FACULDADE REBOUÇAS

BACHARELADO EM FARMÁCIA

CLASSIFICAÇÃO DE XAROPES DE HEDERA HELIX COM AÇÚCAR E DIETÉTICO UTILIZANDO IMAGENS DIGITAIS E QUIMIOMETRIA

VANESKA SABINO SOARES DE ALMEIDA

Campina Grande

2022

VANESKA SABINO SOARES DE ALMEIDA

CLASSIFICAÇÃO DE XAROPES DE HEDERA HELIX COM AÇÚCAR E DIETÉTICO UTILIZANDO IMAGENS DIGITAIS E QUIMIOMETRIA

Trabalho de conclusão de curso na modalidade *artigo científico*, apresentado como requisito para obtenção do título de bacharel em Farmácia Generalista pela Faculdade Rebouças.

Orientador: Profª Drª. Welma Taíse Silva Vilar

Campina Grande

2022

VANESSA SABINO SOARES DE ALMEIDA

CLASSIFICAÇÃO DE XAROPES DE HEDERA HELIX COM AÇÚCAR E DIETÉTICO UTILIZANDO IMAGENS DIGITAIS E QUIMIOMETRIA

Trabalho de Conclusão de Curso na modalidade *Artigo Científico,* apresentado como requisito para obtenção do título de Bacharel em Farmácia pela Faculdade Rebouças.

DATA DA AVALIAÇÃO: 09 de dezembro de 2022.

BANCA EXAMINADORA:

Welma Thaise Silva Vilar

Profª. Drª. Welma Thaise Silva Vilar

(Oríentadora - Faculdade Rebouças)

Gerseuldo Pereira Rodrigues

(Examinador Interno - Faculdade Rebouças)

Jéssica Cabral de Andrade

Profª. Drª. Jessica Cabral de Andrade

(Examinadora Interna - Faculdade Rebouças)

AGRADECIMENTOS

Começo por agradecer a Deus por, ao longo deste processo complicado e desgastante, me ter feito ver o caminho, nos momentos em que pensei em desistir. Ele foi meu alicerce e minha âncora a quem devo a vida e a minha existência sem ele eu não conseguiria e não teria forças para alcançar esse sonho.

Deixo também um agradecimento especial aos meus professores, pois sem eles este trabalho de conclusão de curso não teria sido possível, em especial a minha orientadora Welma Vilar que foi peça ímpar e fundamental para que eu conseguisse concluir.

Aos meus pais, Lucilene Sabino e Valter Soares a quem eu devo a vida e todas as oportunidades que nela tive e que espero um dia poder lhes retribuir.

Ao meu esposo Carlos Almeida agradeço com muita alegria no coração pois sempre me apoiou e não me deixou desistir, e a minha filha Mirela Almeida que é peça fundamental e força maior que me impulsiona todos os dias para dar meu melhor e poder oferecer um futuro excelente.

Agradeço ainda aos meus amigos Angelica Santana e Luan Costa e familiares que ao longo desta etapa me encorajaram e me apoiaram, fazendo com que esta fosse uma das melhores fases da minha vida.

RESUMO

O diabetes mellitus é uma patologia que vem preocupando o cenário da saúde pública não apenas por ser considerado uma doença que atinge a grande maioria da população, mas também por sua repercussão nos gastos públicos, consequências sociais e no bem estar das pessoas. Com isso, os portadores dessa doença buscam cada vez mais medicamentos que não seja glicosado, principalmente no que diz respeito aos xaropes. A busca por medicamentos oriundos de plantas medicinais tem sido recorrente por parte da população. O mercado brasileiro proporciona uma grande variedade de xaropes fitoterápicos, com o aumento da disponibilidade desses xaropes, principalmente de xaropes com açúcar e dietético, surge a necessidade de uma inspeção que possa garantir sua qualidade, eficácia e segurança. Dessa forma, esse trabalho propõe o uso de imagens digitais acopladas com técnicas de reconhecimento de padrões para fornecer uma ferramenta rápida e confiável no controle de qualidade qualitativo de xaropes com hedera hélix quanto a presença ou não de açúcar. A análise discriminante linear (LDA) foi utilizada para o desenvolvimento de modelos de classificação com base em um subconjunto reduzido de variáveis. Para fins de seleção de variáveis, três técnicas foram utilizadas: o algoritmo das projeções sucessivas (SPA), stepwise (SW) e a otimização de colônia de formigas (AOC). Resultados satisfatórios foram obtidos principalmente utilizando LDA/SPA e LDA/AOC com uma taxa de classificação correta (TCC) de 100% de acerto, já o LDA/SW com uma TCC de 96,15%. Estes resultados sugerem que o método apresentado pode ser uma alternativa favorável para o controle de qualidade de xaropes com hedera hélix no que diz respeito a presença ou não de açúcar. Além disso, a metodologia é simples, de baixo custo, não utiliza reagente, não destrói a amostra e realiza a análise em um curto intervalo de tempo, contribuindo assim com a segurança e efetividade dos xaropes para pacientes com restrições ao uso de glicose.

Palavras-chave: Diabetes mellitus; Fitoterapia; Imagens digitais; Quimiometria; Xaropes.

ABSTRACT

Diabetes mellitus is a pathology that has been worrying the public health scenario, not only because it is considered a disease that affects the vast majority of the population, but also because of its impact on public spending, social consequences and people's well-being. As a result, people with this disease are increasingly looking for medications that are not glucose-containing, especially with regard to syrups. The search for medicines from medicinal plants has been recurrent among the population. The Brazilian market provides a wide variety of herbal syrups, with the increased availability of these syrups, especially sugar and dietetic syrups, the need arises for an inspection that can guarantee their quality, effectiveness and safety. Thus, this work proposes the use of digital images coupled with pattern recognition techniques to provide a fast and reliable tool in the qualitative quality control of syrups with hedera helix regarding the presence or absence of sugar. Linear discriminant analysis (LDA) was used to develop classification models based on a reduced subset of variables. For variable selection purposes, three techniques were used: the successive projections algorithm (SPA), stepwise (SW) and ant colony optimization (AOC). Satisfactory results were obtained mainly using LDA/SPA and LDA/AOC with a correct classification rate (TCC) of 100% of success, since the LDA/SW with a TCC of 96.15%. These results suggest that the presented method can be a favorable alternative for the quality control of syrups with hedera helix regarding the presence or absence of sugar. In addition, the methodology is simple, inexpensive, does not use reagents, does not destroy the sample and performs the analysis in a short period of time, thus contributing to the safety and effectiveness of syrups for patients with restrictions on the use of glucose.

Keywords: Diabetes mellitus; Phytotherapy; Digital images; Chemometrics; Syrups.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....01

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....03

2.1 Xaropes fitoterápicos.....03

2.2 Hedera Helix.....04

2.3 Controle de Qualidade de Fitoterápicos.....05

2.4 Imagens digitais.....05

2.4.1 Histogramas.....07

2.5 Quimiometria.....08

2.5.1 Reconhecimento de Padrões Não Supervisionado.....08

2.5.2 Análise por Componentes Principais (PCA).....09

2.5.3 Reconhecimento de Padrões Supervisionado.....09

3. METODOLOGIAS.....11

3.1 Sistema de imagens.....11

3.2 Análises Quimiométricas.....13

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....15

4.1 Histograma.....15

4.2 Análises de componentes principais.....16

4.3 Métodos de Reconhecimento de Padrões Supervisionados.....17

4.4 Comparação das metodologias de classificação.....19

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....20

REFERÊNCIAS.....21

1. INTRODUÇÃO

Diabetes Mellitus (DM) é uma doença caracterizada pela ação ou secreção de um hormônio chamado insulina e que é produzido pelo pâncreas, causando a elevação de insulina no sangue. Seu diagnóstico se baseia nas alterações de glicose plasmática em jejum ou após receber uma sobrecarga de glicose por via oral, as classificações do diabetes são: diabetes tipo 1, diabetes tipo 2, diabetes gestacional e outros tipos específicos (GROSS *et al.*, 2002).

O número de portadores de DM tem crescido mais rapidamente em países pobres e em plena vida produtiva, o que gera a importância de serem realizados exames periódicos (DE CARVALHO; ALVES, 2018).

Pessoas com restrições alimentares e que precisam reduzir ou excluir algumas substâncias devem ficar atentas aos rótulos e observar se apresentam em sua composição o açúcar (DE CARVALHO; ALVES, 2018).

