

OPINIÃO: Estratégias para Impulsionar o Setor Produtivo

SENAI

Revista Científica da Faculdade de
Tecnologia SENAI Roberto Mange

REVISTA **Processos
Químicos**

www.rpqsenai.org.br

Ano 17
nº 33
Jan/Jun
2023

**Diretrizes para Adquirir Conhecimento
na Era Digital**



ISSN 1981-8521

REVISTA **Processos**
Químicos

Revista Científica da Faculdade de Tecnologia
SENAI Roberto Mange



Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial

PELO FUTURO DO TRABALHO

Goiânia, v.17, n.33, ano17, Jan/Jun 2023

Sandro Mabel

Presidente do Conselho Regional do SENAI

Paulo Vargas

Diretor Regional do SENAI

Claudemir José Bonatto

Diretor de Educação e Tecnologia

Osvair de Almeida Matos

Gerente de Educação Profissional

Misclay Marjorie Correia da Silva

Diretora da Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange

Almiro Martins da Silva Neto

Supervisor Técnico

Kenia Francisca Barboza de Carvalho

Coordenadora da Área de Química

Corpo Editorial

Ademir João Camargo

Andre Luiz Simoes

Anselmo Eucana de Oliveira

Eurípedes de Almeida Ribeiro Júnior

Gilberto Lúcio Benedito Aquino

Guilherme Roberto de Oliveira

Hamilton Barbosa Napolitano

Kleber Carlos Mundim

Marcia Cibele Martins Castoldi

Maria Assima Bittar Gonçalves

Roberta Signini

Solemar Silva Oliveira

Valter Henrique Carvalho Silva



Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial

PELO FUTURO DO TRABALHO

Revista Processos Químicos / SENAI. Departamento Regional de Goiás - v.17, n.33 (Jan/Jun 2023).
Goiânia: SENAI/DR/GO. Gerência de Educação Profissional / Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange, 2023.

v.: il.

Semestral

Gerência de Educação Profissional do SENAI/DR/GO

- Capa e Diagramação: Núcleo Integrado de Educação a Distância SESI SENAI Goiás
- Revisão Linguística: Gerência de Educação Profissional SENAI Goiás

ISSN 1981-8521

1. Educação Profissional - Periódicos. 2. Processos Químicos.

I. SENAI. Departamento Regional de Goiás

CDD - 540

Tiragem: 1.500 exemplares

Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange

Av. Engenheiro Roberto Mange, n° 239

Bairro Jundiá - CEP 75113-630 - Anápolis-GO

Fone: (62) 3902-6200 - Fax: (62) 3902-6226

e-mail: revistapq.senai@fieg.com.br

ARTIGO CONVIDADO

- 09 *Aplicação dos Princípios Basilares da Ciência e do Seu Ideal como Diretrizes para Adquirir Conhecimento na Era Digital*

Hugo L. Oliveira

ARTIGOS GERAIS

- 21 *Estimativa da Área Foliar da Alface Repicada por Meio de Redes Neurais Artificiais*

Sabrina D. Oliveira, Frank F. Capuchinho, Diogo S. Sousa, Gustavo H. B. Pinheiro, Carlos E. B. Barbosa, Sueli M. F. Alves & Francisco R. de Melo

- 27 *O Entendimento Estrutural de Moléculas Orgânicas e suas Aplicações como Aditivos para Biocombustíveis*

Vitor S. Duarte & Hamilton B. Napolitano

- 39 *Fundamentos da Dinâmica Molecular Ab Initio*

Nayara D. Coutinho, Lilian T. F. M. Camargo & Ademir J. Camargo

- 49 *Biorremediação Fúngica e Estudo de Fitotoxicidade de Efluente Industrial Proveniente de Planta Produtora de Pesticidas*

Isabella C. S. Santos, Rodrigo H. Silva, Carlos E. B. Barbosa, Rafael B. Ferreira & Paula L. M. Souza

- 57 *A Influência das Queimadas na Qualidade do Ar da Cidade de Goiânia-GO*

Núbia A. Campos, Tiago G. Ribeiro & Sandro M. Pimenta

- 69 *Eficiência da Aplicação do Pó de Rocha na Fase Vegetativa da Cultura do Milho*

