



**UNIVERSIDADE DA INTEGRAÇÃO INTERNACIONAL DA LUSOFONIA AFRO-  
BRASILEIRA**

**PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
INSTITUTO DE ENGENHARIA E DESENVOLVIMENTO SUSTENTÁVEL  
MESTRADO ACADÊMICO EM SOCIOBIODIVERSIDADE E TECNOLOGIAS  
SUSTENTÁVEIS (MASTS)**

**HUDSON PIMENTEL COSTA**

**DETERMINAÇÃO DE MACRO E MICRONUTRIENTES EM ALIMENTOS DE USO  
ENTERAL EMPREGANDO A ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO  
PRÓXIMO E CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA**

**REDENÇÃO – CEARÁ - BRASIL**

**2020**

HUDSON PIMENTEL COSTA

DETERMINAÇÃO DE MACRO E MICRONUTRIENTES EM ALIMENTOS DE USO  
ENTERAL EMPREGANDO A ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E  
CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Mestrado Acadêmico em Sociobiodiversidade e Tecnologias sustentáveis (MASTS) da Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre.

Área de concentração: Química analítica.

Linha de pesquisa: Tecnologias Sustentáveis.

Orientadora: Profa. Dra. Lívia Paulia Dias Ribeiro

Aprovada em: / /2020

BANCA EXAMINADORA

---

Profa. Dra. Lívia Paulia Dias Ribeiro (Orientadora)  
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

---

Profa. Dra. Maria do Socorro Moura Rufino  
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

---

Prof. Dr. Augusto Reinaldo Pimentel Guimaraes  
Universidade Estadual do Ceará (UECE)

---

Profa. Dra. Gisele Simone Lopes  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira  
Sistema de Bibliotecas da UNILAB  
Catalogação de Publicação na Fonte.

---

Costa, Hudson Pimentel.

C837d

Determinação de macro e micronutrientes em alimentos de uso enteral empregando a espectroscopia no infravermelho próximo e calibração multivariada / Hudson Pimentel Costa. - Redenção, 2020. 98f: il.

Dissertação - Curso de Sociobiodiversidade e Tecnologias Sustentáveis, Mestrado Acadêmico em Sociobiodiversidade e Tecnologias Sustentáveis, Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Redenção, 2020.

Orientador: Profa. Dra. Livia Paulia Dias Ribeiro.

1. Alimento enteral. 2. Alimentos - Qualidade. 3. Nutrição enteral. I. Título

CE/UF/BSCA

CDD 664.07

---

A Deus.  
Aos meus pais, Zuza e Edileusa.





## **AGRADECIMENTOS**

A Deus, por ser meu guia, mesmo em caminhos desconhecidos;

Aos meus pais Edileusa e Zuza, por acreditarem em meu potencial desde o início de minha trajetória na academia;

Aos meus irmãos Hugo e Rubens, por todo apoio oferecido durante essa etapa de formação;

A Profa. Dra. Livia Paulia Dias Ribeiro, que me apresentou, cativou e deu todo suporte para conseguir realizar essa pesquisa;

A Profa. Dra. Claudete Pereira, por sua fundamental contribuição para o estudo;

Ao Prof. Dr. Augusto Reinaldo Pimentel Guimarães por abrir as portas da Nuteral® – Indústria de Formulações Nutricionais Ltda, o que permitiu a viabilidade da pesquisa;

A todos colegas do laboratório da Nuteral, em especial ao Pedro, Grazi, Marcelo e Felipe;

A todos os funcionários da Nuteral, por me receberem com tanto carinho e respeito;

A todo apoio dos membros do Núcleo Avançado de Tecnologias Analíticas (NATA);

A todos meus colegas de mestrado.

A todos professores do programa de Mestrado Acadêmico em Sociobiodiversidade e Tecnologias Sustentáveis (MASTS), em especial ao Prof. Dr. Antônio Roberto Xavier, por sempre me motivar a seguir na carreira acadêmica;

Ao Instituto Nacional de Ciência e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) pelo apoio à pesquisa desenvolvida;

A banca examinadora por contribuir para o crescimento do trabalho;

A toda ajuda de fomento fornecida pela Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAP).

“A cada dia que passa os consumidores se tornam mais exigentes, e trabalhar com uma imagem sustentável se torna um grande diferencial das organizações no mercado competitivo.”

Prof. Benedito Godoy

## RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver metodologias capazes de prever os teores de diferentes nutrientes em um tipo de alimento enteral industrial utilizando a técnica de espectroscopia NIR associada a ferramentas quimiométricas. A pesquisa foi realizada através de uma parceria entre a Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB) e a indústria de alimentos enterais NUTERAL®, no qual foi escolhido um produto da marca denominado Mix Enteral e a partir da composição nutricional do produto foi realizado planejamento experimental de misturas, que resultou em 100 experimentos. Os dados espectrais foram obtidos em triplicata usando o espectrômetro de NIR PerkinElmer *Frontier IR* no comprimento de onda entre 800 e 2500 nanômetros (nm), e estudos de pré-tratamentos, com Correção Multiplicativa do Sinal (MSC), Variação normal padrão (SNV), Suavização e Primeira derivada de *Savitsky-Golay*, foram realizado. Os modelos de calibração multivariada foram construídos, para determinação de carboidratos, proteínas, lipídios, aminoácidos adicionados (L-aurina, L-carnitina e L-arginina) utilizando o algoritmo de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS) com 70 amostras do planejamento e validação externa com 30 amostras do planejamento. Os modelos de calibração dos macronutrientes obtiveram desempenho melhores quando foi empregado o pré-tratamento MSC na faixa completa do NIR, e os modelos de calibração dos micronutrientes obtiveram os melhores desempenho com pré-tratamento MSC quando foi usado apenas a faixa espectral 1500 nm a 2399 nm, que possui maior sensibilidade para as bandas dos aminoácidos. Os modelos mais robustos foram selecionados para predição dos nutrientes em 3 lotes diferentes do produto enteral industrializado. Os resultados obtidos demonstraram que os modelos de calibração foram estatisticamente melhores para as previsões dos macronutrientes e com boa precisão, porém os modelos para micronutrientes ainda não apresentaram modelos tão precisos quanto os macronutrientes, sendo indicativo de novos estudos quimiométricos de tratamento de dados.

**Palavras-chave:** Alimento enteral; Controle de qualidade; NIR

## ABSTRACT

Methodologies using NIR spectroscopy technique associated with chemometric tools was developed for predicting the levels of different nutrients in a type of industrial enteral. The research was carried out through a partnership between the University of International Integration of Afro-Brazilian Lusophony (UNILAB) and the NUTERAL® medical food industry, in which a product was selected and called as Mix Enteral (ME). Design of experiments with mixtures was carried out, which resulted in 100 experiments. Spectral data were obtained in triplicate using the PerkinElmer Frontier IR NIR spectrometer at a wavelength between 800 and 2500 nanometers (nm), and pre-treatment studies with Multiplicative Signal Correction (MSC), Standard normal variation (SNV), Smoothing and First derivative of Savitsky-Golay were accomplished. Multivariate calibration models were built to determine carbohydrates, proteins, lipids, added amino acids (L-aurine, L-carnitine and L-arginine) using the Partial Least Squares Regression (PLS) with 70 samples of the planning and external validation with 30 samples. The macronutrient calibration models performed better when the MSC pretreatment was used in the full range of the NIR, and the micronutrient calibration models obtained the best performance with the MSC pretreatment when only the spectral range from 1500 nm to 2399 nm was used, because it has greater sensitivity to the amino acid bands. The most robust models were selected to predict nutrients in three different batches of industrialized enteral product. The results obtained showed that the calibration models were statistically better for the predictions of macronutrients and with good precision, however the models for micronutrients have not yet presented models as accurate as the macronutrients, being indicative of new chemometric studies of data treatment.

Key-words: Medical food; Quality control; NIR

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Processo de obtenção de informação química em métodos instrumentais. ....	30
Figura 2 – Principais bandas analíticas e posições relativas de pico para absorções proeminentes no infravermelho próximo. ....	32
Figura 3 – Esquema representativo de espectros aplicando-se o alisamento espectral. ....	34
Figura 4 – Diferença entre espectros originais e espectros com aplicação do MSC. ....	34
Figura 5 – Resumo do processo de construção de um modelo de calibração multivariada. ....	36
Figura 6 – Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS): compreensão dos dados (X) em variáveis latentes ( $t_1$ e $t_2$ ) para construção do modelo matemático com os valores dos padrões (Y).....	37
Figura 7 – (A) Equipamento de bancada <i>Perkin Elmer Frontier</i> ; (B) Destaque do acessório de reflectância difusa.....	41
Figura 8 – <i>Scores</i> do PC1 e PC2 dos teores das matérias primas que compõe o planejamento das 100 amostras do ME, com formação de seis grupos delimitados em torno das amostras 98, 99 e 100 (circundada em verde) representados pelos pontos centrais. ....	45
Figura 9 – <i>Loadings</i> da PC1, PC2 e PC3 obtidos das concentrações das 14 matérias primas das 100 amostras do ME. ....	46
Figura 10 – Espectros do NIR originais na região do infravermelho próximo (800-2500 nm) das amostras do ME sem a utilização de pré-tratamentos. ....	47
Figura 11 – Espectros na região do infravermelho próximo (NIR) das amostras do ME na faixa de comprimento de onda entre 970-2500 nm com pré-tratamento de MSC. ....	48
Figura 12 – Espectros NIR na região do infravermelho próximo (970-2500 nm) das amostras do ME pré-tratados com SNV. ....	49
Figura 13 – Espectros NIR na região do infravermelho próximo (970-2500 nm) das amostras do ME. Sendo A: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de <i>Savitzky-Golay</i> e MSC; B: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de <i>Savitzky-Golay</i> e SNV; C: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de <i>Savitzky-Golay</i> adicionada à suavização com 5 pontos.....	50
Figura 14 – Predição <i>versus</i> referência dos carboidratos e proteínas com a presença de outliers em A e C, e respectivamente sem outliers em B e D.....	53
Figura 15 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento MSC) <i>versus</i> os valores de referências. ....	55

Figura 16 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento SNV) <i>versus</i> os valores de referências.....	55
Figura 17 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento SNV e 1ª derivada) <i>versus</i> os valores de referências.....	57
Figura 18 – Dados espectrais (com pré-tratamento MSC) das três amostras do ponto central do planejamento experimental médio (Exp. 98,99,100), 9 amostras do produto enteral industrializado e espectros das amostras com valor mínimo (amostra 94) e valor máximo (97) de carboidratos.....	60

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Métodos padrão de análises de nutrientes em alimentos .....	29
Tabela 2 – Caracterização das matérias-primas do ME .....	40
Tabela 3 – Resultados estatísticos de calibração e validação interna de modelos de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) do ME, submetidos diferentes pré-tratamentos espectrais. ....	52
Tabela 4 – Resultados estatísticos de validação externa, submetidos diferentes pré-tratamentos espectrais. ....	56
Tabela 5 – Calibração e validação externa dos aminoácidos L-carnitina, L-arginina e L-aurina (mg. 100g <sup>-1</sup> ) utilizando suavização de Savitzky-Golay (50 pontos) e MSC e primeira derivada na faixa entre 1500 nm a 2399 nm. ....	58
Tabela 6 – Predições de nutrientes do ME utilizando modelos com melhores respostas estatísticas.....	61



## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AE	Alimentos de uso Enteral (AE)
AEC	Alimentos de uso Enteral Caseiros
AEI	Alimentos de uso Enteral Industrializados
NIR	Infravermelho Próximo
MSC	Correção Multiplicativa Do Sinal
SNV	Variação Normal Padrão
LDL	<i>Low Density Lipoprotein</i>
ANVISA	Agência Nacional de Vigilância Sanitária
AOCA	<i>Official Analytical Chemists International</i>
AACC	<i>American Association Of Cereal Chemists</i>
AOCS	<i>American Oil Chemists' Society</i>
ISO	<i>International Organization Of Standardization</i>
IEC	<i>International Electrotechnical Commission</i>
ABNT	Associação Brasileira De Normas Técnicas
UV/VIS	Espectroscopia No Ultravioleta Visível
UNICAMP	Universidade Estadual De Campinas
Nm	Nanômetros
RLM	Regressão Linear Múltipla,
PCR	Regressão Por Componentes Principais
PLS	Regressão Por Mínimos Quadrados Parciais
PCA	Componentes Principais
Ts	Fatores
ME	Mix Enteral
MID	Infravermelho Médio
PC	Componentes Principais
Out.	<i>Outliers</i>
RMSE	Raiz Do Erro Médio Quadrático
RMSEC	Erro Quadrado Médio De Calibração
RMSEP	Erro Quadrado Médio De Previsão
RMSEVC	Erro Quadrado Médio De Validação Cruzada
R <sup>2</sup>	Coefficiente De Determinação
Exp.	Experimentos

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO .....	17
2. OBJETIVOS.....	19
2.1. Objetivo geral.....	19
2.2. Objetivos específicos .....	19
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	20
3.1. Alimentação enteral .....	20
3.2. Tipos de AE .....	21
3.3. Técnicas convencionais de análises químicas de alimentos e inovações analíticas ..	26
3.4. Espectroscopia na região do infravermelho próximo .....	31
3.4.1.1. Alisamento .....	33
3.4.1.2. Correção Multiplicativa do Sinal (MSC) .....	34
3.4.1.3. Variação normal padrão (SNV).....	35
3.4.1.4. Primeira e segunda derivada de Savitsky-Golay.....	35
3.5. Calibração e validação dos modelos multivariados .....	36
3.6. Aplicações da espectroscopia NIR.....	38
4. METODOLOGIA .....	40
4.1. Seleção do produto enteral.....	40
4.2. Planejamento experimental e preparo das amostras .....	40
4.3. Obtenção dos dados espectrais.....	41
4.4. Exploração dos dados espectrais e relação com macronutrientes.....	42
4.5. Pré-tratamentos .....	42
4.6. Análise multivariada .....	42
4.7. Calibração multivariada.....	43
5. RESULTADOS E DISCUSÕES.....	45
5.1. Análise de Componentes Principais (PCA) .....	45
5.2. Dados espectrais de absorção no Infravermelho Próximo e pré-tratamentos .....	46
5.3. Modelos de calibração e validação interna .....	51
5.4. Validação externa.....	54
5.5. Previsão de amostras comercializáveis .....	59
6. CONCLUSÃO .....	63

REFERÊNCIAS .....	64
APÊNDICE A – PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL (DE MISTURAS .....	76
APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS .....	79

## 1. INTRODUÇÃO

A alimentação enteral é recomendada em casos de pacientes desnutridos que estejam momentaneamente ou permanentemente impossibilitados de suprirem suas necessidades biológicas por alimentação oral. Geralmente pacientes que fazem o uso de alimentos enterais estão em situações clínicas críticas, sendo esses, vítimas de politraumatismo, pacientes em quadro pós-operatório, acometidos por doenças digestivas, derrames cerebrais ou até mesmo em recém-nascidos de forma prematura (ALHASHEMI; GHORBANI; VAZIN, 2019).

A ingestão desses tipos de alimentos normalmente é feita por meio de sondas (naso/orgástica) que são posicionadas diretamente no estômago ou no intestino delgado dos pacientes. Os Alimentos de nutrição enteral (AE) são fontes de vários nutrientes essenciais para o organismo como proteínas, carboidratos, gordura e vitaminas, que simulam o que seria a ingestão normal desses nutrientes em meio a alimentação oral. Os AE podem ser classificados em alimentos de uso enteral caseiros (AEC) e alimentos de uso enteral industrializados (AEI), sendo cada tipo com suas características e peculiaridades (UNICAMP,2011).

Os AEC, que também podem ser chamados de alimentação artesanal, representam uma série de alimentos que normalmente são utilizados na dieta dos pacientes em seu dia-a-dia, como feijão, arroz, leite, frutas entre outros. Esses alimentos são cozidos, liquidificados e peneirados, no entanto, esse tipo de alimentação necessita de uma prévia orientação de um profissional nutricionista para equilibrar e dosar a quantidade de cada nutriente, tudo baseado na necessidade fisiológica do paciente (ARAUJO, 2005).

Já a AEI é caracterizada por uma dieta balanceada e rica em nutrientes, que se apresentam normalmente em formulações líquidas ou em pó. Quando essas se apresentam em pó, para que esteja em condições de consumo, há a necessidade de ser diluída em água para serem liquidificadas e homogeneizadas em solução. Atualmente, existem diversas empresas especializadas na fabricação de alimentos enterais, no qual, também existem diferentes formulações para diferentes tipos de pacientes (UNICAMP, 2011).

No Brasil os AEI são subordinados às normas estabelecidas pela vigilância sanitária, que preconizam e estabelecem padrões de qualidade desses alimentos, desde suas matérias-primas, armazenamento, composição de seus produtos, até a identificação das porcentagens de cada nutriente em sua composição final. Este último torna-se importante pois busca a quantificação de cada tipo de nutriente empregado naquele produto, como a quantificação de macronutrientes e micronutrientes (BRASIL, 2017).

A quantificação dos nutrientes em AEI tem se mostrado um desafio nos últimos anos, não pela falta de metodologias específicas, mas pelo alto custo desse processo, que em sua maioria desperdiça a amostra e produzem resíduos e consequentes danos ao meio ambiente. Assim, a busca por novas tecnologias que possam melhorar esse cenário vem sendo estudadas por diversas indústrias desse ramo.

Um dos métodos que se apresenta como uma alternativa para a determinação desses componentes é a análise por espectroscopia no intervalo do infravermelho próximo (NIR), que consiste em uma técnica inovadora nesse segmento, sendo possível criar modelos de previsões que podem ser empregados na quantificação desses nutrientes.

Esses modelos de previsões são desenvolvidos por ferramentas quimiométricas, onde são empregadas técnicas de tratamento de dados que ajudam a transformar dados espectrais em informações analíticas. Essa metodologia tem ganhado notoriedade nos últimos anos, pois se trata de um método relativamente de baixo custo, não usam reagentes químicos, não produz nenhum tipo de resíduo e não há a necessidade de um preparo prévio das amostras. Outro ponto positivo da análise por espectroscopia NIR é o tempo de aquisição dos dados espectrais, em média de 30 segundos por amostra.

A partir de 1990 o uso da espectroscopia por NIR teve um aumento significativo, sendo utilizado para estudar a composição química de diversos meios como do solo, plantas, material biológico e de alimentos. A aplicação dessa técnica para estudos de alimentos ainda vem crescendo nos últimos anos, sendo empregado em análises de micro e macronutrientes de caju (SAMAMAD et al., 2018), pêssegos (BETEMPS et al., 2014), carnes (PAULA et al., 2013), milho (FERRARINI, 2004) dentre outros.

A aplicação da espectroscopia NIR em alimentos enterais ainda é rara, com alguns trabalhos na área de alimentos dedicados à nutrição clínica. Assim, partindo da pluralidade do uso da espectroscopia no NIR para análises de macro e micronutrientes em diversos tipos de alimentos e pela relevância do controle de qualidade dos AEI, o presente trabalho visou explorar o uso do NIR em alimentos enterais comercializados.

## **2. OBJETIVOS**

### **2.1. Objetivo geral**

Desenvolver metodologia não destrutiva capaz de prever quantitativamente os nutrientes em um tipo de alimento de uso enteral industrializado empregando a espectroscopia no intervalo do infravermelho próximo e regressão multivariada por mínimos quadrados parciais.

### **2.2. Objetivos específicos**

- Elaborar um planejamento experimental de misturas, com 14 matérias primas, para construção do conjunto de amostras de calibração e validação externa.
- Empregar as ferramentas de pré-tratamento de dados MSC (*Multiplicative Scatter Correction*), SNV (*Standard Normal Variate*) e primeira derivada para verificação dos melhores modelos de quantificação.
- Predição da metodologia proposta com amostras reais produzidas por empresa especializada na comercialização de produtos enterais.

### **3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

#### **3.1. Histórico da alimentação por via enteral**

A alimentação representa um processo essencial para manutenção da vida humana. Desde os primórdios é entendida a estreita relação entre a saúde humana e a alimentação, a grande maioria de nutrientes é ingerida por via oral fornecendo a energia necessária para a realização das atividades humanas. Além da energia para realização das atividades uma boa alimentação ajuda a fortalecer o sistema imunológico e assim prevenir o aparecimento de quadros patológicos (MARTINEZ, 2013).

Na segunda metade do século XIX foi observado que pacientes hospitalizados praticantes de jejum apresentavam piora significativa em seu quadro clínico, com isso, aumentava sua estadia no leito e em muitos casos o jejum prolongado era associado a causa morte desses indivíduos (PINOTTI; KLAJNER, 1997). E estudos recentes como de Duarte (2016) demonstram que o tempo de internação está intimamente relacionada com a perda de massa corpórea dos pacientes, principalmente naqueles em idade adulta.

No entanto, a alimentação adequada em alguns pacientes torna-se mais dificultosa, sobretudo pelo agravamento de seu quadro clínico, necessitando de uma terapia nutricional específica para evitar e/ou melhorar seu quadro de desnutrição. A problemática maior ocorre quando esses pacientes apresentam restrições parciais ou totais na dieta via oral, comumente são pacientes em período pós-operatório, em quadro de anorexia prolongada, estado de coma, impossibilitados de dieta oral devido a traumas na região de cabeça ou/e pescoço, vitimados de acidentes vasculares cerebrais entre outros. Nesses casos, a nutrição acontece por vias de alimentação alternativa, principalmente por alimentos enterais (JANSEN et al., 2017; UNICAMP, 2011).

A AE pode ser definida como o processo de nutrição de macro e micronutrientes à pacientes acometidos por alguma condição que impedem de forma permanente ou temporária sua alimentação normal. Esse tipo de alimentação normalmente é administrado por meio de sondas que são posicionadas no estômago ou no intestino delgado, por ser o local onde a maioria dos nutrientes é absorvida (BERGER et al., 2019).

Existem diversos tipos de sondas, no entanto, as mais utilizadas são: sonda nasoenteral em posição gástrica (introduzida pelo orifício nasal, passando pelo esôfago e sendo posicionada no estômago do paciente); sonda nasoenteral em posição intestinal (introduzida pelo orifício

nasal) passando pelo esôfago, estômago e sendo posicionado na região jejunal do intestino delgado; sonda de gastrostomia (introduzida diretamente no estômago por meio de um orifício abdominal); sonda de jejunostomia introduzida diretamente no jejuno por meio de um orifício abdominal (UNICAMP, 2011).

Os AE administrados por meio de sonda apresentam-se normalmente em formulações líquidas, ou pastosas, isso também ajuda ao processo digestório dos pacientes. Para administração de AE é necessário que o paciente esteja com o sistema digestório em funcionamento para que os nutrientes administrados tenham uma boa absorção e possa ser metabolizado pelo organismo, para que assim possam suprir suas necessidades nutricionais (CARVALHO, 2014).

### **3.2. Tipos de AE**

Os tipos de AE podem ser divididos em dois grandes grupos: os alimentos de uso enteral caseiros (AEC) e alimentos de uso enteral industrializados (AEI). Os AEC também podem ser chamados de alimentos enterais domésticos ou artesanais, são comumente adotados na dieta de pacientes com algum tipo de doença crônica, segundo Naves e Tronchin (2018) os usuários mais frequentes desse tipo de nutrição enteral são diagnosticados com sequelas de AVC (acidente vascular cerebral) e acometidos por síndromes neurológicas.

Como a grande parte desses pacientes é privada de seus movimentos corporais e digestivos, assim, a dieta enteral é responsável por suprir as necessidades nutricionais desses indivíduos. Na maioria dos casos os AEC são manipulados por familiares ou cuidadores desses pacientes, sendo os ingredientes utilizados para compor essas refeições são os alimentos que são usados habitualmente nas refeições da família, tal como: arroz, feijão, carnes, ovos, frutas, mingaus entre outros (KUTZ et al., 2018).

O modo de preparo desses é padronizado, sendo que estes são misturados à água e liquidificados para tornarem os componentes sólidos mais fluidos e assim possa ser inserido nas sondas. É importante salientar que, os alimentos como os cereais e carnes, necessitam de um cozimento completo antes do processamento dos nutrientes. Nesse tipo de processo é necessária uma maior atenção no preparo das amostras, tempo em vista que a manipulação desses tipos de alimentos sem o cuidado higiênico básico pode acarretar problemas futuros ao paciente (ARAUJO; MENEZES, 2005).



Já os AEI são formulações contendo os nutrientes necessários para a nutrição dos pacientes de forma balanceada ou específica para cada tipo de necessidade alimentar. Basicamente esse tipo de alimento é representado por produtos que são comercializados, no qual, exigem o mínimo de preparo para seu consumo (NOVA NUTRI, 2016).

Os AEI originalmente foram concebidos em formulações líquidas, mas com o passar dos anos foram criados e comercializados outros tipos de formulações, em destaque o pó. Essas formulações ajudam na estabilidade do alimento e propiciam maior vida útil desse, além disso, esses padrões são definidos também por sua fácil administração via sonda, minimizando o tempo e o trabalho empregado pela equipe médica. No entanto, aproximadamente 88% dos AEI comercializados hoje são em padrões líquidos. (CARDOSO; PRATES; ANASTÁCIO, 2018; LIMKETKAI et al., 2019).

Atualmente existem diversas empresas especializadas na fabricação de produtos entéricos, no qual são produzidos diversos tipos de formulações enterais. Essa variedade de produtos é de suma importância para o mercado consumidor, pois existe uma diversidade de pacientes com necessidades nutricionais singulares, e isso também ajuda a manter o dinamismo industrial, essas indústrias tendem a buscar sempre manter a qualidade de seus produtos bem como suas inovações (LIMKETKAI et al., 2019)

Segundo Cunha, Ferreira e Braga (2011) o uso dos AEI é recomendado em pacientes hospitalizados por apresentarem segurança em seu controle microbiológico e nutricional, grande parte desses alimentos é composto por carboidratos, lipídios, proteínas, aminoácidos, minerais e diversos tipos de vitaminas. Importante considerar que esses produtos só devem ser administrados com a devida orientação de profissionais legalmente competentes, sendo estes responsáveis por estabelecerem dietas que visam restaurar o equilíbrio nutricional dos pacientes. Deste modo, os AEI devem ser constituídos por diversas matérias-primas onde são contidos os macros e micronutrientes, que quando somados, possam restabelecer a saúde alimentar.

### ***3.2.1. Composição e qualidade dos AEI***

As indústrias do setor alimentício dedicadas à alimentação enteral utilizam diversos tipos de matérias-primas fornecedoras de nutrientes essenciais à saúde, e que, segundo o Ministério da Saúde, os AEI devem conter obrigatoriamente proteínas, lipídios, carboidratos,

vitaminas e minerais, no qual cada tipo de elementos deve respeitar suas concentrações e especificações mínimas estabelecidas (BRASIL, 2015).

### **3.2.2. *Macronutrientes***

As proteínas no ponto de vista nutricional desempenham funções de grande importância bioquímica e imunológica, principalmente em pacientes acometidos por alguma enfermidade, por esse motivo torna-se importante uma maior variedade de proteínas presentes nos AEI. As proteínas utilizadas nesse processo devem se originar de substratos animal ou vegetal, sendo também permitidas proteínas sintéticas desde que tenha aprovação prévia da Agência Nacional de Vigilância Sanitária – ANVISA (BRASIL, 2015; ANGICANO, 2013).

As proteínas mais utilizadas na produção de AEI são derivadas do leite bovino, sendo o leite desidratado a principal fonte de proteínas de muitos produtos, seguido da proteína do seu soro e do caseinato de cálcio do leite de vaca. A proteína isolada da soja também é um importante componente dos AEI, no qual é produzida a partir da farinha desengordurada do vegetal, por meio de tratamentos físicos e químicos, a proteína é separada dos outros componentes da soja (SOCIEDADE BRASILEIRA DE ALIMENTAÇÃO E NUTRIÇÃO, 2016; ANGICANO, 2013; ARAUJO; MENEZES, 2005).

Outras proteínas de origem vegetal também se destacam como componentes de produtos alimentares entéricos como a proteína hidrolisada do trigo, esse tipo de proteína é empregada há muitos anos na indústria alimentícia, não só em AEI, mas também em outros tipos de alimentos industriais. A proteína hidrolisada do trigo é caracterizada por sua alta solubilidade e digestibilidade, sendo composta majoritariamente por oligossacarídeos e aminoácidos como a glutamina (CARREIRA et al., 2011; QUIROGA, 2017).

Os lipídeos, assim como as proteínas representam um importante componente nutricional em AEI. Esses nutrientes são responsáveis por fornecer aporte de energia, grande parte são degradadas durante o processo de respiração celular. Alimentos contendo grande aporte de lipídeos são considerados como energéticos, em sua composição, apresentando-se uma abundância de carbono, seguido de moléculas de hidrogênio e oxigênio (PINHEIRO; PORTO; MENEZES, 2005).

Além de sua função energética os lipídeos são responsáveis pelo aporte estrutural das células, além de ser um importante transportador de micronutrientes como a exemplos das vitaminas. Nos pacientes em terapia enteral os lipídios são de grande importância para a

manutenção do equilíbrio nutricional, em função disso a presença desse nutriente em AEI torna-se fundamental. Os lipídeos utilizados na produção de AEI são normalmente oriundos de animais e vegetais (PINHEIRO; PORTO; MENEZES, 2005; NORMAN et al., 2008; VERONESE et al. 2019).

Uma importante fonte de lipídeos utilizados em AEI é o óleo de canola, muito utilizado também em AEC. Esse óleo é caracterizado por exercer inúmeros efeitos benéficos ao metabolismo humano, incluindo a diminuição de riscos de doenças cardiovasculares em função da diminuição de agregação plaquetária e da pressão arterial. Outro óleo vegetal bastante utilizado na produção de AEI é o de girassol, o qual se destaca por apresentar uma grande quantidade de ácidos graxos essenciais que ajudam na redução de LDL (*low density lipoprotein*), conhecido também por colesterol ruim e assim ajudam na prevenção de doenças vasculares (BUENO, 2008; SANTOS et al., 2013; BENTO et al., 2012).

Outros óleos são importantes componentes fornecedores de lipídios em AEI como o óleo peixe, óleo da soja, óleo do milho, óleo de açafrão e óleo da linhaça. Diversos aditivos também são comumente utilizados em alimentos entéricos como, por exemplo, o mono e diglicerídeos e a lecitina de soja. Na dieta enteral também é de suma importância a presença de carboidratos, na maioria dos casos esse nutriente apresenta-se em maiores quantidades em relação aos demais. Isso se dá pela importância que esse macronutriente desempenha no metabolismo humano (CARDOSO; PATRES; ANASTÁCIO, 2018; PREVIDELLI; GOULARTI; AQUINO, 2017).

Os carboidratos assim como lipídios são responsáveis por fornecer energia ao organismo, sendo a glicose um dos principais carboidratos utilizados pelas células humana como fonte energética. Por muitos anos foi pensado que os carboidratos tinham apenas aportes energéticos como função, no entanto, a partir da modernização das técnicas científicas, principalmente com o surgimento das técnicas avançadas de cromatografia e espectroscopia sendo possível observar a relação intrínseca que os carboidratos têm em participar da sinalização das células e da interação entre outras moléculas com ações biológicas vitais para a vida (POMIN; MOURÃO, 2006).

