



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CATALÃO
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

WALLACE HENRIQUE CARDOSO PERES

**ANÁLISE DOS PARÂMETROS QUE INFLUENCIAM A
TÉCNICA DE ANÁLISE DE IMAGEM DIGITAL: UMA
ABORDAGEM PARA QUANTIFICAÇÃO DE ÍONS FOSFATO
E FERRO (III)**

Catalão-GO

2025



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CATALÃO

INSTITUTO DE QUÍMICA

Av. Dr. Lamartine Pinto de Avelar, número 1120, - Bairro Setor Universitário, Catalão/GO, CEP 75704-020
Telefone: - - <https://www.ufcat.edu.br>

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO (TECA)

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO (TECA) PARA DISPONIBILIZAR VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES E DISSERTAÇÕES NA BIBLIOTECA DIGITAL DE TESES E DISSERTAÇÕES DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE CATALÃO (UFCAT)

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Catalão (UFCAT) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFCAT), sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei 9.610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou download, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo das Teses e Dissertações disponibilizado na BDTD/UFCAT é de responsabilidade exclusiva do autor. Ao encaminhar o produto final, o(a) autor(a) e o(a) orientador(a) Ao encaminhar o produto final, o autor(a) e o(a) orientador(a) firmam o compromisso de que o trabalho não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

1. Identificação do material bibliográfico

Dissertação ou Tese? **DISSERTAÇÃO**

2. Nome completo do autor: **Wallace Henrique Cardoso Peres**

Nome completo do(a) orientador(a): **Vanessa Nunes Alves**

3. Título do trabalho

Título: **ANÁLISE DOS PARÂMETROS QUE INFLUENCIAM A TÉCNICA DE ANÁLISE DE IMAGEM DIGITAL: UMA ABORDAGEM PARA QUANTIFICAÇÃO DE ÍONS FOSFATO E FERRO (III)**

4. Informações de acesso ao documento (este campo deve ser preenchido pelo orientador)

Concorda com a liberação total do documento: [X] SIM [] NÃO¹

[¹] Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. Após esse período, a possível disponibilização ocorrerá apenas mediante:

a) consulta ao(à) autor(a) e ao(à) orientador(a);

b) novo Termo de Ciência e de Autorização (TECA) assinado e inserido no arquivo da tese ou dissertação.

O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

Obs.: Este termo deverá ser assinado no SEI pelo orientador e pelo autor



Documento assinado eletronicamente por **VANESSA NUNES ALVES, Orientador(a)**, em 20/02/2025, às 18:18, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Wallace Henrique Cardoso Peres, Usuário Externo**, em 11/03/2025, às 15:58, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufcat.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0167016** e o código CRC **B0596257**.



WALLACE HENRIQUE CARDOSO PERES

**ANÁLISE DOS PARÂMETROS QUE INFLUENCIAM A TÉCNICA DE
ANÁLISE DE IMAGEM DIGITAL: UMA ABORDAGEM PARA
QUANTIFICAÇÃO DE ÍONS FOSFATO E FERRO (III)**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Química, do Instituto de Química, da Universidade Federal de Catalão (UFCAT), como requisito para obtenção do título de Mestre em Química. Área de Concentração: Química.

**Orientadora: Professora Doutora
Vanessa Nunes Alves**

Catalão-GO

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do
Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFCAT.

Peres, Wallace Henrique Cardoso

Análise dos parâmetros que influenciam a técnica de análise de
imagem digital : uma abordagem para quantificação de íons fosfato e
ferro (III) / Wallace Henrique Cardoso Peres. - 2025.

126 f.: il.

Orientadora: Profa. Dra. Vanessa Nunes Alves.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Catalão,
Instituto de Química, Programa de Pós-Graduação em Química,
Catalão, 2025.

Bibliografia. Apêndice.

Inclui abreviaturas, tabelas, lista de figuras, lista de tabelas.

1. Análise de imagem digital. 2. RGB. 3. Smartphone. 4. Fosfato. 5.
Ferro (III). I. Alves, Vanessa Nunes, orient. II. Título.

ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Ata nº 113 da sessão de Defesa de Dissertação de **Wallace Henrique Cardoso Peres**, que confere o título de Mestre em Química no Programa de Pós-graduação em Química da UFCAT.

Ao décimo nono dia do mês de fevereiro de dois mil e vinte e cinco, a partir das 14:00 horas, realizou-se na sala Sala 267 do Bloco M da Universidade Federal de Catalão, a sessão pública de Defesa de Dissertação do(a) discente **Wallace Henrique Cardoso Peres**, intitulada "**ANÁLISE DOS PARÂMETROS QUE INFLUENCIAM A TÉCNICA DE ANÁLISE DE IMAGEM DIGITAL: UMA ABORDAGEM PARA QUANTIFICAÇÃO DE ÍONS FOSFATO E FERRO (III)**" na área de concentração em Química. Os trabalhos foram instalados pela Orientadora, Professora Doutora Vanessa Nunes Alves (PPGQ Mestrado - UFCAT) com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Professora Doutora Silvia de Sousa Freitas (PPGQ Mestrado - UFCAT), membro titular interno e Professor Doutor João Flávio da Silveira Petrucci (IQ - UFU), membro titular externo. Durante a arguição os membros da banca fizeram sugestões de pequenas alterações e complementações no trabalho final. A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Dissertação, tendo sido o candidato **aprovado** pelos seus membros. Proclamados os resultados pela Professora Doutora Vanessa Nunes Alves, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos membros da Banca Examinadora.

TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA:

Não houve alteração no título.



Documento assinado eletronicamente por **SILVIA DE SOUSA FREITAS, Professor(a) do Magistério Superior**, em 20/02/2025, às 15:06, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **VANESSA NUNES ALVES, Orientador(a)**, em 20/02/2025, às 18:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **João Flávio da Silveira Petrucci, Usuário Externo**, em 24/02/2025, às 16:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site

[https://sei.ufcat.edu.br/sei/controlador_externo.php?](https://sei.ufcat.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0)

[acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0](https://sei.ufcat.edu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **0166474** e o código CRC **4FACCAE1**.

Referência: Processo nº 23852.001129/2025-76

SEI nº 0166474

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, a Deus, por todas as oportunidades de evolução.

Aos meus guias espirituais, pela proteção e auxílio.

Aos meus pais, pelo apoio incondicional, em especial à minha mãe, Rosineide Cardoso, por sempre acreditar muito mais do que eu.

À minha orientadora, Dra. Vanessa Nunes Alves, pela excelente orientação desde a iniciação científica e por todas as contribuições à minha formação acadêmica e pessoal.

Aos meus amigos e parceiros de laboratório, James Silva, Ana Alice, Eduarda Garcia, e todos os integrantes do grupo GPSAAT, pelas longas conversas e experiências.

Ao Instituto de Química e à UFCAT.

À CAPES e à FAPEG pela bolsa concedida (Projeto nº 88887.710689/2022-00, Programa nº 52059006009P9).

**“É mais um filho de Zé que acordou cedo pra ver
Que o Sol que brilha pra lá não traz o que ele quer ter
Que a mão que mostra e oferece, de nós sempre ela esquece
Mas nós faz uma prece e bota o trem pra correr”
- MC Kako, Ano de Copa**

RESUMO

A análise de imagem digital tem se destacado como uma abordagem inovadora e acessível na Química Analítica, possibilitando o uso de smartphones como detectores em métodos quantitativos. No entanto, a ausência de padronização e a escassez de estudos detalhados sobre os parâmetros que influenciam a aquisição e o processamento das imagens ainda limitam a reprodutibilidade e a confiabilidade dessas metodologias. Este trabalho teve como objetivo principal desenvolver e otimizar uma metodologia baseada em análise de imagem digital, com ênfase na avaliação sistemática de parâmetros técnicos que afetam diretamente o desempenho analítico, como condições de iluminação, distância de captura, exposição do sensor e comportamento dos canais de cor RGB. Para isso, foi construída uma plataforma analítica com LEDs brancos e uma caixa em plástico ABS, garantindo controle das condições experimentais. Os íons fosfato e ferro(III) foram utilizados como analitos modelo para o desenvolvimento e otimização do método. Para a determinação de fosfato, empregou-se a reação do azul de molibdênio, enquanto o ferro(III) foi quantificado por meio da formação do complexo ferro-tiocianato. Os dados analíticos foram extraídos a partir dos canais RGB das imagens capturadas por diferentes modelos de smartphones. A avaliação sistemática e posterior otimização desses parâmetros experimentais resultaram em melhorias significativas no desempenho do método. A faixa de trabalho variou de 0,25 a 10,0 mg L⁻¹, com precisão intradia de 2,1% a 4,9% e interdia de 4,5% a 6,8% para fosfato; e intradia de 1,6% a 5,7% e interdia de 2,2% a 6,2% para ferro(III). Para este último, também foram propostas faixas alternativas de 0,1 a 1,9 mg L⁻¹ e 10,0 a 80,0 mg L⁻¹. Os limites de detecção (LD) foram de 0,22 mg L⁻¹ para fosfato e 0,18 mg L⁻¹ para ferro(III), enquanto os limites de quantificação (LQ) foram de 0,68 e 0,54 mg L⁻¹, respectivamente, todos calculados matematicamente. Pelo método visual, os valores de LD e LQ foram 0,1 mg L⁻¹ e 0,3 mg L⁻¹, para ambos os íons. A exatidão foi avaliada por diferentes abordagens: para fosfato, obtiveram-se recuperações de 88,5% a 107%, e para ferro(III), os resultados foram confirmados por comparação com a espectrofotometria UV-Vis, sem diferenças significativas (testes F e t, 95% de confiança). A reprodutibilidade foi confirmada com o uso de outros dois smartphones como detectores, apresentando curvas analíticas com valores de R² superiores a 0,99 e coeficientes angulares similares. A sustentabilidade do método foi avaliada utilizando a ferramenta AGREE, obtendo um índice de “verdura” de 0,5, e mostrou alinhamento com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 3, 4, 6, 9, 12 e 13. Além disso, a metodologia foi aplicada ao monitoramento da qualidade do ar em Catalão – GO, avaliando a concentração de íons fosfato durante o outono e o inverno. As concentrações determinadas estavam dentro dos padrões legais e não apresentaram diferenças significativas daquelas obtidas por espectrofotometria UV-Vis. Os resultados obtidos demonstram que a abordagem sistemática de avaliação e otimização dos parâmetros envolvidos é essencial para aprimorar o desempenho de métodos baseados em imagem digital, garantindo maior reprodutibilidade, confiabilidade e robustez analítica. A metodologia desenvolvida, além de se mostrar viável e de baixo custo, reforça o potencial dessa técnica como uma alternativa sustentável e acessível, com aplicabilidade em diferentes contextos analíticos. As evidências apresentadas contribuem para o desenvolvimento de novos métodos baseados em imagem digital, ampliando as possibilidades de sua utilização em cenários com infraestrutura limitada.

Palavras-chave: Análise de imagem digital, RGB, smartphone, fosfato, ferro(III)

ABSTRACT

Digital image analysis has emerged as an innovative and accessible approach in Analytical Chemistry, enabling the use of smartphones as detectors in quantitative methods. However, the lack of standardization and the scarcity of detailed studies on the parameters influencing image acquisition and processing still limit the reproducibility and reliability of such methodologies. This study aimed to develop and optimize a methodology based on digital image analysis, with emphasis on the systematic evaluation of technical parameters that directly affect analytical performance, such as lighting conditions, capture distance, sensor exposure, and the behavior of RGB color channels. To this end, an analytical platform was constructed using white LEDs and an ABS plastic enclosure to ensure controlled experimental conditions. Phosphate and iron(III) ions were used as model analytes for method development and optimization. The phosphate determination was based on the molybdenum blue reaction, while iron(III) was quantified through the formation of the iron-thiocyanate complex. Analytical data were extracted from the RGB channels of images captured by different smartphone models. The systematic evaluation and subsequent optimization of experimental parameters led to significant improvements in method performance. The working range varied from 0.25 to 10.0 mg L⁻¹, with intraday precision ranging from 2.1% to 4.9% and interday precision from 4.5% to 6.8% for phosphate; and intraday from 1.6% to 5.7% and interday from 2.2% to 6.2% for iron(III). For the latter, alternative ranges of 0.1–1.9 mg L⁻¹ and 10.0–80.0 mg L⁻¹ were also proposed. Limits of detection (LOD) were 0.22 mg L⁻¹ for phosphate and 0.18 mg L⁻¹ for iron(III), while limits of quantification (LOQ) were 0.68 and 0.54 mg L⁻¹, respectively, all mathematically calculated. Using a visual method, LOD and LOQ were 0.1 mg L⁻¹ and 0.3 mg L⁻¹, respectively, for both ions. Accuracy was evaluated using different approaches: phosphate recoveries ranged from 88.5% to 107%, and iron(III) results showed no significant differences when compared to UV-Vis spectrophotometry (F and t tests, 95% confidence). Method reproducibility was confirmed using two additional smartphones as detectors, yielding analytical curves with R² values above 0.99 and similar slopes. Method sustainability was assessed using the AGREE tool, resulting in a “greenness” score of 0.5, and aligned with Sustainable Development Goals (SDGs) 3, 4, 6, 9, 12, and 13. Furthermore, the methodology was applied to air quality monitoring in Catalão – GO, evaluating phosphate ion concentrations during autumn and winter. The measured concentrations were within legal limits and did not differ significantly from those obtained by UV-Vis spectrophotometry. The results demonstrate that the systematic evaluation and optimization of key parameters are essential to improve the performance of image-based methods, ensuring greater reproducibility, reliability, and analytical robustness. In addition to being low-cost and feasible, the developed methodology highlights the potential of digital image analysis as a sustainable and accessible alternative with applicability across different analytical contexts. The presented evidence contributes to the development of new image-based methods, expanding their use in settings with limited infrastructure.

Keywords: Digital image analysis, RGB, smartphone, phosphate, iron(III)

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável	6
Figura 2: Interface do software AGREE	10
Figura 3: Pictograma do software AGREE.	11
Figura 4: Espectro eletromagnético correspondente a luz visível	13
Figura 5: Filtro de cor Bayer posicionado acima de um sensor CCD ou CMOS.....	17
Figura 6: Triângulo de exposição.	18
Figura 7: Exemplos de abordagem de química analítica baseada em análise de imagem.	20
Figura 8: Espectro de emissão de LEDs na região Ultravioleta, visível e infravermelho.....	24
Figura 9: Diagrama de cromaticidade CIE 1931, com contornos das gamas de cores de sRGB, DCI-P3, Rec. 2020, Adobe RGB e ProPhoto RGB sobrepostos.	27
Figura 10: Representação do cubo RGB.	28
Figura 11: Histórico de evolução do software ImageJ.	31
Figura 12: Comparação do tamanho das partículas MP_{10} e $MP_{2,5}$ em relação a um fio de cabelo humano e um grão de areia fina de praia.	39
Figura 13: Representação esquemática da deposição do material particulado em diferentes regiões do corpo humano.....	40
Figura 14: Aparato construído para captura de imagens em ambiente controlado. A estrutura conta com LEDs localizados na base para iluminação uniforme; uma base de polipropileno no centro, que também atua como superfície difusora, e uma microplaca de 96 poços contendo as soluções a serem analisadas; na parte superior, há um orifício destinado ao posicionamento da câmera do smartphone.	46
Figura 15: Obtenção dos histogramas dos canais RGB no ImageJ.	47
Figura 16: Aparato construído para captura de imagens em ambiente controlado. A estrutura conta com LEDs localizados na base para iluminação uniforme; uma base de polipropileno no centro, que também atua como superfície difusora; na parte superior, há um orifício destinado ao posicionamento da câmera do smartphone.	52
Figura 17: Curvas analíticas construídas utilizando a intensidade dos canais RGB como resposta às variações de concentração do complexo fosfato molibdênio pentavalente (0,05 até 2,5 mg L ⁻¹).	53
Figura 18: Curvas analíticas construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações complexo fosfato molibdênio pentavalente (0,1 até 2,5 mg L ⁻¹).	54

Figura 19: Imagem do complexo de fosfato molibdênio pentavalente capturada nas condições definidas como ideais: Condições de captura: Configuração 2, exposição mínima, 2 LEDs. .60	60
Figura 20: Curvas analíticas construídas utilizando a intensidade dos canais RGB, como resposta às variações de concentração do complexo ferro tiocianato (0,25 até 10 mg L ⁻¹). Condições de captura: configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.61	61
Figura 21: Curvas analíticas construídas utilizando o sinal analítico (S _A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração do complexo ferro tiocianato (0,25 até 10 mg L ⁻¹). Condições de captura: configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.....62	62
Figura 22: Curva analítica construída no Blue para o complexo de ferro tiocianato, na faixa de concentração de 0,1 até 1,9 mg L ⁻¹ . Condições de captura: 2 LEDs, configuração 2 e exposição mínima.63	63
Figura 23: Faixas de concentração do complexo ferro-tiocianato utilizadas para construção das curvas analíticas nos canais RGB. Canal Blue = 0,1 a 1,9 mg L ⁻¹ ; Canal Green = 0,25 a 10 mg L ⁻¹ ; Canal Red = 10 a 80 mg L ⁻¹64	64
Figura 24: Curvas de calibração construída no canal Red para o complexo de ferro tiocianato, na faixa de concentração de 10,0 até 80,0 mg L ⁻¹ . Condições de captura: 2 LEDs, configuração 2 e exposição padrão.....65	65
Figura 25: Curvas analíticas construída nos canais <i>Red</i> , <i>Green</i> , <i>Blue</i> e média RGB (RGB _M) para o complexo de fosfato, na faixa de concentração de 0,25 até 10,0 mg L ⁻¹ utilizando imagens capturadas por três smartphones: Galaxy S22 Ultra, Iphone 11, Redmi Note 12S. Condições de captura: Configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.....69	69
Figura 26: Curvas de analíticas para o complexo fosfato molibdênio na faixa de 0,25 até 10,0 mg L ⁻¹ construídas utilizando análise de imagem digital (canal <i>Red</i> , condições de captura: distância 2, 2 LEDs exposição mínima) e espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 650 nm.....79	79
Figura 27: Concentrações de íons PO ₄ ³⁻ determinadas em amostras de material particulado (MP ₁₀) coletadas no centro da cidade de Catalão e no campus da UFCAT, durante o outono e o inverno. As análises foram realizadas empregando a metodologia desenvolvida (DIA, canal Red, condições de captura: distância 2, 2 LEDs e exposição mínima) e a espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis a 650 nm.....81	81
Figura 28: Concentrações de íons PO ₄ ³⁻ determinadas em amostras de material particulado (MP _{2,5}) coletadas no campus da UFCAT durante o outono e o inverno. As análises foram realizadas empregando a metodologia desenvolvida (DIA, canal Red, condições de captura:	

distância 2, 2 LEDs e exposição mínima) e a espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis a 650 nm	82
Figura 29: Pictograma AGREE para a metodologia proposta utilizando detecção por análise de imagem digital.	84
Figura 30: Pictograma AGREE para a metodologia proposta utilizando detecção por espectrofotometria UV-vis.....	85

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Valores de intensidade dos canais RGB e S_A	55
Tabela 2: Valores de R^2 e coeficiente angular (sensibilidade) das curvas analíticas do complexo fosfato molibdênio pentavalente, construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração (0,1 até 7,0 mg L ⁻¹). As imagens digitais foram capturadas sob diferentes condições de distância, quantitativo de LEDs e exposição. Configuração 1 = 14 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, e 8 cm entre as soluções e os LEDs.	57
Tabela 3: Valores de R^2 e coeficiente angular (sensibilidade) das curvas analíticas do complexo fosfato molibdênio pentavalente, construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração (0,1 até 7,0 mg L ⁻¹). As imagens digitais foram capturadas sob diferentes condições de distância, quantitativo de LEDs e exposição. Configuração 2 = 9 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, e 13 cm entre as soluções e os LEDs.	58
Tabela 4: Valores de S_A e equações da reta para curvas de calibração do complexo ferro tiocianato construídas em diferentes faixas de trabalho nos canais RGB.	66
Tabela 5: Valores de desvio padrão relativo (DRP) para a avaliação da precisão intradiária e interdiária na determinação de fosfato e ferro(III) em diferentes concentrações.	72
Tabela 6: Comparação de faixa linear, R^2 e limite de detecção em métodos para determinação de fosfato.	74
Tabela 7: Comparação de faixa linear, R^2 e limite de detecção em métodos para determinação de ferro.....	75
Tabela 8: Teste de recuperação de fosfato em amostras aquosas.	77
Tabela 9: Concentrações de íons Fe(III) determinadas em amostras de material particulado utilizando as técnicas de Espectrofotometria de Absorção Molecular UV-VIS e Análise por Imagens Digitais.	78
Tabela 10: Resultados para os Teste T e Teste F aplicados para avaliação estatística do método desenvolvido para determinação de ferro com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 536 nm.	78
Tabela 11: Resultados para os Teste T e Teste F aplicados para avaliação estatística do método desenvolvido para determinação de fosfato com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis.	83

Tabela 12: Avaliação do perfil verde da metodologia de determinação de íons fosfato em MP utilizando a ferramenta AGREE.....	86
Tabela 13: Procedimento AGREE para atribuir pontuações com base nos 12 princípios do GAC.....	104

LISTA DE ABREVIATURAS

AGREE	Analytical GREEnness – índice AGREE
DIA	Digital Image Analysis – Análise de Imagem Digital
GC	Green Chemistry – Química Verde
GAC	Green Analytical Chemistry – Química Analítica Verde
LD	Limite de Detecção
LED	Light Emitting Diode - Diodo Emissor de Luz
LQ	Limite de Quantificação
MP	Material Particulado
ODS	Objetivos de Desenvolvimento Sustentável
RGB	Red, Green, and Blue – Vermelho, verde e azul
ROI	Region of Interest – Região de interesse
PAD	Paper-analytical Devices – dispositivos analíticos baseados em papel
μPAD	dispositivos microfluídicos baseados em papel - <i>Paper-based Microfluidic Devices</i>

SUMÁRIO

1 Introdução.....	1
2 Referencial Bibliográfico	5
2.1 Química Verde	5
2.1.1 Química Analítica Verde	7
2.1.2 <i>Analytical GREENness</i> (AGREE)	9
2.2 Colorimetria.....	11
2.3 Imagens Digitais	15
2.3.1 Imagens Fotográficas Digitais	16
2.4 Análise de Imagem Digital	19
2.5 LEDs.....	23
2.6 Sistemas De Cor RGB	26
2.7 ImageJ.....	29
2.8 Reações de Complexação	32
2.9 Ferro	33
2.10 Fosfato	35
2.11 Material Particulado.....	38
3 Objetivos.....	43
3.1 Objetivo Geral	43
3.2 Objetivos Específicos	43
4 Parte Experimental	44
4.1 Padrões, Reagentes e Amostras	44
4.2 Vidrarias e Materiais.....	45
4.3 Dispositivo de aquisição das imagens	45
4.3 Formação dos complexos	46
4.3.1 Fosfomolibdênio	46
4.3.2 Hexatiocianoferrato(III).....	47

4.4 Determinação.....	47
4.5 Otimizações	48
4.5.1 Aquisição das imagens.....	48
4.5.2 Faixa linear	49
4.6 Figuras de mérito	49
4.6.1 Precisão.....	49
4.6.2 – Reprodutibilidade.....	49
4.6.3 Limite de detecção e quantificação.....	50
4.6.4 Exatidão	50
4.7 Aplicação em amostras reais.....	50
5 Resultados e Discussões	52
5.1.2 5.1 Otimização das condições de captura de imagens do complexo ferro tiocianato..	61
5.3 Avaliação da influência da faixa de concentração do complexo ferro tiocianato na intensidade dos canais RGB	63
5.5 Validação do método	71
5.5.1 Precisão.....	71
5.5.2 Limite de detecção e quantificação.....	72
5.5.3 Exatidão	76
5.6 Aplicação do método para determinação de íons fosfato em material particulado	79
5.7 Avaliação da sustentabilidade do método	83
6 Conclusão	90
Referências Bibliográficas.....	92
Apêndice A1	104

1 Introdução

A química analítica é a ciência dedicada ao estudo, desenvolvimento e aplicação de técnicas e métodos para identificação, determinação da composição e quantificação de diferentes espécies, sendo estas quaisquer substâncias de interesse na análise, em uma amostra (Skoog et al., 2006). Procedimentos analíticos são fundamentais em diversos campos da ciência e da medicina, fornecendo ferramentas essenciais para garantir a qualidade e segurança de produtos, processos e tratamentos. A química analítica pode ser dividida em dois domínios principais: qualitativa e quantitativa. A análise qualitativa possibilita a detecção e identificação das espécies, enquanto a análise quantitativa permite a determinação da quantidade de cada espécie presente em uma amostra (Skoog et al., 2006).

Existem diversas etapas e sequências possíveis para a realização de uma análise quantitativa. De forma simples e resumida, os principais processos incluem a seleção do método de análise, obtenção e tratamento da amostra, medição da propriedade do analito (a espécie de interesse), tratamento dos dados e estimativa da confiabilidade (Harris, 2012). Para métodos e amostras complexas, podem ser necessárias várias outras etapas. Os métodos de análise, assim como a química analítica, podem ser divididos em duas categorias: métodos clássicos e métodos instrumentais.

Os métodos titulométricos, nos quais a concentração do analito é determinada pelo volume de solução consumida de um reagente de concentração conhecido, e os métodos gravimétricos, em que a concentração é obtida relacionando a massa de um composto puro ao analito, são denominados métodos clássicos (Skoog et al., 2006). Por outro lado, os métodos instrumentais utilizam técnicas analíticas baseadas em instrumentos para medir propriedades físicas e químicas dos analitos (Skoog, Holler e Crouch, 2007). Nesses métodos, a obtenção de informações requer a aplicação de um estímulo de energia que interage com o analito, gerando uma resposta característica das propriedades do sistema. Um detector capta essa resposta, que é convertido em um sinal elétrico por meio de um transdutor. Esse sinal é processado, interpretado e convertido em informações analíticas, que são exibidas ao usuário para a interpretação adequada (Skoog; Holler; Crouch, 2007).

Com o advento de novas tecnologias, novos métodos instrumentais vêm sendo desenvolvidos, apresentando melhores parâmetros de sensibilidade, precisão e confiabilidade, sendo amplamente empregados na pesquisa científica e na indústria. A escolha do método analítico ideal depende de vários fatores, como o objetivo da análise, características da amostra, concentrações do analito, níveis de exatidão e precisão necessários, disponibilidade

de equipamentos e reagentes, tempo e custo da análise, além das possíveis interferências (Skoog, Holler, Crouch, 2007). Devido à quantidade de variáveis envolvidas, generalizações de quais técnicas são melhores, baseadas em parâmetros como precisão, conveniência ou tempo gasto, devem ser evitadas (Skoog; Holler; Crouch, 2007).

Dentre os métodos instrumentais, destacam-se o emprego de técnicas espectroscópicas, que envolvem a interação da radiação com a matéria para a obtenção de informações sobre a composição das amostras. Esses métodos podem utilizar radiação eletromagnética, ondas acústicas ou feixes de partículas (Skoog, Holler, Crouch, 2007). Usualmente, os métodos baseados na radiação eletromagnética utilizam seis fenômenos ópticos: absorção, fluorescência, fosforescência, espalhamento, emissão e quimioluminescência (Skoog; Holler; Crouch, 2007). As principais técnicas espectrométricas incluem Espectrofotometria de Absorção Molecular no Ultravioleta-Visível, Espectrometria de Absorção Atômica, Espectrometria de Emissão Atômica, Espectrometria de Massas, Ressonância Magnética Nuclear e Fluorescência de Raios X.

Além das técnicas espectroscópicas, outros métodos analíticos incluem técnicas eletroquímicas e cromatográficas, cada uma com suas aplicações específicas e vantagens (Skoog; Holler; Crouch, 2007). No entanto, os métodos instrumentais em geral, apesar de apresentarem bons parâmetros analíticos como sensibilidade e precisão, também possuem desvantagens significativas. Entre estas estão o alto custo de aquisição e manutenção dos instrumentos, a necessidade de espaços laboratoriais amplos e adequados, treinamento técnico especializado, além da impossibilidade de análises no local e, frequentemente, a necessidade de etapas laboriosas de preparo de amostras (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020).

Além disso, dependendo das técnicas e etapas empregadas, os métodos analíticos tradicionais podem gerar uma quantidade significativa de resíduos químicos, muitos dos quais são tóxicos ou não biodegradáveis, contribuindo para a poluição ambiental (Gałaszka; Migaszewski; Namieśnik, 2013). O uso de grandes volumes de solventes orgânicos e reagentes perigosos, somado ao elevado consumo de energia, são fatores que agravam esse impacto ambiental. Os resíduos gerados podem contaminar o solo e a água, além de gerar riscos à saúde humana e à vida animal. Diante desse cenário, a Química Analítica Verde (*Green Analytical Chemistry* – GAC) surge como uma abordagem que busca manter o equilíbrio entre o avanço analítico e a mitigação desses impactos ambientais associados às análises químicas (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

A GAC propõe o desenvolvimento de métodos que minimizem a geração de resíduos e o uso de substâncias tóxicas, promovendo práticas como a miniaturização de sistemas analíticos, a automação e o emprego de reagentes mais seguros (Gałuszka; Migaszewski; Namieśnik, 2013). Além disso, incentiva o uso de técnicas que demandem menos energia e que permitam análises diretas, diminuindo a necessidade de etapas laboriosas de preparo de amostras. Dessa forma, a partir de diretrizes específicas, a GAC contribui para a responsabilidade social da Química Analítica ao influenciar o desenvolvimento de metodologias mais ecológicas, economicamente viáveis e acessíveis (Locatelli et al., 2023; Płotka-Wasyłka et al., 2021).

A miniaturização do sistema analítico total tem se tornado cada vez mais relevante no campo da Química Analítica (Fernandes et al., 2020). Esse avanço tem sido impulsionado pelo avanço tecnológico no desenvolvimento de sensores e detectores, bem como de dispositivos de iluminação e impressão 3D. Nesse contexto, os smartphones se destacam entre os dispositivos empregados em sistemas miniaturizados, sendo utilizados como alternativas viáveis às técnicas convencionais para a determinação e quantificação de uma ampla gama de analitos em diferentes amostras (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021; Fan et al., 2021; Rezazadeh et al., 2019). O emprego desses dispositivos tem favorecido o desenvolvimento de sistemas analíticos portáteis, economicamente acessíveis e energeticamente eficientes, contribuindo para a redução da geração de resíduos e alinhando-se aos princípios da GAC (De la Guardia; Garrigues, 2020; Locatelli et al., 2023).

Segundo a Fundação Getúlio Varga (FGV, 2023), no Brasil em 2023 existiam 249 milhões de smartphones, o que representa 1,2 aparelhos por habitante. Os aparelhos atuais são multifuncionais, leves, compactos, compatíveis com diversas tecnologias de conectividade sem fio e possuem sensores avançados e inúmeros aplicativos. As características mais relevantes para o seu uso como ferramenta analítica incluem câmeras de alta resolução, sensores de luz, sistema de posicionamento global (*global positioning system* – GPS) e a capacidade de processamento de dados (Di Nonno; Ulber, 2021; Rezazadeh et al., 2019).

Colorímetros, espectrofotômetros e fluorímetros são exemplos de sistemas de detecção óptica que podem ser construídos utilizando smartphones para detecção e quantificação de analitos (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021; Rezazadeh et al., 2019). Além do smartphone, a construção desses sistemas necessita de poucos componentes adicionais que são frequentemente construídos utilizando materiais alternativos. Uma das abordagens mais comuns é a detecção colorimétrica, na qual imagens digitais da amostra, ou de soluções

coloridas formadas através da adição de reagentes, são capturadas, e a concentração do analito é relacionada com a intensidade da cor (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021). Para viabilizar a extração dos dados contidos nas imagens, são empregadas um conjunto de técnicas de processamento e de análise de imagem digital (*Digital Image Analysis* - DIA), que permite a avaliação quantitativa e qualitativa dos analitos (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020).

As inúmeras vantagens dos métodos baseados em smartphones, aliadas ao uso dessas técnicas, têm contribuído para a popularização desses sistemas nas últimas décadas. No entanto, os smartphones não foram projetados para finalidades analíticas. Assim, no desenvolvimento desses métodos, é necessário realizar a otimização de diversos parâmetros relacionados às condições de aquisição – incluindo iluminação, distância de captura e configurações do dispositivo –, além da obtenção e tratamento dos dados obtidos das análises das imagens (Capitán-Vallvey et al.; 2015; Di Nonno; Ulber, 2021). Esses fatores influenciam diretamente parâmetros analíticos essenciais, como linearidade, sensibilidade, faixa de trabalho, limite de detecção.

Embora a avaliação desses parâmetros seja fundamental no desenvolvimento dos métodos, os trabalhos presentes na literatura frequentemente são limitados em discussões detalhadas sobre quais parâmetros foram avaliados ou como essas avaliações foram conduzidas. A ausência dessas informações compromete a reprodutibilidade dos métodos, a confiabilidade dos resultados obtidos e, conseqüentemente, sua implementação prática.

Diante desse cenário, o objetivo deste trabalho é realizar uma análise sistemática desses parâmetros para compreender sua real influência no desenvolvimento e na aplicação de métodos baseados em imagem digital, de modo a fornecer informações que auxiliem na criação de novas abordagens analíticas mais confiáveis e reprodutíveis. Para essas avaliações, serão empregados smartphones para a captura das imagens, e os íons ferro(III) e fosfato como analitos-modelo no desenvolvimento, teste e validação do sistema, com foco na otimização dos parâmetros relacionados à técnica.

2 Referencial Bibliográfico

2.1 Química Verde

A Química Verde (*Green Chemistry* – GC) é uma abordagem científica que, por meio de um conjunto de 12 princípios, orienta o desenvolvimento de produtos e processos mais seguros para a saúde humana e o meio ambiente (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022). Esses princípios são aplicados ao longo de todo o ciclo de vida do produto – projeto, fabricação, uso e eliminação final – com o objetivo de reduzir ou eliminar o uso e a geração de substâncias e resíduos perigosos (Locatelli et al., 2023). Além disso, a GC prioriza o uso de recursos renováveis, a eficiência energética, a economia de átomos, o uso de catalisadores eficientes, monitoramento em tempo real e materiais biodegradáveis, sempre com foco na sustentabilidade e na eficiência sem comprometer o desempenho (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

O termo “química verde” é relativamente recente, sendo introduzido em 1990 (Płotka-Wasyłka et al., 2018). No entanto, preocupações com os impactos ambientais causados pelas atividades humanas começaram a receber atenção no início do século XX, principalmente, devido ao advento da Revolução Industrial (Locatelli et al., 2023; Płotka-Wasyłka et al., 2018). A introdução dos processos industriais em larga escala resultou em um uso excessivo e indiscriminado de produtos químicos tóxicos e, conseqüentemente, em novos desafios relacionados ao controle e à redução dos resíduos gerados nesses processos (De la Guardia; Garrigues, 2020). Os impactos no meio ambiente, na saúde humana e aos ecossistemas, proporcionados pelo aumento da poluição, evidenciaram a necessidade urgente de práticas sustentáveis (Płotka-Wasyłka et al., 2018).

A primeira conferência internacional com foco nos impactos causados pelo crescimento industrial e desenvolvimento econômico foi realizada em 1949, marcando o início de esforços globais para abordar questões ambientais (Płotka-Wasyłka et al., 2021). Nos anos seguintes, foram realizados eventos significativos que fortaleceram a conscientização dos líderes globais sobre a importância do desenvolvimento sustentável (Płotka-Wasyłka et al., 2018). No entanto, foi somente em 1998, com a publicação do livro *Green Chemistry: Theory and Practice*, de Anastas e Warner, que a Química Verde passou a contar com diretrizes claras para a sua aplicação em reações e processos químicos (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

Embora frequentemente relacionadas, a Química Verde e a Sustentabilidade possuem diferenças importantes em seus objetivos e abrangência. A GC lida predominantemente com a

dimensão ambiental, concentrando-se em mitigar os impactos associados ao desenvolvimento e aplicação de produtos químicos, visando segurança e eficiência. Por outro lado, a Sustentabilidade é um conceito mais amplo, integrando aspectos ambientais, econômicos e sociais (Płotka-Wasyłka et al., 2021). Essa diferença é evidenciada nos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) das Nações Unidas (Figura 1), que abrangem 17 metas voltadas a promover bem-estar, igualdade e preservação ambiental, indo além dos propósitos da GC (United Nations, 2024).

Figura 1: Os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável



Fonte: Nações Unidas Brasil, 2025.

