ISSN:2594-6153

RamanScan-PAL2V: digitalização e filtragem de espectros Raman por Lógica Paraconsistente Anotada (LPA2v)

Márcio Pereira Corrêa, Landulfo Silveira Jr, Marcos Tadeu Tavares Pacheco e Joao Inácio da Silva Filho

PPGEMec – Programa de Pós-Graduação Mestrado/Doutorado em Engenharia Mecânica-Universidade Santa Cecília - UNISANTA, Santos-SP, Brasil

E-mail: marciocorrea9@gmail.com

Resumo: Grande parte do material de referência em Espectrometria Raman está disponível apenas como imagens de baixa qualidade em bases públicas, sem acesso à série numérica original, o que impede comparar, medir picos e reprocessar os espectros. Este trabalho apresenta o RamanScan-PAL2V, software que reconstrói a série (x,y) a partir da imagem de um espectro e trata seu ruído por um filtro baseado em Lógica Paraconsistente Anotada de dois valores (LPA2v), com número ajustável de Células Neurais Artificiais Paraconsistentes de Aprendizado (CNAPap), disponibilizando a estudantes e pesquisadores dados antes inacessíveis, com suavização que preserva a estrutura do espectro, demonstrada em um caso prático de digitalização e pré-processamento..
Palavras-chave: Espectrometria Raman; Lógica Paraconsistente Anotada; LPA2v; Digitalização de espectros; Pré-processamento de sinais.

RamanScan-PAL2V: digitizing and filtering of Raman spectra using Paraconsistent Annotated Logic (PAL2v)

Abstract: Much of the reference material in Raman spectroscopy is available only as low-quality images in public databases, with no access to the original numerical series, which prevents comparing, measuring peaks and reprocessing the spectra. This work presents RamanScan-PAL2V, a software that reconstructs the (x,y) series from a spectrum image and treats its noise with a filter based on two-value Paraconsistent Annotated Logic (PAL2v), with an adjustable number of Paraconsistent Artificial Neural Cells of Learning (PANCell*l*), providing students and researchers with previously inaccessible data and a smoothing that preserves the spectrum structure, demonstrated in a practical digitizing and pre-processing case.
Keywords: Raman spectroscopy; Paraconsistent Annotated Logic; PAL2v; Spectra digitization; Signal pre-processing.

Introdução

A espectrometria Raman é uma técnica de espectroscopia vibracional baseada no espalhamento inelástico de luz monocromática, amplamente empregada para caracterizar a composição molecular de materiais. O deslocamento de energia da luz espalhada corresponde a transições vibracionais das moléculas, fornecendo uma espécie de impressão digital espectral de cada substância. Na prática, porém, o sinal Raman bruto raramente está pronto para interpretação: costuma apresentar ruído instrumental, flutuações de linha de base e outros artefatos que mascaram os picos de interesse, o que torna o pré-processamento uma etapa crítica do fluxo de

análise [1]. Entre as operações mais comuns está a suavização, que busca reduzir o ruído aleatório preservando a forma dos picos; métodos clássicos como a média móvel e o filtro de Savitzky-Golay realizam essa tarefa por ajustes locais sobre janelas de pontos [2]. Um obstáculo adicional, muitas vezes negligenciado, é o acesso ao próprio dado. Grande parte dos espectros de referência disponíveis na literatura e em bases de dados públicas encontra-se apenas na forma de imagens — gráficos publicados —, sem a série numérica original. Sem esses valores, o pesquisador não consegue sobrepor espectros, medir posições e intensidades de picos ou reprocessar o sinal.

Para recuperar dados a partir de gráficos publicados, ferramentas de digitalização de curvas convertem as coordenadas de pixels da imagem em pares numéricos (x, y) [3]; entretanto, a série assim obtida herda o ruído da digitalização e da baixa qualidade da figura, exigindo tratamento posterior. O ponto sensível é que os filtros clássicos de suavização são dependentes de parâmetros e podem atenuar a intensidade dos picos ou alterar sua forma, sobretudo em picos estreitos, removendo informação legítima junto com o ruído [1]. Há, portanto, uma lacuna dupla no uso de espectros digitalizados: a ausência do dado numérico e a carência de um tratamento de ruído que preserve a estrutura do espectro.