Os carboidratos mais comuns em AEI são as maltodextrinas, essas são produtos da hidrólise ácida e/ou enzimática parcial do amido com valores de dextrose equivalente menor que 20. A maltodextrina consiste em uma mistura de polissacarídeos e oligossacarídeos e pode ser encontrada no mercado em sua fórmula concentrada. Por seu grande aporte nutricional muitas empresas de AE utilizam apenas a maltodextrina como fonte de carboidrato, já outras

combinam esse nutriente com outras fontes de carboidratos como o xarope de milho e o polissacarídeo de soja (CARDOSO; PATRES; ANASTÁCIO, 2018; ADITIVOS E NUTRIENTES, 2016).

A ANVISA (2015) também estabelece a adição de fibras nas formulações de produtos enterais, isso por que as fibras alimentares, segundo pesquisas como de Bernaud e Rodrigues (2013), atuam na prevenção de diversas doenças crônicas como hipertensão, obesidade, diabetes, câncer de cólon e patologias coronarianas. Além disso, estudos como de Paula, Ramos e Santos (2010) relataram que alguns tipos de fibras são responsáveis por acelerar o trânsito intestinal e aumentar o volume e a maciez das fezes, isso se torna importante para pacientes hospitalizados em estado crítico, muitos desses sofrem por problemas de obstipação intestinal.

As fibras mais comuns presentes em AEI são oriundas da soja. Algumas indústrias também utilizam gomas como fontes de fibras, as mais comuns são as gomas Guar e a Arábica, essa última é representada por uma fibra dietética que contém 90% de fibras solúveis e sua utilização em AE se dá pelas suas potencialidades em oferecer propriedades funcionais benéficas ao metabolismo, além de ter uma importante propriedade prébiótica (BROWN; ROEHL; BETZ, 2014; ADITIVOS E INGREDIENTES; 2016)

Os prebióticos ou fibras prebióticas são classificados como componentes digeríveis que agem seletivamente sobre a microbiota gastrointestinal, e isso permitem mudanças específicas em suas atividades. Assim, promovendo benefícios ao metabolismo de seus consumidores, além da goma arábica outras fibras promovem esse efeito, como os frutooligossacarídeos, as oligofrutose e a inulina (GUARNER et al., 2017; BROWN; ROEHL; BETZ, 2014)

### ***3.2.3. Micronutrientes***

Outros benefícios são atribuídos aos componentes dos AEI, sendo os imunológicos um dos mais importantes. Dada importância advém das necessidades de fortalecimento do sistema imune dos pacientes, a fim de evitar os agravamentos de seus quadros clínicos em decorrência de infecções. E para isso alguns grupos de aminoácidos são introduzidos nos AE, como a arginina e da glutamina (BROWN; ROEHL; BETZ, 2014; GERAIX et al., 2014)

A glutamina, por exemplo, é um aminoácido essencial para o sistema imunológico, uma vez que ele atua diretamente em situações de estresse celular, sendo indispensável no processo de proliferação celular de fibroblastos, células do sistema imune. A glutamina também é responsável por fornecer porte energético aos linfócitos e aos macrófagos, sendo também

fundamentais as células fagocíticas mononucleares produtoras de citocinas, e essas atuam na mediação de respostas imunológicas (GERAIX et al., 2014).

Além dos aminoácidos outros micronutrientes também são utilizados na produção de AEI, e um dos mais comuns são as vitaminas e minerais. Esses elementos ao contrário dos macronutrientes não necessitam de grandes quantidades para manter o equilíbrio fisiológico, e assim como os aminoácidos desempenham funções imunológicas importantes. As vitaminas, por exemplo, atuam na defesa e na nutrição do organismo, já os minerais fazem parte da estrutura de tecidos corpóreos, participam da regulação dos impulsos nervosos e regulam atividades de várias enzimas.

Segundo Jasen (2014) os principais minerais presentes em AE são o zinco (Zn), ferro (Fe), cobre (Cu), cálcio (Ca), fósforo (P) e o potássio (K), esses podem ser encontrados em diferentes proporções dependendo do fabricante e do produto. Cruz e Soares (2011) destaca o Zn como um dos mais importantes minerais presentes na alimentação, sendo este envolvido em mais de 300 reações químicas essenciais para o organismo humano, também envolvido na síntese e degradação de macromoléculas.

Além disso, o Zn é relacionado ao sistema antioxidante, que participa diretamente da defesa celular neutralizando a proliferação e protegendo a membrana celular de ações de tipos reativos de oxigênio. A característica antioxidante é atribuída também às vitaminas C e E, essas são respectivamente derivadas de frutas cítricas e de óleos vegetais como de girassol e de soja. As vitaminas C e E, e também a vitamina A, estão envolvidas no processo de cicatrização de feridas, especialmente importante para pacientes em período pós-operatório (CRUZ; SOARES, 2011 apud OLIVEIRA; KOURY; DONANGELO, 2007).

Com os inúmeros benefícios oferecidos pelos AEI aos seus usuários torna-se imprescindível um controle de qualidade rigoroso nesses produtos, deste modo os valores de cada tipo dos nutrientes que compõe os AEI devem ser cuidadosamente estudados após sua produção. Esse controle envolve uma série de estudos químicos que normalmente representam um custo alto para as indústrias de formulações enterais, além disso, essas técnicas convencionais de análises de AE demasiam tempo e utilizam inúmeros reagentes que podem causar danos ao meio ambiente (BRASIL 2015; CENICCOLA, 2013).

### **3.3. Técnicas convencionais de análises químicas de alimentos e inovações analíticas**

Os métodos analíticos podem ser classificados por organizações internacionais como métodos padrões de análises. Uma das mais conhecidas organizações internacionais é a *Official Analytical Chemists International* (AOCI) que representa uma associação fundada por químicos agrícolas em 1884, atualmente essa organização é reconhecida mundialmente por padronizar praticamente todos os tipos de análises de alimentos. Os métodos sistematizados e distribuídos pela AOCI são altamente creditáveis e defendíveis, sendo essas instituições como laboratórios de testes, agências regulamentadoras, indústrias, universidades entre outros (AOAC INTERNATIONAL, 2019).

Outras organizações que seus métodos de análises de alimentos têm acreditação mundial são a *American Association of Cereal Chemists* (AACC) e a *American Oil Chemists' Society* (AOCS). Enquanto AOCA que tem uma visão mais generalista de análises de alimento, a AACC e a AOCS mantêm um público mais específicos. A AACC trata-se de uma associação global que conta com cerca de 2000 cientistas distribuídos pelo mundo desenvolvendo métodos específicos de análises de cereais e seus subprodutos (CEREALS & GRAINS ASSOCIATION, 2019).

Já a AOCS é uma fundação criada no início do século XX por químicos norte-americanos, inicialmente essa associação voltada para analistas de algodão. Com o passar dos anos o escopo desses cientistas foram moldados para análises de óleos, atualmente, essa organização é responsável por apoiar profissionais interessados no desenvolvimento científico e metodológico de óleos, gorduras, proteínas, surfactantes e materiais relacionados (AMERICAN OIL CHEMISTS' SOCIETY, 2019).

No contexto brasileiro, existem laboratórios especializados em análises bromatológicas que atendem as normas reguladoras, com especificações regidas pela norma técnica ISO/IEC 17025:2017 da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT). Em contexto geral as análises bromatológicas desempenham papéis fundamentais na avaliação do controle de qualidade dos alimentos, e um dos instrumentos importantes para essas análises é a química analítica (INSTITUTO ADOLFO LUTZ, 2008; ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS, 2017).

As metodologias de análises de alimentos com seus respectivos padrões de qualidade sofreram mudanças ao longo dos anos. A introdução de novos métodos analíticos e da biologia molecular não foi suficiente para tornar os métodos volumétricos e espectrofotométricos na região do UV/VIS ultrapassados (INSTITUTO ADOLFO LUTZ; 2008). Os métodos

convencionais de análises de nutrientes mais utilizados no meio analítico estão dispostos na Tabela 1.

Tabela 1 – Métodos padrão de análises de nutrientes em alimentos

MÉTODO	NUTRIENTE ESTUDADO	PRINCÍPIO	CITADO EM:
Kjeldahl	Proteína	Baseia - se em três etapas: digestão, destilação e titulação. A matéria orgânica é decomposta e o nitrogênio existente é finalmente transformado em amônia por meio ácido. O sal amônico desloca-se após receber a solução ácida (ácido bórico). Por titulação determina-se a quantidade de nitrogênio que lhe deu origem.	Instituto Adolfo Lutz (2008)
Extração direta em Soxhlet	Lipídeos	Utiliza um sistema que permite a extração de lipídios através da contínua passagem de um solvente através da amostra.	Menezes e Purgatto (2016)
Bligh e Dyer	Lipídeos	Mistura de três solventes: clorofórmio, metanol e água têm sido recomendados por serem exatos e reprodutíveis para a determinação de lipídios totais em alimentos com alto teor de água.	Menezes e Purgatto (2016); Instituto Adolfo Lutz (2008)
Van Soest	Fibras alimentares	Fundamenta-se na hipótese de que a fibra pode ser quantitativamente e especificamente separada dos outros componentes do alimento (proteínas, amido e lipídios) por ebulição com solução detergente em pH neutro.	Embrapa (2011)
Schaller	Fibra alimentares	Trata-se de um método enzimático-gravimétrico que estimula a fibra alimentar total em produtos de cereais pela digestão enzimática. Porém, foi considerado inadequado para frutas, folhas e raízes. Esse método tem sofrendo alterações ao longo dos anos, principalmente no que se refere as enzimas utilizadas no processo.	Embrapa (2011)
Uppsala	Fibra alimentares	Método de determinação de fibra alimentar total, usando a caracterização dos seus açúcares constituintes por cromatografia gasosa. O teor de fibra equivale à soma de açúcares neutros, ácidos urônicos, amido resistente e lignina.	Embrapa (2011)
Tillmans	Vitamina c	Baseia-se na redução do corante sal sódico de 2,6-diclorofenol indofenol por titulação em uma solução ácida de vitamina C.	Instituto Adolfo Lutz (2008)
Determinação de vitamina A em alimentos	Vitamina A	Este método baseia-se na medida da coloração azul instável, resultante da reação da vitamina A com o tricloreto de antimônio (reagente Carr Price) e é válido para a determinação de vitamina A em alimentos, enriquecidos ou não, rações e misturas vitamínicas (premix). Não é aplicável para produtos contendo pró-vitamina A (carotenos).	Instituto Adolfo Lutz (2008)
Determinação de fósforo por espectrofotometria na região do visível	Fósforo	O método é aplicável à determinação de fósforo em alimentos. Baseia-se na complexação do fósforo com vanado-molibdato de amônio e determinação por espectrofotometria na região do visível.	Instituto Adolfo Lutz (2008)

Fonte: Adaptado de Instituto Adolfo Lutz, 2008; Embrapa (2011); Menezes e Purgatto (2016).

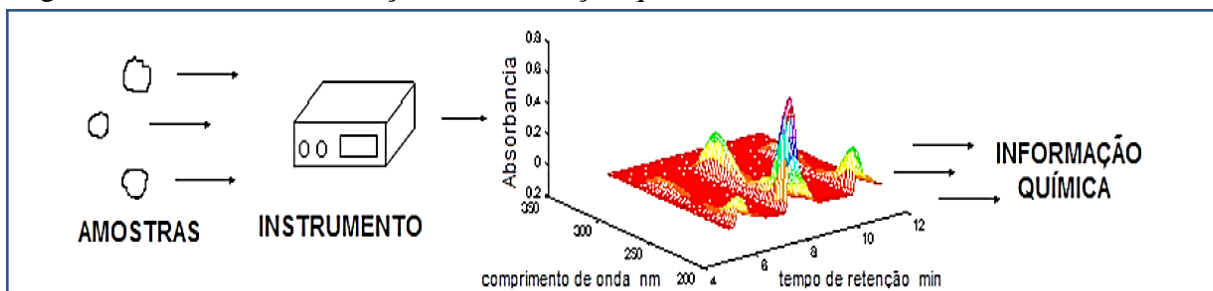


Tradicionalmente os métodos e técnicas utilizadas na química analítica são classificadas em clássicos e instrumentais. Os métodos clássicos são divididos em métodos gravimétricos e volumétricos, esses são caracterizados por envolverem reações químicas, dissolução, extração e estequiometria. Essas técnicas são comumente utilizadas por laboratórios de pequeno porte, muito pelo custo e eficácia desses métodos (PASSOS, 2011).

A utilização dos métodos clássicos ainda é amplamente disseminada pelos laboratórios de pesquisa em todo mundo. No entanto, suas aplicações vêm se restringindo, principalmente pelo avanço tecnológico dos últimos anos. Assim, a química analítica instrumental foi ganhando notoriedade, e os últimos 50 anos foram cruciais para essa nova forma realizar experimentos, muito disso é resultado da introdução de equipamentos como espectrômetros e cromatógrafos, proporcionando a possibilidade do crescimento na quantidade e na qualidade dos dados (PASSOS, 2011; FERREIRA, 2015).

Existem diversos tipos de métodos instrumentais no mercado, esses instrumentos são responsáveis por emitir diferentes tipos de sinais, que são captados e transformados em informações químicas como demonstrado na Figura 1 (PASSOS, 2011). Essas informações são representadas por uma grande quantidade números ou curvas, que não produzem significado químico para interpretação imediata dos dados obtidos do equipamento (FERREIRA, 2015).

Figura 1 – Processo de obtenção de informação química em métodos instrumentais.



Fonte: Ferreira, 2016.

Essas grandes quantidades de dados obtidos dos experimentos tornaram-se trabalhosos de serem processados manualmente, os químicos analíticos necessitavam de uma alternativa para converter essa informação química em informação útil (FERREIRA, 2015). Em meados do século XX os computadores começaram a ser introduzidos na química analítica e a partir desse marco foram desenvolvidos inúmeros programas computacionais que auxiliam no processamento desses dados (BARROS NETO; SCARMINIO; BRUNS, 2006).

Com o avanço computacional foi possível também a inovação nos instrumentos de análises, um dos métodos que foram influenciados por esse avanço foi a espectroscopia eletromagnética na faixa do infravermelho próximo (NIR), que já vinha sendo estudada desde o século XIX. No entanto, essa técnica foi amplamente melhorada após a implementação de modelos matemáticos e estatísticos implementados em *softwares* computacionais (TIBOLA et al., 2018)

### **3.4. Espectroscopia na região do infravermelho próximo**

A técnica da espectroscopia no infravermelho próximo (*Near Infrared Spectroscopy*, NIRS) representa uma inovação nas técnicas analíticas, esse método permite avaliar diferentes tipos de compostos orgânicos e inorgânicos através de baixas vibrações eletromagnéticas. Essas vibrações são responsáveis por promover excitações a nível molecular do material estudado, essa vibração é causada pela energia de fóton na faixa de  $2,65 \times 10^{-19}$  a  $7,96 \times 10^{-20}$  J, que corresponde à faixa de comprimento de onda de 750 a 2.500 nm (números de onda: 13.300 a  $4.000 \text{ cm}^{-1}$ ) que é emitida pelo equipamento (PASQUINI, 2003).

A espectroscopia no NIR assim como em outros métodos de absorção é responsável por promoverem a vibrações e estiramentos em ligações das moléculas para que estas atinjam seu estado máximo de energia. Deste modo, esse tipo de radiação também é caracterizado por ser um processo quantizado<sup>1</sup>, onde os sinais são emitidos e derivados das frequências vibracionais de estiramento e de dobramento das ligações covalentes das moléculas. Cada tipo de vibração corresponde a um tipo diferente de ligação molecular, e assim esses sinais podem fornecer a informação molecular dos compostos (PAIVA et al., 2016).

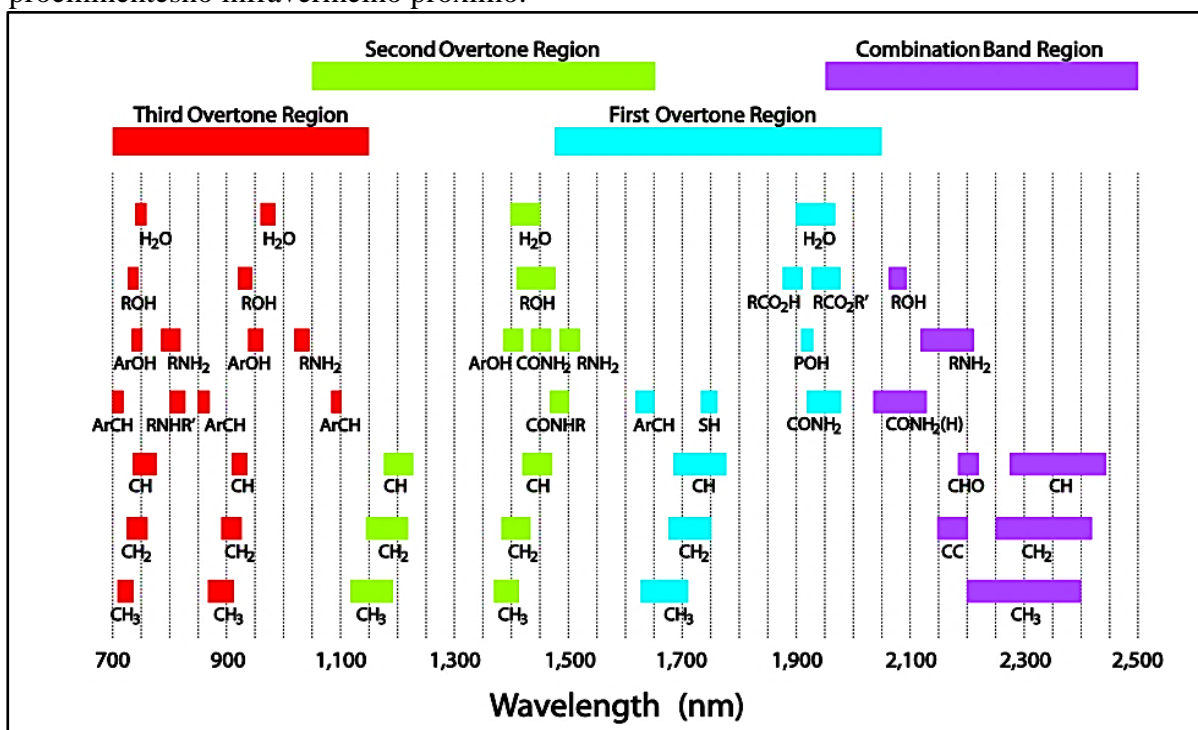
A região espectral do NIR onde ocorre maiores absorções de energia são sobretons e combinações de vibrações moleculares que são observadas na região do infravermelho médio, que corresponde a faixa de comprimento de onda entre 2500 e 5000 nm. As principais bandas moleculares relacionadas a essas vibrações fundamentais são dos grupos moleculares C-H, N-H, O-H e S-H, a singularidade dessas vibrações moleculares formam espectros que permitem o NIR ser usado para determinações de componentes químicos e bioquímicos de uma amostra de forma qualitativa e quantitativa (METROHM, 2013).

---

<sup>1</sup> O processo quantizado é caracterizado pela conversão de um sinal com valores contínuos em um sinal com valores discretos, ou seja, valores aproximados.

As distribuições desses grupos funcionais nos comprimentos de onda e as zonas de combinações e de sobretons estão representadas na Figura 2.

Figura 2 – Principais bandas analíticas e posições relativas de pico para absorções proeminentes no infravermelho próximo.



Fonte: Metrohm, 2013.

Atualmente existem diversos tipos de espectrofotômetro de infravermelho próximo, que podem ser classificados como portáteis, ultra portáteis e de bancada. Segundo Magalhães (2014) o equipamento de espectrofotômetro de infravermelho é composto por uma fonte de luz (normalmente é uma lâmpada halogénea de tungstênio), um sistema óptico, um suporte para amostra e um detector.

Para Paiva et al. (2015) os avanços das últimas décadas foram responsáveis por substituírem os grandes arranjos de luzes e espelhos que caracterizava os espectrofotômetros de infravermelho. Os dois tipos de equipamentos de infravermelho mais utilizados nos laboratórios analíticos são os instrumentos dispersivos e o de transformada de Fourier, apesar dos espectros produzidos por esses equipamentos serem semelhante, o tipo que usa transformada de Fourier tem se destacado pela velocidade da medição dos espectros.

A transformada de Fourier é empregada em espectrofotômetros modernos que durante a interação da radiação eletromagnética e a amostra é produzido um sinal padrão e complexo

chamado de interferograma<sup>2</sup>. Esse sinal padrão tem formato de ondas e contém todas as frequências que formam o infravermelho, essas frequências são separadas pela operação matemática transformada de Fourier e assim produzem vários espectros que são guardados na memória de um computador (PAIVA et al., 2015; FERNANDES, 2015).

Para transformar esses espectros em informações químicas é necessário a atribuição de algumas técnicas de tratamento de dados, sendo estas atribuídas a quimiometria. Esse ramo da química é responsável por estudar diversos fatores que são representados pelos espectros de uma única vez. No entanto, para a uma boa aplicação da quimiometria é necessário que haja um pré-tratamento dos dados espectrais (FERREIRA, 2015).

### ***3.4.1. Pré-tratamento de dados***

Os pré-tratamentos de dados tem o objetivo de eliminar de forma matemática as fontes de variações não programadas no planejamento e que não serão eliminadas naturalmente durante a fase de análise dos dados (FERREIRA, 2015). Os principais pré-tratamentos de dados são:

#### ***3.4.1.1. Alisamento***

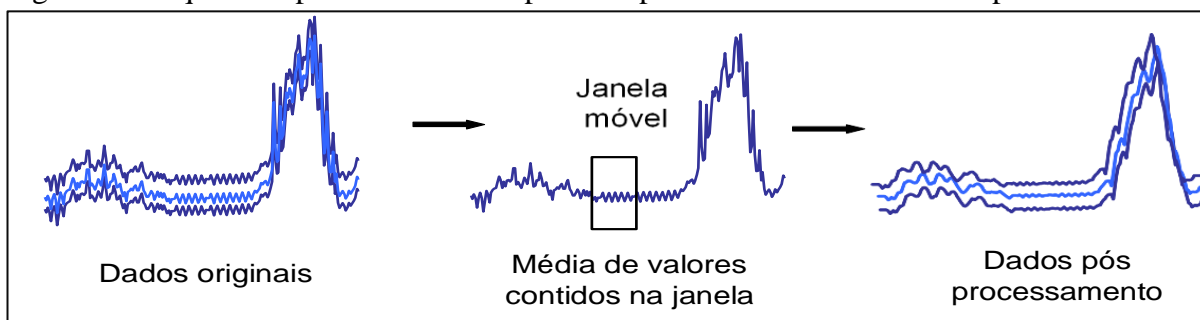
O alisamento (ou suavização), esquematizado na Figura 3 tem como objetivo reduzir matematicamente o componente aleatório (ruído) dos dados para aumentar a razão entre o ruído e o sinal analítico. As técnicas de suavização mais comuns são o alisamento pela média, o alisamento pela média móvel e o alisamento por com filtros de Fourier (FERREIRA, 2015).

Quando a suavização é realizada pela média móvel normalmente se utiliza o polinômio de *Savitzki-Golay*, que separa os espectros em “janelas”, que é caracterizada pelo número fixo de elementos. Após isso os valores médios são ajustados ao modelo polinomial utilizando a aproximação por mínimos quadrados, esse tratamento espectral pode ser observado na (SAUER, 2007).

---

<sup>2</sup> Gráfico de tempo contra a intensidade do sinal.

Figura 3 – Esquema representativo de espectros aplicando-se o alisamento espectral.



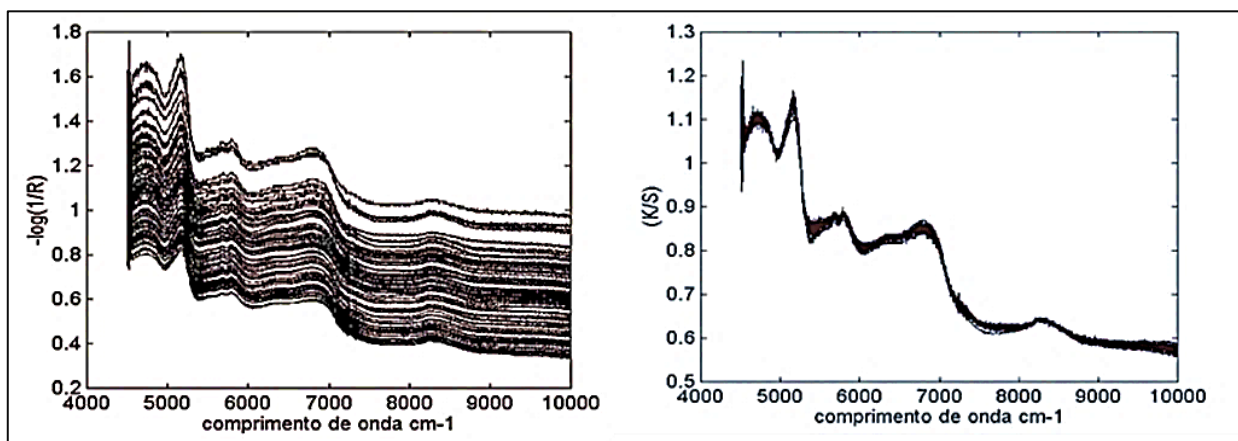
Fonte: Sauer, 2007. Adaptado de Rohwedder (2006).

### 3.4.1.2. Correção Multiplicativa do Sinal (MSC)

O pré-tratamento pela correção multiplicativa do sinal (MSC) permite a separação dos efeitos físicos da dispersão de luz dos efeitos vibracionais da absorção da luz nos espectros. Essa técnica é muito comum nos dados espectrais obtidos pela espectroscopia NIR, pois pode ser aplicada nos diferentes espectros difusos provenientes de uma mistura de elementos que podem ser analisadas por essa técnica (MARTENS; NIELSEN; ENGELSEN, 2003).

Essa correção torna-se particularmente importante no tratamento de espectros de amostras sólidas, principalmente na análise de grãos e pó. Sendo que, nessas amostras os sinais espectrais podem sofrer interferências de fenômenos físicos, como da temperatura, pressão e das diferenças morfológicas da amostra (FERREIRA,2015). Morgano et al. (2005) utilizou a correção multiplicativa de sinal como pré-tratamento espectral de 53 amostras diferentes de café cru, as diferenças entre os espectros com e sem tratamento com MSC pode ser visualizado na Figura 4.

Figura 4 – Diferença entre espectros originais e espectros com aplicação do MSC.



Fonte: Morgano et al., 2005.

### 3.4.1.3. Variação normal padrão (SNV)

A variação normal padrão (*Standard normal variate*, SNV) é obtida pela média dos valores das médias, processo semelhante ao MSC. No entanto, eles se diferenciam em relação às suas aplicações, enquanto o MSC utiliza o espectro médio do conjunto de calibração e o armazena para ser correlacionado com os outros espectros o SNV é aplicado de forma individual, espectro por espectro e não por isso não necessita de um armazenamento de informações como o MSC (FERREIRA, 2015).

Essa correção de espectro é dada pela equação a seguir.

$$x_{corr} = \frac{x_{org} - m}{s} \quad (1)$$

Onde:

$x_{corr}$  = espectro corrigido

$x_{org}$  = espectro original

$m$  = valor médio das variáveis do espectro a ser corrigido

$s$  = desvio padrão da média das variáveis

### 3.4.1.4. Primeira e segunda derivada de Savitsky-Golay

Muitas vezes os espectros apresentam inclinações ou desvios da linha base espectral, esses efeitos dessas situações podem ser resolvidos aplicando as derivadas de Savitsky-Golay. Utilizando as derivadas as linhas da base da curva são aproximadas utilizando o modelo linear:

$$A = \lambda \cdot a + b \quad (2)$$

Onde:

$A$  = absorvância (influenciada por uma inclinação)

$a\lambda$  = termo constante (também influencia na inclinação)

$b$  = desvio da linha da base.

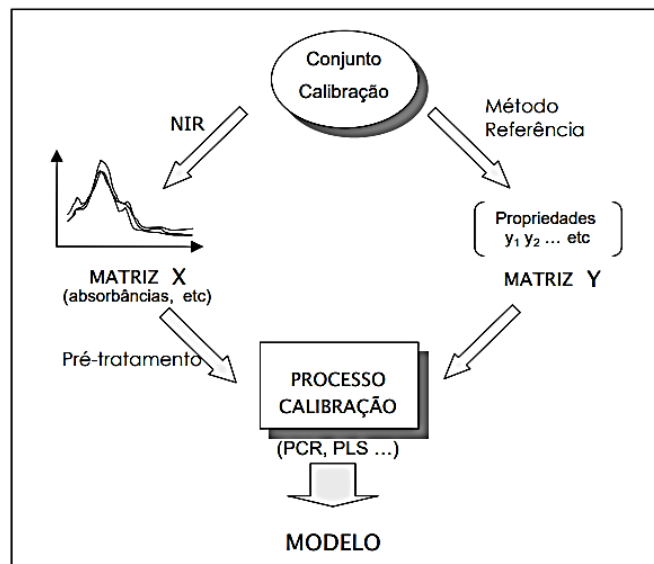
As derivadas mais comuns são a primeira e a segunda, as correções das linhas sugerem alterações nos termos constantes melhorando a separação de sinais das bandas que não foram totalmente sobrepostos. É comum a associação das derivadas com algum outro tipo de pré-tratamento, como por exemplo, a suavização, além desses pré-tratamentos citados existe outros que melhoram a qualidade dos dados obtidos do NIR. O passo posterior a esse pré-tratamento é a elaboração dos modelos de calibração multivariada (OLIVEIRA, 2014).

### 3.5. Calibração e validação dos modelos multivariados

A calibração é caracterizada por uma série de operações que estabelecem relação entre os padrões realizados e as medidas instrumentais. Quando a calibração é multivariada, significa que duas ou mais respostas instrumentais estão sendo relacionadas com as propriedades de interesse. Esses métodos de análise de dados não sofrem com a presença de possíveis interferentes, desde que sejam identificados nas amostras utilizados para a calibração (BRAGA; POPPI, 2004).

De maneira geral os modelos de calibração devem extrair as informações relevantes que estão contidas nos espectros, sendo essas informações ligadas diretamente com a informação que se deseja conhecer no futuro. A Figura 5 esquematiza esse processo de calibração multivariada (SOTELO, 2006).

Figura 5 – Resumo do processo de construção de um modelo de calibração multivariada.

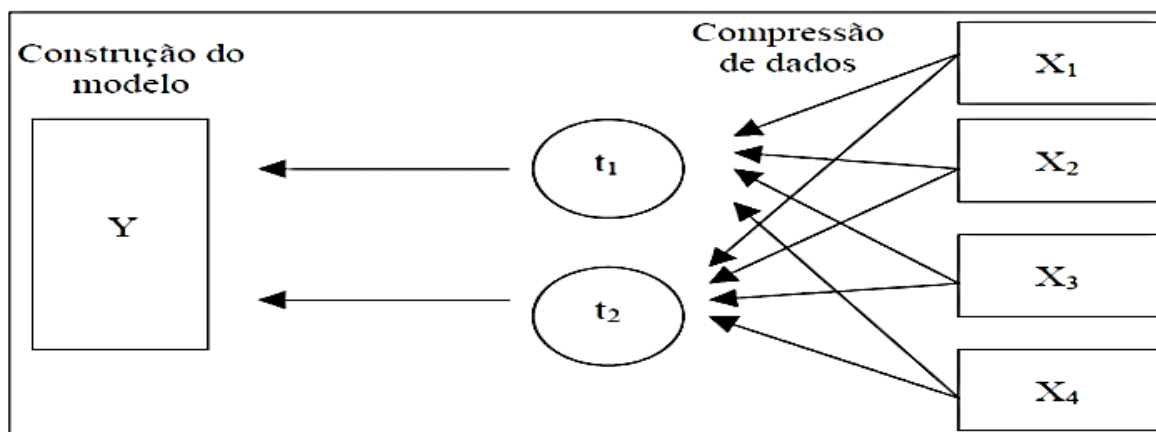


Fonte: Sotelo, 2006.

