

Rede Neural Quântica Aplicada a Dados de Biossensor para Detecção de *Staphylococcus aureus*: Tecnologia de Prevenção de Infecções Nosocomiais

Reinaldo Padilha França (CTI – Renato Archer) reinaldofranca@cti.gov.br
Ana Carolina Borges Monteiro Padilha (CTI – Renato Archer) ana.monteiro@cti.gov.br
Rodrigo Bonacin (CTI – Renato Archer) rbonacin@cti.gov.br
Aline Macedo Faria (CTI – Renato Archer) amfaria@cti.gov.br
Larissa Bach Toledo (CTI – Renato Archer) ltodelo@cti.gov.br
Talita Mazon (CTI – Renato Archer) tmazon@cti.gov.br

Resumo

As infecções nosocomiais são um problema de saúde global responsável por milhares de óbitos anuais em diferentes faixas etárias ao redor do mundo. Um dos principais responsáveis é a infecção pela bactéria gram-positiva Staphylococcus aureus (S. aureus), a qual pode desencadear a sepse em pacientes em internação hospitalar. Biossensores eletroquímicos são considerados testes rápidos e promissores para detectar S. aureus na pele das mãos após a assepsia das mesmas. Esses dispositivos lidam com um conjunto de variáveis que podem interferir na assertividade da presença ou ausência do patógeno. Com base nisso, o presente estudo tem como objetivo aplicar uma Rede Neural Quântica (QNN) nos dados coletados pelo biossensor eletroquímico de forma a conferir mais confiabilidade, reprodutibilidade e assertividade aos resultados liberados pelo dispositivo quanto a presença ou ausência de S. aureus. Por meio da análise exclusiva dos resultados eletroquímicos do biossensor a acurácia obtida foi de 70%. No entanto, quando variáveis externas (como umidade e temperatura) foram analisadas pela QNN, houve aumento na acurácia para 82,95%. Diante disso, a associação de metodologias que unem Inteligência Artificial (IA) a Computação Quântica (CQ) pode ser vista como uma ferramenta promissora para a prevenção de infecções nosocomiais.

Palavras-chave: Rede Neural Quântica; Biossensor; Validação.

1. Introdução

De acordo com a Associação Médica Brasileira, estima-se que no Brasil mais de 45 mil óbitos ocorrem anualmente decorrente de infecções hospitalares. A Organização Mundial da Saúde (OMS) afirma que esse número possa aproximar de 100 mil por ano (ANS, 2021).

Uma das principais complicações ocasionada pelas infecções nosocomiais é a sepse, um quadro clínico de infecção generalizada desencadeada por uma resposta exacerbada do organismo para conter uma infecção. Estima-se que 11 milhões de óbitos sejam decorrentes de sepse anualmente no mundo. Desse total, o Brasil representa 400 mil casos anuais, onde 60% dos diagnosticados vem a óbito. O número de pacientes pediátricos acometidos por infecções hospitalares corresponde a 42 mil, sendo que 19% não sobrevivem. Como consequência dessas estatísticas o Brasil apresenta um dos maiores índices de sepse entre os países em desenvolvimento (Ebserh, 2023).

Um dos principais causadores de infecção hospitalar é uma bactéria gram-positiva denominada de *Staphylococcus aureus* (*S. aureus*), responsável por mais de 1 milhão de óbitos anuais no

mundo (IKUTA et al, 2022). Sua descoberta data do ano de 1879, quando Robert Koch a descreveu a partir da observação de amostra de pus humano. Em 1880, o cirurgião escocês Alexander Ogston, a descreveu na morfologia de coccus semelhantes a cachos de uva, sendo indicada como responsável por uma grande gama de doenças humanas. Majoritariamente essas infecções acometem o trato respiratório inferior, sangue, peritônio, regiões intra-abdominais e podem causar sepse (Piewngam; Otto, 2024). Apenas em 1882, a bactéria recebeu o nome de *Staphylococcus aureus*, onde *staphylé* é uma palavra grega que significa cacho de uva e *aureus* faz referência a cor da colônia bacteriana que lembra a cor do ouro (Corbia et al., 2000).