Kalebe K. I. Nagatani, Mouzarty S. Loreno, Rafael B. Ferreira, Sabrina D. Oliveira & Carlos E. B. Barbosa

76 ARTIGOS DE OPINIÃO

Prospectando Estratégias para Impulsionar o Setor Produtivo Privado de Anápolis: Sinergia entre Academia e Indústria

Valter H. Carvalho-Silva, Hamilton B. Napolitano, Bruno M. D'Abadia & Kleber C. Mundim

A Revista Processos Químicos (RPQ), publicada pelo Serviço Nacional de Aprendizagem Industrial (SENAI), destaca-se nos campos da Química e Engenharia Química, proporcionando um espaço de excelência para a difusão de pesquisas e avanços na área de processos químicos. Comprometida, de forma rigorosa, com a qualidade acadêmica e a inovação tecnológica, a RPQ consolida-se a cada dia como um importante espaço qualificado, unindo acadêmicos, pesquisadores e profissionais na partilha de suas descobertas e saberes. Vale ressaltar que nossa compreensão da inovação tecnológica abrange a pesquisa, o desenvolvimento e a aplicação de novas tecnologias e processos, que, por sua vez, têm o poder de revolucionar de forma profunda tanto produtos quanto serviços.

Neste trigésimo terceiro volume da RPQ, merece destaque o artigo intitulado "Aplicação dos Fundamentos da Ciência e seu Valor como Orientação para a Aquisição de Conhecimento na Era Digital". O autor argumenta de forma racional e lógica que os fundamentos da ciência clássica continuam a servir como sólidos guias na busca de conhecimento na era contemporânea. Além disso, o artigo intitulado "Compreensão da Estrutura de Moléculas Orgânicas e seu Potencial como Aditivos em Biocombustíveis" enfatiza a crescente escassez de recursos naturais como uma ameaça global que afeta a sustentabilidade dos sistemas econômicos. Para superar esse desafio, a estabilidade dos biocombustíveis emerge como uma barreira a ser transposta, e soluções como o uso de aditivos estão sendo objeto de extensa pesquisa. Os artigos desse volume proporcionam uma leitura edificante para um público diversificado, desejoso por explorar essas temáticas de relevância tecnológica.

Hamilton B. Napolitano
Editor da Revista Processos Químicos

Aplicação dos Princípios Basilares da Ciência e do Seu Ideal como Diretrizes para Adquirir Conhecimento na Era Digital

Hugo Luiz Oliveira

Neste artigo, o autor sustenta que os princípios basilares da ciência clássica constituem guias seguros para a apreensão de novos conhecimentos na era contemporânea. Esta concepção advém de uma reflexão sobre o conceito de ciência amparada em acontecimentos históricos que forjaram a civilização ocidental e o seu modo de pensar a realidade visando a busca pela verdade. Um dos resultados dessa atividade foi o desenvolvimento de um método para obter novos conhecimentos apoiados em três pilares: teoria, experimentação e simulação. Embora existam desafios próprios da era atual, os cientistas contemporâneos podem sempre pautar suas atividades nos bens transcendentais clássicos.

Palavras-chave: *modelos matemáticos; sentido teleológico; experiência cognitiva.*

In this opinion piece, the author advocates the basic principles of classical science as safe guides for the apprehension of new knowledge in the contemporary era. This opinion emerges from a thinking about the concept of science supported by historical events that forged Western civilization, its way of thinking reality aiming at the search for truth. One of the outcomes of this activity was to develop a method of obtaining new knowledge based on three pillars: theory, experimentation and simulation. Although there are challenges peculiar to the present era, contemporary scientists can always base their activities on classical transcendentals.