Entre os métodos de calibração se destacam a regressão linear múltipla (*Multiple Linear Regression*, MLR), Regressão por Componentes Principais (*Principal Component Regression*, PCR) e Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (*Partial Least Squares Regression*, PLS). No qual o PLS é o método de calibração mais utilizado, e tem suas aplicações com ótimos resultados em diversas áreas (BRAGA; POPPI, 2004). Os modelos de regressão são considerados mais vantajosos para o NIR, pois produzem modelos usando o mínimo de componentes principais, não possui limitador do número de comprimentos de ondas, e por isso é possível extrair uma quantidade maior de informações sobre o número de espectros estudados (PASQUINI, 2003).

Segundo Oliveira (2014) o método de regressão por PLS é capaz de comprimir as informações contidas nos espectros, reduzindo os dados, mas sem perder informações relevantes, em novas variáveis chamadas de fatores ou de variáveis latentes. Soletto (2006) esquematiza esse processo de compreensão de dados e criação de novas variáveis na Figura 6.

Figura 6 – Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS): compreensão dos dados (X) em variáveis latentes ( $t_1$  e  $t_2$ ) para construção do modelo matemático com os valores dos padrões (Y).



Fonte: Soletto, 2006.

Para Zeni (2006) o método PLS pode ser dividido em três etapas básicas: A primeira consiste em montar as matrizes de dados X a partir das variáveis independentes e a matriz Y a partir das variáveis dependentes. A segunda etapa elimina as informações que não são relevantes para o sistema e a terceira consiste em relacionar as matrizes X (reduzida pelo PCA) e a Y que possui a propriedade de estudo.

Após a construção do modelo ele deverá passar por validações, esse método é indispensável na elaboração de um modelo de calibração. Os tipos mais comuns desse processo são as validações externas e a validação cruzada. A validação externa mede a eficácia da



predição dos constituintes, sendo extraídas aleatoriamente do conjunto de calibração um número de amostras, sendo esta considerada o conjunto teste. Os restantes das amostras serão usados para a calibração e se obtém equações de regressão para prever as amostras de validação, a partir de seus dados espectrais de infravermelho próximo (MILAGRES, 2009).

Já a validação cruzada é caracterizada quando uma ou mais amostras são removidas das amostras do modelo de calibração, após a retirada da amostra é feita a predição da amostra que não participou do modelo. Esse processo é repetido para todas as amostras, proporcionando a validação cruzada completa (SOUSA, 2011; OLIVEIRA, 2014).

### **3.6. Aplicações da espectroscopia NIR**

O uso na espectroscopia no infravermelho próximo se mostra como um ramo promissor dentro da química analítica, sendo responsável por análises de diferentes tipos. Uma vantagem do uso do NIR é a possibilidade da elaboração de modelos de previsão qualitativos e quantitativos. Bueno (2011) justifica que essas possibilidades de análises se dão pela modernidade e robustez dos equipamentos de infravermelho disponíveis no mercado, e acredita que o crescimento do uso desse método se dá pelas seguintes características, entre vantagens e desvantagens em relação aos métodos convencionais:

- A possibilidade de ensaio com o mínimo de preparação de amostra;
- Rapidez na obtenção dos espectros, cálculos e apresentação dos resultados;
- Por não ser um método destrutivo, sendo a amostra preservada que posteriormente possam ser usadas para outros fins;
- Não ser uma técnica invasiva;
- Pela variedade de aplicações, sendo que esse método pode ser aplicado em qualquer molécula que possua ligações C-H, N-H, S-H ou O-H;
- A possibilidade de aplicação dessa técnica em amostras líquidas, sólidas ou pastosas;
- Por ser uma técnica limpa, não utiliza reagentes, logo não produz resíduos que possam ser danosos ao meio ambiente;
- Apresentam uma pequena necessidade de manutenção, e o aparelho de NIR pode ser utilizado em vários ambientes.

Apesar dessas vantagens a espectroscopia NIR apresenta algumas desvantagens como:

- A análise de soluções aquosa pode se apresentar dificultosa, ocorrendo a alta absorbância e pode elevar os espectros e sobrepor bandas de detecção importantes para a análise (JAMRÓGIEWICZ, 2012);
- Técnica sensível apenas a presença de grupos funcionais, ou seja, ligações químicas (MONTEIRO, 2007);
- Técnica não aconselhável a amostras muito heterogêneas (MONTEIRO, 2007);
- Necessidade de um método de referência para sua calibração (BUENO; 2011).

Muitas dessas desvantagens podem ser contornadas com a aplicação de técnicas quimiométricas, se fazendo necessário a aplicações de correções espectrais através dos tratamentos de dados (MAGALHÃES, 2014).

O uso da espectroscopia NIR vem ganhando muitas aplicações nos setores industriais e não industriais. Essa disseminação se dá pela sua capacidade de análise de diferentes matérias, e também pelo seu custo-benefício. Essas facilidades possibilitaram a aplicação dessa técnica nos setores da pecuária, energético, farmacêutico, veterinário e dentre outros (PASQUINI, 2003; JAMRÓGIEWICZ, 2012).

Apesar dessa multidisciplinariedade é no setor alimentício que a espectroscopia no NIR ganha espaço e já foi empregada em diversos segmentos como na avaliação da qualidade de adoçantes de mesa (TOZETTO; DEMIATE; NAGATA, 2006); na determinação de proteínas em cafés crus (MORGANO et al., 2002); na determinação de caseinato macropéptido em leite (OLIVEIRA et al., 2018); determinação de açúcar total em café cru (MORGANO et al., 2007); na qualidade da acerola (ANDRADE et al., 2002); no controle de qualidade dos cajus (SAMAMAD et al., 2018) da soja (MARCHESE et al., 2018) e da manga (BETEMPS; FACHINELLO; GALARÇA, 2011).

## 4. METODOLOGIA

A pesquisa ocorreu em uma parceria entre a Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB), e a indústria de formulações de produtos enterais Nuteral®, com sede em Fortaleza, Ceará, Brasil. Para o estudo foi selecionado um tipo de produto fabricado e comercializado por essa empresa. Por razões éticas o produto não terá o seu nome divulgado na pesquisa. No estudo, o mesmo será denominado de mix enteral (ME).

### 4.1. Seleção do produto enteral

O ME é um AEI em pó de coloração amarelo claro, comercializado em latas de folha de flandres (445g). Esse AE apresenta-se como uma dieta rica e completa, possui uma alta concentração de proteínas, e também é rico em imunomoduladores que são importantes para o fortalecimento do sistema imunológico. O ME também possui fibras alimentares, que aliviam a constipação e previne a diarreia e, com isso, contribuem na manutenção saudável da microbiota intestinal normal. (NUTERAL, 2012)

A escolha desse produto se dá pela sua alta comercialização, por sua alta complexidade de matérias-primas, e por esse ME ser constituído por cinco tipos de nutrientes diferentes que se originam de 14 matérias-primas, como mostra a Tabela 2.

Tabela 2 – Caracterização das matérias-primas do ME

<b>Tipo</b>	<b>Nutriente</b>	<b>Matéria Prima</b>
Macronutrientes	Carboidratos	Maltodextrina, Neofiber Aroma de Baunilha e Acessulfane K.
	Lipídeos	Óleo de Canola, Óleo de Girassol e Ômega 3.
	Proteínas	Caseinato de Cálcio, Proteína Isolada da Soja e Proteína Hidrolisada do trigo.
	Aminoácidos	L- Arginina, L- Carnitina e L- Taurina.
Micronutrientes	Vitaminas e minerais	Pré-mix*

\*pré-mix é caracterizado por ser uma mistura rica em diferentes vitaminas e sais minerais.

FONTE: Nuteral, 2018.

### 4.2. Planejamento experimental e preparo das amostras

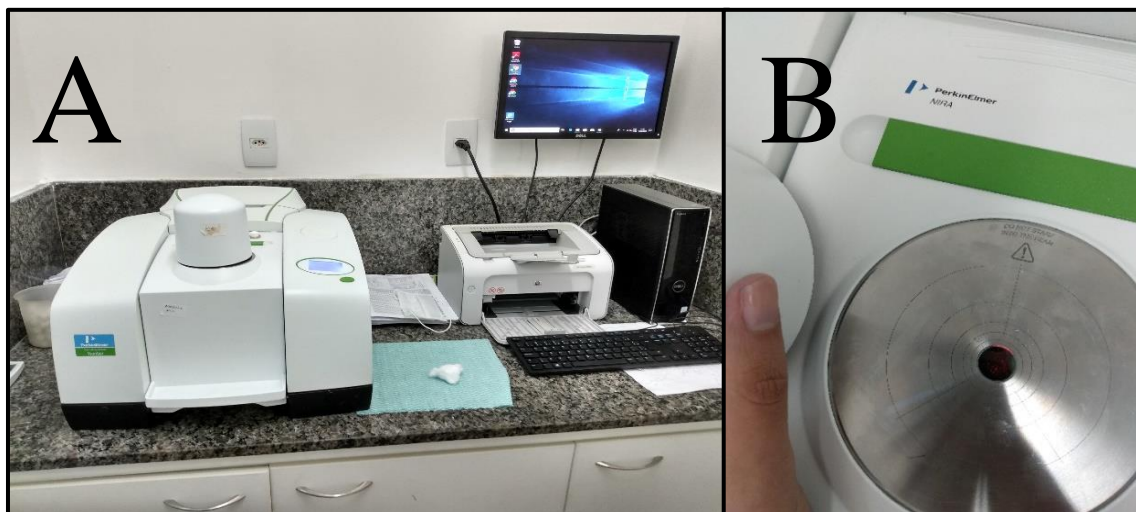
Para a criação do modelo matemático foi necessário a elaboração do planejamento de misturas, para isso foi utilizado o pacote *software The Unscrambler X 10.4* (CAMO S.A, Oslo, Norway) *software package*. sendo formuladas 100 (cem) misturas com 100g/cada a partir da composição original do ME (como sendo o ponto médio), considerando a variação de cada nutrientes em 25% a mais e 25% a menos em relação ao ponto médio (tabela com o planejamento no APÊNDICE 1). A determinação dos teores dos nutrientes foi realizada pela relação centesimal da massa pesada e a massa total da amostra, considerando o grau de pureza declarado no laudo da matéria prima.

Após a elaboração das misturas, as matérias primas foram pesadas em balança analítica (EduTec modelo EEQ9003F-B com incerteza de  $\pm 0,0001$  g), tendo as massas corrigidas ao final de cada pesagem, a fim de minimizar os eventuais erros. Posteriormente as matérias-primas foram adicionadas em recipiente plástico, e misturados por agitação manual e sistemática em um período de tempo de 5 minutos, esse procedimento foi repetido nas 100 amostras.

### 4.3. Obtenção dos dados espectrais

Após a mistura foram obtidos os dados espectrais de 800 nm a 2.500 nm pelo equipamento de bancada *Perkin Elmer Frontier NIR/MID* (Figura 7), com resolução  $16\text{ cm}^{-1}$ , 32 varreduras em triplicata, usando acessório de reflectância difusa.

Figura 7 – (A) Equipamento de bancada *Perkin Elmer Frontier*; (B) Destaque do acessório de reflectância difusa.



Fonte: Autor, 2019.

Para cada amostra foi obtido a média aritmética de triplicatas dos dados espectrais, em seguida realizado estudos de pré-tratamentos dos dados, comportamento espectral, construção do modelo de calibração e as predições, usando o pacote *software The Unscrambler* versão X 10.4 (CAMO S.A, Oslo, Norway) *software package*.

#### **4.4. Exploração dos dados espectrais e relação com macronutrientes**

Antes da realização das análises quimiométricas foi realizado um estudo dos espectros de cada matéria-prima do ME, esse procedimento foi necessário para o melhor conhecimento do material estudado. Essa classificação foi feita a partir do atlas desenvolvido por Workman e Weyer (2012) para análise de espectros obtidos no NIR, cada comprimento de onda apresentado no ME foi identificado e catalogado de acordo com a classificação do atlas (APENDICE 2).

#### **4.5. Pré-tratamentos**

O primeiro procedimento realizado foi a Correção Multiplicativa do Sinal (MSC), seguido do alisamento que segundo Gris et al. (2017) são procedimentos úteis para reduzir o espalhamento de luz e diminuir os ruídos aleatórios. Após esse processo foi verificado que na região espectral que correspondia a 800 nm a 969 nm apresentava-se ruidoso e sem informação espectral, logo essa região foi retirada do estudo. Deste modo a região espectral estudada limitou-se ao comprimento de onda entre 970 nm a 2500 nm.

Outros pré-tratamentos foram aplicados no estudo, como a Variação normal padrão (SNV) e a primeira derivada de Savitsky-Golay. A eficiência dos pré-tratamentos foi avaliada pela capacidade de predizer as amostras do ME.

#### **4.6. Análise multivariada**

##### **4.6.1. PCA**

O uso da técnica de análise de componentes principais (PCA) nesse estudo se justifica pela possibilidade de reduzir a quantidade de dados, sem perder informações importantes. Com a PCA também é possível estabelecer relações entre amostras com características semelhantes, e possibilita a identificação dos experimentos considerados “*outliers*”, que são amostras anômalas.

#### 4.7. Calibração multivariada

No estudo foram empregados métodos de análise multivariada, essa metodologia torna-se particularmente importante em técnicas espectroscópicas no NIR, sendo possível manipular dados de absorbância espectral associáveis em mais de uma frequência ao mesmo tempo. Na teoria a calibração multivariada é capaz de relacionar duas matrizes (X e Y), onde X é o conjunto dos dados experimentais contendo as variáveis independentes (representadas pelas linhas do conjunto de dados) e pelas variáveis dependentes (Y) (colunas) (PASQUINI, 2003; CARVALHO, 2015).

A calibração multivariada foi realizada seguindo as orientações das normas padrões internacionais publicado na ASTM E1655-00. O conjunto de dados foi separado em dois grupos: 70 amostras para calibração e validação interna (respeitando os valores mínimos e máximos de cada nutriente estudado e as amostras do ponto central) e 30 amostras para validação externa. O coeficiente de correlação (r), coeficiente de determinação ( $R^2$ ), erro médio quadrático de determinação dos nutrientes na validação interna e externa (RMSECV e RMSEP, respectivamente) e o viés (bias) dos modelos foram avaliados para verificação dos modelos de calibração mais robustos e eficientes.

O erro médio determinação dos nutrientes (RMSECV e RMSEP) foram calculados seguindo as seguintes equações:

$$\text{RMSECV} = \sqrt{\frac{1}{n_c} \sum_{i=1}^{n_c} (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (3)$$

e

$$\text{RMSEP} = \sqrt{\frac{1}{n_p} \sum_{i=1}^{n_p} (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (4)$$

Onde  $\hat{y}_i$  é o valor previsionado da  $i^{\text{th}}$  amostra na calibração ou na predição,  $y_i$  é o valor real da amostra fornecido pelo método de referência e  $n_c$  é o número de amostra na calibração, e  $n_p$  é o número de amostra na predição.

A avaliação dos modelos foi realizada com objetivo de verificar a melhor correlação (r mais próximo de 1), melhor coeficiente de determinação ( $R^2$  mais próximo de 1), menor erro

médio de determinação (RMSECV e RMSEP mais próximo de 0) e o menor vies (bias mais próximo de 0).

Após a indicação dos modelos com maior desempenho na validação externa, esses foram empregados na predição dos nutrientes em amostras de três lotes diferentes do produto comercializado pela empresa Nuteral ®.

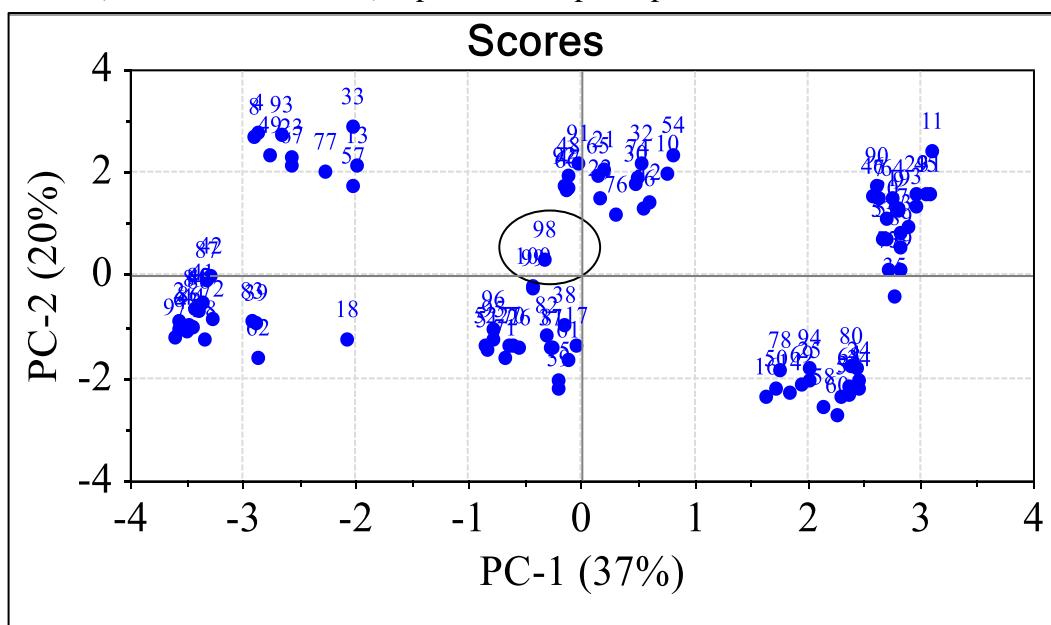
## 5. RESULTADOS E DISCUSÕES

### 5.1. Análise de Componentes Principais (PCA)

A PCA dos teores das 14 matérias primas nas 100 amostras do planejamento experimental foi realizada para identificar os padrões das amostras que possuem composição semelhante e o comportamento das amostras em relação às réplicas do produto ME industrializado que foi escolhido (amostras 98, 99 e 100).

A Figura 8 mostra o gráfico de *scores* que correlaciona os componentes principais (PC) 1 e 2, e explica que a PC-1 foi responsável por explicar 37% da variabilidade dos dados, e a PC-2 é responsável por explicar 20%. Foi possível verificar as amostras distribuídas em seis grandes grupos, em torno das três amostras do ponto central (amostras circundadas de verde) que são réplicas do produto enteral industrializado escolhido.

Figura 8 – *Scores* do PC1 e PC2 dos teores das matérias primas que compõe o planejamento das 100 amostras do ME, com formação de com seis grupos delimitados em torno das amostras 98, 99 e 100 (circundada em verde) representados pelos pontos centrais.



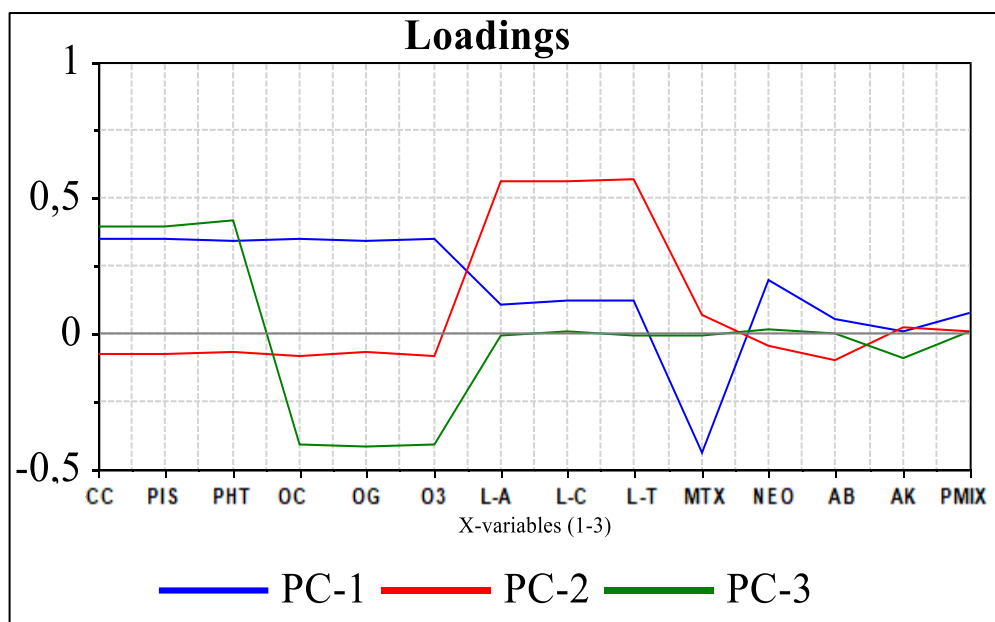
Fonte: Autor, 2019.

No gráfico de pesos ou *loadings* (Figura 9) é possível entender as disposições das amostras no gráfico de *scores* (Figura 8), sendo PC-1 (em azul) destacou a influência da maltodextrina que é um carboidrato em maior abundância no ME.



Logo, é possível supor que a PC-1 é representada pelos carboidratos e também que as amostras que detêm maiores quantidades de carboidratos foram dispostas na parte inferior (negativa) do gráfico de *scores* (Figura 8).

Figura 9 – *Loadings* da PC1, PC2 e PC3 obtidos das concentrações das 14 matérias primas das 100 amostras do ME.



CC - Caseinato de Cálcio; PIS - Proteína Isolada da Soja; PHT - Proteína Hidrolisada do trigo; OC - Óleo de Canola; OG - Óleo de Girassol; O3 - Ômega 3; L-A - L- Arginina; L-C - L- Carnitina; L-T - L- Taurina; MTX – Maltodextrina; NEO – Neofiber; AB - Aroma de Baunilha AK - Acessulfane K; PMIX: Pré-mix.  
Fonte: Autor, 2019.

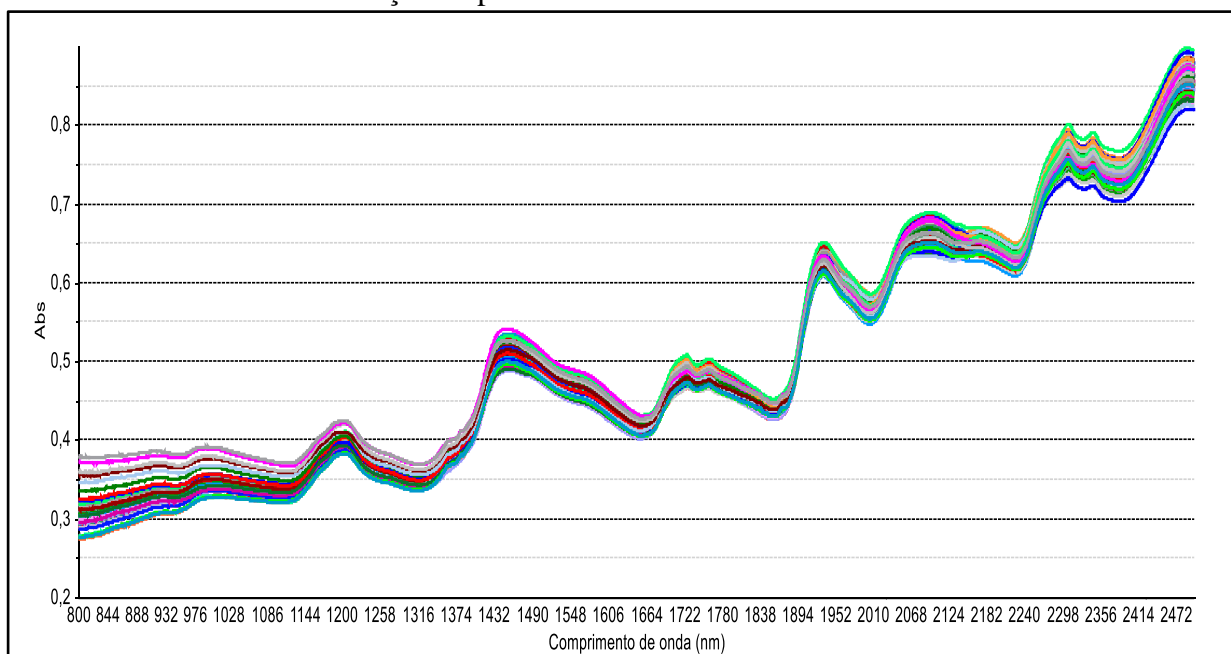
Já a PC-2 (em vermelho) mostra a influência dos aminoácidos sobre as amostras, apesar da pouca quantidade desses micronutrientes, esta influência pode ser resultado dos aminoácidos presentes nas proteínas. As amostras que se influenciaram com essa PC estão dispostas na parte superior (positiva) do gráfico de *scores* (Figura 8).

A PC-3 (em verde) não está representada no gráfico de *scores*. No entanto, essa PC explicou uma grande parcela do estudo (15%) e o gráfico de *loadings* pressupõe que a PC-3 é influenciada pelos lipídeos. A caracterização das PC's é de suma importância para o maior conhecimento das amostras envolvidas no estudo, e os resultados obtidos na PCA estão de acordo com a composição do ME e de suas variações, sendo os três nutrientes em maiores quantidades nesse AE são respectivamente: carboidratos, proteínas e lipídeos.

## 5.2. Dados espectrais de absorção no Infravermelho Próximo e pré-tratamentos

Na Figura 10 podem ser observados os espectros de NIR sem nenhum tratamento espectral. Esses espectros foram traçados no comprimento de onda que corresponde à faixa entre 800 nm e 2500 nm das 100 amostras utilizadas para a composição do modelo de calibração. Foram observadas diferentes regiões com picos espectrais, que se justifica pelas dessemelhanças das matérias primas que compõe o ME.

Figura 10 – Espectros do NIR originais na região do infravermelho próximo (800-2500 nm) das amostras do ME sem a utilização de pré-tratamentos.

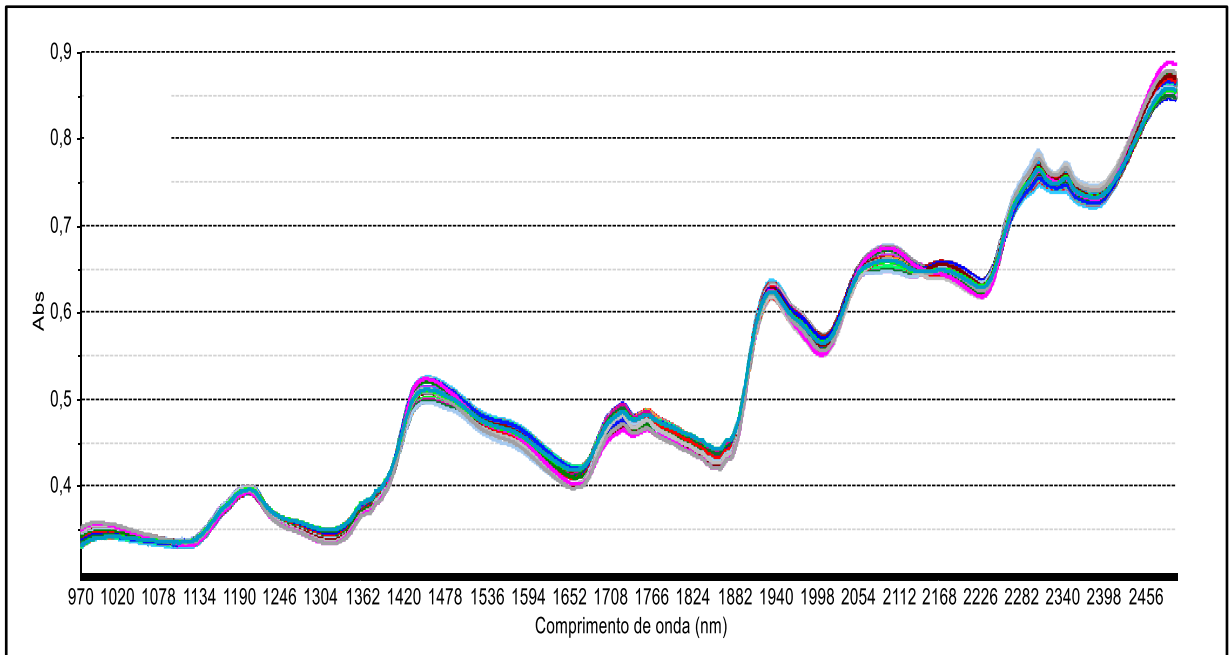


Fonte: Autor, 2019.

Não é possível observar as diferenças entre as amostras, fato que pode ser justificado pela presença das mesmas matérias primas em todos os ME, mudando somente suas quantidades. Apesar de não ser possível observar as diferenças entre as amostras é possível identificar que os espectros apresentaram diferença de linha de base. Segundo Souza, Madari e Guimarães (2012) esse problema é comum em varreduras espectrais por refletância difusa, principalmente em amostras em pó. Essa diferença de altura dos espectros, chamado de espalhamentos de luz, pode ser amenizada com o pré-tratamento de correção de espalhamento de luz por MSC, como observado na

Figura 11.

Figura 11 – Espectros na região do infravermelho próximo (NIR) das amostras do ME na faixa de comprimento de onda entre 970-2500 nm com pré-tratamento de MSC.



Fonte: Autor, 2019.

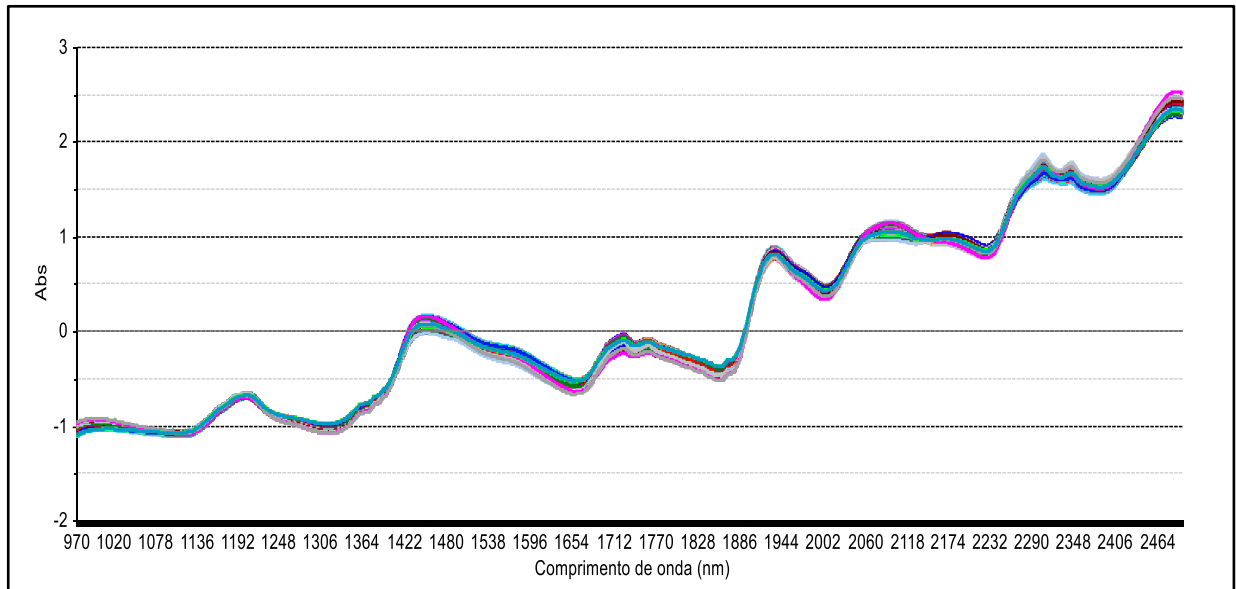
Na

Figura 11 foi retirada a faixa de comprimento 800-970 nm por apresentar forte ruído espectral. Essa região apresentou-se muito ruidosa mesmo com pré-tratamentos, foi observada também através do atlas de Workman e Weyer (2012) que essa faixa não apresentava informações relevantes para o estudo. Fazendo a comparação entre as Figura 10 e

Figura 11 é possível notar que os espectros ficaram menos dispersos (mais agrupados), e menos ruidosos.

