los 134 datos utilizados para la validación interna. En cada una de las gráficas se observa que existe una correlación positiva y alta, que es confirmado con el valor del coeficiente de correlación de la Tabla 4.

Tabla 4. Datos de validación interna de los modelos de estimación de cada propiedad del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*).

Parámetro (%)	Factor	SEV	Press Val	r Val	SEC	Press Cal	r Cal	t_c
PC, %	7	0.317	11.278	0.996	0.282	8.253	0.997	0.02
DIMS, %	6	1.028	121.552	0.985	0.926	92.533	0.988	0.12
FDN, %	6	0.706	54.882	0.997	0.541	30.174	0.998	0.70
FDA, %	6	0.640	46.708	0.996	0.600	38.546	0.996	0.12
CC, %	6	1.383	221.870	0.986	1.291	181.700	0.989	0.18
H, %	5	0.450	21.651	0.993	0.383	14.833	0.995	0.27
C, %	5	0.357	13.139	0.996	0.288	8.025	0.997	0.03

PC: proteína cruda, DIMS: degradación *in situ* de la materia seca, FDN: fibra detergente neutro, FDA: fibra detergente ácida, CC: contenido celular, H: hemicelulosa, C: cenizas, SECV : error estándar de validación cruzada, PRESS Val: suma de cuadrados de la predicción en la validación, r Val: coeficiente de correlación de la validación, SEC: error estándar de calibración, PRESS Cal: suma de cuadrados de la predicción en la calibración, r Cal: coeficiente de correlación de la calibración, t_c: prueba t para datos pareados.

Validación externa

En la validación externa se calificó la exactitud, precisión y robustez de los modelos de calibración NIRS, de cada uno de los siete parámetros estudiados, para ello, se utilizaron 13 muestras no incluidas en la construcción del modelo (aproximadamente el 11% del total de muestras). Los calificadores utilizados son el error estándar de validación, el error estándar de predicción (SEP) y la relación entre la desviación estándar de los datos de referencia (RPD). En la Figura 3 se presentan las correlaciones entre los valores obtenidos en el laboratorio (referencia) para cada uno de los parámetros y los valores estimados con los espectros VIS-NIR, con los 13 datos utilizados para la validación externa. En cada una de las gráficas se observa que existe una correlación directa y fuerte, que lo indica también el alto coeficiente de correlación (>0.98).

En la Figura 4 se presenta la diferencia espectral para el tratamiento matemático (Tabla 3) realizado para la medición de las siete variables medidas del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*). Lo anterior permite visualizar la información subyacente en los espectros originales (sin tratamiento matemático). Estas estructuras espectrales subyacentes demuestran la conectividad entre el dato espectral y la composición química del pasto en estudio y son la base para obtención de los modelos de calibración propuestos.