A GC tem estimulado avanços significativos, como a substituição de solventes tóxicos por alternativas renováveis e o desenvolvimento de catalisadores mais eficientes que minimizam resíduos (De la Guardia; Garrigues, 2020; Locatelli et al., 2023). Em contextos educacionais, disciplinas voltadas para esses princípios capacitam novos químicos a adotar práticas ambientalmente responsáveis desde a formação acadêmica (Płotka-Wasyłka et al., 2021). Já no setor industrial, a prática da GC tem se expandido como alternativa à abordagem tradicional, incluindo sínteses farmacêuticas mais limpas e processos biotecnológicos inovadores, como biorreatores para produção sustentável (De la Guardia; Garrigues, 2020; Locatelli et al., 2023; Noce, 2018)

A mudança de mentalidade e atuação proporcionada pela GC não apenas melhora a viabilidade econômica dos processos, promovendo maior competitividade e responsabilidade social, mas também impacta áreas específicas como a Química Analítica (Płotka-Wasyłka et al., 2021). Nessa área, os princípios da GC se transformam na Química Analítica Verde (*Green Analytical Chemistry* – GAC), que adapta os fundamentos da GC de maneira mais direcionada a atuação do químico analítico, promovendo a sustentabilidade nos processos de detecção e quantificação (De la Guardia; Garrigues, 2020).

2.1.1 Química Analítica Verde

Embora a Química Verde tenha estimulado avanços ecológicos significativos na atuação química, por seus princípios serem direcionados a todos os setores, incluindo a síntese, caracterização e produção de materiais, estes podem ser considerados gerais e fornecem apenas indicações amplas de como desenvolver e atuar em atividades (Locatelli et al., 2023). Essa generalidade possibilita a aplicação de apenas alguns desses princípios diretamente a Química Analítica. Sendo assim, surgiu a necessidade do desenvolvimento de um subnível adicional, no qual os princípios da GC foram adaptados ao campo analítico, dando origem a Química Analítica Verde (*Green Analytical Chemistry* – GAC) (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

Essa adaptação foi realizada por Gałuszka, Migaszewski e Namieśnik (2013), utilizando quatro dos princípios fornecidos por Anastas e Warner e os complementando com oito novos princípios. Esses novos princípios referem-se a todas as etapas do processo analítico – amostragem, preparação das amostras, análise da amostra, configuração do instrumento e apresentação dos dados – e são voltados à melhoria da eficiência, seletividade e sustentabilidade nos processos analíticos, priorizando a minimização do consumo de amostras

e reagentes e incentivando o uso de métodos analíticos diretos e automação, práticas essas menos enfatizadas na GC (Locatelli et al., 2023). Além disso, a GAC tem como foco a viabilização de análises *in loco*, possibilitando a redução de custos e impactos associados ao transporte e armazenamento de amostras.

Assim, a GAC complementa a GC, adaptando seus princípios ao contexto analítico, que exige inovação e parâmetros de desempenho elevados. Sua aplicação representa novos desafios na atuação do químico analítico, que deve buscar desenvolver métodos mais acessíveis, eficientes e com uma ampla aplicabilidade, mantendo o compromisso com a redução do impacto ambiental e a sustentabilidade (Locatelli et al., 2023; Płotka-Wasyłka et al., 2021). No entanto, considerando a diversidade de técnicas analíticas, além das características específicas de cada problema, nem sempre é viável a aplicação dos doze princípios ao procedimento (Gałuszka; Migaszewski; Namieśnik, 2013). A escolha ou desenvolvimento do método ideal será determinada pelo nível de concordância com esses princípios, além das necessidades e recursos disponíveis para o usuário (Gałuszka; Migaszewski; Namieśnik, 2013).

Apesar dos desafios significativos relacionados à busca por um equilíbrio entre os parâmetros de validação dos métodos analíticos, preservação ambiental e sustentabilidade, a GAC tem promovido avanços expressivos na simplificação e redução de custos em análises químicas (Locatelli et al., 2023). O uso de dispositivos portáteis inteligentes, como sensores e smartphones, associados a técnicas que não exigem pessoal altamente qualificado, como a Análise de Imagem Digital, e a utilização de ferramentas quimiométricas, exemplifica como inovações tecnológicas têm possibilitado a realização de medições rápidas, precisas, acessíveis, seguras e de menor impacto ambiental (De la Guardia; Garrigues, 2020; Locatelli et al., 2023; Płotka-Wasyłka et al., 2021).

Além dessas vantagens, essas ferramentas são frequentemente combinadas com a automação de procedimentos, miniaturização de instrumentos e a substituição de reagentes tóxicos, ampliando a possibilidade de análises *in loco* e reduzindo a geração de resíduos (Płotka-Wasyłka et al., 2021). A combinação desses benefícios, geralmente associada a métodos menos dispendiosos, fortalece a sustentabilidade no campo analítico e facilita a adesão da GAC tanto em laboratórios acadêmicos quanto industriais (De la Guardia; Garrigues, 2020). Devido a sua versatilidade, esses métodos têm sido aplicados em diferentes matrizes, como alimentos, sangue, saliva e outros (Płotka-Wasyłka et al., 2021), consolidando

a sua relevância e os destacando como tendência atual no desenvolvimento e aprimoramento de métodos analíticos verdes (Locatelli et al., 2023).

Como discutido por Płotka-Wasyłka et al. (2021), a GAC vai além dos aspectos ambientais. Entre as responsabilidades éticas e sociais dos químicos analíticos está o dever de transmitir informações de forma clara e contextualizada para a sociedade. Essa comunicação, quando realizada de forma acessível, sem exigir conhecimentos técnicos aprofundados, ajuda a desconstruir o paradigma de que a química é apenas uma fonte de problemas (De la Guardia; Garrigues, 2020; Płotka-Wasyłka et al., 2018). Nesse contexto, a abordagem educacional torna-se uma ferramenta essencial para que a sociedade compreenda como a química contribui para a qualidade de vida e na resolução de desafios ambientais e de saúde pública (Płotka-Wasyłka et al., 2021).

Um dos principais desafios na transmissão de informações sobre procedimentos analíticos está na avaliação da ecologia do método. Diversas ferramentas foram desenvolvidas para esse propósito (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022). Esses recursos fornecem uma avaliação visual e quantitativa, permitindo classificar a veracidade dos métodos, compara-los e identificar tanto vantagens quanto pontos de melhoria (Locatelli et al., 2023). No entanto, diversos parâmetros podem ser levados em consideração nessa avaliação, e, como discutido anteriormente, nem sempre é viável a aplicação de todos os doze princípios da GAC em um único procedimento.

Essa diversidade dificulta o uso de uma única ferramenta para a avaliação detalhada de todas as etapas do processo, como amostragem, geração de resultados e fatores externos inerentes ao ambiente de trabalho (Locatelli et al., 2023). Assim, para alcançar uma avaliação mais abrangente, é essencial dispor de uma variedade de ferramentas com métricas projetadas para diferentes abordagens. Entre as opções, as mais populares incluem a *Analytical Eco-Scale*, *Green Analytical Procedures Index* (GAPI) e *Analytical GREEnness* (AGREE) (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

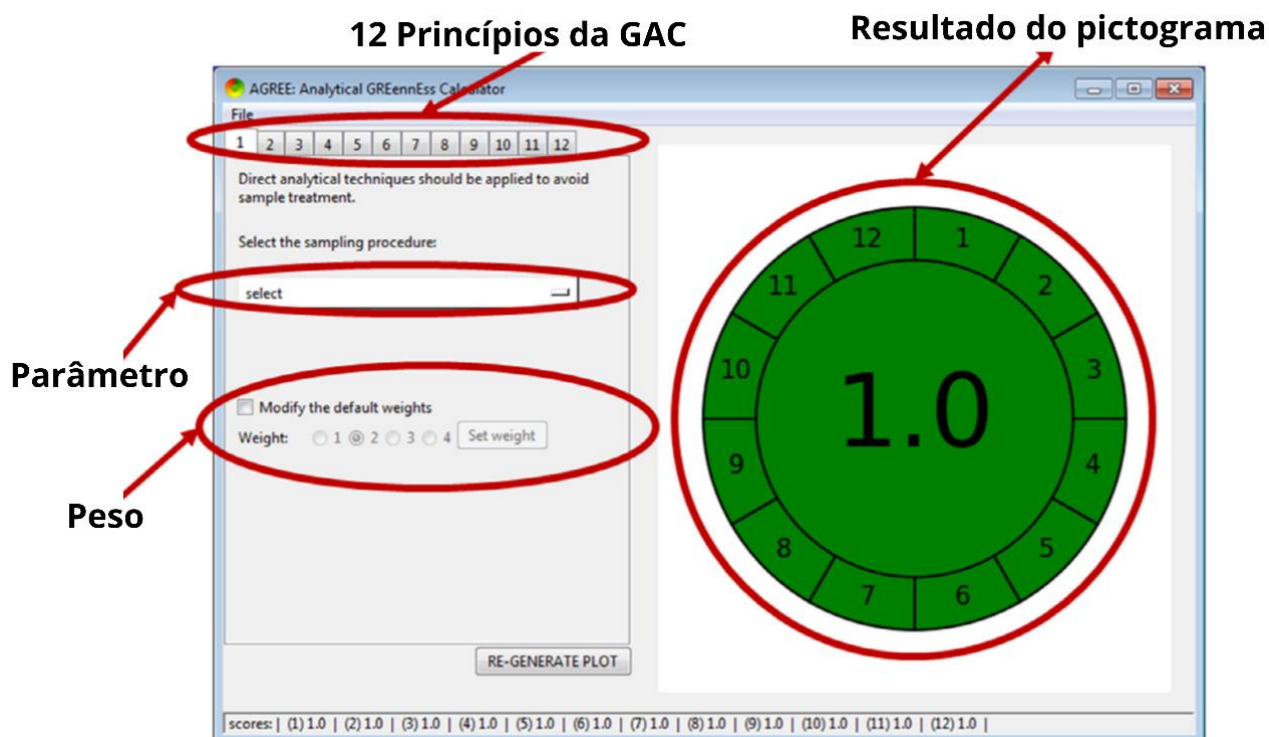
2.1.2 *Analytical GREEnness* (AGREE)

Uma ferramenta de metrificação de métodos analíticos, sob a perspectiva da Química Analítica Verde, deve ser capaz de avaliar individualmente os parâmetros do procedimento, identificando aspectos menos verdes para possíveis melhorias (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022). A ferramenta deve fornecer medidas quantitativas da adequação do método aos princípios da GAC de forma intuitiva e rápida, equilibrando simplicidade e clareza na apresentação dos

resultados (Locatelli et al., 2023). Além disso, deve possibilitar reavaliações consistentes por outros analistas e flexibilização no peso dos critérios de acordo com a especificidade de cada cenário, fornecendo maior assertividade na metrificação (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022).

O índice AGREE (*Analytical GREEnness*) foi desenvolvido com o objetivo de atender os requisitos descritos anteriormente (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020). Na ferramenta, os doze princípios da GAC são convertidos em uma faixa de pontuação de 0 (menos verdes) a 1 (altamente verdes) e divididos em seções, onde são explicados e considerados de forma individual (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020). O sistema também possibilita a atribuição de pesos diferentes a cada seção, fornecendo um resultado final em forma de média ponderada. O software é gratuito, disponível online e conta com uma interface intuitiva, apresentada na Figura 2.

Figura 2: Interface do software AGREE

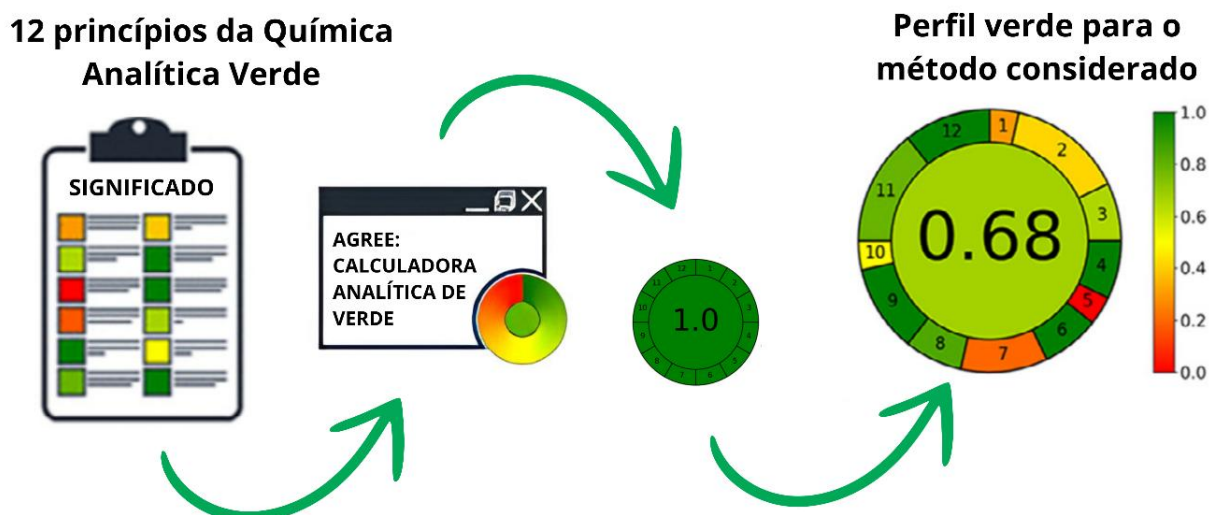


Fonte: Adaptado de Locatelli et al., 2023.

O resultado da avaliação da verdura do procedimento analítico é apresentado de forma visualmente intuitiva, utilizando um pictograma semelhante a um relógio, com a pontuação geral posicionada no centro (Figura 3). Cada princípio é representado por um segmento colorido ao redor do número central, onde o desempenho é indicado por um gradiente de

cores (de vermelho, para notas 0, até verde escuro, para notas 1) (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020). A largura de cada segmento reflete o peso atribuído ao princípio correspondente. Os critérios detalhados e as pontuações atribuídas a cada princípio da GAC estão disponíveis na Tabela A1 (Apêndice 1).

Figura 3: Pictograma do software AGREE.



Fonte: Adaptado de Locatelli et al., 2023.

O principal diferencial do AGREE em relação a outras métricas é a cobertura dos 12 princípios da GAC, o que possibilita uma análise abrangente da ecologização dos métodos analíticos (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022). Além disso, a possibilidade de atribuir pesos individuais aos critérios torna a avaliação mais específica para diferentes contextos (Locatelli et al., 2023). No entanto, apesar da ampla cobertura, uma das desvantagens da ferramenta é não incluir uma análise detalhada dos produtos químicos, energia e resíduos gerados durante a síntese (Sajid; Płotka-Wasyłka, 2022). Outro ponto a considerar é a ausência de critérios econômicos, como custo de reagentes e equipamentos (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020), o que pode limitar sua aplicação em avaliações de sustentabilidade.

2.2 Colorimetria

Ao longo tempo, diferentes definições foram atribuídas à Colorimetria. De forma mais abrangente, a Colorimetria é a ciência que se dedica ao estudo, medição e quantificação da luz visível para avaliar as informações das cores (Cairone et al., 2019; Capitán-Vallvey et al., 2015; Fan et al., 2021; Fernandes et al., 2020). Ela envolve a compreensão de como o olho

humano percebe as cores, como as cores podem ser descritas quantitativamente, e como essas descrições podem ser aplicadas em diversos campos, como a química analítica, a indústria, a medicina e a ciência dos materiais (Capitán-Vallvey et al., 2015)

Quando uma fonte de luz (radiação eletromagnética) é irradiada sobre um objeto, esse objeto interage com a radiação e diferentes comprimentos de onda são absorvidos, refletidos ou transmitidos (Atkins, 2018). A absorbância e a transmitância são grandezas complementares. Enquanto a transmitância é uma medida da quantidade de luz que consegue atravessar o material, a absorbância é a fração da energia que foi absorvida pelo material. Materiais transparentes, como vidro e certos plásticos, têm alta transmitância e baixa absorbância, permitindo que quase toda a luz passe através deles. A cor de um material transparente ou translúcido é definida pelos comprimentos de onda que passam através dele, enquanto os outros são absorvidos (Atkins, 2018).

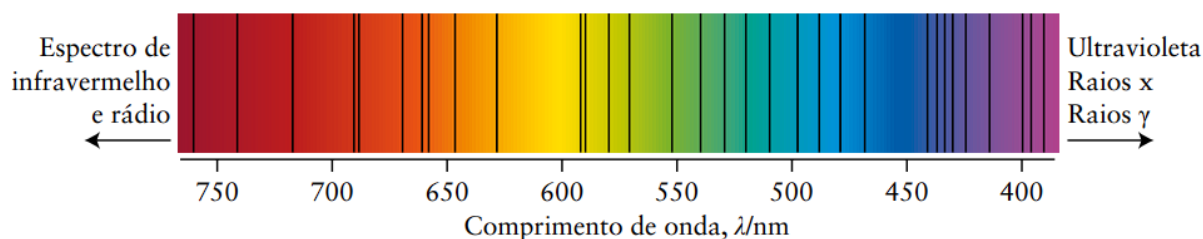
A reflexão ocorre quando a luz incidente bate na superfície do objeto e é redirecionada de volta ao meio de onde veio (Hecht, 2011). A quantidade de luz refletida e sua direção dependem da superfície do material. Superfícies lisas e polidas, como espelhos, refletem a luz de maneira especular, onde o ângulo de incidência é igual ao ângulo inicial. Materiais com superfícies rugosas refletem a luz de maneira difusa, espalhando a luz em várias direções (Cloud, 2008). A reflexão é responsável pela aparência brilhante ou fosca dos objetos, além de contribuir significativamente para a cor percebida, pois as cores observadas são os comprimentos de onda refletidos pela superfície do objeto (Cloud, 2008).

Os comprimentos de onda que interagem com os objetos são específicos, sendo definidos pela estrutura química do material, como por exemplo grupos cromóforos e níveis de energia eletrônica (Atkins, 2018). Além disso, leis da física determinam a intensidade e qualidade da cor expressa. Características da luz, como comprimento de onda, ângulo em que ela é incidida e índice de refração, interferem diretamente (Calvini et al., 2020). O produto dessas interações físicas e químicas é uma cor bem definida e quantificável.

A percepção das cores é um fenômeno complexo que depende da interação da luz refletida ou transmitida com os cones sensoriais na retina do olho humano. Existem três tipos de cones, cada um sensível a uma faixa específica de comprimentos de onda correspondentes às cores vermelha, verde e azul (Cairone et al., 2019). Esses cones são estimulados, e a interpretação das cores é criada no cérebro humano, representando os comprimentos de onda que constituem a chamada “luz visível”, aproximadamente entre 400 até 700 nm (Figura 4). A

combinação da estimulação desses cones permite que o cérebro perceba aproximadamente 10 milhões de cores (Cairone et al., 2019).

Figura 4: Espectro eletromagnético correspondente a luz visível



Fonte: Atkins, 2018.

Baseada na combinação desses três tipos de cones, foi criada a teoria tristímulo. A teoria tristímulo postula que qualquer cor percebida pelo olho humano pode ser descrita como uma combinação de três cores primárias: vermelho, verde e azul (Cairone et al., 2019). Esses três componentes são chamados de valores tristímulo e podem ser misturadas em diferentes proporções para produzir uma ampla gama de cores visíveis. A teoria tristímulo é um conceito fundamental na colorimetria, permitindo a quantificação das cores e fornecendo a base para sistemas de cores (Cairone et al., 2019).

Por envolver as características da luz, objeto e observador, a cor de um objeto é subjetiva quando visualizada por humanos. É o produto de uma interpretação pessoal de estímulos externos, gerada por respostas neurais e mediada por influências externas. Características do observador, como idade, sexo, fadiga ocular e distúrbios visuais, como o daltonismo, influenciam na percepção das cores (Calvini et al., 2020). Além disso, a posição do observador em relação a luz, o meio intermediário (por exemplo, ar ou água), assim como a presença de cores adjacentes e o contexto em que a cor é visualizada, também influenciam na sua percepção (Calvini et al., 2020).

Com o objetivo de eliminar a subjetividade e erros relacionados a percepção do observador, a Comissão Internacional de Iluminação (*Commission Internationale de l'Éclairage* – CIE) padronizou condições de iluminação e definiu especificações para o observador padrão (Ohno, 2023). Além disso, em 1931, a CIE desenvolveu o sistema de cor CIE XYZ (CIE – X, Y, Z) que é baseado na teoria tristímulo, e criado a partir de medições experimentais da percepção das cores pelo sistema visual humano (Ohno, 2023). Nos anos seguintes, a CIE desenvolveu outros sistemas de cores para diferentes aplicações. Destes

sistemas, o CIELab (CIE – L^* , a^* , b^*) se destaca por ser mais consistente com a percepção humana e é amplamente empregado como referência de cores em instrumentos colorimétricos (Morsy; Holiel, 2023).

Na química, a cor é empregada como ferramenta visual para a confirmação da ocorrência de reações químicas, identificação de substâncias e obtenção de informações qualitativas e semiquantitativas. A cor é utilizada, também, para indicar o ponto final nas titulações e em determinações de pH, desempenhando um papel fundamental no controle e monitoramento de reações. Além disso, para análises quantitativas, são empregados instrumentos colorimétricos que possibilitam a quantificação precisa das cores. Portanto, o uso da cor como ferramenta analítica facilita o monitoramento e a compreensão de processos químicos de forma simples e eficaz (Capitán-Vallvey et al., 2015).

Colorímetros e Espectrofotômetros são os instrumentos mais utilizados para a avaliação colorimétrica. Ambos instrumentos normalmente seguem as diretrizes da CIE para que as medidas sejam repetíveis e replicáveis. Os espectrofotômetros são instrumentos que medem a quantidade de luz absorvida, transmitida ou refletida por uma amostra em uma ampla faixa de comprimentos de onda (Skoog; Holler; Crouch, 2007). Em contrapartida, os colorímetros são instrumentos mais simples que funcionam de forma análoga ao sistema visual humano.

Diferente dos espectrofotômetros, que quantificam comprimentos de onda em um amplo espectro, os colorímetros medem a cor do objeto. Os colorímetros são instrumentos limitados aos comprimentos de onda das três cores primárias (vermelho, verde e azul) (Ohno, 2023). Nesses instrumentos a cor é representada numericamente em sistemas de cores padronizados que descrevem diferentes aspectos da cor, como por exemplo o sistema CIELab (Morsy; Holiel, 2023; Ohno, 2023).

A escolha entre um colorímetro e um espectrofotômetro depende da aplicação específica, da necessidade de precisão e da complexidade da análise requerida. Colorímetros são ferramentas mais simples que promovem medições rápidas e consistentes, além de portabilidade. Em contrapartida, espectrofotômetros oferecem uma análise detalhada e precisa das propriedades óticas das amostras, sendo essenciais em pesquisas científicas e controle de qualidade avançado.

Ambos os instrumentos, colorímetros e espectrofotômetros, podem ser construídos utilizando materiais alternativos. O emprego de smartphones se destaca na construção desses instrumentos, devido as diferentes possibilidades de aplicação, além da alta disponibilidade e

tecnologia de câmeras avançadas (Capitán-Vallvey et al. 2015; Di Nonno; Ulber, 2021). A detecção colorimétrica é baseada na captura de imagens digitais que, assim como ocorre em colorímetros tradicionais, imitam a percepção humana das cores. Embora os dispositivos construídos não possuam a precisão dos instrumentos laboratoriais tradicionais, eles permitem a análise de cores em campo e em tempo real, oferecendo uma alternativa prática e acessível para diversas aplicações, como monitoramento ambiental e testes preliminares em diversas áreas, incluindo a química analítica (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021; Fernandes et al., 2020 Rezazadeh et al., 2019).

2.3 Imagens Digitais

Uma imagem é uma representação visual de uma cena ou objeto. Dependendo do dispositivo ou processo utilizado para sua captura ou criação, essa representação pode ser categorizada como analógica ou digital (Caputo, 2014). Imagens analógicas, como pinturas, esculturas e fotografias em filme, são criadas por processos físicos e apresentam uma forma contínua e direta, onde as variações de cor e luz são capturadas de maneira ininterrupta (Solomon; Breckon, 2010; Szeliski, 2011). Por outro lado, imagens digitais são uma representação discreta de dados, compostas por valores distintos e separados, criados a partir de sensores eletrônicos e processados em dispositivos digitais (Solomon; Breckon, 2010; Szeliski, 2011).

As imagens digitais podem ser consideradas como sinais multidimensionais, uma vez que envolvem a variação de dados em mais de uma dimensão, como altura, largura e, em alguns casos, profundidade (Szeliski, 2011). A criação da representação numérica de imagens reais é realizada a partir do processo de discretização. Esse processo envolve a transformação de informações contínuas em valores discretos e envolve duas etapas principais: a amostragem, na qual pontos regulares da imagem original ou do ambiente são coletados, determinando a resolução espacial e formando uma matriz de pixels (*picture elements*), os menores constituintes de uma imagem digital. Em seguida, na quantização, os valores de intensidades contínuas capturadas em cada pixel são convertidos em valores digitais específicos, que representam a cor e a intensidade (Solomon; Breckon, 2010; Szeliski, 2011).

Um bit (*binary digit*) é a unidade fundamental de informação em computação e sistemas digitais. Os bits podem assumir apenas dois valores, sendo geralmente representados como 0 e 1 (Szeliski, 2011). Em imagens digitais, os bits são usados para codificar informações de cor e luminosidade de cada pixel. A quantidade de cores que cada pixel pode

exibir depende da quantidade de bits utilizados para representa-lo, ou seja, quanto mais bits, maior a profundidade de cor da imagem (Scuri, 2002). Imagens que utilizam grades de pixels para sua representação são classificadas como bitmap (*raster*). Outro tipo de imagens digitais são as vetoriais, que utilizam formas geométricas baseadas em equações matemáticas para representar a imagem (Solomon; Breckon, 2010).

Existem diversos tipos de imagens digitais, resultantes de variadas técnicas e fenômenos físicos utilizados para sua aquisição. Grande parte dessas imagens é formada pela conversão de diferentes bandas do espectro eletromagnético em sinais elétricos, utilizando sensores e tecnologias de captura específicos (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020; Gupta, 2019; Solomon; Breckon, 2010). Essas imagens armazenam uma enorme variedade de informações que, quando processadas e/ou analisadas, são úteis em aplicações em diversos setores como medicina, segurança, indústria e agricultura (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020; Rosenfeld, 2001; Solomon; Breckon, 2010).

2.3.1 Imagens Fotográficas Digitais

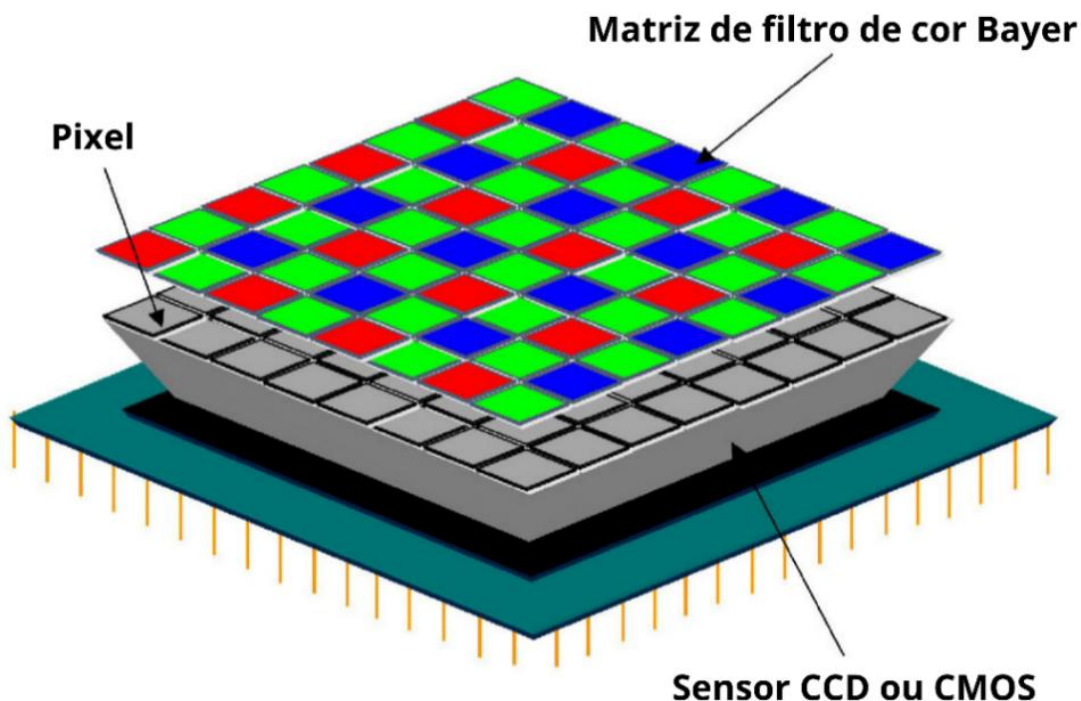
As imagens fotográficas são o tipo de imagens mais populares entre as imagens digitais. Elas podem ser monocromáticas (tons de cinza) ou coloridas, sendo amplamente utilizadas para a reprodução de conteúdo de mídia (Solomon; Breckon, 2010; Szeliski, 2011). A captura dessas imagens é realizada com dispositivos como câmeras, smartphones e webcams, que captam a luz do espectro visível com o objetivo de replicar a visualização do olho humano. Esses dispositivos geralmente possuem sensores de Carga Acoplada (*Charge-Coupled Device* - CCD) ou Óxido Metálico Complementar em silício (*Complementary Metal-Oxide-Semiconductor* - CMOS). Ambos os sensores convertem a luz refletida pelo objeto em sinais elétricos, mas diferem na forma como processam e transferem essa carga (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020).

Nos sensores CCD, cada pixel armazena uma carga elétrica proporcional à intensidade da luz incidente. Essa carga é transferida sequencialmente para um ponto de leitura, onde é convertida em sinal digital por um conversor analógico-digital (Hain; Kähler; Tropea, 2007; Szeliski, 2011). Em contrapartida, nos sensores CMOS, cada pixel possui seu próprio conversor de carga, permitindo leitura independente e eliminando a necessidade de transferência de carga pelo sensor (Hain; Kähler; Tropea, 2007; Szeliski, 2011). Embora o processo de captura dos sensores CCD seja mais lento e consuma mais energia, ele geralmente oferece maior qualidade de imagem, especialmente em condições de baixa

iluminação. A escolha entre esses sensores depende do contexto de uso e das prioridades em termos de qualidade da imagem e eficiência. Atualmente, sensores CMOS são mais comuns em smartphones devido ao seu melhor custo-benefício (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020).

Uma característica comum a ambos os sensores é estarem cobertos por uma matriz de filtros de cor (*Color Filter Array – CFA*) para separação dos comprimentos de onda da luz incidente, normalmente utilizando o padrão Bayer (Figura 5). Esse filtro de cores, baseado na teoria tristímulo, é composto pelas cores primárias vermelho (comprimento de onda 700,0 nm), verde (546,1 nm) e azul (435,8 nm) (Szeliski, 2011). O filtro é organizado em um padrão 2x2, com dois pixels verdes, um vermelho e um azul, de modo que cada pixel registre a intensidade de apenas uma dessas cores. Essa organização 2:1:1 está relacionada à sensibilidade do olho humano. O verde está associado à luminância (percepção de variação de intensidade de luz), essencial para a percepção de formas e detalhes, enquanto o vermelho e azul estão associados à crominância, composta por matiz (tonalidade) e saturação (intensidade de cor), responsáveis por especificar a cor que o pixel possui (Szeliski, 2011).

Figura 5: Filtro de cor Bayer posicionado acima de um sensor CCD ou CMOS.



Fonte: Adaptado de Kim; Park; Kang, 2024.

Após a captura das intensidades dessas cores pelos sensores (seja CCD ou CMOS) e sua conversão em cargas elétricas, o dispositivo realiza várias operações de processamento de

sinal digital (*digital signal processing* – DSP) para formar a imagem final. Essas operações incluem o *demosaicing*, que interpola as informações de cor para representar outras cores (Ramanath et al., 2002). Também são realizadas correções de balanço de branco e exposição, filtragem de ruído, e ajustes de nitidez e saturação (Szeliski, 2011). É importante destacar que as informações de cor no resultado final não correspondem diretamente às intensidades das cores vermelho, verde e azul capturadas, pois estas passam por múltiplas transformações e ajustes. Dependendo do formato de armazenamento, a imagem pode ser comprimida para reduzir o tamanho do arquivo antes de ser armazenada para visualização ou edição posterior (Solomon; Breckon, 2010).

Além das características do sensor, algoritmos e softwares, a iluminação é um dos principais fatores que influenciam a produção da imagem final. A quantidade de luz que atinge o sensor, denominada exposição, é essencial para determinar a clareza, o brilho e outros aspectos visuais da imagem (Scuri, 2002). A exposição é composta por três parâmetros interdependentes, conhecidos como o triângulo de exposição (Figura 6): abertura, velocidade do obturador e ISO (Santos, 2010). A abertura controla a quantidade de luz que entra pela lente, influenciando também a profundidade de campo. A velocidade do obturador determina quanto tempo o sensor ficará exposto à luz, afetando a captura de movimento. O ISO ajusta a sensibilidade do sensor à luz, influenciando o ruído da imagem (Santos, 2010).

Figura 6: Triângulo de exposição.



Fonte: Santos, 2010.

Em smartphones o controle desses parâmetros é realizado automaticamente por meio de algoritmos que analisam a cena capturada pelo sensor, considerando a iluminação, contraste e movimentos (Bernacki, 2020). A maioria desses dispositivos também permite alterações pontuais individuais, ou de forma semiautomática, onde a alteração de um parâmetro reajusta os demais (Szeliski, 2011). A mesma exposição pode ser obtida a partir de diferentes combinações de abertura, velocidade do obturador e ISO, mas cada combinação resulta em características distintas na imagem final (Santos, 2010). A escolha desses parâmetros depende das condições de iluminação e do efeito desejado na imagem.

2.4 Análise de Imagem Digital

Devido a ampla gama de informações contidas nas imagens digitais, estas são amplamente processadas e analisadas para uso tanto por máquinas quanto humanos. O processamento de imagem digital (*Digital Image Processing – DIP*) abrange desde a captura inicial da imagem até a preparação das imagens para análises posteriores (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020). Esse conjunto de procedimentos assegura que as imagens estejam em condições ideais para extração de informações relevantes, através de operações como filtragem e realce de características. Já a análise de imagem digital (*Digital Image Analysis – DIA*) concentra-se na extração de informações úteis a partir das imagens previamente processadas. Essa análise pode fornecer dados quantitativos, como histogramas de cor, ou identificar estruturas específicas, facilitando a detecção de características importantes nas imagens e contribuindo para diversas aplicações (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020).

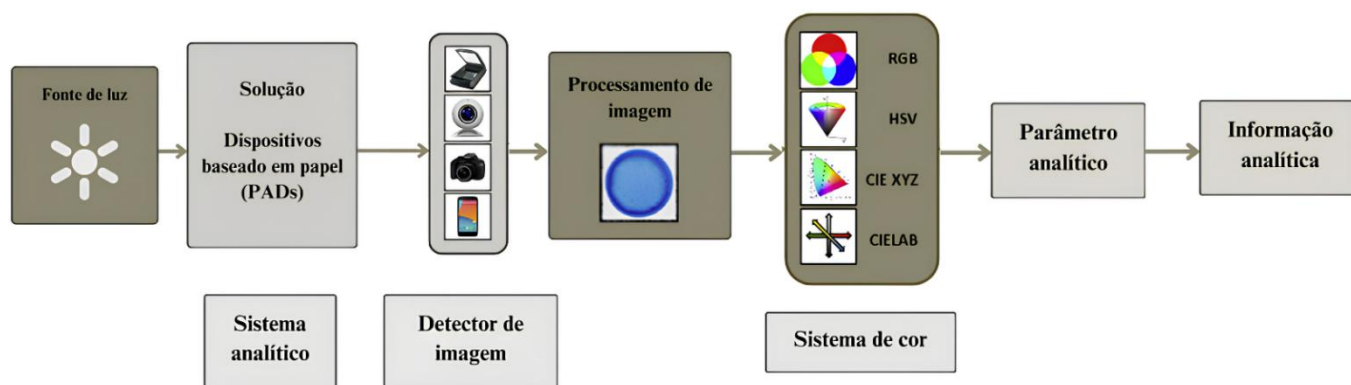
A visão computacional (*Computer Vision – CV*) expande esses conceitos, permitindo que sistemas computacionais interpretem e compreendam imagens em um nível avançado. Utilizando técnicas de aprendizado de máquina, a visão computacional habilita a identificação de padrões complexos e a extração de dados detalhados, ampliando o escopo de aplicações (Fernandes; Dórea; Rosa, 2020; Zhong et al., 2019). Na Química Analítica, as imagens digitais vêm sendo utilizadas para o desenvolvimento de métodos analíticos desde o século passado. Um exemplo de destaque é o trabalho de Monemi et al. (1999), que utilizou reações de quimioluminescência para determinar proteínas específicas, empregando uma câmera CCD como detector.