Muitos medicamentos líquidos apresentam açúcares em sua composição a fim de mascarar o gosto desagradável de algumas formulações. Dentre esses açúcares, pode-se destacar a utilização da sacarose (SANTINHO; WALDOW; SANTOS, 2008).

No Brasil o xarope de frutose é obtido através da hidrólise da sacarose e concentrado a 86% em frutose, que por sua vez é muito utilizada em produtos integrados ao mercados de bebidas, laticínios, geleia, panificação e na forma cristalina na indústria farmacêutica (ESTELLER *et al.*, 2004).

Existem, ainda, os xaropes produzidos com os derivados das plantas medicinais. Dentre diversas plantas medicinais usadas no Brasil destaca-se a Hedera Helix L. um produzidos fitoterápico broncodilatador e expectorante e que apresenta distintas composições em termo de quantidade do extrato seco e marcador por mL (OGNIBENE; MARQUES, 2012).

Apesar do controle de medicamentos ser muito rígido no Brasil, na literatura são encontradas adulterações de medicamentos, principalmente quando se trata dos fitoterápicos, uma vez que a fiscalização não é tão rígida frente a outros medicamentos (RDC-26/2014 / RDC 301/2019)

O controle de qualidade de medicamentos muitas vezes utiliza metodologias onerosas, laboriosas, que necessitam de pré-tratamento para análise e de elevado custo (SHAWKY; EL SOHAFY, 2020). Portanto, surge a necessidade de metodologias que sejam confiáveis, rápidas e não destrutivas.

Diante desse cenário, o presente trabalho tem o objetivo de classificar xaropes com açúcar e dietéticos, através de imagens digitais e técnicas de reconhecimento de padrões supervisionadas, pois é uma análise simples, rápida, não destrutiva e de baixo custo.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Diabetes Mellitus é uma doença que resulta de defeitos e ações da insulina e está associado a resistência à insulina, obesidade, dislipidemias e hipertensão arterial o tratamento atual visa diminuir a resistência à insulina e melhorar a função da célula beta pancreática com dietas, exercícios físicos e hipoglicemiantes (GROSSI; PASCALI, 2000).

A atividade física é muito importante no tratamento do DM pois contribui para melhorar a qualidade de vida do paciente e seus benefícios em curto e longo prazo contribuem para diminuir os fatores de riscos a doenças cardiovasculares (MERCURI; ARRECHEA, 2001).

A presença de depressão em portadores de diabetes mellitus (DM), está associado a alterações neuroquímicas e hormonais que teriam efeitos hiperglicemiantes e poderiam acarretar distúrbios no metabolismo glicêmico (MOREIRA *et al.*, 2003).

2.1 Xaropes Fitoterápicos

A utilização de fitoterápicos tem como base a tradição popular onde se diz erroneamente que esses medicamentos não possuem reações adversas, porém, se não forem usados de forma adequada pode gerar efeitos nocivos para o organismo, por isso se torna indispensável a farmacovigilância (ABREU; MOURA, 2014).

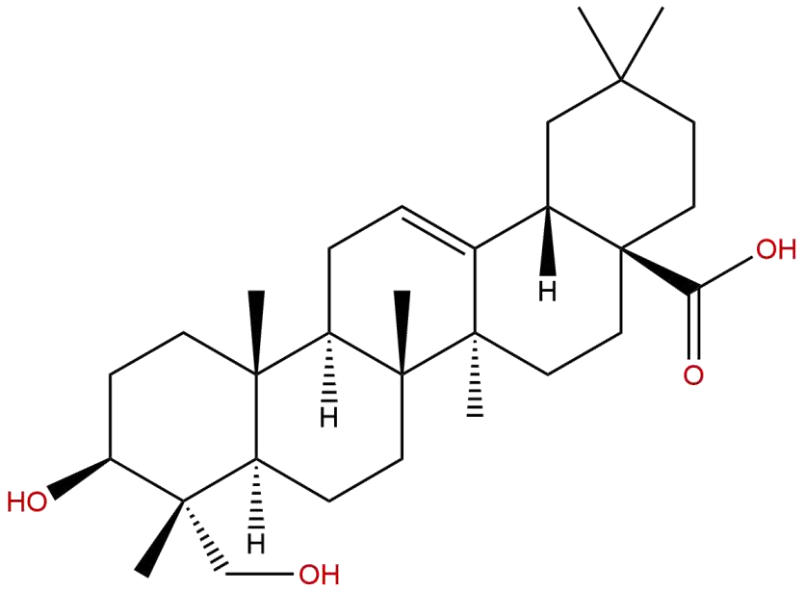
Os fitoterápicos são produzidos a partir de drogas vegetais por ensaios clínicos e não clínicos para que seja avaliada sua eficácia e segurança. Agência Nacional de Vigilância Sanitária (Anvisa), dispõe sobre as boas práticas de fabricação de medicamentos e tem por objetivo documentar os procedimentos de manipulação, armazenamento, transporte e comercialização, visando garantir a segurança e a qualidade aos consumidores (DE CARVALHO; ALVES, 2018).

Formulações farmacêuticas aquosas com altas concentrações de açúcar ou algum adoçante substituto, e também podem conter flavorizantes, que são agentes que conferem um aroma característico à formulação e ao princípio ativo. De acordo com Lubi; Sato & Gaensly (2003), esta fórmula farmacêutica é amplamente empregada em formulações expectorantes, mas possui muitos pacientes com restrições quanto ao uso de sacarose, desta forma, faz-se necessário formulações isentas de açúcar, mas com propriedades edulcorantes e viscosidades semelhantes a esta.

2.2 Hedera Helix

O gênero Hedera Helix (Figura 1) ou Hera pertence à família Araliaceae com origem na Europa, Ilhas Canárias, ÁSIA e África é uma planta de textura semi lenhosa, com ramos longos e reptantes suas raízes adventícias e folhagem verde escura, a floração aparece mais no verão e deve ser cultivada em solo fértil é rica em matéria orgânica sob sol e irrigada periodicamente (MAGELA, 2019).

Figura 1. Estrutura molecular da Hedera Hélix.



Fonte: Biopurify Chengdu (2015).

Quando Hedera Helix está presente nas composições de medicamentos fitoterápicos ele pode ser utilizado para tratar tosses secas ou produtivas seus efeitos terapêutico se dá a partir das saponinas presente no extrato seco da folha, que apresenta dupla ação broncodilatadora e mucolítica ambas eliminam a secreção que obstrui as vias aéreas (MAGELA, 2019).

O Hedera Helix possui atividade antioxidante, antiproliferativa, antiespasmódica e antialérgica é uma espécie de planta que possui como constituintes químicos alcaloides, terpenos, saponinas e taninos, os extratos são bem tolerados para crianças e adultos que sofrem de doenças agudas ou crônicas obstrutivas (ALVES; ARAÚJO; OLIVEIRA, 2021).

A hederina por sua vez é o principal composto ativo farmacológico dos extratos secos de hera, aumentando a responsividade de β2-adrenérgica em células alveolares tipo II e células do músculo liso das vias aéreas humanas α-hederina inibe a internalização dos receptores β2-adrenérgicos mesmo sob condições estimulantes (ALVES; ARAÚJO; OLIVEIRA, 2021).

2.3 Controle de qualidade de fitoterápicos

O uso de fitoterápicos na população em geral tem sido recorrente, portanto, o controle de qualidade nesses tipos de medicamentos se torna indispensável. Portanto, um controle de qualidade eficiente é importante uma vez que a presença de açúcar em xaropes que são dietéticos podem ser prejudiciais à saúde do consumidor (CARMO; NOGUEIRA; SILVA, 2022).

Barros, (2017), estudou o xarope de guaco cientificamente conhecido como *Mikania glomerata*. Onde o teor de cumarina foi avaliado em amostras comerciais de xarope utilizando imagens digitais, e foram comparados os resultados com a metodologia utilizando cromatografia líquida de alta eficiência (HPLC). Como resultados, foi encontrado um valor discrepante ao teor de cumarina que continha no rótulo dos produtos comercializados.

Shawky & El Sohafy, (2020), estudaram o perfil químico usando teste de atividade, antioxidante e antimicrobiano da hedera hélix utilizando impressões digitais de Cromatografia de camada fina de alto desempenho (HPTLC) acopladas com quimiometria. Portanto, com uma análise de componentes principais (PCA) já foi possível observar que diferentes lotes de hedera hélix foram agrupados em sua classe.