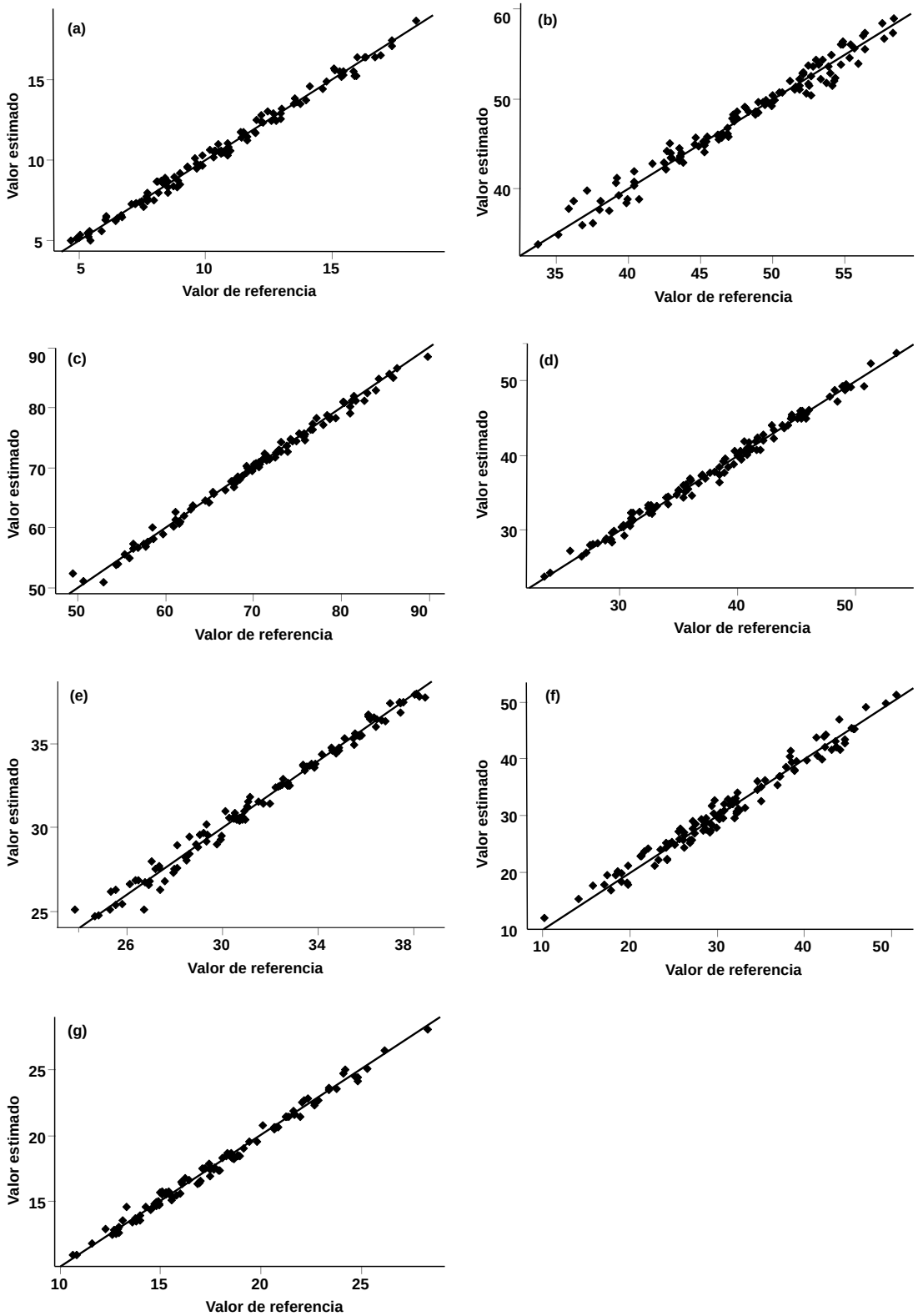


Figura 2. Valores estimados y de referencia en la validación interna de las ecuaciones de calibración VIS-NIR para la estimación de: (a) proteína cruda, (b) digestibilidad *in situ* de la materia seca, (c) fibra detergente neutra, (d) fibra detergente ácida, (e) hemicelulosa, (f) contenido celular y (g) cenizas del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*).