Keywords: *mathematical models; teleological sense; cognitive experience.*

Introdução

As revoluções científicas das últimas décadas fizeram com que um fato inovador acontecesse na história humana: nunca foi tão rápido obter uma informação. O acesso a redes de alta velocidade e a dispositivos de conexão cada vez mais velozes fizeram com que a comunicação intercontinental pudesse ser feita de maneira instantânea. Entretanto, tamanha cadência e imediatez sugere a existência de um impasse, porque a capacidade humana de apreensão de informação e formação do conhecimento é limitada. Além disso, como alguém que busca o conhecimento deve se orientar em meio à vasta quantidade de informações disponíveis? Como separar conhecimentos verdadeiros e profundos daqueles falsos ou superficiais? Quais seriam os critérios corretos para julgar se determinado conhecimento é ou não pertinente? Perguntas como estas se manifestam sempre que alguém pesquise por uma simples informação nos meios digitais. Mas neste artigo, busca-se trazer luz a estes questionamentos sob o ponto de vista do cientista; ou ainda, de todo aquele que esteja em busca de um conhecimento genuíno sobre um assunto que lhe interesse.

O argumento central da concepção do presente autor é que os princípios que guiaram as investigações acerca da realidade no período da ciência clássica (situado entre os séculos VII a.C e VI d.C) continuam a ser relevantes na era atual. Esses princípios foram cunhados a partir de uma atenta investigação da estrutura da realidade, bem como dos modos gerais que lhe são aplicáveis, ou transcendentais do ser: o bem, a verdade e a beleza. Apesar de os três estarem profundamente interligados, os conceitos de verdade e bem receberão maior destaque ao longo deste artigo.

Os argumentos acessórios que compõem o entendimento do autor serão desenvolvidos ao longo das próximas seis sessões. Na Sessão 2, será apresentada uma breve perspectiva histórica do que o ato de conhecer significou ao logo do tempo, segundo autores de reconhecida expertise. É possível notar que, embora tenha havido visões históricas distintas, há elementos comuns que podem ser explicitados sob a forma de princípios, o que é descrito na Sessão 3. Alguns desses princípios possuem

aspectos que podem ser quantizados, organizados e interrelacionados, dando origem aos métodos matemáticos de conhecimento, conforme discutido na quarta sessão. Essa maneira algorítmica, numérica, de fazer ciência cresceu em relevância e profundidade com o advento dos computadores na segunda metade do século XX fazendo com que a ciência, ao lado da teoria e experimentação, se apoiasse em um novo pilar: a simulação (Sessão 5). Em seguida, a sexta sessão retoma os princípios que fundamentam o conhecimento e que podem ser aplicados mesmo em âmbitos matemáticos. Como forma de alertar o cientista sobre fatores que podem atrapalhar a sua busca genuína pelo conhecimento, a sétima sessão destaca alguns desafios a serem superados no âmbito da formação. O texto se encerra com conclusões e apontamentos para reflexões mais profundas.

Breve Histórico Sobre a Evolução do Significado do Termo Ciência

Desde os primórdios da história da filosofia, o ser humano anseia por descobrir o sentido (a razão de ser) das coisas que existem à sua volta. A busca pelo conhecimento nasce desta inquietação de desvendar a realidade, partindo da hipótese de que tudo que existe tem um logos, um sentido ou propósito de ser. Ademais, tudo aquilo que tem sentido pode ser conhecido, ou apreendido, e essa é uma atividade essencial daquele que busca conhecer, elucidar questões e evidenciar padrões.

Protágoras afirmava que o “ser humano é a medida de todas as coisas”, ou seja, o conhecimento deveria ser visto como algo puramente subjetivo e dependente da experiência pessoal tornando-o totalmente mutável. Heráclito, por sua vez, sustentava que “ninguém pode entrar duas vezes no mesmo rio, pois quando nele se entra novamente, não se encontra as mesmas águas, e o próprio ser já se modificou...”. Deste modo, para o autor, tudo flui, nada persiste ou permanece; o conhecimento seria algo sempre em estado de mudança, um eterno vir a ser, aquilo que fosse percebido como verdadeiro seria mutável. Este pensamento foi confrontado por

Parmênides afirmando que “o que é, é; o que não é, não é”. Isto implica em admitir que nas realidades que existem no mundo há coisas que são permanentes e coisas que não são. Além disso, aquilo que fosse conhecido como verdadeiro não poderia sofrer mudanças.¹⁷

Sócrates, dialogando com Teeteto,¹ aponta que a filosofia genuína nasce a partir do encantamento do filósofo pela realidade. O conhecimento (intimamente ligado à atividade filosófica) se referiria à tentativa de compreender a riqueza das interrelações, conexões, dependências, encadeamentos sucessivos de eventos que o universo possui. Algo sabidamente tão grandioso que escaparia à finitude existencial daqueles que buscam o conhecer e que tem suscitado o interesse da humanidade desde as mais remotas épocas até o presente. Com o intuito de tornar a busca do conhecimento mais acessível, foram criadas as disciplinas filosóficas, tais como: Lógica, Retórica, Política, Ética, Metafísica, Astronomia e as Ciências da Natureza.