A Lógica Paraconsistente Anotada de anotação com dois valores (LPA2v) oferece uma abordagem alternativa para esse tratamento. Diferentemente da lógica clássica, ela é capaz de manipular formalmente informações incertas e contraditórias sem trivializar o raciocínio, o que a torna adequada ao processamento de sinais ruidosos [4]. De seus fundamentos derivam-se as Células Neurais Artificiais Paraconsistentes (CNAP) e, em particular, a célula de aprendizado (CNAPap), empregada como filtro de sinais — o chamado PAL2vFilter [5]. Algoritmos baseados nessa lógica já foram aplicados a dados de espectroscopia Raman na caracterização de lesões de câncer de pele [6], o que evidencia o potencial da abordagem no domínio espectral. Neste contexto, o presente trabalho apresenta o RamanScan-PAL2V, ferramenta que integra, em um único fluxo, a extração da série numérica de um espectro Raman a partir de sua imagem e a suavização dessa série por meio de um filtro baseado em LPA2v, com número ajustável de CNAPap [5].

Objetivos

O presente trabalho tem por objetivo apresentar o RamanScan-PAL2V, software para digitalização e pré-processamento de espectros Raman a partir de imagens. Especificamente, busca-se reconstruir a série numérica (x, y) de um espectro a partir de sua imagem e suavizar

essa série por meio de um filtro baseado em Lógica Paraconsistente Anotada com anotação de dois valores (LPA2v), com número ajustável de Células Neurais Artificiais Paraconsistentes de Aprendizado (CNAPap), demonstrando sua aplicação em um caso prático de digitalização e tratamento de ruído.

Material e Métodos

O RamanScan-PAL2V foi desenvolvido em linguagem Object Pascal, no ambiente Delphi 12 Community Edition, como uma aplicação *desktop* que organiza o processamento em três domínios encadeados; imagem, sinal e dados, conforme o fluxo apresentado na Figura 1.

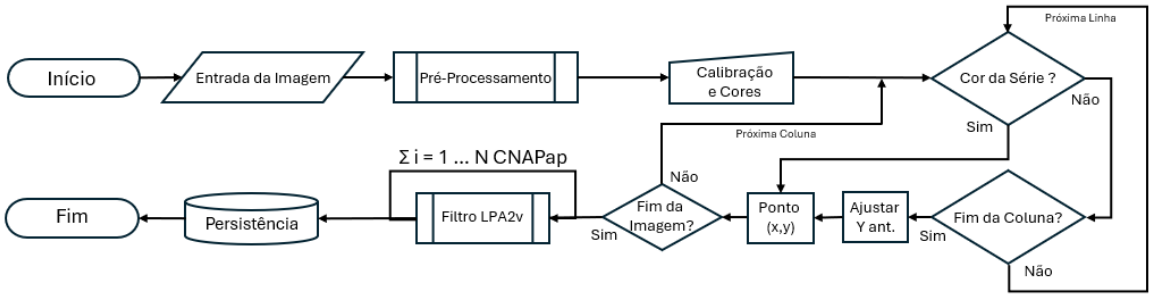

Figura 1. Fluxograma do RamanScan.

O funcionamento do RamanScan-PAL2V, está descrito a seguir:

1.**Aquisição e preparação da imagem**. A imagem do espectro é carregada a partir de arquivo ou colada da área de transferência. A ferramenta dispõe de operações de recorte, espelhamento/inversão e conversão para escala de cinza, que permitem isolar e ajustar a região do gráfico antes da extração. **2.Calibração e seleção de cores**. O usuário informa os limites dos eixos — inicial e final do eixo x (número de onda) e do eixo y (intensidade) — e uma tolerância de comparação de cor. Em seguida, seleciona por clique, diretamente sobre a imagem, a cor de fundo e a cor da curva (série), que servirão de referência para a varredura.

3.Extração da série. A conversão da curva em dados é feita por varredura coluna a coluna da imagem. Para cada coluna de pixels, as linhas são percorridas de cima para baixo e o primeiro pixel cuja cor coincide com a cor da série — dentro da tolerância, por comparação canal a canal (R,G,B) — é tomado como ponto da curva. A posição do *pixel* é convertida em coordenadas reais por fatores de escala derivados dos limites dos eixos e das dimensões da imagem: o valor de x avança por um passo constante (razão entre a faixa do eixo x e a largura em pixels) e o valor de y decorre da posição vertical relativa à altura da imagem. Colunas sem correspondência

de cor recebem um ponto interpolado, que repete o último valor de y válido, evitando descontinuidades. Ao final, as intensidades são normalizadas ao intervalo [0, 1], de modo a serem interpretadas como graus de evidência pela etapa seguinte. 4. **Filtro de sinal paraconsistente (PAL2v).** O núcleo do tratamento de ruído é um filtro fundamentado na LPA2v [4]. Nessa lógica, uma proposição é avaliada por dois graus de evidência — favorável (μ) e desfavorável (λ) a proposição P em análise, ambos no intervalo [0, 1] —, a partir dos quais se definem o grau de certeza e o grau de contradição:

$$Dc = \mu - \lambda \qquad (1) \qquad \text{e} \qquad Dct = \mu + \lambda - 1 \qquad (2)$$