Diversas técnicas de processamento e análise são utilizadas para o desenvolvimento de métodos analíticos, que normalmente envolvem etapas de captura, processamento e extração de informações qualitativas e quantitativas. Esses métodos podem ser aplicados tanto para um

único analito quanto multianalitos (Capitán-Vallvey et al., 2015). Devido à crescente popularidade e aplicação dessa abordagem, diversas nomenclaturas surgiram ao longo do tempo, como Fotometria de Imagem Digital (*Digital Image Photometry - DIP*) (Tuaño; Castrillo; Viola, 2021), Colorimetria de Imagem Digital (*Digital Imaging Colorimetry - DIC*) (Nepomuceno; Azevedo Lemos; Oliveira dos Santos, 2022) e Fotometria de Imagem Digital Baseada em Smartphone (*Smartphone-based Digital Image Photometry - SDI*) (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). Embora os termos variem, o objetivo comum é utilizar técnicas de processamento e análise de imagem digital para a extração de dados relevantes.

Independentemente da terminologia empregada, a escolha das etapas e técnicas utilizadas depende da complexidade do problema e do sistema desenvolvido. As metodologias variam, baseando-se em fenômenos distintos, como a fotometria de absorção molecular utilizando reações colorimétricas, além de técnicas que exploram fluorescência, quimioluminescência, fosforescência e turbimetria (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). Apesar da presença desses fenômenos durante a captura das imagens digitais, a captura em si, ocorre através da luz refletida para o sensor do dispositivo. Dessa forma, qualquer determinação de absorbância ou de outro fenômeno é feita de maneira indireta, relacionando os dados de cor na imagem com a concentração do analito ou outras informações de interesse (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). Na Figura 7 é apresentada a principal estrutura dos métodos utilizando análise de imagem digital.

Figura 7: Exemplos de abordagem de química analítica baseada em análise de imagem.



Fonte: Adaptado, Capitán-Vallvey et al., 2015.

Reações colorimétricas podem ser realizadas em diferentes superfícies, como soluções em recipientes ou em dispositivos analíticos baseados em papel (*Paper-analytical Devices* –

PAD) (Fernandes et al., 2020). Os sistemas baseados em papel geralmente utilizam tiras de testes ou dispositivos microfluídicos baseados em papel (*Paper-based Microfluidic Devices* – μ PAD), compostos por papel poroso impregnado com reagentes para obtenção das reações colorimétricas. Técnicas como impressão em cera, fotolitografia, impressão por jato de tinta, corte a Laser e deposição química em fase de vapor, são empregadas para construir regiões hidrofóbicas na superfície do papel (Fernandes et al., 2020). Essas regiões delimitam as áreas de reação colorimétrica ou são complementadas por barreiras físicas, garantindo o direcionamento adequado dos líquidos. A análise de cor é realizada avaliando a região central delimitada, sendo necessárias apenas algumas gotas para que ocorram as reações.

Os PADs ganharam destaque por seu baixo custo, operação simples e portabilidade, sendo leves e práticos para análises em campo (Capitán-Vallvey et al., 2015). Apesar das vantagens, a construção destes sistemas pode ser desafiadora devido à distribuição não homogênea do analito ou produto da reação, o que resulta em cores não uniformes, reduzindo a sensibilidade do método e induzindo erros nas análises. Existem diferentes formas para condicionar a superfície do papel e resolver, ou amenizar, esse problema. Contudo, essas soluções adicionam mais etapas ao processo de análise (Capitán-Vallvey et al., 2015).

Sistemas baseados em soluções, por outro lado, geralmente empregam cubetas, placas de poços, ou outros recipientes como zonas de ensaio, e a medição colorimétrica é realizada diretamente na solução (Capitán-Vallvey et al., 2015). Essa abordagem proporciona a formação de cores mais uniformes, resultando em maior sensibilidade e menos restrições, embora com menor portabilidade em comparação aos PADs. Independentemente do sistema utilizado, é fundamental um controle rigoroso da iluminação, evitando sombras e distorções ao capturar as imagens digitais (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). Outras condições, como distância entre o dispositivo de captura e a amostra, posição da amostra e configurações do dispositivo de captura, também devem ser controladas para garantir desempenho analítico satisfatório (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021).

Dispositivos específicos são frequentemente construídos para controlar essas condições, sendo construídos com materiais de custo baixo, como MDF, papelão e filamentos poliméricos para impressão 3D. A iluminação pode ser fornecida por visores de cristal líquido (*Liquid Crystal Display* – LCD), flash de smartphones, monitores de tubo de raios catódicos ou diodo emissor de luz (*Light Emitting Diode* – LED) (Capitán-Vallvey et al., 2015). Os LEDs são amplamente utilizados nos sistemas construídos devido às suas vantagens

operacionais. O emprego desses aparatos proporciona maior repetibilidade, precisão e exatidão nas análises colorimétricas (Di Nonno; Ulber, 2021; Fernandes et al., 2020).

Embora diversos dispositivos possam ser utilizados para captura de imagens fotográficas digitais, os smartphones tem sido amplamente utilizados devido à sua portabilidade, capacidade de realizar análises independentes de outros dispositivos, alto poder de processamento digital e sensores ópticos de qualidade (Rezazadeh et al., 2019; Soares; Fernandes; Rocha, 2023). A relação entre a intensidade de cor e a concentração de substâncias é estabelecida por meio da seleção da região de interesse (*Region of Interest* – ROI) nas imagens. Essas regiões contêm dados de cores, que são expressos utilizando sistemas de cores como RGB (*Red, Green, Blue*), HSV (*Hue, Saturation, Value*), CMYK (*Cyan, Magenta, Yellow, Key*) e CIELab, que são utilizados como parâmetros analíticos (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021).

Os dados dos sistemas de cores são, então, aplicados para reconhecimento de padrões, análise multivariada e construção de curvas de calibração (Rezazadeh et al., 2019). A extração pode ser realizada utilizando aplicativos móveis (Android e iOS) ou editores gráficos para computadores, como Adobe Photoshop, e softwares de processamento de imagens como ImageJ, Chemostat e Matlab (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021; Fan et al., 2021). A principal vantagem dos aplicativos é a portabilidade e conveniência, pois seu uso elimina a necessidade de um computador para quantificação. No entanto, os aplicativos podem não estar disponíveis para todos os modelos de smartphones. Além disso, geralmente oferecem menos recursos, o que pode limitar o seu uso em análises mais complexas quando não existe uma relação simples entre a cor e a informação analítica de interesse.

Nos casos mais complexos, onde a relação entre cor e informação analítica não é simples, técnicas estatísticas, como Análise de Componentes Principais e Análise de Agrupamento Hierárquico podem ser empregadas (Rezazadeh et al., 2019). Além disso, o uso de inteligência artificial tem sido explorado, com a construção de Redes Neurais Artificiais (RNAs) para reconhecimento de padrões. Em muitos casos, no entanto, não é necessário a aplicação desses recursos e uma relação linear é estabelecida de forma direta ou através de simples equações matemáticas (Fiedoruk-Pogrebniak, 2024).

Métodos baseados em DIA geralmente necessitam de baixo investimento financeiro, são simples e portáteis. Além disso, possuem alta sensibilidade, faixa linear ampla, alta frequência analítica, alta reprodutibilidade e repetibilidade, bem como precisão e exatidão adequadas para aplicações em controle de qualidade, monitoramento ambiental e aplicações

clínicas, entre outras áreas. Ao contrário de muitos métodos instrumentais, que demandam grandes volumes de reagentes e geram considerável quantidade de resíduos, esses métodos utilizam pequenas quantidades de reagentes, reduzindo significativamente a geração de resíduos (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). Além disso, a portabilidade e simplicidade dos equipamentos minimizam o consumo de energia e recursos, estando em conformidade com os princípios da química verde, contribuindo para a preservação ambiental e promovendo análises mais sustentáveis (Pena-Pereira; Wojnowski; Tobiszewski, 2020).

Esses métodos têm sido amplamente empregados em diversas áreas. Na indústria alimentícia, por exemplo, smartphones são utilizados para monitorar a qualidade e segurança dos alimentos (Meenu et al., 2021). No monitoramento ambiental, são empregados na detecção de poluentes e na análise da qualidade da água e do ar (Upadhyay et al., 2024). Na medicina, facilitam diagnósticos rápidos e o monitoramento da saúde (Kap et al., 2021). No ensino de química, são utilizados como dispositivos analíticos em aulas experimentais (Da Silva Oliveira et al., 2023). Na análise forense, ajudam na detecção de substâncias ilícitas e na autenticação de documentos (Ferreira et al., 2020). Já na análise agrícola, permitem o monitoramento da saúde das plantas e a análise do solo (Kwon; Park, 2017).

No entanto, apesar das diversas vantagens e possibilidades de emprego desses métodos, é importante enfatizar que os dispositivos utilizados para a captura das imagens não foram originalmente projetados para finalidades analíticas. Portanto, para que as vantagens citadas e o potencial da técnica sejam plenamente explorados, é necessária a otimização de diversos parâmetros técnicos, como a aquisição das imagens, a composição, o pós-processamento e o tratamento dos dados (Soares; Fernandes; Rocha, 2023). A otimização desses parâmetros é essencial para garantir a precisão, confiabilidade e repetibilidade das análises, minimizando a interferência de variáveis indesejadas e aumentando a robustez dos resultados (Capitán-Vallvey et al. 2015; Di Nonno; Ulber 2021).

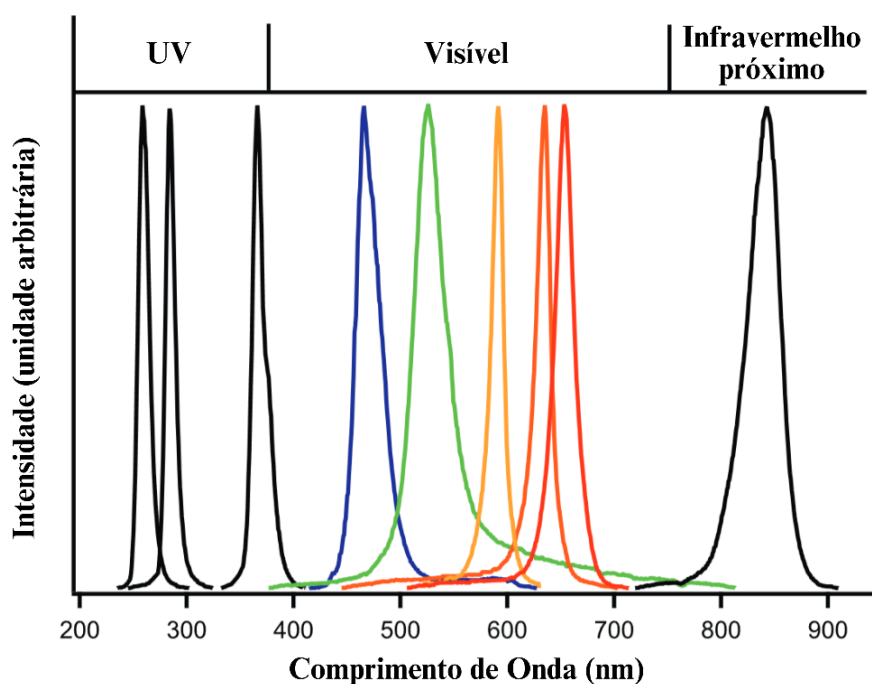
2.5 LEDs

Os diodos emissores de luz (LEDs) são dispositivos semicondutores que emitem radiação eletromagnética em determinados comprimentos de onda. A emissão da luz é gerada através do processo de eletroluminescência. Nesse processo, é aplicada uma corrente elétrica, fazendo com que os elétrons e buracos (ausência de elétrons) se recombinem em uma junção p-n (positivo-negativo), liberando energia na forma de fótons (Macka; Piasecki; Dasgupta,

2014). A energia, ou cor do fóton emitido, depende da diferença de energia entre as bandas de valência e de condução (bandgap) do semiconductor (Fernandes et al., 2020).

A comercialização dos LEDs foi iniciada na década de 1960, sendo o primeiro LED de emissão da cor vermelha (Bui; Hauser, 2015). Em seguida, foram produzidos outros LEDs de comprimentos de onda mais curtos, como laranja, amarelo e verde. Atualmente, está disponível uma ampla variedade de LEDs que abrangem diversos comprimentos de onda, classificados principalmente pela cor da luz emitida e pela tecnologia de fabricação. Os principais tipos de LEDs incluem LEDs monocromáticos, LEDs de alto brilho, LEDs RGB, LEDs brancos, OLEDs, LEDs infravermelhos e LEDs ultravioletas (Bhattarai; Ebong; Raja, 2024). A Figura 8 mostra o espectro de emissão dos LEDs nas regiões ultravioleta, visível e infravermelho.

Figura 8: Espectro de emissão de LEDs na região Ultravioleta, visível e infravermelho.



Fonte: Adaptado, Bui; Hauser, 2015.

Os LEDs monocromáticos emitem luz de uma única cor, sendo comumente utilizados em sinais e indicadores. LEDs de alto brilho produzem intensidade de luz maior e são usados em aplicações de iluminação e displays. Os LEDs RGB combinam os LEDs vermelho, verde e azul, para produzirem uma ampla gama de cores. Já os LEDs brancos podem ser baseados na combinação de três cores primárias (assim como os RGB), ou compor um material fluorescente para uma emissão mais ampla, sendo usados como substitutos para as lâmpadas

fluorescentes em aplicações de iluminação. Os OLEDs possuem compostos orgânicos como material semicondutor, apresentando flexibilidade e eficiência em displays de alta resolução. Por fim, os LEDs infravermelho são utilizados em controles remotos e sensores, enquanto os LEDs ultravioletas são utilizados em aplicações de esterilização e detecção de substâncias fluorescentes (Bui; Hauser, 2015; Fernandes et al., 2020; Macka; Piasecki; Dasgupta, 2014).

O uso de LEDs tem revolucionado a iluminação e proporcionado uma variedade de novas aplicações tecnológicas, de consumo e pesquisa (Bhattarai; Ebong; Raja, 2024; Fernandes et al. 2020). Além da variedade de opções de LEDs, combinada com ofertas em diferentes tamanhos e formatos, esses dispositivos apresentam outras vantagens, como uma alta eficiência de conversão de corrente, o que produz menos calor e mantém a emissão estável, longa vida útil (em média 100.000 horas) e custo baixo em comparação com outras fontes de radiação mais robustas (Fernandes et al., 2020). Todas essas características tornam o uso dos LEDs muito atrativo para a construção de instrumentos analíticos, com destaque para os instrumentos baseados em análise óptica (Fernandes et al., 2020).

Na literatura, são encontrados diversos relatos da construção de espectrofotômetros, fluorímetros e colorímetros utilizando LEDs como fontes de iluminação (Capitán-Vallvey et al., 2015). O comprimento de onda de emissão do LED é selecionado de acordo a faixa de absorção do analito. Nos instrumentos construídos, normalmente a troca do LED é um processo simples, o que possibilita a aplicação para uma variedade de analitos (Bui; Hauser, 2015). Além disso, grande parte dos LEDs possuem espectros de emissão na região visível com larguras de bandas com 20 a 30 nm, o que pode eliminar a necessidade de um monocromador em determinadas aplicações, reduzindo os custos do instrumento (Macka; Piasecki; Dasgupta, 2014).

O desempenho dos LEDs pode ser comprometido por ruídos da fonte de alimentação, variações de temperatura, limitações no comprimento de onda, entre outros (Macka; Piasecki; Dasgupta, 2014). Quando empregados em instrumentos ou análises em que requerem alta precisão, algumas otimizações podem ser realizadas para amenizar essas características limitantes. A combinação de LEDs de duas ou três cores diferentes proporciona maiores faixas de emissão de radiação. Nesses casos, a utilização de feixes de fibras ou divisores de fibras pode auxiliar na efetividade da combinação. A temperatura pode ser controlada com dissipadores de calor, por exemplo, para evitar desvios espectrais, enquanto o uso de fontes de corrente constante evita os ruídos causados pela alimentação (Macka; Piasecki; Dasgupta, 2014).

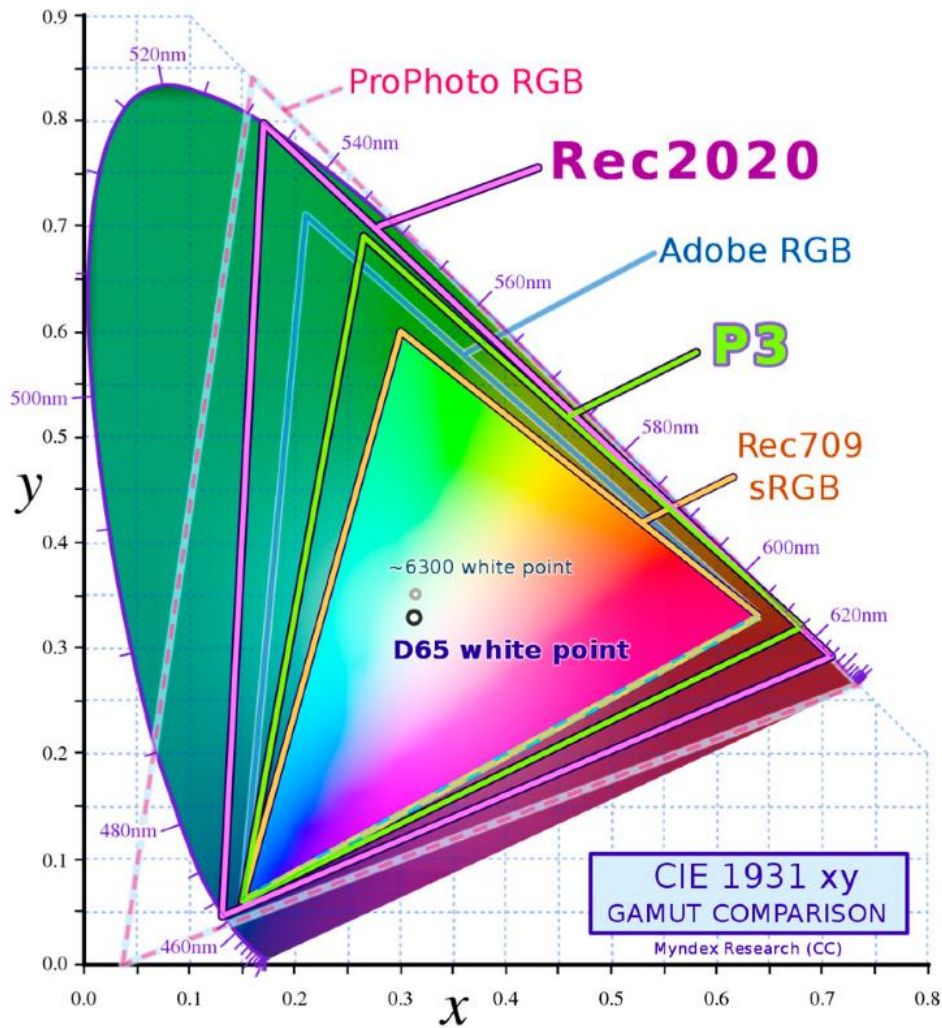
2.6 Sistemas De Cor RGB

Um sistema, modelo ou espaço de cor é um modelo matemático que representa as cores de maneira sistemática, definindo um conjunto de cores em coordenadas, geralmente em três dimensões (Süsstrunk, Buckley, Swen, 1999). A combinação das coordenadas é usada para especificar, criar e reproduzir cores de maneira consistente e precisa em diferentes dispositivos e contextos. Os sistemas de cores são fundamentais para comunicar informações de cor entre os dispositivos de captura, exibição e saída, sendo cruciais em diversas áreas, como fotografia, impressão, computação gráfica, processamento de imagens, visão computacional, entre outras (Ibraheem et al., 2012)

O sistema de cores aditivo RGB é baseado na teoria tristímulo e combina três cores primárias: vermelho (*red*), verde (*green*) e azul (*blue*), em diferentes intensidades para representar uma ampla gama de cores visíveis (Woelf et al., 2020). Este sistema é amplamente utilizado em dispositivos eletrônicos, como monitores, televisores, câmeras digitais e smartphones. No entanto, o termo “RGB” é genérico e engloba diversos espaços de cores específicos, cada um cobrindo diferentes partes do espectro RGB e sendo otimizado para diferentes aplicações (Fay; Wu, 2024).

Existem sistemas RGB com 8, 10, 12 bits e 16 bits por canal. Quanto maior a profundidade de bits, maior será a gama, precisão e suavidade de cor apresentada (Fay; Wu, 2024). Os sistemas de 8 bits são amplamente utilizados e suficientes para a maioria das aplicações diárias. No entanto, para aplicações profissionais, pode ser necessário um espaço com maior profundidade de bits para alcançar um detalhamento de cor extremamente fino. A Figura 9 apresenta o diagrama de cromaticidade CIE 1931, que representa as cores enxergadas pelo sistema visual humano, e a gama de alguns sistemas de cores RGB.

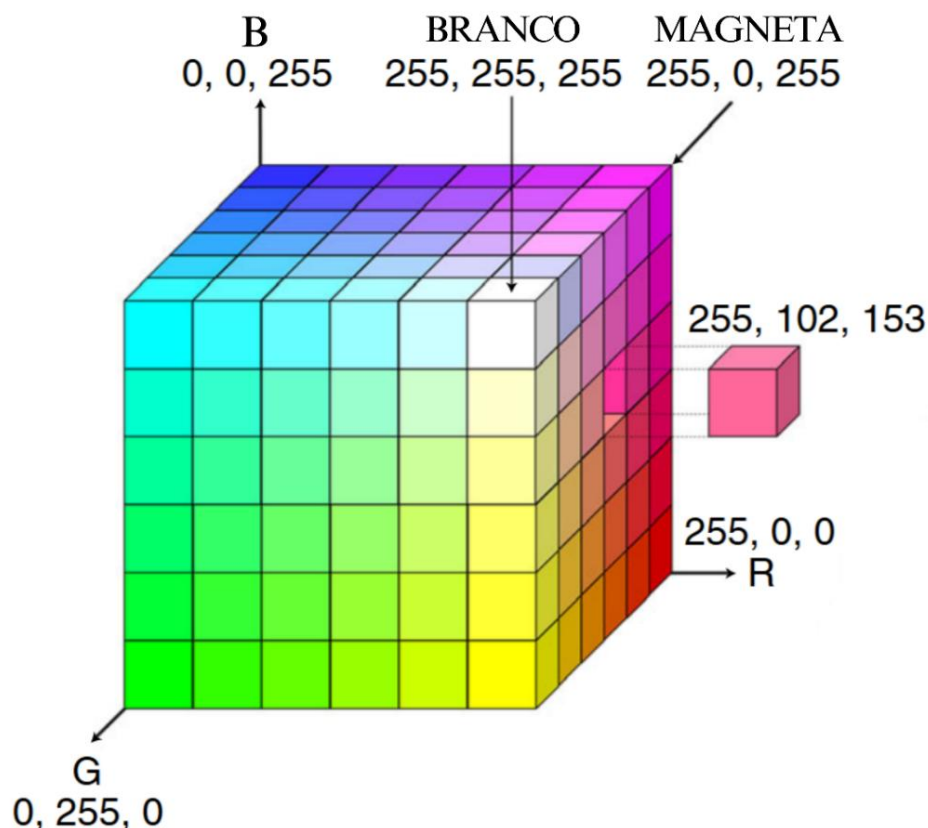
Figura 9: Diagrama de cromaticidade CIE 1931, com contornos das gamas de cores de sRGB, DCI-P3, Rec. 2020, Adobe RGB e ProPhoto RGB sobrepostos.



Fonte: Kim; Kim; Kim, 2023.

Em um sistema de 8 bits, cada cor RGB é representada por 8 bits, totalizando 256 valores diferentes (2^8). Como são três canais de cores, com a combinação deles ($256 \times 256 \times 256$) é possível representar 16.777.216 cores (Da Silva Oliveira et al., 2023). Esse padrão de cores foi determinado pela *International Color Consortium* (ICC) e possibilita a padronização na reprodução das cores em diferentes dispositivos (Fernandes et al., 2020). A combinação dos canais RGB pode ser representada em forma de cubo (Figura 10), no qual os eixos x, y e z, são as cores vermelho, verde e azul. Na representação tridimensional, o cubo é maciço e cada lado e ângulo representam a cor da mistura de diferentes intensidades dos canais RGB (Woolf et al., 2020). As cores vermelho, verde e azul absolutas são, respectivamente $[255,0,0]$, $[0,255,0]$ e $[0,0,255]$, enquanto o branco é representado como $[255,255,255]$ e o preto é $[0,0,0]$.

Figura 10: Representação do cubo RGB.



Fonte: Adaptado, Woolf et al., 2020.

O modelo RGB é dependente do dispositivo, isto é, os valores de RGB são afetados pelos sensores presentes nos dispositivos de captura, como câmeras, smartphones e scanners, mesmo se capturados em condições iguais de iluminação e distância (Ibraheem et al., 2012). Além disso, a exibição da cor resultante também é afetada pelos componentes e configurações dos dispositivos usados para a exibição das cores, como monitores e TVs. Um mesmo conjunto de dados RGB pode representar visualmente duas cores distintas em dispositivos diferentes (Ibraheem et al., 2012). Diversas tentativas de padronização foram feitas, entretanto, um único modelo para todas as aplicações é improvável devido as diferenças de componentes usados para a construção dos dispositivos (Süsstrunk, Buckley, Swen, 1999).

Apesar das limitações, o sistema RGB se tornou padrão para a maioria das aplicações de imagem, estando presente em dispositivos de captura e exibição pela ampla compatibilidade, dispensando a necessidade de conversão adicional para a exibição (Ibraheem et al., 2012). Diversos padrões de sistemas RGB são utilizados para finalidades específicas. Nesse sentido, o sistema sRGB se destaca como o sistema padrão para a exibição de conteúdo na internet e o mais utilizado em dispositivos eletrônicos (Da Silva Oliveira et al., 2023).

Além disso, pela maior presença e fácil acesso, é comumente utilizado como informações colorimétricas para análises de imagem digital.

Na análise de imagem digital, os valores RGB são extraídos da imagem e utilizados como ferramentas analíticas. A concentração do analito pode ser obtida relacionando o valor individual de cada canal RGB, a relação entre os canais (por exemplo R/B) e empregando equações matemáticas (Da Silva Oliveira et al., 2023). A seleção dos canais, assim como o emprego de relações e equações, depende das cores que o analito apresenta nas imagens digitais. Imagens com áreas brilhantes podem aumentar os valores de RGB e impactar negativamente nas análises (Fernandes et al., 2020).

Após a obtenção dos dados RGB, estes podem ser denominados como sinal analítico e uma curva de calibração é construída relacionando-os com a concentração do analito. Essa relação pode ser direta ou inversa, dependendo da matriz do analito (Da Silva Oliveira et al., 2023). Além disso, como discutido anteriormente, as condições de captura e configurações dos dispositivos utilizados influenciam nos dados RGB e, portanto, na quantificação (Fernandes et al., 2020).

A maioria dos trabalhos de análise de imagem digital encontrados na literatura não relata qual padrão RGB foi utilizado. Essa falta de informações detalhadas é atribuída tanto à ausência de conhecimento prévio quanto à maneira como os softwares apresentam os valores de pixel, geralmente representados apenas como RGB. Isso representa uma limitação significativa para reprodutibilidade e padronização dos métodos (Fay; Wu, 2024). Em um estudo recente, Fay e Wu (2024) compararam 68 padrões de sistema RGB e identificaram uma diferença de 42 a 77% em parâmetros analíticos, incluindo sensibilidade e limite de detecção, entre os sistemas. Além disso, após a conversão dos dados de um sistema RGB para outro, foi identificada uma discrepância de até 18,3% entre os valores obtidos.

2.7 ImageJ

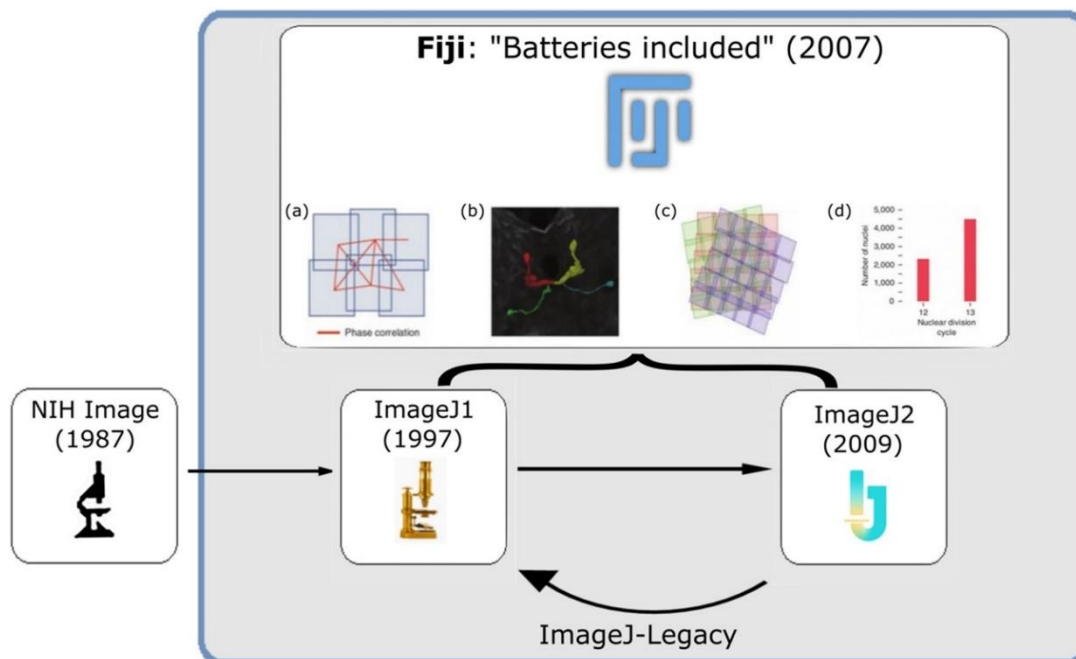
O software de processamento e análise de imagens ImageJ foi desenvolvido por Wayne Rasband em 1997 no *National Institutes of Health*. O software foi projetado para a ciência, sendo um software de código aberto que permite visualizar, inspecionar, quantificar e validar dados de imagens de diversos formatos, incluindo TIFF, GIF, JPEG, BMP, DICOM, FITs e raw (Hartig, 2013; Schroeder et al., 2020). O ImageJ é baseado na linguagem de programação Java e compatível com diversos sistemas operacionais, como Macintosh, Windows e Linux.

Historicamente, o ImageJ é uma evolução do seu antecessor, o NIH Image, também desenvolvido por Rasband. Além da ampla compatibilidade com sistemas operacionais e suporte a vários formatos de imagem, o ImageJ possui as ferramentas de macros e plugins (Abràmoff, Mahalhães, Ram, 2004). Os macros são *scripts* de programação que possibilitam a automatização de rotinas de análises. Usuários sem conhecimentos prévios de programação podem gravar suas ações manuais, criando uma tarefa personalizada e automatizada (Schneider; Rasband; Eliceiri, 2012).

Embora os macros sejam uma ferramenta muito útil, alguns contando com enormes quantidades de comandos, a maior gama de possibilidades está no uso de plugins. Estas, são ferramentas externas, escritas principalmente na linguagem Java, que adicionam novas funções ao software (Schroeder et al., 2020). Os plugins são desenvolvidos pelos usuários para atender a necessidades específicas em diversas áreas da ciência e tornam o potencial de uso do ImageJ ilimitado. Diferentemente dos macros, a escrita de plugins requer conhecimento em programação, no entanto, a comunidade de usuários do ImageJ disponibiliza milhares dessas ferramentas de modo gratuito na internet (Schroeder et al., 2020).

O Fiji é uma versão de distribuição do ImageJ muito popular por facilitar a instalação e desenvolvimento de plugins mais complexos, além de já incluir vários plugins e ferramentas instaladas (Arena et al., 2016). Em 2009 foi disponibilizado o ImageJ2, que melhorou a arquitetura central e reduziu algumas limitações do ImageJ (agora nomeado de ImageJ1) (Rueden et al., 2017). Apesar das atualizações, a interface dos softwares permanece praticamente a mesma do NIH Image, com o objetivo de serem simples e intuitivas. Os três softwares possuem compatibilidade retroativa e são amplamente utilizados pela comunidade científica (Schroeder et al., 2020). A Figura 11 mostra a evolução dos softwares.

Figura 11: Histórico de evolução do software ImageJ.



Fonte: Schroeder et al., 2020.

O código aberto do software torna possível a colaboração da comunidade científica e garante a capacidade de inspecionar, reproduzir e verificar os métodos de análise aplicados (Arena et al., 2016). Medicina, biologia, arqueologia, indústria, ensino e química, são alguns exemplos de áreas que utilizam o ImageJ. Na química, uma das principais ferramentas empregadas em análises de imagem é a segmentação. A segmentação de imagem é o processo de identificar e isolar uma determinada área ou objeto dentro de uma imagem (Schroeder et al., 2020).

A segmentação é frequentemente usada para definir uma região de interesse (ROI) em reações colorimétricas. Após a seleção da ROI, os dados contidos da distribuição de valores de pixel podem ser extraídos e histogramas RGB obtidos. Os histogramas RGB fornecem uma análise detalhada da distribuição de intensidade de cada canal RGB dentro da região segmentada. Esses dados são utilizados como informações analíticas nas análises para calcular vários parâmetros de interesse, através de uma curva de calibração (Fernandes et al., 2020).

A otimização do ROI é fundamental nas análises para a interpretação correta dos resultados. A seleção adequada do ROI permite a captura precisa das áreas mais relevantes da imagem, onde ocorrem as reações colorimétricas que indicam a presença e a concentração dos analitos. A seleção de áreas com bordas, ou regiões onde a cor não é homogênea e regiões que

possuem sombras ou reflexos, devem ser evitadas para minimizar erros nas medições. A correta definição e otimização do ROI permite dados mais representativos e resultados confiáveis, além de maior repetibilidade e curvas de calibração precisas (Capitán-Vallvey et al., 2015).

2.8 Reações de Complexação

A formação de um complexo ocorre quando uma base de Lewis (uma espécie doadora de par de elétrons) se liga a ácido de Lewis (uma espécie que recebe pares de elétrons) formando uma ligação covalente coordenada. Nessas reações, as bases de Lewis, íons ou moléculas, são denominadas ligantes e podem ser classificadas de acordo com a quantidade de ligações que fazem com o íon central. Os ligantes monodentados se ligam ao átomo central doando um par de elétrons, enquanto os bidentados formam duas ligações e os polidentados possuem mais que dois pontos de coordenação por molécula (Vogel, 2002).

As reações de complexação são fundamentais em muitas áreas da química, sendo amplamente empregadas em análises químicas, síntese de novos materiais, catálise, biomedicina, remediação ambiental e outros (Malinowski et al., 2020). A ampla gama de aplicações é devida a sua capacidade de formar complexos estáveis e específicos com diferentes íons e moléculas. Os complexos formados possuem propriedades eletroquímicas, físicas e espectroscópicas específicas, tornando-os ferramentas valiosas em química analítica (Elattar et al., 2024).

Alguns exemplos do uso de reações de complexação na química analítica incluem a detecção e identificação de íons, formando complexos coloridos, fluorescentes ou insolúveis (Shakya; Khan, 2021, Skoog et al., 2006). Essas reações também são empregadas em métodos clássicos, como a titulação complexiométrica, que determina a concentração de íons metálicos em solução (Skoog et al., 2006). Além disso, os complexos metálicos aumentam a seletividade e eficiência na preparação de amostras, sendo utilizados para pré-concentração de analitos (Laskar; Siddiqui; Islam, 2016). A especiação química, que envolve a determinação de diferentes formas químicas de um elemento, pode ser realizada utilizando ligantes que reagem de forma específica com o analito de interesse (Kiss; Enyedy; Jakusch, 2017).

A formação das cores em complexos depende das características dos íons centrais e ligantes. Diversos mecanismos podem ser responsáveis pelo surgimento da cor, incluindo transições de elétrons entre os orbitais d-d em metais de transição e a transferência de carga entre o ligante e o íon central (Atkins, 2018). Segundo a lei de Beer, a absorvância de um

composto em solução é proporcional à sua concentração molar (Skoog et al., 2006). A cor resultante das reações de complexação pode ser utilizada para determinar a concentração molar da espécie de interesse, sendo essa possibilidade particularmente relevante para técnicas espectroscópicas e análise de imagem digital.

Devido à sua simplicidade, seletividade e capacidade de fornecer resultados rápidos e visualmente interpretáveis, as reações de complexação são amplamente utilizadas em análises diretas na determinação de íons específicos. Ferro(III) e fosfato são exemplos de analitos frequentemente determinados utilizando essas reações. Ambos são nutrientes essenciais para a saúde humana e desempenham funções cruciais no meio ambiente. No entanto, em determinados contextos e concentrações, também podem ser considerados contaminantes, o que ressalta a importância de métodos analíticos eficazes para monitorar sua presença em diferentes matrizes ambientais.

