



# DETECÇÃO DE ADULTERAÇÃO EM CREATINA E WHEY PROTEIN UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA MIR COM MODELAGEM PLS, SVR e TENSORFLOW

VII Escola de Inverno  
de Quimiometria

29/jul à 01/ago - 2025  
Belo Horizonte - MG

Gilson A. Helfer <sup>a\*</sup> (PQ), Matheus Konrath <sup>a</sup> (PG), Henyo N. Santos <sup>a</sup> (PG),  
Lucas Rodrigues <sup>a</sup> (PG), José Abich <sup>b</sup> (IC), Eduarda L. Avelar <sup>b</sup> (IC), Cauã J.  
Schwin <sup>b</sup> (IC) Adilson Ben da Costa <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  
<sup>\*</sup>e-mail: ghelfer@unisc.br



## Introdução

A utilização de suplementos alimentares à base de creatina e proteína do soro do leite (*Whey Protein*) tem aumentado significativamente nos últimos anos, sendo o Brasil um dos principais mercados consumidores. Nesse contexto, o aumento expressivo no consumo reforça a importância do desenvolvimento de estratégias de controle de qualidade desses produtos, especialmente no que diz respeito à adulteração econômica, caracterizada pela substituição parcial ou total do suplemento por ingredientes de menor valor como o amido [1]. Este estudo teve como objetivo avaliar a aplicabilidade da espectroscopia no infravermelho médio (MIR), associada a métodos multivariados de calibração, para a detecção e quantificação da adulteração de creatina e proteína do soro do leite por amido.

## Materiais e Métodos

### Preparação das Amostras

Amostras com 10% a 100% de adulterante  
Armazenadas em tubos de 50 mL

### Homogeneização manual

Peneiradas (<0,08 mm)

Mistura final com vortex mixer

### Homogeneização Final

Espectros em triplicata, ATR-FTIR no PerkinElmer  
Spectrum 400, 4 cm<sup>-1</sup>, 16 varreduras, faixa 660–4000 cm<sup>-1</sup>

### Aquisição Espectral (FTIR)

SNV, Savitzky-Golay(1ª deriv., 2.ª ordem polin., janela 9 pontos)