Em 4 de dezembro de 1904, surgiu a mecânica quântica por meio dos estudos do comportamento da matéria pelo pesquisador Mark Plank. Um século depois essa ciência deu origem a Computação quântica (CQ). Essa tecnologia utiliza conceitos da mecânica quântica para resolver problemas complexos mais rapidamente do que em computadores tradicionais e otimiza simulações de sistemas físicos. A principal estrutura da CQ é o *qubit* (*bit* quântico). Os conceitos principais da CQ são: superposição (o *qubit*, pode ser 0 e 1 simultaneamente, de forma a aumentar a capacidade de armazenamento de informações), emaranhamento (correlação intrínseca de *qubits* independente da distância, de forma a otimizar velocidade do sistema), interferência quântica (manipulação das probabilidades de superposição, de maneira a reforçar as soluções corretas e anular as incorretas, assim otimizando o processamento de resultados) e decoerência (término da superposição e o emaranhamento, ocasionando o colapso de onda e consequentemente gerando o resultado entre 0 e 1) (Padilha et al., 2020).

Nos últimos meses, o interesse na utilização da Inteligência Artificial (IA) tem aumentado de forma a atingir não apenas pessoas, mas também organizações. Na área da saúde estima-se que 62,5% dos hospitais privados já utilizam a IA (MedicinaSA, 2023). Estimativas feitas pela Precedence Research apontam que o mercado mundial de IA voltada para serviços de saúde poderá aumentar 37% por ano e alcançar o valor de US\$ 187,9 bilhões até o ano de 2030.

Em 2025, um estudo da Universidade Estadual Paulista (Unesp) associou IA e a CQ para diagnóstico precoce de câncer de mama. Com base nisso a união dessas duas tecnologias pode ser vista como uma forte aliada para resolução de desafios nas áreas médicas (Sobrinho, Y.R. et al, 2025).

O presente estudo visa aplicar uma Rede Neural Quântica (do inglês “*Quantum Neural Networks – QNN*”), ou seja, uma metodologia que combina CQ e IA em dados coletados por biossensor de detecção de *S. aureus*, de forma a auxiliar no combate de infecções nosocomiais, por meio de um dispositivo de baixo custo e que possa atender ao Sistema Único de Saúde.

2. Metodologia

O desenvolvimento desse estudo foi formado por meio de 3 etapas: (1) desenvolvimento do biossensor de *S. aureus*, (2) coleta das amostras e testagem do biossensor, (3) aplicação da QNN. Todas as amostras foram coletadas seguindo o protocolo aprovado pelo comitê de ética.

Os dados utilizados na QNN foram obtidos por meio da coleta de amostras de material biológico coletado na palma das mãos de 400 voluntários. Por meio dessa coleta e testagem em biossensor eletroquímico foram obtidos os valores correspondentes a como a corrente (μA); potencial elétrico (V) e resistência elétrica (corrente/potencial elétrico) do biossensor. Além disso, também foram coletados dados referentes ao estado de higiene das mãos dos voluntários, sendo classificados como mãos higienizadas ou não higienizadas no momento da coleta. Dados ambientais também foram obtidos, como a umidade e a temperatura do momento da testagem

das amostras no biossensor. As amostras coletadas das palmas das mãos dos voluntários foram submetidas a cultura bacteriana para fornecer os dados de padrão ouro de microbiologia, e posterior validação dos resultados eletroquímicos do biossensor associado a QNN.

A QNN testada com dados provenientes do biossensor e da coleta do material foram validados através da de validação cruzada *k-fold* ($k = 5$), matriz de confusão, sensibilidade, especificidade, precisão, F1 – score, F2 - score e AUC (Área sob a Curva).

Os dados gerados pelo biossensor foram: valor da corrente – da análise DPV – (μA); valor do potencial elétrico – da análise DPV – (V); razão entre corrente e potencial; estado de higiene das mãos (higienizada e não higienizada); temperatura e umidade do ambiente; bem como um resultado do cultivo de amostras coletadas das mãos dos voluntários. Todos os dados foram tratados e aplicados seguindo os passos descritos na Figura 1.

