



Simpósio Integrado das Ciências Farmacêuticas

AVANÇOS QUE CONECTAM CIÊNCIA, CUIDADO E TECNOLOGIA

Inteligência artificial aplicada à quantificação simultânea de clofazimina e dapsona por espectroscopia UV-Vis

Igor Eduardo Silva Arruda¹; Lucas Marinho de Santana¹; Lucas José de Alencar Danda¹; José Lamartine Soares-Sobrinho¹; Monica Felts de La Roca Soares¹

¹Universidade Federal de Pernambuco, UFPE; Laboratório Capibaribe, LCF; Recife/PE

Email do autor principal: Igor.Arruda@ufpe.br

Introdução: A quantificação simultânea de fármacos em sistemas multicomponentes representa um desafio analítico, principalmente quando ocorre sobreposição espectral entre os analitos. A clofazimina e a dapsona são fármacos empregados na terapia combinada da hanseníase, sendo relevante o desenvolvimento de métodos analíticos rápidos, preditivos e com menor consumo de solventes. Nesse contexto, a inteligência artificial, por meio de modelos de aprendizado de máquina, pode contribuir para extrair informações quantitativas de dados espectroscópicos complexos. Entre esses modelos, destaca-se o *Support Vector Machine* (SVM), ou máquina de vetores de suporte, capaz de modelar relações entre sinais analíticos e concentrações dos analitos. **OBJETIVOS:** Avaliar a aplicação de inteligência artificial, utilizando modelo SVM, para a determinação simultânea de clofazimina e dapsona por espectroscopia UV-Vis, empregando validação cruzada e validação externa, com comparação frente a valores de referência obtidos por cromatografia líquida de alta eficiência. **MATERIAL E MÉTODOS:** Foram desenvolvidos modelos SVM para estimar simultaneamente as concentrações de clofazimina e dapsona a partir de dados espectrais obtidos por UV-Vis. O desempenho preditivo dos modelos foi avaliado por validação cruzada e validação externa. Como método de referência, foram utilizadas curvas analíticas por cromatografia líquida de alta eficiência para ambos os fármacos. A qualidade do modelo foi investigada por meio do coeficiente de determinação, erro médio quadrático de validação cruzada, erro médio quadrático de predição e análise dos resíduos. **RESULTADOS E DISCUSSÃO:** Os modelos baseados em SVM apresentaram elevada capacidade preditiva para os dois fármacos. Na validação cruzada, a clofazimina apresentou RMSECV de 0,2092 e R^2 de 0,9992, enquanto a dapsona apresentou RMSECV de 0,3229 e R^2 de 0,9980, indicando forte concordância entre os valores reais e preditos. Na validação externa, o desempenho permaneceu satisfatório, com RMSEP de 0,2385 e R^2 de 0,9992 para clofazimina, e RMSEP de 0,7037 e R^2 de 0,9947 para dapsona. A maior dispersão residual observada para a dapsona sugere maior complexidade na predição desse analito, especialmente em amostras externas. As curvas de referência por cromatografia líquida de alta eficiência apresentaram boa linearidade, com R^2 de 0,9978 para clofazimina e 0,9972 para dapsona, reforçando a confiabilidade dos valores utilizados no treinamento e avaliação dos modelos. De modo geral, os resultados demonstram que a associação entre UV-Vis e SVM permitiu estimar simultaneamente as





concentrações dos dois fármacos com alto desempenho preditivo. **CONCLUSÃO:** A aplicação de inteligência artificial por meio de modelos *Support Vector Machine* demonstrou potencial para a quantificação simultânea de clofazimina e dapsona por espectroscopia UV-Vis. A abordagem apresentou elevada correlação entre valores reais e preditos, baixos erros de predição e desempenho consistente em validação cruzada e externa, podendo auxiliar o desenvolvimento de métodos analíticos rápidos para controle de qualidade de sistemas farmacêuticos combinados.

PALAVRAS-CHAVE: Inteligência artificial. Clofazimina. Dapsona.

ÁREA TEMÁTICA: Tecnologia Farmacêutica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

RAMOS, H. A. et al. Quantification of antibiotics in multicomponent drug formulations using UV–Vis spectrometer with PLS and MCR-ALS. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Amsterdam, v. 260, art. 105354, 2025. DOI: 10.1016/j.chemolab.2025.105354.

VALAEE, M.; SOHRABI, M. R.; MOTIEE, F. Rapid simultaneous analysis of anti human immunodeficiency virus drugs in pharmaceutical formulation by smart spectrophotometry based on multivariate calibration and least squares support vector machine methods. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Amsterdam, v. 290, art. 122292, 2023. DOI: 10.1016/j.saa.2022.122292.

NOROOZI, R.; SOHRABI, M. R.; DAVALLO, M. A simple and rapid spectrophotometric method coupled with intelligent approaches for the simultaneous determination of antiepileptic drugs in pharmaceutical formulations, biological, serological, and breast milk samples. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Amsterdam, v. 228, art. 104633, 2022. DOI: 10.1016/j.chemolab.2022.104633.