2.9 Ferro

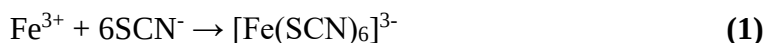
O ferro é um metal de transição com número atômico 26, sendo o quarto elemento mais abundante na crosta terrestre e no núcleo terrestre. Ele desempenha funções cruciais em muitos contextos, incluindo os seres humanos (Comensoli et al., 2017; Heeney, 2014). Entre suas propriedades físicas, o magnetismo é a mais destacada. O ferro apresenta vários estados de oxidação, com os mais comuns sendo Fe^{2+} e Fe^{3+} . Esse elemento é facilmente oxidável, formando óxidos de ferro, como a ferrugem (Fe_2O_3), quando exposto ao ar e à umidade. Essa característica impede sua ocorrência de forma pura na natureza, sendo a sua forma inorgânica mais comum a hematita (Fe_2O_3), enquanto suas formas orgânicas são encontradas em vários alimentos (Shrivastava et al., 2020).

O ferro é essencial no metabolismo das plantas, atuando no transporte de elétrons durante a fotossíntese, desintoxicação de espécies reativas de oxigênio, e na síntese de clorofila, entre outras (Achterberg et al., 2001; Shrivastava et al., 2020). Na indústria, é amplamente empregado em ligas metálicas, como o aço. Óxidos de ferro são utilizados como pigmentos em tintas, enquanto seus sais solúveis servem como catalisadores, fertilizantes, rações, etc. (Ahmed; Roy, 2009). Nos seres humanos, o ferro desempenha um papel fundamental na síntese de DNA, é responsável pelo transporte de oxigênio no sangue (hemoglobina), no armazenamento de oxigênio nos músculos (mioglobina), e no metabolismo energético (Hirota, 2019).

Além de suas funções metabólicas, o ferro é crucial para o sistema imunológico, influenciando a proliferação e atividade de células imunológicas, como linfócitos T e B, e na regulação da resposta inflamatória (Nairz et al., 2018; Yao et al., 2023). Devido as funções citadas e diversas outras, uma ingestão de quantidades apropriadas de ferro é de suma importância para a manutenção da saúde e bem-estar dos humanos. Uma baixa ingestão de ferro na alimentação está associada a uma variedade de doenças e condições adversas, sendo a anemia a principal delas. Essa condição afeta milhões de pessoas, causando fadiga, fraqueza, falta de ar e diversos outros sintomas (Deloughery, 2017). Em contrapartida, o excesso de ferro também é prejudicial a saúde, podendo induzir a oxidação e danos de proteínas, ácidos nucleicos e lipídeos, a partir da formação de espécies ativas de oxigênio no corpo (Shrivastava et al., 2020).

As recomendações de ingestão de ferro variam conforme a idade, sexo e necessidades específicas dos indivíduos. Para homens adultos a partir de 19 anos recomenda-se a ingestão de 8 mg por dia, enquanto para mulheres acima de 19 anos a ingestão recomendada é de 18 mg por dia (Bortolini; Fisberg, 2010). Alimentos como carne vermelha, aves, peixes, vegetais e leguminosas possuem quantidades consideráveis de ferro. Além disso, suplementes alimentares podem auxiliar na obtenção das quantidades necessárias desse micronutriente (Silva et al., 2019). A determinação de ferro é fundamental para a saúde pública devido às complicações causadas tanto pela deficiência quanto pelo excesso de ingestão.

Uma técnica muito comum para a determinação de ferro em amostras é a formação de complexos. Diferentes ligantes são usados para cada espécie de ferro: o ferro(II) é geralmente complexado com fenantrolina, enquanto o ferro(III) é comumente complexado com tiocianato (SCN^-). A reação com o tiocianato (Equação 1) é uma reação clássica na química analítica, utilizada desde 1853 e amplamente utilizada para análises qualitativas e quantitativas, especialmente em aplicações ambientais e no ensino de química (Hayder; Najib, 2011). Nesta reação, os íons Fe^{3+} são complexados com os íons tiocianato, produzindo seis complexos possíveis: $[\text{Fe}(\text{SCN})_4]^-$, $[\text{Fe}(\text{SCN})_5]^{2-}$, $[\text{Fe}(\text{SCN})_6]^{3-}$, $\text{Fe}(\text{SCN})_3$, $[\text{Fe}(\text{SCN})_2]^+$ e $\text{Fe}(\text{SCN})^{2+}$. Em concentrações superiores a $0,10 \text{ mol L}^{-1}$ de íons tiocianato, a espécie predominante é o hexatiocianoferrato(III) $[\text{Fe}(\text{SCN})_6]^{3-}$, enquanto em concentrações menores, a espécie predominante é $[\text{Fe}(\text{SCN})^{2+}]$ (Lourenço et al., 2020). Os íons Fe^{2+} também podem reagir com o tiocianato, formando um único complexo $\text{Fe}(\text{SCN})^+$, porém sua formação não é favorável.



A reação entre ferro(III) e tiocianato produz uma coloração vermelha em solução aquosa, indicando a formação do complexo. Diferentes proporções de Fe(III) para SCN^- são relatadas na literatura, comumente entre 1:1 e 1:6 (Hayder; Najib, 2011). A intensidade da cor varia de acordo com a concentração de íons Fe^{3+} . Para quantificação, a absorbância do complexo é medida em um espectrofotômetro UV-Vis e correlacionada com a sua concentração pela lei de Beer. A reação é rápida e atinge o equilíbrio facilmente, entretanto, a formação do complexo deve ocorrer em meio ácido (pH 1 – 2) para evitar a hidrólise do ferro, sendo comum o uso de HCl durante as determinações (Martins et al., 2005). Além disso, para uma melhor estabilidade do complexo, é recomendado adicionar primeiro o ferro, em seguida acidificar o meio, e finalmente adicionar o reagente SCN^- (Martins et al., 2005).

2.10 Fosfato

O fósforo (P) e seus compostos fazem parte de diversos processos ambientais e fisiológicos, afetando todos os ecossistemas e sendo essencial para todas as formas de vida (Zhu; Ma, 2020). O ortofosfato inorgânico (PO_4^{3-}) é a forma totalmente oxidada do P. Esse íon é crucial para a sobrevivência, reprodução e metabolismo de todos os seres vivos, sendo componente de moléculas como o RNA e DNA (Huang et al., 2024). Além disso, o fosfato desempenha um papel fundamental no armazenamento, transferência e liberação de energia celular, através da síntese de ATP. (Nicholls et al., 2023).

Para as plantas, o fosfato é o principal tipo de fósforo absorvido, sendo um macronutriente essencial que afeta o seu crescimento e desenvolvimento (Dai et al., 2024). A presença de fosfato nas plantas melhora a resposta às aplicações de nitrogênio e potássio, promovendo a biofixação e a manutenção da matéria orgânica do solo (Smil, 2000). Consequentemente, a presença de fosfato melhora a capacidade de retenção de água do solo, reduzindo processos de degradação como a erosão.

A deficiência de fosforo nas plantas não apresenta sinais específicos, mas resulta em atraso no crescimento, prejudicando a formação de raízes, floração, frutificação de sementes (Smil, 2000). Devido à necessidade de fósforo para o crescimento das plantas, o fosfato é amplamente utilizado na fabricação de fertilizantes, aumentando a produtividade agrícola. Desde o século XIX, a produção comercial de fertilizantes inorgânicos, como o superfosfato, tem sido essencial para a agricultura moderna (Smil, 2000). Esses fertilizantes são produzidos a partir do tratamento de rochas fosfáticas com ácidos, aumentando significativamente a solubilidade do fósforo e tornando-o mais disponível para as plantas.

O desenvolvimento industrial, somado ao aumento da população global, tem afetado os ciclos do fósforo, aumentando sua mobilidade (Saha et al., 2021; Zhu; Ma, 2020). O excesso desse elemento pode gerar consequências ambientais indesejáveis. Processos como a mineração de rochas fosfáticas, a aplicação de fertilizantes, a produção pecuária e consumo humano depositam fósforo em solos e sedimentos, resultando em problemas de poluição (Li et al., 2022A; Zhu; Ma, 2020). Nos corpos d'água, esse excesso pode gerar a eutrofização, comprometendo a qualidade da água e a segurança do ecossistema aquático (Preisner; Neverova-Dziopak; Kowalewski, 2020; Zhu; Ma, 2020).

A eutrofização é um processo caracterizado pelo aumento da concentração de nutrientes, principalmente nitrogênio e fósforo, em corpos d'água, levando ao crescimento excessivo de algas e outras plantas aquáticas (Li et al., 2022A). Embora o aumento da biomassa e da produtividade primária possa parecer benéfico a curto prazo, as consequências a longo prazo são prejudiciais aos ecossistemas aquáticos. A eutrofização leva à redução da oxigenação da água, à morte de peixes, à alteração dos ecossistemas aquáticos, ao desequilíbrio na cadeia alimentar, à proliferação de cianobactérias tóxicas, à acidificação da água, ao acúmulo de matéria orgânica e a impactos econômicos negativos (Li et al., 2022A).

A transparência e a cor da água são indicativos da sua qualidade nutricional. Apenas $10 \mu\text{g P L}^{-1}$ dissolvido é suficiente para tornar a água turva, diminuindo a sua clareza de 9 para 3 metros. Concentrações superiores a essa podem ser suficientes para promover a eutrofização. No entanto, é importante ressaltar que a eutrofização é um processo impulsionado pelo aporte de nutrientes (carga) e não apenas pela concentração de fósforo (Smil, 2000).

O excesso de algas bloqueia a luz solar, impedindo que plantas subaquáticas realizem a fotossíntese, resultando em sua morte. A decomposição da biomassa algal consome grandes quantidades de oxigênio dissolvido na água, causando hipóxia ou anoxia (condições de baixo ou nenhum oxigênio), levando à morte de peixes e outros organismos aquáticos dependentes do oxigênio para sobreviver (Li et al., 2022A). Além disso, algumas espécies de algas, conhecidas como cianobactérias, produzem toxinas prejudiciais à saúde humana e animal, contaminando a água potável e representando um risco significativo para a saúde pública (Smil, 2000).

Portanto, a determinação de fosfato em amostras de água é crucial para monitorar e controlar a eutrofização. Diversos métodos analíticos tem sido utilizados para realizar esse monitoramento, entre eles a espectrofotometria usando o azul de molibdênio (MB),

amplamente aplicada como método padrão de determinação (Zhu; Ma, 2020). Essa reação envolve a complexação de várias espécies de fósforo lábeis, além do ortofosfato (Nagul et al., 2015). Essa reação é citada desde 1783 e ocorre em duas etapas: primeiro, a formação de um íon kegglin ao redor do ânion analito, e em seguida, a redução do heteropoliácido, formando um produto de cor azul (Nagul et al., 2015). As reações simplificadas são mostradas nas equações 2 e 3.



Para que a formação do complexo fosfomolibdênio ocorra, é necessário um ácido forte, uma fonte de Mo(VI) e um agente redutor. Um pH entre 0 e 1 é indicado para favorecer a formação das quantidades adequadas de um produto estável, sem que ocorra redução direta excessiva do molibdato (Nagul et al., 2015). O molibdato presente deve estar em grande excesso para a estabilização do complexo, mas não em concentração alta o suficiente para evitar concentrações deletérias de ácido (Nagul et al., 2015). Entre os redutores empregados, o ácido ascórbico é um dos mais utilizados devido a sua disponibilidade e segurança de manipulação. Além disso, geralmente se utiliza o antimônio(III) como catalisador, evitando a necessidade de aquecimento e produzindo um produto estável por horas. A combinação de antimônio e quantidades suficientes de ácido ascórbico resulta em uma rápida formação do complexo, com a reação atingindo o equilíbrio em aproximadamente 1,5 min (Nagul et al., 2015). A intensidade da cor do complexo é diretamente proporcional à concentração de fosfato na amostra, permitindo uma quantificação precisa do nutriente.

A determinação de fosfato em amostras ambientais é essencial para o monitoramento da qualidade da água e a prevenção de problemas ambientais graves, como a eutrofização. Métodos analíticos, como a espectrofotometria utilizando o azul de molibdênio, desempenham um papel crucial na identificação e quantificação desse nutriente essencial, mas potencialmente prejudicial. No entanto, devido às limitações de infraestrutura, nem sempre é possível a aplicação de métodos convencionais de análise. Diante dessa realidade, o desenvolvimento de novos métodos de baixo custo, portáteis e de fácil aplicação se torna fundamental. Esses métodos têm o potencial de ampliar significativamente o acesso ao monitoramento de fósforo em ecossistemas aquáticos, além de contribuir para a formulação

de políticas públicas e estratégias de gestão que visam a preservação da saúde ambiental e a sustentabilidade dos recursos hídricos.

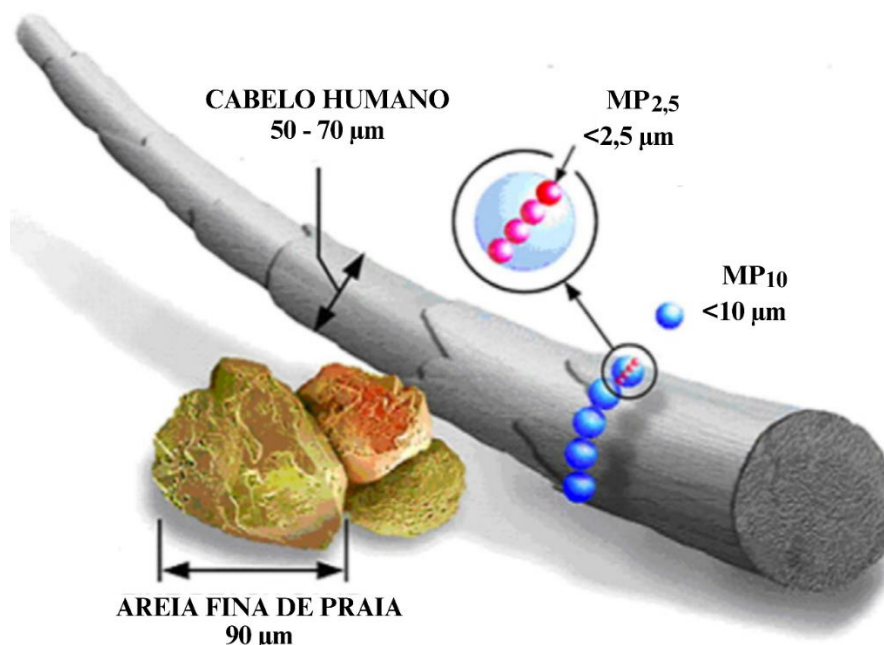
2.11 Material Particulado

A poluição ambiental, resultante de interferências antropogênicas diretas ou indiretas, manifesta-se em diversas formas, incluindo poluição do solo, sonora, hídrica, visual e atmosférica. No âmbito da poluição atmosférica, cerca de 99% da população respira ar com níveis de poluição acima dos recomendados pela OMS (Who, 2022). A OMS classifica a poluição atmosférica e as alterações climáticas como ameaça coletiva número 1 para a saúde humana, contribuindo para 9% de todas as mortes humanas (Pryor; Cowley; Simonds, 2022). Entre os diversos poluentes atmosféricos, o Material Particulado (MP) se destaca por sua complexidade e impacto significativo. O MP consiste em uma mistura de partículas sólidas e líquidas suspensas no ar. Estas partículas podem ser de origem natural, como poeira do solo, pólen e cinzas vulcânicas, ou antropogênicas, resultantes de processos industriais, queima de combustíveis fósseis e atividades agrícolas (Thangavel; Park; Lee, 2022).

O material particulado possui uma composição química variada que pode incluir sulfatos, nitratos, amônio, fuligem, metais como chumbo e mercúrio, e outros compostos orgânicos e inorgânicos. A exposição a esse poluente está associada a uma série de efeitos adversos à saúde, variando de irritações leves no sistema respiratório a doenças graves e crônicas como asma, bronquite, doenças cardiovasculares e câncer de pulmão. Segundo dados da OMS, a exposição ao ar poluído causa cerca de 7 milhões de mortes todos os anos, afetando principalmente grupos vulneráveis como crianças, idosos, gestantes e fumantes. O número de mortes aumenta em países subdesenvolvidos (Thangavel; Park; Lee, 2022).

As partículas permanecem suspensas no ar devido ao seu tamanho, baixa densidade e condições ambientais, como temperatura e velocidade do vento. As partículas de MP são classificadas com base no seu diâmetro aerodinâmico, sendo as categorias mais monitoradas o MP10 (diâmetro $\leq 10 \mu\text{m}$) e o MP2,5 (diâmetro $\leq 2,5 \mu\text{m}$), conforme ilustrado na Figura 12 (Pryor; Cowley; Simonds, 2022).

Figura 12: Comparação do tamanho das partículas MP_{10} e $MP_{2,5}$ em relação a um fio de cabelo humano e um grão de areia fina de praia.

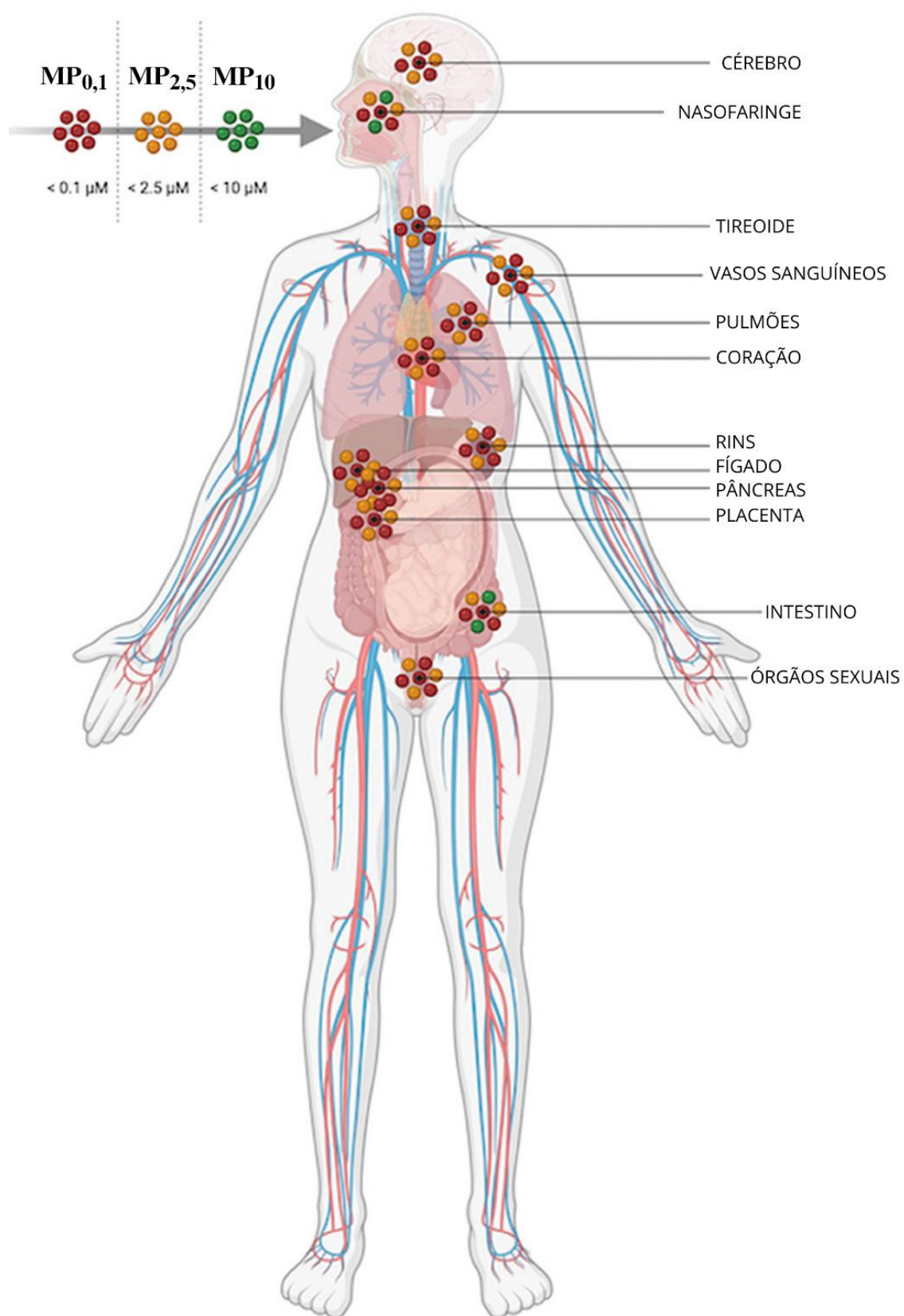


Fonte: Adaptado, Kim; Kabir; Kabir, 2015.

Além da classificação por tamanho, o MP também pode ser classificado quanto à sua formação. As partículas primárias são emitidas diretamente pelas fontes, enquanto as secundárias são geradas na atmosfera a partir de reações químicas entre poluentes precursores, como dióxidos de enxofre (SO_2), óxidos de nitrogênio (NO_2), amônia (NH_3) e compostos orgânicos voláteis (Grantz; Garner; Johnson, 2003; Zhang et al., 2015). Esse tipo de formação secundária costuma gerar partículas com composição mais complexa e potencialmente mais tóxica. Além disso, durante o transporte, a composição desse poluente pode ser alterada através de reações químicas, efeitos oxidativos do ozônio e o baixo pH do ambiente (Pryor; Cowley; Simonds, 2022).

A toxicidade do MP e os efeitos no organismo humano dependem do tamanho das partículas, área superficial e composição química, sendo o $MP_{2,5}$ mais nocivo à saúde por se acumular mais em comparação ao MP_{10} (Zhang et al., 2015). A contaminação por MP pode ocorrer pela inalação, atravessando o epitélio olfativo e trato gastrointestinal (Pryor; Cowley; Simonds, 2022). Os MP_{10} ficam retidos às vias áreas superiores, enquanto os $MP_{2,5}$ conseguem atravessar os alvéolos, gerando processos inflamatórios e infecções. Além disso, o $MP_{2,5}$ pode contaminar o sangue, onde será transportado para vários órgãos (Pryor; Cowley; Simonds, 2022). Na Figura 13 são apresentadas as diferentes regiões de retenção das partículas de material particulado no corpo humano.

Figura 13: Representação esquemática da deposição do material particulado em diferentes regiões do corpo humano.



Fonte: Adaptado, Pryor; Cowley; Simonds, 2022.

MPs que apresentam metais traços tem caráter mais oxidativo, sendo mutagênicos, produzindo processos inflamatórios, danificando mitocôndrias, o DNA e causando morte celular (Pryor; Cowley; Simonds, 2022). A exposição ao MP_{2,5} está associada ao aumento de riscos de doenças renais, doenças respiratórias, desregulação no sistema endócrino, perda de massa muscular esquelética, obesidade, diabetes, Alzheimer, doença de Parkinson, demência, problemas cardiovasculares, além de diversas outras doenças e complicações (Kyung; Jeong, 2020; Pryor; Cowley; Simonds, 2022).

Além dos impactos na saúde humana, o MP também afeta o meio ambiente, contribuindo para redução da visibilidade e comprometendo a qualidade do solo e da água. Mudanças climáticas também são influenciadas pelo material particulado, partículas como o carbono negro e compostos de ferro absorvem luz solar e aquecem a atmosfera, enquanto outros compostos, como sulfatos, refletem a luz solar e tem um efeito de resfriamento (Fuzzi et al., 2015; Zhang et al., 2015). Além disso, as partículas podem interferir na fotossíntese das plantas e na saúde dos ecossistemas, alterando as funções naturais e reduzindo a biodiversidade (Grantz; Garner; Johnson, 2003; (Mukherjee; Agrawal, 2017).

Diversos estudos evidenciam o impacto da exposição ao MP na saúde humana. Um estudo realizado por Keuken et al. (2011) mostrou que uma redução na exposição do MP gera um aumento na expectativa de vida em até 13 meses por pessoa. A maioria das cidades urbanas no mundo apresentam níveis de MP₁₀ acima das recomendações da OMS (Mukherjee; Agrawal, 2017). O monitoramento da qualidade do ar é crucial para controlar os níveis de MP e proteger a saúde pública e o meio ambiente. No Brasil, a Resolução CONAMA nº 491/2018 estabelece padrões para os níveis de MP e outros poluentes atmosféricos, orientando políticas públicas para mitigar os impactos da poluição do ar.

O monitoramento da qualidade do ar no Brasil enfrenta desafios significativos, com apenas dez estados brasileiros e o DF realizando o monitoramento de qualidade do ar. Existem 371 estações ativas, 80% delas localizadas na Região Sudeste (Vormittag et al., 2021). Essas estações estão espalhadas em 40 cidades e todas apresentam níveis de qualidade do ar acima dos valores considerados seguros para a saúde. As políticas de regulamentação e monitoramento do Programa Nacional de Controle da Poluição do Ar (Pronar) tem sido insuficiente para garantir a qualidade do ar para a população brasileira (Vormittag et al., 2021).

Diante dos impactos significativos do material particulado na saúde humana e nos ecossistemas, torna-se evidente a necessidade de métodos acessíveis e eficientes para a

determinação dessas partículas no ambiente. No Brasil, ainda existe um longo caminho a ser percorrido para alcançar um monitoramento de ampla cobertura geográfica. É necessário uma reavaliação e reestruturação das políticas e práticas de monitoramento (Vormittag et al., 2021). A coleta de dados de monitoramento, assim como a compreensão detalhada da composição, fontes e efeitos do material particulado é crucial para desenvolver estratégias eficazes de controle da poluição atmosférica (Hopke et al., 2020).

O desenvolvimento de novos métodos de baixo custo e fácil aplicação é fundamental para ampliar o acesso ao monitoramento da qualidade do ar, especialmente em regiões com infraestrutura limitada. Esses métodos não só permitem uma avaliação mais precisa da exposição ao MP, como também viabilizam a formulação de políticas públicas para mitigar os impactos da poluição atmosférica. A colaboração contínua entre órgãos governamentais, indústrias e a comunidade científica é fundamental para garantir um ar mais limpo e seguro para toda a população.

3 Objetivos

3.1 Objetivo Geral

Desenvolver e otimizar uma metodologia de análise de imagem digital, focando na avaliação dos parâmetros que influenciam na aquisição e composição da imagem, além de avaliar o comportamento do sistema RGB. Utilizar diferentes analitos como modelos para desenvolver, testar e validar o sistema, com ênfase na otimização da técnica de análise, incluindo sua aplicação a diferentes amostras.

3.2 Objetivos Específicos

- Construir um dispositivo alternativo utilizando LEDs como fonte de iluminação e um smartphone como detector.
- Otimizar os diferentes parâmetros que influenciam o processo de aquisição de imagens, sendo eles: A distância entre a fonte de luz e as soluções, a distância entre as soluções e a câmera do smartphone, a intensidade da luz emitida pelos LEDs e a sensibilidade de exposição do sensor da câmera do smartphone;
- Avaliar o uso dos dados do sistema de cor RGB como parâmetro analítico.
- Validar a metodologia desenvolvida por meio de testes de precisão, exatidão, repetibilidade e comparando os resultados com métodos de referência estabelecidos;
- Aplicar a metodologia desenvolvida em amostras de água e material particulado.
- Avaliar a sustentabilidade do método desenvolvido com base nos princípios da Química Analítica Verde, utilizando a ferramenta AGREE e a conformidade com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS).

4 Parte Experimental

4.1 Padrões, Reagentes e Amostras

As soluções utilizadas foram preparadas a partir de reagentes de grau analítico e água ultrapura, coletada de um sistema de purificação de água Milli-Q® (Millipore, Merck, Alemanha).

Os reagentes utilizados foram: ácido ascórbico ($C_6H_8O_6$), 99%, ácido sulfúrico (H_2SO_4) 98%, ácido sulfúrico (H_2SO_4) 65%, ácido clorídrico (HCl) 37%, Tiocianato de amônio (NH_4SCN) 86%, molibdato de amônio ($(NH_4)_6Mo_7O_{24}$) 81% e fosfato monopotássico (KH_2PO_4) 84%, produzidos pela LABSYNTH (São Paulo, Brasil), além dos padrões de Sb(III) e Fe(III) 1000 mg L⁻¹ produzidos pela SpecSol (São Paulo, Brasil).

Cinco amostras de água natural foram coletadas: uma em regiões próximas a atividade de mineração, três de represas da cidade de Catalão – GO, Brasil (Clube do Povo, Campo Belo e Monsehor), e água da torneira, coletada nas dependências do campus da Universidade Federal de Catalão (UFCAT). As amostras foram coletadas em amostradores de garrafa plástica previamente descontaminadas e armazenadas em refrigeração até a realização das análises.

Amostras de material particulado foram coletadas na cidade de Catalão por meio de um Amostrador de Grande Volume (AGV) produzido pela Energética. O material particulado foi coletado utilizando filtros de fibra de vidro com 10µm e 2,5µm (MP₁₀ e MP_{2,5}). Os filtros foram condicionados a 300°C em uma estufa por 3 horas para eliminação de contaminantes orgânicos. A metodologia de coleta ocorreu de acordo com as normas estabelecidas pela ABNT NBR 9547:1997 (ABNT, 1997), sendo programada para ocorrer a cada 6 dias, durante as estações do Outono e Inverno, com os filtros permanecendo expostos por um período de 24 horas.

As amostras foram obtidas de dois pontos de coleta: o primeiro nas dependências da Universidade Federal de Catalão (UFCAT), sendo coletados filtros de MP₁₀ e MP_{2,5}, e o segundo ponto localizado no centro da cidade, onde foram coletados filtros de MP₁₀. Após a coleta, os filtros foram armazenados em dessecador por 24 horas para eliminar qualquer umidade presente. Após a secagem, foi realizado o quarteamento dos filtros, e uma massa de 25 mg foi pesada em uma balança analítica (OHAUS ®), seguida da adição de 12 mL de água régia (solução de HCl 37% e HNO₃ 65%, em proporção 3:1) para análise de íons ferro(III) e 12 mL de água ultrapura para análise de íons fosfato. A digestão foi feita em Ultrassom

(Ultrasonique) durante duas horas e, em seguida, as amostras foram armazenadas em refrigeração até a realização das análises.

4.2 Vidrarias e Materiais

As vidrarias e materiais utilizados para as análises, como microplaca de poços, pipeta Pasteur, tubos Falcon e frascos plásticos utilizados nas análises, foram lavados com detergente, permanecendo em água destilada durante 24 horas, em solução de ácido nítrico 10% v/v por 24 horas, enxaguadas com água ultrapura e secas à temperatura ambiente.

4.3 Dispositivo de aquisição das imagens

Para controle e padronização das condições de aquisição de imagens, como distância, posição e iluminação, foi adaptada uma caixa Patola com dimensões de 22 cm x 15 cm x 10 cm, fabricada em ABS (Acrilonitrila Butadieno Estireno). A caixa conta com um orifício superior, onde o smartphone é posicionado para a captura das imagens digitais. No interior, estão disponíveis duas opções para o posicionamento das soluções: Configuração 1, com 14 cm entre as soluções e a câmera do smartphone e 8 cm entre as soluções e os LEDs; e Configuração 2, com 9 cm entre as soluções e a câmera e 13 cm entre as soluções e os LEDs.. A base utilizada para posicionar a microplaca é fabricada em polipropileno (PP), atuando também como superfície difusora da iluminação. A microplaca de 96 poços com fundo redondo é transparente e fabricada em poliestireno, sendo usada para conter as soluções a serem analisadas. A iluminação é promovida por uma fita de 15 LEDs brancos com potência de 12 V, dispostos na base da caixa. Na Figura 14, é apresentado um esquema do aparato construído.

Figura 14: Aparato construído para captura de imagens em ambiente controlado. A estrutura conta com LEDs localizados na base para iluminação uniforme; uma base de polipropileno no centro, que também atua como superfície difusora, e uma microplaca de 96 poços contendo as soluções a serem analisadas; na parte superior, há um orifício destinado ao posicionamento da câmera do smartphone.



Fonte: O autor.

4.3 Formação dos complexos

Para avaliar e otimizar o sistema de análise de imagem digital construído neste trabalho, foram empregadas análises colorimétricas através da complexação dos íons fosfato (PO_4^{3-}) e ferro(III) em amostras aquosas e de material particulado (MP).

4.3.1 Fosfomolibdênio

O fosfato foi determinado utilizando o método do azul de molibdênio. A formação do complexo envolveu a mistura de 100 μL da solução mista, composta por ácido ascórbico 0,1 mol L^{-1} , ácido sulfúrico 2,8 mol L^{-1} e molibdato de amônio 10,31 mmol L^{-1} na proporção de 1:1:1, com 400 μL de soluções de fosfato (preparadas a partir do sal KH_2PO_4) e 30 μL do padrão de antimônio como catalisador (Colzani et al., 2017). Após 5 minutos, 230 μL do complexo foram transferidos para uma microplaca de poços para a caputra de imagens digitais.

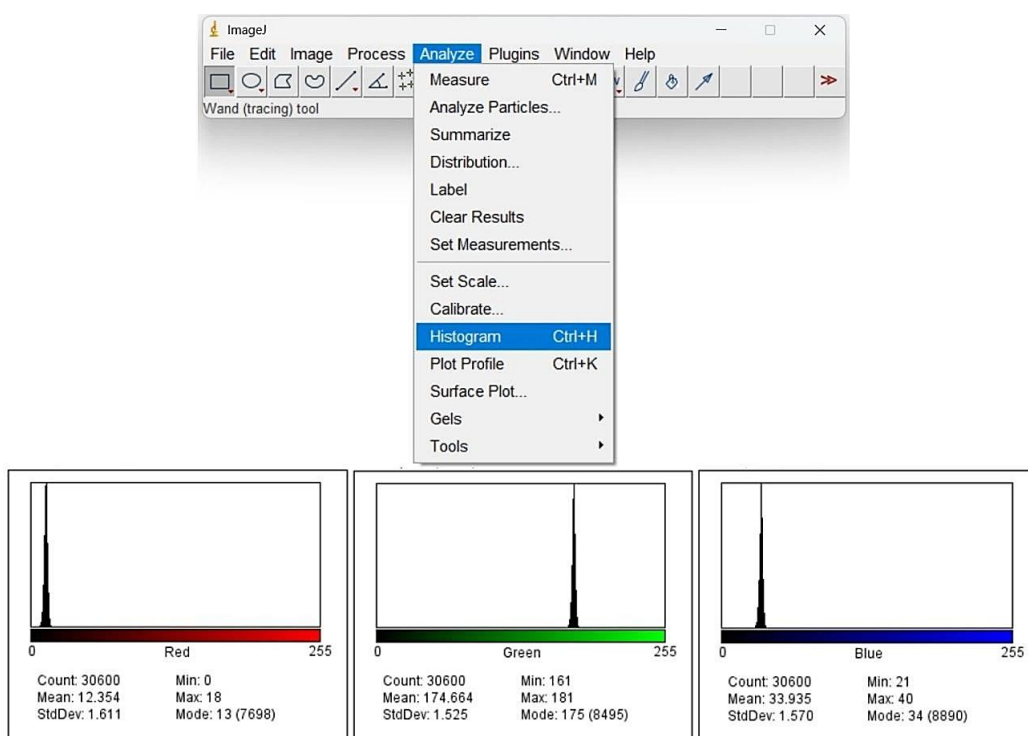
4.3.2 Hexatiocianoferrato(III)

O ferro(III) foi determinado através da formação do complexo $\text{Fe}(\text{SCN})_6]^{3-}$. A formação do complexo foi realizada reagindo 400 μL de soluções de ferro (preparadas através da diluição do padrão de 1000 mg L^{-1}), 400 μL de solução de Tiocianato de Amônio 1 mol L^{-1} e 400 μL de $\text{HCl } 1 \text{ mol L}^{-1}$. Para a análise, uma alíquota de 230 μL do produto reacional foi transferida imediatamente para uma microplaca de poços e imagens digitais foram capturadas.

4.4 Determinação

As imagens foram capturadas através de um smartphone Samsung Galaxy S22 Ultra utilizando a câmera principal, com resolução de 108 mega pixels (MP) com tamanho de $1/1,33''$, abertura de $f/1.8$ e campo de visão de 89° (Samsung, 2024). As imagens digitais capturadas dos complexos foram transferidas para um computador via cabo USB. Para a obtenção e tratamento dos dados RGB contidos nas imagens, foi utilizado o software de processamento de imagens ImageJ versão 1.54g. No software, as regiões de interesse (ROI) de cada solução foram selecionadas manualmente e seus histogramas obtidos para análise, através do comando “Ctrl + H” (Figura 15).

Figura 15: Obtenção dos histogramas dos canais RGB no ImageJ.



Fonte: O autor.

A média da intensidade (*Mean*) dos canais *Red*, *Green*, *Blue* e RGB_M (média aritmética dos canais) foi correlacionada diretamente com a concentração das soluções do complexo (intensidade = resposta) e também transformado os valores em Sinal Analítico (S_A) por meio de tratamento matemático, conforme descrito na Equação 4.

$$S_A = -\log \left(\frac{I_n}{I_{branco}} \right) \quad (4)$$

Na equação 4, S_A representa o sinal analítico, I_n é a intensidade do canal R, G ou B do padrão/amostra, e I_{branco} é a intensidade correspondente ao branco nos mesmos canais (Fiedoruk-Pogrebniak, 2024). Após o tratamento matemático dos dados, curvas de analíticas foram construídas correlacionando a concentração das soluções de complexo com os valores de sinal analítico obtido.