O grau de certeza é normalizado para [0, 1], resultando no grau de evidência resultante real (μE), que constitui a saída da célula:

$$\mu E = (\mu - \lambda + 1) / 2 \qquad (3)$$

O filtro é construído com Células Neurais Artificiais Paraconsistentes de Aprendizado (CNAPap), nas quais o grau desfavorável de cada amostra é obtido por realimentação, como o complemento da evidência resultante da amostra anterior [5]:

$$\lambda_k = 1 - \mu_E,(k-1) \qquad (4)$$

Substituindo (4) em (3), a saída do filtro para cada amostra normalizada μ_k da série espectral é dada pela recorrência:

$$\mu E,k = (\mu k - (1 - \mu E,(k-1)) + 1) / 2 = (\mu k + \mu E,(k-1)) / 2 \qquad (5)$$

Dessa forma, cada célula pondera o valor corrente com a evidência acumulada, atenuando variações abruptas atribuíveis a ruído e preservando a tendência do sinal. O número de células é ajustável; nos ensaios adotou-se o valor de 2 CNAPap em cascata — configuração já empregada com sucesso na filtragem paraconsistente de sinais de vibração para monitoramento de condição de ativos industriais [7]. **5. Persistência.** Os pares (x, y) da série tratada podem ser exportados para posterior análise, na forma de cópia para planilha e de arquivo CSV.

Resultados

Para demonstrar a aplicação da ferramenta, utilizou-se como entrada a imagem de um espectro Raman de baixa qualidade obtida de uma base de dados pública, apresentada na Figura 2.

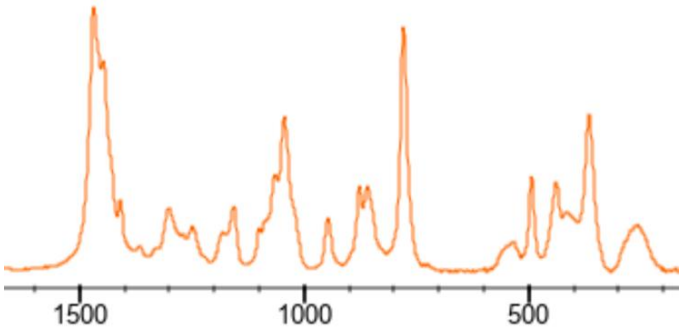

Figura 2. Espectro Raman de entrada, em baixa qualidade

Nota-se, na curva original, a presença acentuada de ruído de alta frequência sobreposto às bandas, com oscilações que dificultam a leitura precisa das posições e intensidades dos picos. A partir dessa imagem, o RamanScan-PAL2V executou a varredura da curva e reconstruiu a série numérica correspondente, submetendo-a em seguida ao filtro paraconsistente configurado com 2 CNAPap. O resultado é mostrado na Figura 3, gerada pela própria ferramenta.

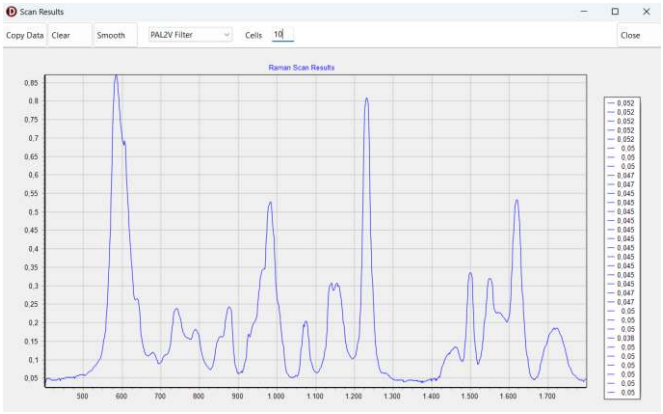

Figura 3. Série extraída e suavizada pelo RamanScan-PAL2V com o filtro paraconsistente (2 CNAPap).

