**Desenvolvimento de Software para Análise FT-IR.**

Saúde e Bem-estar (3)

Indústria, Inovação e Infraestrutura (9)

Jean Patrick dos Santos Moraes (Universidade de Taubaté)

Thiago Pereira (Universidade Federal de São Paulo)

Diego Rezende Santos de Moura (Universidade de Taubaté)

Sara Janet dos Santos Michalopoulos (Universidade de Taubaté)

Julia Nani Bittencourt Gouvêa (Universidade de Taubaté)

Luís Felipe das Chagas e Silva de Carvalho (Universidade de Taubaté)

Este trabalho foca na utilização da espectroscopia de infravermelho com transformada de Fourier (FT-IR) para a análise de espectros em diagnósticos clínicos, desenvolvendo métodos não invasivos para a detecção precoce de doenças como diabetes. A pesquisa explora a implementação de um software que utiliza uma técnica de “Argument Parsing”, interface de terminal para a manipulação e análise dos dados espectrais. Ao contrário de softwares com interfaces gráficas, nossa solução permite maior flexibilidade e controle direto sobre o processamento dos dados, tornando o software mais leve e eficiente para usuários avançados. O método empregado envolve o desenvolvimento de scripts em Python, utilizando bibliotecas específicas para leitura de arquivos espectrais, pré-processamento dos dados e visualização dos resultados através de gráficos. Por exemplo, as funções implementadas permitem a leitura de diretórios de amostras controle e de pacientes com patologia, seguidas por procedimentos de pré-processamento como normalização e filtragem dos dados. Em seguida, a análise por componentes principais (PCA) é utilizada para reduzir a dimensionalidade dos dados e facilitar a interpretação dos resultados. O usuário pode escolher diferentes opções de processamento diretamente pela linha de comando, para a devida análise a ser realizada. Os resultados preliminares indicam que a abordagem baseada em interface de terminal é eficaz para a análise rápida e precisa dos dados espectrais, oferecendo flexibilidade para ajustes personalizados de acordo com as necessidades do pesquisador. Esta flexibilidade é crucial para ambientes de pesquisa onde diferentes tipos de amostras e métodos de análise precisam ser testados. A ausência de uma interface gráfica reduz a complexidade do software, facilitando sua implementação em diferentes sistemas operacionais e dispositivos. Conclui-se que o desenvolvimento deste software de análise espectral, utilizando uma interface de terminal, representa uma contribuição significativa para a área de diagnósticos clínicos, permitindo uma detecção precoce mais eficaz e acessível de várias condições de saúde. Esta abordagem pode ser facilmente adaptada para integrar novos algoritmos de processamento e expandir seu uso em diversas aplicações clínicas e laboratoriais.

**Palavras-chave:** Espectroscopia FT-IR; Diagnóstico clínico; Análise de espectros; Software de terminal; Detecção precoce.