4.5 Otimizações

Parâmetros que influenciam nos resultados das análises foram avaliados no modo univariado.

4.5.1 Aquisição das imagens

Foram analisadas duas distâncias de captura: Configuração 1, com 14 cm entre as soluções e a câmera do smartphone e 8 cm entre as soluções e os LEDs; e Configuração 2, com 9 cm entre as soluções e a câmera e 13 cm entre as soluções e os LEDs. Além disso, avaliou-se a quantidade de LEDs utilizados na iluminação, com imagens capturadas sob a ação de 9, 7, 5, 3, 2 e 1 LEDs. Para cada combinação de distância e quantidade de LEDs, investigou-se o impacto do nível de exposição à luz na qualidade da análise, por meio de duas abordagens distintas. Na primeira, as imagens foram capturadas sem ajustes manuais de exposição, apenas com o foco direcionado às soluções. Na segunda, o nível de exposição foi ajustado manualmente para o valor mínimo permitido pela câmera, clicando na região correspondente às soluções e utilizando o controle deslizante do aplicativo nativo do dispositivo. As configurações que apresentaram melhor desempenho em termos de linearidade e sensibilidade foram selecionadas para as análises subsequentes.

4.5.2 Faixa linear

A faixa de concentração inicialmente avaliada para a determinação do complexo fosfato-molibdênio pentavalente foi de 0,05 a 2,5 mg L⁻¹. Durante as otimizações das condições de captura de imagem, essa faixa foi ampliada para 0,25 a 7,0 mg L⁻¹, sendo posteriormente estendida até 10,0 mg L⁻¹ nas etapas de avaliação da reprodutibilidade com diferentes smartphones e na aplicação em amostras de material particulado.

Para a determinação de ferro(III), foram testadas três faixas distintas de concentração: 0,25 a 1,9 mg L⁻¹, 0,25 a 10,0 mg L⁻¹ e 10,0 a 80,0 mg L⁻¹, visando avaliar o desempenho da metodologia em diferentes níveis de concentração e ampliar sua aplicabilidade analítica.

4.6 Figuras de mérito

4.6.1 Precisão

A precisão intradia e interdia dos métodos desenvolvidos foi avaliada utilizando os critérios e procedimentos indicados pela RDC N°166 da Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA). Foram analisados os sinais analíticos de três concentrações, sendo 0,25; 5,0 e 8,0 mg L⁻¹ para o fosfato e 0,25; 3,0 e 9,0 mg L⁻¹ para o ferro(III). Para cada concentração foram avaliadas três réplicas. Os resultados foram expressos em termos de desvio padrão relativo (DPR).

4.6.2 – Reprodutibilidade

Para avaliar a reprodutibilidade do método proposto, após as otimizações, a metodologia foi aplicada utilizando outros smartphones e os resultados comparados com o dispositivo padrão (Galaxy S22). Para as análises de fosfato, curvas analíticas foram construídas utilizando os smartphones Apple Iphone 11 com um sensor de 12 MP com tamanho de 1/2.55”, abertura de f/1.8 e campo de visão de 120° (Apple, 2024), e um Xiaomi Redmi Note 12S com um sensor de 108 MP com tamanho de 1/1.52”, abertura de f/1.9 e campo de visão de 118° graus (Mi, 2024).

4.6.3 Limite de detecção e quantificação

Os limites de detecção (LD) e limites de quantificação (LQ) foram determinados utilizando as equações 5 e 6 (Anvisa, 2017).

$$LD = \frac{3,3.\sigma_{intercepto}}{Coeficiente\ angular} \quad (5)$$

$$LQ = \frac{10.\sigma_{intercepto}}{Coeficiente\ angular} \quad (6)$$

Nas equações, σ é o desvio padrão do intercepto com o eixo Y.

4.6.4 Exatidão

O teste de recuperação foi realizado para avaliar a exatidão do método de determinação de fosfato. Cinco amostras de água foram coletadas em locais distintos da cidade de Catalão e fortificadas com concentrações de fosfato de 1,0, 4,0 e 8,0 mg L⁻¹. A porcentagem de recuperação foi calculada empregando a equação 7 (Anvisa, 2017).

$$Recuperação = \frac{Concentração\ média\ experimental}{Concentração\ teórica} \times 100 \quad (7)$$

Para avaliar a exatidão do método para determinação de ferro(III), foram analisadas amostras de material particulado (MP_{2,5} e MP₁₀). Os resultados obtidos por meio da análise de imagem digital foram comparados aos obtidos por espectrofotometria de absorção molecular na região do UV-Vis, empregando os testes estatísticos de análise de variância (teste F) e teste T de Student, ambos com nível de significância de 95%.

4.7 Aplicação em amostras reais

O método proposto foi utilizado para realização do monitoramento da qualidade do ar em Catalão-GO, considerando a presença de íons (PO₄³⁻) no material particulado durante as estações do outono e inverno. Para a determinação das concentrações de íons fosfato nas amostras, foram construídas curvas de analíticas do complexo fosfato molibdênio

pentavalente de 0,25 até 8,0 mg L⁻¹, e as concentrações determinadas através da equação da reta.

Os resultados obtidos pela técnica de análise de imagem foram comparados com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular na região do UV-Vis (Biospectro, modelo SP-22). A absorbância do complexo foi lida em 650 nm (Colzani et al., 2017). Os resultados obtidos pela análise de imagem digital e pela espectrofotometria foram avaliados utilizando os testes estatísticos de análise de variância (teste F) e teste T de Student, com nível de significância de 95%.

5 Resultados e Discussões

5.1 Otimização das condições de captura de imagens do complexo fosfato molibdênio pentavalente

A etapa inicial do estudo envolveu a análise do complexo fosfato molibdênio pentavalente, com o objetivo de avaliar a resposta analítica do sistema sob diferentes condições de captura de imagem. As imagens foram capturadas em triplicata utilizando o aparato construído (Figura 16), com máxima iluminação (15 LEDs), 14 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, 8 cm entre as soluções e os LEDs e exposição padrão (sensibilidade do sensor em modo automático). Os dados dos canais RGB (*Red*, *Green* e *Blue*) foram extraídos das imagens digitais utilizando o software de processamento de imagens ImageJ.

Figura 16: Aparato construído para captura de imagens em ambiente controlado. A estrutura conta com LEDs localizados na base para iluminação uniforme; uma base de polipropileno no centro, que também atua como superfície difusora; na parte superior, há um orifício destinado ao posicionamento da câmera do smartphone.



Fonte: O autor.

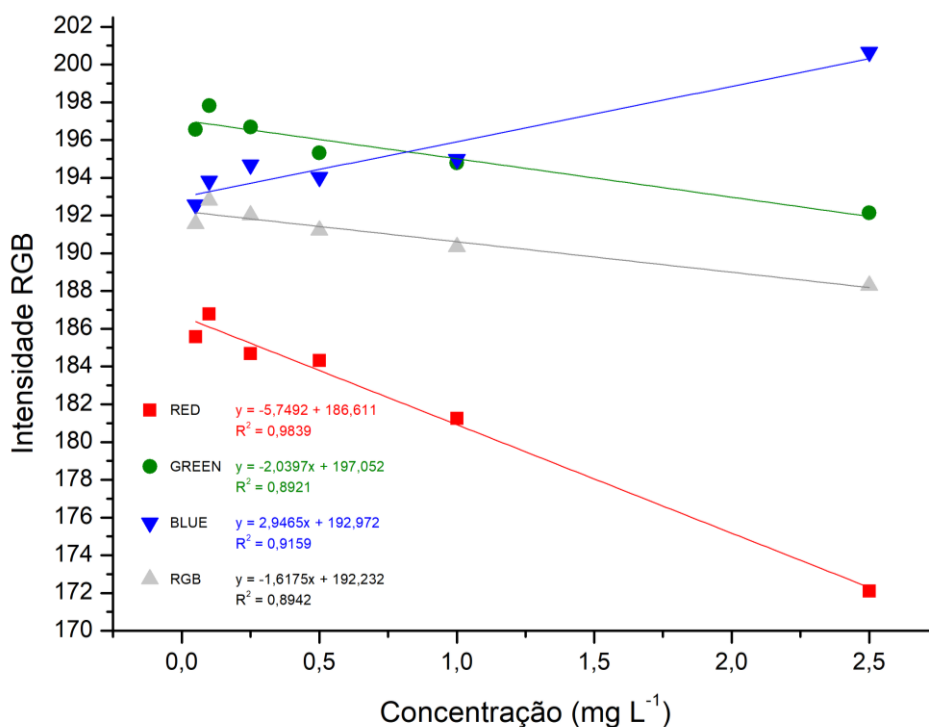
No software ImageJ, foram selecionadas manualmente as regiões de interesse (ROI) e obtidos seus respectivos histogramas. Uma avaliação das regiões de interesse foi realizada em estudos prévios que evidenciaram que a região central apresenta maior homogeneidade de

cores, sendo mais indicada para obtenção dos histogramas. As imagens capturadas utilizaram o sistema sRGB para expressar as cores.

Devido a coloração azul do complexo, o sistema RGB emprega o canal *Blue* como canal principal para expressar a cor visualizada. Isso se reflete em altos valores de intensidade nesse canal, que aumentam discretamente à medida que a concentração de fosfato cresce e a coloração azul se intensifica. Nos canais *Red* e *Green*, o comportamento é oposto: esses canais são utilizados de forma secundária para expressar a cor do complexo, apresentando valores decrescentes de intensidade frente o aumento da concentração de fosfato.

Essa diferença na utilização dos canais pelo sistema RGB resultou em curvas analíticas com tendências opostas, dependendo do canal. Para os canais *Red*, *Green* e para RGB_M (média aritmética dos canais RGB), observou-se uma tendência decrescente quando os valores de intensidade foram utilizados diretamente para a construção das curvas. Por outro lado, o canal *Blue* apresentou tendência crescente, como mostrado na Figura 17.

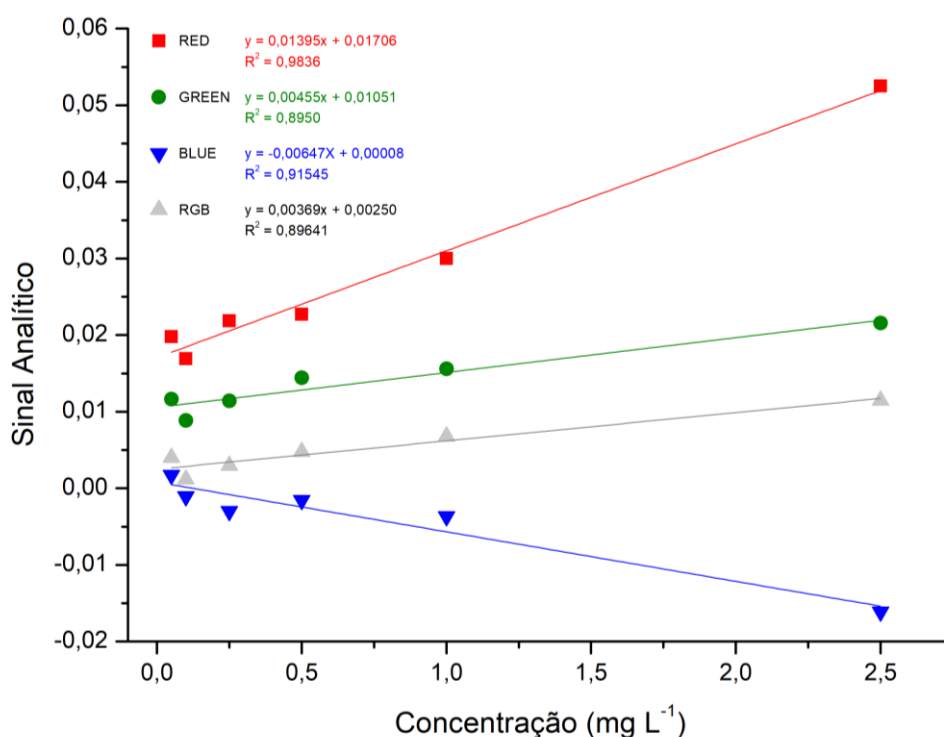
Figura 17: Curvas analíticas construídas utilizando a intensidade dos canais RGB como resposta às variações de concentração do complexo fosfato molibdênio pentavalente (0,05 até 2,5 mg L^{-1}).



Fonte: O autor.

A aplicação do tratamento matemático para conversão dos valores de intensidade em sinal analítico (S_A), utilizando a equação 4, promoveu a inversão das tendências observadas nas curvas. Como consequência, os coeficientes angular e linear também foram alterados. No entanto, como apresentado na Figura 18, os valores de R^2 permaneceram quase idênticos, indicando que o tratamento matemático não proporcionou mudanças significativas na linearidade das curvas.

Figura 18: Curvas analíticas construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações complexo fosfato molibdênio pentavalente (0,1 até 2,5 mg L^{-1}).



Fonte: O autor.

Quando utilizado o S_A na construção das curvas, no canal *Blue* obteve-se um coeficiente de determinação (R^2) igual a 0,9155 com sensibilidade (coeficiente angular) de -0,00647. Enquanto no canal *Green* e média RGB_M , foram obtidas curvas com valores de R^2 de 0,8950 (sensibilidade = 0,00455) e 0,8964 (sensibilidade = 0,00369), respectivamente. No canal *Red* foi determinada a maior linearidade e sensibilidade, com valor de R^2 de 0,9836 e um coeficiente angular de 0,01395.

Em contrapartida, ao utilizar os valores diretos de intensidade RGB, as sensibilidades observadas foram maiores (-5,7492 para o canal *Red*; -2,0397 para o canal *Green*; -2,9465

para o canal *Blue*; -1,6185 para RGB_{total}). No entanto, essas sensibilidades mais elevadas não resultaram em grandes variações práticas na resposta do sistema em função da concentração de fosfato, como evidenciado na Tabela 1.

Tabela 1: Valores de intensidade dos canais RGB e S_A .

$[PO_4^{3-}] \text{ mg L}^{-1}$	Canal <i>Red</i>		Canal <i>Green</i>		Canal <i>Blue</i>		RGB_M	
	Intensidade	S_A	Intensidade	S_A	Intensidade	S_A	Intensidade	S_A
Branco	194,214	-	201,907	-	193,343	-	193,343	-
0,05	185,570	0,0198	196,569	0,0116	192,570	0,0017	191,569	0,0040
0,1	186,793	0,0169	197,830	0,0089	193,826	-0,0011	192,816	0,0012
0,25	184,683	0,0219	196,683	0,0114	194,683	-0,0030	192,016	0,0030
0,5	184,326	0,0227	195,325	0,0144	194,035	-0,0020	191,228	0,0048
1,0	181,256	0,0300	194,798	0,0156	194,984	-0,0040	190,346	0,0068
2,5	172,102	0,0525	192,135	0,0216	200,655	-0,0160	188,297	0,0115

Fonte: O autor.

A baixa variação dos valores de intensidade foi atribuída à intensa iluminação do sistema durante a captura das imagens. Os 15 LEDs utilizados resultaram em imagens excessivamente claras, com valores de cor numericamente próximos. Nas regiões de interesse selecionadas, desde o branco até 2,5 mg L^{-1} de fosfato, as variações de intensidade foram inferiores a 5% nos canais *Green* (201,907 a 192,135) e *Blue* (193,343 a 200,655), enquanto no canal *Red* foram de aproximadamente 12% (194,214 a 172,102).

Quando os altos valores de intensidade RGB foram convertidos em S_A , a magnitude da resposta foi reduzida, diminuindo a correlação entre concentração e sinal, o que resultou em curvas com menor sensibilidade. Além disso, a iluminação excessiva e possivelmente heterogênea pode ter causado desvios na intensidade RGB, afetando também a linearidade do método.

Diante da baixa variação observada nos valores de intensidade RGB e da consequente redução na sensibilidade das curvas analíticas, foram realizados experimentos sob diferentes condições captura de imagem, incluindo variações na posição da microplaca de poços, no

número de LEDs e na exposição do sensor, com o objetivo de aprimorar a sensibilidade e linearidade do método. Foram testadas duas configurações de distância entre os componentes do aparato: na configuração 1, a distância entre as soluções e a câmera do smartphone foi de 14 cm, e entre as soluções e os LEDs, de 8 cm; na configuração 2, essas distâncias foram de 9 cm e 13 cm, respectivamente.

Curvas de calibração foram preparadas com onze soluções de padrão de fosfato, na faixa de 0,1 à 7,0 mg L⁻¹. As imagens do complexo fosfato molibdênio pentavalente foram capturadas em duplicata, nas duas configurações de distância, utilizando 1, 3, 5, 7 e 9 LEDs. Para cada combinação de distância e LEDs, foram registradas imagens com a exposição padrão do dispositivo e com a exposição mínima disponível.

Embora o ajuste manual da velocidade do obturador, da abertura e do valor de ISO permita maior controle sobre a exposição, essa abordagem exige conhecimentos técnicos de fotografia e análises adicionais da influência individual de cada parâmetro. Para simplificar o procedimento, optou-se por uma configuração automática, na qual a exposição foi definida de forma intuitiva por meio do controle deslizante do dispositivo, que ajusta simultaneamente a velocidade, a abertura e o ISO.

A partir da análise das imagens, foram construídas curvas analíticas utilizando tanto a intensidade quanto o sinal analítico. Diferentemente das análises preliminares, em que a conversão de intensidade em S_A não proporcionou mudanças significativas de linearidade, a otimização dos parâmetros de captura resultou em melhorias expressivas, principalmente sob condições de baixa luminosidade. Nessas condições, o uso do S_A proporcionou curvas mais lineares e com maior sensibilidade. Assim, o S_A foi adotado como variável de resposta por apresentar desempenho mais consistente e representativo para o sistema. As Tabelas 2 e 3 apresentam os valores de R^2 e dos coeficientes angulares (sensibilidade) das curvas analíticas construídas a partir do S_A , considerando as duas configurações avaliadas.

As imagens capturadas com menor intensidade de iluminação proporcionaram maior diferenciação de uso dos canais RGB para expressar as cores. O canal *Blue* apresentou menor variação de intensidade em resposta às mudanças na concentração do complexo, resultando em desempenho analítico inferior. Já os canais *Red* e *Green*, assim como a média RGB_M , apresentaram maiores variações de intensidade, refletindo maior sensibilidade às concentrações de fosfato. Embora os resultados obtidos com os canais *Red* e *Green* tenham sido semelhantes, as curvas construídas no canal *Red* apresentaram maiores diferenças de S_A em baixas concentrações, além de melhor sensibilidade analítica.

Tabela 2: Valores de R^2 e coeficiente angular (sensibilidade) das curvas analíticas do complexo fosfato molibdênio pentavalente, construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração (0,1 até 7,0 mg L⁻¹). As imagens digitais foram capturadas sob diferentes condições de distância, quantitativo de LEDs e exposição. Configuração 1 = 14 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, e 8 cm entre as soluções e os LEDs.

CONFIGURAÇÃO 1, EXPOSIÇÃO PADRÃO

LEDs	Canal <i>Red</i>		Canal <i>Green</i>		Canal <i>Blue</i>		RGB _M	
	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade
15	0,9868	0,0171	0,8950	0,0046	0,9155	-0,0065	0,8964	0,0037
9	0,8952	0,0371	0,9629	0,0203	0,2290	0,0031	0,9500	0,0185
7	0,9568	0,0352	0,9639	0,0191	0,3361	0,0029	0,9431	0,0173
5	0,9693	0,0340	0,9666	0,0189	0,2345	0,0023	0,9481	0,0169
3	0,9624	0,0380	0,9603	0,0202	0,2492	0,0029	0,9378	0,0185
2	0,9696	0,0386	0,9489	0,0206	0,1760	0,0022	0,9346	0,0187
1	0,9609	0,0312	0,9539	0,0197	0,5362	0,0044	0,9409	0,0175

CONFIGURAÇÃO 1, EXPOSIÇÃO MÍNIMA

LEDs	Canal <i>Red</i>		Canal <i>Green</i>		Canal <i>Blue</i>		RGB _M	
	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade
9	0,9748	0,0661	0,9645	0,0362	0,4585	0,0052	0,9600	0,0306
7	0,9776	0,0619	0,9704	0,0358	0,3755	0,0047	0,9618	0,0295
5	0,9750	0,0607	0,9663	0,0355	0,2728	0,0045	0,9519	0,0291
3	0,9608	0,0624	0,9384	0,0378	0,4199	0,0071	0,9237	0,0306
2	0,9764	0,0638	0,9494	0,0403	0,3007	0,0083	0,9226	0,0333
1	0,9371	0,0468	0,9552	0,0347	0,5814	0,0069	0,9540	0,0299

Fonte: O autor.

Tabela 3: Valores de R^2 e coeficiente angular (sensibilidade) das curvas analíticas do complexo fosfato molibdênio pentavalente, construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração (0,1 até 7,0 mg L⁻¹). As imagens digitais foram capturadas sob diferentes condições de distância, quantitativo de LEDs e exposição. Configuração 2 = 9 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, e 13 cm entre as soluções e os LEDs.

CONFIGURAÇÃO 2, EXPOSIÇÃO PADRÃO

LEDs	Canal <i>Red</i>		Canal <i>Green</i>		Canal <i>Blue</i>		RGB _M	
	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade
9	0,9476	0,0520	0,9464	0,0313	0,6232	0,0070	0,9397	0,0276
7	0,8879	0,0470	0,9554	0,0270	0,6176	0,0060	0,9487	0,0244
5	0,8860	0,0502	0,9520	0,0318	0,6165	0,0071	0,9453	0,0279
3	0,9892	0,0441	0,9808	0,0264	0,6819	0,0073	0,9747	0,0230
2	0,9828	0,0552	0,9798	0,0312	0,7331	0,0077	0,9781	0,0280
1	0,9709	0,5050	0,9810	0,0321	0,8165	0,0092	0,9827	0,0286

CONFIGURAÇÃO 2, EXPOSIÇÃO MÍNIMA

LEDs	Canal <i>Red</i>		Canal <i>Green</i>		Canal <i>Blue</i>		RGB _M	
	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade	R ²	Sensibilidade
9	0,9809	0,0786	0,9687	0,0490	0,5493	0,0137	0,9538	0,0417
7	0,9876	0,0749	0,9728	0,0469	0,5483	0,0137	0,9669	0,0389
5	0,9520	0,0526	0,9521	0,0318	0,6165	0,0071	0,9453	0,0279
3	0,9908	0,0680	0,9908	0,0471	0,6101	0,0123	0,9902	0,0404
2	0,9932	0,0685	0,9919	0,0517	0,7759	0,0165	0,9910	0,0444
1	0,9842	0,0663	0,9894	0,0465	0,6895	0,0125	0,9901	0,0397

Fonte: O autor.

A análise das Tabelas 2 e 3 revelou diferentes tendências de linearidade e sensibilidade nas curvas analíticas. Como discutido anteriormente, a alta intensidade luminosa do sistema proporcionou altos valores de intensidade RGB e baixos valores de S_A , resultando em curvas com baixas sensibilidades. Com a diminuição da iluminação, as imagens tornaram-se mais escuras, o que levou à redução nos valores de intensidade RGB e ao aumento dos valores de S_A , favorecendo curvas mais sensíveis. No entanto, essa correlação está fortemente condicionada à homogeneidade da iluminação.

Enquanto a intensidade luminosa afeta a imagem como um todo, heterogeneidades na iluminação geram variações locais, com regiões mais claras ou escuras. O impacto dessas regiões na linearidade e sensibilidade do método depende de diversos fatores, incluindo a maneira como a região é iluminada (mais ou menos luz), a cor e concentração da solução, e como o sistema RGB processa os desvios de cor.

Na Tabela 3, as imagens obtidas com 9, 7 e 5 LEDs apresentaram maior heterogeneidade de iluminação devido às posições dos LEDs, resultando em maior dispersão dos sinais RGB e queda na linearidade das curvas. À medida que o número de LEDs foi reduzido, observou-se um aumento na homogeneidade da iluminação e, conseqüentemente, menor dispersão dos valores RGB. As imagens capturadas com 3 e 2 LEDs apresentaram iluminação mais uniforme, com menos regiões saturadas e melhor linearidade dos sinais.

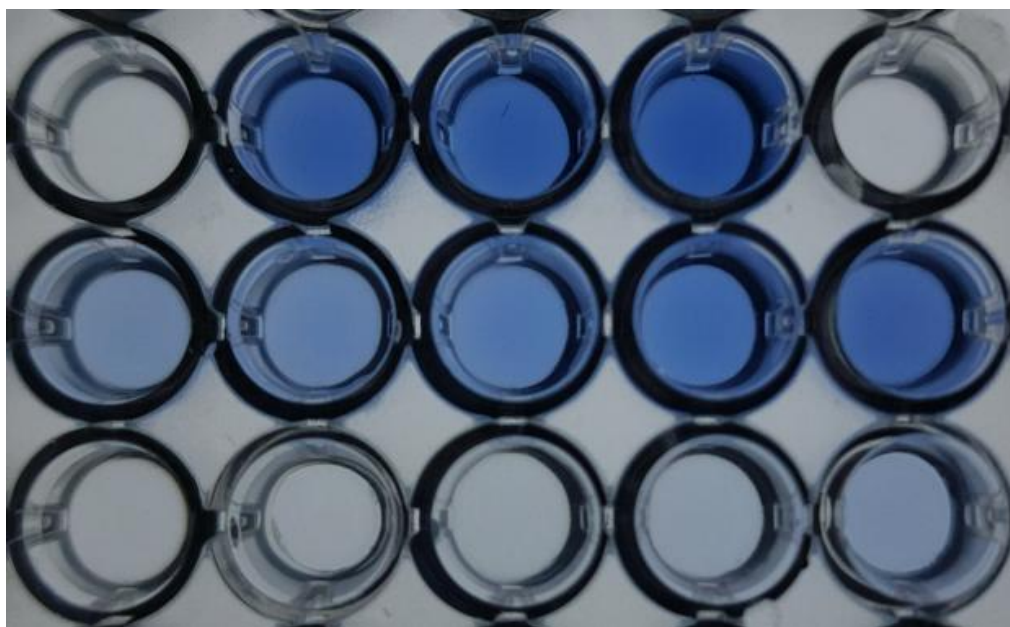
Por outro lado, os dados da Tabela 2 não indicaram melhora significativa na uniformidade da iluminação ao se utilizar 3 ou 2 LEDs, com as curvas analíticas apresentando valores de R^2 semelhantes àquelas construídas com maior número de LEDs. A melhor linearidade observada na Configuração 2 foi atribuída a dois fatores principais: a menor distância da câmera do smartphone e as soluções, que favoreceu a captura de detalhes e reduziu distorções laterais; e a maior distância dos LEDs em relação a base de polipropileno, que contribuiu para uma distribuição luminosa mais difusa e uniforme.

Os LEDs utilizados possuem uma distribuição de intensidade luminosa que não é uniforme, emitindo luz em um padrão angular com maior intensidade diretamente à frente do LED, que diminui à medida que se afasta do centro do feixe (Qin et al., 2010). Ao aumentar a distância entre os LEDs e a base de polipropileno, a luz tem mais espaço para se espalhar e se misturar, promovendo uma distribuição mais homogênea sobre a superfície da microplaca. Além disso, ao afastar base de polipropileno, que atua como uma superfície difusora, a luz que atinge a base se torna mais distribuída e menos concentrada, permitindo uma difusão mais eficaz e resultando em uma iluminação mais uniforme.

Em relação aos níveis de exposição, a condição de exposição mínima resultou em imagens mais escuras, com menores intensidades nos canais RGB na região de interesse, o que favoreceu o aumento da sensibilidade em todas as curvas de calibração. Na Configuração 2, que apresentou maior homogeneidade luminosa, a redução da exposição também promoveu melhorias na linearidade nos canais *Red* e *Green*, independentemente da quantidade de LEDs utilizada.

As condições ideais de captura foram definidas como: 2 LEDs, Configuração 2 (9 cm entre as soluções e a câmera do smartphone, e 13 cm entre as soluções e os LEDs), e exposição mínima. Nessas condições, valores de S_A obtidos a partir das intensidades do canal *Red* foram selecionados como resposta do sistema para as determinações subsequentes. O controle preciso desses parâmetros permitiu reduzir a intensidade da luz refletida, resultando em uma melhora significativa na linearidade e sensibilidade do método. As curvas construídas com o canal *Red* apresentaram um aumento no valor de R^2 , de 0,9836 para 0,9932, e uma melhora de aproximadamente 5 vezes no coeficiente angular, que passou de 0,01395 para 0,0685. A Figura 19 ilustra uma imagem dos complexos capturada nas condições otimizadas.

Figura 19: Imagem do complexo de fosfato molibdênio pentavalente capturada nas condições definidas como ideais: Condições de captura: Configuração 2, exposição mínima, 2 LEDs.



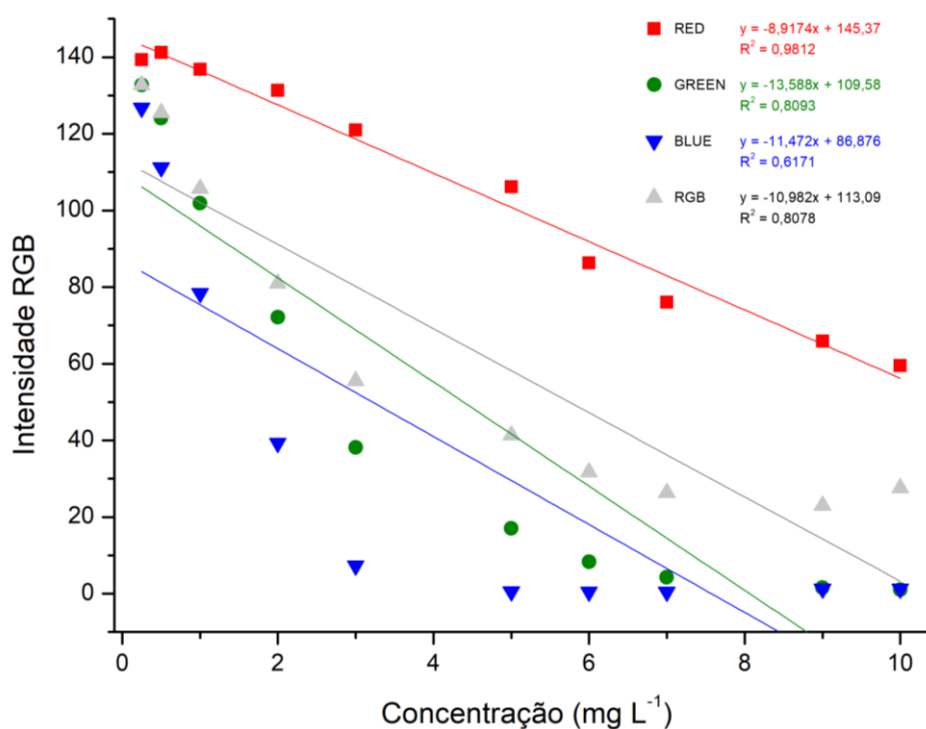
Fonte: O autor.

5.1.2 Otimização das condições de captura de imagens do complexo ferro tiocianato

As condições de captura e a utilização dos dados RGB como resposta foram reavaliadas devido à coloração vermelha intensa do complexo ferro tiocianato, que impacta diretamente a forma como o sistema RGB processa os dados de intensidade. Para isso, as otimizações de captura foram repetidas na faixa de 0,25 à 10,0 mg L⁻¹, avaliando as Configurações 1 e 2, exposições padrão e mínima, e o uso 3 ou 2 LEDs, que apresentaram melhor homogeneidade de iluminação.

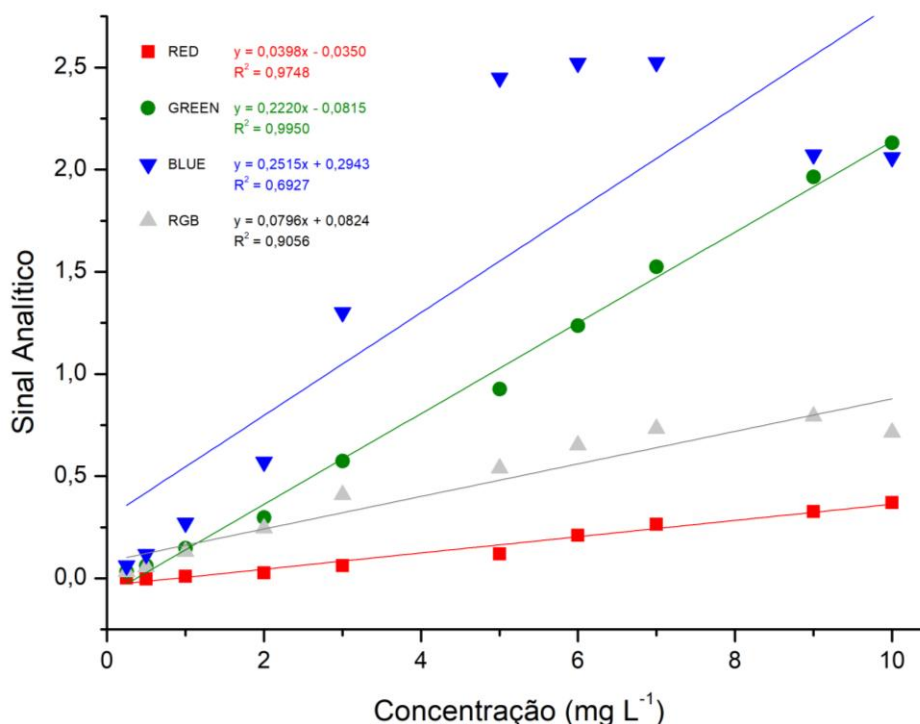
De maneira similar ao observado na avaliação do complexo do fosfato, as imagens capturadas com maior iluminação (3 LEDs e exposição padrão), na configuração 1, resultaram em curvas de calibração com maiores desvios de sinal, além de linearidade e sensibilidade inferiores. A Figura 20 apresenta as curvas analíticas construídas a partir das intensidades RGB de imagens capturadas na configuração 2, com exposição mínima e 2 LEDs. Nas mesmas condições de captura, a Figura 21 exibe as curvas foram obtidas utilizando o sinal analítico (S_A) calculado com base na Equação 4.

Figura 20: Curvas analíticas construídas utilizando a intensidade dos canais RGB, como resposta às variações de concentração do complexo ferro tiocianato (0,25 até 10 mg L⁻¹). Condições de captura: configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.



Fonte: O autor.

Figura 21: Curvas analíticas construídas utilizando o sinal analítico (S_A) dos canais RGB como resposta às variações de concentração do complexo ferro tiocianato (0,25 até 10 mg L⁻¹). Condições de captura: configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.



Fonte: O autor.

A conversão dos dados de intensidade em sinal analítico (S_A) demonstrou novamente uma melhoria significativa nos valores de R^2 , especialmente em condições de menor intensidade luminosa. No canal Green, observou-se a maior variação, resultando na melhor resposta de linearidade, com o R^2 passando de 0,8093 (intensidade = resposta) para 0,9950 (S_A = resposta), além de uma sensibilidade de 0,2223.

Nos canais Red e Blue, assim como na RGB_M, foram observados maiores desvios de sinais, com as curvas de calibração apresentando piores parâmetros analíticos em comparação ao canal Green. Apesar da baixa linearidade da curva no canal Blue ($R^2 = 0,6300$) e altos desvios em concentrações mais elevadas, observou-se uma tendência de linearidade em concentrações até 2,0 mg L⁻¹.

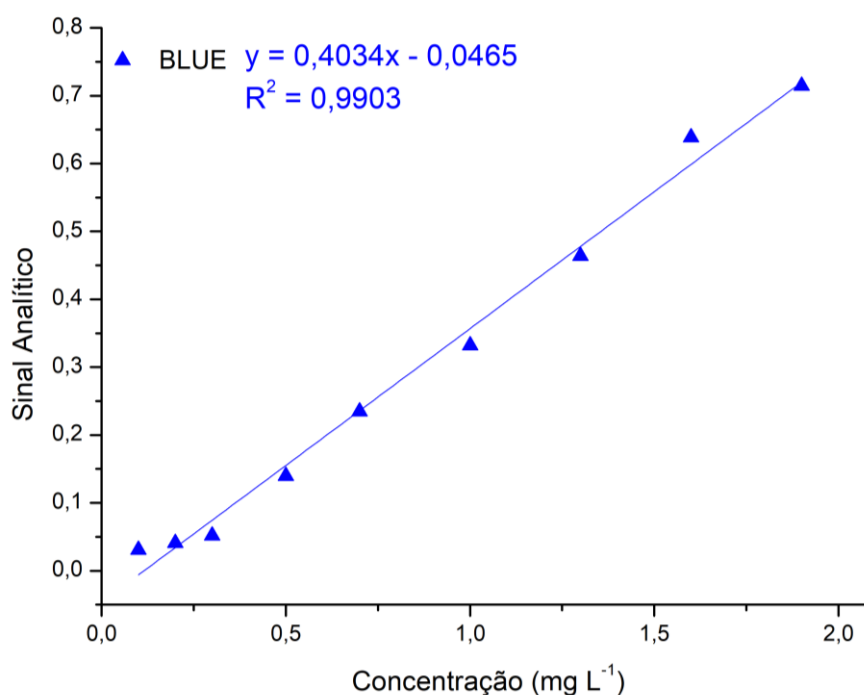
Portanto, as condições ótimas de captura de imagens para o complexo de ferro tiocianato foram definidas como as mesmas do complexo anterior, e as intensidades do canal Green escolhidas para obtenção de S_A . Ao controlar esses parâmetros, observou-se uma melhoria significativa em termos de linearidade e sensibilidade do método.