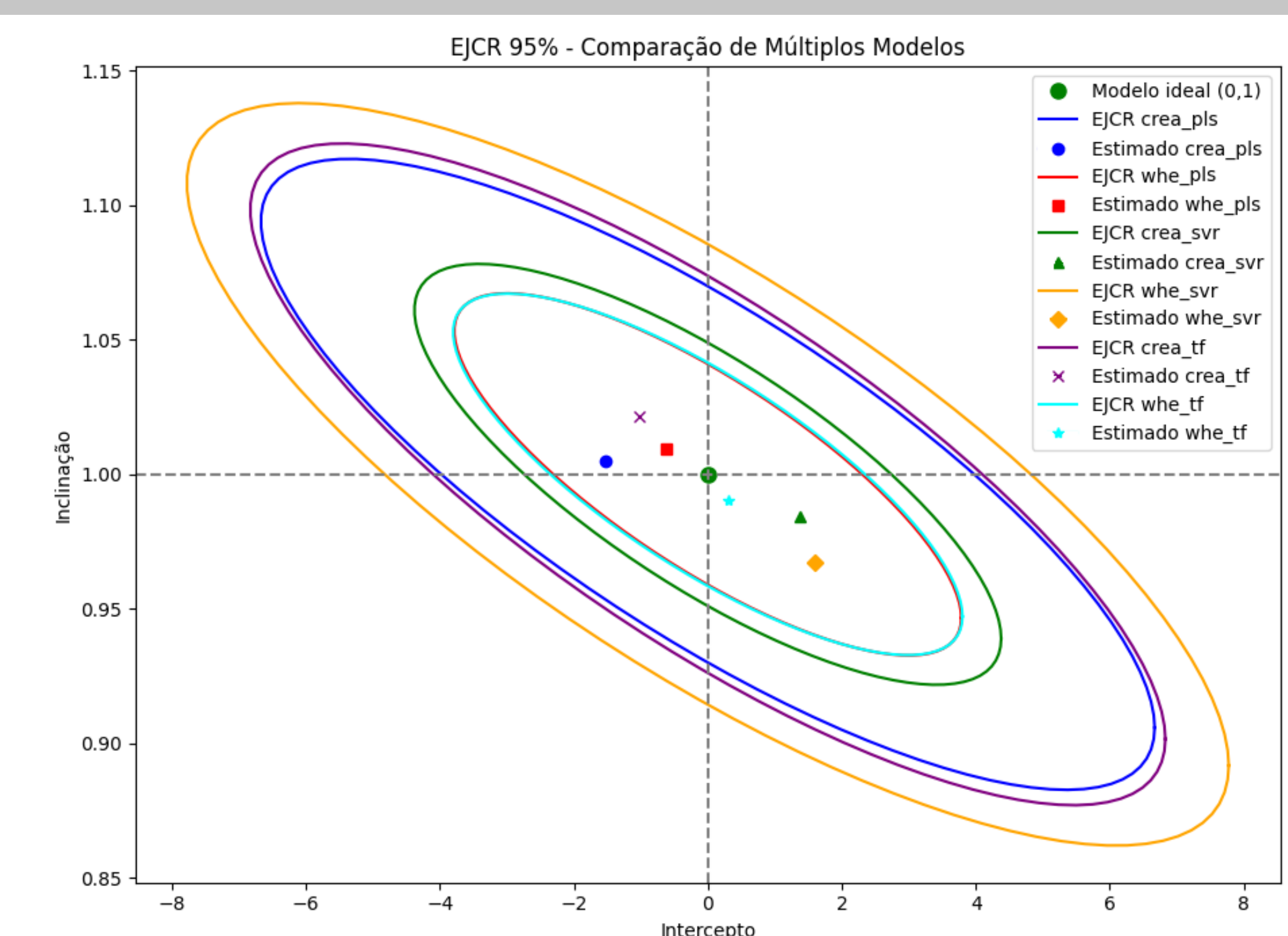
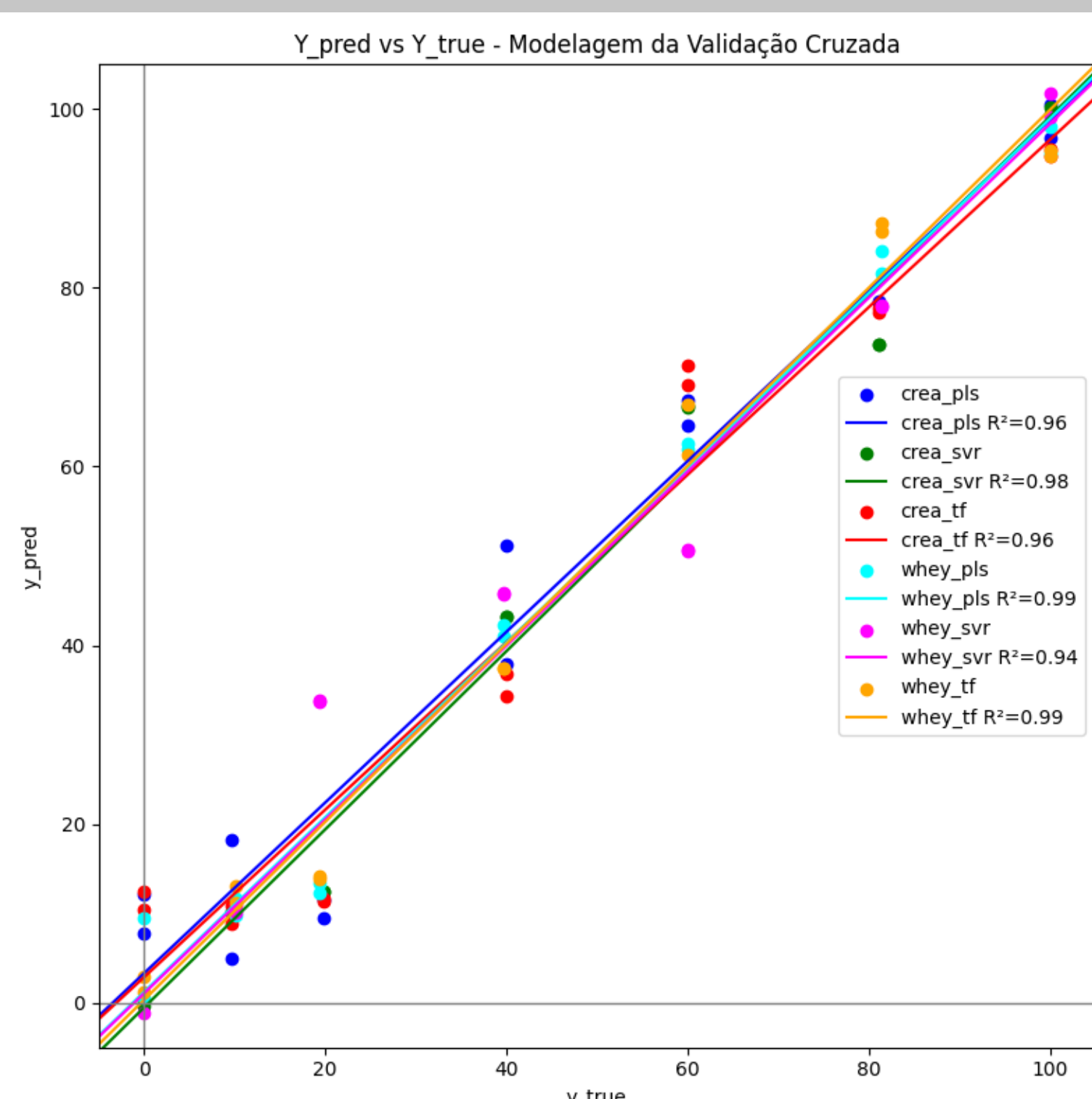