Ormond; Fernandes & Diniz, (2022), utilizaram um sistema de aquisição de imagens para o controle de qualidade de *Mikania glomerata*, utilizando associada o *Data-Driven Soft Independent Modeling of Class Analogy* (DD-SIMCA) para autenticar xaropes sem açúcar. Em sequência foi quantificado o teor de cumarina no xarope. O processamento com imagens digitais atingiu uma sensibilidade de 100% e o teor obteve um R quadrado de 0,99, o que demonstrou que o estudo baseado em imagens digitais pode ser eficiente para análise de xaropes fitoterápicos.

É importante ressaltar que nenhum trabalho demonstrando o controle de qualidade de xaropes a base de hedera hélix com açúcar e sem açúcar utilizando imagens digitais e quimiometria foram encontrados na literatura.

2.4 Imagem digital

A imagem digital é a conversão de uma cena real tridimensional em uma imagem analógica (representação eletrônica). Para que isso ocorra são necessárias duas etapas a aquisição da imagem, sua digitalização e decomposição em modelos de cores (FRANÇA, 2020).

Esses modelos de cores podem ser representados por histogramas, que são conjuntos de números apresentados por um gráfico de barras, fornecendo o percentual de pixels em uma

imagem, que mostra um dado valor de cor ou de intensidade. Eles fornecem diversas informações, qualitativas e quantitativas, como os de níveis cinza, presença de pixels claros ou escuros, se a imagem apresenta ruídos entre outros (SANCHES, 2009).

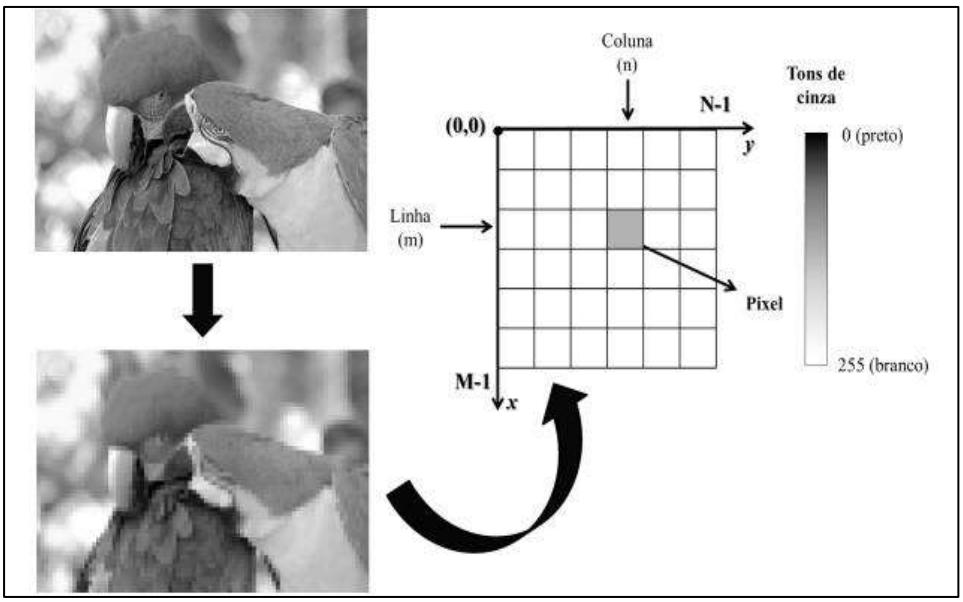
Uma imagem digital é a representação bidimensional que utiliza números binários codificados de modo que permita a armazenagem, transferência, impressão, reprodução e processamento por meios eletrônicos (MARQUES FILHO; VIEIRA NETO, 1999).

A imagem analógica, monocromática ou colorida, capturada por algum dispositivo eletrônico, só pode ser processada pelos computadores, por meio de matrizes com números digitais. Por isso, a imagem analógica precisa ser convertida em imagem digital a partir da construção de uma matriz M por N pontos, em que cada ponto dessa matriz é chamado de pixel (EUSTÁQUIO; QUEIROZ; GOMES, 2001).

Um pixel é a menor unidade de uma imagem digital, geralmente em formato quadrado, e que descreve a cor e o brilho característico de uma célula de imagem. Em uma imagem digitalizada cada pixel tem um valor numérico, correspondendo ao nível de sinal naquele ponto (MILANEZ, 2013).

Uma imagem analógica monocromática quando convertida a imagem digital gera uma matriz em que cada ponto representa o nível de cinza da imagem naquele ponto. Se os valores de M e N são elevados, pode-se afirmar que a imagem possui alta resolução, ou seja, existe um grande número de pixels e, portanto, maior será a qualidade da imagem (Figura 2).

Figura 2. Imagem monocromática e sua representação em imagem digital.



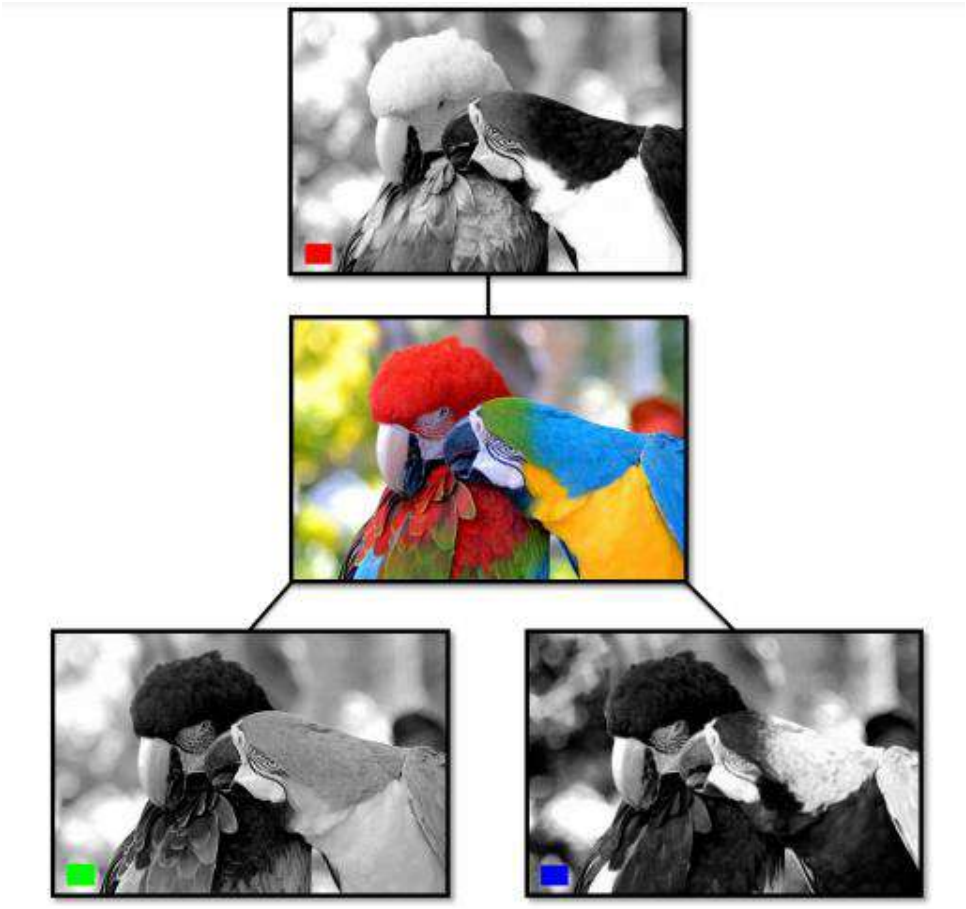
Fonte: Gonçalves (2015).

Já para imagens coloridas, pelo sistema RGB, um pixel é considerado um vetor e a imagem é decomposta em três imagens monocromáticas, em que cada banda representa as intensidades de vermelho, verde e azul de sua cor (Fig. 3). Uma representação matemática desse conceito é expressa na Eq. 1, abaixo:

$$f(x,y) = f_r(x,y) + f_g(x,y) + f_b(x,y) \quad (1)$$

Onde, $f_r(x,y)$, $f_g(x,y)$ e $f_b(x,y)$ representam as intensidades das componentes das cores vermelha, verde e azul, respectivamente.

Figura 3. Os três planos monocromáticos de uma imagem, separadamente, e a imagem colorida resultante da composição desses três planos.