Observa-se que a série tratada preservou integralmente a estrutura de bandas do espectro — as principais feições, situadas aproximadamente em 590, 990, 1240 e 1600 cm^{-1}, mantiveram posição, altura relativa e largura —, enquanto o ruído de alta frequência foi expressivamente atenuado. Os picos estreitos e de maior intensidade, como o localizado próximo a 1240 cm^{-1}, permaneceram nítidos após a filtragem, sem o achatamento tipicamente associado a suavizações excessivas. As intensidades, normalizadas ao intervalo [0, 1] na etapa de extração, permitem comparar diretamente as amplitudes relativas das bandas. Ao final do processamento, a série tratada ficou disponível para exportação (cópia para planilha e arquivo CSV), convertendo um espectro que antes existia apenas como imagem em um conjunto de dados numéricos reutilizável.

Discussão

Os resultados indicam que o RamanScan-PAL2V cumpre os dois papéis a que se propõe — recuperar o dado numérico de um espectro disponível apenas como imagem e tratar o ruído dessa série — em um único fluxo integrado. Esse é o principal diferencial prático da ferramenta: enquanto soluções de digitalização de curvas se limitam a converter a imagem em pares (x, y) [3], aqui a extração já entrega a série normalizada e pronta para o filtro, reduzindo o retrabalho manual entre a obtenção do dado e seu pré-processamento.

Quanto ao comportamento do filtro, a suavização por CNAPap, formalizada nas equações (3)–(5), opera como um estimador recorrente em que cada amostra é ponderada pela evidência acumulada das anteriores. O efeito observado na Figura 3 — atenuação do ruído de alta frequência com preservação da posição, da altura relativa e da largura das bandas — é coerente com esse mecanismo: variações abruptas, típicas de ruído, são amortecidas, enquanto as tendências consistentes do sinal são mantidas. O uso da LPA2v insere ainda o trabalho em uma linha de pesquisa consolidada: as CNAPap foram concebidas para atuar como estimador e filtro de sinais [5], e algoritmos paraconsistentes já haviam sido aplicados a dados de espectroscopia Raman [6], o que evidencia o potencial da abordagem no domínio espectral.

Algumas limitações devem ser reconhecidas. A qualidade da série depende da imagem de entrada e da correta seleção das cores de fundo e da curva, e a varredura registra um único ponto por coluna, o que a restringe a curvas simples. Além disso, a avaliação aqui é qualitativa e ilustrativa; uma validação quantitativa, com métricas de erro e comparação entre diferentes números de CNAPap, constitui desdobramento natural para trabalhos futuros.

Conclusões

Este trabalho apresentou o RamanScan-PAL2V, ferramenta que integra a digitalização de espectros Raman a partir de imagens e o tratamento do ruído por um filtro fundamentado na LPA2v, com número ajustável de CNAPap. No caso demonstrado, a ferramenta reconstruiu a série numérica de um espectro disponível apenas como imagem e, com 2 CNAPap, produziu uma série suavizada que atenuou o ruído preservando a estrutura das bandas, disponibilizando os dados para exportação. Os resultados, de caráter ilustrativo, indicam a viabilidade da abordagem paraconsistente para o pré-processamento de espectros Raman digitalizados.

Referências

1. Han M, Dang Y, Han J. Denoising and baseline correction methods for Raman spectroscopy based on convolutional autoencoder: a unified solution. Sensors. 2024;24(10):3161.

2. Savitzky A, Golay MJE. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. Anal Chem. 1964;36(8):1627-39.
3. Marin F, Rohatgi A, Charlot S. WebPlotDigitizer, a polyvalent and free software to extract spectra from old astronomical publications: application to ultraviolet spectropolarimetry. arXiv:1708.02025 [astro-ph.IM]. 2017.
4. Da Silva Filho JI, Lambert-Torres G, Abe JM. Uncertainty treatment using paraconsistent logic: introducing paraconsistent artificial neural network. Amsterdam: IOS Press; 2010. (Frontiers in Artificial Intelligence and Applications; vol. 211).
5. De Carvalho Junior A, Da Silva Filho JI, Mario MC, Blos MF, Cruz CM. A study of paraconsistent artificial neural cell of learning applied as PAL2v filter. IEEE Lat Am Trans. 2018;16(1):202-9.
6. Garcia DV, Da Silva Filho JI, Silveira L, Pacheco MTT, Abe JM, De Carvalho Junior A, et al. Analysis of Raman spectroscopy data with algorithms based on paraconsistent logic for characterization of skin cancer lesions. Vib Spectrosc. 2019;103:102929.
7. Corrêa MP, Machado AC, Da Silva Filho JI, Garcia DV, Mario MC, Salinas Sedano CT. Paraconsistent annotated logic applied to industry assets condition monitoring and failure prevention based on vibration signatures. *Res Soc Dev*. 2022;11(1):e14211125104.