5.3 Avaliação da influência da faixa de concentração do complexo ferro tiocianato na intensidade dos canais RGB

Considerando os diferentes comportamentos observados dos canais RGB em diferentes concentrações para o complexo de ferro tiocianato, foram conduzidos estudos para explorar outras faixas lineares nos canais *Red* e *Blue*. Para o canal *Blue* foram construídas curvas analíticas na faixa de 0,1 até 1,9 mg L⁻¹, com imagens capturadas nas condições ideais estabelecidas. Para o canal *Red*, as curvas de calibração foram construídas na faixa de 10 até 80 mg L⁻¹, com imagens capturadas nas mesmas condições e com iluminação promovida por 15 LEDs, na configuração 1, e três níveis exposição: mínima, média (padrão) e máxima.

A Figura 22 exibe a curva analítica construída para as concentrações de 0,1 até 1,9 mg L⁻¹ a partir do S_A obtido das intensidades no canal *Blue*. A curva apresentou boa linearidade ($R^2 = 0,9903$) e coeficiente angular de 0,4034. Comparada com a curva no canal *Green*, construída a partir da mesma imagem, o canal *Blue* apresentou maior sensibilidade, com um coeficiente angular aproximadamente 2,1 vezes mais alto e melhor linearidade ($R^2 = 0,9877$ no canal *Green*).

Figura 22: Curva analítica construída no Blue para o complexo de ferro tiocianato, na faixa de concentração de 0,1 até 1,9 mg L⁻¹. Condições de captura: 2 LEDs, configuração 2 e exposição mínima.

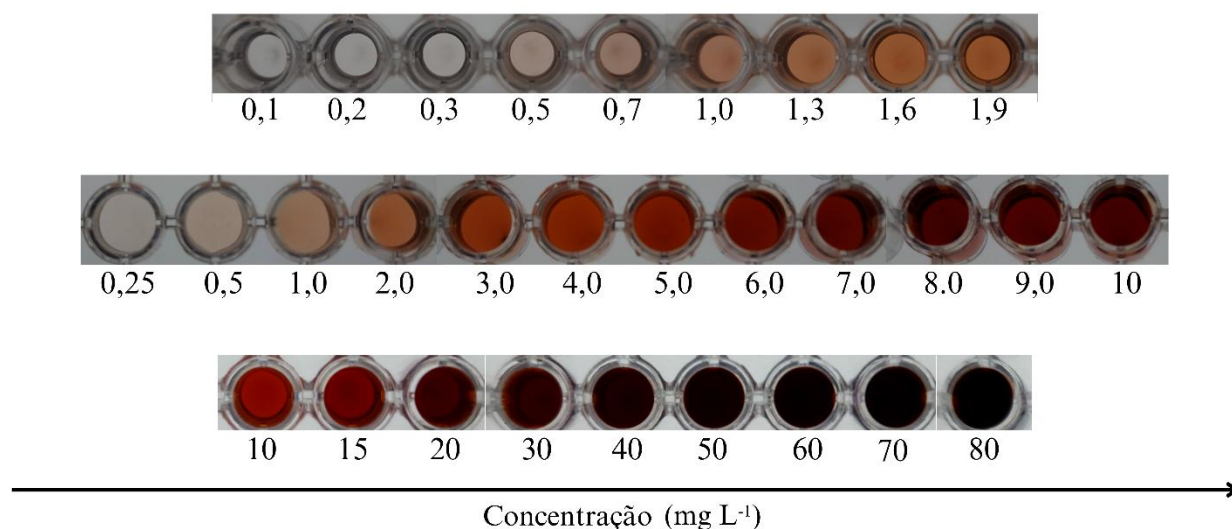


Fonte: O autor.

Na faixa de concentração de 0,1 a 1,9 mg L⁻¹, a intensidade do canal *Red* variou aproximadamente 1,3%, passando de 138,522 para a concentração de 0,1 mg L⁻¹ a 136,744 para a concentração de 1,9 mg L⁻¹. No canal *Green*, ocorreu uma variação aproximada de 48,5% de intensidade entre as concentrações iniciais e finais (139,218 a 71,625), enquanto no canal *Blue* as variações foram mais significativas, com uma redução de aproximadamente 79,3% (140,437 a 29,090).

O melhor desempenho da curva analítica no canal *Blue* foi atribuído à mudança da faixa de concentração e, conseqüentemente, a mudança das cores das soluções. O complexo de ferro tiocianato apresenta um gradiente de coloração próximo a cor laranja na faixa de concentração de 0,1 a 1,9 mg L⁻¹, resultando em distribuições distintas de intensidades RGB, quando comparado a concentrações mais elevadas. A Figura 23 mostra os gradientes de cores apresentados pelo complexo em diferentes faixas de concentrações.

Figura 23: Faixas de concentração do complexo ferro-tiocianato utilizadas para construção das curvas analíticas nos canais RGB. Canal Blue = 0,1 a 1,9 mg L⁻¹; Canal Green = 0,25 a 10 mg L⁻¹; Canal Red = 10 a 80 mg L⁻¹.

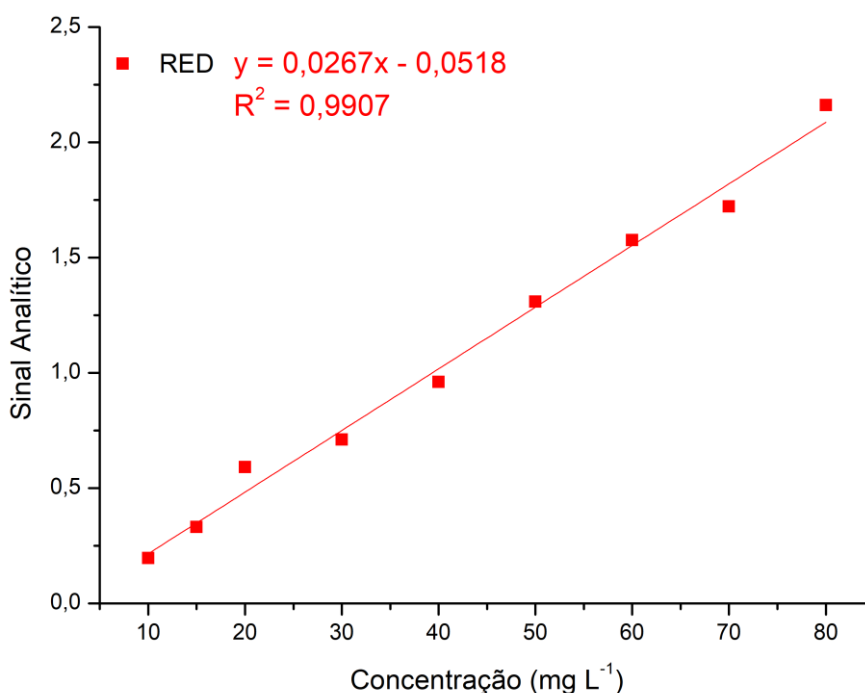


Fonte: O autor.

A Figura 24 apresenta a curva analítica no canal *Red* na faixa de 10,0 à 80,0 mg L⁻¹. Devido à intensa coloração vermelha em altas concentrações de Fe(III), foram estudadas outras condições de captura. No entanto, as imagens capturadas com 15 LEDs, configuração 1 e exposição máxima, apresentaram excesso de brilho, resultando em desempenho inferior. As condições estabelecidas como padrão para a captura das imagens nessa faixa de trabalho foram: 2 LEDs, configuração 2 e exposição padrão.

Para as soluções analisadas, o canal *Red* apresentou maiores variações de intensidade, com valores reduzindo de 127,331 na concentração de 10,0 mg L⁻¹ para 1,379 na concentração de 80,0 mg L⁻¹, representando uma redução de 98,9%. Essa variação resultou em um bom desempenho analítico em termos de linearidade ($R^2 = 0,9907$). No entanto, apesar da variação ser superior à observada no canal *Blue* (79,3%) para a faixa de 0,1 a 1,9 mg L⁻¹, a sensibilidade da curva no canal *Red* (0,0267) foi cerca de 20 vezes menor em comparação com o canal *Blue* na faixa inferior de concentração. Essa diferença de sensibilidade é atribuída às características do sistema RGB e a forma de tratamento dos dados de intensidade.

Figura 24: Curvas de calibração construída no canal Red para o complexo de ferro tiocianato, na faixa de concentração de 10,0 até 80,0 mg L⁻¹. Condições de captura: 2 LEDs, configuração 2 e exposição padrão.



Fonte: O autor.

A Tabela 4 apresenta os valores de S_A para as três faixas lineares de íons Fe(III) nos diferentes canais RGB. Ao analisar o último ponto das curvas no canal *Red* (80,0 mg L⁻¹) e no canal *Green* (10,0 mg L⁻¹), observa-se que, apesar da diferença de 8 vezes em termos de concentração, os valores de S_A são muito próximos (2,1619 e 2,1309 respectivamente),

Tabela 4: Valores de S_A e equações da reta para curvas de calibração do complexo ferro tiocianato construídas em diferentes faixas de trabalho nos canais RGB.

Canal Red		Canal Green		Canal Blue	
[Fe³⁺] mg L⁻¹	S_A	[Fe³⁺] mg L⁻¹	S_A	[Fe³⁺] mg L⁻¹	S_A
10,0	0,1965	0,25	0,0327	0,1	0,0269
15,0	0,3314	0,5	0,0619	0,2	0,0341
20,0	0,5921	1,0	0,1478	0,3	0,0417
30,0	0,7107	2,0	0,2974	0,5	0,1238
40,0	0,9609	3,0	0,5740	0,7	0,2221
50,0	1,3095	4,0	0,7010	1,0	0,2951
60,0	1,5767	5,0	0,9252	1,3	0,4183
70,0	1,7228	6,0	1,2365	1,6	0,5730
80,0	2,1619	7,0	1,5250	1,9	0,6503
-	-	9,0	1,9638	-	-
-	-	10,0	2,1309	-	-
R²	Equação da reta	R²	Equação da reta	R²	Equação da reta
0,9907	$y = 0,0267x - 0,0518$	0,9932	$y = 0,2223x + 0,0928$	0,9903	$y = 0,4034x - 0,0465$

Fonte: O autor.

Ao utilizar a intensidade dos canais RGB como resposta para as curvas de concentrações baixas, como a de 0,1 até 1,9 mg L⁻¹, o sistema proporciona valores de S_A relativamente altos, resultando em coeficientes angulares mais elevados. No entanto, em faixas de concentrações elevadas como 10,0 a 80,0 mg L⁻¹, que representam um aumento de até 42 vezes nas concentrações, são obtidos valores de resposta (S_A) com magnitude semelhante às concentrações mais baixas. Isso ocorre porque as intensidades dos canais RGB variam dentro de uma faixa fixa de 0 a 255, limitando o alcance do S_A mesmo para concentrações maiores. Assim, ao trabalhar com faixas de concentrações mais elevadas, a magnitude do eixo x (concentração) aumenta, enquanto os valores no eixo y (S_A) permanecem na mesma ordem de magnitude devido às características de resposta do sistema RGB e o tratamento matemático (equação 4) empregado.

O coeficiente angular é determinado pela correlação entre as variáveis do eixo x e y, quando essa correlação diminui, observa-se um decaimento na sensibilidade, que é

predominantemente numérica (Bussab; Morettin, 2017). Embora o uso das intensidades como resposta para o sistema aumente essa relação e proporcionar valores mais elevados de coeficiente angular, seu uso não é viável devido à baixa linearidade observada ($R^2 = 0,7248$), o que compromete a exatidão das determinações. Para melhorar o valor do coeficiente angular, podem ser explorados métodos alternativos de tratamento de dados, como o uso de outras equações ou de métodos estatísticos (Fiedoruk-Pogrebniak, 2024).

Dependendo da metodologia empregada, etapas de preparo de amostras podem ser necessárias para garantir condições instrumentais de detecção. Essas são etapas críticas em um processo de análise e necessitam do emprego de tempo e reagentes, além de serem fonte de erros experimentais (Viana; Menegário; Fostier, 2021). Todas as curvas, nos diferentes canais, foram construídas a partir de imagens capturadas em condições iguais de distância e iluminação, com alteração apenas na sensibilidade de exposição do sensor para a análise na faixa de 10,0 até 80,0 mg L⁻¹.

A possibilidade de empregar três faixas de trabalho distintas reduz a necessidade de etapas de diluição e pré-concentração nas análises, facilitando a determinação de amplas amostras com concentrações distintas. Além disso, minimiza a manipulação na amostra e reduz erros experimentais, tornando as análises mais rápidas e consequentemente aumentando a frequência analítica do método.

5.4 Comparativo de determinações utilizando diferentes smartphones como detectores na determinação do complexo fosfato molibdênio pentavalente

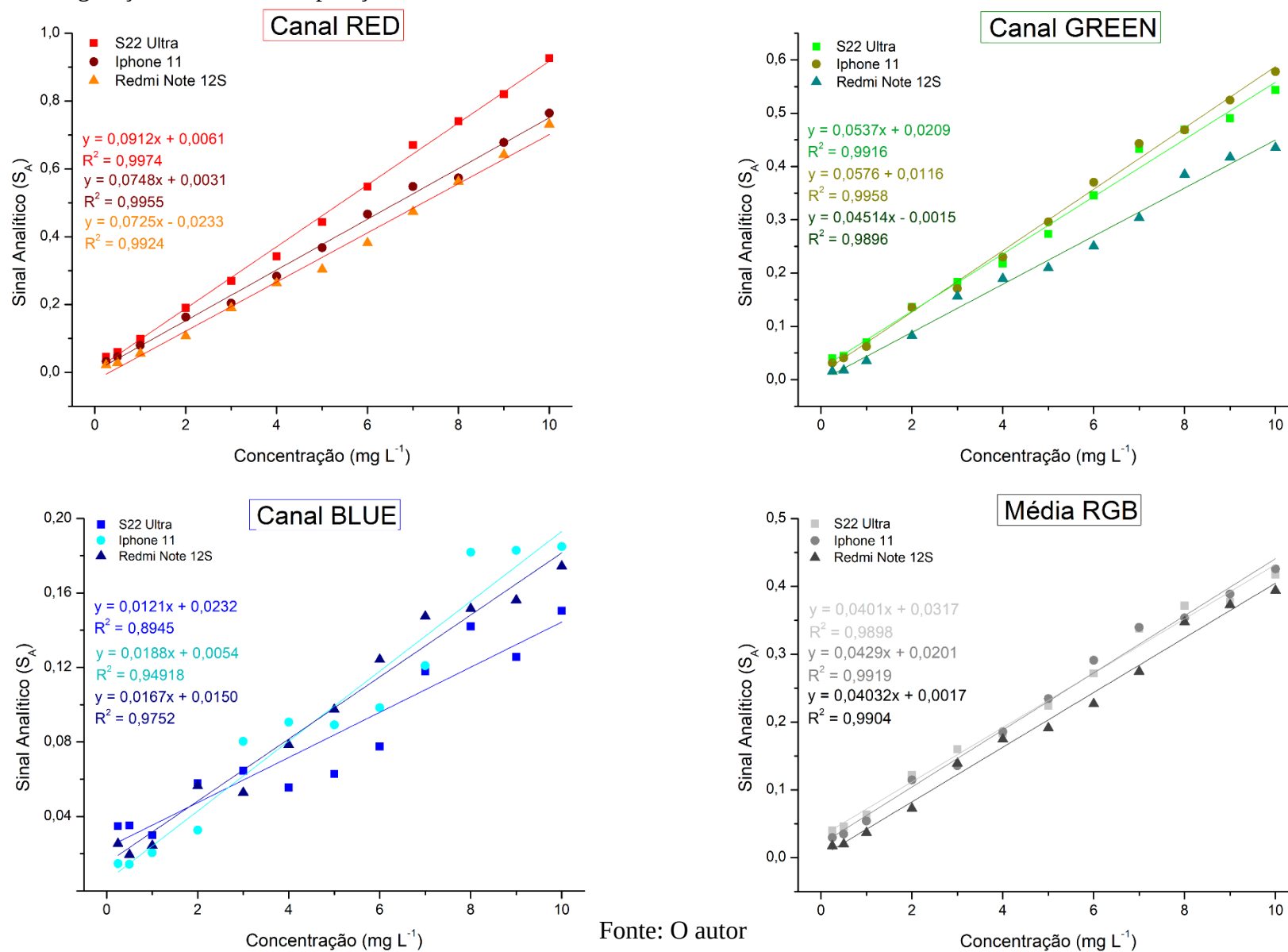
As condições definidas como padrões de captura de imagem, determinadas através dos resultados das otimizações, estão diretamente relacionados com o emprego do smartphone Samsung Galaxy S22 Ultra como detector. Para avaliar a influência do smartphone na obtenção de sinais analíticos e verificar a reprodutibilidade do método proposto, foram construídas curvas de calibração utilizando outros smartphones.

Foram preparadas soluções de fosfato nas concentrações de 0,25 até 10,0 mg L⁻¹ e construídas curvas de calibração a partir de imagens capturadas nas condições padrões. Além do smartphone utilizado para o desenvolvimento do método (Samsung Galaxy S22 Ultra), foram utilizados outros dois smartphones para a captura das imagens digitais: o modelo Iphone 11, da marca Apple, e o modelo Redmi Note 12S, da marca Xiaomi.

Na Figura 25, são apresentadas as curvas analíticas construídas nos canais *Red*, *Green*, *Blue* e média RGB (RGB_M), a partir das imagens capturadas utilizando os diferentes modelos

de smartphones. Apesar de não terem sido realizadas otimizações específicas para a captura das imagens utilizando esses dispositivos, as curvas apresentaram desempenho analítico semelhante, com valores de R^2 e coeficiente angular próximos aos valores das curvas construídas utilizando o Samsung Galaxy S22 Ultra.

Figura 25: Curvas analíticas construída nos canais *Red*, *Green*, *Blue* e média RGB (RGB_M) para o complexo de fosfato, na faixa de concentração de 0,25 até 10,0 mg L⁻¹ utilizando imagens capturadas por três smartphones: Galaxy S22 Ultra, Iphone 11, Redmi Note 12S. Condições de captura: Configuração 2, 2 LEDs e exposição mínima.



Fonte: O autor

As curvas construídas nos canais *Red* e *Green*, além do RGB_M , apresentaram linearidade próximas, com valores de coeficiente angular maiores no canal *Red*. Utilizando os três smartphones, no canal *Red*, obtiveram-se valores de R^2 de: 0,9974 (Galaxy S22 Ultra), 0,9955 (Iphone 11) e 0,9924 (Redmi Note 12S). O valor do coeficiente angular da curva construída utilizando o Galaxy S22 Ultra foi de 0,0912, enquanto para o Iphone 11 foi de 0,0748 e 0,0725 para o Redmi Note 12S. Portanto, assim como discutido na secção 5.1, o canal *Red* foi o mais adequado para determinações do complexo.

Por outro lado, no canal *Blue*, os valores de S_A apresentaram maior variação entre os dispositivos, resultando em curvas de calibração com dispersões distintas em vários pontos. Essas diferenças estão diretamente relacionadas à cor do complexo e às características específicas de cada smartphone. Como o sistema RGB utiliza o canal *Blue* como principal para representar a cor do complexo, algoritmos específicos de cada smartphone – que ajustam parâmetros como brilho, contraste e saturação, além de realizarem compressões automáticas dos dados de cor (Soares; Fernandes; Rocha, 2023; Szeliski, 2011) – proporcionam variações mais acentuadas de intensidade neste canal.

Os valores de R^2 próximos, mesmo empregando condições não otimizadas para os dispositivos, evidenciaram que uma iluminação homogênea é o parâmetro mais importante para linearidade na análise de imagem digital. Por outro lado, os valores de coeficiente angular semelhantes, obtidos utilizando os smartphones Iphone 11 e o Redmi Note 12S como detectores, demonstram que a sensibilidade é fortemente influenciada pela intensidade da iluminação. Esses achados corroboram com a discussão das otimizações apresentadas na secção 5.1 e 5.2 e estão de acordo com a literatura, que destaca a importância desses parâmetros na análise de imagem digital (Capitán-Vallvey et al., 2015; Di Nonno; Ulber, 2021)

Além disso, os resultados demonstraram que o método apresenta boa reprodutibilidade quando diferentes smartphones são utilizados, mesmo sem otimizações específicas para cada dispositivo. Outro parâmetro relevante é a robustez do método, evidenciada pela semelhança nas linearidades das curvas analíticas, mesmo diante de variações nos sensores, algoritmos internos de processamento de imagem e características ópticas dos diferentes dispositivos. Esse desempenho sugere que o método pode ser aplicado de forma eficaz com diferentes modelos de smartphones, tornando-o acessível e prático para diferentes usuários e ambientes de trabalho, sendo especialmente útil em aplicações com menor controle instrumental, como análises em campo ou em laboratórios com recursos limitados. Além disso, dependendo da

necessidade da análise, os estudos realizados anteriormente podem ser empregados para a otimização do método utilizando outros smartphones.

5.5 Validação do método

A Resolução da Diretoria Colegiada (RDC) é uma normativa emitida pela Agência Nacional de Vigilância Sanitária (ANVISA) que estabelece requisitos e procedimentos para garantir a qualidade e a segurança de produtos e métodos analíticos. A avaliação da precisão, exatidão, limite de detecção (LD) e limite de quantificação (LQ) do método desenvolvido foi realizada utilizando os critérios e procedimentos indicados pela RDC N°166 da ANVISA (Anvisa, 2017).

Para avaliação da precisão, exatidão e cálculo dos limites de detecção e quantificação, foram preparadas soluções de padrão de ferro e de fosfato na faixa de 0,1 até 10 mg L⁻¹. As imagens digitais foram capturadas nas condições definidas como padrões, utilizando o smartphone Samsung Galaxy S22 Ultra. As intensidades RGB foram avaliadas no canal *Red* para o complexo fosfato molibdênio, enquanto para o complexo de ferro tiocianato a intensidade foi avaliada no canal *Green*.

5.5.1 Precisão

Foram analisados os sinais analíticos de três réplicas em três níveis de concentração para a avaliação da precisão intradiária, e outras três réplicas, em dias diferentes, para a precisão interdia. Os resultados, expressos em termos de desvio padrão relativo (DPR), estão apresentados na Tabela 5.

Para a determinação de fosfato, as concentrações avaliadas foram 0,25; 5,0 e 8,0 mg L⁻¹, enquanto para ferro(III), foram analisadas as concentrações de 0,25; 3,0 e 9,0 mg L⁻¹. Os valores obtidos de DPR intradia e interdia encontram-se dentro da faixa permitida pela ANVISA, indicando que o método apresenta boa precisão (Anvisa, 2017).

Tabela 5: Valores de desvio padrão relativo (DRP) para a avaliação da precisão intradiária e interdiária na determinação de fosfato e ferro(III) em diferentes concentrações.

Analito	Concentração (mg L ⁻¹)	Intradia (%)	Interdia (%)
Fosfato	0,25	4,9	6,5
	5,0	3,7	6,1
	8,0	2,1	4,5
Ferro(III)	0,25	5,7	6,2
	3,0	5,2	5,5
	9,0	1,6	2,2

Fonte: O autor

5.5.2 Limite de detecção e quantificação

O limite de detecção (LD) é definido como a menor concentração detectável do analito, e o limite de quantificação (LQ) é a menor concentração quantificada, ambos devendo ser diferenciados dos ruídos (Commitee, 1987). Normalmente esses valores são calculados a partir de equações relacionando o desvio padrão do branco e a inclinação de curvas analíticas. No entanto, no caso do sinal analítico, não há um valor para o branco, já que ele é obtido pela divisão das intensidades do branco nos canais RGB. Assim, neste trabalho, esses parâmetros foram calculados a partir das equações 5 e 6, que utilizam o desvio padrão do intercepto com o eixo Y em substituição ao desvio padrão do branco (Anvisa, 2017).

Para as determinações, foram construídas 3 curvas de calibração na faixa de 0,1 – 10 mg L⁻¹, no canal *Red* para o complexo de fosfato molibdênio pentavalente e no canal *Green* para o complexo de ferro tiocianato. A partir das equações, o limite de detecção para a determinação de fosfato foi calculado como 0,22 mg L⁻¹, e para a ferro, como 0,18 mg L⁻¹. Já os limites de quantificação foram de 0,68 e 0,54 mg L⁻¹, respectivamente. Essa abordagem matemática visa quantificar de forma rigorosa a variabilidade do sinal e a relação linear da resposta do analito. No entanto, como discutido neste estudo, durante a avaliação do uso da intensidade RGB e do S_A, e corroborado por Fiedoruk-Pogrebniak (2024), que avaliou diferentes formas de tratamentos matemáticos dos dados RGB, a magnitude dos coeficientes angulares das curvas analíticas pode variar em várias ordens de grandeza. Dependendo da

abordagem matemática usada, essa variabilidade pode resultar em valores de LD e LQ que não refletem a realidade experimental (Fiedoruk-Pogrebniak, 2024).

Portanto, além do cálculo baseado no S_A , os valores de LD e LQ também foram determinados pelo método visual. Esse método consiste na observação direta dos sinais obtidos, com base na interpretação visual dos resultados. Na análise das intensidades nos canais estabelecidos como padrão para os complexos, determinou-se que os menores sinais distinguíveis de concentração em relação ao branco analítico foram os mesmos para ambos os complexos. Assim, os valores de LD foram definidos como $0,1 \text{ mg L}^{-1}$. Já o LQ, calculado como três vezes o LD, foi definido como $0,3 \text{ mg L}^{-1}$ para ambos os íons.

As figuras de mérito determinadas neste trabalho são próximas às reportadas na literatura utilizando diferentes métodos de determinação. Comparações entre a faixa linear, R^2 e LD para diferentes métodos de determinação de fosfato é apresentada na Tabela 5, enquanto a Tabela 6 compara esses valores para métodos de determinação de ferro. Embora experimentalmente os limites de detecção e quantificação determinados pelo método visual sejam inferiores aos calculados pelas equações 6 e 7, eles ainda representam estimativas subjetivas, baseadas na mínima diferença visível entre o analito e o branco. Para efeito de comparação nas tabelas, foram utilizados os valores obtidos pelas equações, mesmo que, experimentalmente o método proporcione determinações mais sensíveis.

Tabela 6: Comparação de faixa linear, R^2 e limite de detecção em métodos para determinação de fosfato.

Método	Amostras	Faixa linear (mg L ⁻¹)	R^2	LD (mg L ⁻¹)	Ref.
Análise de imagem digital utilizando Smartphone	Aquosas e Material Particulado	0,25 – 10,0	0,9973	0,22	Este trabalho
Análise de imagem digital utilizando Smartphone	Colírio	0,47 – 2,8	0,9962	0,17	(Berasarte et al., 2021)
Análise de imagem digital utilizando Smartphone com pré-concentração	Aquosas	0,0 – 0,48	0,9921	0,018	(Pan et al., 2022)
Análise colorimétrica utilizando tira de imersão e scanner de mesa	Aquosas	-	0,9920	0,13	(Heidari-Bafroui et al., 2021)
Análise de fluxo multicomutado baseada em fluorescência	Soro humano	1,1 – 5,7	0,9960	0,34	(Fiedoruk-Pogrebniak; Koncki, 2015)
Coloumetria de fluxo	Aquosas	0,14 – 5,2	-	0,032	(Manová; Beinrohr, 2020)
Análise em fluxo com determinação espectrofotométrica	Aquosas	0,2 – 5,0	0,9989	0,054	(Kozak et al., 2015)
Sensor eletroquímico	Aquosas	0,9 – 9,5.10 ³	0,9987	0,18	(Li et al., 2022B)
Cromatografia de íons	Alimento	-	0,9994	0,01 – 0,91	(Song et al., 2020)

Fonte: O autor.

Na tabela 6, observa-se que os métodos de análise de imagem digital utilizando smartphones possuem faixas lineares, valores de R^2 e limites de detecção próximos em relação aos outros métodos listados. No entanto, existem algumas diferenças notáveis entre eles. Por exemplo, o método desenvolvido neste trabalho, aplicado a amostras aquosas e material particulado, abrange uma faixa linear de 0,25 a 10,0 mg L⁻¹, com um LD de 0,22 mg L⁻¹ e R^2 de 0,9973, o que representa uma ampla aplicabilidade.

Em comparação, o método de Berasarte et al. (2021), que também utiliza análise de imagem digital, apresenta um LD ligeiramente melhor (0,17 mg L⁻¹), mas sua faixa linear é mais estreita (0,47 – 2,8 mg L⁻¹), sendo mais indicado para concentrações menores. O método de Pan et al. (2022), que utiliza pré-concentração, alcança o menor LD (0,018 mg L⁻¹) entre os métodos de imagem digital. Contudo, o uso de pré-concentração pode aumentar a

complexidade e o tempo de análise, além de limitar a sua aplicação em concentrações mais altas (faixa linear de 0,0 – 0,48 mg L⁻¹).

O método de Heidari-Bafroui et al. (2021), que utiliza tiras de imersão e scanner, apresenta um LD inferior (0,13 mg L⁻¹), mas a ausência de especificação da faixa linear limita a comparação direta de sua aplicabilidade. Já métodos como o baseado em cromatografia de íons (Song et al., 2020) ou espectrofotometria por análise de fluxo (Kozak et al., 2015) apresentam LDs muito baixos (0,01 – 0,91 mg L⁻¹ e 0,10 mg L⁻¹, respectivamente), mas demandam equipamentos especializados e maior infraestrutura.

Tabela 7: Comparação de faixa linear, R² e limite de detecção em métodos para determinação de ferro.

Método	Amostras	Faixa linear (mg L ⁻¹)	R ²	LD (mg L ⁻¹)	Ref.
Análise de imagem digital utilizando Smartphone	Aquosas e Material Particulado	0,1 – 1,9; 0,25 – 10,0 10,0 – 80,0	0,9938	0,18	Este trabalho
Análise de imagem digital utilizando Smartphone	Bioetanol	0,5 – 10,0	0,9980	0,10	(João et al., 2019)
Análise de imagem digital utilizando Smartphone	Amostras aquosas	0,05 – 2,0	0,9985	0,03	(Meelapsom et al., 2022)
Sensor eletroquímico	Vinho	-	-	0,87	(Norocel; Gutt, 2018)
Detector fotométrico	Medicamentos	1,0 – 30,0	0,9990	0,50	(Koronkiewicz, 2021)
Síntese de CQDs e determinação por fluorescência	Medicamentos	1,5 – 5,6	0,9941	0,46	(Yu et al., 2023)
Síntese de SQDs e determinação por absorvância/fluorescência	Alimentos	0,14 – 3,1	0,9990	0,08	(Lu et al., 2022)
Espectrofotometria de injeção sequencial	Amostras aquosas	1,0 – 8,0	0,9963	0,05	(Ganranoo; Chokchaisiri; Grudpan, 2019)
Síntese de nanoglomerado e determinação por fluorescência	Aquosas, sangue, suplemento	0,56 – 55,8	0,9963	0,17	(Kardar; Shemirani; Zadnardi, 2020)

Fonte: O autor.

Na tabela 7, o método desenvolvido neste trabalho demonstra flexibilidade, sendo capaz de operar em três faixas lineares distintas: 0,1 – 1,9 mg L⁻¹, 0,25 – 10,0 mg L⁻¹ e 10,0 – 80,0 mg L⁻¹, com um LD de 0,18 mg L⁻¹ e um R² de 0,9938. Essa ampla faixa linear permite

análises em diferentes cenários sem a necessidade de etapas de pré-concentração, o que representa uma vantagem importante para a sua aplicabilidade prática em análises de rotina.

Em comparação, o método de Meelapsom et al. (2022) apresenta o menor LD entre os métodos de imagem digital para ferro ($0,03 \text{ mg L}^{-1}$), mas sua faixa linear mais estreita ($0,05\text{--}2,0 \text{ mg L}^{-1}$) pode limitar sua aplicação em amostras com concentrações mais elevadas. O método de João et al. (2019), com LD de $0,10 \text{ mg L}^{-1}$ e faixa linear de $0,5\text{--}10,0 \text{ mg L}^{-1}$, é comparável à segunda faixa de trabalho do método proposto, mas não oferece a mesma flexibilidade em termos de concentração. Outros métodos baseados em nanomateriais, como os descritos por Lu et al. (2022) e Kardar et al. (2020), apresentam LDs baixos e alta sensibilidade, mas envolvem etapas de síntese complexas e requerem maior infraestrutura, dificultando seu emprego em cenários de menor disponibilidade de recursos.

De forma geral, o método desenvolvido neste trabalho apresenta boa flexibilidade, tanto para determinações de íons fosfato e ferro(III). A possibilidade de operar em amplas faixas lineares sem a necessidade de pré-concentração ou instrumentação avançada é uma de suas principais vantagens, especialmente em análises de rotina e em locais com infraestrutura limitada. Além disso, o método demonstrou boa precisão interdia e intradia, garantindo consistência nos resultados. Embora o LD não seja o mais baixo em comparação com os métodos mais sofisticados, ele é competitivo e uma opção viável para a maioria das aplicações práticas em análises aquosas e de material particulado.

Além disso, as principais vantagens do método proposto estão em sua sustentabilidade, abrangendo aspectos ecológicos, econômicos e sociais. A simplicidade operacional, associada à redução no uso de reagentes, menor geração de resíduos e utilização de dispositivos acessíveis como smartphones, reforça seu potencial ecológico e econômico. A seção 5.7 explora esses fatores em mais detalhes, discutindo também os impactos sociais relacionados à acessibilidade e à democratização da análise química.

5.5.3 Exatidão

Para avaliar a exatidão do método para determinações de íons fosfato, cinco amostras de água foram coletadas em locais distintos da cidade de Catalão-GO e fortificadas com concentrações de fosfato de 1,0; 4,0 e $8,0 \text{ mg L}^{-1}$. Foram obtidas recuperações de 88,5% a 107% nas amostras. Os valores apresentados na Tabela 8 demonstram que a metodologia proposta está dentro da faixa aceitável de 80 – 120% (Anvisa, 2017), além de evidenciar que o efeito matriz não causa problemas no método proposto.

Tabela 8: Teste de recuperação de fosfato em amostras aquosas.

	Amostra 1	Amostra 2	Amostra 3	Amostra 4	Amostra 5
Sem adição de PO_4^{3-}	< LD	< LD	< LD	< LD	< LD
Adição de $1,0 \text{ mg L}^{-1}$	0,92	0,93	1,1	0,95	1,0
Média recuperada (%)	91,9	93,1	106,0	94,8	103,0
Adição de $4,0 \text{ mg L}^{-1}$	3,7	3,7	3,9	3,5	4,2
Média recuperada (%)	92,6	92,5	97,1	88,5	105,8
Adição de $8,0 \text{ mg L}^{-1}$	7,2	7,3	8,7	7,6	8,0
Média recuperada (%)	90,5	91,8	107,0	94,9	100,3

Fonte: O autor.

Para avaliar a exatidão do método para determinação de íons Fe^{3+} , foram realizadas determinações em amostras de material particulado (MP_{10}) coletadas nas dependências da Universidade Federal de Catalão (UFCAT) e no Centro da cidade de Catalão – GO. As concentrações de íons Fe^{3+} obtidas utilizando o método proposto foram comparadas com resultados obtidos utilizando a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 536 nm.

As concentrações determinadas utilizando ambas as técnicas são apresentadas na Tabela 9, evidenciando que as duas metodologias encontraram concentrações de íons Fe^{3+} semelhantes nas amostras de material particulado.

Tabela 9: Concentrações de íons Fe(III) determinadas em amostras de material particulado utilizando as técnicas de Espectrofotometria de Absorção Molecular UV-VIS e Análise por Imagens Digitais.

Amostra	Análise por Imagem (mg L ⁻¹)	UV-Vis (mg L ⁻¹)
02/04/23 - Centro	1,369	1,045
02/04/2023 - UFCAT	1,043	1,326
26/04/2023 - UFCAT	1,222	1,102
26/06/2023 - Centro	1,082	1,249

Fonte: O autor

Para avaliar se as respostas obtidas por ambos os métodos são estaticamente iguais, em termos de variância e média de resultados, foi aplicada a análise de variância (teste F) e teste T de Student, com nível de significância de 95%. Os resultados dos testes estatísticos são apresentados na tabela 10.

Tabela 10: Resultados para os Teste T e Teste F aplicados para avaliação estatística do método desenvolvido para determinação de ferro com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 536 nm.