Fonte: Gonçalves (2015).

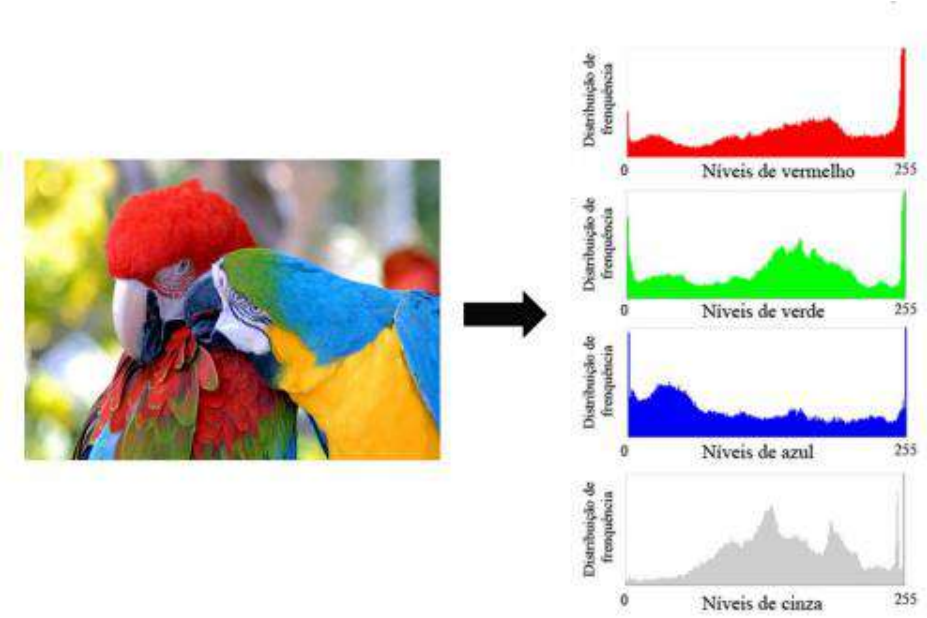
2.4.1. Histogramas

O histograma é a representação gráfica da distribuição de frequências de valores de um pixel, ou seja, é percentual de pixels naquela imagem que apresenta um dado valor de

intensidade, ou de cor. Para uma imagem na escala de cinza, por exemplo, o histograma apresenta o número de vezes que o valor de cinza (0-255) existente na imagem (EUSTÁQUIO; QUEIROZ; GOMES, 2001; MARQUES FILHO; VIEIRA NETO, 1999; MILANEZ, 2013).

O conceito de histograma também é aplicado a imagens coloridas (Fig. 4). A imagem é transformada nos canais R, G e B, por exemplo, e para cada um é calculado um histograma adequado.

Figura 4. Histogramas referentes a distribuição de frequência de todos os possíveis valores de um pixel nos níveis de cinza, vermelho, verde e azul de uma imagem.



Fonte: Gonçalves (2015).

2.5 Quimiometria

A quimiometria é a aplicação de um conjunto de procedimentos matemáticos e estatísticos utilizando dados provenientes de análises químicas; solucionando, desta forma, problemas de interesse e origem na química (TOBIAS *et al.*, 1999).

As principais áreas abordadas na quimiometria são planejamento e otimização de experimentos, calibração multivariada e técnicas de reconhecimento de padrões não supervisionados ou supervisionados (NUNES, 2008).

2.5.1 Reconhecimento de Padrões Não Supervisionado

Com o objetivo de avaliar a presença de agrupamentos naturais existentes entre os grupos de amostras utiliza-se as técnicas de reconhecimento de padrões não supervisionadas. A

aplicação dessas técnicas aos conjuntos de dados não requer um conhecimento prévio dos membros das classes em questão. Métodos como a Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA) e a Análise por Componentes Principais (PCA) são amplamente aplicadas no contexto dos problemas analíticos de classificação. Neste trabalho, apenas a PCA foi empregada.

2.5.2 Análise por Componentes Principais (PCA)

A analise por componentes principais (PCA) é um método utilizado para observar se existe algum agrupamento natural ou se existe alguma semelhança entre as amostras. Para que isto ocorra acontece uma manipulação matemática na matriz dos dados de certa forma que haja uma redução na quantidade de variáveis, porém uma maior quantidade de informação é mantida com a finalidade de representar as variações presentes em um número menor de fatores (CORREIA; FERREIRA, 2007).

A PCA é bastante utilizada para identificar amostras anômalas (outliers), verificar a contribuição das variáveis, verificar a contribuição das variáveis originais no novo conjunto de variáveis obtido, entre outros (MOITA NETO; MOITA, 1998).

2.5.3 Reconhecimento de Padrões Supervisionado

Para a utilização das técnicas de reconhecimento de padrões supervisionados é necessária uma informação adicional sobre os membros da classe. Modelos são construídos, com intuito de prever amostras desconhecidas. Em Química Analítica, métodos como o *Data-Driven Soft Independent Modeling of Class Analogy* (SIMCA, PLS-DA) e análises Discriminantes Linear (LDA) com prévia seleção de variáveis têm sido aplicados com frequência em diferentes técnicas e matrizes (BALLABIO; CONSONNI, 2013; ZIEGEL, 2001). Neste trabalho, foram abordados apenas os métodos LDA e a PLS-DA.

A técnica LDA baseia-se no cálculo de Funções Discriminantes (FDs), as quais maximiza a variância entre as classes e minimiza a variância entre os indivíduos de uma mesma classe. Para que isto seja possível, as FDs são obtidas a partir de combinações lineares das variáveis originais que discriminam melhor as classes ou grupos de objetos (PONTES, M. J. C., 2009).

A capacidade de generalização de modelos LDA pode ser prejudicada por problemas de colinearidade e seu uso é recomendado em dados de pequena dimensão. Para solucionar esse problema, necessita-se de procedimentos de seleção de variáveis e/ou de redução de dimensionalidade (NETO, 2008).

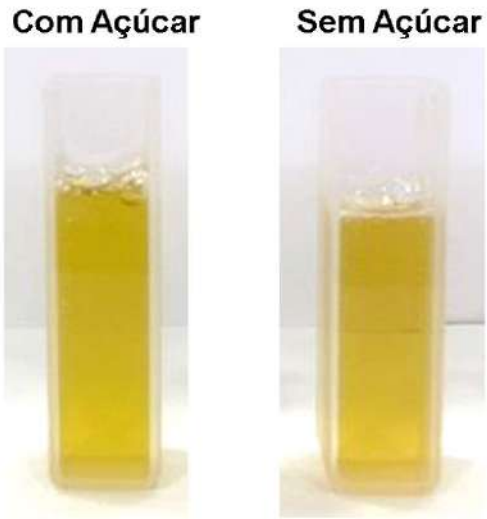
Para selecionar variáveis em modelos LDA, alguns métodos vêm sendo bastante utilizados, a saber: Algoritmo das Projeções Sucessivas (SPA) (PONTES, Márcio José Coelho

et al., 2005), Algoritmo Genético (GA) (LEARDI, 2007) e Stepwise (SW) (SOARES *et al.*, 2014), Otimização de colônia de formigas (AOC) (PONTES, Aline S. *et al.*, 2020).

3. METODOLOGIA

Foram adquiridos xaropes com açúcar e sem açúcar em várias farmácias da cidade de Campina Grande-PB. Com o intuito de agregar variabilidade e representatividade aos modelos, lotes e fabricantes diferentes foram escolhidos. Portanto, 56 amostras foram analisadas (Figura 5).

Figura 5. Imagem de comparação dos xaropes

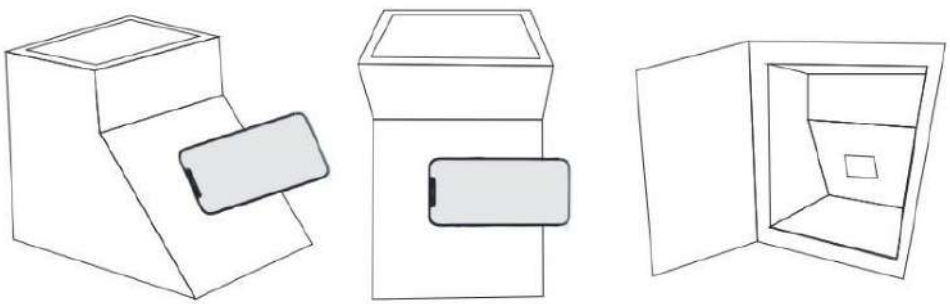


Fonte: Autoria Própria (2022).