Também foram testados outros pré-tratamentos, como o SNV que se assemelha com os espectros tratados com MSC. No entanto o SNV segundo Tibola et al. (2018) é mais robusto que o MSC, por não utilizar o espectro médio como referência. Na Figura 12 é possível visualizar as 100 amostras do ME com SNV.

Figura 12 – Espectros NIR na região do infravermelho próximo (970-2500 nm) das amostras do ME pré-tratados com SNV.

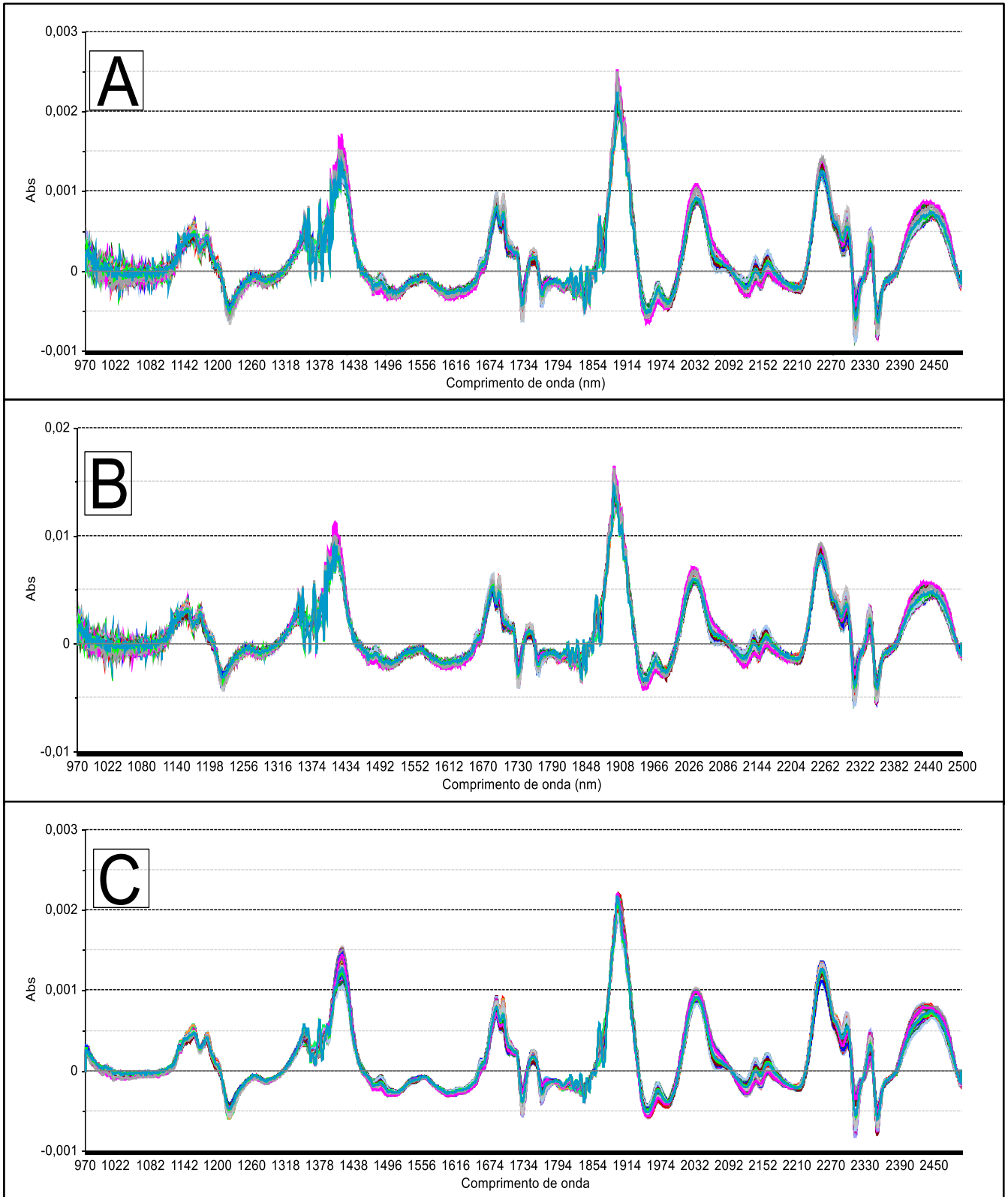


Fonte: Autor, 2019.

Após esse procedimento foi aplicado à primeira derivada de *Savitzky-Golay* nos espectros pré-tratados com MSC (Figura 13A) e também nos espectros pré-tratados com SNV (Figura 13B). Os espectros de primeira derivada apresentaram ruído dos dados e isso poderá causar prejuízos durante a etapa de construção dos modelos. Nesses casos, o uso de suavização pode ser interessante.

A Figura 13C mostra o efeito da suavização *Savitzky-Golay* de 5 pontos nos 100 espectros com a primeira derivada de *Savitzky-Golay*. O uso das derivadas, segundo Ferreira (2015) é recomendada para correção de algum possível deslocamento do espectro, que pode ser causado pelo tipo de amostra ou até mesmo por algum erro instrumental. Esse tipo de deslocamento é comum em espectros de refletância difusa, e esse problema pode ser solucionado com a aplicação da primeira derivada de *Savitzky-Golay*.

Figura 13 – Espectros NIR na região do infravermelho próximo (970-2500 nm) das amostras do ME. Sendo A: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de *Savitzky-Golay* e MSC; B: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de *Savitzky-Golay* e SNV; C: Espectros com pré-tratamento de primeira derivada de *Savitzky-Golay* adicionada à suavização com 5 pontos.



Fonte: Autor, 2019.

### 5.3. Modelos de calibração e validação interna

Para a determinação quantitativa dos nutrientes do ME foram criados modelos matemáticos utilizando o algoritmo de Regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS), que segundo Lobato (2018), é amplamente utilizada no estudo multivariado de diversos produtos e com esse método é possível estudar o padrão de qualidade de alimentos, bem como possíveis adulterações dos mesmos.

Na identificação dos modelos mais robusto e eficiente, foram produzidos sete modelos com diferentes pré-tratamentos dos dados espectrais para cada tipo de nutriente, no qual, suas respectivas potencialidades foram medidas pelos parâmetros estatísticos:  $R^2$ , correlação linear, RMSEC (erro da calibração), RMSECV (erro da validação interna) e Bias. Os resultados dos modelos de calibração e validação interna (com validação cruzada total) estão na Tabela 3.

Através da Tabela 3 é possível observar que os modelos de calibração (70 amostras) elaborados para os macronutrientes possuíam melhores respostas estatísticas que os modelos de micronutrientes. Para os aminoácidos adicionados (L-aurina, L-carnitina e L-arginina) foi considerado inicialmente na avaliação dos modelos a soma dos 3 aminoácidos, assim também para a matéria prima de mix de vitaminas e minerais, para que nas próximas etapas sejam feitos melhoramentos dos modelos mais dedicados a esses componentes.

Analisando os resultados, pode-se verificar que os modelos sem nenhum pré-tratamento possuem menor desempenho. Para os macronutrientes os melhores modelos foram aqueles que sofreram menos pré-tratamento, em geral apenas com correção de espalhamento de luz. Os modelos para os micronutrientes apresentam melhor desempenho quando adicionados à primeira derivada, esse resultado é esperado, visto a necessidade de atingir as diferenças mínimas dos espectros.

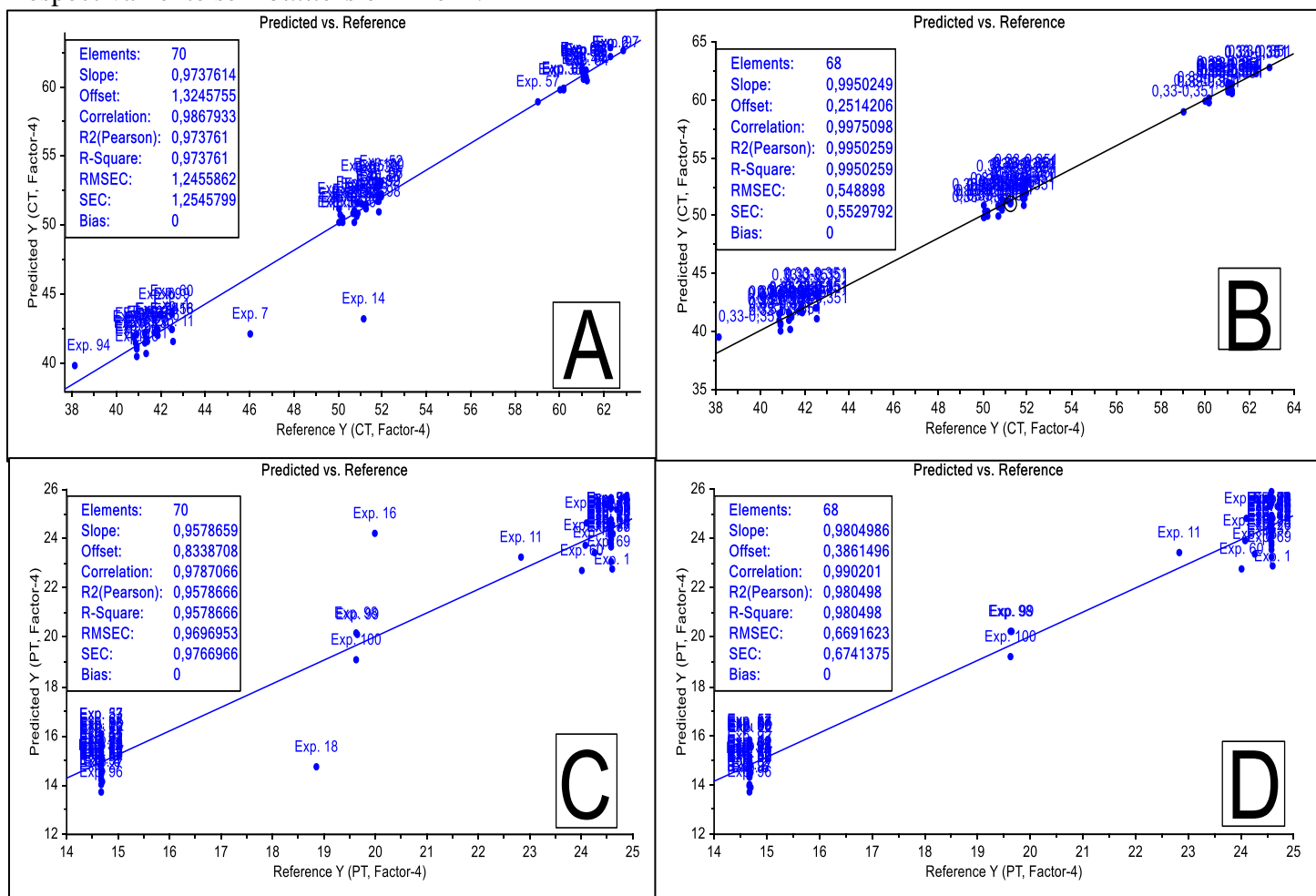
É importante mencionar a necessidade de eliminação de algumas amostras (conhecido normalmente de *outliers*) durante a modelagem, 2 ou 3 amostras, que tiveram algum comportamento indesejado de piora do modelo. Para demonstração da identificação das amostras anômalas, a Figura 14 – Predição *versus* referência dos carboidratos e proteínas com a presença de outliers em A e C, e respectivamente sem *outliers* em B e D. possui 2 modelos de calibração e seu melhoramento com a eliminação de 2 amostras.

Tabela 3 – Resultados estatísticos de calibração e validação interna de modelos de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS) do ME, submetidos diferentes pré-tratamentos espectrais (n=70).

Nutriente	Pré-processamento	Calibração			Validação interna (cruzada)			
		Faixa g. 100g <sup>-1</sup>	R <sup>2</sup>	Correl.	RMSEC	R <sup>2</sup>	Correl.	RMSEVC
Carboidratos totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	38,1 – 62,9	0,968	0,984	1,357	0,964	0,982	1,455
	MSC S/ OUT.		0,995	0,997	0,548	0,996	0,996	0,618
	SNV S/ OUT.		0,989	0,994	0,804	0,988	0,994	0,851
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,993	0,996	0,628	0,993	0,996	0,657
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,978	0,989	1,128	0,984	0,992	0,967
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,995	0,997	0,543	0,993	0,996	0,631
Proteína totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	14,6 – 24,9	0,951	0,975	1,043	0,944	0,971	1,114
	MSC S/ OUT.		0,980	0,990	0,669	0,975	0,987	0,744
	SNV S/ OUT.		0,963	0,981	0,915	0,958	0,979	0,975
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,985	0,992	0,571	0,976	0,989	0,697
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,986	0,993	0,563	0,982	0,990	0,677
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,986	0,993	0,556	0,993	0,996	0,631
Lipídeos totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	10,9 – 18,3	0,965	0,982	0,642	0,959	0,979	0,697
	MSC S/ OUT.		0,982	0,991	0,463	0,978	0,989	0,507
	SNV S/ OUT.		0,981	0,990	0,472	0,970	0,984	0,603
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,983	0,991	0,448	0,978	0,989	0,512
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,983	0,991	0,427	0,975	0,987	0,539
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,984	0,992	0,526	0,971	0,985	0,588
Aminoácidos adicionados	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	1,4 – 2,6	0,539	0,734	0,355	0,482	0,694	0,379
	MSC S/ OUT.		0,340	0,583	0,425	0,205	0,453	0,471
	SNV S/ OUT.		0,343	0,586	0,423	0,208	0,456	0,471
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,724	0,851	0,274	0,488	0,698	0,374
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,589	0,767	0,335	0,324	0,570	0,436
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,636	0,797	0,315	0,316	0,562	0,438
Vitaminas e minerais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	2,5 – 4,3	0,483	0,695	0,263	0,226	0,476	0,331
	MSC S/ OUT.		0,400	0,635	0,284	0,153	0,391	0,348
	SNV S/ OUT.		0,270	0,520	0,313	0,049	0,223	0,371
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,736	0,858	0,268	0,500	0,707	0,370
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,603	0,776	0,231	0,227	0,503	0,327
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZAÇÃO S/ OUT.		0,734	0,856	0,189	0,214	0,463	0,343

n - Número de amostras; R<sup>2</sup> - coeficiente de determinação; C - correlação linear; RMSEC - erro quadrado médio de calibração; RMSEVC - Erro Quadrado Médio De Validação Cruzada.  
Fonte: Autor, 2019.

Figura 14 – Predição *versus* referência dos carboidratos e proteínas com a presença de outliers em A e C, e respectivamente sem *outliers* em B e D.



Fonte: Autor, 2019.

Os gráficos representados nas Figura 14A e Figura 14B mostram os valores de referências e de predição de carboidratos usando os pré-tratamento MSC, com as 70 amostras de calibração e com 68 amostras, após eliminação de 2 amostras anômalas (amostras 7 e 14). Os gráficos representados nas Figura 14C e Figura 14D mostram os valores de referências e de predição de proteína total usando os pré-tratamento MSC, com as 70 amostras de calibração e com 68 amostras, após eliminação de 2 amostras anômalas (16 e 18).

A eliminação dessas amostras trouxeram benefícios aos parâmetros estatísticos de avaliação dos modelos, em especial à raiz do erro médio de calibração (RMSEC), no caso do modelo de carboidrato diminuindo o erro de 1,24 para 0,55 g.100g<sup>-1</sup> e no modelo da proteína diminuindo o erro de 0,97 para 0,67 g.100g<sup>-1</sup>.

Outros autores também retiram as amostras anômalas para melhorarem seus modelos, como a exemplo Santos, Gomidei e Sousa (2009) que usaram dessa técnica para melhorar modelos de calibração de umidade de madeiras e de polpa celulósica, no estudo também foi



utilizado a espectroscopia NIR. Segundo Dallagnol et al. (2013) ao retirar as amostras anômalas ocorre a diminuição da distância entre os espectros (conhecido também como distância de Mahalanobis) do conjunto de calibração. Por consequência também é diminuído a dispersão entre os espectros, e quando aplicado o algoritmo de PLS o RMSE apresenta melhoras significativas.

Para Urbano-Cuadrado et al. (2004) modelos de calibração com valores de  $R^2$  superiores a 0,900 indicam excelente precisão, entre 0,700 e 0,900 significam que aquele modelo apresenta uma boa precisão. Segundo o autor valores de  $R^2$  menores que 0,700 permite o uso analítico apenas de triagem, que permitem classificar as amostras em valores baixos, médios e elevados. Essa classificação também é muito utilizada no controle de qualidade de vários produtos industrializados, principalmente na indústria alimentícia.

A partir dessas informações é possível verificar que todos os modelos de macronutrientes apresentaram uma excelente precisão quanto se analisa seus  $R^2$ , em destaque as os modelos de carboidratos totais pré-tratado com MSC e o modelo tratado com SNV e a primeira derivada, ambos apresentaram  $R^2 = 0,995$ .

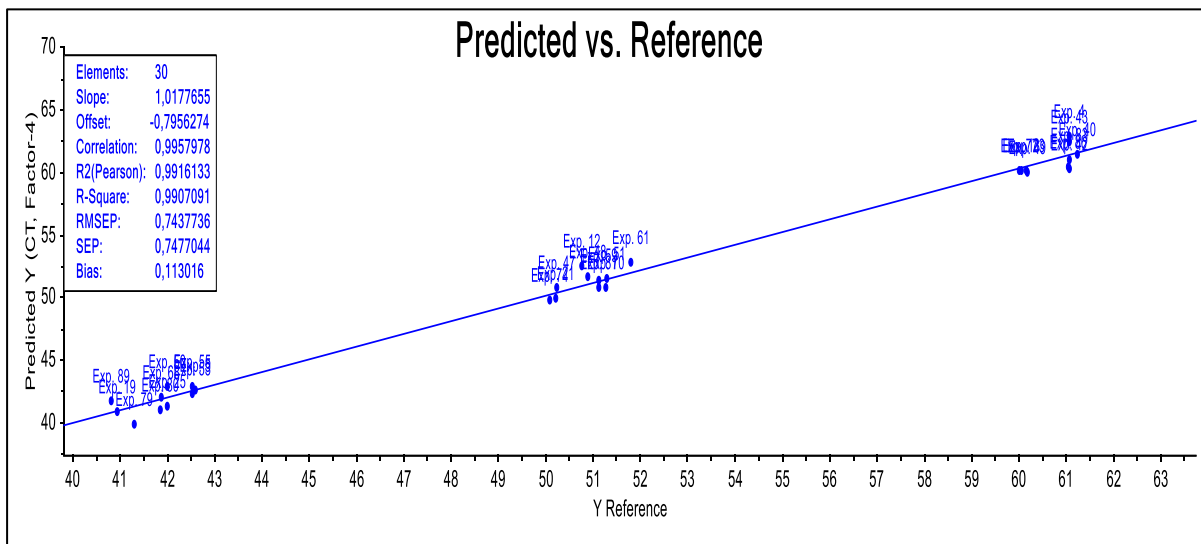
Os modelos de calibração para proteínas e lipídeos totais foram classificados como excelente, sendo apresentado  $R^2$  superiores a 0,900, inclusive os modelos sem nenhum tipo de tratamentos quimiométricos. Em contrapartida nenhum modelo dos micronutrientes apresentaram-se como excelente segundo a classificação de Urbano-Cuadrado et al. (2004), porém em alguns pré-tratamentos com derivadas possuíram classificação com boa precisão. Apesar dessas informações só é possível identificar se um modelo realmente tem boa precisão com a etapa de validação externa, sendo esses avaliados com amostras que não participaram da etapa de calibração.

#### **5.4. Validação externa**

Assim como na calibração, na previsão também foi evidenciada as diferenças entre as qualidades de precisões entre os macros e micronutrientes. Todos os macronutrientes apresentaram excelentes parâmetros estatísticos, sendo que todos exibiram  $R^2 > 0,980$ . Os modelos de carboidratos, proteínas e lipídios totais que foram pré-tratados com MSC mostraram-se semelhantes aos modelos pré-tratados com SNV com um teste  $F = 0,9821$  apresentando um nível de confiança de 95%. Esses foram os modelos que apresentaram os melhores resultados estatísticos. As Figura 15 e Figura 16 demostram os gráficos de relação

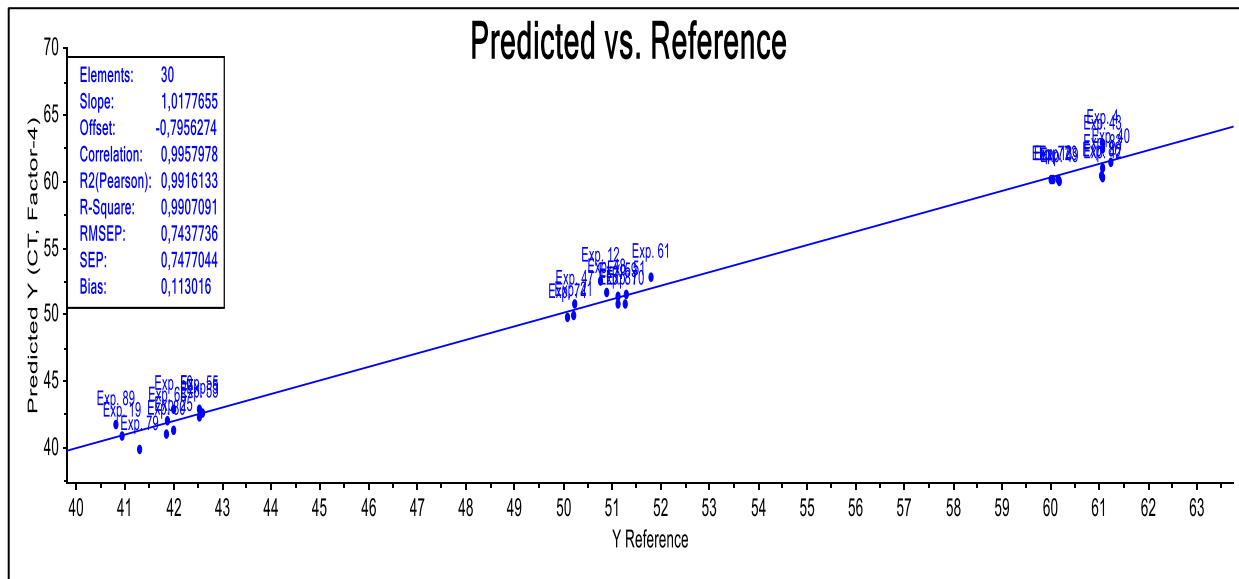
entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo com pré-tratamentos MSC e SNV, respectivamente.

Figura 15 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento MSC) *versus* os valores de referências.



Fonte: autor, 2019.

Figura 16 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento SNV) *versus* os valores de referências.



Fonte: Autor, 2019.

Nos dois pré-tratamentos, MSC e SNV, os modelos tiveram a mesma eficiência da predição das amostras de validação externa, com  $R^2 = 0,99$  e  $RMSEP = 074\%$  ( $g.100g^{-1}$ ).

Ambas as previsões de carboidratos apresentaram uma acurácia boa, sendo que todas as amostras testes nesse estudo se localizaram na linha de regressão ou próximo dela, o que comprova ainda mais a semelhança e o poder de previsão desses modelos.

A semelhança entre os modelos que foram pré-tratados com SNV e o MSC também foi observada nos modelos de previsão dos micronutrientes, no entanto, esses modelos não apresentaram tamanha precisão como o dos macronutrientes. Para esses, os modelos que foram aplicados somente o SNV e o MSC não obtiverem respostas boa estatísticas, sendo melhorada quando o SNV e o MSC foram adicionadas à primeira derivada de *Savitzky-Golay*, resultados apresentados na Tabela 4.

Em destaque a previsão dos aminoácidos obtidos dos modelos que foram aplicado o MSC com suavização associada a primeira derivada de *Savitzky-Golay*, com  $R^2 = 0,744$  e correlação = 0,875, além disso a distância entre os espectros foi considerada boa (RMSEP = 0,265) o que promove maior acurácia ao modelo.

Tabela 4 – Resultados estatísticos de validação externa, submetidos diferentes pré-tratamentos espectrais (n=30).

Nutriente	Modelo	Faixa g. 100g <sup>-1</sup>	Correl.	RMSEP
Carboidratos totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	38,1 – 62,9	0,992	1,010
	MSC S/ OUT.		0,995	0,746
	SNV S/ OUT.		0,994	0,743
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,993	0,941
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,990	1,11
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,993	0,922
Proteínas totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	14,6 – 24,9	0,981	0,955
	MSC S/ OUT.		0,987	0,768
	SNV S/ OUT.		0,987	0,770
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,989	0,732
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,991	0,651
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,991	0,669
Lipídeos totais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	10,9 – 18,3	0,966	1,007
	MSC S/ OUT.		0,984	0,639
	SNV S/ OUT.		0,984	0,642
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,981	0,692
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,982	0,676
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,982	0,679

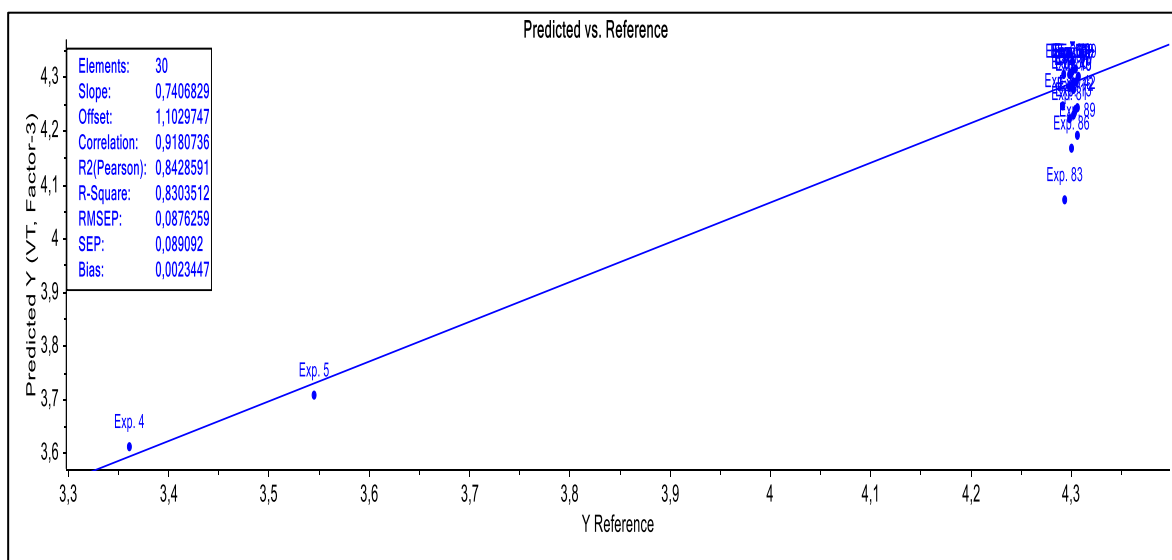
Aminoácidos adicionados	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	1,4 – 2,6	0,625	0,424
	MSC S/ OUT.		0,364	0,517
	SNV S/ OUT.		0,369	0,515
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,681	0,400
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,875	0,265
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,520	0,462
Vitaminas e Minerais	SEM PRÉ-PROCESSAMENTO	2,5 – 4,3	0,329	0,241
	MSC S/ OUT.		0,314	0,219
	SNV S/ OUT.		0,312	0,220
	PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,831	0,132
	MSC + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,868	0,110
	SNV + PRIMEIRA DERIVADA + SUA VIZIÇÃO S/ OUT.		0,918	0,087

C – Correlação linear; RMSEP - erro quadrado médio de previsão; S/ OUT – sem outliers.

Fonte: Autor, 2019.

As vitaminas e minerais também apresentaram melhores previsões quando foram usados modelos pré-tratados com primeira derivada *Savitzky-Golay*. Em destaque observamos as previsões externas obtidos do modelo que foi aplicado o SNV, suavização e primeira derivada, no qual o RMSEP foi o menor entre todos, incluindo as previsões de macronutrientes, sendo 0,087, o que demonstra o desempenho satisfatório para a previsão desse nutriente como é demonstrado na Figura 17.

Figura 17 – Gráfico da relação entre os valores de carboidratos preditos pelo modelo (com pré-tratamento SNV e 1ª derivada) *versus* os valores de referências.



Fonte: Autor, 2019.

Na tentativa de melhorar os resultados dos modelos dos micronutrientes foram construídos novos modelos com faixas espectrais mais sensíveis às ligações químicas características dos aminoácidos. Esses novos modelos foram possíveis pela prévia identificação das bandas espectrais verificadas, relacionadas aos aminoácidos L-Carnitina, L-Arginina e L-Taurina. Para determinação das regiões espectrais do aminoácido foram buscadas as faixas que correspondiam ao grupo orgânico das amins (NH) que está na estrutura molecular dos aminoácidos, e que segundo o atlas desenvolvido por Workman e Weyer (2012), é característico da faixa de comprimento de onda entre 1500 nm a 2399 nm.

A Tabela 5 mostra a calibração e a validação externa realizada para essa técnica, com dados de modelos com diferentes pré-tratamentos de suavização de *Savitzky-Golay* (50 pontos), MSC na faixa que correspondia ao grupo das NH (modelo que apresentou maior acurácia para os aminoácidos) e primeira derivada. As amostras usadas para calibração e para validação foram as mesmas que foram usadas para a elaboração dos aminoácidos totais dos modelos anteriores.

Tabela 5 – Calibração e validação externa dos aminoácidos L-carnitina, L-arginina e L-aurina (mg. 100g<sup>-1</sup>) utilizando suavização de Savitzky-Golay (50 pontos) e MSC e primeira derivada na faixa entre 1500 nm a 2399 nm.

Aminoácido	Faixa mg. 100g-1	Calibração				Validação externa			
		n	R <sup>2</sup>	C	RMSEC	n	R <sup>2</sup>	C	RMSEP
L-Carnitina (MSC)	20,4 - 70,2	70	0,768	0,876	5,822	30	0,584	0,764	7,26
L-Arginina (MSC)	1423,3 - 2485,6	70	0,838	0,915	201,7	30	0,745	0,863	256,0
L- Taurina (MSC)	20,8 - 61,7	70	0,787	0,887	5,58	30	0,609	0,780	7,57
L-Carnitina (MSC+1 <sup>a</sup> deriva)	1423,3 - 2485,6	69	0,764	0,874	5,913	30	0,607	0,779	6,97
L-Arginina (MSC+1 <sup>a</sup> deriva)	1423,3 - 2485,6	69	0,992	0,996	43,73	30	0,808	0,900	241,22
L- Taurina (MSC+1 <sup>a</sup> deriva)	20,8 - 61,7	69	0,818	0,904	5,12	30	0,584	0,764	7,80

n - Número de amostras; R<sup>2</sup> - coeficiente de determinação; C – correlação linear; RMSEC - erro quadrado médio de calibração, RMSEP - erro quadrado médio de previsão.

Fonte: Autor, 2019.