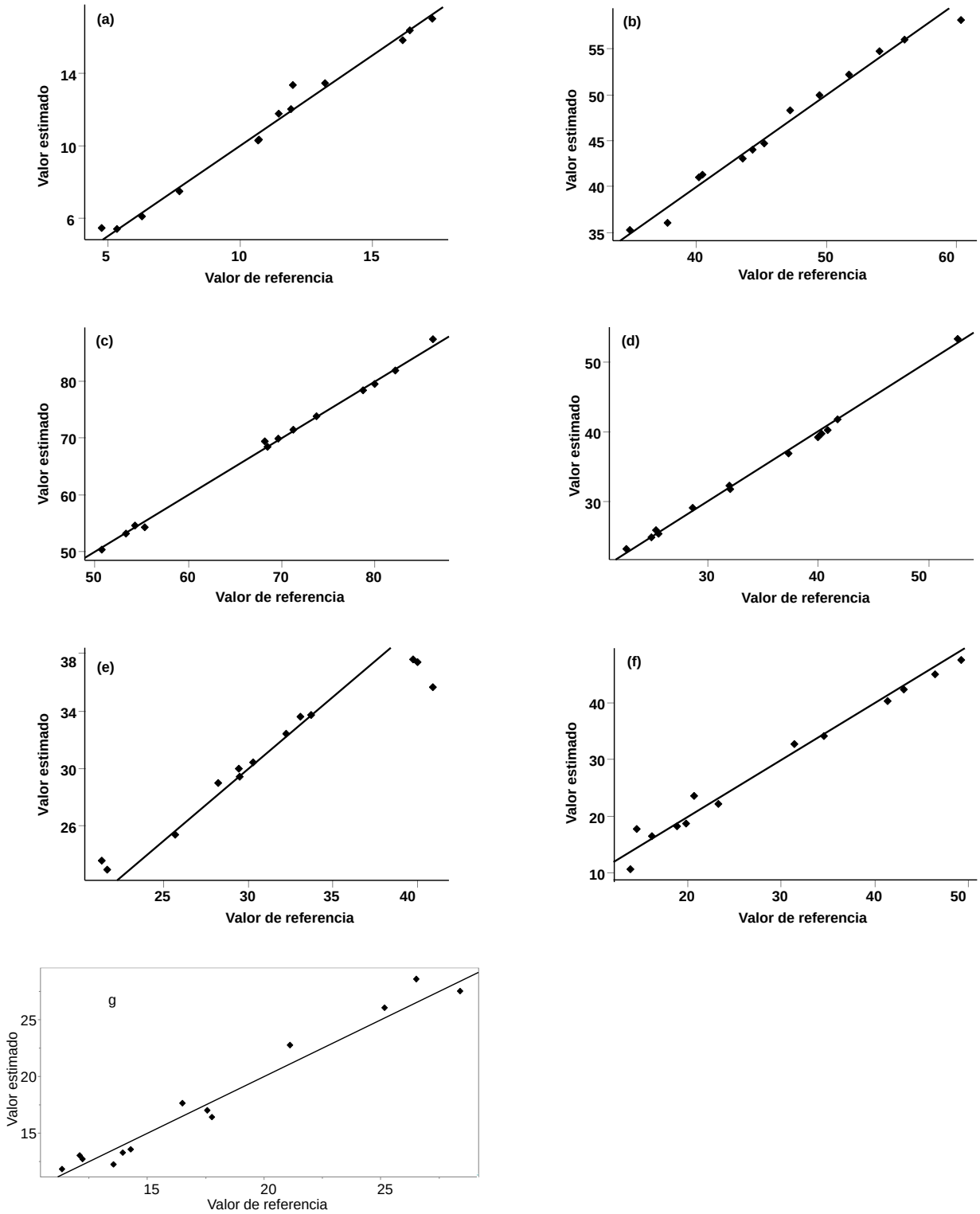


Figura 3. Valores estimados y de referencia en la validación externa de las ecuaciones de calibración VIS-NIR para la estimación de: (a) proteína cruda, (b) digestibilidad *in situ* de la materia seca, (c) fibra detergente neutra, (d) fibra detergente ácida, (e) hemicelulosa, (f) contenido celular y (g) cenizas, del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*).