Teste F				Teste T			
F _{calculado}	F _{tabelado}	Valor-p	α	T _{calculado}	T _{tabelado}	Valor-p	α
1,307	9,27	0,415	0,05	-0,015	2,45	0,988	0,05

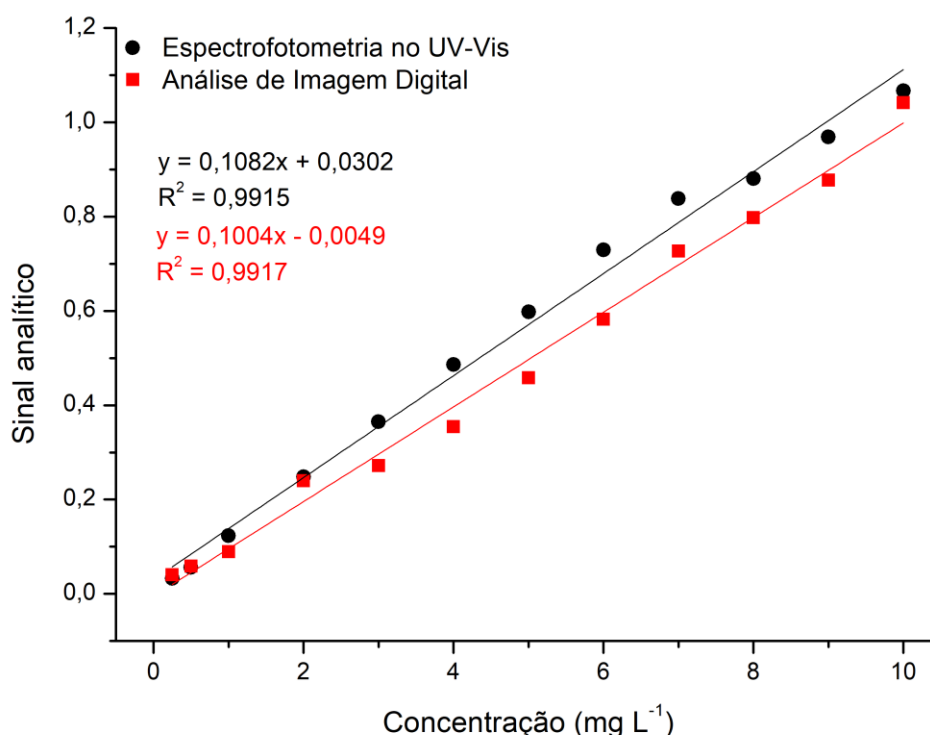
Fonte: O autor.

Através da análise de variância (Teste F), foi comprovado que os resultados obtidos na análise por processamento de imagens digitais apresentam variabilidade semelhantes aos obtidos na análise por espectrofotometria, uma vez que valor de F_{tabelado} é maior que F_{calculado}. No teste T, verificou-se que as médias dos dois conjuntos de dados não possuem diferenças significativas, pois o T_{calculado} é menor que o T_{tabelado}, sendo muito próximo de zero, o que indica uma alta concordância entre as técnicas de medição. Além disso, os valores de valor-p para ambos os testes são maiores que o nível de significância (α), indicando que a hipótese nula de igualdade das variâncias e das médias é aceita. Portanto, os resultados sugerem equivalência em termos de variância e média entre as duas técnicas de análise empregadas (Kaufmann; Schering, 2007).

5.6 Aplicação do método para determinação de íons fosfato em material particulado

A concentração de íons fosfato (PO_4^{3-}) no material particulado foi monitorada durante as estações de outono e inverno de 2023, utilizando amostras de MP_{10} e $\text{MP}_{2,5}$, coletadas na UFCAT, e amostras de MP_{10} coletadas no centro da cidade. Para cada ponto de coleta, foram analisadas 29 amostras. As concentrações de íons fosfato nas amostras foram determinadas utilizando o método de análise de imagem digital proposto neste trabalho e comparadas com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 650 nm. As curvas analíticas construídas para ambos os métodos são apresentadas na Figura 26.

Figura 26: Curvas de analíticas para o complexo fosfato molibdênio na faixa de 0,25 até 10,0 mg L^{-1} construídas utilizando análise de imagem digital (canal Red, condições de captura: distância 2, 2 LEDs exposição mínima) e espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis em 650 nm.



Fonte: O autor.

Os coeficientes angulares e a linearidade das curvas analíticas de ambos os métodos foram próximos. O LD calculado (empregando as equações 5 e 6) para as análises por espectrofotometria foi de 0,06 mg L^{-1} , enquanto o LQ foi de 0,20 mg L^{-1} . Esses valores são melhores que os obtidos pelo método de análise de imagem digital, que apresentou LD de

0,22 e LQ 0,68 mg L⁻¹. As melhores figuras de mérito no UV-Vis são atribuídas à maior precisão do espectrômetro, que proporcionou menores desvios padrões no intercepto com o eixo Y.

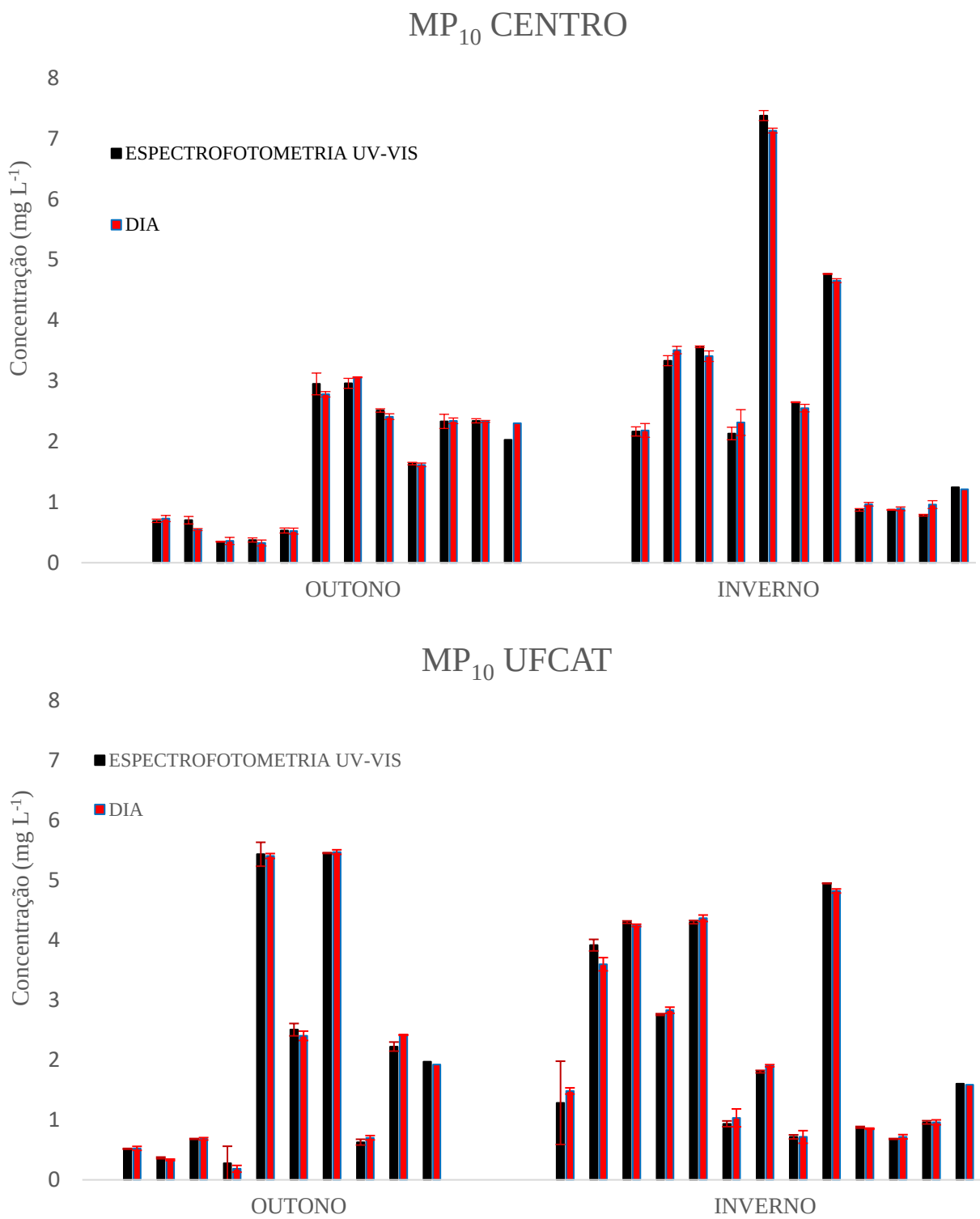
No entanto, o método de análise de imagem digital apresentou vantagens significativas em outros aspectos. A curva de calibração no UV-Vis apresentou desvios de linearidade em concentrações superiores a 8,0 mg L⁻¹, com absorbâncias acima de 1,0 em 10,0 mg L⁻¹, o que limita a aplicação da Lei de Beer e restringe a faixa de trabalho do método espectrofotométrico. Por outro lado, o método de análise de imagem digital manteve boa linearidade e precisão para concentrações mais elevadas, destacando sua aplicabilidade em faixas de trabalho mais amplas.

Além disso, a análise de imagem digital possibilitou a determinação simultânea da concentração de íons fosfato em diferentes amostras de material particulado. Com a captura de uma única imagem, foi possível analisar três amostras ao mesmo tempo, reduzindo o tempo de análise, o consumo de reagentes e aumentando a frequência analítica.

A aplicação do método proposto foi direcionada à determinação de íons fosfato com o objetivo de avaliar a influência da atividade mineradora na qualidade do ar da cidade de Catalão. O campus da UFCAT foi selecionado devido à sua proximidade com as áreas de mineração, enquanto o centro da cidade foi escolhido por estar mais distante e apresentar um maior fluxo de pessoas e veículos de transporte.

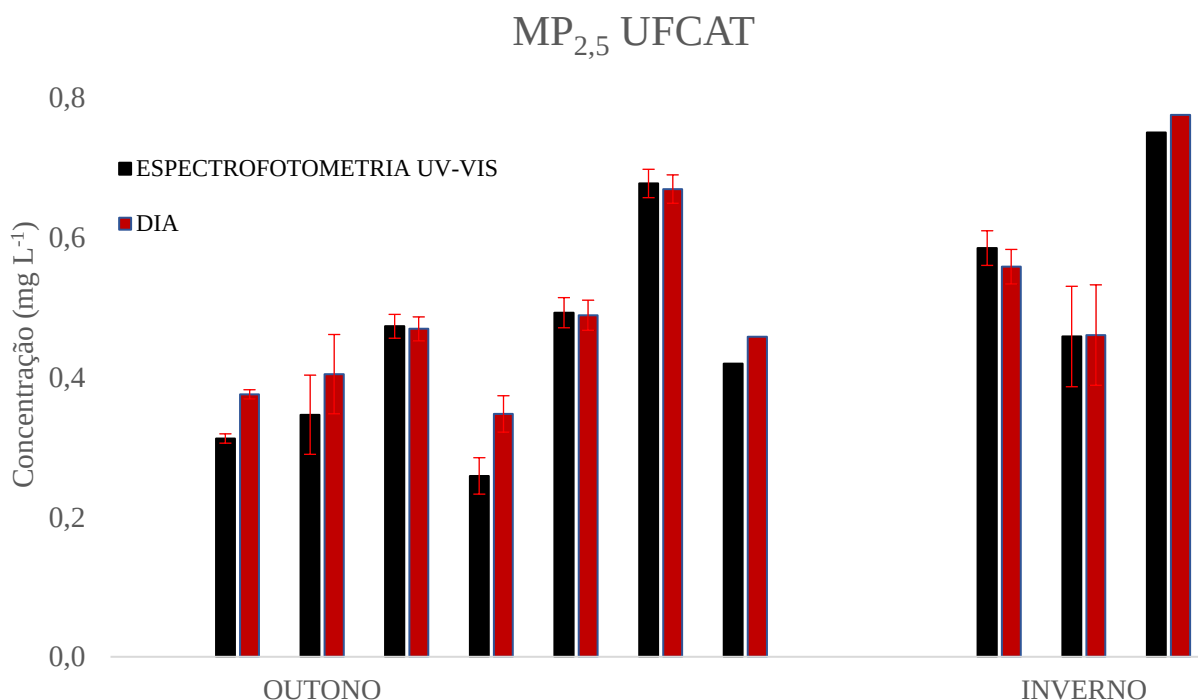
Os resultados do estudo de monitoramento da qualidade do ar em Catalão, focando nos íons PO₄³⁻ no material particulado (MP), durante as estações de outono e inverno, são apresentados na Figura 27 (MP₁₀) e Figura 28 (MP_{2,5}). São mostradas apenas as amostras analisadas que apresentaram concentrações de PO₄³⁻ superiores ao limite de quantificação do método espectrofotométrico (0,25 mg L⁻¹). Entre as 87 amostras coletadas, 56 apresentaram concentrações de PO₄³⁻ acima de 0,25 mg L⁻¹, sendo 46 amostras de MP₁₀ e 10 de MP_{2,5}.

Figura 27: Concentrações de íons PO_4^{3-} determinadas em amostras de material particulado (MP_{10}) coletadas no centro da cidade de Catalão e no campus da UFCAT, durante o outono e o inverno. As análises foram realizadas empregando a metodologia desenvolvida (DIA, canal Red, condições de captura: distância 2, 2 LEDs e exposição mínima) e a espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis a 650 nm.



Fonte: O autor

Figura 28: Concentrações de íons PO_4^{3-} determinadas em amostras de material particulado ($\text{MP}_{2,5}$) coletadas no campus da UFCAT durante o outono e o inverno. As análises foram realizadas empregando a metodologia desenvolvida (DIA, canal Red, condições de captura: distância 2, 2 LEDs e exposição mínima) e a espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis a 650 nm



Fonte: O autor.

Os resultados indicam concentrações semelhantes de íons fosfato no MP_{10} , tanto no centro quanto no campus, com variações observadas em dias distintos. Pequenos aumentos nas concentrações de fosfato foram registrados no inverno, com poucas amostras de $\text{MP}_{2,5}$ ultrapassando a concentração de $0,25 \text{ mg L}^{-1}$. A proximidade das concentrações de PO_4^{3-} determinadas nas amostras coletadas no campus e no centro da cidade sugere que a atividade mineradora próxima ao campus não afeta significativamente a qualidade do ar em termos de presença de íons fosfato. Essa semelhança nas concentrações pode ser atribuída a uma baixa emissão do poluente pela mineração e/ou à dispersão dos poluentes provocada por fatores meteorológicos e sazonais.

Embora não exista legislação específica para controle da concentração de íons PO_4^{3-} em MP no Brasil, os valores monitorados de $\text{MP}_{10\text{Total}}$ e $\text{MP}_{2,5\text{Total}}$, apresentaram-se dentro dos padrões estabelecidos pela legislação nacional CONAMA N 491, DE 19 DE NOVEMBRO DE 2018, não ultrapassando os valores de referência para o poluente e apresentando níveis satisfatórios na cidade de Catalão - GO perante a legislação nacional vigente.

Para verificar a equivalência das medidas em termos de variância e média, os valores determinados das concentrações de íons fosfato presentes no material particulado utilizando a técnica de análise imagem digital e espectrofotometria no UV-Vis, foram aplicados o teste F e teste T de student. Os resultados dos testes estatísticos são apresentados na Tabela 11.

Tabela 11: Resultados para os Teste T e Teste F aplicados para avaliação estatística do método desenvolvido para determinação de fosfato com a técnica de espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis.

	Teste F				Teste T			
	F _{calculado}	F _{tabelado}	Valor-p	α	T _{calculado}	T _{tabelado}	Valor-p	α
MP₁₀ UFCAT	1,056	2,014	0,449	0,05	0,004	2,011	0,997	0,05
MP₁₀ Centro	1,031	2,048	0,471		-0,002	2,013	0,998	
MP_{2,5} UFCAT	1,005	1,929	0,495		-0,319	2,004	0,751	

Fonte: O autor.

Assim como discutido na seção 5.5.3, os valores de F_{calculado} são menores que F_{tabelado}, indicando que não há diferença significativa entre as variâncias dos conjuntos de dados comparados. Os valores de T_{calculado} também são menores que os valores de T_{tabelado}, indicando que não há diferença significativa entre as médias dos dois conjuntos de resultados. Além disso, os altos valores de valor-p (>0,05) em todos os casos, tanto nos testes F quanto T, indicam que as duas técnicas de análise (DIA e espectrofotometria de absorção molecular no UV-Vis) produziram resultados que são estatisticamente iguais em termos de variância e média das concentrações de fosfato.

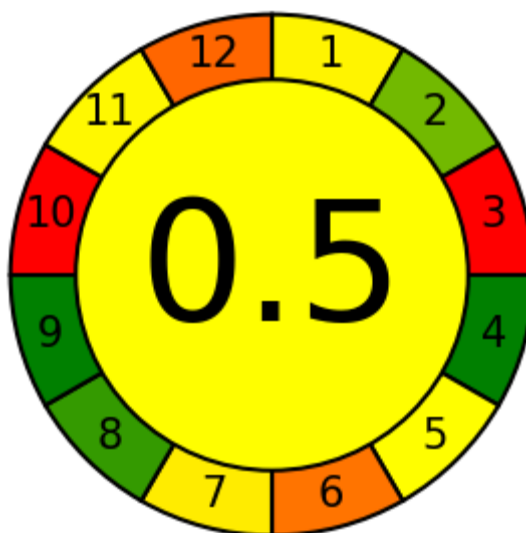
5.7 Avaliação da sustentabilidade do método

A sustentabilidade em métodos analíticos envolve a integração de aspectos ambientais, econômicos e sociais para o desenvolvimento de abordagens mais éticas, acessíveis e eficientes (Plotka-Wasyłka et al., 2021). Neste estudo, a metodologia proposta foi avaliada sob essas três perspectivas, com foco na aplicação da técnica de Análise de Imagem Digital (DIA). Nesse contexto, é importante distinguir a avaliação do método completo – que inclui o

preparo da amostra e o uso de reagentes – da avaliação da técnica analítica propriamente dita. O índice AGREE foi utilizado para mensurar o desempenho ambiental do método completo, com base nos doze princípios da Química Analítica Verde (GAC).

Os analitos avaliados durante o desenvolvimento da metodologia foram empregados apenas como modelos, com o objetivo de investigar os parâmetros inerentes à técnica. Assim, não foram realizados estudos voltados à substituição de reagentes específicos, mantendo o escopo centrado na avaliação da técnica aplicada. A avaliação da sustentabilidade pelo índice AGREE foi conduzida com base nas características da metodologia de determinação de fosfato, visto que a principal diferença entre essa metodologia e a determinação de íons ferro(III) está nos reagentes utilizados. A Figura 29 apresenta o pictograma gerado pelo software, ilustrando o desempenho geral da “verdura” da metodologia.

Figura 29: Pictograma AGREE para a metodologia proposta utilizando detecção por análise de imagem digital.

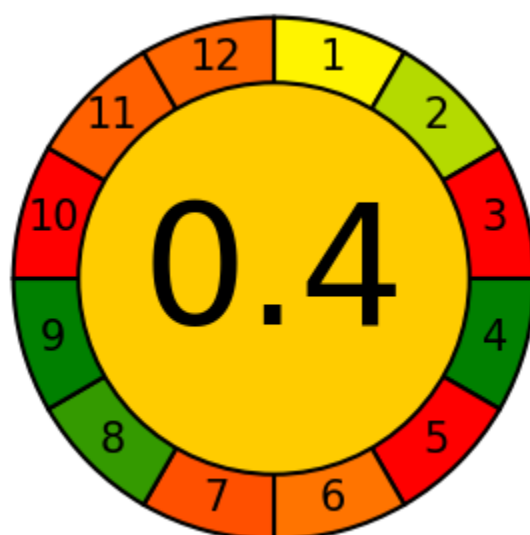


Fonte: Software AGREE. Disponível em: < <https://agree-index.anvil.app/>>. Acesso em: 01 jan. 2025.

Os pesos dos critérios foram mantidos no padrão estabelecido pelo software, visando garantir uma avaliação menos arbitrária e facilitar a identificação de pontos de melhoria. A pontuação média obtida foi 0,5, com melhor desempenho nos critérios relacionados à instrumentação: miniaturização, baixo consumo de amostra, alta frequência analítica, menor geração de resíduos e baixo consumo energético. Por outro lado, os critérios com pontuação mais baixa foram aqueles associados ao preparo da amostra e à formação do complexo analítico, especialmente devido ao uso de substâncias perigosas, como ácidos.

A título de comparação, a Figura 30 apresenta o resultado da avaliação no índice AGREE do método de determinação de fosfato utilizando a espectrofotometria de absorção molecular UV-Vis como técnica de detecção, que obteve uma pontuação média de 0,4. Ao comparar especificamente os aspectos das técnicas de detecção – DIA e espectrofotometria UV-Vis – observa-se um desempenho ambiental significativamente superior para a primeira. A miniaturização proporcionada pela DIA permitiu uma redução de até 10 vezes nos volumes de reagentes utilizados e nos resíduos gerados, o que representa uma importante vantagem ambiental. Esse impacto é exibido especialmente nos critérios 5 (miniaturização), 7 (geração de resíduos) e 11 (uso de reagentes tóxicos), nos quais a espectrofotometria apresentou pontuações consideravelmente inferiores.

Figura 30: Pictograma AGREE para a metodologia proposta utilizando detecção por espectrofotometria UV-vis.



Fonte: Software AGREE. Disponível em: < <https://agree-index.anvil.app/>>. Acesso em: 01 jan. 2025.

Dessa forma, quando se considera o método como um todo, incluindo as etapas de preparo da amostra e uso de reagentes, o desempenho ambiental é limitado por essas etapas, uma vez que exigem o uso de substâncias tóxicas – ainda que em volumes e concentrações reduzidos. No entanto, ao restringir a análise aos critérios relacionados exclusivamente à técnica de detecção, tornam-se evidentes as vantagens da aplicação da DIA em termos de sustentabilidade, especialmente por sua capacidade de reduzir resíduos e custos, além de

oferecer maior portabilidade e flexibilidade. Os resultados da avaliação dos doze critérios da ferramenta estão detalhados na Tabela 12.

Tabela 12: Avaliação do perfil verde da metodologia de determinação de íons fosfato em MP utilizando a ferramenta AGREE.

Critério avaliado na AGREE	Característica do método	Pontuação
1 - Técnicas analíticas diretas devem ser aplicadas para evitar o tratamento de amostras.	Análise off-line	0,48
2 - O tamanho mínimo da amostra e o número mínimo de amostras são objetivos.	0.4 ml L ⁻¹ de amostra	0,78
3 – Se possível, as medições devem ser realizadas in situ.	Posicionamento do dispositivo analítico: Off-line	0
4 - A integração de processos e operações analíticas economiza energia e reduz o uso de reagentes.	3 etapas no procedimento de preparação da amostra	1,0
5 – Devem ser selecionados métodos automatizados e miniaturizados.	Método manual e miniaturizado	0,5
6 - A derivatização deve ser evitada.	Uso de ácido sulfúrico	0,23
7 - A geração de um grande volume de resíduos analíticos deve ser evitada e o gerenciamento adequado dos resíduos analíticos deve ser providenciado.	Geração de 5,5 ml L ⁻¹ de resíduos	0,47
8 - Métodos multianalitos ou multiparâmetros são preferíveis em vez de métodos que usam um analito por vez.	1 analito por vez; 50 amostras/hora	0,9
9 - O uso de energia deve ser minimizado.	Maior consumo de energia: extração assistida por ultrassom	1,0
10 - Devem ser preferidos reagentes obtidos de fontes renováveis.	Nenhum dos reagentes é de origem biológica	0
11 – Reagentes tóxicos devem ser eliminados ou substituídos.	1,1 mL ⁻¹ utilizado de reagentes tóxicos	0,49
12 – A segurança do operador deve ser aumentada.	Ameaças não evitadas: tóxico para a vida aquática; bioacumulativo; persistente; corrosivo	0,2

Fonte: O autor.

A metodologia baseada em DIA apresenta ainda diversas possibilidades de melhoria, A realização de análises *in loco*, por exemplo, poderia ser viabilizada com a implementação de

dispositivos microfluídicos em papel (uPADs) associados a aplicativos para a análise de imagens diretamente no local, atendendo aos princípios 1 e 3. Além disso, o uso de uPADs demandaria volumes ainda menores de amostra, otimizando também os critérios 2 e 7. Neste último, vale destacar que, embora a configuração atual do sistema gere 5,5 mL de resíduos por análise, a maior parte desse volume (5,0 mL) é empregada na construção da curva analítica, restando apenas 0,5 mL gerado por amostra analisada, o que é relativamente baixo.

Caso as análises permaneçam no laboratório, a automação do processo poder ser explorada por meio da implementação de plugins ou scripts no software ImageJ, tornando o método semiautomático e contribuindo para atender ao critério 5. Existe ainda a possibilidade de realizar a análise simultânea de múltiplos analitos (critério 8). No entanto, sua viabilidade deve ser avaliada considerando a limitação da área com iluminação homogênea e a capacidade física da placa de poços utilizada.

Já os critérios diretamente ligados as etapas de preparo de amostra e formação do complexo, 6 e 10 que avaliam a eliminação de reagentes perigosos e a preferência por reagentes de fontes renováveis, bem como os critérios 11 e 12 relacionados a toxicidade dos reagentes e a segurança do operador,

Os critérios 6 e 10, que avaliam a eliminação de reagentes perigosos e a preferência por reagentes de fontes renováveis, bem como os critérios 11 e 12, relacionados a toxicidade dos reagentes e a segurança do operador, estão diretamente associados às etapas de preparo de amostra e formação do complexo. Para aprimorar o desempenho ambiental da metodologia, estudos futuros podem ser realizados para explorar substituições mais seguras e renováveis para os reagentes empregados. Ainda assim, vale destacar que o método proposto utiliza volumes reduzidos de reagentes tóxicos, o que contribui para minimizar a contaminação ambiental e aumentar a segurança operacional.

Completando a análise de sustentabilidade, sob a perspectiva econômica, o método apresenta vantagens significativas de baixo custo de implementação e operação em comparação à instrumentação analítica tradicional. Por exemplo, enquanto um espectrofotômetro UV-Vis custa, em média, dezenas de milhares de reais, o sistema de captura de imagens, projetado para garantir condições constantes, foi construído com materiais reutilizados e um investimento total de apenas R\$ 71,95, dos quais mais de 50% foi destinado a aquisição da caixa patola. Alternativas como impressão 3D poderiam reduzir significativamente o investimento no sistema, além de ampliar as possibilidades de aplicação devido à maior flexibilidade no design.

O smartphone e o notebook utilizados para a captura e tratamento das imagens não foram adquiridos exclusivamente para o desenvolvimento do método. No entanto, mesmo considerando esses equipamentos no cálculo, o custo total foi de R\$ 5.569,95, valor ainda significativamente inferior ao de instrumentações analíticas tradicionais. Cabe destacar, como demonstrado nos testes com outros smartphones (secção 5.4), que o dispositivo pode ser substituído por modelos mais acessíveis, mantendo a viabilidade analítica do método. Além disso, o uso do computador pode ser dispensado a partir de estudos voltados à substituição do ImageJ por aplicativos móveis. Os valores individuais dos componentes utilizados estão listados na Tabela 13.

Tabela 13: Valores dos componentes utilizado para o desenvolvimento do sistema de captura de imagens em condições constantes.

Componentes	Quantidade	Valor (R\$)
Caixa patola	1 un	38,66
Módulo 3 LEDs SMD 5730/5050	5 un	11,37
Imã Neodímio 10x3 mm N35	8 un	11,92
Fonte de alimentação 12V 1A	1 un	10,00
TOTAL (R\$)		71,95
Samsung Galaxy S22 Ultra	1 un	3.799,00
Notebook	1 un	1.999,00
TOTAL (R\$)		5.789,00

Fonte: O autor.

Além do impacto ambiental já discutido, o baixo consumo energético dos componentes empregados e a miniaturização do sistema, que requer menores volumes de reagentes, também contribuem significativamente para a redução do custo por análise. Essa redução se torna ainda mais relevante a longo prazo, viabilizando aplicações em contextos de monitoramento contínuo, especialmente em larga escala.

Do ponto de vista social, a metodologia apresenta impactos positivos nas áreas de pesquisa, ensino e população geral. Na pesquisa científica, a aplicação da DIA facilita a troca de informações sobre poluentes ambientais e viabiliza estudos em regiões com recursos limitados, onde o acesso a instrumentação analítica tradicional é restrito, promovendo a inclusão de novos grupos de pesquisa. No ensino, a simplicidade do método o destaca como uma opção viável para aulas experimentais de Química Analítica. Além disso, os resultados e discussões apresentados oferecem uma base sólida para que estudantes desenvolvam novas metodologias confiáveis, eficazes e ambientalmente responsáveis, contribuindo para a formação de profissionais mais preparados e comprometidos com a química verde.

Para a população geral, o método contribui para a democratização da ciência. Ao utilizar dispositivos cotidianos, como smartphones, para realizar análises químicas e exigir menor formação técnica, o método torna o conhecimento mais acessível, especialmente para pessoas que vivem em ambientes com recursos limitados. Essa acessibilidade tem um impacto educativo significativo, aproximando a ciência da realidade das pessoas e ajudando a desmistificar a ideia de que a Química é exclusivamente um problema, e não parte da solução.

Esse caráter educativo contribui para uma maior compreensão e engajamento social com a importância da pesquisa científica e do ensino, sendo particularmente relevante em países subdesenvolvidos, como o Brasil, onde os recursos destinados ao desenvolvimento científico são escassos e a busca por conhecimento é frequentemente desestimulada. Contudo, para que essa conscientização seja efetiva, além de métodos mais atrativos, é necessário também reavaliar as estratégias de divulgação científica, tornando-as menos abstratas e mais conectadas à realidade da população geral.

Ao analisar de forma integrada os três aspectos principais da sustentabilidade — ambiental, econômico e social — evidencia-se que a metodologia desenvolvida apresenta um desempenho altamente favorável. O método conta com características que se alinham diretamente aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) 3, 4, 9 e 12 da Agenda 2030 da ONU, destacando sua contribuição para a saúde, educação e sustentabilidade global. Além disso, quando aplicada em análises de água e ar, o método contribui diretamente para o cumprimento dos ODS 6 e 13, fornecendo dados essenciais para alcançar o acesso a saneamento e higiene adequados, bem como para o desenvolvimento de estratégias e planejamentos de combate às mudanças climáticas.

6 Conclusão

Neste trabalho, foi desenvolvida uma metodologia baseada em análise de imagem digital para a determinação quantitativa de íons fosfato e ferro(III). O sistema de aquisição de imagens construído é composto por uma caixa patola em ABS e fitas de LEDs para iluminação, ambos componentes de baixo custo e acessíveis. A otimização da iluminação mostrou-se fundamental para melhorar o desempenho analítico da técnica, destacando a importância de avaliar os parâmetros que influenciam a análise de imagem. As melhorias obtidas na qualidade das imagens capturadas foram significativas, proporcionando redução de erros e ruídos, tornando os resultados mais consistentes e confiáveis.

A definição das condições ideais de distância de captura, intensidade e uniformidade da iluminação contribuiu diretamente para a exatidão do método. Além disso, a avaliação das intensidades de sinal nos canais RGB e do Sinal Analítico (S_A), calculado de forma análoga à Lei de Beer, foi essencial para a obtenção de curvas mais lineares e resultados confiáveis, reforçando a importância de ajustes criteriosos nos parâmetros inerentes a técnica.

A análise do sinal analítico nos três canais RGB permitiu ampliar a capacidade do método para diferentes faixas de concentração, eliminando a necessidade de etapas adicionais de diluição ou pré-concentração. A metodologia demonstrou ainda alta reprodutibilidade e robustez, com resultados consistentes em diferentes modelos de smartphones, e pode ser facilmente adaptada para a análise de outros íons ou compostos, ampliando seu escopo de aplicação.

A validação do método revelou excelente correlação com técnicas de referência, confirmando a confiabilidade dos resultados. A simplicidade e rapidez da abordagem tornam-na uma alternativa atrativa para análises de rotina, especialmente em ambientes com recursos limitados. Para contextos que demandem maior precisão e sensibilidade, podem ser implementadas otimizações adicionais, como o emprego de técnicas de processamento, ajustes na composição das imagens e tratamentos matemáticos avançados.

Do ponto de vista ambiental, a metodologia está alinhada aos princípios da Química Analítica Verde (GAC), com destaque para o consumo reduzido de energia e a minimização da geração de resíduos. Apesar do uso de alguns reagentes tóxicos, a pequena quantidade empregada por análise contribui para um impacto ambiental reduzido. O desenvolvimento de dispositivos microfluídicos e aplicativos para análises *in loco* representa uma oportunidade de elevar ainda mais a sustentabilidade do método.

Em um contexto mais amplo, a metodologia também está de acordo com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), particularmente ao ODS 12 (Consumo e Produção Responsáveis), ODS 9 (Indústria, Inovação e Infraestrutura) e ODS 13 (Ação contra a Mudança Global do Clima). O baixo custo operacional e a eficiência energética contribuem para sua viabilidade econômica e para a redução de emissões de carbono, enquanto as possibilidades de adaptação reforçam o compromisso com práticas analíticas mais sustentáveis.

Portanto, conclui-se que a melhoria dos parâmetros que influenciam a técnica de análise de imagem digital é uma estratégia prioritária para aprimorar o desempenho dos métodos baseados nessa abordagem, especialmente no que se refere à qualidade do sinal analítico, à replicabilidade dos resultados e à sustentabilidade ambiental e econômica.

Referências Bibliográficas

- ABNT. NBR 9547:1997. Material particulado em suspensão no ar ambiente - Determinação da concentração total pelo método do amostrador de grande volume. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Normas Técnicas, set. 1997. Disponível em: <https://www.abntcatalogo.com.br/pnm.aspx?Q=cWZ3UFR3NzZzMTM4M2ticlE5ZVdBRC9BNm9US09VNkgzRkdRZll5OHRuUT0=>. Acesso em 11 jul. 2024.
- ABRÀMOFF, Michael D; MAHALHÃES, Paulo J; RAM, Sunanda J. Image processing with ImageJ. **Biophotonics International**, p. 1-7, jul. 2004. Disponível em: <https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=8bc8c09c4193fdd351320d1632beadd0e2245b90>. Acesso em: 30 jun. 2024.
- ACHTERBERG, Eric P. *et al.* Determination of iron in seawater. **Analytica Chimica Acta**, v. 442, n. 1, p. 1-14, ago. 2001. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(01\)01091-1](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(01)01091-1). Acesso em: 5 jul. 2024.
- AHMED, M. Jamaluddin; ROY, Uttam Kumer. A simple spectrophotometric method for the determination of iron(II) aqueous solutions. **Turkish Journal of Chemistry**, 1 jan. 2009. Disponível em: https://doi.org/10.3906/ki_m-0802-9. Acesso em: 5 jul. 2024.
- ANVISA, Agência Nacional de Vigilância Sanitária. Resolução da diretoria colegiada – RDC Nº 166, 2017. Acesso em: 10 jul. 2024.
- APPLE, Support. IPHONE 11 - especificações técnicas. Disponível em: <https://support.apple.com/pt-br/111865>. Acesso em: 11 jul. 2024.
- ARENA, Ellen T. *et al.* Quantitating the cell: turning images into numbers with ImageJ. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Developmental Biology**, v. 6, n. 2, p. e260, 2 dez. 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/wdev.260>. Acesso em: 29 jun. 2024.
- ATKINS, Peter; JONES, Loretta; LAVERMAN, Leroy. **Princípios de química: questionando a vida moderna e o meio ambiente**. 7. Ed. Porto Alegre: Bookman, 2018.
- BERNACKI, Jarosław. Automatic exposure algorithms for digital photography. **Multimedia Tools and Applications**, v. 79, n. 19-20, p. 12751-12776, 22 jan. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11042-019-08318-1>. Acesso em: 13 jan. 2025.
- BERASARTE, Irati *et al.* PH measurement and phosphate determination in pharmaceutical eye drops for eye diseases by digital image analysis. **Microchemical Journal**, v. 162, p. 105854, mar. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2020.105854>. Acesso em: 24 jan. 2025.
- BHATTARAI, Trailokya; EBONG, Abasifreke; RAJA, Mohammad Yasin Akhtar. A review of light-emitting diodes and ultraviolet light-emitting diodes and their applications. **Photonics**, v. 11, n. 6, p. 491, 22 maio 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/photonics11060491>. Acesso em: 15 jan. 2025.
- BORTOLINI, Gisele A.; FISBERG, Mauro. Orientação nutricional do paciente com deficiência de ferro. **Revista Brasileira de Hematologia e Hemoterapia**, v. 32, p. 105-113,

jun. 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/s1516-84842010005000070>. Acesso em: 6 jul. 2024.

BUI, Duy Anh; HAUSER, Peter C. Analytical devices based on light-emitting diodes – a review of the state-of-the-art. **Analytica Chimica Acta**, v. 853, p. 46-58, jan. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2014.09.044>. Acesso em: 25 jun. 2024.