Os dados estatísticos apresentados na Tabela 5 mostraram eficiências semelhantes aos modelos de cada aminoácido com diferente pré-tratamento. Para Soares (2017) o grande número de variáveis pode influenciar na qualidade dos modelos gerados, principalmente na previsão de unidades em pequenas quantidades, como é o caso dos aminoácidos nos AE. O autor ainda relata que a seleção de variáveis ajuda a tornar o modelo mais robusto, e ainda torna sua acurácia mais elevada. Nesse pensamento ainda foram utilizados outros programas de tratamentos de dados como o *matlab* versão 2010 para verificar a existência de regiões espectrais mais sensíveis para os aminoácidos, no entanto, não foram observadas melhores respostas estatísticas.

Apesar dessas premissas os resultados obtidos na Tabela 5 são interessantes, pois para a quimiometria o ideal é alterar menos os dados espectrais de absorbância para encontrar boa relação na calibração multivariada. Isso foi possível verificar que quando usado a região espectral característica da absorção das ligações químicas presentes nos aminoácidos geram modelos com a mesma eficiência, entre o que tiveram apenas correção do espalhamento de luz (MSC) com aqueles tratados com primeira derivada.

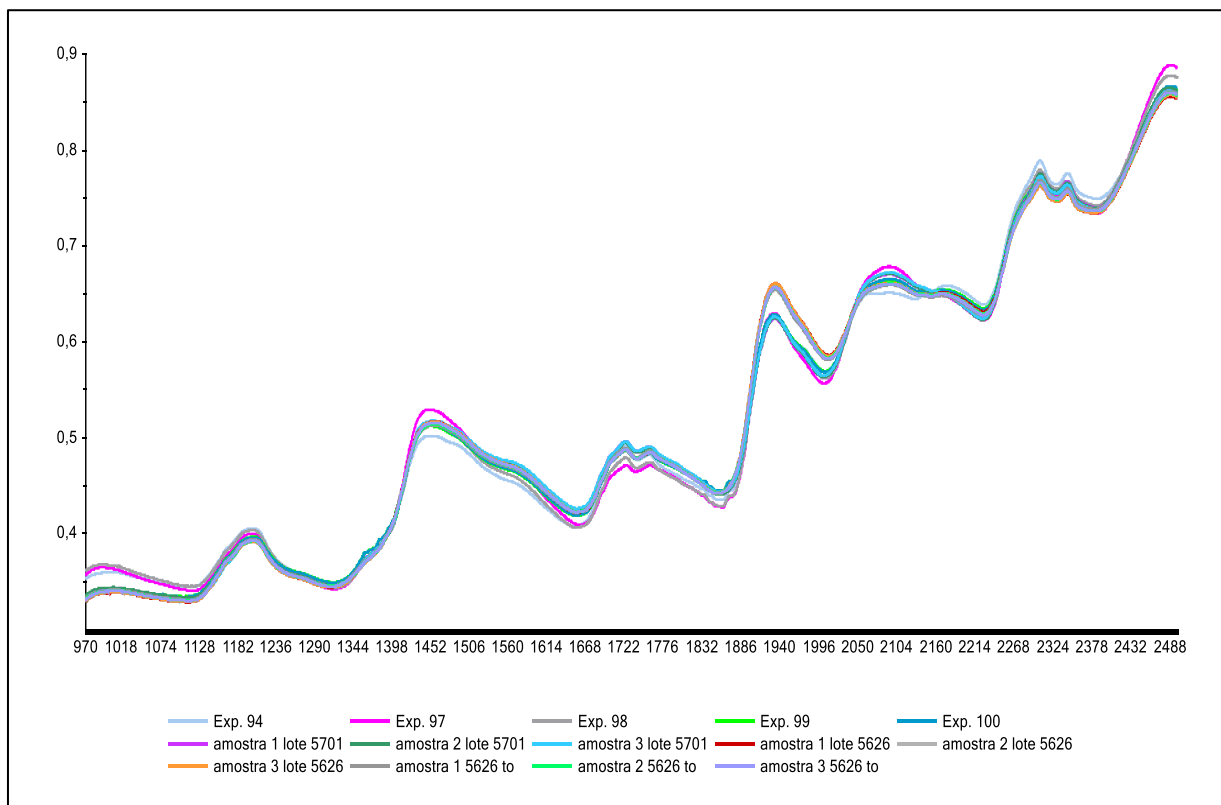
### **5.5. Previsão de amostras comercializáveis**

Após o processo validação externa os modelos com melhores respostas estatísticas foram selecionados para prever amostras do ME comerciais proveniente de três lotes distintos (Lote 5701, Lote 5626, Lote 5626 to). De cada lote foram retiradas três amostras diferentes de modo aleatório. Todas as amostras foram processadas e analisadas usando os mesmos procedimentos das amostras do planejamento experimental retratado na seção 4.2.

Os dados espectrais das nove amostras foram inseridos na matriz de dados e submetidas aos mesmos pré-tratamentos que seus respectivos modelos. As predições dos nutrientes foram realizadas utilizando o modelo mais robusto de cada tipo de nutriente, a partir de suas acurácias observadas na etapa de validação externa.

Um estudo foi realizado para verificação da semelhança do comportamento espectral das 3 amostras do ponto central do planejamento experimental (98, 99 e 100) com as 9 amostras do produto enteral industrializado e as diferenças deles com as amostras que possuem a menor quantidade (amostra 94) e a maior quantidade de carboidrato (amostra 97), apresentado na Figura 18.

Figura 18 – Dados espectrais (com pré-tratamento MSC) das três amostras do ponto central do planejamento experimental médio (Exp. 98,99,100), 9 amostras do produto enteral industrializado e espectros das amostras com valor mínimo (amostra 94) e valor máximo (97) de carboidratos.



Fonte: Autor, 2019.

Esse estudo foi possível verificar que a região em torno do comprimento de onda 2100 nm (região de combinação do grupo R-OH) apresenta a menor banda de absorção para amostra 94 (azul claro), a maior banda para amostra 97 (rosa) e o conjunto das demais amostras entre os dois espectros. O que se pode afirmar que se trata da região mais sensível às ligações químicas dos carboidratos presentes nas amostras enterais.

Essa resposta também foi observada na predição quantitativa dos macronutrientes ME, como mostrado na Tabela 6. O mesmo não foi observado nos micronutrientes, sendo que suas predições apresentaram desvios padrões consideráveis. As predições dos nutrientes estão coerentes com os dados fornecidos pelo rótulo do produto, com erro médio de  $\pm 2,1\%$  para os macronutrientes e de  $\pm 3,9$  para os micronutrientes.

Tabela 6 – Predições de nutrientes do ME utilizando modelos com melhores respostas estatísticas.

Nutriente	Modelo	Amostras	Lote 5701	Lote 5626	Lote 5626 to
Carboidratos totais g. 100g <sup>-1</sup>	SUAVIZAÇÃO + MSC	Amostra 01	51,8 ± 1,0	53,8 ± 2,4	51,9 ± 2,2
		Amostra 02	52,6 ± 1,0	53,7 ± 2,4	52,9 ± 2,1
		Amostra 03	53,7 ± 1,2	54,2 ± 2,4	53,6 ± 2,2
Proteínas totais g. 100g <sup>-1</sup>	MSC + SUAVIZAÇÃO + PRIMEIRA DERIVADA	Amostra 01	20,4 ± 1,0	21,5 ± 1,4	20,4 ± 1,2
		Amostra 02	18,0 ± 1,0	19,3 ± 1,3	19,4 ± 1,3
		Amostra 03	17,7 ± 1,0	19,3 ± 1,3	19,2 ± 1,2
Lipídeos totais g. 100g <sup>-1</sup>	SUAVIZAÇÃO + MSC	Amostra 01	16,6 ± 3,1	14,2 ± 2,7	15,4 ± 2,1
		Amostra 02	16,2 ± 3,0	14,2 ± 2,6	14,2 ± 2,2
		Amostra 03	16,3 ± 3,3	14,1 ± 2,5	14,1 ± 2,5
L-Carnitina mg. 100g <sup>-1</sup>	SUAVIZAÇÃO + MSC	Amostra 01	36,4 ± 19,7	36,9 ± 47,9	37,4 ± 39,0
		Amostra 02	36,0 ± 19,9	36,8 ± 45,7	37,0 ± 41,6
		Amostra 03	35,7 ± 18,0	36,5 ± 47,5	36,7 ± 42,0
L-Arginina g. 100g <sup>-1</sup>	SUAVIZAÇÃO + MSC	Amostra 01	0,984 ± 1,4	2,122 ± 1,0	2,337 ± 1,2
		Amostra 02	0,995 ± 1,5	2,238 ± 1,2	2,329 ± 1,2
		Amostra 03	0,821 ± 1,4	1,964 ± 1,1	2,009 ± 1,3
L- Taurina mg. 100g <sup>-1</sup>	SUAVIZAÇÃO + MSC	Amostra 01	35,9 ± 19,7	36,4 ± 47,9	36,1 ± 39,0
		Amostra 02	35,5 ± 19,9	36,3 ± 45,7	36,5 ± 41,6
		Amostra 03	35,2 ± 18,0	36,1 ± 47,5	36,3 ± 42,0
Vitaminas e mineiras g. 100g <sup>-1</sup>	SNV + SUAVIZAÇÃO + PRIMEIRA DERIVADA	Amostra 01	4,2 ± 0,5	4,3 ± 0,5	4,3 ± 0,6
		Amostra 02	4,1 ± 0,5	4,3 ± 0,6	4,3 ± 0,6
		Amostra 03	4,2 ± 0,5	4,3 ± 0,6	4,2 ± 0,6

Fonte: Autor, 2019.



Os resultados da tabela 6 revelam as potencialidades da utilização do NIR para a quantificação de macronutrientes em alimentos para uso enteral, que pode ser útil inclusive para testagem rápida de seus controles de qualidade. Diferentemente, os micronutrientes mesmo com a utilização de outras ferramentas quimiométricas não apresentaram resultados estatísticos satisfatórios para ser considerado eficaz na determinação do controle de qualidade desse alimento. Autores como Bueno (2011) relatam que a NIRS não apresenta bons desempenhos para analisar amostras muito heterogênicas, principalmente quando o elemento pesquisado representa uma porção muito baixa em relação aos outros que compõe a massa total da substância analisada.

De modo geral as análises quantitativas de micronutrientes por NIR se apresenta como um desafio. Caramês (2016) afirma que baixas concentrações de um elemento em uma amostra dificulta a melhor performance do modelo, chegando a essa conclusão em estudos relacionados ao néctar de diferentes frutas. Botelho (2014) relata que a técnica NIRS em alimentos apresenta baixa sensibilidade, apresentando limite de detecção de aproximadamente de 0,1% (p/p)<sup>4</sup>, inviabilizando, segundo a autor, a utilização do NIRS na determinação de compostos em baixas concentrações.

Não foi encontrado na literatura trabalhos que determinaram micronutrientes em alimentos de uso enterais, sendo este um trabalho piloto nessa abordagem. Buscas sobre a quantificação de micronutrientes em alimentos, foram observadas em trabalhos como o de Ferrarini (2004) que determinou valores nutricionais de minerais, através de modelos de regressão, sendo que o experimento também não apresentou bom desempenho.

## 6. CONCLUSÃO

A técnica de espectroscopia no infravermelho próximo (NIR) associada a ferramentas quimiométricas permitiu a elaboração de modelos de calibração multivariada com boa eficiência na determinação de nutrientes em alimento enteral industrializado. Esse resultado foi possível pela construção de um planejamento experimental de misturas com 25% de variação nos teores dos nutrientes.

Foi verificado que a correção de espalhamento de luz (MSC) é o pré-tratamento eficiente para obter modelos robustos para os macronutrientes, usando a faixa espectral completa do infravermelho próximo, sendo possível estudar quantitativamente cada nutriente estudado. Para os micronutrientes a correção do espalhamento de luz foi eficiente para modelos com faixa espectral mais sensível as ligações químicas dos aminoácidos.

Para os modelos dos aminoácidos adicionados, os resultados estatísticos da calibração e da validação externa apresentaram bom desempenho, porém, quando foram empregados para previsões nas amostras de lotes comercializados os resultados apresentaram baixa precisão e exatidão, o que pode ser resultado das baixas porcentagens desses nutrientes no produto pesquisado, prejudicando a obtenção de sinais obtidos pelo equipamento de NIRS. Uma alternativa para melhorar estatisticamente esses modelo seria a análise das concentrações desses aminoácidos utilizando a análises pelo método padrão como a cromatografia líquida de alta eficiência (CLAE) e não somente pelas massas das misturas, criando assim correlações mais precisas entre a quantidade de nutriente e os espectros NIR.

Apesar disso a inovação do uso dessa técnica no estudo de componentes bioquímicos de alimentos de uso enteral apresentam vantagens quanto à utilização do método de referência, incluindo rapidez, praticidade, economia com reagentes, não geração de resíduos e possibilidade de comercialização das amostras analisadas por não serem destruídas ou processadas e isso tem um impacto positivo nas indústrias deste segmento.

## REFERÊNCIAS

- ADITIVOS E INGREDIENTES.** [s.l.]: Aditivos & Ingredientes, 2016. Disponível em: <[https://aditivosingredientes.com.br/upload\\_arquivos/201612/2016120083727001481819280.pdf](https://aditivosingredientes.com.br/upload_arquivos/201612/2016120083727001481819280.pdf)>. Acesso em: 18 set. 2019.
- ADITIVOS E NUTRIENTES (Maltodextrinas - Características Estruturais e Aplicações) (Ed.). **Maltodextrinas - características estruturais e aplicações.** 2016. Disponível em: <<https://aditivosingredientes.com.br/artigos/todos/maltodextrinas-caracteristicas-estruturais-e-aplicacoes>>. Acesso em: 17 set. 2019.
- ALHASHEMI, Samira Hossaini; GHORBANI, Raana; VAZIN, Afsaneh. Improving knowledge, attitudes, and practice of nurses in medication administration through enteral feeding tubes by clinical pharmacists: a case-control study. **Advances In Medical Education And Practice**, [s.l.], v. 10, n. 5, p.493-500, 9 jul. 2019. Disponível em: <<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6628606/>>. Acesso em: 20 ago. 2019.
- AMERICAN OIL CHEMISTS' SOCIETY ([s.i]) (ed.). O AOCS avança a ciência e a tecnologia de óleos, gorduras, proteínas, surfactantes e materiais relacionados, enriquecendo a vida das pessoas em todos os lugares. AOCS. Disponível em: <<https://www.aocs.org/info/about-aocs-x2029>>. Acesso em: 15 out. 2019.
- ANDRADE, Ruth Sales Gama de et al. Determinação e distribuição de ácido ascórbico em três frutos tropicais. **Eclética Química**, [s.l.], v. 27, n. , p.393-401, 2002. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-46702002000200032>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-46702002000200032](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-46702002000200032)>. Acesso em: 20 out. 2019.
- ANGICANO, Marcone Macêdo Tôrres. **Qualidade do leite bovino no semiárido potiguar.** 2013. 43 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mestrado em Produção Animal, Universidade Federal Rural do Semiárido, Mossoró, 2013. Disponível em: <<https://ppgpa.ufersa.edu.br/wp-content/uploads/sites/60/2014/10/MARCONE.pdf>>. Acesso em: 12 set. 2019.
- AOAC INTERNATIONAL. **Sobre a AOAC international.** 2019. Disponível em: <<https://www.aoac.org/about-aoac-international/>>. Acesso em: 01 out. 2019.
- ARAÚJO, Edma M.; MENEZES, Hilary C.. Composição centesimal, lisina disponível e digestibilidade in vitro de proteínas de fórmulas para nutrição oral ou enteral. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, [s.l.], v. 25, n. 4, p.768-771, dez. 2005. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0101-20612005000400023>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0101-20612005000400023](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0101-20612005000400023)>. Acesso em: 10 set. 2019.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **ISO/IEC 17025:2017**: Requisitos gerais para a competência de laboratórios de ensaio e calibração. Rio de Janeiro: Abnt, 2017. 32 p.

BARROS NETO, Benício de; SCARMÍNIO, Ieda Spacino; BRUNS, Roy Edward. **Como fazer experimentos**. Campinas: Unicamp, 2007. 480 p.

BENTO, Ana Paula Lança; JORDÃO JÚNIOR, Alceu Afonso; GARCIA, Rosa Wanda Diez. **Manual do paciente em terapia nutricional enteral domiciliar**. [s.i]: Cgpan, 2012. 51 p.

BERGER, Mette M et al. Micronutrient Deficiencies in Medical and Surgical Inpatients. **Journal Of Clinical Medicine**, [s.l.], v. 8, n. 7, p.931-948, 28 jun. 2019. MDPI AG. <http://dx.doi.org/10.3390/jcm8070931>. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2077-0383/8/7/931>>. Acesso em: 08 set. 2019.

BERNAUD, Fernanda Sarmiento Rolla; RODRIGUES, Ticiania C.. Fibra alimentar: ingestão adequada e efeitos sobre a saúde do metabolismo. **Arquivos Brasileiros de Endocrinologia & Metabologia**, [s.l.], v. 57, n. 6, p.397-405, ago. 2013. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0004-27302013000600001>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0004-27302013000600001](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0004-27302013000600001)>. Acesso em: 18 set. 2019.

BETEMPS, Débora Leitzke et al. Espectroscopia do visível e infra-vermelho próximo para estimar sólidos solúveis e firmeza de polpa em função da época de colheita em pêssegos. **Semina: Ciências Agrárias**, [s.l.], v. 35, n. 3, p.1257-1266, 23 jun. 2014. Universidade Estadual de Londrina. <http://dx.doi.org/10.5433/1679-0359.2014v35n3p1257>. Disponível em: <<http://www.uel.br/revistas//uel/index.php/semagrarias/article/view/14839/0>>. Acesso em: 26 ago. 2019.

BETEMPS, Débora Leitzke; FACHINELLO, José Carlos; GALARÇA, Simone Padilha. Espectroscopia do visível e infravermelho próximo (VIS/NIR) na avaliação da qualidade de mangas Tommy Atkins. **Revista Brasileira de Fruticultura**, [s.l.], v. 33, n. 1, p.306-313, out. 2011. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-29452011000500038>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0100-29452011000500038&script=sci\\_abstract&tlng=es](http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0100-29452011000500038&script=sci_abstract&tlng=es)>. Acesso em: 20 out. 2019.

Bianca Ramos Marins (Org.). **Segurança alimentar no contexto da vigilância sanitária**: reflexões e práticas. Rio de Janeiro: Epsjv, 2014. 288 p. Disponível em: <[http://www.epsjv.fiocruz.br/sites/default/files/seguranca\\_alimentar\\_vigilancia\\_0.pdf](http://www.epsjv.fiocruz.br/sites/default/files/seguranca_alimentar_vigilancia_0.pdf)>. Acesso em: 06 set. 2019.

BOTELHO, Bruno Gonçalves. **Desenvolvimento e validação de métodos para análise direta de alimentos usando ferramentas quimiométricas, espectroscopia no infravermelho e imagens digitais**. 2014. 136 f. Tese (Doutorado em ciências) - Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2014. Disponível em: <[https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/SFSA-9TMH34/1/tese\\_bruno\\_g\\_botelho\\_2014.pdf](https://repositorio.ufmg.br/bitstream/1843/SFSA-9TMH34/1/tese_bruno_g_botelho_2014.pdf)> Acesso em: 20/09/2020

BRAGA, Jez Willian B.; POPPI, Ronei Jesus. Validação de modelos de calibração multivariada: uma aplicação na determinação de pureza polimórfica de carbamazepina por espectroscopia no infravermelho próximo. **Química Nova**, [s.l.], v. 27, n. 6, p.1004-1011, dez. 2004. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422004000600027>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-40422004000600027](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422004000600027)>. Acesso em: 14 out. 2019.

BRASIL. Resolução nº 160, de 6 de junho de 2017. Dispõe sobre os aditivos alimentares e coadjuvantes de tecnologia autorizados para uso em fórmulas para nutrição enteral e dá outras providências.. **Resolução da Diretoria Colegiada – Rdc Nº 160, de 6 de junho de 2017**. BRASÍLIA, DF, 6 jun. 2017. Disponível em: <[http://portal.anvisa.gov.br/documents/10181/3404463/RDC\\_160\\_2017\\_.pdf/ca04f3b1-fe31-4d61-82cd-a02cc4034dc0](http://portal.anvisa.gov.br/documents/10181/3404463/RDC_160_2017_.pdf/ca04f3b1-fe31-4d61-82cd-a02cc4034dc0)>. Acesso em: 25 ago. 2019.

BRASIL. Resolução nº 91, de 15 de maio de 2015. **Resolução da Diretoria Colegiada – Rdc Nº 21, de 13 de Maio de 2015**. Brasília, DF, Disponível em: <[http://www.lex.com.br/legis\\_26788427\\_RESOLUCAO\\_N\\_21\\_DE\\_13\\_DE\\_MAIO\\_DE\\_2015.aspx](http://www.lex.com.br/legis_26788427_RESOLUCAO_N_21_DE_13_DE_MAIO_DE_2015.aspx)>. Acesso em: 12 set. 2019.

BROWN, Britta; ROEHL, Kelly; BETZ, Melanie. Enteral Nutrition Formula Selection. **Nutrition In Clinical Practice**, [s.l.], v. 30, n. 1, p.72-85, 16 dez. 2014. Wiley. <http://dx.doi.org/10.1177/0884533614561791>. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1177/0884533614561791>>. Acesso em: 17 set. 2019.

BUENO, Aerton Ferreira. **Desenvolvimento de um analisador de processo por espectroscopia no próximo infravermelho (NIR) para previsão de propriedades de derivados de petróleo**. 2011. 294 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Departamento de Química Analítica, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2019. Disponível em: <[file:///C:/Users/User/Downloads/Bueno\\_AertonFerreira\\_D%20\(1\).pdf](file:///C:/Users/User/Downloads/Bueno_AertonFerreira_D%20(1).pdf)>. Acesso em: 17 out. 2019.

BUENO, Luciana. Efeito do triglicerídeo de cadeia média, fibra e cálcio na disponibilidade de ferro, magnésio e zinco em uma formulação de alimentação enteral com otimização conjunta para os três minerais. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, [s.l.], v. 28, p.125-134, dez. 2008. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0101-20612008000500020>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0101-20612008000500020](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0101-20612008000500020)>. Acesso em: 16 set. 2019.

CARAMÊS, Elem Tamirys dos Santos. **Avaliação da qualidade e potencial bioativo de bebidas de fruta : aplicação da espectroscopia no infravermelho e quimiometria**. 2016. 69 f. Dissertação (Mestrado em Ciência de Alimentos) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2016. Disponível em: <[http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/325011/1/Carames\\_ElemTamirysDosSantos\\_M.pdf](http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/325011/1/Carames_ElemTamirysDosSantos_M.pdf)>. Acesso em: 20/09/2020

CARDOSO, Maria Gabriela Castro e; PRATES, Sarah Morais Senna; ANASTÁCIO, Lucilene Rezende. Fórmulas para nutrição enteral padrão e modificada disponíveis no Brasil: Levantamento e classificação. **Braspen**, [s.l.], v. 4, n. 33, p.402-417, dez. 2018. Disponível em: <<http://arquivos.braspen.org/journal/out-dez-2018/08formulas.pdf>>. Acesso em: 10 set. 2019.

CARREIRA, Raquel Linhares et al. PERFIL PEPTÍDICO DE HIDROLISADOS PROTEICOS DA FARINHA DE TRIGO. **Pesquisa Agropecuária Tropical**, [s.l.], v. 41, n. 4, p.481-489, 17 out. 2011. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.5216/pat.v41i4.10754>. Disponível em: <https://www.revistas.ufg.br/pat/article/view/10754>>. Acesso em: 12 set. 2019.

CARVALHO, ANA PAULA PERILLO FERREIRA. **Protocolo de terapia nutricional enteral e parenteral da comissão de suporte nutricional**. Goiânia: Ufg, 2014. 162 p. Disponível em: <http://www2.ebserh.gov.br/documents/222842/1033900/Manual+de+Nutricao+Parenteral+e+Enteral.pdf/98898f78-942a-4e5e-93be-4e13c63ee8cd>>. Acesso em: 09 set. 2019.

CARVALHO, Lívia Cirino de. **Uso da espectroscopia do infravermelho próximo (nir) como método não destrutivo para a discriminação de aguardentes de cana-de-açúcar produzidas no estado de São Paulo e Minas Gerais, e predição do teor de etanol**. 2015. 128 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós-graduação em Alimentos e Nutrição, Faculdade de Ciências Farmacêuticas, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Araraquara, 2015. Disponível em: <https://repositorio.unesp.br/bitstream/handle/11449/132127/000851651.pdf;jsessionid=75162BEFC1E1C36B3E97DF5C72E13AED?sequence=1>>. Acesso em: 15 nov. 2019.

CENICCOLA, Guilherme Duprat. **Validação de conteúdo de instrumento para avaliar os procedimentos da nutrição enteral em ambiente hospitalar**. 2013. 82 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós-graduação em Nutrição, Departamento de Nutrição, Universidade de Brasília, Brasília, 2013. Disponível em: [https://repositorio.unb.br/bitstream/10482/14913/3/2013\\_GuilhermeDupratCeniccola.pdf](https://repositorio.unb.br/bitstream/10482/14913/3/2013_GuilhermeDupratCeniccola.pdf)>. Acesso em: 30 set. 2019.

CEREALS & GRAINS ASSOCIATION. **About Cereals & Grains Association**. 2019. Disponível em: <https://www.cerealsgrains.org/about/Pages/default.aspx>>. Acesso em: 01 out. 2019.

CRUZ, Josilaine B. Fernandes; SOARES, Henrique Freire. UMA REVISÃO SOBRE O ZINCO. **Ensaio e Ciência Ciências Biológicas, Agrárias e da Saúde**, São Paulo, v. 15, n. 1, p.207-222, jul. 2011. Disponível em: <https://www.redalyc.org/pdf/260/26019329014.pdf>>. Acesso em: 20 set. 2019.

CUNHA, Selma Freire de Carvalho da; FERREIRA, Carolina Rodrigues; BRAGA, Camila Bitu Moreno. Fórmulas enterais no mercado brasileiro: classificação e descrição da composição nutricional. **International Journal Of Nutrology**, Catanduva, v. 4, n. 3, p.71-86, maio 2011.

DALLAGNOL, Felipe Scheibe et al. ESTIMATIVA DOS TEORES DE CARBONO POR ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO EM *Merostachys skvortzovii* (BAMBUSOIDAE). **Floresta**, [s.l.], v. 43, n. 2, p.281-288, 2 jul. 2013. Universidade Federal do Parana. <http://dx.doi.org/10.5380/ufpr.v43i2.26729>. Disponível em: <https://revistas.ufpr.br/floresta/article/view/26729>>. Acesso em: 01 dez. 2019

DUARTE, Agnis. Nutritional risk in hospitalized patients during hospital stay. **Nutrición Clínica y Dietética Hospitalaria**, [s.l.], n. 3, p.146-152, 2016. SEDCA.

<http://dx.doi.org/10.12873/363duarte>. Disponível em:  
<<https://revista.nutricion.org/PDF/duarte.pdf>>. Acesso em: 08 set. 2019.

FERNANDES, César Rodrigues. **Espectroscopias raman e infravermelho em cristais de aminoácidos: os casos da L-valina e do ácido L-glutâmico**. 2015. 294 f. Tese (Doutorado) - Curso de Programa de Pós-graduação em Física, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2015. Disponível em:  
<[http://www.repositorio.ufc.br/bitstream/riufc/11279/1/2015\\_tese\\_crfernandes.pdf](http://www.repositorio.ufc.br/bitstream/riufc/11279/1/2015_tese_crfernandes.pdf)>. Acesso em: 10 out. 2019.

FERRARINI, Hair. **Determinação de teores nutricionais do milho por espectroscopia no infravermelho e calibração multivariada**. 2004. 125 f. Dissertação (Mestrado em Química) - Universidade Federal do Paraná, Curitiba. Disponível em: <  
<https://acervodigital.ufpr.br/bitstream/handle/1884/34780/R%20-%20D%20-%20HAIR%20FERRARINI.pdf?sequence=1&isAllowed=y>> Acesso em: 20 set. 2020.

FERRARINI, Hair. **Determinação de teores nutricionais do milho por espectroscopia no infravermelho e calibração multivariada**. 2004. 125 f. Dissertação (Doutorado) - Curso de Química,, Centro de Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2004. Disponível em: <<https://acervodigital.ufpr.br/handle/1884/34780>>. Acesso em: 26 ago. 2019.

FERREIRA, Márcia Miguel Castro. **Quimiometria**. Campinas: Slide, 2016. 44 slides, color. Disponível em: <<http://lqta.iqm.unicamp.br/portugues/downloads/Introducao.pdf>>. Acesso em: 10 out. 2019.

FERREIRA, Márcia Miguel Castro. **Quimiometria: conceitos, métodos e aplicações**. Campinas: Unicamp, 2015. 496 p.

GERAIX, Juliana et al. Glutamina e sistema imune. **Revista brasileira de nutrição clínica funcional**, [s.l.], v. 14, n. 61, p.44-52, maio 2014. Disponível em:  
<<https://www.vponline.com.br/portal/noticia/pdf/fc557cfcadd25b8630acc52bbc753cc9.pdf>>. Acesso em: 26 set. 2019.

GRIS, Diego José et al. Pré-processamento dos dados de espectroscopia na região do Vis-NIR melhoram a predição do carbono orgânico do solo? In: XVIII SIMPÓSIO BRASILEIRO DE SENSORIAMENTO REMOTO -SBSR, 18., 2017, Santos. **Anais...** . São José dos Campos: Inpe, 2017. p. 6304 - 6311. Disponível em:  
<<http://marte2.sid.inpe.br/col/sid.inpe.br/marte2/2017/10.27.15.44.42/doc/59674.pdf>>. Acesso em: 15 nov. 2019.

GUARNER, Francisco et al. World Gastroenterology Organisation (Ed.). **Probióticos e prebióticos**. [s.i], 2017. 35 p. Disponível em:  
<<https://www.worldgastroenterology.org/UserFiles/file/guidelines/probiotics-and-prebiotics-portuguese-2017.pdf>>. Acesso em: 21 set. 2019.

Instituto Adolfo Lutz (Org.). **Métodos físico-químicos para análise de alimentos**. 4. ed. São Paulo, 2008. 1020 p. Disponível em:  
<[http://www.ial.sp.gov.br/resources/editorinplace/ial/2016\\_3\\_19/analisedealimentosial\\_2008.pdf](http://www.ial.sp.gov.br/resources/editorinplace/ial/2016_3_19/analisedealimentosial_2008.pdf)>. Acesso em: 02 out. 2019.

IZABELLE SILVA DE ARAUJO (Petrolina). Hospital de Ensino Dr. Washington Antonio de Barros (Org.). **Guia multiprofissional de orientação para pacientes em uso de nutrição enteral domiciliar**. Petrolina: Hospital de Ensino Dr. Washington Antonio de Barros, 2017. 25 p. Disponível em: <<http://www2.ebserh.gov.br/documents/220938/2471769/Guia+-+Nutri%C3%A7%C3%A3o+Enteral+%28%29.pdf/4b7a7f0c-4547-4a2d-b1de-00601bf9245e>>. Acesso em: 21 ago. 2019.