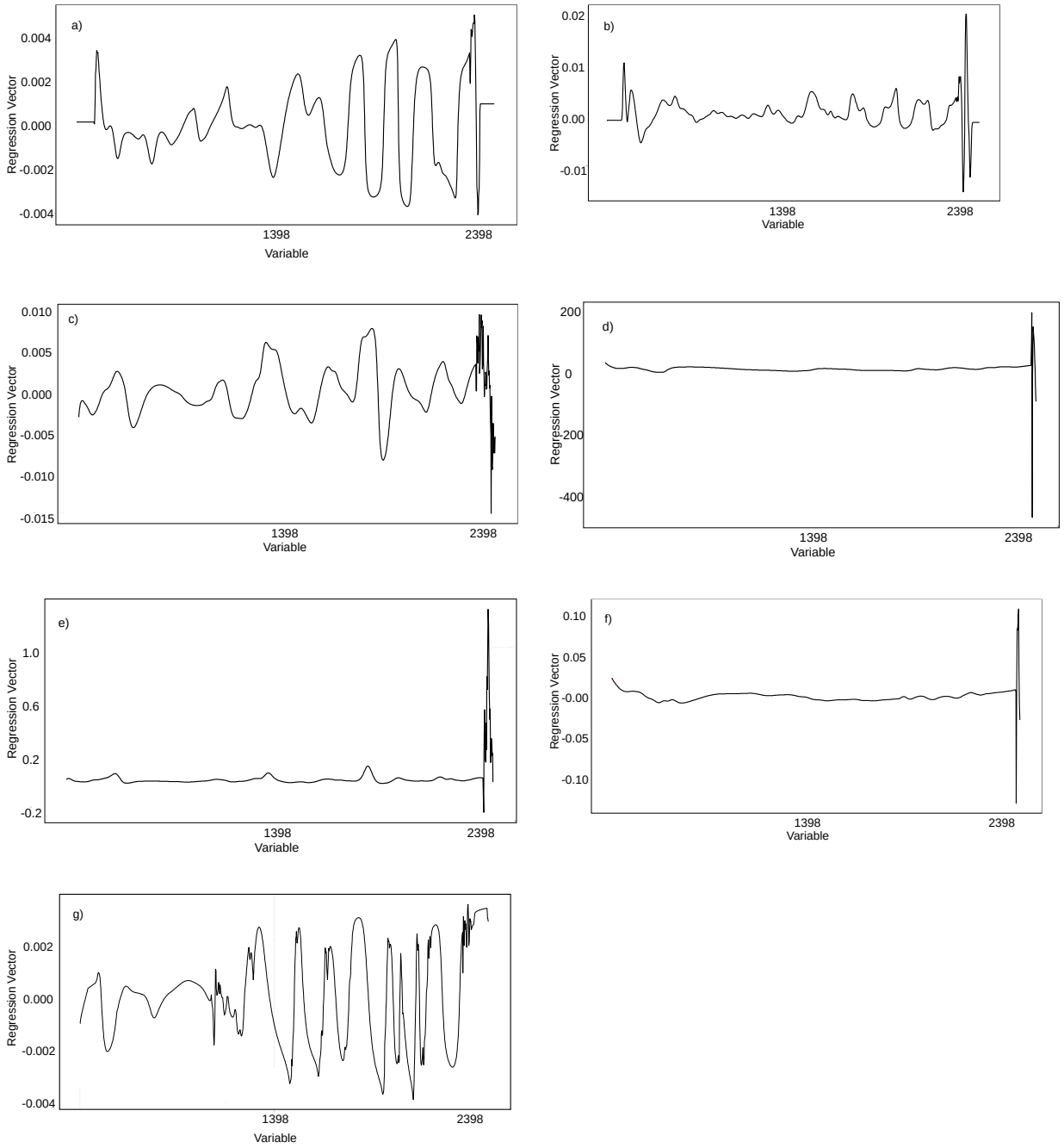


Figura 4. Diferencia espectral para el tratamiento matemático más conveniente que permite la calibración de (a) proteína cruda, (b) digestibilidad *in situ* de la materia seca, (c) fibra detergente neutra, (d) fibra detergente ácida, (e) hemicelulosa, (f) contenido celular y (g) cenizas del pasto Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum*).

