Detecção de Adulteração em Creatina e *Whey Protein* utilizando Espectroscopia MIR com Modelagem PLS, Tensor Flow e SVR

HELFER, Gilson A.a\*(PQ); KONRATH, Matheusa(PG); SANTOS, Henyo N.a(PG); RODRIGUES, Lucasa(PG); ABICH, José G.L.b(IC); AVELAR, E.L.b(IC); SCHWIN, Cauã J.b(IC); SANTOS, Roberta O.a(PQ); COSTA, Adilson B.a(PQ)

a PPG em Sistemas e Processos Industriais, Universidade de Santa Cruz do Sul, Santa Cruz do Sul – RS – Brasil

b Depto Eng., Arq. e Computação - Curso de Agronomia, Universidade de Santa Cruz do Sul, Santa Cruz do Sul – RS – Brasil

\*ghelfer@unisc.br

Palavras-Chave: Adulteração, suplemento alimentar, calibração multivariada.

Introdução

A utilização de suplementos alimentares à base de creatina e proteína do soro do leite (*Whey Protein*) tem aumentado significativamente nos últimos anos, sendo o Brasil um dos principais mercados consumidores. Nesse contexto, o aumento expressivo no consumo reforça a importância do desenvolvimento de estratégias de controle de qualidade desses produtos, especialmente no que diz respeito à adulteração econômica, caracterizada pela substituição parcial ou total do suplemento por ingredientes de menor valor, como o amido [1].

Dessa forma, este estudo teve como objetivo avaliar a aplicabilidade da espectroscopia no infravermelho médio (MIR) associada a métodos multivariados de calibração para a detecção e quantificação da adulteração de creatina e proteína do soro do leite por amido. Para a simulação da adulteração, foram preparadas amostras com diferentes proporções de adulterantes (entre 10% e 100%). As misturas foram homogeneizadas em gral de porcelana, peneiradas até atingir partículas menores que 0,08 mm e acondicionadas em tubos de polipropileno de 50 mL. A homogeneização final foi realizada com auxílio de um sistema de agitação por vórtex.

Os espectros de infravermelho foram adquiridos em triplicata utilizando um espectrofotômetro FTIR (PerkinElmer Spectrum 400, EUA), equipado com acessório de refletância total atenuada (ATR-FTIR). As análises foram realizadas no modo absorbância, com resolução espectral de 4 cm⁻¹ e 16 varreduras por amostra, na faixa de 660 a 4000 cm⁻¹.

O desenvolvimento dos modelos de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) foi realizado utilizando a biblioteca Scikit-learn versão 1.1.3 [2]. Diferentes estratégias de pré-processamento espectral foram aplicadas para correção de ruídos e variações instrumentais [3][4].

Resultados e Discussão

A espectroscopia no infravermelho médio mostrou-se eficaz na detecção de adulterações em creatina e *Whey Protein*. Os modelos PLS, Tensor Flow e SVR gerados com seis variáveis latentes, pré-processamento por Savitzky-Golay (primeira derivada, segunda ordem polinomial e janela de 11 pontos) e centramento na média apresentaram coeficiente de determinação (R²) > 0,99 para ambos os suplementos. Os valores de RMSEC foram baixos (0,62% para creatina e 0,32% para *Whey Protein*). No entanto, os valores de RMSECV foram mais elevados (7,1% e 4,1%, respectivamente), sugerindo maior variabilidade na predição em validação cruzada, especialmente para a creatina. Ainda assim, os resultados apontam potencial para aplicação da técnica em estratégias de controle de qualidade.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| *Tabela 1. Inserir aqui o título da tabela.*   |  |  |  |  | | --- | --- | --- | --- | | Modelagem | PLS | Tensor Flow | SVR | | R² |  |  |  | | RMSEC |  |  |  | | RMSECV |  |  |  | |

Conclusões

Os resultados indicam que a espectroscopia MIR associada à modelagem PLS é uma ferramenta promissora para a detecção de adulterações em suplementos alimentares, oferecendo uma alternativa rápida, sem geração de resíduos e com potencial para aplicação em rotinas de controle de qualidade. Futuras etapas da pesquisa poderão explorar a integração da análise espectral com dispositivos portáteis, visando a realização de testes *in loco*.

Agradecimentos

À Capes, Fapergs, CNPq e Unisc.

1. https://g1.globo.com/saude/noticia/2025/04/23/anvisa-resultados-de-analise-creatina.ghtml
2. Pedregosa, F et al. *Journal of Machine Learning Research*, **2011**, 12.
3. Rinnan, Å; Berg, F; Engelsen, SB. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **2009**, 10, 28.
4. Ferreira, MMC. *Quimiometria – Conceitos, Métodos e Aplicações*. Campinas, SP: Editora da Unicamp, **2015.**