3.1 Sistemas de Imagens

Foi desenvolvido em laboratório um sistema para aquisição das imagens composto de uma caixa de madeira, um smartphone e um *notebook*, conforme mostrado na Figura 6.

Figura 6. Representação de sistema de aquisição de imagens.



Fonte: Autoria Própria (2022).

Na Figura 7. são apresentadas as imagens obtidas dentro da caixa para xaropes com açúcar e sem açúcar respectivamente. A captura das imagens foi realizada por smartphone do tipo iPhone 11 e suas configurações padrão mantida

Tipo da câmera utilizada foi um câmera dupla:

- Ultra angular e grande-angular e 12 MP,
- Ultra angular abertura f/2,4 e campo de visão de 120
- Grande-angular; abertura f/1.8.
- Zoom digital até 5 x.
- Zoom out óptico de 2x
- Modo retrato com efeito boken avançado e controle de profundidade

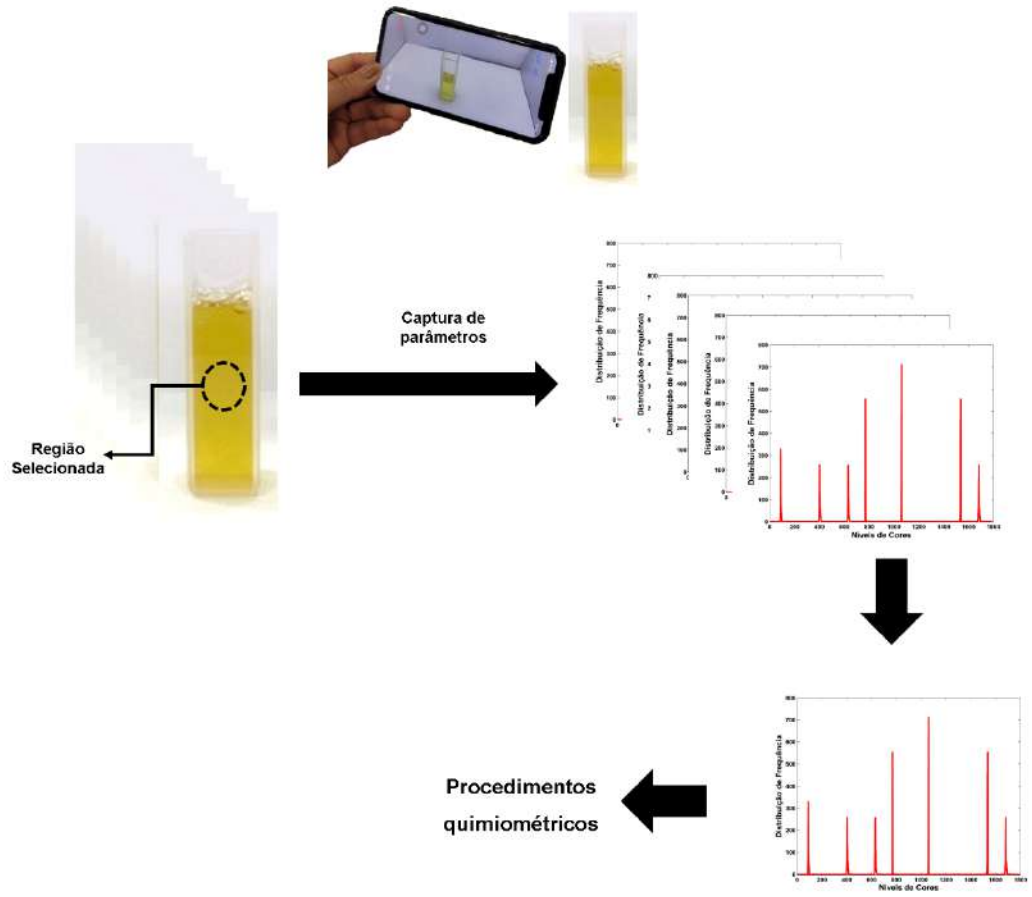
Figura 7. Imagem dos xaropes obtidas no sistema de imagens com o smartphone com açúcar e sem açúcar respectivamente.



Fonte: Autoria Própria (2022).

Foram registradas cinco imagens sequenciais para cada amostra e após a captura, cada imagem foi decomposta em histogramas correspondentes a uma região específica da imagem na parte inferior. Em seguida, calculou-se a média destes histogramas que por sua vez foi utilizada como resposta instrumental referente àquela amostra (Figura 8).

Figura 8. Procedimento para obtenção dos dados analíticos.



Fonte: Autoria própria (2022).

3.2 Análises Quimiométricas

Procedimentos quimiométricos foram utilizados para classificar xaropes de hedera hélix com açúcar e dietético. Antes de construir os modelos de classificação supervisionados, uma Análise de Componentes Principais (PCA) foi realizada para observar o comportamento exploratório das amostras, mas foi visto que não teríamos o resultado positivo.

Na construção dos modelos de classificação, os conjuntos de dados foram divididos em treinamento e teste (50% cada) utilizando o algoritm Kenard Stone (KENNARD; STONE, 1969).

Os subconjuntos de treinamento e validação foram utilizados no procedimento de modelagem, enquanto que o subconjunto de teste foi empregado para avaliação do desempenho dos modelos resultantes. A métrica de comparação dos modelos foi realizada em função da taxa de classificação correta (TCC) (equação 2).

$$TCC\% = \frac{(número\ de\ acertos\ de\ classificação)}{(número\ total\ de\ amostras)}\ x\ 100\% \qquad (2)$$

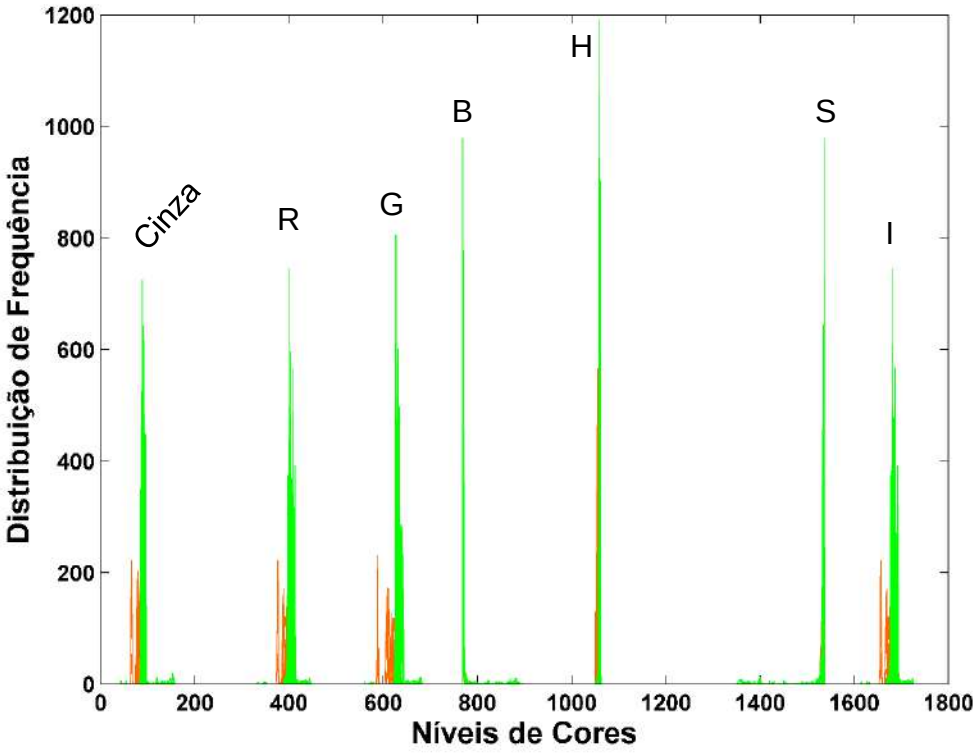
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Histogramas

Os histogramas com os canais de cores cinza, Red (R), Green (G), Blue (B), matriz (H), saturação (S) e brilho intensidade (I) obtidos com as imagens digitais das 56 amostras de xaropes podem ser observados na figura 9.

Os histogramas representam as distribuições de frequência dos níveis de cores presentes na imagem e a quantidade de pixels relacionados a cada nível de cor. Considerando os sete canais, 1792 níveis de cores os quais correspondem a 256 variáveis (0 a 255) por cada canal foram coletados.