DISCUSIÓN

Validación de las ecuaciones

El coeficiente de correlación múltiple (RSQ) que mide la linealidad, presento valores altos (cercanos a 1.0), lo que indica linealidad alta de los modelos; y con base en lo establecido por Saha *et al*. (2017),

todos los modelos establecidos en la presente investigación presentan una excelente RSQ. Al no tener una regla de calificación individual del SEC, se optó por compararlo con los datos reportados en los trabajos realizados en pastos tropicales por Valenciaga *et al*. (2007), Sandoval *et al*. (2008), Alomar *et al*. (2009), Molano *et al*. (2016) y por Fernández-Cabanás *et al*. (2023), en los que el SEC promedio fue 1.32±0.51, valor que es superior a los obtenidos en esta investigación. Esta diferencia puede ser por lo siguiente: 1) la calidad de los datos de referencia (que pueden ser más preciso en esta investigación); al tratamiento matemático (transformación y secuencia de las transformaciones) aplicado en esta modelación, tratamientos que están definidos en los diferentes programas estadísticos usados en cada publicación (Pirouette, WINISI, OMNIC, BCAP, etc.); finalmente se debe mencionar el rigor estadístico en la validación de los modelos, ya que en esta investigación se incluyó la prueba t y el RPD, los cuales no fueron considerados en las investigaciones comparadas.

Como parte de la discusión de resultados, se utilizó un estadístico derivado, que fue la relación (SEC/SEV), para cada parámetro. En promedio fue menor a 1 con valores mínimos de 0.766 y máximos de 0.938; lo que indica un buen ajuste de los modelos establecidos y buena capacidad predictiva. Con base en la propuesta de Bellon-Maurel *et al*. (2010) y Golddshleger *et al*. (2013) los RPD de esta investigación son calificados como regulares para DIMS y FDA, y excelentes para PC, FDN, CC, H y C. Con lo anterior, los resultados suguieren que las ecuaciones establecidas, en esta investigación, con la metodología NIRS miden, cada parámetro con una precisión y exactitud estadísticamente igual que los métodos convencionales o de referencia; y que la tecnología NIR ofrece una alternativa para caracterizar el valor nutrimental del pasto Cuba CT-115. También es incluido el número de factores o componentes principales necesario para lograr la modelación matemática de cada variable en estudio; mismos que son similares en número al utilizado por Hernández *et al*. (2021). Al respecto, Vega-Vilca y Guzmán (2011) indican que el número máximo de componentes sean siete para la regresión PLS, con lo cual se reduce el sobreajuste de los modelos.

La robustez de las ecuaciones establecidas es demostrada al utilizar muestras diferentes para la construcción de los modelos, y diferentes para la validación de los mismos. Los resultados obtenidos en estas muestras son similares a los de los métodos de referencia. Las pruebas de robustez mejoran el rigor de la evaluación (precisión de las mediciones) de los modelos PLS en la investigación (Vaithilingam *et al*. 2024).

La representación gráfica de la correlación ratifica los datos estadísticos presentados en la Tabla 4. Al respecto, Hernández *et al.* (2021) indican que valores del coeficiente de correlación cercanos a la unidad se deben la alta proximidad entre el valor de referencia y el estimado por el modelo. Y ratifica la prueba t al demostrar que no existen diferencias estadísticas entre el valor de referencia y el estimado por el modelo en todas las variables experimentadas. Estos coeficientes de correlación son superiores a los reportados por Kleinebecker *et al*. (2009) en el estudio de la relación $\delta^{13}C$ y $\delta^{15}N$ en plantas. Al respecto, Richardson *et al*. (2003) indican que la información subyacente se manifiesta en los espectros originales (sin tratamiento matemático). Estas estructuras espectrales subyacentes demuestran la conectividad entre el dato espectral y la composición química del pasto en estudio y son la base para obtención de los modelos de calibración propuestos. Para la presente investigación, los pretratamientos matemáticos y el orden en que se aplicaron permite optimizar el