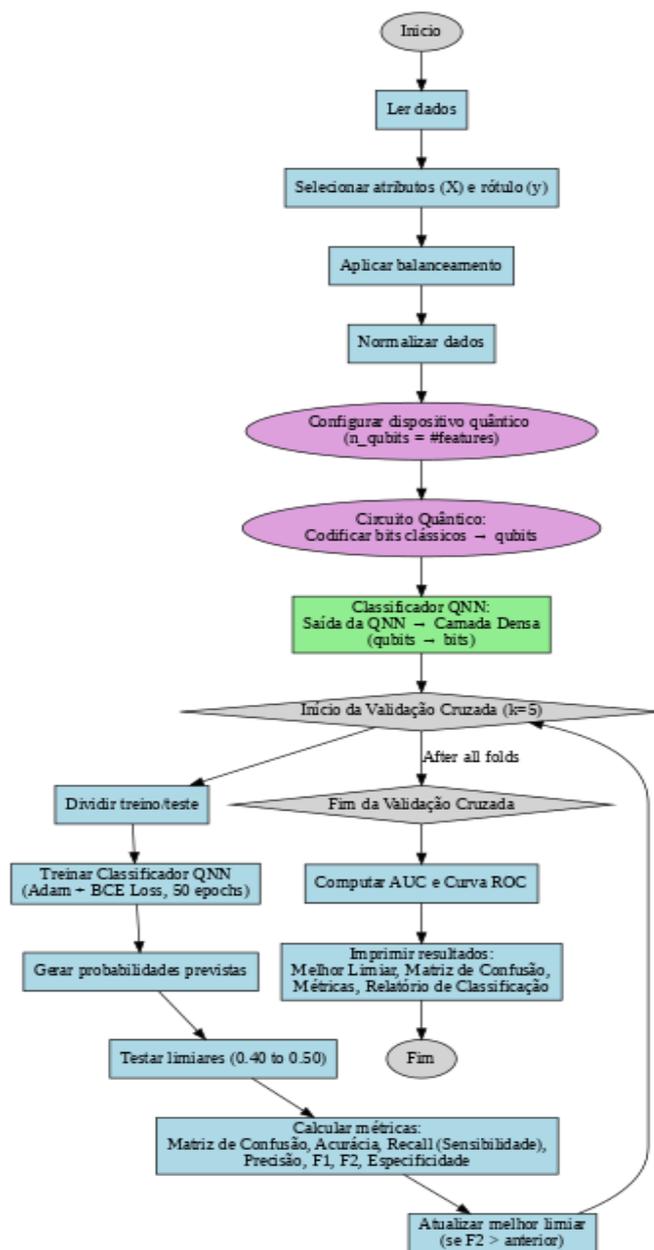


Figura 1- Modelo lógico dos algoritmos da IA. Em azul claro e escuro são dados em *bits* (modelo clássico) e em rosa dados em *qubits* (computação quântica)

Inicialmente no bloco de entrada ocorre a codificação individual de cada *feature* em seu próprio *qubit*, em seguida os dados são conduzidos ao bloco quântico, o qual nesse caso é formado por 5 *qubits*, ou seja, um *qubit* para cada uma das *features* analisadas pelo modelo. Nesse momento a QNN é executada em simulador quântico, formado por um circuito quântico desenvolvido exclusivamente para analisar os dados específicos desse biossensor eletroquímico de *S. aureus*. A QNN atua através da codificação dos dados e da camada de emaranhamento. Na codificação dos dados as cinco *features* são convertidas em um estado quântico, por meio das portas de rotação, onde cada valor de cada *feature* é empregado como um ângulo de rotação para cada *qubit* específico. A camada de emaranhamento é responsável por aplicar uma série de portas que emaranham os *qubits* entre si. Essa camada possui pesos que são ajustados durante o treinamento. Em seguida, as 5 *features* saem do bloco quântico após a medição e são encaminhados para a camada clássica de IA, onde encontram camadas densas e funções de ativação, havendo a liberação de um único resultado binário de 0 e 1, para resultados positivo ou negativo para a presença de *S. aureus* na palma das mãos.

3.0 Resultados e discussão

Com a finalidade de atribuir uma contribuição e influência de cada uma das *features* do modelo de predição foi aplicada a técnica de SHAP (*SHapley Additive exPlanations*) (Antwarg et al, 2021). Com a aplicação do SHAP é possível aumentar a confiabilidade da QNN. Para isso as variáveis de estado de higiene das mãos (higienizada ou não higienizada), corrente (proveniente da análise do DPV), umidade do ambiente, potencial (proveniente da análise do DPV) e a razão entre a corrente e potencial, foram analisadas, conforme apresentado na Figura 2. Os resultados demonstram que as *features* mais relevantes são a declaração do estado de higiene das mãos (higienizada ou não higienizada), corrente (DPV) e umidade do ambiente.