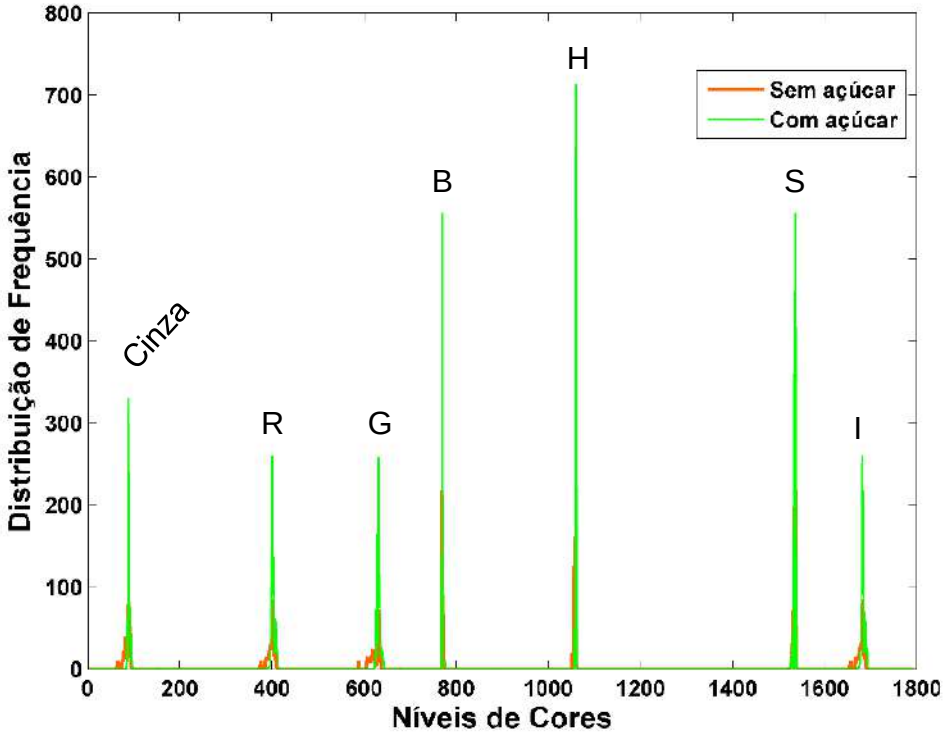
Figura 9. Histograma completo. Laranja: sem açúcar; Verde: com açúcar.



Fonte: Autoria própria (2022).

A Figura 10, apresenta os histogramas médios, como observado é difícil distinguir as duas classes de xaropes estudadas apenas com uma inspeção visual dos histogramas. Por esta razão, uma análise multivariada baseada em classificação foi aplicada.

Figura 10 - Histograma médio.

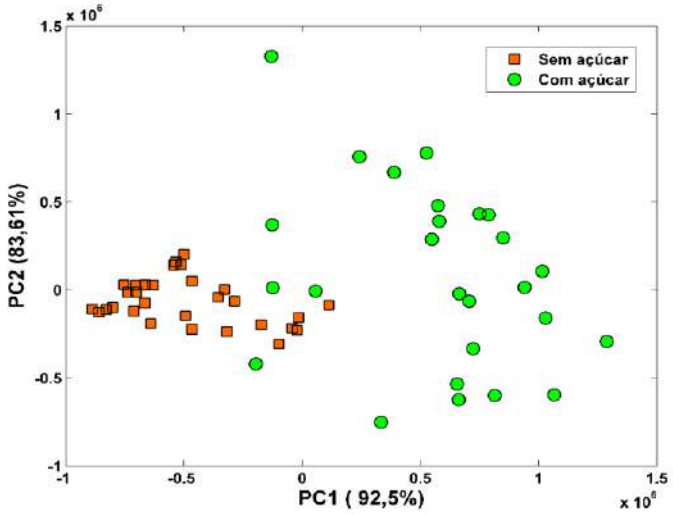


Fonte: Autoria própria (2022).

4.2 Análise de Componentes Principais (PCA)

Para observar a existência de agrupamento naturais entre as amostras de xaropes, uma análise exploratória dos dados foi realizada, para tanto uma PCA foi aplicada (figura 11). É possível perceber na figura uma tendência de agrupamento para as amostras de xarope sem açúcar das amostras com açúcar. No entanto, existe ainda um espalhamento de algumas amostras.

Figura 11. Gráfico dos escores obtidos por PCA aplicada aos dados imagens digitais.

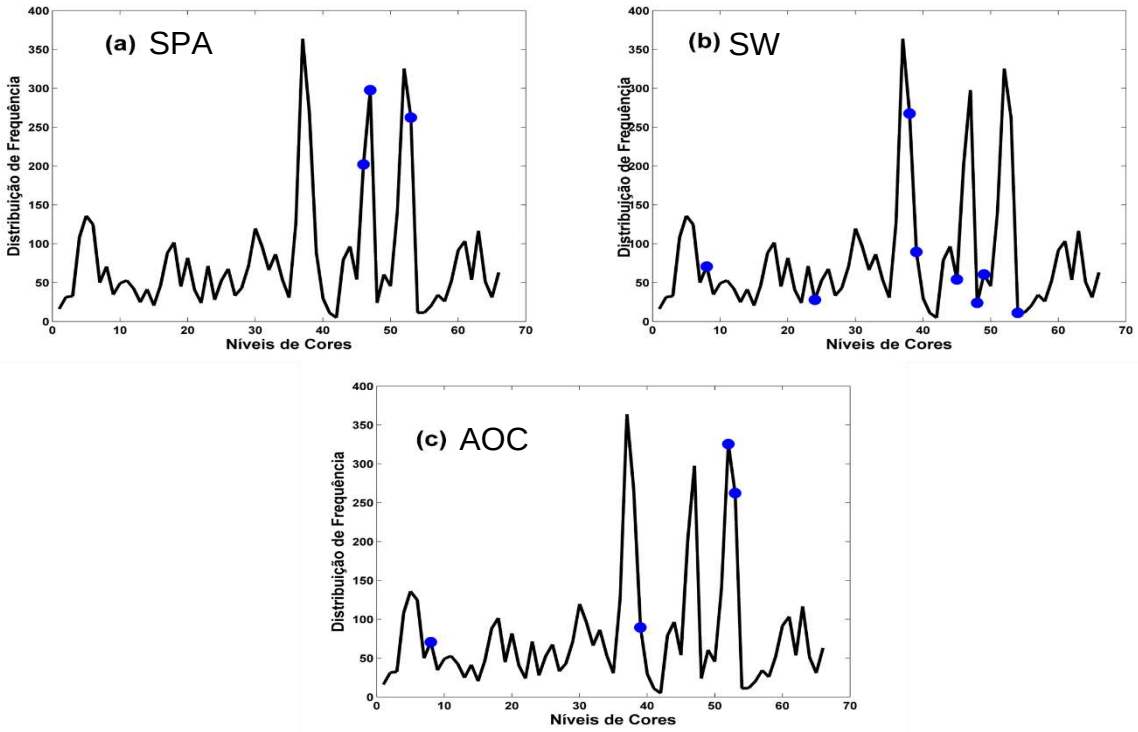


Fonte: Autoria própria (2022).

4.3. Métodos de Reconhecimento de Padrões Supervisionados

Na Figura 12. são apresentadas as variáveis selecionadas e utilizadas na construção dos modelos LDA/SPA, LDA/SW e LDA/AOC.

Figura 12. Espectros médios do conjunto de dados com indicação das variáveis selecionadas pelo SPA (a), SW (b) e AOC (c) em modelos de classificação LDA.