Platão, em sua Teoria das Ideias, ou Teoria das Formas, sugeria que o conhecimento verdadeiro repousava em realidades unas, inalteradas, inteligíveis e perfeitas, porém para além do mundo concreto, o chamado mundo dos sentidos. Deste modo, as realidades existentes no mundo material seriam nada mais que cópias imperfeitas daquelas existentes no mundo ideal, e, portanto, o conhecimento verdadeiro não poderia ser reduzido às coisas em si mesmas. A ciência verdadeira seria uma busca mais profunda pelo conhecimento de tudo aquilo que é universal e necessário; e para Platão esse conhecimento viria do mundo das formas abstratas e perfeitas.²

Aristóteles introduziu uma maneira de investigar mais moderada, a chamada teoria hilemorfista (do grego *hylé* que significa matéria e *morphé* que significa forma). Com esta teoria, Aristóteles concilia, corrige e expande várias ideias materialistas sustentadas pelos investigadores pré-socráticos e o idealismo platônico, aquilo que de certo modo representava todo o conhecimento até

aquele então. Segundo esta teoria, todos os indivíduos existentes (entes) são constituídos de matéria e forma. Ao perceber um ente, a mente humana é capaz de apreender uma imagem constituída pela forma que este ente tem, porém sem sua matéria. A partir desta forma, o intelecto entra em ação e abstrai os vestígios da matéria isolando a forma, aquela mesma existente no ente, dando origem ao conceito.³

Aristóteles sustentava que antes de emitir um juízo sobre qualquer assunto seria necessário fazer a correta distinção entre aquilo que uma coisa efetivamente é, e aquilo que são suas qualidades (predicativos). Essas diferentes maneiras de se olhar para um mesmo assunto ficaram explicitadas pelo conceito das categorias: substância, quantidade, qualidade, relação, lugar, tempo, posição, posse, ação e paixão. Note que estas operações são espontâneas, no sentido de que, qualquer pessoa gozando de plenas capacidades cognitivas consegue notar a diferença entre perceber o que uma maçã é (substância), perceber quantas maçãs estão em cima da mesa (quantidade), por exemplo. Além disso, para explicar qualquer elemento na realidade seria necessário fazer a correta distinção entre a natureza ou essência deste elemento (causa formal), o impulsionador que produz o elemento (causa eficiente), o propósito ou sentido do elemento (causa final) e o meio, ou substrato pelo qual o elemento se realiza (causa material). Deste modo, para Aristóteles, ter conhecimento, ou a ciência de algo, significaria ser capaz de produzir um conceito adequado, universal e necessário, e elucidar as suas causas e seus predicáveis. Note que, essencialmente Aristóteles afirma que a fonte do conhecimento está nas coisas em si, tais como experienciadas e percebidas habitualmente por qualquer pessoa.⁴ Esta perspectiva realista (assentada na realidade) se baseia no fato de que a essência (forma) dos entes existe, se sustenta, pode ser provada, e não se trata de um simples artefato da mente, ou uma opinião avulsa. Esta maneira de apreender conhecimento perpassa toda a idade antiga e atinge seu auge na idade média com o

surgimento da Escolástica, tendo Agostinho de Hipona, Tomás de Aquino, Alberto Magno, Hugo de São Vitor, entre outros, como seus principais pensadores.⁵