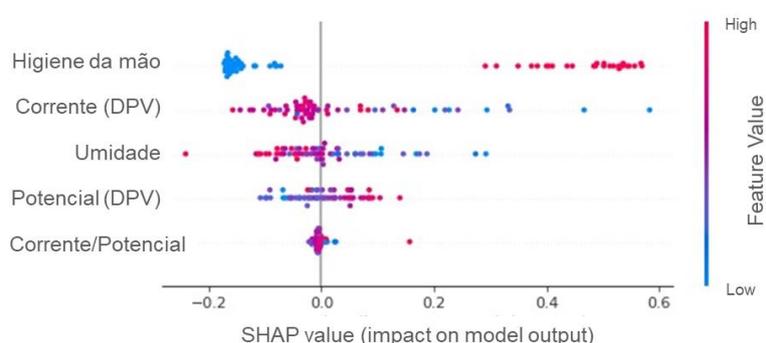


Figura 2 – SHAP para identificação das variáveis mais relevantes para o modelo de Rede Neural Quântica aplicado a dados de biossensor de *S. aureus*

Com base nisso, é relevante que o usuário do biossensor eletroquímico forneça dados externos (higiene das mãos e umidade ambiental no dia da coleta) de forma a ter um resultado mais assertivo e confiável das análises das amostras. Caso não haja fornecimento de tais informações, a acurácia do modelo é de 70%. Entretanto, com a adição das variáveis

supracitadas, o modelo apresenta 82,95% de acurácia quando associados a QNN, demonstrando a funcionalidade e competitividade da CQ em relação a alguns modelos clássicos, mesmo que atualmente haja limitações dos *hardwares* quânticos. É primordial destacar que a rede quântica abordada conseguiu executar a tarefa de classificação com os resultados apresentados, conforme Tabela 1.

	Acurácia	F2-Score	F1-Score	AUC	Sensibilidade	Especificidade
QNN	82,95%	86,67%	83,87%	88,89%	88,64%	77,27%

Tabela 1 – Rede Neural Quântica com variáveis externas (estado de higiene das mãos, temperatura, umidade do ambiente)

Os resultados apontam que as Redes Neurais Quânticas têm potencial para realizar tarefas de aprendizado de máquina, mesmo com as limitações da tecnologia atual. Além disso nota -se que a QNN é capaz de representar mais informações com menos parâmetros bem como generalizar melhor os dados, visto que essa metodologia pode explorar espaços de características que seriam inacessíveis para modelos clássicos, ou seja, no futuro, redes de CQ poderão apresentar desempenho superior em tarefas de aprendizado de máquina. A capacidade de representar mais informações com menos parâmetros é uma das grandes promessas da computação quântica.

A QNN demonstrou que uma máquina que opera com base nos princípios da mecânica quântica, através da codificação de *features*, entrelaçamento de informações e mensurações observáveis, apresenta a capacidade de aprender e classificar dados de maneira significativa. Possivelmente, o futuro do *Machine Learning Quântico* será construído, prometendo resolver problemas que as arquiteturas clássicas atuais não conseguem.

Com base nas análises através do SHAP nota -se que a umidade é uma das variáveis primordiais para o desempenho do modelo de QNN. Isso é justificado pelo fato que a composição do biossensor é baseada em biocarvão proveniente do reaproveitamento da biomassa, ou seja, é oriundo de toda matéria orgânica de origem vegetal ou animal capaz de gerar energia. Visando a reprodutibilidade de um dispositivo baseado em biomassa, é crucial que sejam fornecidos os dados de umidade e temperatura do ambiente no momento em que as amostras são submetidas as análises por biossensor eletroquímico de detecção de *S. aureus*. É extremamente relevante salientar que essa pesquisa está sendo desenvolvida em um país tropical, onde geralmente as temperaturas e umidade estão em maior parte do tempo em níveis elevados. Diante disso mesmo que o biossensor seja testado em regiões áridas ou frias, a QNN terá a capacidade de aprender com novos padrões climáticos e permanecer fornecendo resultados precisos, confiáveis e reprodutíveis. Essas variáveis são pontos cruciais para disponibilização, reprodutibilidade e distribuição comercial dessa tecnologia no futuro.