BUSSAB, Wilton A; MORETINI, Pedro A. **Estatística Básica**. 9. ed. São Paulo: Saraiva Uni, 2017.

CAIRONE, Francesco *et al.* Reflectance colorimetry: a mirror for food quality—a mini review. **European Food Research and Technology**, v. 246, n. 2, p. 259-272, 1 ago. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00217-019-03345-6>. Acesso em: 23 jun. 2024.

CALVINI, Rosalba *et al.* Colourgrams GUI: A graphical user-friendly interface for the analysis of large datasets of RGB images. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 196, p. 103915, jan. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2019.103915>. Acesso em: 23 jun. 2024.

CAPITÁN-VALLVEY, Luis Fermín *et al.* Recent developments in computer vision-based analytical chemistry: a tutorial review. **Analytica Chimica Acta**, v. 899, p. 23-56, out. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.10.009>. Acesso em: 10 jun. 2024.

CAPUTO, Anthony C. Digital video overview. In: CAPUTO, Anthony C. **Digital video surveillance and security**. [S. l.]: Elsevier, 2014. p. 25-47. ISBN 9780124200425. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-420042-5.00002-2>. Acesso em: 9 jan. 2025.

CHANG, Yaw-Jen. An electrochemical sensor with graphene–graphene oxide nanocomposite and ammonium molybdate for phosphate determination. **International Journal of Electrochemical Science**, p. ArticleID:2212100, dez. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.20964/2022.12.105>. Acesso em: 19 jul. 2024.

CLOUD, Gary. Basic of Optics. In: **Springer Handbook of Experimental Solid Mechanics**. Boston: Springer, 2008. Disponível em: https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-0-387-30877-7_18. Acesso em: 26 jun. 2024.

COLZANI, Heloisa *et al.* Determinação de fosfato em refrigerantes utilizando um scanner de mesa e análise automatizada de dados: um exemplo didático para ensino de química. **Química Nova**, 24 mar. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.21577/0100-4042.20170035>. Acesso em: 11 jul. 2024.

COMENSOLI, Lucrezoa; BINDSCHEDLER, Saskia; JUNIER, Pilar; JOSEPH, Edith. Iron and Fungal Physiology: A Review of Biotechnological Opportunities. **Advances in Applied Microbiology**, [S. l.], v. 98, p. 31–60, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/bs.aambs.2016.11.001>. Acesso em: 6 jul. 2024.

COMMITTEE, Analytical Methods. Recommendations for the definition, estimation and use of the detection limit. **The Analyst**, v. 112, n. 2, p. 199, 1987. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/an9871200199>. Acesso em: 22 jul. 2024.

DAI, Ying *et al.* Comparative physiological and proteomic analysis reveals different responding mechanisms of phosphate deficiency between two clones of *pinus elliottii* × *P. caribaea*. **Industrial Crops and Products**, v. 218, p. 118994, out. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2024.118994>. Acesso em: 7 jul. 2024.

DA SILVA OLIVEIRA, Claudinéia Rosa *et al.* Methods based on digital image: from general considerations to chemistry teaching. **Revista Virtual de Química**, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.21577/1984-6835.20230060>. Acesso em: 28 jun. 2024.

DE LA GUARDIA, Miguel; GARRIGUES, Salvador. Chapter 1. past, present and future of green analytical chemistry. In: DE LA GUARDIA, Miguel; GARRIGUES, Salvador. **Green chemistry series**. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2020. p. 1-18. ISBN 9781788015370. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/9781788016148-00001>. Acesso em: 15 nov. 2024.

DELOUGHERY, Thomas G. Iron deficiency anemia. **Medical Clinics of North America**, v. 101, n. 2, p. 319-332, mar. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.mcna.2016.09.004>. Acesso em: 9 fev. 2024.

DI NONNO, Sarah; ULBER, Roland. Smartphone-based optical analysis systems. **The Analyst**, v. 146, n. 9, p. 2749-2768, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/d1an00025j>. Acesso em: 10 jun. 2024.

DUERKOP, Axel *et al.* Microtiter plate assay for phosphate using a europium–tetracycline complex as a sensitive luminescent probe. **Analytica Chimica Acta**, v. 555, n. 2, p. 292-298, jan. 2006. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2005.09.007>. Acesso em: 19 jul. 2024.

FAN, Yajun *et al.* Digital image colorimetry on smartphone for chemical analysis: A review. **Measurement**, v. 171, pág. 108829, fev. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2020.108829>. Acesso em: 14 jun. 2024.

FAY, Cormac D.; WU, Liang. Critical importance of RGB color space specificity for colorimetric bio/chemical sensing: a comprehensive study. **Talanta**, v. 266, p. 124957, jan. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2023.124957>. Acesso em: 28 jun. 2024.

FERNANDES, Arthur Francisco Araújo; DÓREA, João Ricardo Rebouças; ROSA, Guilherme Jordão de Magalhães. Image analysis and computer vision applications in animal sciences: an overview. **Frontiers in Veterinary Science**, v. 7, 21 out. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.3389/fvets.2020.551269>. Acesso em: 7 jan. 2025.

FERNANDES, Gabriel Martins *et al.* Novel approaches for colorimetric measurements in analytical chemistry – A review. **Analytica Chimica Acta**, v. 1135, p. 187-203, out. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2020.07.030>. Acesso em: 12 jun. 2024.

FERREIRA, William D. *et al.* A review of digital image forensics. **Computers & Electrical Engineering**, v. 85, p. 106685, jul. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.compeleceng.2020.106685>. Acesso em: 13 jun. 2024.

FIEDORUK-POGREBNIAK, Marta. Mathematical processing of RGB data in microfluidic paper-based analytical devices. **Scientific Reports**, v. 14, n. 1, 13 jun. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41598-024-63546-2>. Acesso em: 25 jul. 2024.

FIEDORUK-POGREBNIAK, Marta; KONCKI, Robert. Multicommutated flow analysis system based on fluorescence microdetectors for simultaneous determination of phosphate and calcium ions in human serum. **Talanta**, v. 144, p. 184-188, nov. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.06.001>. Acesso em: 19 jul. 2024.

FLÁVIA SOUTO FIGUEIREDO NEPOMUCENO, Ana; AZEVEDO LEMOS, Valfredo; OLIVEIRA DOS SANTOS, Liz. A new green method employing ultrasonic-assisted liquid-phase microextraction and digital imaging colorimetry for the determination of mefenamic acid in medicinal products. **Microchemical Journal**, v. 179, p. 107538, ago. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2022.107538>. Acesso em: 14 jan. 2025.

FUNDAÇÃO GETULIO VARGAS (FGV). Pesquisa do uso da TI – tecnologia de informação nas empresas. 2023. Disponível em: https://eaesp.fgv.br/sites/eaesp.fgv.br/files/u68/pesti-fgvcia-2023_0.pdf. Acesso em: 10 jun. 2024.

FUZZI, S. *et al.* Particulate matter, air quality and climate: lessons learned and future needs. **Atmospheric Chemistry and Physics**, v. 15, n. 14, p. 8217-8299, 24 jul. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.5194/acp-15-8217-2015>. Acesso em: 8 jul. 2024.

GANRANOO, Lucksagoon; CHOKCHASIRI, Ratchanaporn; GRUDPAN, Kate. Simple simultaneous determination of iron and manganese by sequential injection spectrophotometry using astilbin extracted from smilax china L. root. **Talanta**, v. 191, p. 307-312, jan. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2018.08.076>. Acesso em: 2 set. 2024.

GALHARDO, Cristiane X.; MASINI, Jorge C. Spectrophotometric determination of phosphate and silicate by sequential injection using molybdenum blue chemistry. **Analytica Chimica Acta**, v. 417, n. 2, p. 191-200, jul. 2000. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0003-2670\(00\)00933-8](https://doi.org/10.1016/S0003-2670(00)00933-8). Acesso em: 19 jul. 2024.

GALUSZKA, Agnieszka; MIGASZEWSKI, Zdzisław; NAMIEŚNIK, Jacek. The 12 principles of green analytical chemistry and the SIGNIFICANCE mnemonic of green analytical practices. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 50, p. 78-84, out. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2013.04.010>. Acesso em: 15 nov. 2024.

GRANTZ, D. A.; GARNER, J. H. B.; JOHNSON, D. W. Ecological effects of particulate matter. **Environment International**, v. 29, n. 2-3, p. 213-239, jun. 2003. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0160-4120\(02\)00181-2](https://doi.org/10.1016/S0160-4120(02)00181-2). Acesso em: 8 jul. 2024.

GUPTA, Abhishek. Current research opportunities of image processing and computer vision. **Computer Science**, v. 20, n. 4, 4 dez. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.7494/csci.2019.20.4.3163>. Acesso em: 7 jan. 2025.

HAIN, Rainer; KÄHLER, Christian J.; TROPEA, Cam. Comparison of CCD, CMOS and intensified cameras. **Experiments in Fluids**, v. 42, n. 3, p. 403-411, 13 jan. 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00348-006-0247-1>. Acesso em: 13 jan. 2025.

HARRIS, Daniel C. **Análise química quantitativa**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2012. ISBN 978-85-216-2042-6.

HARTIG, Sean M. Basic image analysis and manipulation in imagej. **Current Protocols in Molecular Biology**, v. 102, n. 1, abr. 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/0471142727.mb1415s102>. Acesso em: 29 jun. 2024.

HAYDER, I. Omed; NAJIB, Fadhil, M. Study of Stoichiometry of Ferric Thiocyanate Complex for Analytical Purposes Including F- - Determination. **Iraqi National Journal Of Chemistry**, v. 42, n.1, p. 135-155, 2011. Disponível em: <https://www.iasj.net/iasj/article/33574>. Acesso em: 6 jul. 2024.

HECHT, Eugene. **Optics**. 4. ed. Boston: Addison-Wesley, 2011.

HEENEY, Matthew M. Iron clad: iron homeostasis and the diagnosis of hereditary iron overload. **Hematology**, v. 2014, n. 1, p. 202-209, 5 dez. 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1182/asheducation-2014.1.202>. Acesso em: 6 jul. 2024.

HEIDARI-BAFROUI, Hojat *et al.* A colorimetric dip strip assay for detection of low concentrations of phosphate in seawater. **Sensors**, v. 21, n. 9, p. 3125, 30 abr. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/s21093125>. Acesso em: 24 jan. 2025.

HIROTA, Kiichi. An intimate crosstalk between iron homeostasis and oxygen metabolism regulated by the hypoxia-inducible factors (HIFs). **Free Radical Biology and Medicine**, v. 133, p. 118-129, mar. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2018.07.018>. Acesso em: 5 jul. 2024.

HOPKE, Philip K. *et al.* Global review of recent source apportionments for airborne particulate matter. **Science of The Total Environment**, v. 740, p. 140091, out. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.140091>. Acesso em: 8 jul. 2024.

HUANG, Weibin *et al.* Impacts of dietary phosphorus level on growth, antioxidant capacity and immunity in juvenile hybrid grouper (*Epinephelus fuscoguttatus* ♀ × *E. lanceolatus* ♂) fed with high-lipid diets. **Aquaculture Reports**, v. 35, p. 101958, abr. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aqrep.2024.101958>. Acesso em: 7 jul. 2024.

IBRAHEEM, Norr, A. *et al.* Understanding color models: a review. **ARNP Journal of Science and Technology**, v. 2, n. 3, p. 265-275, 2012. Disponível em: <https://citeseerx.ist.psu.edu/document?repid=rep1&type=pdf&doi=75e9c6dcaaaa31fd60e61a69aaba7e706b97e4ad>. Acesso em: 28 jun. 2024.

JOÃO, Afonso Filipe *et al.* Iron (III) determination in bioethanol fuel using a smartphone-based device. **Microchemical Journal**, v. 146, p. 1134-1139, maio 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.02.053>. Acesso em: 2 set. 2024.

KAP, Özlem *et al.* Smartphone-based colorimetric detection systems for glucose monitoring in the diagnosis and management of diabetes. **The Analyst**, v. 146, n. 9, p. 2784-2806, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/d0an02031a>. Acesso em: 13 jun. 2024.

KARDAR, Zahra Shakeri; SHEMIRANI, Farzaneh; ZADMARD, Reza. Determination of iron(II) and iron(III) via static quenching of the fluorescence of tryptophan-protected copper nanoclusters. **Microchimica Acta**, v. 187, n. 1, jan. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00604-019-4067-4>. Acesso em: 22 jul. 2024.

KAUFMANN, Jörg; SCHERING A.G. Analysis of variance Anova. **Wiley Encyclopedia of Clinical Trials**, 2007. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/9780471462422.eoct017>. Acesso em: 25 jul. 2024.

KEUKEN, Menno *et al.* Air quality and health impact of PM₁₀ and EC in the city of Rotterdam, the Netherlands in 1985–2008. **Atmospheric Environment**, v. 45, n. 30, p. 5294-5301, set. 2011. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.06.058>. Acesso em: 9 jul. 2024.

KIM, Hansol; PARK, JongEun; KANG, Moon Gi. Multi-frame demosaicing for the quad bayer CFA in the color difference domain. **Optics Express**, 14 mar. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1364/oe.510065>. Acesso em: 13 jan. 2025.

KIM, Hyun-Suh; KIM, Eun Joung; KIM, JungYoon. The optimal color space for realistic color reproduction in virtual reality content design. **Electronics**, v. 12, n. 22, p. 4630, 12 nov. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/electronics12224630>. Acesso em: 28 jun. 2024.

KIM, Ki-Hyun; KABIR, Ehsanul; KABIR, Shamin. A review on the human health impact of airborne particulate matter. **Environment International**, v. 74, p. 136-143, jan. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.envint.2014.10.005>. Acesso em: 8 jul. 2024.

KISS, Tamás; ENYEDY, Éva A.; JAKUSCH, Tamás. Development of the application of speciation in chemistry. **Coordination Chemistry Reviews**, v. 352, p. 401-423, dez. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2016.12.016>. Acesso em: 4 jul. 2024.

KORONKIEWICZ, Stanisława. Photometric determination of iron in pharmaceutical formulations using double-beam direct injection flow detector. **Molecules**, v. 26, n. 15, p. 4498, 26 jul. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/molecules26154498>. Acesso em: 22 jul. 2024.

KOZAK, J. *et al.* Simultaneous spectrophotometric flow injection determination of phosphate and silicate. **Talanta**, v. 133, p. 150-154, fev. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2014.07.057>. Acesso em: 24 jan. 2025.

KWON, Ojun; PARK, Tusan. Applications of Smartphone Cameras in Agriculture, Environment, and Food: A review. **Journal of Biosystems Engineering**. V. 42, n. 4, p. 330-338, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.5307/JBE.2017.42.4.330>. Acesso em: 13 jun. 2024.

KYUNG, Sun Young; JEONG, Sung Hwan. Particulate-Matter related respiratory diseases. **Tuberculosis and Respiratory Diseases**, v. 83, n. 2, p. 116, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.4046/trd.2019.0025>. Acesso em: 8 jul. 2024.

LASKAR, Mohammad Asaduddin; SIDDIQUI, Sana; ISLAM, Aminul. Reflection of the physiochemical characteristics of 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol on the pre-concentration of trace heavy metals. **Critical Reviews in Analytical Chemistry**, v. 46, n. 5, p. 413-423, 27 jun. 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/10408347.2016.1140019>. Acesso em: 4 jul. 2024.

LI, Jiaxi et al. Highly efficient removal of nitrate and phosphate to control eutrophication by the dielectrophoresis-assisted adsorption method. **International Journal of Environmental Research and Public Health**, v. 19, n. 3, p. 1890, 8 fev. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/ijerph19031890>. Acesso em: 7 jul. 2024.

LI, Peng et al. Targeted analysis of sugar phosphates from glycolysis pathway by phosphate methylation with liquid chromatography coupled to tandem mass spectrometry. **Analytica Chimica Acta**, v.15, 17 jun, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2022.340099>. Acesso em: 19 jul. 2024.

LOCATELLI, Marcello *et al.* Green profile tools: current status and future perspectives. **Advances in Sample Preparation**, v. 6, p. 100068, maio 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.sampre.2023.100068>. Acesso em: 14 nov. 2024.

LOURENÇO, Emilene *et al.* Determination of iron content using the photometrix PRO® application: technology in favor of teaching chemistry. **Revista Virtual de Química**, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.21577/1984-6835.20200137>. Acesso em: 6 jul. 2024.

LU, Changfang *et al.* A colorimetric and fluorescence dual-signal determination for iron (II) and H₂O₂ in food based on sulfur quantum dots. **Food Chemistry**, v. 366, p. 130613, jan. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2021.130613>. Acesso em: 22 jul. 2024.

MACKA, Mirek; PIASECKI, Tomasz; DASGUPTA, Purnendu K. Light-Emitting diodes for analytical chemistry. **Annual Review of Analytical Chemistry**, v. 7, n. 1, p. 183-207, 12 jun. 2014. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev-anchem-071213-020059>. Acesso em: 25 jun. 2024.

MANOVÁ, A.; BEINROHR, E. Determination of phosphate in water by flow coulometry. **Acta Chimica Slovaca**, v. 13, n. 1, p. 102-107, 1 abr. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.2478/acs-2020-0015>. Acesso em: 24 jan. 2025.

MARTINS, F. G. *et al.* Spectrophotometric study of iron oxidation in the iron(II)/thiocyanate/acetone system and some analytical applications. **Eclética Química**, v. 30, n. 3, p. 63-71, set. 2005. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/s0100-46702005000300008>. Acesso em: 5 jul. 2024.

MEENU, Maninder *et al.* A concise review on food quality assessment using digital image processing. **Trends in Food Science & Technology**, v. 118, p. 106-124, dez. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2021.09.014>. Acesso em: 13 jun. 2024.

MEELAPSOM, Rattapol *et al.* Smartphone-Assisted colorimetric determination of iron ions in water by using anthocyanin from *ruellia tuberosa* L. as a green indicator and application for hands-on experiment kit. **Journal of Chemical Education**, v. 99, n. 4, p. 1660-1671, 22 fev. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.1c01120>. Acesso em: 24 jan. 2025.

Mi. Redmi note 12S. Disponível em: <https://www.mi.com/global/product/redmi-note-12s/specs>. Acesso em: 11 jul. 2024.

MOHAMED, Ashraf A.; SHALABY, Ahmed A. Digital imaging devices as sensors for iron determination. **Food Chemistry**, v. 274, p. 360-367, fev. 2019b. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2018.09.014>. Acesso em: 6 jul. 2024.

MOMENI, Naghi *et al.* CCD-camera based capillary chemiluminescent detection of retinol binding protein. **Analytica Chimica Acta**, v. 387, n. 1, p. 21-27, abr. 1999. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/s0003-2670\(99\)00037-9](https://doi.org/10.1016/s0003-2670(99)00037-9). Acesso em: 14 jan. 2025.

MORSY, Noha; HOLIEL, Ahmed A. Color difference for shade determination with visual and instrumental methods: a systematic review and meta-analysis. **Systematic Reviews**, v. 12, n. 1, 8 jun. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1186/s13643-023-02263-9>. Acesso em: 23 jun. 2024.

MUKHERJEE, Arideep; AGRAWAL, Madhoolika. World air particulate matter: sources, distribution and health effects. **Environmental Chemistry Letters**, v. 15, n. 2, p. 283-309, 23 fev. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10311-017-0611-9>. Acesso em: 8 jul. 2024.

NAÇÕES UNIDAS BRASIL. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br>. Acesso em: 3 de jan. 2025.

NAIRZ, Manfred *et al.* Iron and innate antimicrobial immunity—Depriving the pathogen, defending the host. **Journal of Trace Elements in Medicine and Biology**, v. 48, p. 118-133, jul. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jtemb.2018.03.007>. Acesso em: 6 jul. 2024.

NAGUL, Edward A. *et al.* The molybdenum blue reaction for the determination of orthophosphate revisited: opening the black box. **Analytica Chimica Acta**, v. 890, p. 60-82, ago. 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.aca.2015.07.030>. Acesso em: 7 jul. 2024.

NICHOLLS, Jack W. F. *et al.* On the potential roles of phosphorus in the early evolution of energy metabolism. **Frontiers in Microbiology**, v. 14, 2 ago. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.3389/fmicb.2023.1239189>. Acesso em: 7 jul. 2024.

NOCE, Anthony M. Green chemistry and the grand challenges of sustainability. **Physical Sciences Reviews**, v. 3, n. 12, 14 set. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1515/psr-2018-0072>. Acesso em: 4 dez. 2024.

NOROCEL, L.; GUTT, G. Development and performance testing of an electrochemical sensor for determination of iron ions in wine. **Australian Journal of Grape and Wine**

Research, v. 25, n. 2, p. 161-164, 28 nov. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1111/ajgw.12375>. Acesso em: 22 jul. 2024.

OHNO, Yoshi. CIE Fundamentals for Color Measurements. In: International Conference on Digital Printing Technologies (NIP16), 2000, Gaithersburg, Maryland. Optical Technology Division, National Institute of Standards and Technology, 2000. Disponível em: https://library.imaging.org/admin/apis/public/api/ist/website/downloadArticle/print4fab/16/1/art00033_2. Acesso em: 23 jun. 2024.

PAN, Zhen *et al.* Field determination of phosphate in environmental water by using a hand-powered paper centrifuge for preconcentration and digital image colorimetric sensing. **Journal of Analytical Methods in Chemistry**, v. 2022, p. 1-7, 17 jan. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1155/2022/7359197>. Acesso em: 24 jan. 2025.

PENA-PEREIRA, Francisco; WOJNOWSKI, Wojciech; TOBISZEWSKI, Marek. AGREE—Analytical greenness metric approach and software. **Analytical Chemistry**, v. 92, n. 14, p. 10076-10082, 15 jun. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.0c01887>. Acesso em: 11 jun. 2024.

PŁOTKA-WASYLKA, Justyna *et al.* Green chemistry in higher education: state of the art, challenges, and future trends. **ChemSusChem**, v. 11, n. 17, p. 2845-2858, 8 ago. 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/cssc.201801109>. Acesso em: 15 nov. 2024.

PŁOTKA-WASYLKA, Justyna *et al.* Green analytical chemistry as an integral part of sustainable education development. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, p. 100508, abr. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.cogsc.2021.100508>. Acesso em: 14 nov. 2024.

PREISNER, M.; NEVEROVA-DZIOPAK, E.; KOWALEWSKI, Z. Analysis of eutrophication potential of municipal wastewater. **Water Science and Technology**, v. 81, n. 9, p. 1994-2003, 1 maio 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.2166/wst.2020.254>. Acesso em: 7 jul. 2024.

PRYOR, Jack T.; COWLEY, Lachlan O.; SIMONDS, Stephanie E. The physiological effects of air pollution: particulate matter, physiology and disease. **Frontiers in Public Health**, v. 10, 14 jul. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.3389/fpubh.2022.882569>. Acesso em: 8 jul. 2024.

QIN, Zong *et al.* Analysis of condition for uniform lighting generated by array of light emitting diodes with large view angle. **Optics Express**, v. 18, n. 16, p. 17460, 30 jul. 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1364/oe.18.017460>. Acesso em: 20 jul. 2024.

RAMANATH, Rajeev *et al.* Demosaicking methods for Bayer color arrays. **Journal of Electronic Imaging**, v. 11, n. 3, p. 306, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1117/1.1484495>. Acesso em: 8 jan. 2025.

REZAZADEH, Maryam *et al.* The modern role of smartphones in analytical chemistry. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 118, p. 548-555, set. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.06.019>. Acesso em: 11 jun. 2024.

ROSENFELD, Azriel. From image analysis to computer vision: an annotated bibliography, 1955–1979. **Computer Vision and Image Understanding**, v. 84, n. 2, p. 298-324, nov. 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/cviu.2001.0953>. Acesso em: 7 jan. 2025.

RUEDEN, Curtis T. *et al.* ImageJ2: ImageJ for the next generation of scientific image data. **BMC Bioinformatics**, v. 18, n. 1, 29 nov. 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.1186/s12859-017-1934-z>. Acesso em: 29 jun. 2024.

SAHA, Ajoy *et al.* Phosphorus fractions in the sediment of a tropical reservoir, India: implications for pollution source identification and eutrophication. **Environmental Geochemistry and Health**, 29 maio 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10653-021-00985-0>. Acesso em: 7 jul. 2024.

SAJID, Muhammad; PŁOTKA-WASYLKA, Justyna. Green analytical chemistry metrics: a review. **Talanta**, v. 238, p. 123046, fev. 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.123046>. Acesso em: 14 nov. 2024.

SAMSUNG. Galaxy A31 full device specifications - SamMobile. Disponível em: <https://www.sammobile.com/samsung/galaxy-a31/specs/>. Acesso em: 11 jul. 2024.

SAMSUNG. Galaxy S22 Ultra full device specifications - SamMobile. Disponível em: <https://www.sammobile.com/samsung/galaxy-s22-ultra/specs/>. Acesso em: 11 jul. 2024.

SANTOS DE SOUZA, Valdinei *et al.* Development of a methodology for phosphorus determination in soils, water, and biofertilizer using digital image analysis - DIA. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, p. 104929, ago. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2023.104929>. Acesso em: 25 jul. 2024.

SANTOS, Joel. **Fotografia. Luz, Exposição Equipamento e Dicas para fotografar em Portugal**. 1. Ed. V.N. Famalicão: Papelmunde, 2010.

SCURI, Antonio Escaño. **Fundamentos da Imagem Digital**. Rio de Janeiro: Tecgraf, 2002. Disponível em: <https://webserver2.tecgraf.puc-rio.br/~scuri/download/fid.pdf>. Acesso em: 9 jan. 2025

SILVA, Clarice Lima *et al.* Frequência de consumo de alimentos fonte de ferro entre crianças de 6 a 59 meses atendidas pela Estratégia de Saúde da Família. **HU Revista**, v. 45, n. 4, p. 389-395, 14 fev. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.34019/1982-8047.2019.v45.27795>. Acesso em: 6 jul. 2024.

SCHNEIDER, Caroline A.; RASBAND, Wayne S.; ELICEIRI, Kevin W. NIH Image to ImageJ: 25 years of image analysis. **Nature Methods**, v. 9, n. 7, p. 671-675, 28 jun. 2012. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/nmeth.2089>. Acesso em: 29 jun. 2024.

SCHROEDER, Alexandra B. *et al.* The ImageJ ecosystem: open-source software for image visualization, processing, and analysis. **Protein Science**, v. 30, n. 1, p. 234-249, 20 nov. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/pro.3993>. Acesso em: 29 jun. 2024.

SHRIVAS, Kamlesh *et al.* Smartphone coupled with paper-based chemical sensor for on-site determination of iron(III) in environmental and biological samples. **Analytical and**

Bioanalytical Chemistry, v. 412, n. 7, p. 1573-1583, 13 jan. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s00216-019-02385-x>. Acesso em: 5 jul. 2024.

SMIL, Vaclav. PHOSPHORUS IN THE ENVIRONMENT: natural flows and human interferences. **Annual Review of Energy and the Environment**, v. 25, n. 1, p. 53-88, nov. 2000. Disponível em: <https://doi.org/10.1146/annurev.energy.25.1.53>. Acesso em: 7 jul. 2024.

SOARES, Samara; FERNANDES, Gabriel M.; ROCHA, Fábio R. P. Smartphone-based digital images in analytical chemistry: why, when, and how to use. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, p. 117284, set. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2023.117284>. Acesso em: 19 jul. 2024.

SOLOMON, Chris; BRECKON, Toby. **Fundamentals of digital image processing**. Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 2010. *E-book*. ISBN 9780470689776. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/9780470689776>. Acesso em: 8 jan. 2025.

SONG, Minjung *et al.* New analytical approach for the determination of calcium phosphate dibasic and tribasic in processed food by comparison of ion chromatography with high-performance liquid chromatography. **Foods**, v. 9, n. 3, p. 248, 25 fev. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/foods9030248>. Acesso em: 19 jul. 2024.

SZELISKI, Richard. **Computer vision**. London: Springer London, 2011. *E-book*. ISBN 9781848829343. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-1-84882-935-0>. Acesso em: 7 jan. 2025.

THANGAVEL, Prakash; PARK, Duckshin; LEE, Young-Chul. Recent insights into particulate matter (pm2.5)-mediated toxicity in humans: an overview. **International Journal of Environmental Research and Public Health**, v. 19, n. 12, p. 7511, 19 jun. 2022b. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/ijerph19127511>. Acesso em: 8 jul. 2024.

TUAÑO, Arvin Paul P.; CASTRILLO, Gabrielle A.; VIOLA, Gabriel Angelo V. Analysis of apparent amylose content of market milled rice via digital image photometry using a smartphone camera. **Current Research in Food Science**, v. 4, p. 852-861, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.crfs.2021.11.011>. Acesso em: 14 jan. 2025.

UNITED NATIONS. The 17 Goals. Disponível em: <https://sdgs.un.org/>. Acesso em: 11 dez. 2024.

SKOOG, Douglas A. et al. **Fundamentos de Química Analítica**. 8. ed. São Paulo: Thomson, 2006.

SKOOG, Douglas A.; JAMES HOLLER, F.; R. CROUCH, Stanley. **Principles of instrumental analysis**. 7. ed. Boston: Cengage Learning, 2007.

SÜSSTRUNK, Sabine; BUCKLEY, Robert; SWEN, Steve. Standard RGB color spaces. IS&T/SID 7th Color Imaging Conference, 1999. Proc. IS&T/SID 7th Color Imaging Conference, 1999. p 127-134.

UPADHYAY, Satyam *et al.* Recent advancements of smartphone-based sensing technology for diagnosis, food safety analysis, and environmental monitoring. **Talanta**, p. 126080, abr. 2024. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2024.126080>. Acesso em: 13 jun. 2024.

VIANA, José Lucas Martins; MENEGÁRIO, Amauri Antônio; FOSTIER, Anne Hélène. Preparation of environmental samples for chemical speciation of metal/metalloids: a review of extraction techniques. **Talanta**, v. 226, p. 122119, maio 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2021.122119>. Acesso em: 16 jul. 2024

VOGEL, Arthur I. **Análise química quantitativa**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002.

VORMITTAG, Evangelina da Motta P. A. de Araújo *et al.* Análise do monitoramento da qualidade do ar no Brasil. **Estudos Avançados**, v. 35, n. 102, p. 7-30, ago. 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/s0103-4014.2021.35102.002>. Acesso em: 9 jul. 2024.

World Health Organization. Ambient outdoor air pollution. WHO, 19 Dez. 2022. Disponível em: < [https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-\(outdoor\)-air-quality-and-health?gad_source=1&gclid=CjwKCAiAuYuvBhApEiwAzq_YiS1gCItaV7LcCw9EBgOpIsJPnbKMCEGMzUVt8o-H9uIbCzS5-kyQ0BoCW_cQAvD_BwE](https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/ambient-(outdoor)-air-quality-and-health?gad_source=1&gclid=CjwKCAiAuYuvBhApEiwAzq_YiS1gCItaV7LcCw9EBgOpIsJPnbKMCEGMzUVt8o-H9uIbCzS5-kyQ0BoCW_cQAvD_BwE) > Acesso em 9 jul. 2024.

WOOLF, M. Shane *et al.* Digital postprocessing and image segmentation for objective analysis of colorimetric reactions. **Nature Protocols**, v. 16, n. 1, p. 218-238, 9 dez. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1038/s41596-020-00413-0>. Acesso em: 28 jun. 2024.

YAO, Lizhong *et al.* Cancer-associated fibroblasts impair the cytotoxic function of NK cells in gastric cancer by inducing ferroptosis via iron regulation. **Redox Biology**, p. 102923, out. 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.redox.2023.102923>. Acesso em: 6 jul. 2024.

YU, Wenzhan *et al.* Green synthesis of CQDs for determination of iron and isoniazid in pharmaceutical formulations. **Analytical Methods**, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1039/d2ay01793h>. Acesso em: 22 jul. 2024.

ZHANG, Renyi *et al.* Formation of urban fine particulate matter. **Chemical Reviews**, v. 115, n. 10, p. 3803-3855, 5 maio 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.5b00067>. Acesso em: 8 jul. 2024.

ZHONG, Botao *et al.* Mapping computer vision research in construction: developments, knowledge gaps and implications for research. **Automation in Construction**, v. 107, p. 102919, nov. 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.autcon.2019.102919>. Acesso em: 14 jan. 2025.

ZHU, Xiangyu; MA, Jian. Recent advances in the determination of phosphate in environmental water samples: insights from practical perspectives. **TrAC Trends in Analytical Chemistry**, v. 127, p. 115908, jun. 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.115908>. Acesso em: 7 jul. 2024.

Apêndice A1

Tabela 14: Procedimento AGREE para atribuir pontuações com base nos 12 princípios do GAC.

Número do princípio	Princípio GAC	Condição	Pontuação
1	Técnicas analíticas diretas devem ser aplicadas para evitar o tratamento de amostras.	Atividades de pré-tratamento de amostra sensoriamento remoto sem danos à amostra sensoriamento remoto com poucos danos físicos análise não invasiva amostragem em campo e análise direta amostragem em campo e análise on-line análise on-line análise em linha análise off-line pré-tratamento e análise de lote de amostra externa (número reduzido de etapas) pré-tratamento e análise de lote de amostra externa (grande número de etapas)	Score 1,00 0,95 0,90 0,85 0,78 0,70 0,60 0,48 0,30 0,00
2	O tamanho mínimo da amostra e o número mínimo de amostras são objetivos.	Tipo de análise (tamanho da amostra mg ou µL) Ultramicroanálise (<1) Microanálise (1–10) Semimicroanálise (10–100) Macroanálise (>100)	Pontuação 1,00 = -0,142 x ln(quantidade amostra em g ou mL) + 0,65
3	Devem ser realizadas medições in situ.	Posição instrumental Em linha On-line Em linha	Pontuação 1,00 0,66 0,33

		Off-line	0,00
4	A integração de processos e operações analíticas economiza energia e reduz o uso de reagentes.	Número de etapas no processo analítico	Pontuação
		Três ou menos	1,00
		Quatro	0,80
		Cinco	0,60
		Seis	0,40
		Sete	0,20
		Oito ou mais	0,00
5	Métodos automatizados e miniaturizados devem ser selecionados.	nível de automação e miniaturização	Pontuação
		automático, miniaturizado	1,00
		semi-automático, miniaturizado	0,75
		manual, miniaturizado	0,50
		automático, não miniaturizado	0,50
		semiautomático, não miniaturizado	0,25
		manual, não miniaturizado	0,00
6	A derivatização deve ser evitada	Status de derivatização	Pontuação
		Nenhuma derivatização aplicada	1,00
		Derivatização aplicada	$= DA_1 \times DA_2 \times DA_3 \times \dots \times DA_n$; onde DA_i é a pontuação correspondente ao agente de derivatização específico.
7	A geração de um grande volume de resíduos analíticos deve ser evitada e o gerenciamento adequado dos resíduos analíticos deve ser providenciado.	Quantidade de resíduos	Pontuação
		0,1 g (mL)	1,00
		10 g (mL)	0,40
		25 g (mL)	0,25
		100 g (mL)	0,1
		Qualquer outro valor	$= -0,134 \times \ln$ (quantidade de resíduos em g ou

			mL) + 0,6946
8	Métodos multianalitos ou multiparâmetros são preferíveis em vez de métodos que usam um analito por vez.	Número de analitos por hora 1 10 50 70 Qualquer outro número de analitos	Pontuação 0,0 0,5 0,9 1.0 $= 0,2429 \times \ln$ (número de analitos determinados em 1 h) - 0,0517
9	O uso de energia deve ser minimizado.	Quantidade de energia por amostra <0,1 kWh 0,1–1,5 kWh >1,5 kWh	Pontuação 1.0 0,5 0,0
10	Reagentes tóxicos devem ser eliminados ou substituídos.	Doença Não são utilizados reagentes ou solventes tóxicos São utilizados reagentes ou solventes tóxicos	Pontuação 1.0 $= -0,156 \times \ln$ (quantidade de reagente ou solvente em g ou mL) + 0,5898
11	Devem ser preferidos reagentes obtidos de fontes renováveis.	Doença Nenhum reagente é aplicado ou todos são de fontes biológicas. Se alguns deles são derivados de fontes biológicas, enquanto outros não o são nenhum dos reagentes é originário de fontes biológicas	Pontuação 1.0 0,5 0,0
12	A segurança do operador deve ser aumentada.	Ameaças As ameaças que não são evitadas devem ser selecionadas da seguinte lista: • tóxicas para a vida aquática • bioacumulativas	Pontuação

• persistentes	
• altamente inflamáveis	
• altamente oxidáveis	
• explosivas	
• corrosivas	
Todas as ameaças evitadas	1,0
Uma ameaça presente	0,8
Duas ameaças presentes	0,6
Três ameaças presentes	0,4
Quatro ameaças presentes	0,2
Cinco ou mais ameaças presentes	0,0

Fonte: Adaptado de Sajid; Plotka-Wasyłka, 2022.