Com o advento da modernidade, Descartes, no século XVII, propõe uma maneira de conhecer totalmente distinta da que havia no tempo antigo e medieval. Se antes a unidade do conhecimento estava na coisa conhecida em si, comprovada pela experiência e evidenciada pelos sentidos, agora com Descartes, essa unidade passaria a ser questionada porque os sentidos não seriam totalmente confiáveis como meios de aquisição de conhecimento. Essa maneira de pensar advinha do ceticismo vigente em sua época, de que as essências não existiam ou não poderiam ser conhecidas. Não haveria, portanto, fundamento absoluto para qualquer conhecimento universal e necessário. Tudo seria questionável, com a exceção de uma, o “eu” que pensa: “Penso, logo existo” – *cogito, ergo sum* –.⁶ Portanto, se tudo é questionável, ou duvidoso, então a ciência verdadeira seria aquela obtida pelo método proposto por Descartes: a dúvida metódica. Mas havia um ponto obscuro na teoria cartesiana: o que garantiria que o “eu” pensante também não fosse questionável, duvidoso? A resposta de Descartes dá origem ao seu dualismo metafísico, que presumia a existência de uma realidade suprema (deus) que trazia o ser pensante à existência infundindo neste o conhecimento de si próprio. Além de ser cético, este modo de obter conhecimento não precisaria recorrer aos sentidos e à experiência. Entretanto, Descartes não conseguiu extinguir completamente a necessidade de existência de um ser universal e absoluto.

David Hume, no século XVII, apresenta o seu empirismo radical e ceticismo filosófico, em que o conhecimento poderia ser obtido apenas até onde as percepções permitissem, e nada mais.⁷ Kant influenciado por ideias cartesianas e humeanas apresenta o seu dualismo: parte do conhecimento deriva da experiência, mas não todo ele. Para Kant, o conhecimento

verdadeiro residia em entes abstratos inapreensíveis pelos sentidos: o tempo e o espaço.⁸ Assim, esses dois elementos, embora não possam ser tocados, vistos, nem experienciados de nenhuma maneira, ao mesmo tempo, não podem ser apenas um produto da mente humana. Nota-se aí uma depreciação da metafísica e da filosofia como ciência, e um enaltecimento da Matemática e da Física Newtoniana como ciências genuínas. O efeito seria que o conhecimento, logo a ciência, seria apenas aquilo que se submetesse aos crivos do método científico físico-matemático confinados na categoria do espaço e do tempo, apenas aquilo que pudesse ser medido, formulado e experimentado. Quanto à verdade, justiça, beleza, bondade, economia, política, entre outros não obedeciam a estes critérios, e, portanto, não poderiam ser chamados de ciência. Outros pensadores seguem nessa linha de raciocínio, o que dá origem ao movimento idealista de ciência, em que o sujeito cognoscente é quem cria percepções da realidade. O sujeito, e todas suas limitações, é tratado como fundamento do conhecimento, ou construtor do conhecimento, e não mais a realidade intrínseca das coisas, que em última instância não pode ser conhecida. Segundo essa visão as coisas mesmas não poderiam ser conhecidas, mas apenas suas representações no interior do sujeito e nada mais.

No século XIX, o positivismo se instalou na Europa. Essa concepção de ciência se afasta da necessidade de fundamentos universais e absolutos e se concentra exclusivamente em fatos empíricos. Especulações e ideias que não possam ser demonstradas seja por fórmulas matemáticas, seja por experimentos de laboratório, nos estilos da matemática e da física newtoniana, passam a ser tratadas como não ciência. O conceito de conhecimento ganha um novo predicativo e se torna: conhecimento científico. Segundo essa perspectiva cientificista, todo conhecimento precisaria ser revisto, matematizado, demonstrado experimentalmente, não apenas por uma, mas por várias pessoas, e só então

adquiriria o status de conhecimento científico. Vale ressaltar que as *verdades científicas* começam a perder o significado de *verdades universais e absolutas* (inexistentes, na perspectiva científicista), e passam a ser apenas constatações provisórias e questionáveis. Uma determinada teoria, ou conceito, é verdade até que surja um fato novo que faça com que esta verdade, ou conceito, precise ser revisto e aprimorado.