Através da análise dos dados da QNN, nota -se que o biossensor de detecção de *S. aureus* preza por mitigar a liberação de resultados falso negativos, ou seja, evita que pessoas com mão contaminadas sejam classificadas como mão limpas, visto que o dispositivo apresenta elevado

valor de especificidade. Caso isso acontecesse com grande frequência haveria a possibilidade de maior contaminação por *S. aureus* dentro do ambiente hospitalar. No caso de falso positivo, ou seja, pessoas com mãos limpas sendo classificadas como mãos contaminadas, levaria o profissional da saúde a apenas higienizar novamente as mãos. Tal ação não traria nenhum tipo de dano aos pacientes ou mesmo aos trabalhadores.

3. Conclusão

A CQ é uma tecnologia que poderá ser cada vez mais empregada nas áreas médicas. Juntamente com a IA, algoritmos como a QNN aplicada no presente estudo podem ser vistos como ferramentas cruciais para o futuro. O biossensor eletroquímico para a detecção de *S. aureus* associado a QNN para análise de dados apresenta acurácia satisfatória de 82,95% e alta especificidade 88,89%, garantindo boa aplicabilidade no mundo real para a prevenção de infecções nosocomiais. Trabalhos futuros envolverão testes com mais algoritmos de CQ associadas a IA, em busca de melhores resultados de desempenho e confiabilidade para tornar as áreas médicas cada vez mais assertiva e ágil a fim de mitigar riscos e prejuízos a pacientes.

Referências

- ANS: ANS alerta sobre o controle das infecções hospitalares,2021. <https://www.gov.br/ans/pt-br/assuntos/noticias/qualidade-da-saude/ans-alerta-sobre-o-controle-das-infeccoes-hospitalares#:~:text=Segundo a Associação Médica Brasileira,até 100 mil por ano>
- Ikuta, K.S., Swetschinski, L.R., Robles Aguilar, G. Sharara, F. & Al, E.:** Global mortality associated with 33 bacterial pathogens in 2019: a systematic analysis for the Global Burden of Disease Study 2019. *Lancet*. 400, 2221–2248 (2022). [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(22\)02185-7](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(22)02185-7)
- Corbia, A.C.G., et al.:** Staphylococcus aureus: importância para a saúde pública e aspectos epidemiológicos, <https://www.infoteca.cnptia.embrapa.br/infoteca/handle/doc/597280>, (2000)
- Padilha, R. et al.** Understanding quantum computation concepts and applications. In: Brazilian Technology Symposium. Cham: Springer International Publishing, 2020. p. 351-359.
- Piewngam, P.; Otto, M.:** Staphylococcus aureus colonisation and strategies for decolonisation. *The Lancet Microbe*. 5, e606–e618 (2024). [https://doi.org/10.1016/S2666-5247\(24\)00040-5](https://doi.org/10.1016/S2666-5247(24)00040-5)
- Ebserh, E.B. de S.H.:** Dia Mundial da Sepsis: Brasil tem alta taxa de mortalidade por sepsis entre os países em desenvolvimento, 2023. <https://www.gov.br/ebserh/pt-br/hospitais-universitarios/regiao-sudeste/hu-ufjf/comunicacao/noticias/2023/dia-mundial-da-sepsis-brasil-tem-alta-taxa-de-mortalidade-por-sepsis-dentre-os-paises-em-desenvolvimento#:~:text=A cada ano%2C a sepsis, %2C um índice de>
- OPAS, O.P.-A. da S.:** Dia Mundial de Higiene das Mãos 2024, <https://www.paho.org/pt/campanhas/dia-mundial-higiene-das-maos-2024>
- UNIVEL, C.U.:** Inteligência Artificial: como a tecnologia está transformando o mercado de trabalho e criando novas profissões, <https://g1.globo.com/pr/parana/especial-publicitario/univel/ensino-de-verdade-univel/noticia/2024/09/11/inteligencia-artificial-como-a-tecnologia-esta-transformando-o-mercado-de-trabalho-e-criando-novas-profissoes.ghtml>
- MedicinaSA:** Inteligência Artificial na Saúde: 62,5% dos hospitais privados já usam a tecnologia,2023. <https://medicinas.com.br/inteligencia-artificial-na-saude/>
- Sobrinho, Y. R. et al.** A Hybrid Quantum-Classical Model for Breast Cancer Diagnosis with Quantum Evolutions. In: 2025 IEEE 38th International Symposium on Computer-Based Medical Systems (CBMS). IEEE, 2025. p. 290-296.
- Antwarg, L., Miller, R.M., Shapira, B., Rokach, L.:** Explaining anomalies detected by autoencoders using Shapley Additive Explanations. *Expert Syst. Appl.* 186, 115736 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2021.115736>