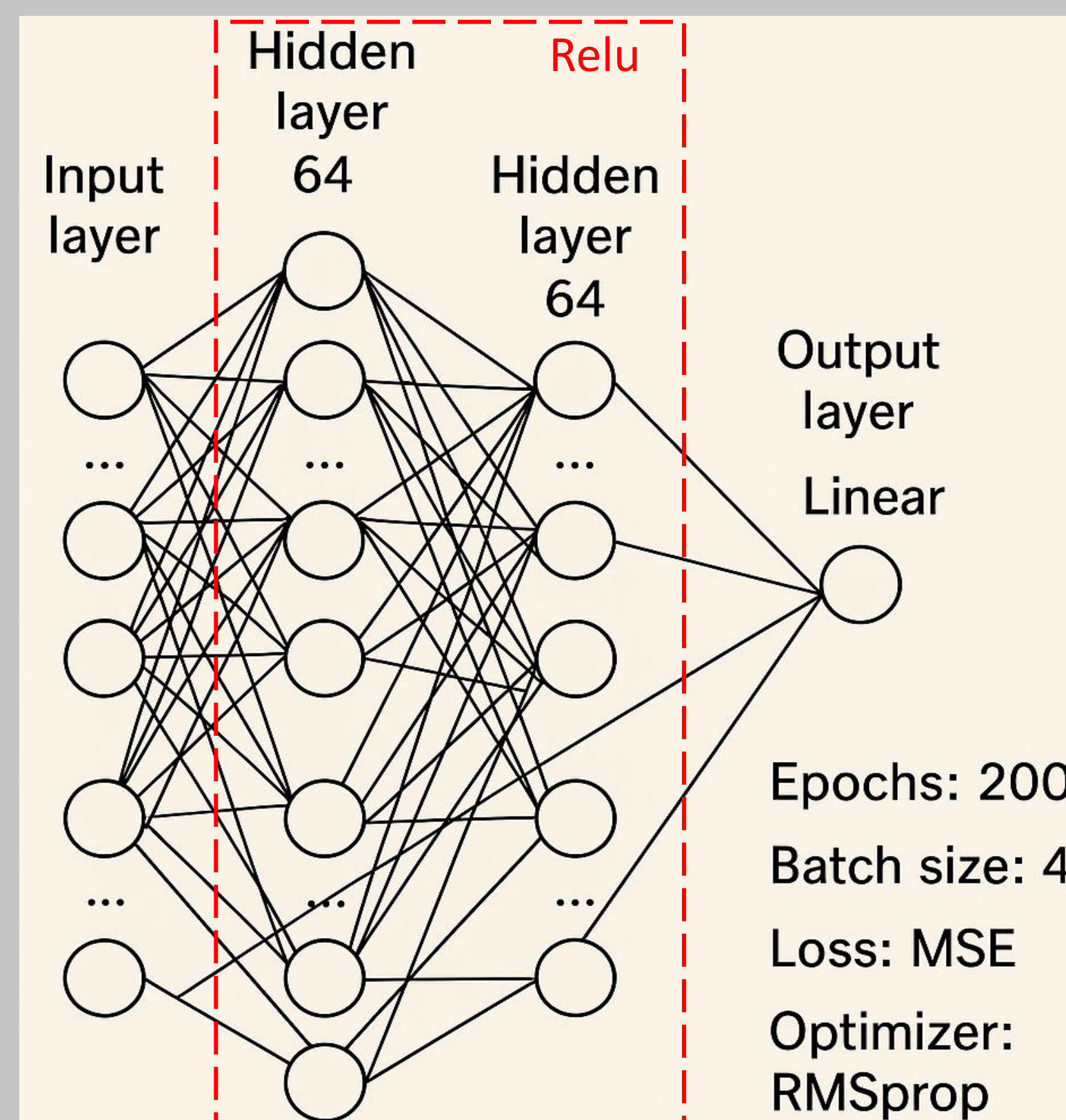