Observe que a perspectiva científicista deixa de fora vários tipos de conhecimentos que são inquestionáveis para a vida humana, tais como aqueles adquiridos nas disciplinas do Direito, História, Psicologia, Teologia, Arqueologia, entre outras. O motivo é que o objeto de estudo destas disciplinas não é redutível a níveis experimentais. Suas interligações estão numa esfera da realidade muito maior e mais complexa que não pode ser desconsiderada, sob pena de se obter conclusões errôneas sobre os fatos observados. Nesse cenário, Dilthey, reconhecendo a grandeza do método científico, propõe uma maneira de pacificar os conflitos sobre o estatuto de cientificidade do conhecimento.⁹ Ele sugere a distinção entre ciências naturais, em que o conhecimento visa explicar as causas dos fenômenos naturais (causalidade), e ciências humanas, em que o conhecimento busca compreender as causas dos fenômenos humanos (hermenêutica). Note a distinção entre explicação e compreensão. As ciências de cunho explicativo conseguem reduzir satisfatoriamente seus objetos de estudo a apenas seus aspectos físicos, matematizáveis, quantizáveis. As ciências de ordem compreensiva não conseguem reduzir seus objetos de estudos somente a seus aspectos físicos; não é possível isolar seus objetos de seus meios e circunstâncias; é preciso abarcar, compreender o todo. Embora sejam tipos distintos de conhecimentos, quanto a seus objetos e métodos de investigação, são ambos pertinentes, válidos e necessários.

Este histórico das diversas maneiras de se enxergar a ciência e conhecimento, longe de ser exaustivo,

permite retirar um ensinamento importante válido para todo aquele que busca conhecer algo, e, portanto, um cientista, mesmo que não profissional. É preciso que o aspirante ao conhecimento tenha muito claro diante de si quais as questões que se busca responder e quais os métodos corretos que serão empregados para tal. Para além disso, o fato comum ao longo de todas as épocas é que conhecimento genuíno advém da busca honesta e sincera pelas verdades não evidentes que subjazem a realidade. E para esta empreitada, é preciso que se saiba quais são os princípios que fazem com que uma ciência seja uma ciência, e não outro modo qualquer de conhecer.

Princípios Basilares do Conhecimento Científico

Pode-se afirmar que, na modernidade, a maioria das pessoas que exercem atividades científicas possuem conhecimentos dos preceitos do método científico. Esse método é reconhecido e aceito como um caminho seguro de investigação para a descoberta de verdades científicas. Embora seja frequente se deparar com exímios praticantes do método científico, é inabitual encontrar cientistas que conheçam os fundamentos cognitivos que sustentam a validade do método científico, ou quais seriam suas limitações e seus pressupostos, ou ainda, qual seria a diferença entre um conhecimento científico para outros tipos de conhecimentos. Pode-se dizer que o conhecimento científico não é uma opinião qualquer, mas sim, uma opinião demonstrável (seja por dedução seja por indução). Para que a demonstração seja válida, é preciso que se atente a cinco princípios.¹⁰

Primeiro princípio: existência de conhecimento evidentes. Esse princípio é plasmado nos clássicos princípios da Lógica de Aristóteles, a saber:¹ princípio da identidade (A é igual a A),² princípio da não-contradição (é impossível que A seja A e não- A ao mesmo tempo) e ³ princípio do terceiro excluído (A é x , ou não- x , não há uma terceira possibilidade). Note que estas noções são evidentes (conhecimentos que não carecem de demonstração) e pressupõem a intuição (capacidade

humana de apreender as evidências). Se não houvesse conhecimentos evidentes e intuição, toda verdade dependeria de uma cadeia sucessiva e infinita de outras verdades, tornando o ato de conhecer impraticável ou impossível. Entretanto, a existência de verdades evidentes não basta para fundamentar uma ciência porque existem verdades que não são evidentes, e que requerem provas (demonstrações).

Segundo princípio: existência de provas (evidências indiretas). A prova é o resultado de uma sequência de raciocínios em que se tomam determinados conhecimentos *a priori* (premissas) e tenta-se chegar a conclusões. Observe que a maneira de condução desses raciocínios é provida pela Lógica, que em si não é uma ciência, mas sim um instrumento. Tanto as premissas quanto as conclusões dependem da capacidade de se reconhecer a identidade de cada premissa e conclusão. No fundo, as conclusões são não mais que explicitações daquilo que já estava contido implicitamente nas premissas. O objeto da Lógica (arte do pensar bem) é a Silogística.