desarrollo de los modelos de calibración y se promueve el ajuste lineal de la relación entre la absorbancia y la concentración de los componentes analizados; como lo exponen Andrade *et al.* (2023), quienes usaron el pretratamiento para eliminar las tendencias no lineales de los espectros, corrigiendo la dispersión de la luz, el ruido y la interferencia del tamaño de las partículas. Con base en los calificadores estadísticos obtenidos y lo discutido en este trabajo suguiere que la tecnología NIR, en las regiones espectrales VIS-NIR, proporciona información útil y suficiente para establecer modelos de calibración con la misma precisión y exactitud que los datos obtenidos con los métodos convencionales o de referencia. El espectro NIR es el resultado de la composición química de cada especie y que determina la constitución y número de uniones (C-H, N-H, O-H, etc.) como lo indican Richardson *et al*. (2003); con lo cual se sugiere tener modelos de calibración específicos para cada pasto o especie forrajera y de preferencia validados localmente por la influencia del ambiente en el desarrollo vegetal.

CONCLUSIONES

Los espectros VIS-NIR generados con la tecnología NIRS constituyen una fuente de información para establecer modelos de calibración para estimar la cantidad de proteína cruda, fibra detergente neutro, fibra detergente ácido, contenido celular, hemicelulosa, cenizas y degradación *in situ* de la materia seca del pasto Cuba CT-115 *Pennisetum purpureum*; en sus diferentes etapas fenológicas y con niveles amplios de concentración de cada variable. Los estadísticos utilizados en la validación interna y externa de los modelos confirman la capacidad de los modelos establecidos, con resultados iguales a los obtenidos con métodos convencionales de referencia. Es decir, que los modelos estiman con similar precisión y exactitud las variables del pasto, con la ventaja de que NIRS es una técnica no destructiva, que no genera residuos químicos, con menor tiempo y costo del análisis; cuando es comparada con los métodos convencionales.

CONFLICTO DE INTERÉS

Los autores declaran que no tienen intereses en competencia.

LITERATURA CITADA

Alomar D, Montero R, Fuchslocher R (1999) Effect of freezing and grinding method on near and chemical composition of fresh silage. Animal Fedd Science and Technology 78: 57-63.

AOAC (2005) Official Methods of Analysis. Edition 18. Association of Official Analytical Chemists. Washington, EE.UU. 1928p.

Alomar D, Fuchslocher R, de-Pablo M (2003) Effect of preparation method on composition and NIR spectra of forage samples. Animal Fedd Science and Technology 107: 191-200. https://doi.org/10.1016/S0377-8401(03)00124-X

Alomar D, Fuchslocher R, Cuevas J, Mardones R, Cuevas E (2009) Prediction of the composition of fresh pastures by near infrared reflectance or interactance-reflectance spectroscopy. Chilean Journal of Agricultural Research 69(2): 198-206. https://doi.org/10.4067/S0718-58392009000200009

Andrade RMC, Loures GG, Cano SC, Nobrega de CL, Galbeiro S, Squeira VPR, Monteiro do CJP, Rodrigues FE, Geralda FJ, Nunes do PI, Prado COP, Yurika MI (2023) Prediction models of the nutritional quality of fresh and dry *Brachiaria brizantha* cv. Piata grass by near infrared spectroscopy. Journal of applied Animal Research 51(1): 193-203. https://doi.org/10.1080/09712119.2023.2172022

Barnes RJ, Dhanoa MS, Lister SJ (1989) Standard normal variate and de-trending of near diffuse reflectance spectra. Applied Spectroscopy 43: 772-777. https://doi.org/10.1366/0003702894202201

Basurto GR, Ramírez RE, Mariscal LG (2025) Estimación de la composición química de granos y pastas proteicas mediante espectroscopia (NIRS-FTIR). Revvista Mexicana de Ciencias Pecuarias 16(2): 428-445. https://doi.org/10.22319/rmcp.v16i2.6637

Bellon-Maurel V, Fernandez-Ahumada E, Palagos B, Roger JM, McBratney A (2010) Critical review of chemometric indicators commonly used for assessing the quality of the prediction of soil attributes by NIR spectroscopy. Trends in Analytical Chemistry 29(9): 1073-1081. https://doi.org/10.1016/j.trac.2010.05.006

Bolaños AED, Émile JC, Enríquez QJF (2010) Les fourrages au Mexique: ressources, valorisation et perspectives de recherche. Fourrage 204: 277-282.

