

## Detecção de Adulteração em Creatina e Whey Protein utilizando Espectroscopia MIR com Modelagem PLS, SVR e TensorFlow

HELFER, Gilson A.<sup>a\*</sup>(PQ); KONRATH, Matheus<sup>a</sup>(PG); SANTOS, Henyo N.<sup>a</sup>(PG); RODRIGUES, Lucas<sup>a</sup>(PG); ABICH, José<sup>b</sup>(IC); AVELAR, Eduarda L.<sup>b</sup>(IC); SCHWIN, Cauã J.<sup>b</sup>(IC); SANTOS, Roberta O.<sup>a</sup>(PQ); COSTA, Adilson B.<sup>a</sup>(PQ)

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

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

\*ghelfer@unisc.br

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

### INTRODUÇÃO

A crescente utilização de suplementos como creatina e Whey Protein no Brasil destaca a necessidade de estratégias eficazes de controle de qualidade, principalmente contra adulterações econômicas, como a adição de amido [1]. Este estudo avaliou a espectroscopia no infravermelho médio (MIR) combinada com métodos de aprendizagem de máquina para detectar e quantificar adulterações por amido em suplementos. Foram preparadas amostras com 10% a 100% de adulterante, homogeneizadas, peneiradas (<0,08 mm) e armazenadas em tubos de polietileno de 50 mL. A homogeneização final foi feita com auxílio de misturador vórtex. Os espectros de infravermelho foram obtidos em triplicata com espectrofotômetro FTIR (PerkinElmer Spectrum 400, EUA), usando ATR-FTIR, resolução de 4 cm<sup>-1</sup>, 16 varreduras por amostra, na faixa de 660 a 4000 cm<sup>-1</sup>. Foram desenvolvidos modelos de regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS), Vetores de Suporte para Regressão (SVR) e uma rede neural Perceptron Multicamadas (MLP) [2][3]. O modelo MLP foi implementado com TensorFlow/Keras v2.14, apresentando arquitetura com duas camadas ocultas de 64 neurônios e ativação ReLU, e uma camada de saída linear. O treinamento foi realizado com 200 épocas e lote de 4 amostras, utilizando a função de perda MSE e otimizador RMSprop. As regressões PLS e SVR foram implementadas com Scikit-learn 1.5.2, sendo aplicadas diferentes estratégias de pré-processamento espectral [4][5].

### RESULTADOS E DISCUSSÃO

A espectroscopia no infravermelho médio mostrou-se eficaz na detecção de adulterações em creatina e *Whey Protein*. O modelo que combinou SNV, Savitzky-Golay (janela de 9 pontos) e centrimento na média apresentou o melhor desempenho entre os avaliados para PLS, SVR e TensorFlow. O modelo PLS com 6 variáveis latentes apresentou o melhor desempenho geral, com R<sup>2</sup> > 0,99 e os menores erros de calibração (RMSEC: 0,62% para creatina e 0,32% para *Whey*). No entanto, observou-se maior erro de validação cruzada (RMSECV), especialmente para creatina (7,11%). O TensorFlow teve bom ajuste (R<sup>2</sup> = 0,99), mas maior erro em calibração e validação para creatina. O SVR se

destacou pelos menores valores de RMSECV (4,89%), mas teve pior desempenho para *Whey* (8,55%). Os modelos desenvolvidos por PLS apresentaram resultados mais robustos, de acordo com a Tabela 1.

Tabela 1. Resultados para Creatina e Whey, respectivamente.

Modelagem	PLS	SVR	TensorFlow
R <sup>2</sup>	0,99   0,99	0,98   0,97	0,99   0,99
RMSEC, %	0,62   0,32	3,70   5,93	3,32   1,08
RMSECV, %	7,11   4,07	4,89   8,55	8,34   3,47
REP, %	1,41   0,74	8,34   13,38	8,12   2,51
RPD	57,8   110,7	9,76   6,09	9,99   32,43

A comparação entre os modelos foi realizada com o objetivo de avaliar a performance preditiva dos diferentes algoritmos frente ao problema de detecção e quantificação de adulterantes em suplementos alimentares. O PLS, linear e transparente, foi contrastado com SVR e MLP, não-lineares e mais complexos, porém menos interpretáveis. Embora todos os modelos tenham tido bom desempenho em R<sup>2</sup> e RMSE, o modelo PLS apresentou desempenho superior nas métricas complementares: REP% mais baixo, indicando menor erro relativo; RPD mais alto, sinalizando excelente capacidade preditiva. Foram também realizados o teste de EJCRC com 95% de confiança, onde o ponto ideal se encontrou dentro da elipse em todos os modelos, demonstrando a ausência de diferenças significativas entre os valores reais e os previstos.

### CONCLUSÕES

A espectroscopia MIR com modelagem PLS mostrou-se mais eficaz para detectar adulterações em suplementos, sendo uma alternativa rápida, limpa e viável para o controle de qualidade. Pesquisas futuras podem focar em aplicações com dispositivos portáteis para testes em campo.

### AGRADECIMENTOS

À Capes, Fapergs, CNPq e Unisc.

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