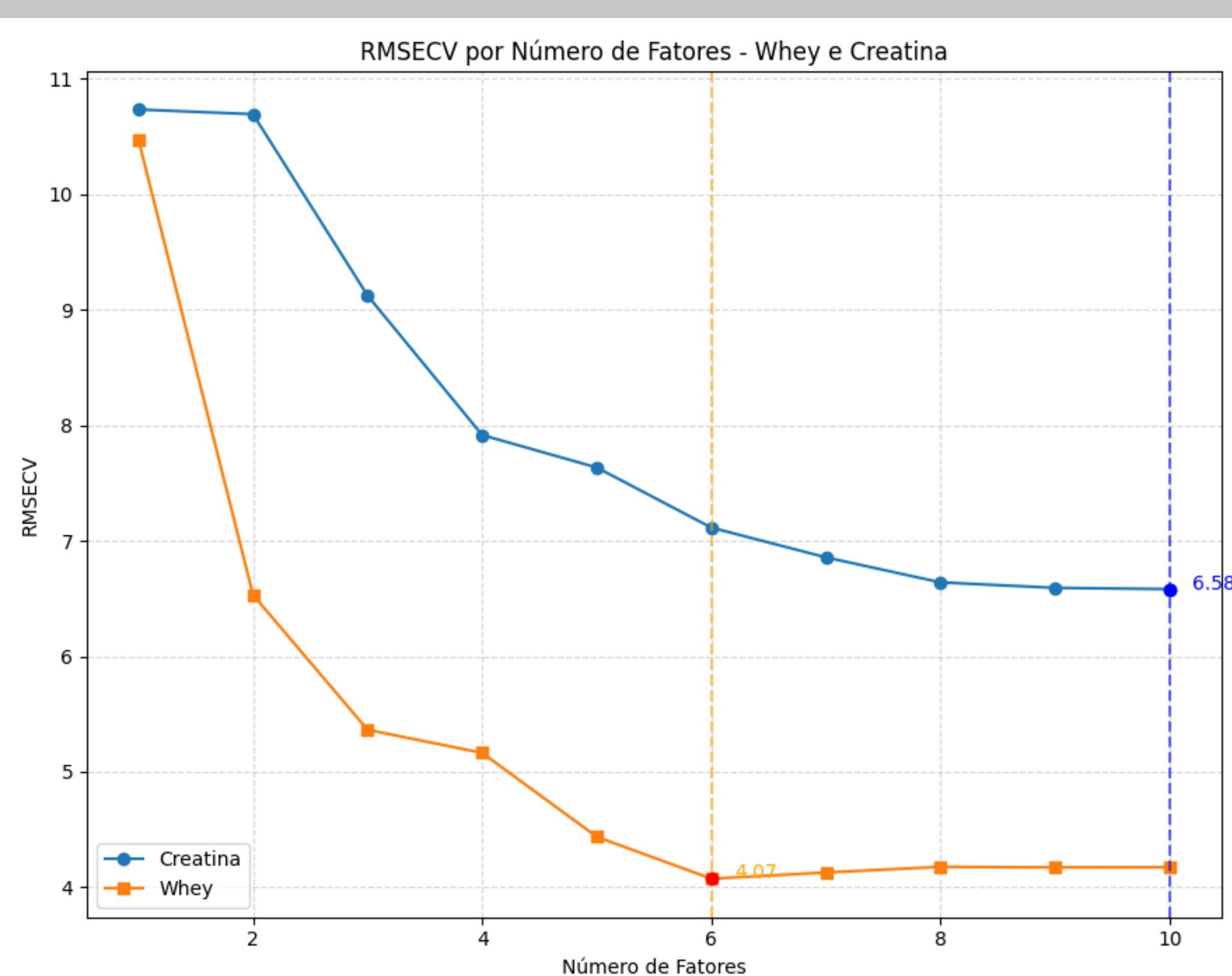
### Pré-processamento dados

