

## **ANÁLISE POR COMPONENTES PRINCIPAIS (PCA) COMO RECURSO PARA AVALIAÇÃO DE DADOS ESPECTRAIS DE INFRAVERMELHO (FT- IR) PARA BIOFLUÍDOS**

### **ODS 3**

Analice de Oliveira (Universidade de Taubaté)  
Giovana dos Santos Toledo (Universidade de Taubaté)  
Sara Janet dos Santos Michalopoulos (Universidade de Taubaté)  
Hugh James Byrne (Universidade Tecnológica de Dublin)  
Luis Felipe das Chagas e Silva de Carvalho (Universidade de Taubaté)

Técnicas de espectroscopia vibracional tem se demonstrado cada vez mais promissoras para com o diagnóstico clínico, ao passo que, através de análises não invasivas, não destrutivas e em tempo real, são capazes de gerar verdadeiras impressões digitais moleculares de uma amostra biológica. Trazendo o conceito de “biopsia líquida”, fornece informações altamente específicas dessas substâncias, viabilizando a caracterização por uma diversidade estrutural e bioquímica, além de dados qualitativos e quantitativos sobre os comportamentos vibracionais de grupos funcionais inerentes em proteínas, carboidratos, lipídios, ácidos nucleicos etc. Dentre as técnicas de espectroscopia, a Espectroscopia no Infravermelho por Transformada de Fourier (FT-IR) é caracterizada a partir da interação da luz infravermelha para com a amostra de material. A partir dessa interação, as ligações moleculares da amostra absorvem determinadas frequências da luz, o que culmina em vibrações em nível atômico. Assim, as frequências de vibração são mensuradas e o espectro é obtido, fornecendo informações detalhadas sobre a composição e estrutura química da substância. No entanto, a identificação e interpretação dos espectros é complexa, principalmente quando se faz necessário comparar uma grande quantidade de amostras. Nesse contexto, a análise por componentes principais (PCA) sobrevêm como um recurso para a simplificação do processo de análise amostral. Esta, configura uma redução na dimensionalidade de um conjunto de dados espectrais, viabilizando a identificação de padrões, observação de tendências, classificação e diferenciação de amostras. Para tanto, o PCA, converte as variáveis originais em um conjunto menor, os chamados componentes principais (PCs), que são arranjos lineares não correlacionadas das variáveis originais. À vista disso, o objetivo do presente estudo foi empregar a metodologia estatística PCA para a análise de dados espectrais de FT-IR em biofluidos. Os dados foram obtidos através de uma revisão na literatura, através da busca de estudos utilizando as palavras-chave “espectroscopia vibracional”, “espectroscopia FT-IR”, “biofluidos” e “técnicas de diagnóstico” no PubMed e ScienceDirect e, a partir disso, foram selecionados 12 artigos, publicados, estes, a partir do ano 2011. Para a geração dos gráficos dos componentes principais, nesse interim, foi utilizado o software Matlab. Diante os gráficos processados, foi possível monitorar semelhanças e identificar heterogeneidades biomoleculares entre

as amostras, concebendo maior destreza ao trabalho de análise comparativa de biofluidos. A análise através da metodologia PCA, demonstrou sucesso na redução de ruído dos dados espectrais, na medida em que os PCs mantêm o máximo de informação possível com um número reduzido de variáveis. Portanto, conclui-se que o emprego do PCA para a análise, leitura e interpretação dos espectros FT-IR se faz de grande vantagem, uma vez que nos permite, com maior clareza e precisão, compreender intrinsecamente a composição bioquímica de um determinado biofluido e manipular arranjos de dados complexos oriundos de espectros FT-IR.

**Palavras-chave:** PCA; Espectroscopia; FT-IR; Biofluidos