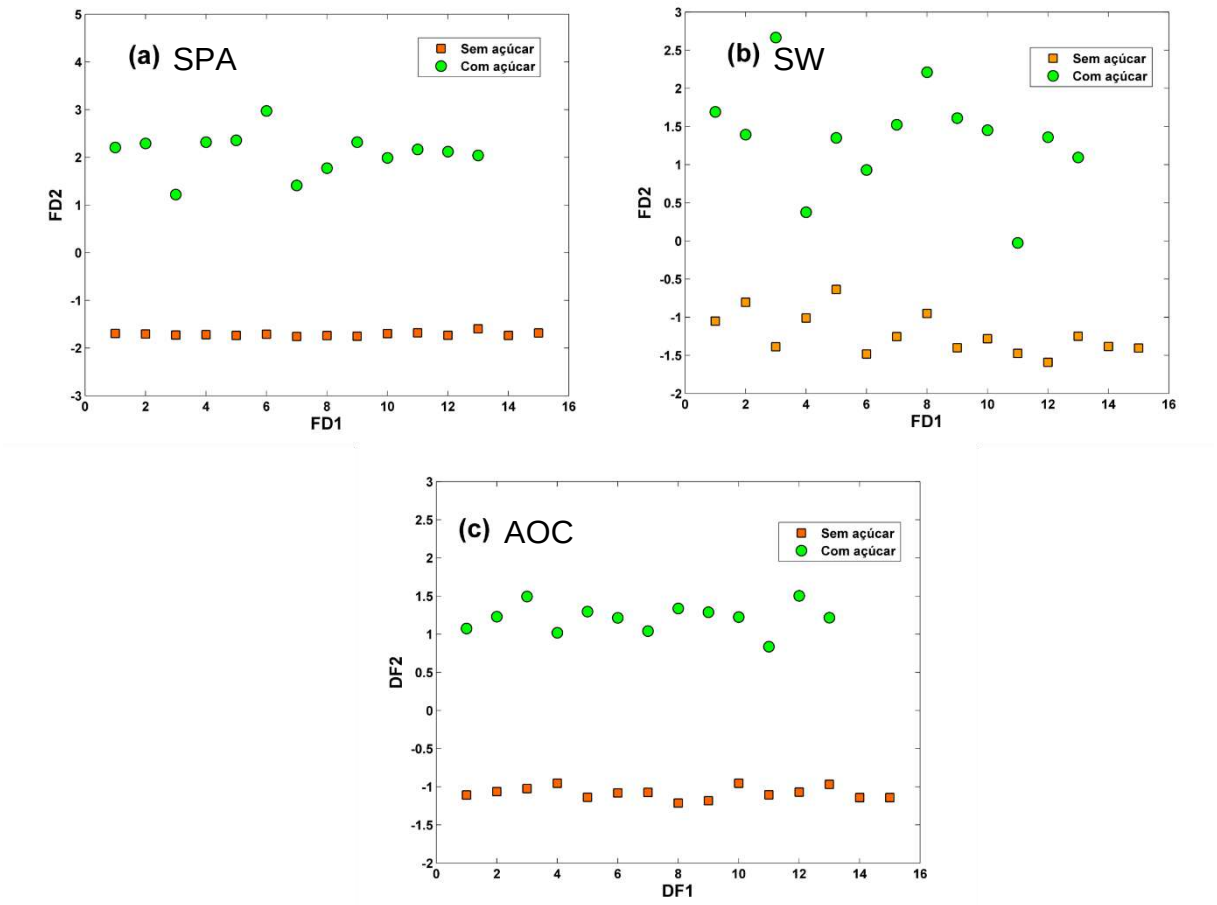
Fonte: Autoria própria (2022).

As variáveis selecionadas estão distribuídas ao longo de todo o histograma, principalmente quando do SW é aplicado. O método **stepwise** é usado para selecionar quais variáveis mais influenciam o conjunto de saída podendo, assim, diminuir o número de variáveis a compor a equação de regressão.

O SPA selecionou apenas 3 variáveis nos canais H e S, onde tem-se maior informação de matriz e saturação, estes canais são os que mais enfatizam as cores da amostra, já o AOC selecionou no canal cinza, B e na mesma região que o SPA do canal S.

Os gráficos dos scores obtidos por LDA com as seleções de variáveis pelo SPA, SW e AOC podem ser observados na Figura 13.

Figura 13. Gráfico de escores obtido por LDA usando algoritmos de seleção de variáveis a) SPA, b) SW e c) AOC.



Fonte: Autoria própria (2022).

4.4. Comparação das metodologias de classificação

Na Tabela 1 são apresentados os resultados detalhados para os modelos LDA/SPA, LDA/SW e LDA/AOC utilizando o conjunto de teste. Esses valores expressam tanto as classificações corretas como as classificações incorretas.

Tabela 1 – Taxa de classificação correta obtida com os modelos de classificação LDA/SPA, LDA/SW e LDA/AOC utilizando imagens digitais para o conjunto de teste. Os números entre parêntesis indicam a taxa de classificação correta (TCC). N indica o número de amostras utilizadas.

		LDA/SPA (100%)		**LDA/SW (96,15%)**		**LDA/AOC (100%)**	
Amostras		Classe Predita		Classe Predita		Classe Predita	
Classe verdadeira	N	Sem açúcar	Com açúcar	Sem açúcar	Com açúcar	Sem açúcar	Com açúcar
Sem açúcar	15	15	-	15	-	15	-
Com açúcar	13	-	13	1	12	-	13

Fonte: Autoria própria (2022)

Para uma avaliação do conjunto de teste são apresentados na Tabela 1 o resumo de classificação. Resultados são satisfatórios acertado todas as amostras em sua classe foram encontrados para os modelos LDA/SPA e LDA/AOC. No LDA/SW observa-se que 1 amostra com açúcar foi incorretamente classificada como pertencente a classe das amostras sem açúcar.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho apresentou uma metodologia rápida, simples e não destrutiva para classificação de xaropes utilizando imagens digitais e pode ser adotado tanto por órgãos fiscalizadores quanto pela população de maneira geral. Foi um estudo que não trouxe danos e gerou um resultado positivo pois em uma das amostras no seu rótulo estava escrito sem açúcar e com esse método podemos avaliar que a amostra teria o açúcar empregado com isso identificamos que o estudo é eficaz e traz benefícios para uma dispensação segura e sem danos ao paciente portador da doença de diabetes mellitus e que há uma necessidade de restrições a açúcar. Esse estudo de PCA aplicado aos dados do histograma revelou uma tendência de separação entre as amostras de xarope com açúcar e dietético avaliados. Quando os métodos de reconhecimento supervisionados foram utilizados, os melhores resultados foram obtidos com os modelos LDA/SPA e LDA/AOC, que classificou corretamente 100% das amostras em suas classes. É importante mencionar que o procedimento de classificação é baseado em dados. Assim, os resultados não podem ser facilmente generalizados para a análise de outros tipos de xaropes que não foram incluídos no estudo.

REFERÊNCIAS

ALVES, K. L.; ARAÚJO, K. C. A.; OLIVEIRA, A. M. C. Principais fitoterápicos comercializados em drogarias de Teresina: informações terapêuticas dos principais princípios ativos vegetais. **Revista de Casos e Consultoria**, v. 12, n. 1, p. 1–16, 2021. Disponível em: https://periodicos.ufrn.br/casoseconsultoria/article/view/25217. Acessado em: 2 dez. 2022.

BALLABIO, D.; CONSONNI, V. Classification tools in chemistry. Part 1: Linear models. PLS-DA. **Analytical Methods**, v. 5, n. 16, 2013. https://doi.org/10.1039/c3ay40582f.

BARROS, A. E. S. **Novas propostas analíticas para qualificação de cumarina em amostras de xaropes fitoterápicos contendo guaco (Mikania glomerata)**. 2017. Dissertação – Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, 2017. Disponível em: https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/UEPB_a20800e14f460864d9d118a9934d7484. Acessado em: 2 dez. 2022.

BIOPURIFY CHENGDU. **Hederagenina**. 2015. Disponível em: https://m.phytopurify.com/Hederagenin-p-4282.html. Acessado em: 2 dez. 2022.

CARMO, J. S.; NOGUEIRA, J. M. R.; SILVA, L. O. P. A importância do controle de qualidade microbiológico em produtos fitoterápicos e plantas medicinais. **Research, Society and Development**, v. 11, n. 10, p. e462111033001, 2022. https://doi.org/10.33448/rsd-v11i10.33001.

CORREIA, P. R. M.; FERREIRA, M. M. C. Reconhecimento de padrões por métodos não supervisionados: Explorando procedimentos quimiométricos para tratamento de dados analíticos. **Quimica Nova**, v. 30, n. 2, 2007. https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000200042.

DE CARVALHO, R. M.; ALVES, M. D. A. L. Rótulo de alimentos: dificuldades de interpretação por idosos diabéticos. **Nutrição Brasil**, v. 17, n. 2, p. 104, 2018. https://doi.org/10.33233/nb.v17i2.818.