### MLP (TensorFlow/Keras v2.14)

2 camadas ocultas:  
(64 neurônios, ReLU)  
Saída linear, 200 épocas  
Lote: 4 amostras  
Perda: MSE  
Otimizador: RMSprop

### PLS e SVR (Scikit-learn 1.5.2)

PLS: 6 fatores, centrado na média  
SVR: Kernel Polinomial



## Resultados

Os modelos de espectroscopia no infravermelho médio para detecção de adulterações em creatina e Whey Protein mostraram resultados promissores. O modelo PLS, utilizando 6 variáveis latentes, foi o mais eficaz, alcançando  $R^2 > 0,99$  e os menores erros de calibração (RMSEC de 0,62% para creatina e 0,32% para Whey). Em termos de validação, o modelo SVR apresentou os menores valores de RMSECV (4,89% para creatina), mas teve um desempenho inferior para Whey Protein (8,55%). O TensorFlow, apesar de um bom ajuste ( $R^2 = 0,99$ ), apresentou maiores erros em calibração e validação, especialmente para creatina. A análise dos testes complementares, como REP e RPD, indicou que o modelo PLS foi o mais robusto, com melhor desempenho preditivo geral. Além disso, os testes de EJC com 95% de confiança confirmaram a precisão dos modelos, sem diferenças significativas entre os valores reais e previstos de acordo com a Tabela 1.

**Tabela 1** – Resultados para os modelos de Creatina e Whey, respectivamente.

Modelagem	PLS	SVR	TensorFlow
$R^2$	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

## Conclusão

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. Futuras etapas da pesquisa poderão explorar a integração da análise espectral com dispositivos portáteis, visando a realização de testes *in loco*.

## Referências

- [1] <https://g1.globo.com/saude/noticia/2025/04/23/anvisa-resultados-deanalise-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, **2009**, 10, 28.
- [5] Ferreira, MMC. Quimiometria – Conceitos, Métodos e Aplicações. Campinas, SP: Editora da Unicamp, **2015**.



## Agradecimentos



Participe do teste fechado da  
versão **PhotoMetrix NEO**

Escaneie o QRCode e  
preencha o formulário!

Lançamento 2026/1