De-Boever JL, Vanacker JM, De-Brabander DL (2002) Rumen degradation characteristics of nutrients in maize silages and evaluation of laboratory measurements and NIRS as predictors. Animal Feed Science Technology 101: 73-86. https://doi.org/10.1016/S0377-8401(02)00145-1

Decruyenaere V, Lecomte P, Demarquilly C, Aufrere J, Darenne P, Stilmant D, Buldgen A (2009) Evaluation of green forage intake and digestibility in ruminants using near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): developing a global calibration. Animal Feed Science and technology 148: 138-156. https://doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2008.03.007

De-Dios-León GE, Ramos-Juárez JA, Izquierdo-Reyes F, Joaquín-Torres B, Meléndez-Nava F (2022) Comportamiento productivo y valor nutricional del pasto Pennisetum purpureum cv Cuba CT-115, a diferente edad de rebrote. Revista Mexicana de Ciencias Pecuarias 13(4): 1055-1066. https://doi.org/10.22319/rmcp.v13i4.5217

Detmann E, Fonseca PM, de Campos VFS, Huhtanen P (2014) Nutritional aspects applied to grazing cattle in the tropics: A review based on Brazilian results. Semina: Ciências Agrárias, Londrina 35(4): 2829-2854. https://doi:10.5433/1679-0359.2014v35n4Suplp2829

Fernández-Cabanás VM, Pérez-Marín DC, Fearn T (2023) Optimization of the predictive ability of NIR models to estimate nutritional parameters in elephant grass through LOCAL algorithms. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy 285: 121922. https:doi.org/10.1016/j.saa.2022.121922.

Goldshleger N, Chudnosky AA, Ben-binyam R (2013) Predicting salinity in tomate using soil reflectance spectra. International Journal of Remote Sensor 34(17): 6079-6093. https:doi:10.1080/01431161.2013.793859

Hernández EA, Juárez Lagunes FI, Montero-Lagunes M, Enríquez-Quiróz JF, Loeza-Limón R, Pinos-Rodríguez JM (2021) Calibraciones de espectrofotometría de reflectancia en el infrarrojo cercano para carbohidratos en pasto Urochloa. Ecosistemas y Recursos Agropecuarios Núm. Esp. II: e2874. http:doi:10.19136/era.a8nII.2874

Jacobi HF, Ohl S, Thiessen E, Hartung E (2012) NIRS-aided monitoring and prediction of biogas yields from maize silage at a full-scalle biogas plant applying lumped kinetics. Bioresource Technology 1003: 162-172. https:doi.org/10.1016/j.biortech.2011.10.012.

Kleinebecker T, Schmidt SR, Fritz C, Smolders AJP, Norbert H (2009) Prediction of δ13C and δ15N in plant tissues with near-infrared spectroscopy. New Phytologist 184: 732-739. https://doi.org/10.1111/j.1469-8137.2009.02995.x

Lovett DK, Deaville ER, Givens DI, Finlay M, Owen E (2005) Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) to predict biological parameters of maize silage: effects of particle comminution, oven drying temperature and the presence of residual moisture. Animal Feed Science and Technology 120: 323-332. https:doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2005.02.001

Molano ML, Cortés ML, Ávila P, Martens SD, Muñoz LS (2016) Near infrared spectroscopy (NIRS) calibration equations to predict nutritional quality parameters of tropical forages. Tropical Grasslands-Forrajes Tropicales 4(3): 139-145. https:doi.org/10.17138/tgft(4)139-145