ESTELLER, M. S.; YOSHIMOTO, R. M. O.; AMARAL, R. L.; LANNES, S. C. S. Uso de açúcares em produtos panificados. **Ciência e Tecnologia de Alimentos**, v. 24, n. 4, p. 602–607, 2004. https://doi.org/10.1590/S0101-20612004000400021.

EUSTÁQUIO, J.; QUEIROZ, R. de; GOMES, H. M. Introdução ao Processamento Digital de Imagens. **RITA**, v. 8, n. 1, 2001.

FANG, F.; QI, Y.; LU, F.; YANG, L. Highly sensitive on-site detection of drugs adulterated in botanical dietary supplements using thin layer chromatography combined with dynamic surface enhanced Raman spectroscopy. **Talanta**, v. 146, 2016. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.08.067.

FRANÇA, V. F. **Aplicação de imagens digitais e técnicas quimiométricas para detecção de adulteração em mel**. 2020. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Federal da Paraíba, Areia, 2020. Disponível em: https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/123456789/17653?locale=pt_BR. Acessado em: 2 dez. 2022.

GONÇALVES, M. I. S. **Aplicações de imagens digitais e análise multivariada para classificação e determinação de parâmetros de qualidade em plumas de algodão**. 2015. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2015. Disponível

em: https://repositorio.ufpb.br/jspui/handle/tede/8193?locale=pt_BR. Acessado em: 2 dez. 2022.

GROSSI, S. A. A.; DE PASCALI, P. M. Cuidados de enfermagem em diabetes mellitus. **Grupo Gen-AC Farmacêutica**, E-book, 2000. Disponível em: https://www.saudedireta.com.br/docsupload/13403686111118_1324_manual_enfermagem.pdf. Acesso em: 23 dez. 2022.

GROSS, J. L.; SILVEIRO, S. P.; CAMARGO, J. L.; REICHELT, A. J.; AZEVEDO, M. J. Diabetes Melito: Diagnóstico, Classificação e Avaliação do Controle Glicêmico. **Arquivos Brasileiros de Endocrinologia & Metabologia**, v. 46, n. 1, p. 16–26, 2002. https://doi.org/10.1590/S0004-27302002000100004.

KENNARD, R. W.; STONE, L. A. Computer Aided Design of Experiments. **Technometrics**, v. 11, n. 1, p. 137–148, 1969. https://doi.org/10.1080/00401706.1969.10490666.

LEARDI, R. Genetic algorithms in chemistry. **Journal of Chromatography A**, v. 1158, n. 1–2, 2007. https://doi.org/10.1016/j.chroma.2007.04.025.

LUBI, N. C.; SATO, M. E. O.; GAENSLY, F. Desenvolvimento de forma farmacêutica líquida de uso oral, isenta de substâncias glicogênicas, com extrato fluido de Mikania glomerata Sprengel - Asteraceae (guaco). **Revista Brasileira de Farmacognosia**, v. 13, p. 43–46, 2003. https://doi.org/10.1590/S0102-695X2003000300017.

MAGELA, M. F. **O universo Harry Potter: herbário mágico**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2019. Disponível em: https://repositorio.ufu.br/handle/123456789/27961. Acessado em: 2 dez. 2022.

MARQUES FILHO, O.; VIEIRA NETO, H. **Processamento Digital de Imagens**. Rio de Janeiro: Brasport, 1999. ISBN 8574520098.

MERCURI, N.; ARRECHEA, V. Atividade física e diabetes mellitus. **Diabetes Clínica**, v. 5, n. 5, p. 347-9, 2001. Disponível em: http://www.educadores.diaadia.pr.gov.br/arquivos/File/2010/artigos_teses/2010/Educacao_fisica/artigo/3_exercicio_diabetes.pdf. Acesso em: 23 dez. 2022.

MILANEZ, K. D. T. M. **Classificação de óleos vegetais comestíveis usando imagens digitais e técnicas de reconhecimento de padrões**. 2013. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2013.

MOITA NETO, J. M.; MOITA, G. C. Uma introdução à análise exploratória de dados multivariados. **Química Nova**, vol. 21, nº 4, 1998. https://doi.org/10.1590/s0100-40421998000400016.

MOREIRA, R. O., et al. Diabetes mellitus e depressão: uma revisão sistemática. **Arquivos Brasileiros de Endocrinologia & Metabologia**, v. 47, p. 19-29, 2003. https://doi.org/10.1590/S0004-27302003000100005.

NETO, G. F. G. **Classificação de Óleos Vegetais Utilizando Voltametria de Onda Quadrada e Métodos Quimiométricos**. 2008. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2008. Disponível em: https://docplayer.com.br/16613922-Dissertacao-de-mestrado-classificacao-de-oleos-vegetais-utilizando-voltametria-de-onda-quadrada-e-metodos-quimiometricos.html. Acessado em: 2 dez. 2022.

NUNES, P. G. A. **Uma nova técnica para seleção de variáveis em calibração multivariada aplicada às espectrometrias UV-VIS e NIR**. 2008. Tese de Doutorado – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2008. Disponível em: https://docplayer.com.br/85500401-Tese-de-doutorado-uma-nova-tecnica-para-selecao-de-variaveis-em-calibracao-multivariada-aplicada-as-espectrometrias-uv-vis-e-nir.html. Acessado em: 2 dez. 2022.

OGNIBENE, C. E. F.; MARQUES, L. C. Produção e comercialização de fitoterápicos à base de Hedera helix: Avaliação comparativa dos produtos disponíveis no Brasil. **Revista Brasileira de Medicina**, v. 69, n. 10, 2012.

ORMOND, T. de S.; FERNANDES, D. D. de S.; DINIZ, P. H. G. D. An eco-friendly analytical methodology based on digital images for quality control of commercial Mikania glomerata syrups. **Microchemical Journal**, v. 178, 2022. https://doi.org/10.1016/j.microc.2022.107338.

PONTES, A. S.; ARAÚJO, A.; MARINHO, W., *et al*. Ant colony optimization for variable selection in discriminant linear analysis. **Journal of Chemometrics**, v. 34, n. 12, 2020. https://doi.org/10.1002/cem.3292.

PONTES, M. J. C. **Algoritmo das Projeções Sucessivas para Seleção de Variáveis Espectrais em Problemas de Classificação**. 2009. Tese de Doutorado – Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2009. Disponível em: https://docplayer.com.br/82054410-Tese-de-doutorado-algoritmo-das-projecoes-sucessivas-para-selecao-de-variaveis-espectrais-em-problemas-de-classificacao-marcio-jose-coelho-de-pontes.html. Acessado em: 2 dez. 2022.

PONTES, M. J. C.; GALVÃO, R. K. H.; ARAÚJO, M. C. U., et al. The successive projections algorithm for spectral variable selection in classification problems. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 78, n. 1, 2005. https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2004.12.001.

SANCHES, I. J. **Sobreposição de imagens de termografia e ressonância magnética: uma nova modalidade de imagem médica tridimensional**. 2009. Tese de Doutorado – Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Curitiba, 2009. Disponível em: https://repositorio.utfpr.edu.br/jspui/handle/1/125. Acessado em: 2 dez. 2022.

SANTINHO, A. J. P.; WALDOW, C.; SANTOS, S. B. Estudo sobre a correlação do potencial cariogênico e do pH de xaropes pediátricos. **Rev. Bras. Farm**, v. 89, n. 2, 2008.

SHAWKY, E.; EL SOHAFY, S. M. Untargeted and targeted chemical profiling for efficacy-directed discrimination of Hedera helix L. subspecies using HPTLC- image analysis and HPTLC/MS. **Industrial Crops and Products**, v. 145, 2020. https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2019.111980.

SOARES, S. F. C.; GALVÃO, R. K. H.; PONTESA, M. J. C.; ARAÚJO, M. C. U. A new validation criterion for guiding the selection of variables by the successive projections algorithm in classification problems. **Journal of the Brazilian Chemical Society**, v. 25, n. 1, 2014. https://doi.org/10.5935/0103-5053.20130262.

TOBIAS, R. D.; BEEBE, K. R.; PELL, R. J.; SEASHOLTZ, M. B. Chemometrics: A Practical Guide. **Technometrics**, v. 41, n. 4, 1999. https://doi.org/10.2307/1271366.

ZIEGEL, E. R. Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. **Technometrics**, v. 43, n. 2, 2001. https://doi.org/10.1198/tech.2001.s596.