Terceiro princípio: a autoevidência da conexão lógica entre os conhecimentos. A ligação entre uma evidência direta (ou indireta) e outra precisa ser imediata por si mesma. Não pode ser uma conexão lógica, mas sim intuitiva. Isto porque se a conexão fosse do tipo provada, então ela necessitaria de outra conexão igualmente provada até que se chegasse a uma conexão primeira (não provada), portanto autoevidente. Logo encadeamento das verdades descobertas precisa ser evidente. Vale lembrar que o que é evidente para uns pode não o ser para outros. Conhecimentos evidentes para matemáticos não são necessariamente evidentes para médicos ou historiadores, e vice-versa. A capacidade de enxergar as evidências pressupõe formação e treinamento nas respectivas áreas do saber em que se tenha interesse de atuar.

Quarto princípio: repetibilidade do ato intuitivo. É necessário que duas pessoas distintas estudando um mesmo aspecto, de um mesmo objeto, apreendam a mesma

evidência (direta ou indireta). Esta repetibilidade deve ser garantida para além do tempo (independente do instante no passado, presente ou futuro que o cientista esteja) e para além do espaço (independente do lugar geográfico o cientista se encontre). Note que esse princípio precisa ser garantido mesmo nos equipamentos de observação que o cientista opere. Daí surge a necessidade da criação de padrões de medida, calibrações, tolerâncias, tudo a fim de garantir a repetibilidade da experiência cognitiva. Esta talvez seja uma das maiores fontes de divergências dentre de uma comunidade de estudiosos sobre um determinado assunto.

Quinto Princípio: registro da experiência cognitiva. O registro, organização, ordenamento e estruturação de todos os atos intuitivos é essencial para a elaboração do saber. Sem esse registro, torna-se impossível tanto a transmissão das informações entre as gerações quanto a evolução do saber para o próprio cientista. Esta ação pressupõe atitudes profundamente reflexivas e analíticas por parte do cientista de modo a depurar as apreensões genuínas das meras superficialidades.

Esses princípios podem ser empregados na construção do *edifício do saber* nas mais variadas disciplinas do conhecimento. A cada conhecimento (ou sua expressão por meio da linguagem falada ou escrita) pode ser dado um grau de credibilidade: poético, retórico, dialético e lógico. Assume-se que nenhum conhecimento verdadeiro parta de premissas falsas. Portanto, as premissas podem ser possíveis (há uma chance de serem verdadeiras) ou necessárias (são verdadeiras), e as conclusões podem ser verossímeis (têm a aparência de serem verdadeiras) ou necessárias (são verdadeiras). O nível poético trata da ordem do possível, parte de premissas possíveis para chegar a conclusões verossímeis. Neste campo se encontram a poesia, ficção, fantasias e correlatos. O nível retórico parte de premissas necessárias para chegar a conclusões verossímeis. Neste campo se encontram os conhecimentos que mobilizam as crenças pessoais e coletivas; eles apontam as decisões mais adequadas a serem tomadas dado um conjunto de

verdades conhecidas. O nível dialético parte de premissas possíveis para chegar a conclusões necessárias. Neste caso, tenta-se aferir a razoabilidade das crenças ou das hipóteses em questão submetendo-as a uma série de testes de prova, ou depuração. O nível lógico parte de premissas necessárias e chega a conclusões necessárias. Trata-se do conhecimento em seu grau mais elevado de certeza; não há mais discussões, há apenas a demonstração linear que parte de premissas verdadeiras e se chega a conclusões que não podem deixar de serem certas.¹¹

O cientista deve buscar os conhecimentos lógicos olhando para a realidade, mas sem perder de vista a incapacidade humana de depurar por completo todos os fatores que possam influenciar esses mesmos conhecimentos. É preciso reconhecer ser impossível conhecer tudo o que há para se conhecer, em seus mínimos detalhes, tomando em conta o nexos entre eles, sua ordenação, proporção e harmonia. Apesar disso, é possível conhecer muito. E uma maneira exitosa de conhecer consiste em fixar a atenção em aspectos do objeto a ser conhecido, como por exemplo, as atividades desenvolvidas pela Matemática.