JAMRÓGIEWICZ, Marzena. Application of the near-infrared spectroscopy in the pharmaceutical technology. **Journal Of Pharmaceutical And Biomedical Analysis**, [s.l.], v. 66, n. 25, p.1-10, mar. 2015. Disponível em: <[https://www.researchgate.net/publication/223982056\\_Application\\_of\\_the\\_near-infrared\\_spectroscopy\\_in\\_the\\_pharmaceutical\\_technology](https://www.researchgate.net/publication/223982056_Application_of_the_near-infrared_spectroscopy_in_the_pharmaceutical_technology)>. Acesso em: 17 out. 2019.

JANSEN, Ann Kristine et al. Avaliação química de macronutrientes e minerais de dietas enterais artesanais utilizadas em terapia nutricional domiciliar no sistema único de saúde. **Demetra: Alimentação, Nutrição & Saúde**, [s.l.], v. 9, p.249-267, 17 jul. 2014. Universidade de Estado do Rio de Janeiro. <http://dx.doi.org/10.12957/demetra.2014.10424>. Disponível em: <<https://www.e-publicacoes.uerj.br/index.php/demetra/article/view/10424>>. Acesso em: 26 set. 2019.

JANSEN, Ann Kristine et al. Development of enteral homemade diets for elderly persons receiving home care and analysis of macro and micronutrient composition. **Revista Brasileira de Geriatria e Gerontologia**, [s.l.], v. 20, n. 3, p.387-397, maio 2017. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/1981-22562017020.160168>.

KUTZ, Alexandre et al. Padronização de dietas enterais artesanais para uso domiciliar na Atenção Primária. **Revista Família, Ciclos de Vida e Saúde no Contexto Social**, [s.l.], v. 1, n. 1, p.298-205, jun. 2018. Disponível em: <<https://www.redalyc.org/articulo.oa?>>. Acesso em: 10 set. 2019.

LIMKETKAI, Berkeley N. et al. Classifying Enteral Nutrition: Tailored for Clinical Practice. **Current Gastroenterology Reports**, [s.l.], v. 21, n. 9, p.21-47, 31 jul. 2019. Springer Science and Business Media LLC. <http://dx.doi.org/10.1007/s11894-019-0708-3>. Disponível em: <<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11894-019-0708-3#citeas>>. Acesso em: 11 set. 2019.

LOBATO, Kleidson Brito de Sousa. **Espectroscopia no infravermelho em leite uht e polpa de açaí liofilizada: parâmetros de qualidade, detecção e identificação de adulterantes**. 2018. 157 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia de Alimentos, Engenharia de Alimentos, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2018. Disponível em: <[http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/333865/1/Lobato\\_KleidsonBritoDeSousa\\_D.pdf](http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/333865/1/Lobato_KleidsonBritoDeSousa_D.pdf)>. Acesso em: 25 nov. 2019.

MAGALHÃES, Diogo Faria. **Aplicações da Espectroscopia de Infravermelho Próximo na Monitorização de Processos Farmacêuticos**. 2014. 127 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mestrado em Química Tecnológica, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade de Lisboa, Lisboa - Por, 2014. Disponível em: <[https://repositorio.ul.pt/bitstream/10451/15541/1/ulfc111897\\_tm\\_Diogo\\_Magalh%C3%A3e\\_s.pdf](https://repositorio.ul.pt/bitstream/10451/15541/1/ulfc111897_tm_Diogo_Magalh%C3%A3e_s.pdf)>. Acesso em: 10 out. 2019.



MARCHESE, Natalia Regina. **Espectroscopia de infravermelho próximo e metodologia de mínimos quadrados parciais para análise de soja (Glycine Max. (L) Merrill) inativada termicamente**. 2017. 77 f. Dissertação. (Mestrado em Tecnologia de Alimentos) - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Londrina, 2017

MARTENS, Harald; NIELSEN, Jesper Pram; ENGELSEN, Søren Balling. Light Scattering and Light Absorbance Separated by Extended Multiplicative Signal Correction. Application to Near-Infrared Transmission Analysis of Powder Mixtures. **Analytical Chemistry**, [s.l.], v. 75, n. 3, p.394-404, fev. 2003. American Chemical Society (ACS).  
<http://dx.doi.org/10.1021/ac020194w>. Disponível em:  
<<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ac020194w>>. Acesso em: 11 out. 2019.

MARTINEZ, Sílvia. A nutrição e a alimentação como pilares dos programas de promoção da saúde e qualidade de vida nas organizações. **O Mundo da Saúde**, [s.l.], v. 37, n. 2, p.201-207, 30 jun. 2013. Centro Universitario Sao Camilo - Sao Paulo.  
<http://dx.doi.org/10.15343/0104-7809.2013372201207>. Disponível em:  
<[https://www.researchgate.net/publication/317376424\\_A\\_nutricao\\_e\\_a\\_alimentacao\\_como\\_pilares\\_dos\\_programas\\_de\\_promocao\\_da\\_saude\\_e\\_qualidade\\_de\\_vida\\_nas\\_organizacoes](https://www.researchgate.net/publication/317376424_A_nutricao_e_a_alimentacao_como_pilares_dos_programas_de_promocao_da_saude_e_qualidade_de_vida_nas_organizacoes)>. Acesso em: 06 set. 2019.

METROHM. NIR Spectroscopy. **A guide to near-infrared spectroscopic analysis of industrial manufacturing processes**. Herisau, Suíça: Metrohm, 2013.

MILAGRES, Flaviana Reis. **Avaliação das madeiras de híbridos de Eucalyptus globulus com E. grandis e E. urophylla para produção de celulose utilizando a espectroscopia NIR**. 2009. 141 f. Tese (Doutorado) - Curso de Ciência Florestal, Universidade Federal de Viçosa, Viçosa - Mg, 2009. Disponível em:  
<<https://www.locus.ufv.br/bitstream/handle/123456789/2994/texto%20completo.pdf?sequence=1&isAllowed=y>>. Acesso em: 16 out. 2019.

MONTEIRO, Gonçalo Murteira Machado. **Análise de Revestimentos Orgânicos por Espectroscopia de Infravermelho**. 2007. 113 f. Dissertação (Doutorado) - Curso de Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, Lisboa - Por, 2007. Disponível em:  
<<https://fenix.tecnico.ulisboa.pt/downloadFile/395137461902/Tese%20Final%20de%20Mestrado.pdf>>. Acesso em: 18 out. 2019.

MORGANO, Marcelo A. et al. Determinação de açúcar total em café cru por espectroscopia no infravermelho próximo e regressão por mínimos quadrados parciais. **Química Nova**, [s.l.], v. 30, n. 2, p.346-350, abr. 2007. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422007000200020>. Disponível em: <Determinação de açúcar total em café cru por espectroscopia no infravermelho próximo e regressão por mínimos quadrados parciais>. Acesso em: 20 out. 2019.

MORGANO, Marcelo A. et al. Determinação de proteína em café cru por espectroscopia NIR e regressão PLS. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, [s.l.], v. 25, n. 1, p.25-31, mar. 2005. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0101-20612005000100005>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_abstract&pid=S0101-20612005000100005&lng=en&nrm=iso&tlng=pt](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_abstract&pid=S0101-20612005000100005&lng=en&nrm=iso&tlng=pt)>. Acesso em: 20 nov. 2019.

MORGANO, Marcelo Antônio. **Aplicação de métodos quimométricos em análise de alimentos**. 2005. 127 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Instituto de Química,

Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005. Disponível em: <[http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/248538/1/Morgano\\_MarceloAntonio\\_D.pdf](http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/248538/1/Morgano_MarceloAntonio_D.pdf)>. Acesso em: 13 out. 2019.

NAVES, Larissa Kozloff; TRONCHIN, Daisy Maria Rizatto. Nutrição enteral domiciliar: perfil dos usuários e cuidadores e os incidentes relacionados às sondas enterais. **Revista Gaúcha de Enfermagem**, [s.l.], v. 39, p.1-8, 3 set. 2018. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/1983-1447.2018.2017-0175>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1983-14472018000100437&lng=pt&tlng=pt](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1983-14472018000100437&lng=pt&tlng=pt)>. Acesso em: 09 set. 2019.

NORMAN, Kristina et al. Prognostic impact of disease-related malnutrition. **Clinical Nutrition**, [s.l.], v. 27, n. 1, p.5-15, fev. 2008. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.clnu.2007.10.007>. Disponível em: <[https://www.clinicalnutritionjournal.com/article/S0261-5614\(07\)00168-9/pdf](https://www.clinicalnutritionjournal.com/article/S0261-5614(07)00168-9/pdf)>. Acesso em: 13 set. 2019.

NOVANUTRI. **Diferenças entre a dieta enteral caseira e industrializada**. 2016. Disponível em: <<https://www.nutrii.com.br/blog/diferencas-entre-dieta-enteral-caseira-e-industrializada/>>. Acesso em: 10 set. 2019

NUTERAL. **Reabilit Peptiflex**. 2012. Disponível em: <<http://nutranon.com/produtos/alta-hospitalar/reabilit-peptiflex>>. Acesso em: 01 nov. 2019.

OLIVEIRA, Karla de Jesus Fernandes de; KOURY, Josely Correa; DONANGELO, Carmen Marino. Micronutrientes e capacidade antioxidante em adolescentes sedentários e corredores. **Revista de Nutrição**, [s.l.], v. 20, n. 2, p.171-179, abr. 2007. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s1415-52732007000200006>. Disponível em: [http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1415-52732007000200006&lng=pt&tlng=pt](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1415-52732007000200006&lng=pt&tlng=pt). Acesso em: 16 dez. 2019.

OLIVEIRA, R.r. et al. Determinação do caseinomacropéptido em leite UAT por espectroscopia no infravermelho próximo e regressão por mínimos quadrados parciais. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, [s.l.], v. 70, n. 3, p.946-956, jun. 2018. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/1678-4162-9778>.

OLIVEIRA, Raphael Rocha de. **Modelos de calibração multivariada por nirs para a predição de características de qualidade da carne bovina**. 2014. 132 f. Tese (Doutorado) - Curso de Programa de pós-graduação em ciência Animal, Escola de veterinária e Zootecnia, Universidade Federal de Goiás, Goiânia, 2014. Disponível em: <[https://ppgca.evz.ufg.br/up/67/o/Tese2014\\_Raphael\\_Rocha.pdf](https://ppgca.evz.ufg.br/up/67/o/Tese2014_Raphael_Rocha.pdf)>. Acesso em: 14 out. 2019.

PASQUINI, Celio. Near Infrared Spectroscopy: fundamentals, practical aspects and analytical applications. **Journal Of The Brazilian Chemical Society**, [s.l.], v. 14, n. 2, p.198-219, abr. 2003. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0103-50532003000200006>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0103-50532003000200006](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-50532003000200006)>. Acesso em: 05 out. 2019.

PASSOS, Elisangela de Andrade. **Métodos Instrumentais de Análise**. São Cristóvão: Cesad, 2011. 16 p. Disponível em:

<[http://www.cesadufs.com.br/ORBI/public/uploadCatalogo/18024916022012Metodos\\_Instrumentais\\_de\\_Analise\\_-\\_Aula\\_01.pdf](http://www.cesadufs.com.br/ORBI/public/uploadCatalogo/18024916022012Metodos_Instrumentais_de_Analise_-_Aula_01.pdf)>. Acesso em: 03 out. 2019.

PAULA, E.f.e. et al. Determinação da Qualidade da Carne com Uso da Espectroscopia de Reflectância. **Scientia Agraria Paranaensis**, [s.l.], v. 12, n. 4, p.301-307, 30 dez. 2013. Revista Scientia Agraria Paranaensis (SAP). <http://dx.doi.org/10.18188/1983-1471/sap.v12n4p301-307>. Disponível em: <[https://www.researchgate.net/publication/264548803\\_Determinacao\\_da\\_Qualidade\\_da\\_Carne\\_com\\_Uso\\_da\\_Espectroscopia\\_de\\_Reflectancia](https://www.researchgate.net/publication/264548803_Determinacao_da_Qualidade_da_Carne_com_Uso_da_Espectroscopia_de_Reflectancia)>. Acesso em: 26 ago. 2019.

PAULA, Priscila Barsanti de; RAMOS, Eneida Gomes da Cunha; SANTOS, Ana Claudia. Fibra alimentar: sua importância para a saúde. **Saúde Alimentar**, [s.l.], v. 2, n. 4, p.212-213, ago. 2010. Disponível em: <[http://apps.einstein.br/revista/arquivos/PDF/1911-EC\\_V8\\_N4\\_p212-3.pdf](http://apps.einstein.br/revista/arquivos/PDF/1911-EC_V8_N4_p212-3.pdf)>. Acesso em: 16 set. 2019.

PAVIA, Donald et al. **Introdução À Espectroscopia**. São Paulo: Cengage Learning, 2015. 733 p.

PINHEIRO, Denise Maria; PORTO, Karla Rejane de Andrade; MENEZES, Maria Emília da Silva. **A Química dos Alimentos**: carboidratos, lipídeos, proteínas, vitaminas e minerais. Maceió: Edufal, 2005. 52 p. Disponível em: <[http://www.ufal.edu.br/usinaciencia/multimidia/livros-digitais-cadernos-tematicos/A\\_Quimica\\_dos\\_Alimentos.pdf](http://www.ufal.edu.br/usinaciencia/multimidia/livros-digitais-cadernos-tematicos/A_Quimica_dos_Alimentos.pdf)>. Acesso em: 13 set. 2019.

PINOTTI, Henrique Walter; KLAJNER, Sidney. **Nutrição enteral em cirurgia**. [s.i]: Fundo Editorial Byk, 1997. 223 p.

POMIN, Vitor Hugo; MOURÃO, Paulo Antônio de Souza. **Carboidratos**. 39. ed. Rio de Janeiro: Ciência Hoje, 2006. Disponível em: <<http://cienciahoje.org.br/artigo/carboidratos-de-adocantes-a-medicamentos/>>. Acesso em: 17 set. 2020.

PREVIDELLI, Agatha Nogueira; GOULART, Rita Maria Monteiro; AQUINO, Rita de Cássia de. Balanço de macronutrientes na dieta de idosos brasileiros: análises da Pesquisa Nacional de Alimentação 2008-2009. **Revista Brasileira de Epidemiologia**, [s.l.], v. 20, n. 1, p.70-80, mar. 2017. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/1980-5497201700010006>. Disponível em: <[scielo.br/scielo.php?pid=S1415-790X2017000100070&script=sci\\_abstract&tlng=pt](http://scielo.br/scielo.php?pid=S1415-790X2017000100070&script=sci_abstract&tlng=pt)>. Acesso em: 18 set. 2019.

QUIROGA, Ana Lúcia Barbosa. **Proteínas hidrolisadas de trigo na nutrição esportiva**. 2017. Disponível em: <<https://revista-fi.com.br/artigos/ingredientes-funcionais/proteinas-hidrolisadas-de-trigo-na-nutricao-esportiva>>. Acesso em: 13 set. 2019.

RAQUEL BUSSOLOTI (São Paulo). A.c.camargo Cancer Center. **Orientações para Pacientes Nutrição Enteral**. São Paulo: A.c.camargo Cancer Center, 2018. 16 slides, color, 20 x 16. Disponível em: <<https://www.accamargo.org.br/sites/default/files/2018-07/Manual-Nutricao-Enteral.pdf>>. Acesso em: 21 ago. 2019.

RIBEIRO, Livia Paulia Dias et al. Non-Destructive Determination of Quality Traits of Cashew Apples (*Anacardium Occidentale*, L.) Using a Portable near Infrared Spectrophotometer. **Journal Of Near Infrared Spectroscopy**, [s.l.], v. 24, n. 1, p.77-82, jan.

2016. SAGE Publications. <http://dx.doi.org/10.1255/jnirs.1197>. Disponível em: <<https://journals.sagepub.com/doi/10.1255/jnirs.1197>>. Acesso em: 26 ago. 2019.

SAMAMAD, Nancy Taéra Ibraimo et al. Near infrared spectroscopy, a suitable tool for fast phenotyping – The case of cashew genetic improvement. **Scientia Horticulturae**, [s.l.], v. 238, p.363-368, ago. 2018. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.scienta.2018.05.007>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0304423818303339?via%3Dihub>>. Acesso em: 20 out. 2019.

SANTOS, Rd et al. I Diretriz sobre o consumo de Gorduras e Saúde Cardiovascular. **Arquivos Brasileiros de Cardiologia**, [s.l.], v. 100, n. 1, p.01-40, 2013. Sociedade Brasileira de Cardiologia. <http://dx.doi.org/10.5935/abc.2013s003>. Disponível em: <[http://publicacoes.cardiol.br/consenso/2013/Diretriz\\_Gorduras.pdf](http://publicacoes.cardiol.br/consenso/2013/Diretriz_Gorduras.pdf)>. Acesso em: 16 set. 2019.

SANTOS, Ricardo Balleirini dos; GOMIDE, José Lívio; SOUSA, Leonardo Chagas de. Predição de qualidade da madeira e da polpa celulósica por técnica de espectroscopia de infravermelho próximo (NIRS). **Revista Árvore**, [s.l.], v. 33, n. 4, p.759-767, ago. 2009. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-67622009000400019>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-67622009000400019](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-67622009000400019)>. Acesso em: 27 nov. 2019.

SAUER, Elenise. **Desenvolvimento de metodologias multivariadas para análise de queijos por espectroscopia Drift**. 2007. 157 f. Tese (Doutorado) - Curso de Pós-graduação em Química, Ciências Exatas, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2007. Disponível em: <<https://acervodigital.ufpr.br/bitstream/handle/1884/24903/TESE%20revisada3-7abb.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 11 out. 2019.

SOARES, Felipe. **Abordagens de seleção de variáveis para classificação e regressão em química analítica**. 2017. 83 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia de Produção, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017. Disponível em: <<https://www.lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/163421/001022289.pdf?sequence=1>>. Acesso em: 15 dez. 2019.

SOCIEDADE BRASILEIRA DE ALIMENTAÇÃO E NUTRIÇÃO - SEBAN. Sociedade Brasileira de Alimentação e Nutrição. **O benefício do consumo da proteína isolada de soja nas diferentes fases da vida**. [s.i]: Seban, 2016. 32 p.

SOTELO, Francisco Falla. **Aplicação da espectroscopia de infravermelho Próximo na caracterização de petróleo: Simulação de uma unidade de destilação atmosférica**. 2005. 154 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Química, Escola Técnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005. Disponível em: <[https://teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3137/tde-13032007-002338/publico/Tese\\_Francisco\\_Falla\\_Sotelo\\_edrev.pdf](https://teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3137/tde-13032007-002338/publico/Tese_Francisco_Falla_Sotelo_edrev.pdf)>. Acesso em: 15 out. 2016.

SOUSA, Leonardo Chagas de et al. Desenvolvimento de modelos de calibração NIRS para minimização das análises de madeiras de Eucalyptus spp. **Ciência Florestal**, [s.l.], v. 21, n. 3, p.591-599, 30 set. 2011. Universidad Federal de Santa Maria. <http://dx.doi.org/10.5902/198050983817>. Disponível em:

<[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S1980-50982011000300591](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1980-50982011000300591)>. Acesso em: 17 out. 2019

SOUZA, Diego M.; MADARI, Beata E.; GUIMARÃES, Freddy F.. Aplicação de técnicas multivariadas e inteligência artificial na análise de espectros de infravermelho para determinação de matéria orgânica em amostras de solos. **Química Nova**, [s.l.], v. 35, n. 9, p.1738-1745, 2012. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0100-40422012000900007>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0100-40422012000900007](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422012000900007)>. Acesso em: 17 nov. 2019.

TIBOLA, Casiane Salete et al. **Espectroscopia no Infravermelho Próximo para Avaliar Indicadores de Qualidade Tecnológica e Contaminantes em Grãos**. Brasília: Embrapa, 2018. 200 p. Disponível em: <<https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1106595/1/ID445392018LVespectroscopia.pdf>>. Acesso em: 05 out. 2020.

TIBOLA, Casiane Salete et al. **Espectroscopia no Infravermelho próximo para avaliar indicadores de qualidade tecnológica e contaminantes em grãos**. Brasília: Embrapa, 2018. 200 p. Disponível em: <<https://www.alice.cnptia.embrapa.br/alice/bitstream/doc/1106595/1/ID445392018LVespectroscopia.pdf>>. Acesso em: 25 nov. 2019.

TOZETTO, Adriana; DEMIATE, Ivo Mottin; NAGATA, Noemi. Análise exploratória de adoçantes de mesa via espectroscopia no infravermelho (FTIR) e análise por componentes principais (ACP). **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, [s.l.], v. 27, n. 4, p.723-728, dez. 2007. FapUNIFESP (SciELO). <http://dx.doi.org/10.1590/s0101-20612007000400008>. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0101-20612007000400008](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0101-20612007000400008)>. Acesso em: 20 out. 2019.

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS (UNICAMP). Secretária Estadual de Educação de São Paulo. **Nutrição Enteral domiciliar: como preparar e administrar a dieta por sonda**. 2. ed. Campinas, 2011. 33 p. Disponível em: <[https://www.hc.unicamp.br/servicos/emtn/Manual\\_paciente.pdf](https://www.hc.unicamp.br/servicos/emtn/Manual_paciente.pdf)>. Acesso em: 23 ago. 2019.

URBANO-CUADRADO, Manuel et al. Espectroscopia de refletância no infravermelho próximo e análise multivariada em enologia: determinação ou triagem de quinze parâmetros em diferentes tipos de vinhos. **Analytica Chimica Acta**, [s.l.], p.81-88, nov. 2004. Disponível em: <[https://www.researchgate.net/publication/222516109\\_Near\\_infrared\\_reflectance\\_spectroscopy\\_and\\_multivariate\\_analysis\\_in\\_enology\\_Determination\\_or\\_screening\\_of\\_fifteen\\_parameters\\_in\\_different\\_types\\_of\\_wines](https://www.researchgate.net/publication/222516109_Near_infrared_reflectance_spectroscopy_and_multivariate_analysis_in_enology_Determination_or_screening_of_fifteen_parameters_in_different_types_of_wines)>. Acesso em: 05 dez. 2019.

VERONESE, Nicola et al. Enteral tube feeding and mortality in hospitalized older patients: A multicenter longitudinal study. **Clinical Nutrition**, [s.l.], p.1-5, jul. 2019. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.clnu.2019.07.011>. Disponível em: <[https://www.clinicalnutritionjournal.com/article/S0261-5614\(19\)30293-6/fulltext](https://www.clinicalnutritionjournal.com/article/S0261-5614(19)30293-6/fulltext)>. Acesso em: 13 set. 2019.f

WORKMAN JUNIOR, J. WEYER, L. **Practical Guide and spectral Atlas for Interpretive Near- Infrared Spectroscopy**. Second Edition. 2012.

ZENI, Diego. **Determinação de cloridrato de propranolol em medicamentos por espectroscopia sem infravermelho com calibração multivariada (PLS)**. 2005. 64 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Mestrado em Química, Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2005. Disponível em: <<https://repositorio.ufsm.br/handle/1/10478?show=full>>. Acesso em: 16 out. 2019.

## APÊNDICE A – PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL (DE MISTURAS)

Ensaios	Caseinato de Cálcio	Proteína Iso. Soja	Proteína Hidro. do trigo	Óleo de Canola	Óleo de Girassol	Ômega 3	L-Arginina	L-Carnitina	L-Taurina	Maltodextrina	Neofiber	Aroma de Baunilha	Acessulfane K	Vitaminas
1	8,0386	6,8808	10,8959	20,6200	2,5002	1,1250	1,4530	0,0290	0,0330	34,9155	6,9995	2,9983	0,0205	3,5476
2	4,7746	4,1213	6,5044	12,3348	1,5015	0,6622	1,4700	0,0260	0,0296	58,2111	4,1941	3,0114	0,0230	3,1741
3	8,0203	6,8798	10,9348	20,6057	2,4933	1,1020	2,4966	0,0496	0,0505	34,8973	7,0082	1,6985	0,0214	3,7846
4	4,7545	4,1684	6,5089	12,3470	1,4937	0,6791	2,4934	0,0504	0,0544	58,1912	4,2209	1,6998	0,0238	3,3612
5	8,0566	6,8701	10,8890	20,5956	2,4866	1,1075	1,4843	0,0282	0,0219	34,9008	7,0830	3,0039	0,0126	3,5457
6	4,7651	4,1667	6,4913	12,3383	1,5035	0,6866	1,4550	0,0258	0,0277	58,2075	4,2005	3,0230	0,0117	3,1659
7	8,0316	6,8762	10,8946	20,4871	2,4984	1,1080	2,4974	0,0523	0,0512	39,8956	6,9982	1,6969	0,0118	3,3602
8	4,7584	4,1675	6,5069	12,3693	1,5061	0,6684	2,4940	0,0561	0,0479	58,1946	4,2402	1,7090	0,0126	3,3729
9	8,0136	6,8996	10,8970	19,0453	2,3163	1,0218	2,4959	0,0495	0,0512	34,9085	6,9940	3,0100	0,0216	4,2990
10	8,0101	6,8784	10,8893	12,3380	1,4924	0,6682	2,4944	0,0506	0,0560	42,7687	7,0560	3,0061	0,0213	4,2920
11	7,4444	6,4097	10,1120	20,6048	2,4952	1,1087	2,5037	0,0707	0,0546	34,9078	7,0429	3,0093	0,0209	4,2988
12	4,7898	4,1235	6,5050	20,6082	2,4941	1,1122	2,5009	0,0419	0,0526	43,4743	7,0152	3,0176	0,0220	4,3047
13	4,7893	4,1148	6,5090	12,3409	1,4980	0,6535	2,4954	0,0438	0,0548	53,1780	7,0153	3,0252	0,0215	4,3023
14	8,0279	6,8818	10,8906	19,9923	2,4238	1,0666	1,4426	0,0272	0,0219	43,9177	7,0328	3,0179	0,0208	4,3018
15	8,0112	6,8788	10,5910	12,3424	1,4940	0,6641	1,4415	0,0222	0,0223	43,8816	7,0162	2,9993	0,0206	4,3135
16	7,7958	6,6932	6,5015	20,6046	2,4928	1,1024	1,4466	0,0240	0,0221	34,9034	6,9972	3,0033	0,0218	4,3100
17	4,7863	4,1155	6,5249	20,6037	2,4967	1,1045	1,4427	0,0311	0,0289	44,5850	6,9969	3,0209	0,0250	4,2945
18	4,7850	4,1190	10,9058	12,3400	1,4952	0,6281	1,4443	0,0251	0,0284	54,2772	7,0249	2,9976	0,0224	4,2944
19	8,0616	6,8823	10,9058	20,6057	2,4940	1,0000	2,5000	0,0494	0,0509	34,9081	5,1758	3,0455	0,0362	4,3045
20	8,0083	6,8834	10,8934	20,6049	2,4960	1,1008	2,4958	0,0470	0,0492	35,8784	4,2049	3,0053	0,0263	4,3002
21	8,0268	6,8888	10,8993	12,3491	1,4855	0,6675	2,4986	0,0520	0,0537	45,5728	4,1936	2,9979	0,0228	4,2926
22	4,7931	4,1255	6,5204	20,5926	2,4925	1,1766	2,5000	0,0445	0,0499	46,2710	4,2090	2,9970	0,0286	4,3066
23	4,7803	4,1469	6,4959	12,3585	1,4973	0,6211	2,5050	0,0500	0,0487	55,9710	4,2028	3,0068	0,0240	4,3431
24	8,0287	6,8960	10,8928	20,6000	2,4975	1,1199	1,4460	0,0303	0,0259	34,9024	6,2677	2,9965	0,0258	4,3093
25	8,0166	6,8877	10,8990	20,6014	2,5020	1,1170	1,4375	0,0282	0,0265	36,9694	4,2002	3,0117	0,0235	4,2997
26	8,0151	6,8924	10,8935	12,3442	1,4965	0,6844	1,4414	0,0281	0,0283	46,6787	4,2134	2,9989	0,0260	4,2994
27	4,7818	4,1137	6,5005	20,6001	2,5015	1,0973	1,4483	0,0297	0,0273	47,3813	4,2048	3,0076	0,0240	4,3060
28	4,7855	4,1181	6,5010	12,3442	1,4908	0,6546	1,4420	0,0276	0,0208	57,0778	4,2098	2,9990	0,0219	4,3035
29	8,0089	6,8727	10,8905	20,1582	2,4934	1,0249	2,5068	0,0507	0,0528	34,9228	6,9955	1,7986	0,0214	4,2996
30	8,0159	6,8740	10,8977	12,3426	1,4946	0,6617	2,5045	0,0482	0,0484	44,0674	7,0041	1,7012	0,0232	4,2939
31	7,8502	6,7415	10,6782	20,6047	2,4980	1,1411	2,5043	0,0535	0,0503	34,9455	6,9997	1,7045	0,0229	4,3054
32	4,7816	4,1026	6,5004	20,6020	2,4954	1,1098	2,4965	0,0531	0,0531	44,7230	7,0057	1,7089	0,0234	4,3006
33	4,7812	4,1214	6,5018	12,3452	1,4937	0,6725	2,5064	0,0474	0,0617	54,4776	7,0005	1,7020	0,0237	4,3053
34	8,0114	6,8852	10,8948	20,6040	2,4955	1,1297	1,4423	0,0268	0,0240	34,7900	6,9960	2,2798	0,0237	4,2987
35	8,0059	6,8825	10,9040	20,6059	2,5022	1,1240	1,9877	0,0355	0,0391	34,9090	7,0440	1,6999	0,0222	4,3067

