

DIAGNÓSTICO RÁPIDO DE MALÁRIA POR ESPECTROSCOPIA FTIR E ANÁLISE MULTIVARIADA

Autores: Yessamin Costa¹; Cícero Cena¹; Giselle Maria Rachid Viana²; Marissa Prado¹; Nathália Chamma-Siqueira²; Rafael Barata²

Afiliações: ¹*Universidade Federal de Mato Grosso do Sul (UFMS)*, ²*Instituto Evandro Chagas (IEC/SVSA/MS)*

Autor Correspondente: Yessamin Costa

E-mail: yessamin.gabriela@ufms.br

Introdução: A malária permanece como um importante problema de saúde pública, exigindo métodos diagnósticos rápidos, confiáveis e de baixo custo. Embora a microscopia pela gota espessa seja amplamente utilizada, métodos alternativos automatizados e reprodutíveis vêm sendo investigados. Nesse contexto, a espectroscopia no infravermelho por transformada de Fourier (FTIR), associada a técnicas quimiométricas e ao aprendizado de máquina, apresenta potencial para detectar alterações bioquímicas associadas à infecção malárica.

Objetivo: Avaliar o desempenho da espectroscopia FTIR combinada à Análise de Componentes Principais (PCA) e a métodos supervisionados de aprendizado de máquina na discriminação entre amostras infectadas por *Plasmodium* sp. e controles negativos.

Métodos: Espectros FTIR de amostras infectadas e controles negativos foram submetidos a pré-processamento envolvendo normalização, subtração espectral do sinal da água, correção por variabilidade espectral (SNV) e seleção da região espectral de 800–1800 cm^{-1} . A redução de dimensionalidade foi realizada por PCA, e a identificação de outliers utilizou a distância de Mahalanobis. Para correção do desbalanceamento entre classes, aplicou-se a técnica SMOTE. A etapa de classificação empregou Support Vector Machine (SVM), k-vizinhos mais próximos (KNN) e Análise Discriminante Linear (LDA), avaliados por validação cruzada Leave-One-Out (LOOCV), com otimização de hiperparâmetros por GridSearchCV aninhado.

Resultados: Os primeiros componentes principais concentraram a maior parte da variância espectral, evidenciando separação consistente entre amostras infectadas e controles negativos. O modelo SVM apresentou melhor desempenho, com acurácia de 97,5%, seguido por KNN (77,5%) e LDA (72,5%).

Conclusão: A espectroscopia FTIR associada à PCA e ao aprendizado de máquina demonstrou ser abordagem promissora como ferramenta complementar de triagem e apoio ao diagnóstico da malária. Como perspectiva, pretende-se aprimorar o método para facilitar a diferenciação entre espécies de *Plasmodium* sp.

Financiadores: Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ), Fundação de Apoio ao Desenvolvimento do Ensino, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso do Sul (FUNDECT)