

DESENVOLVIMENTO DE SOFTWARE PARA PROCESSAMENTO ESPECTRAL AUTOMATIZADO

RESUMO

A espectroscopia Raman, é uma técnica que permite a obtenção de informações detalhadas das características químicas das moléculas que formam diferentes tipos de materiais, orgânicos ou inorgânicos. Um espectro Raman, possui sinais que representam as vibrações moleculares que são geradas a partir da excitação de um material com energia fornecida por uma fonte de luz. A técnica de espectroscopia Raman, pode ser aplicada em diferentes áreas do conhecimento, como física, química, ciências dos materiais, alimentos, biomédica dentre outras. Na área de Engenharia Biomédica, a espectroscopia Raman permite um profundo conhecimento das características bioquímicas dos tecidos, permitindo verificar alterações em células, verificar a presença de um fármaco ou a permeação de um produto cosmético na pele. Os benefícios da técnica são amplos, uma vez que é uma técnica não destrutiva e não invasiva, permitindo a realização de análises sem causar danos as amostras ou tecidos analisados. Um dos grandes desafios que se apresenta na utilização da técnica, é o correto processamento dos dados de maneira que se possa extrair conhecimento de um sinal Raman. Na análise espectral, faz-se necessária a aplicação de um pré-processamento dos dados, o que inclui a correção de linha de base para a extração do sinal de fluorescência gerado por uma amostra, filtros para remoção de spikes, suavização do sinal para eliminação de ruídos, normalização de dados, dentre outros pré-processamentos que se façam necessários de acordo com cada tipo de estudo. Os principais fornecedores de espectrômetros Raman, fornecem softwares proprietários que permitem que o usuário realize o pré-processamento dos dados, porém em sua grande maioria, esses softwares dependem das ações do usuário para a realização do processamento, o que pode inserir erros no resultado, uma vez que não é garantido que o usuário realizará as ações de maneira padronizada. Tendo isso em vista, neste trabalho é realizado o desenvolvimento de um software para processamento espectral de maneira automatizada, em que todo o pré-processamento de grandes quantidades de dados, é padronizado com o intuito de remover a possibilidade de erros de processamento inseridos por falha humana. Foram desenvolvidos algoritmos para cada etapa do pré-processamento, que podem ser ajustados pelo usuário de acordo como o tipo de espectro a ser utilizado. Dentre os principais benefícios do software desenvolvido, pode-se destacar dois pontos principais que são: a padronização dos procedimentos e o ganho de tempo do utilizador do software, uma vez que o pré-processamento é realizado de forma rápida e padronizada.

Palavras – Chave: Espectroscopia Raman, Processamento, Desenvolvimento de Software