**APÊNDICE A – PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL (DE MISTURAS)**

...continuação

Ensaios	Caseinato de Cálcio	Proteína Iso. Soja	Proteína Hidro. do trigo	Óleo de Canola	Óleo de Girassol	Ômega 3	L-Arginina	L-Carnitina	L-Taurina	Maltodextrina	Neofiber	Aroma de Baunilha	Acessulfane K	Vitaminas
36	8,1156	6,8897	10,9057	20,6038	2,5050	1,1217	1,4432	0,0237	0,0223	35,4753	7,0356	1,7214	0,0314	4,3035
37	8,0108	6,8931	10,8910	12,3458	1,4807	0,6494	1,4498	0,0280	0,0253	45,1744	6,9999	1,6944	0,0227	4,3085
38	4,7834	4,1089	6,5049	20,6080	2,5044	1,1105	1,4509	0,0318	0,0314	45,8061	7,0303	1,7099	0,0305	4,3006
39	4,7856	4,1087	6,5037	12,3413	1,4983	0,6635	1,4432	0,0291	0,0237	55,5350	7,0114	1,7069	0,0268	4,3017
40	4,7822	4,1125	6,5015	12,3458	1,4959	0,6586	1,4450	0,0280	0,0293	58,2012	4,2055	1,8790	0,0235	4,2920
41	4,7855	4,1154	6,5019	12,3460	1,4977	0,6562	1,4423	0,0297	0,0294	58,1940	4,3767	1,7023	0,0231	4,2990
42	4,7872	4,1145	6,5019	12,3458	1,4952	0,6561	1,6185	0,0337	0,0318	58,2045	4,2051	1,6980	0,0248	4,3060
43	4,8367	4,1588	6,5003	12,3428	1,4922	0,6558	1,4469	0,0253	0,0219	58,1961	4,2065	1,7087	0,0223	4,3012
44	4,7812	4,1157	6,5040	12,5020	1,5189	0,6664	1,4438	0,0259	0,0234	58,2103	4,2089	1,6989	0,0200	4,3040
45	8,0176	6,8822	10,8943	20,5088	2,4996	1,1037	2,4944	0,0502	0,0538	34,9082	6,4825	1,7012	0,0260	4,2952
46	8,0155	6,8896	10,8954	20,5978	2,4967	1,1028	2,4991	0,0526	0,0492	37,1739	4,2075	1,6965	0,0214	4,2966
47	8,0131	6,8850	10,8923	12,3399	1,4939	0,6588	2,4938	0,0500	0,0431	46,8764	4,2063	1,7066	0,0230	4,3051
48	4,7837	4,1172	6,5040	20,6018	2,4976	1,0932	2,4981	0,0507	0,0472	47,5557	4,2029	1,7050	0,0297	4,3027
49	4,7875	4,1170	6,5032	12,3382	1,4954	0,6494	2,4995	0,0528	0,0426	57,2817	4,2097	1,6984	0,0227	4,3071
50	8,0203	6,8832	10,9050	20,5962	2,4984	1,0950	1,4477	0,0238	0,0220	38,2685	4,2047	1,6960	0,0219	4,2978
51	8,0268	6,8873	10,8980	12,3370	1,4915	0,6512	1,4453	0,0256	0,0250	47,9753	4,2022	1,7014	0,0245	4,2996
52	4,7867	4,1161	6,5060	20,6025	2,5046	1,0936	1,4452	0,0259	0,0270	48,6765	4,2034	1,7065	0,0221	4,2968
53	8,0136	6,8862	10,8977	19,0598	2,3111	1,0148	2,4966	0,0408	0,0483	34,8963	7,0033	3,0010	0,0112	4,3017
54	8,0130	6,8816	10,8932	12,3481	1,4986	0,6540	2,4934	0,0572	0,0573	42,7860	6,9947	3,0014	0,0130	4,2966
55	7,4508	6,4016	10,1301	20,6068	2,4970	1,1008	2,5071	0,0459	0,0430	34,9017	7,0044	2,9994	0,0121	4,3005
56	4,7819	4,1120	6,5009	20,6046	2,4988	1,1026	2,4956	0,0459	0,0468	43,4865	7,0073	2,9990	0,0135	4,2998
57	4,7864	4,1117	6,5047	12,3421	1,4987	0,6611	2,5082	0,0434	0,0470	52,1930	6,9987	3,0022	0,0111	4,3085
58	8,0163	6,8839	10,8929	19,9975	2,4265	1,0039	1,4421	0,0241	0,0210	34,9063	6,9940	3,0080	0,0121	4,3086
59	8,0179	6,8923	10,9062	12,3446	1,4960	0,6536	1,4423	0,0210	0,0214	43,8788	7,0010	3,0066	0,0125	4,3047
60	7,7110	6,8970	10,5990	20,6022	2,4990	1,1027	1,4426	0,0205	0,0218	34,9052	6,9971	3,0052	0,0116	4,3047
61	4,7817	4,1118	6,5033	20,5976	2,4970	1,1050	1,4460	0,0267	0,0279	44,5868	7,0032	3,0042	0,0145	4,2986
62	4,7850	4,1144	6,5018	12,3464	1,4972	0,6418	1,4420	0,0222	0,0215	54,2850	7,0001	3,0070	0,0118	4,3039
63	8,0135	6,8872	10,8924	20,6097	2,4940	1,1017	2,4990	0,0450	0,0471	34,9022	5,1824	2,9945	0,0117	4,3013
64	8,0134	6,8878	10,8947	20,5955	2,4940	1,0918	2,4926	0,0618	0,0436	35,8881	4,2040	3,0074	0,0137	4,2968
65	8,0186	6,8884	10,8936	12,3460	1,4938	0,6562	2,4999	0,0504	0,0530	45,5840	4,2015	3,0032	0,0141	4,3040
66	4,7842	4,1122	6,5085	20,6037	2,4944	1,0012	2,4960	0,0473	0,0496	46,2835	4,2042	3,0023	0,0112	4,3061
67	4,7866	4,1135	6,5006	12,3485	1,4950	0,6568	2,4934	0,0528	0,0437	55,9921	4,1988	3,0044	0,0153	4,3029
68	8,0193	6,8864	10,8992	20,6028	2,4942	1,0990	1,4449	0,0291	0,0244	34,9036	6,2855	2,9978	0,0155	4,2977
69	8,0139	6,8930	10,8920	20,6037	2,4974	1,0949	1,4495	0,0256	0,0276	36,9883	4,1970	2,9956	0,0138	4,2975
70	8,0155	6,8884	10,9035	12,3440	1,4930	0,6525	1,4411	0,0313	0,0263	46,6838	4,1993	3,0038	0,0124	4,3014

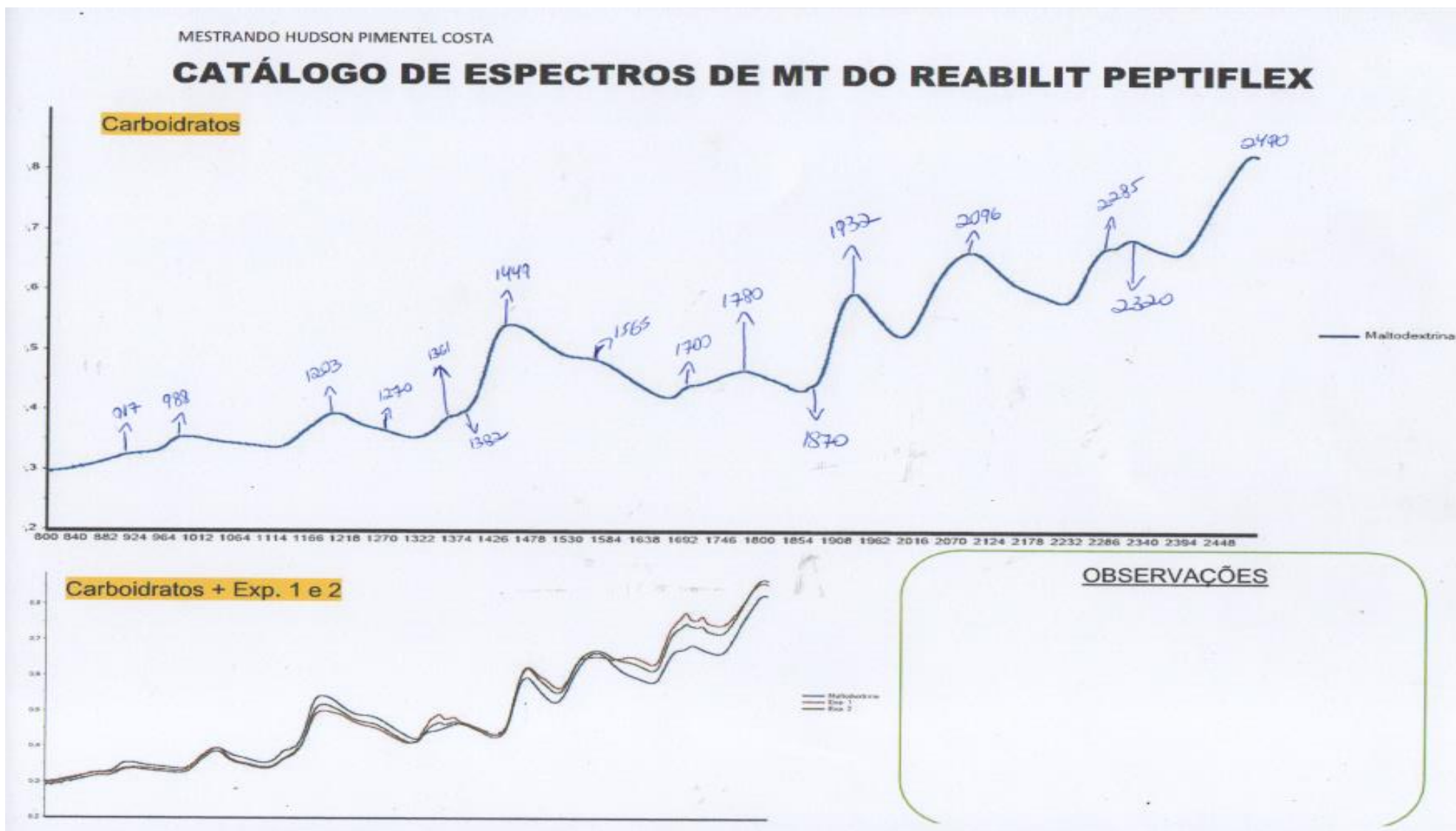


## APÊNDICE A – PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL (DE MISTURAS)

...continuação

Ensaios	Caseinato de Cálcio	Proteína Iso. Soja	Proteína Hidro. do trigo	Óleo de Canola	Óleo de Girassol	Ômega 3	L- Arginina	L- Carnitina	L- Taurina	Maltodextrina	Neofiber	Aroma de Baunilha	Acessulfane K	Vitaminas
71	4,7869	4,1124	6,5007	20,6069	2,4990	1,1063	1,4450	0,0276	0,0255	47,3848	4,2010	3,0004	0,0145	4,3046
72	4,7865	4,1090	6,5065	12,3438	1,4930	0,6547	1,4440	0,0290	0,0280	57,0879	4,1951	3,0006	0,0123	4,2978
73	8,0147	6,8847	10,8952	20,1662	2,4438	1,0761	1,4460	0,0480	0,0498	34,9019	6,9992	1,7040	0,0126	4,3051
74	8,0156	6,8882	10,8971	12,3412	1,5012	0,6548	2,5024	0,0518	0,0485	44,0830	6,9941	1,7084	0,0138	4,2985
75	7,8585	6,7524	10,6815	20,6039	2,5044	1,1073	2,4947	0,0440	0,0476	34,9000	7,0080	1,6988	0,0112	4,3006
76	4,7887	4,1121	6,5065	20,6020	2,5050	1,0971	2,4965	0,0441	0,0419	44,7827	7,0046	1,7003	0,0117	4,3070
77	4,7872	4,1136	6,5042	12,3471	1,5021	0,6446	2,4988	0,0455	0,0465	54,4906	7,0006	1,6975	0,0116	4,3011
78	8,0188	6,8932	10,8921	20,6047	1,4979	1,1025	1,4431	0,0251	0,0314	34,8957	7,0093	2,2877	0,0126	4,3038
79	8,0188	6,8856	10,8971	20,6051	2,4991	1,1013	2,0035	0,0412	0,0439	34,9032	6,9985	1,7021	0,0133	4,3027
80	8,0189	6,8810	10,8972	20,6017	2,5007	1,0945	1,4362	0,0290	0,0300	35,4826	7,0060	1,7050	0,0109	4,2986
81	8,0130	6,8923	10,8937	12,3434	1,4995	0,6538	1,4417	0,0251	0,0295	45,1875	6,9995	1,7000	0,0130	4,2988
82	4,7816	4,1169	6,5046	20,1018	2,4943	1,0896	1,4492	0,0316	0,0277	45,8895	7,0034	1,7030	0,0138	4,3092
83	4,7882	4,1178	6,5029	12,3414	1,5020	0,6529	1,4446	0,0273	0,0270	55,5855	6,9949	1,6959	0,0113	4,2937
84	4,7842	4,1166	6,5038	12,3454	1,5017	0,6450	1,4451	0,0295	0,0282	58,2072	4,2026	1,8840	0,0111	4,3059
85	4,7881	4,1165	6,5033	12,3476	1,4981	0,6580	1,4495	0,0282	0,0292	58,2002	4,3839	1,7030	0,0174	4,2994
86	4,8444	4,1686	6,5899	12,3484	1,4942	0,6489	1,4462	0,0244	0,0254	58,2034	4,1972	1,7006	0,0127	4,3010
87	4,7810	4,1166	6,5019	12,3448	1,4979	0,6550	1,6290	0,0331	0,0310	58,1968	4,2043	1,6999	0,0115	4,3016
88	4,7841	4,1194	6,5073	12,5039	1,5167	0,6630	1,4407	0,0273	0,0290	58,2039	4,2079	1,7038	0,0113	4,3002
89	8,0133	6,8855	10,8903	20,6005	2,4906	1,0912	1,4425	0,0558	0,0520	34,8991	6,4839	1,6987	0,0110	4,3061
90	8,0143	6,8890	10,8993	20,6025	2,5017	1,1005	2,4952	0,0545	0,0519	37,1864	4,1966	1,7026	0,0128	4,3009
91	8,0144	6,8858	10,8925	12,3433	1,4991	0,6566	2,4990	0,0570	0,0465	46,8851	4,1990	1,6996	0,0130	4,3011
92	4,7855	4,1126	6,5036	20,6016	2,4990	1,1046	2,5055	0,0466	0,0484	47,5829	4,2007	1,7034	0,0128	4,2983
93	4,7856	4,1114	6,5090	12,3420	1,4955	0,6582	2,4940	0,0546	0,0501	57,2821	4,2038	1,7032	0,0128	4,3066
94	8,0150	6,8824	10,8940	20,6055	2,4985	1,1067	1,4400	0,0284	0,0272	34,2849	4,1960	1,6979	0,0138	4,2977
95	8,0148	6,8847	10,9020	12,3460	1,5001	0,6638	1,4428	0,0306	0,0253	47,9837	4,1970	1,7044	0,0128	4,3063
96	4,7848	4,1153	6,5040	20,6009	2,4983	1,1045	1,4402	0,0321	0,0280	48,6840	4,2009	1,6964	0,0121	4,2962
97	4,7887	4,1164	6,5060	13,3477	1,4954	0,6548	1,4455	0,0280	0,0226	58,2091	4,8774	3,0047	0,0230	2,5007
98	6,4065	5,5008	8,7092	16,4711	1,9966	0,8735	1,9762	0,0381	0,0412	46,6011	5,6056	2,3544	0,0199	3,4036
99	6,4066	5,5055	8,7070	16,4735	1,9995	0,8808	1,9751	0,0317	0,0364	46,6005	5,6080	2,3509	0,0173	3,4060
100	6,4041	5,5067	8,7054	16,4746	2,0023	0,8753	1,9735	0,0350	0,0335	46,5942	5,6069	2,3527	0,0178	3,4027

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

### MALTODEXTRINA

Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
917	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (4v), metil C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
988	Fenóis O-H, fenol diluído em CCl <sub>4</sub>	3vO-H, orto-iodofenol	O-H fenólico
1203	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H, .O-H - v1 + v2 + v3	Água
1270	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3v), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1361	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1382	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1449	O-H aromático (ArO-H)	O-H (2v), .O-H	Hidrocarbonetos aromáticos
1565	Combinação ligada N-H da poliamida 11	N-H [estiramento de NH ligado e 2x combinação de deformação de Amida II (flexão de N-H no plano)] da poliamida 11	Poliamida 11
1700	C-H Metil C-H, clorado (CH <sub>3</sub> Cl)	C-H metil, CH <sub>3</sub> Cl	Halogenado (CH <sub>3</sub> Cl)
1780	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (2v), .CH <sub>2</sub>	Celulose
1870	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1932	O-H (.O-H & HOH)	Polissacarídeos	Combinação O-H alongamento e flexão HOH
22096	Banda de deformação O-H, álcoois ou água	3δ O-H da banda infravermelha média ocorrendo perto de 1420 cm <sup>-1</sup>	Álcoois ou água O-H
2285	Amido C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos
2320	C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e combinação de deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos (glicose)
2490	C-H/C-C (.C-H & .C-C)	C-H stretching & C-C stretching combination	Celulose



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

MESTRANDO HUDSON PIMENTEL COSTA

### CATÁLOGO DE ESPECTROS DE MT DO REABILIT PEPTIFLEX

#### NEOFIBER

Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

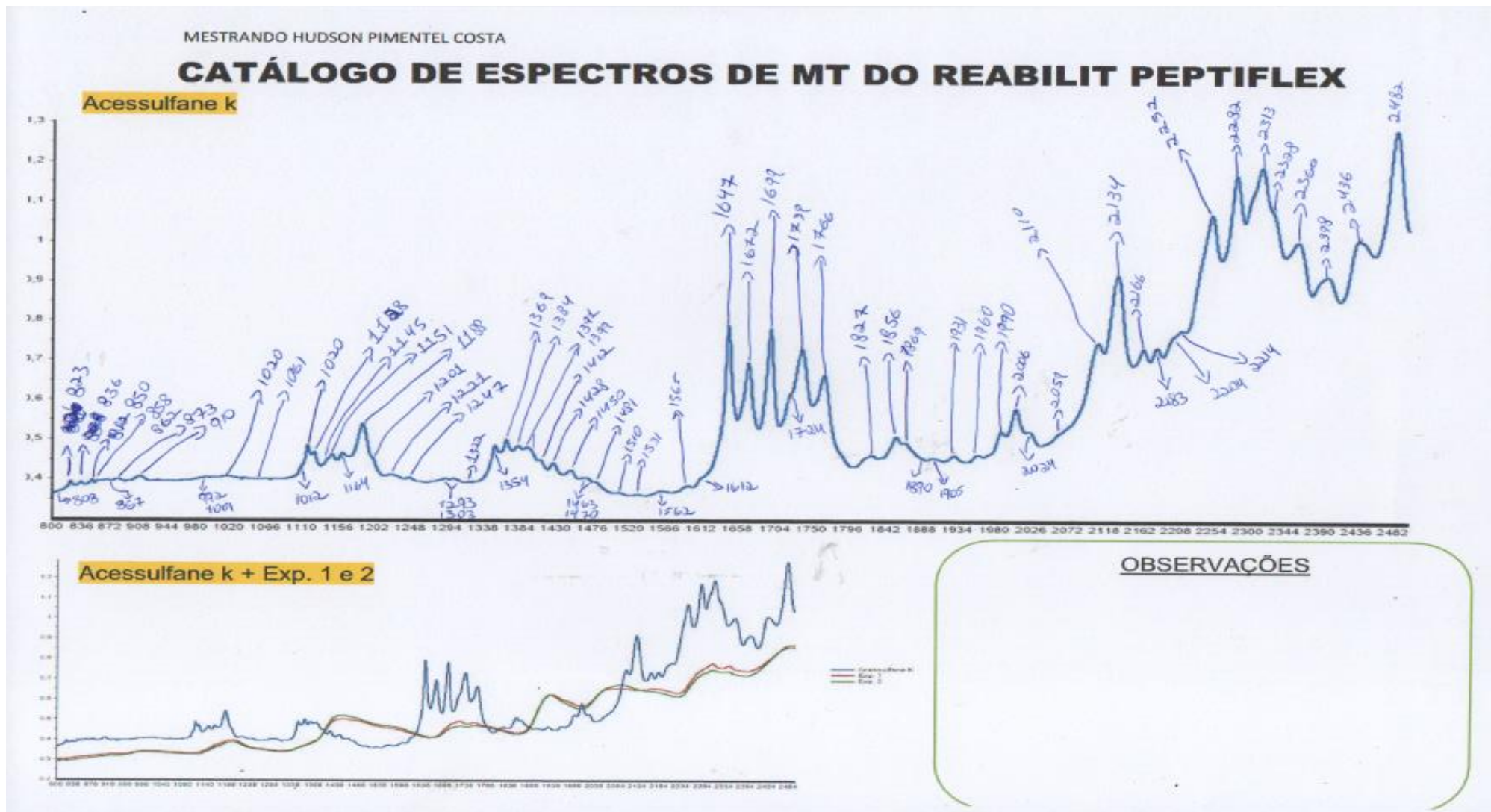
Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
910	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (4v), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos metil
995	O-H de álcoois primários como (-CH <sub>2</sub> -OH)	O-H (3v) (-CH <sub>2</sub> -OH), álcoois primários	Álcoois primários
1199	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H, .O-H - v1 + v2 + v3	Água
1362	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1383	C-H Metil C-H, associado a alifáticos lineares	Combinação de CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) N CH <sub>3</sub> C-H (2vSCH <sub>3</sub> & δCH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
1453	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H (2v), .O-H	Água
1572	Combinação ligada N-H da poliamida 11	N-H [estiramento de NH ligado e 2x combinação de deformação da Amida II (flexão de N-H no plano)] da poliamida 11	Poliamida 11
1703	C-H Metil C-H ramificado	C-H como RCH <sub>3</sub> CHR ramificado	C-H alifático
1770	C-H Metil C-H, associado aromático (ArCH <sub>3</sub> )	C-H metil aromático (ArCH <sub>3</sub> )	Aromático (ArCH <sub>3</sub> )
1820	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1828	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1838	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1848	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo .C-Cl)	C-Cl (7v), .C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1872	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo .C-Cl)	C-Cl (7v), .C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1931	Alongamento Si-O-H + combinação Si-O-Si de silicone	Combinação Si-O-H + combinação de deformação Si-O-Si a partir de silicone (dimetil siloxano)	Alongamento Si-O-H + Si-O-Si em silicone (dimetil siloxano)
2098	Banda de deformação O-H, álcoois ou água	3δ O-H da banda infravermelha média ocorrendo perto de 1420 cm <sup>-1</sup>	Álcoois ou água O-H
2284	Amido C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos
2323	C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e combinação de deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos (glicose)
2491	C-H / C-C (.C-H e .C-C)	Combinação de alongamento C-H e alongamento C-C	Celulose

Neofiber

**... Continuação**

# APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação





## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>ACESSULFANE K</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
808	C-H Metil C-H, associado a RC (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> alifático ramificado ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Combinação C-H (4vCH <sub>3</sub> e δCH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
823	C-H Metileno C-H, associado a R (CH <sub>2</sub> ) NR linear alifático	Combinação C-H (4vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
836	C-H Metileno C-H, associado a RC alifático ramificado (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Combinação C-H (4vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
850	C-H Metileno C-H, associado a RC alifático ramificado (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Combinação C-H (4vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
858	C-H Metileno C-H, associado a RC alifático ramificado (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Combinação C-H (4vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
862	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
867	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
873	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
910	C-H Metil (CH <sub>3</sub> )	C-H (4v), CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos, metil
992	Fenóis O-H, fenol diluído em CCl <sub>4</sub>	3vO-H, orto-iodofenol	O-H fenólico
1001	Fenóis O-H, fenol diluído em CCl <sub>4</sub>	Fenol diluído 3vO-H em CCl <sub>4</sub>	O-H fenólico
1012	Amina aromática primária N-H (m-NO <sub>2</sub> )	N-H (3v) amina aromática primária assimétrica em CCl <sub>4</sub> como substituinte meta-NO <sub>2</sub>	Amina aromática
1020	Amina aromática primária N-H (p-Cl)	Amina aromática primária assimétrica N-H (3v) em CCl <sub>4</sub> como substituinte para-Cl	Amina aromática
1061	Banda de combinação O-H, álcoois ou água	Combinação de metil 2vO-H & δ C-H	Álcoois como R-C-O-H
1120	C-H aromático (ARCH)	C-H (3v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
1128	C-H aromático (ARCH)	C-H (3v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
1145	C-H (C-H aromático)	C-H (3v), Ar.C-H	Hidrocarbonetos aromáticos
1151	C = O (Carbonil > C = O)	C = O (5v)	Hidrocarbonetos alifáticos
1164	C = O (Carbonil > C = O)	C = O (5v)	Hidrocarbonetos alifáticos
1201	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H, O-H - v1 + v2 + v3	Água
1221	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3v), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1247	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3v), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1293	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3v), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>ACESSULFANE K</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
1739	CONH2 especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura $\alpha$ -hélice	CONH2 especificamente devido à estrutura do peptídeo $\alpha$ -hélice	Proteínas como espectro normalizado de segunda derivada de proteínas em solução aquosa
1766	C-H Metileno (CH <sub>2</sub> )	C-H (2v), CH <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos, metileno
1827	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1856	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo C-Cl)	C-Cl (7v), C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1869	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo C-Cl)	C-Cl (7v), C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1890	Ligação de hidrogênio O-H entre a água e o álcool polivinílico exposto OH	OH atribuído como um hidrogênio ligado a um OH isolado, da mesma maneira que OH :: OH <sub>2</sub> , a partir do efeito da hidratação do álcool isolado OH - refere-se às interações da água com os grupos OH em poli (álcool etileno-co-vinílico) (EVOH)	Água e álcool polivinílico OH
1905	Fosfato de P-OH (P-OH)	O-H (2v), P-OH	Fosfato
1931	O-H (.O-H & HOH)	Combinação O-H alongamento e flexão HOH	Polissacarídeos
1960	O-H Polimérico (.O-H)	Combinação O-H alongamento e flexão HOH	Polissacarídeos
1990	Amida N-H: NH <sub>2</sub> -C = ONH <sub>2</sub>	Combinação de alongamento N-H e flexão N-H	Ureia
2006	Banda de combinação N-H / C-N de amidas primárias (R-C = O - NH <sub>2</sub> )	Combinação de N-H [vN-H simétrica e de amida III (combinação de alongamento C-N / flexão no plano N-H)] para amidas primárias	Banda de combinação N-H de amidas primárias
2024	Combinação N-H / C = O da RNase A nativa	N-H / C = O [combinação de NH ligado e amida I (2vC = O)] da RNase A nativa	RNase A
2059	HN ... O = banda C da amida A	Combinação CONH <sub>2</sub> da amida A e amida II	Combinação de amida A e amida II de proteínas (polipeptídeos)
2110	O-H / C-O Polimérico (.O-H & .C-O)	Combinação O-H flexão e alongamento C-O	Polissacarídeos (glicose)
2134	Combinação N-H / C = O da poliamida 11	N-H / C = O [2 x amida II (combinação de N-H no plano) e amida I (combinação de 2vC = O) da poliamida 11]	Poliamida 11
2166	C-H aromático C-H (aril)	CCv + CHv (16 + 5), atribuição de banda de benzeno	C-H Aril
2183	Banda de combinação N-H / C-N / C = O de amidas secundárias em proteínas	N-H / C-N / C = O [2x amida I (alongamento 2vC = O) e deformação da amida III (combinação alongamento C-N / flexão no plano N-H)] para amidas secundárias em proteínas	N-H / C-N / C = O da proteína
2204	Banda amina primária N-H do composto diamino	Banda N-H (3v) de amina primária como resinas de bisfenol A (I) curadas com endurecedor de 4,4'-diaminodifenilsulfona (II)	Amina primária



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>ACESSULFANE K</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
2214	C = combinação O / C-N / N-H da poliamida 11	C = O / C-N / N-H [combinação de 2 x amida I (2νC = O) e amida III (combinação C-N / alongamento N-H) da poliamida 11	Poliamida 11
2252	CHO - Instrumento de filtro clássico	Instrumento de filtro clássico	Lignina
2282	Amido C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos
2313	CHO - Instrumento de filtro clássico	Instrumento de filtro clássico	Lipídios / óleos
2328	C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e combinação de deformação CH <sub>2</sub>	Polissacarídeos (glicose)
2360	C-H Metileno C-H, associado a RC alifático ramificado (CH <sub>3</sub> ) 3 ou RCH (CH <sub>3</sub> ) 2	Combinação C-H (alongamento simétrico 2νCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
2398	C-H aromático C-H (aril)	CH <sub>v</sub> + CH <sub>δ</sub> (15 + 10), atribuição de banda de benzeno	C-H Aril
2436	C-H aromático C-H (arilo)	CC <sub>5</sub> + CH <sub>v</sub> (14 + 1), criação de banda de benzeno	C-H Aril
2482	C-H Metil C-H, associado a aromático (ArCH <sub>3</sub> )	C-H (35 CH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos aromáticos



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

### CASEINATO DE CÁLCIO

Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
848	C-H Metileno C-H, associado a RC (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> alifático ramificado ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	C-H (4νCH <sub>2</sub> & 5CH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos combinados alifáticos
910	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (4ν), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos, metil
11018	Amina aromática primária N-H (m-Cl)	N-H (3ν) amina aromática primária assimétrica em CCl <sub>4</sub> como substituinte meta-Cl	Amina aromática
11149	C-H (C-H aromático)	C-H (3ν), Ar.C-H	Hidrocarbonetos aromáticos
11186	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (3ν), metil C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
11277	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3ν), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
11360	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
11425	N-H de amidas primárias (R-C = O - NH <sub>2</sub> )	N-H (2ν) simétrico da amida primária (R-C = O - NH <sub>2</sub> )	N-H de amidas primárias
11497	Amina aromática primária N-H (p-CH <sub>3</sub> )	Amina aromática primária simétrica N-H (2ν) em CCl <sub>4</sub> como agrupamento para-CH <sub>3</sub>	Amina aromática
11570	N-H amida .NH	N-H (2ν), .CONHR	Amida / proteína
11624	C-H Vinil C-H ligado ao grupo N, como (CH <sub>2</sub> = CH-N-C = O - C)	C-H, Vinil em N (1-etenil 2-pirrolidinona) como (CH <sub>2</sub> = CH-N-C = O - C)	Vinil sobre pirrolidinona
11695	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (2ν) CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos Metílicos
11735	C-H Metil C-H, amina associada a NH <sub>2</sub> CH <sub>3</sub>	C-H metil, amina associada a RN (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Aminas
11812	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3νS)	Celuloses
11938	O-H Água a cerca de 0 graus C	O-H (2ν), .O-H - ν <sub>2</sub> + ν <sub>3</sub>	Água



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

...Continuação

### PROTEINA HIDRO. TRIGO

Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
1020	C-H Metil C-H, associado a aromático (ArCH <sub>3</sub> )	Combinação C-H (3νCH <sub>3</sub> e δCH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos aromáticos
1188	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (3ν), metil C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1277	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3ν), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1495	Amina aromática primária N-H (p-CH <sub>3</sub> )	Amina aromática primária simétrica N-H (2ν) em CCl <sub>4</sub> como agrupamento para-CH <sub>3</sub>	Amina aromática
1697	C-H Metil C-H, carbonil adjacente como (.C = OCH <sub>3</sub> )	C-H metil, carbonil adjacente como (.C = OCH <sub>3</sub> )	Cetonas
1731	C-H Metil C-H, OH associado como (ROHCH <sub>3</sub> )	C-H metil, OH associado a ROHCH <sub>3</sub>	Álcoois, dióis
1940	O-H (H-O-H) Água	Combinação O-H alongamento e flexão HOH	Água
1978	N-H amida II (.CONH <sub>2</sub> )	Combinação de alongamento N-H (assimétrico) e flexão no plano N-H	Amidas / proteínas
2057	N-H / C = O Amida como (.CONH.) & .CONH <sub>2</sub> )	Alongamento N-H e combinação C = O alongamento (amida I)	Amidas / proteínas
2149	CONH <sub>2</sub> especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura α-hélice.	CONH <sub>2</sub> especificamente devido à estrutura do peptídeo α-hélice	Proteínas como espectros normalizados de segunda derivada de proteínas em solução aquosa
2280	CONH <sub>2</sub> especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura α-hélice	CONH <sub>2</sub> especificamente devido à estrutura do peptídeo α-hélice	Proteínas como espectro normalizado de 2ª derivada de proteínas em solução aquosa
2305	C-H Metileno C-H, associado a R (CH <sub>2</sub> ) NR linear alifático	Combinação C-H (alongamento assimétrico 2νCH <sub>2</sub> & δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifático
2344	C-H Methylene C-H, associated with ovalbumin protein side chains seen at pH 5.0	C-H (2νCH <sub>2</sub> symmetric stretching & δCH <sub>2</sub> ) combination band from ovalbumin protein side chains seen at pH 5.0	C-H from ovalbumin protein side chains
2472	Amida C-N-C: (.C-N-C)	C-N-C (2ν)	Proteínas