Nocita M, Stevens A, van Wesemael B, Aitkenhead M, Bachmann M, Barthès B, Dor EB, Brown DJ, Clairotte M, Csorba A, Dardenne P, Demattê JAM, Genot V, Guerrero C, Knadel M, Montanarella L, Noon C, Ramirez-Lopez L, Robertson J, Sakai H, Wetterlind J (2015) Soil spectroscopy: An alternative to wet chemistry for soil monitoring. Advances in Agronomy 132: 139-159. https://doi.org/10.1016/bs.agron.2015.02.002

NordheimH, Volden H, Fystro G, Lunnan T (2007) Prediction of *in situ* degradation characteristics of neutral detergent fibre (aNDF) in temperate grasses and re clover using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS). Animal Feed and Technology 139: 92-108. https:doi.org/10.1016/j.anifeedsci.2006.11.024

Orskov ER (1992) Protein nutrition in ruminants. 2da. Edición. Nueva York. Academic Press Inc. London. 175p.

Ramos RC, Basurto GR, Ramírez RE, Reis de STC, Mariscal LG (2023) Predicción de la composición química de las heces y digesta ileal de cerdos mediante espectroscopia de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIRS). Revista Mexicana de Ciencias Pecuarias 14(3): 488-504. https://doi.org/10.22319/rmcp.v14i3.6175

Richardson AD, Reeves JB, Timothy GG (2003) Multivariate analyses of visible/near infrared (VIS/NIR) absorbance spectra reveal underlying spectral differences among dried, ground conifer needle samples from different growth environments. New Phytologist 161(1): 291-301. https:doi:10.1046/j.1469-8137.2003.00913.x

Saha U, Endale D, Tillman G, Johnson W, Sonon L, Schomberg H, Yang Y (2017) Analysis of various quality attributes of sunflower and soybean plants by near infrared reflectance spectroscopy: Development and validation calibration models. American Journal of Analytical Chemistry 8: 462-492. https://doi.org/10.4236/ajac.2017.87035

Sandoval-Mejía LA, Bueso-Uclés FJ, Vélez-Nauer M (2008) Predicción nutricional para pastos tropicales por espectroscopia de reflectancia en el infrarrojo cercano. Agronomía Mesoamericana 19(2): 221-225. https:doi.org/10.15517/am.v19i2.5003

Vaithilingam S, Sun OS, Moisescu OI, Nair MS (2024) Robustness checks in PLS-SEM: A review of recent practices and recommendations for future applications in business research. Journal of Business Research 173: 114465. https://doi.org/10.1016/j.jbusres.2023.114465

Van-Soest PJ, Robertson JB, Lewis BA (1991) Methods for dietary fiber, neutral detergent fiber and nonstarch polysaccharides in relation to animal nutrition. Journal Dairy Science 74: 3583-3597.

Valenciaga D, O La O, Chongo B, Oramas A (2006) Efecto del tiempo de reposo en la degradabilidad ruminal in situ del complejo lignocelulósico y la producción de gas *in vitro* del clon Cuba CT-115 (*Pennisetum purpureum* sp.). Revista Cubana de Ciencia Agrícola 40(1): 71-81.

Valenciaga D, De Olivera ES, O laO, Chongo B, Oramas A, Cairo JC (2007) Obtención de las curvas de calibración para la determinación de la composición química de la especie *Pennisetum purpureum*

mediante la Espectroscopia de Reflectancia en el Infrarrojo Cercano (NIRS). Revista Cubana Ciencia Agrícola 41: 165-168.

Van-Soest PJ, Robertson JB, Lewis BA (1991) Methods for dietary fiber, neutral detergent fiber and nonstarch polysaccharides in relation to animal nutrition. Journal Dairy Science (74): 3583-3597. https:doi.org/10.3168/jds.S0022-0302(91)78551-2.

Vega-Vilca JC and Guzmán J (2011) Regresión PLS y PCA como solución al problema de multicolinealidad en regresión múltiple. Revista de Matemática: Teoría y Aplicaciones 18(1): 9-20.