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>PROTEINA ISO. DE SOJA</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
1020	C-H Metil C-H, associado a aromático (ArCH3)	Combinação C-H (3νCH3 e δCH3)	
1190	C-H Metil C-H, (.CH3)	C-H (3ν), metil C-H	Hidrocarbonetos aromáticos
1276	Carbono secundário ou terciário C-H (.CH)	C-H (3ν), .C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1422	O-H Fenólico	O-H 2νO-H a partir de fenóis e álcoois arílicos Ar-OH	Hidrocarbonetos alifáticos
1499	N-H amida .NH ou .NH2	N-H (2ν), .NH2	O-H fenólico
1570	N-H amida .NH	N-H (2ν), .CONHR	Amida / proteína
1620	Alceno C-H, = CH2	C-H (2ν), = CH2	Amida / proteína
1698	C-H Metil C-H, nitro (CH3NO2)	C-H metil, CH3NO2	Alcenos
1735	CONH2 especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura α-hélice	CONH2 especificamente devido à estrutura do peptídeo α-hélice	Nitro (CH3) como (CH3NO2)
1939	O-H Água a cerca de 0 graus C	O-H (2ν), .O-H - ν2 + ν3	Proteínas como espectro normalizado de segunda derivada de proteínas em solução aquosa
1978	Combinação N-H, amina aromática primária (o-OCH3)	N-H (combinação νN-H & δN-H), amina aromática primária em CCl4 como substituinte orto-OCH3	Água
2058	Banda de combinação N-H (RNase A) - C = banda amida I	Banda de combinação N-H encontrada no espectro da RNase A nativa (banda C = O amida I)	Amina aromática
2188	C-H aromático C-H (aril)	CCν + CHν (13 + 1), atribuição de banda de benzeno	N-H da proteína
2300	CONH2 especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura α-hélice	CONH2 especificamente devido à estrutura do peptídeo α-hélice	C-H Aril
2349	C-H Metileno C-H, associado a R (CH2) NR linear alifático	Combinação C-H (alongamento simétrico 2νCH2 & δ CH2)	Proteínas como espectro normalizado de 2ª derivada de proteínas em solução aquosa
2468	Amida C-N-C: (.C-N-C)	C-N-C (2ν)	Hidrocarbonetos alifáticos
			Proteínas

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

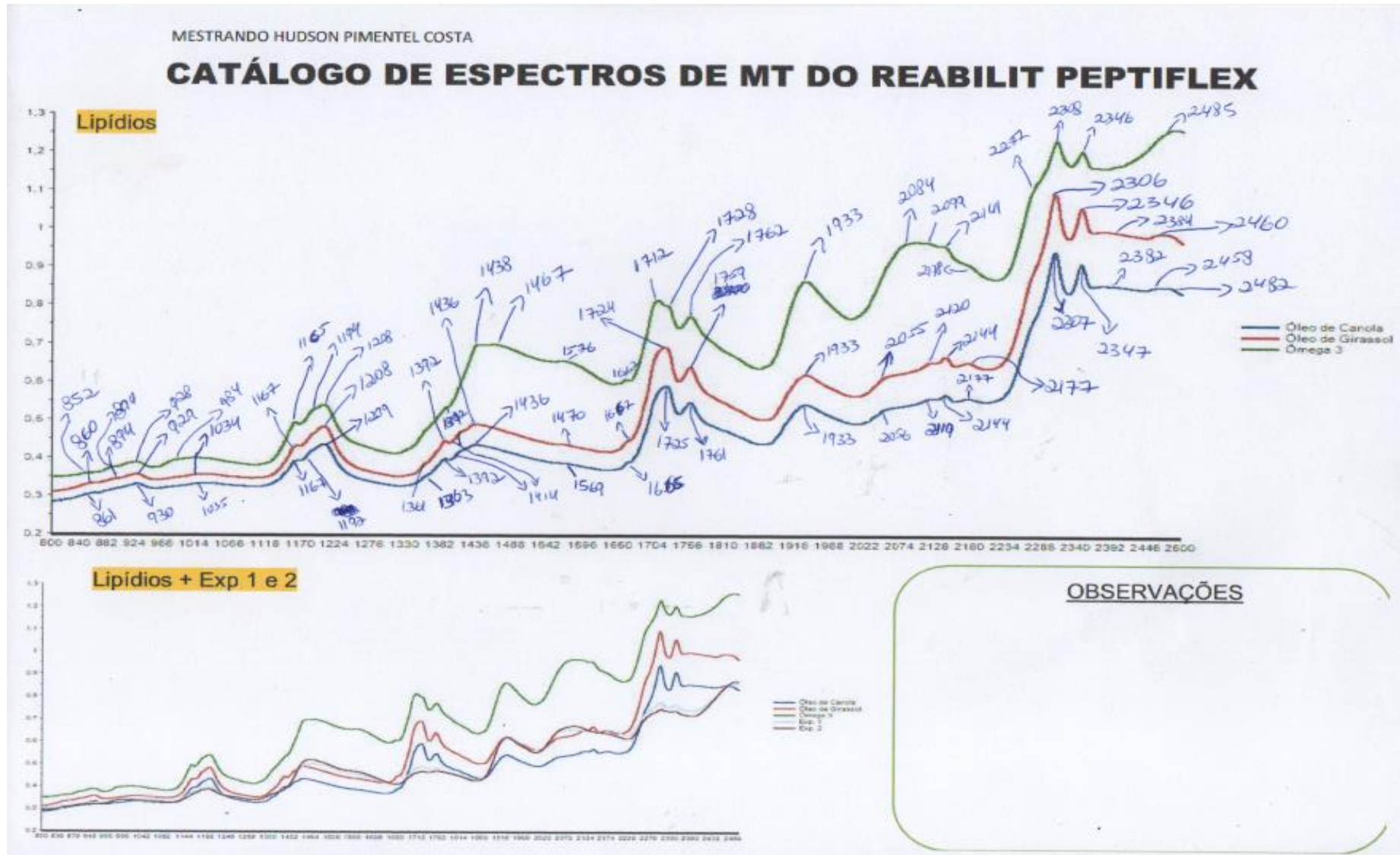
... Continuação

CASEINATO DE CÁLCIO			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
		Grupo Funcional	
1972	Combinação N-H, amina aromática primária (o-Cl)	N-H (combinação $\nu$ N-H & $\delta$ N-H), amina aromática primária em CCl <sub>4</sub> como agrupamento orto-Cl	Amina aromática
2054	CONH <sub>2</sub> especificamente devido aos grupos peptídeo N-H e C = O em ângulo reto com a linha do esqueleto peptídico referido como estrutura da folha $\beta$	CONH <sub>2</sub> especificamente devido a estruturas de folhas $\beta$ peptídicas	Proteínas como espectros normalizados de segunda derivada de proteínas em solução aquosa
2182	Combinação N-H / C-N / N-H da poliamida 11	N-H / C-N / N-H [combinação de estiramento de NH ligado e amida III (combinação de estiramento de C-N / flexão no plano de N-H)] da poliamida 11	Poliamida 11
2275	O-H / C-O da glicose O-H / C-O-U-N-T-Y Absorção de glicose do alongamento O-H e C-O	combinação de alongamento	Glicose
2294	CONH <sub>2</sub> especificamente devido ao hidrogênio C = O ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura $\alpha$ -hélice	CONH <sub>2</sub> especificamente devido à estrutura do peptídeo $\alpha$ -hélice	Proteínas como espectros normalizados de 2ª derivada de proteínas em solução aquosa
2345	C-H Metileno C-H, associado a cadeias laterais da proteína ovalbumina observadas em pH 5,0	Banda de combinação C-H (alongamento simétrico $2\nu$ CH <sub>2</sub> e $\nu$ CH <sub>2</sub> ) das cadeias laterais da proteína ovalbumina observadas em pH 5,0	C-H das cadeias laterais da proteína ovalbumina
2469	C-H aromático C-H (aril)	CC $\delta$ + CH $\nu$ (14 + 15), atribuição de banda de benzeno	C-H Aril



# APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>ÓLEO DE CANOLA</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
861	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hydrocarbonetos aromáticos
930	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (4v), .CH <sub>2</sub>	Hydrocarbonetos, metileno
1035	C-H Metileno C-H, associado a R (CH <sub>2</sub> ) nR linear alifático	Combinação C-H (3vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> )	Hydrocarbonetos alifáticos
1167	Alceno C-H (.HC = CH)	C-H (3v), .HC = CH	Alcenos, polienos
1192	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (3v), metil C-H	Hydrocarbonetos alifáticos
1209	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (3v), metil C-H	Hydrocarbonetos alifáticos
1363	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, C-H <sub>3</sub>	Hydrocarbonetos alifáticos
1392	C-H Metil C-H, associado ao CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) N alifático linear	Combinação CH <sub>3</sub> C-H (2vSCH <sub>3</sub> e δCH <sub>3</sub> )	Hydrocarbonetos alifáticos
1436	Amina aromática primária N-H (o-NO <sub>2</sub> )	N-H (2v) amins aromática primária assimétrica em CCl <sub>4</sub> como substituinte orto-NO <sub>2</sub>	Amina aromática
1565	Combinação ligada N-H da poliamida 11	N-H [estiramento de NH ligado e 2x combinação de deformação de Amida II (flexão de N-H no plano)] da poliamida 11	Poliamida 11
1569	Combinação ligada N-H da poliamida 11	N-H [estiramento de NH ligado e 2x combinação de deformação de Amida II (flexão de N-H no plano)] da poliamida 11	Poliamida 11
1625	C-H Vinil C-H ligado ao grupo N, como (CH <sub>2</sub> = CH-N-C = O - C)	C-H, Vinil em N (1-etenil 2-pirrolidinona) como (CH <sub>2</sub> = CH-N-C = O - C)	Vinil sobre pirrolidinona
1725	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (2v), .CH <sub>2</sub>	Hydrocarbonetos, Metileno
1761	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> ) (Simétrico)	C-H (2v), Metileno C-H (Simétrico)	Hydrocarbonetos alifáticos
1933	Alongamento Si-O-H + combinação Si-O-Si de silicone	Combinação Si-O-H + combinação de deformação Si-O-Si a partir de silicone (dimetil siloxano)	Estiramento Si-O-H + Si-O-Si a partir de silicone (dimetil siloxano)
2058	N-H / C = O Amida como (.CONH.) & .CONH <sub>2</sub> da RNase A nativa	Faixa de combinação de alongamento N-H e alongamento C = O (amida I) no espectro da RNase A nativa	RNase A
2119	N-H / C-N de gama-valerolactam	N-H / C-N [combinação de deformação vN-H e amida III (alongamento C-N / flexão no plano de N-H)] para gama-Valerolactona	gama-Valerolactona
2144	C-H / C = O Lipídico associado (.RC = CH & RC = O)	Alongamento C-H & C = O combinação de alongamento e combinação de deformação C-H	Lipídios
2177	Banda de combinação N-H / C-N / C = O da ureia (NH <sub>2</sub> -C = O - NH <sub>2</sub> )	N-H / C-N / C = O [combinação de 2x amida I (estiramento 2vC = O) e deformação da amida III (combinação estiramento C-N / flexão no plano N)] para uréia	N-H / C-N / C = O da ureia



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>ÓLEO DE CANOLA</b>		
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo		
Número	Grupo Funcional	Número (nm)
2307	C-H (flexão C-H)	C-H (36)
2347	C-H Metileno C-H, associado a R (CH2) NR linear alifático	Combinação C-H (alongamento simétrico 2νCH2 & δ CH2)
2392	C-H / C-C (C-H e C-C)	Combinação de alongamento C-H e alongamento C-C
2458	C-H Metil C-H, associado ao CH3 alifático linear	(CH2) N CH3
2482	C-H (CH2)	Combinação C-H
		Lípidios
		Hidrocarbonetos alifáticos
		Lípidios
		C-H (36 CH3) Hidrocarbonetos alifáticos
		Lípidios, compostos alifáticos

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

### ÓLEO DE GIRASSOL

Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
860	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
894	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
929	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (4v), .CH <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos aromáticos
1034	Álcoois alquílicos polifuncionais O-H / C-O	Combinação 2v O-H e 3vC-O	Hidrocarbonetos, metileno
1167	Alceno C-H (.HC = CH)	C-H (3v), .HC = CH	Éteres e ésteres também contendo álcoois
1208	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (3v), metileno C-H	Alcenos, polienos
1361	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1392	C-H Metil C-H, associado ao CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) N CH <sub>3</sub> alifático linear	Combinação C-H (2vSCH <sub>3</sub> e δCH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
1414	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1436	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1470	Banda de combinação N-H de amidas primárias (R-C = O - NH <sub>2</sub> )	N-H (combinação assimétrica vN-H e simétrica vN-H) para amidas primárias	Hidrocarbonetos alifáticos
1667	C-H Metil C-H, OH associado como (ROHCH <sub>3</sub> )	C-H metil, OH associado a ROHCH <sub>3</sub>	Banda de combinação N-H de amidas primárias
1724	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (2v), .CH <sub>2</sub>	Álcoois, Dióis
1759	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> ) (Simétrico)	C-H (2v), Metileno C-H (Simétrico)	Hidrocarbonetos, Metileno
1933	O-H Água a cerca de 0 graus C	O-H (2v), .O-H - v <sub>2</sub> + v <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
2055	N-H da gama-valerolactam	N-H (combinação vN-H e δN-H) para gama-Valerolactona	Água
2120	N-H / C-N de gama-Valerolactona	N-H / C-N [combinação de deformação vN-H e amida III (alongamento C-N / flexão no plano de N-H)] para gama-Valerolactona	gama-Valerolactona
2144	C-H / C = O Lipídico associado (.RC = CH & RC = O)	Alongamento C-H & C = O combinação de alongamento e combinação de deformação C-H	gama-Valerolactona
2177	Proteínas N-H: N-H (3vB)	N-H (3d)	Lipídios
2306	C-H (flexão .C-H)	C-H (3δ)	Proteínas / aminoácidos
2346	C-H Metileno C-H, associado a R (CH <sub>2</sub> ) NR linear alifático	Combinação C-H (alongamento simétrico 2vCH <sub>2</sub> & δ CH <sub>2</sub> )	Lipídios
2384	C-H / C-C (C-H e .C-C)	Combinação de alongamento C-H e alongamento C-C	Hidrocarbonetos alifáticos
2460	C-H (.CH <sub>2</sub> )	Combinação C-H	Lipídios
			Lipídios, compostos alifáticos

## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

### ÔMEGA 3

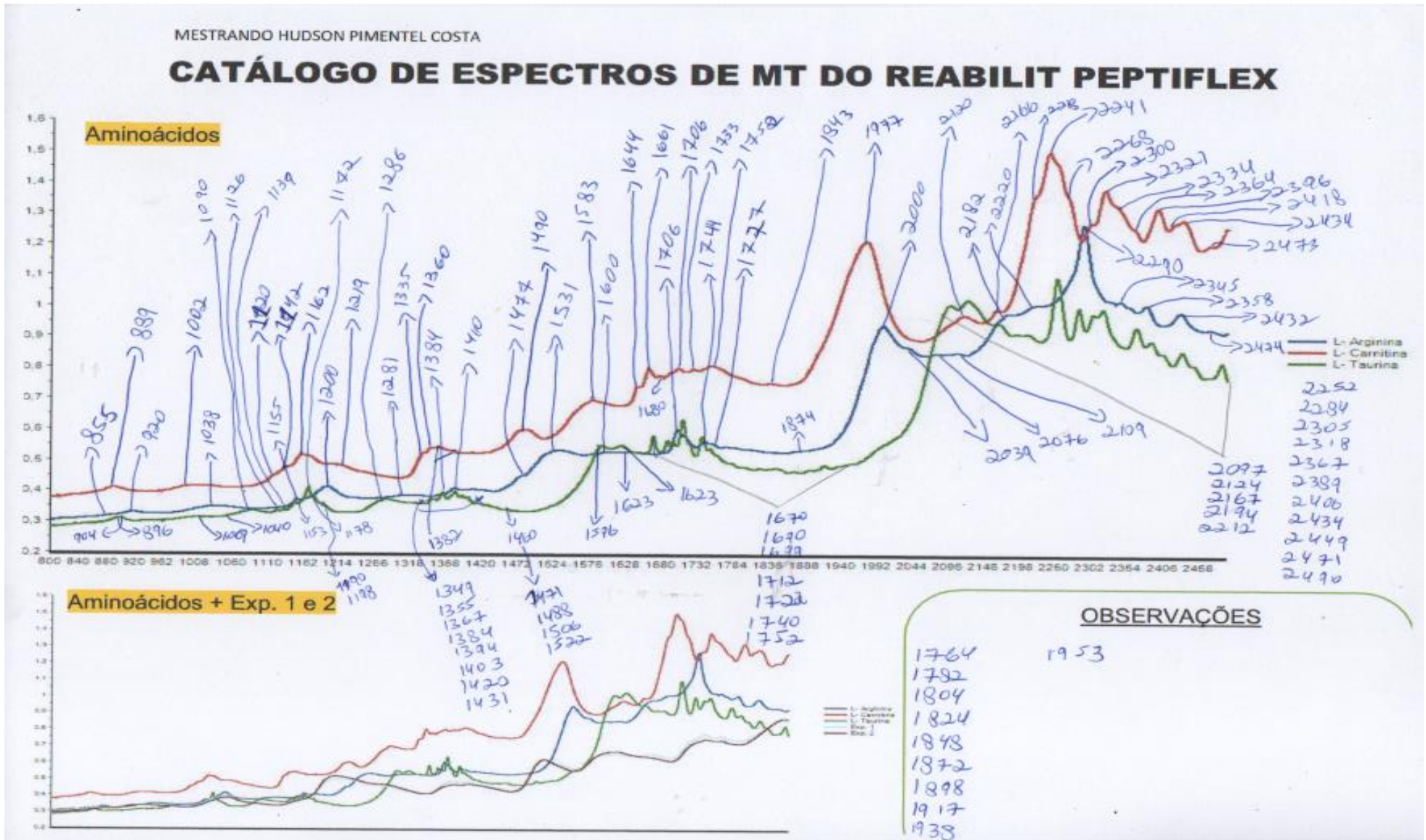
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
852	C-H aromático (ARCH)	C-H (4v), C-H aromático	
894	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (4v), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos aromáticos
928	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (4v), metileno C-H	Hidrocarbonetos, metil
984	Fenóis O-H, fenol diluído em CCl <sub>4</sub>	3vO-H, orto-iodofenol	Hidrocarbonetos alifáticos
1165	Alceno C-H (.HC = CH)	C-H (3v), .HC = CH	O-H fenólico
1194	C-H Metil C-H, (.CH <sub>3</sub> )	C-H (3v), metil C-H	Alcenos, polienos
1208	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (3v), metileno C-H	Hidrocarbonetos alifáticos
1438	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1467	O-H de álcoois terciários como (-C-OH)	O-H (2v) (-C-OH), álcoois terciários	Hidrocarbonetos alifáticos
1576	Amônia N-H na água	N-H (2v) para NH <sub>3</sub> (amônia) em água	Álcoois terciários
1662	C-H Metil C-H, CH <sub>3</sub> clorado	C-H metil, CH <sub>3</sub> Cl	Amônia na água
1712	C-H Metil C-H, iodo (CH <sub>3</sub> I)	C-H metil, CH <sub>3</sub> Br	Halogenado (CH <sub>3</sub> Cl)
1728	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> ) (Assimétrico)	C-H (2v), Metileno C-H (assimétrico)	Halogenado (CH <sub>3</sub> I)
1762	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> ) (Simétrico)	C-H (2v), Metileno C-H (Simétrico)	Hidrocarbonetos alifáticos
1933	Alongamento Si-O-H + combinação Si-O-Si de silicone	Combinação Si-O-H + combinação de deformação Si-O-Si a partir de silicone (dimetil siloxano)	Hidrocarbonetos alifáticos
2084	Combinação relacionada ao O-H da mudança de água na fase e banda de combinação N-H / C-N da uréia (NH <sub>2</sub> -C = O - NH <sub>2</sub> ) da ovalbumina	Combinação relacionada a O-H da mudança de água na fase com o aumento da concentração de proteínas em pH acima de 2,8, sobrepondo-se a uma banda que representa a N-H / C-N [combinação de deformação assimétrica e amida III vSN-H (aminação III da C-N / estiramento C-N / H no plano)]	Hidrocarbonetos alifáticos
2099	C = O-O Polimérico (alongamento C = O e C-O)	C = O-O (4v)	Estiramento Si-O-H + Si-O-Si a partir de silicone (dimetil siloxano)
2141	C-H / C = O Lipídico associado (.RC = CH & RC = O)	Alongamento C-H & C = O combinação de alongamento e combinação de deformação C-H	Combinação relacionada ao O-H da mudança de água na fase e N-H / C-N da proteína ovalbumina
2178	Banda de combinação N-H / C-N / C = O de amidas secundárias em proteínas	N-H / C-N / C = O [combinação de 2x amida I (2vC = O) e deformação da amida III combinação C-N alongamento / flexão N-H] para amidas secundárias em proteínas	Polissacarídeos (glicose)
2277	Amido C-H (.C-H & CH <sub>2</sub> )	Alongamento C-H e deformação CH <sub>2</sub>	Lipídios
2308	C-H (flexão C-H)	C-H (3δ)	N-H / C-N / C = O da proteína
2346	C-H Metileno C-H, associado a cadeias laterais da proteína ovalbumina observadas em pH 5,0	Banda de combinação C-H (alongamento simétrico 2vCH <sub>2</sub> e δCH <sub>2</sub> ) das cadeias laterais da proteína ovalbumina observadas em pH 5,0	Polissacarídeos
2485	C-H / C-C (.C-H e .C-C)	Combinação de alongamento C-H e alongamento C-C	Lipídios
			C-H das cadeias laterais da proteína ovalbumina
			Celulose



# APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

### L - CARNITINA

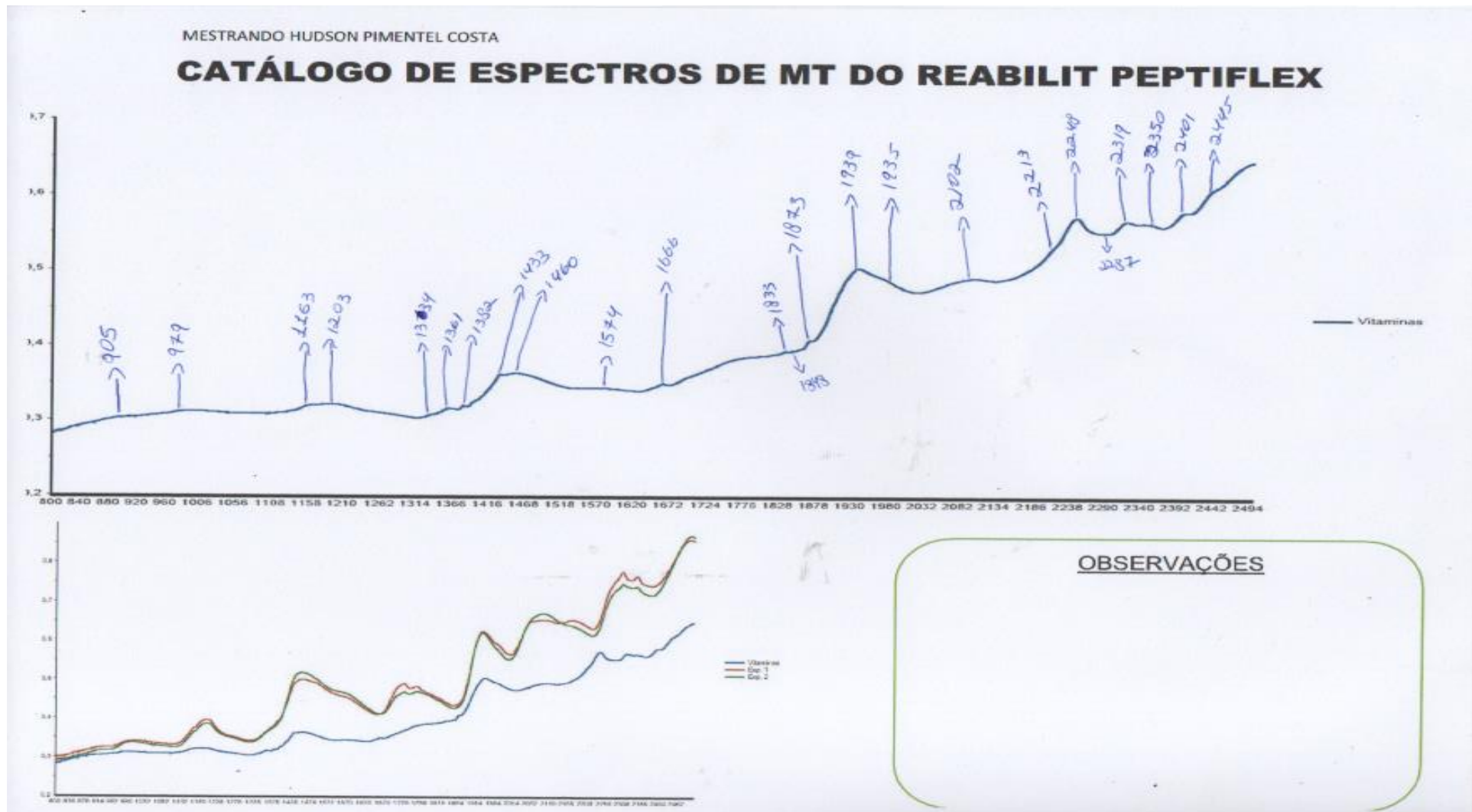
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo

Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
889	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (4v), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos, metil
1002	Amina aromática primária N-H (o-NO <sub>2</sub> )	Amina aromática primária assimétrica N-H (3v) em CCl <sub>4</sub> como substituinte orto-NO <sub>2</sub>	Amina aromática
1120	C-H aromático (ARCH)	C-H (3v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
1142	C-H aromático (ARCH)	C-H (3v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
1162	C = O (Carbonil > C = O)	C = O (5v)	Hidrocarbonetos alifáticos
1219	C-H Metileno (.CH <sub>2</sub> )	C-H (3v), .C-H <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1335	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1360	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1490	N-H amida NH ou .NH <sub>2</sub>	N-H (2v), ArNH <sub>2</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1583	Banda de alongamento O-H, álcoois alquílicos ou água	Combinação νO-H e δO-H relatada na literatura a partir de espectros de copolímeros de etileno-álcool vinílico, provavelmente melhor atribuídos como 2νO-H	Amida / proteína Álcoois ou água O-H
1644	C-H do grupo vinil como (CH <sub>2</sub> = CH-)	Grupo de vinil pendente C-H da unidade 1,2 para poli (acrilonitrila-co-butadieno) carboxilado líquido [ou borracha nitrílica (NBR)]	C-H do grupo associado ao vinil
1661	C-H Metil C-H, OH associado como (ROHCH <sub>3</sub> )	C-H metil, OH associado a ROHCH <sub>3</sub>	Álcoois, Dióis
1680	C-H aromático (ARCH)	C-H (2v), C-H aromático	Hidrocarbonetos aromáticos
1706	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	C-H (2v), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos Metílicos
1733	C-H Metil C-H, éter associado como (R-O-CH <sub>3</sub> )	C-H metil, éter associado como R-O-CH <sub>3</sub>	Éteres
1752	C-H (2v) de silicone	Estiramento C-H (2v) a partir de silicone (dimetil siloxano)	C-H a partir de silicone (dimetil siloxano)
1843	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo .C-Cl)	C-Cl (7v), .C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1977	Combinação N-H, amina aromática primária (o-OCH <sub>3</sub> )	N-H (combinação νN-H & δN-H), amina aromática primária em CCl <sub>4</sub> como substituinte orto-OCH <sub>3</sub>	Amina aromática
2120	N-H / C-N de gama-Valerolactona	N-H / C-N [combinação de deformação νN-H e amida III (alongamento C-N / flexão no plano de N-H)] para gama-Valerolactona	gama-Valerolactona
2166	C-H aromático C-H (aril)	CCv + CHv (16 + 5), atribuição de banda de benzeno	C-H Aril
2218	Banda de combinação N-H da uréia (NH <sub>2</sub> -C = O - NH <sub>2</sub> )	Combinação N-H (νN-H assimétrica e balanço de NH <sub>2</sub> )	N-H da uréia
2241	CHO - Instrumento de filtro clássico	Instrumento de filtro clássico	Referência (clássica)



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação



## APÊNDICE B – CARACTERIZAÇÃO DE ESPECTROS CORRELACIONADOS COM SEUS GRUPOS FUNCIONAIS

... Continuação

<b>VITAMINAS E MINERAIS</b>			
Correlações espectro-estruturais para infravermelho próximo			
Nanômetros (nm)	Grupo Funcional	Estrutura do Espectro	Tipo de Material
905	C-H Metil	(.CH <sub>3</sub> ) C-H (4v), .CH <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos, metil
979	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H (3v) - 2 v1 + v3	Água
1163	C = O (Carbonil) > C = O)	C = O (5v)	Água
1203	O-H da água a cerca de 0 ° C	O-H, .O-H - v1 + v2 + v3	Hidrocarbonetos alifáticos
1334	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Água
1361	C-H Metil (.CH <sub>3</sub> )	Combinação C-H, .C-H <sub>3</sub>	Hidrocarbonetos alifáticos
1382	C-H Metil C-H, associado ao CH <sub>3</sub> (CH <sub>2</sub> ) N CH <sub>3</sub> alifático linear	Combinação C-H (2vSCH <sub>3</sub> e δCH <sub>3</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos
1433	Amina aromática primária N-H (o-NO <sub>2</sub> )	N-H (2v) amina aromática primária assimétrica em CCl <sub>4</sub> como substituinte orto-NO <sub>2</sub>	Amina aromática
1460	N-H amida .NH ou .NH <sub>2</sub>	N-H (2v), simétrico	Urea
1574	Combinação ligada N-H da poliamida 11	N-H [estiramento de NH ligado e 2x combinação de deformação de Amida II (flexão de N-H no plano)] da poliamida 11	Poliamida 11
1666	C-H Metil C-H, OH associado como (ROHCH <sub>3</sub> )	C-H metil, OH associado a ROHCH <sub>3</sub>	Álcoois, Dióis
1833	Combinação O-H / C-H	Combinação de alongamento O-H e alongamento C-O (3vS)	Celulose
1848	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo .C-Cl)	C-Cl (7v), .C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1873	Produtos orgânicos clorados C-Cl (grupo .C-Cl)	C-Cl (7v), .C-Cl	Hidrocarbonetos clorados
1939	O-H Água a cerca de 0 graus C	O-H (2v), .O-H - v2 + v3	Água
1935	Combinação N-H, amina aromática primária (p-CH <sub>3</sub> )	N-H (combinação vN-H & δN-H), amina aromática primária em CCl <sub>4</sub> como agrupamento para-CH <sub>3</sub>	Amina aromática
2102	O-H / C-O Polimérico (.O-H & .C-O)	Combinação O-H flexão e alongamento C-O	Polissacarídeos (glicose)
2213	C = combinação O / C-N / N-H da poliamida 11	C = O / C-N / N-H [combinação de 2 x amida I (2vC = O) e amida III (combinação C-N / alongamento N-H) da poliamida 11	Poliamida 11
2248	CHO - Filtro clássico	instrumento de filtro clássico	Referência (clássica)
2287	CONH <sub>2</sub> especificamente devido a C = O hidrogênio ligado ao N-H do link peptídico denominado estrutura α-hélice	CONH <sub>2</sub> especificamente devido à estrutura do peptídeo α-helix	Proteínas como espectros normalizados da segunda derivada de proteínas em solução aquosa
2319	C-H Metileno C-H, associado a RC alifático ramificado (CH <sub>3</sub> ) <sub>3</sub> ou RCH (CH <sub>3</sub> ) <sub>2</sub>	Combinação C-H (alongamento assimétrico 2vCH <sub>2</sub> & δCH <sub>2</sub> )	Hidrocarbonetos alifáticos