A Proposição de Modelos Matemáticos como Forma de Inteligir a Realidade

Os modelos matemáticos são ferramentas essenciais para a simulação de comportamentos, entendimento de padrões e até mesmo projeto de artefatos. O propósito dos modelos matemáticos é servir de representação simplificada da realidade mimetizando as características relevantes do sistema sob estudo. Esses modelos são a translação dos fenômenos observáveis que ocorrem no mundo real para o mundo conceitual. Quanto à maneira com que são elaborados, há duas categorias em que os modelos matemáticos podem ser divididos: modelos teóricos e modelos experimentais.

Os modelos matemáticos teóricos (ou *white-box*) são baseados em equações matemáticas obtidas a partir de princípios fundamentais da Física, Química, entre outras,

por exemplo: lei de Newton, lei de Hooke, leis de Ohm, lei de Bernoulli, conservação de massa e energia. Pode também haver equações derivadas de observações fenomenológicas, que ainda não são entendidas como princípios, mas que se mostram relevantes na prática (equações constitutivas e demais relações empíricas). As equações expressam a relação entre variáveis, que por sua vez representam o estado do sistema observado. Os princípios gerais normalmente estabelecem a maneira pela qual essas variáveis podem se alterar, e assim dar origem a novos estados do sistema.

Os modelos matemáticos experimentais (ou *black-box*) são baseados em medidas experimentais. Diferentemente do caso anterior, o modelo matemático do sistema é construído a partir de numerosos conjuntos de medições, cada uma registrando a resposta do sistema de interesse (saída) para um dado estímulo ou perturbação (entrada). Estes modelos são úteis quando os princípios que regem o sistema não estão suficientemente claros ou mesmo são desconhecidos. Uma vez que este tipo de modelo é produzido para um dado conjunto de dados, automaticamente sua aplicação fica restrita a situações contidas, ou suficientemente próximas, deste mesmo conjunto de dados. Extrapolações de cenários costumam ser desaconselhadas nesses casos.

Seja qual for o tipo de modelo matemático empregado, o seu nível de credibilidade é dado pelo grau com que os estados previstos se confirmam com a realidade. A referência sempre é a realidade observável. Quão mais próxima da realidade, precisa e repetível uma resposta se mostra, mais confiável o modelo se torna. Naturalmente, cenários observados na realidade que não estão contemplados no modelo fazem com que o mesmo precise ser revisto. Isto se deve ao fato de que os modelos matemáticos são capazes de abarcar apenas os aspectos quantizáveis da realidade, e não a totalidade da realidade; que está para além das medições (substância, qualidade, relação, lugar, posse, ação, paixão). Portanto, modelos matemáticos, embora possam representar de forma satisfatória muitos aspectos da realidade, nunca serão capazes de substituí-la. Sempre haverá um nível de imperfeição nos modelos, e, portanto, no conhecimento obtidos a partir deles. Mas, isto não significa que os modelos sejam inúteis. Pelo contrário, esta limitação

justifica o emprego de tolerâncias em diversos níveis que, no fundo, manifestam o grau aceitável de imprecisão. Esses graus são ditados pelas aplicações a que os modelos se destinam. Esta deve ser uma constatação presente na mente dos cientistas.

Embora os modelos matemáticos acompanhem o desenvolvimento da humanidade em paralelo com a História, foi a Geometria, e posteriormente, a Álgebra (consequentemente o Cálculo) que elevaram o seu nível de aplicabilidade a partir do século XVI. Por cerca de quatro séculos, esta aplicabilidade era limitada à capacidade humana de cálculo, já que todos os resultados precisavam ser obtidos manualmente. Esta limitação seria reduzida com a invenção de máquinas de computo, ou *computadores*, no século XX. Esta invenção fez com que os modelos matemáticos pudessem ser levados às suas capacidades preditivas máximas por meio de cálculos automáticos. Surge então o uma nova técnica para obter conhecimento auxiliada por máquinas de processamento, a chamada *técnica computacional*.

A ASCENSÃO DA SIMULAÇÃO AO STATUS DE TERCEIRO PILAR DA CIÊNCIA MODERNA

Nos dias atuais, os cientistas consideram que as técnicas computacionais, ou simulações, são o terceiro pilar da ciência moderna, ao lado da teoria e da experimentação.¹⁹ A Figura 1 ilustra o arranjo dos três pilares como meio para obter novos conhecimentos nas ciências práticas e tecnológicas. Considere o exemplo específico das ciências naturais, em que se quer compreender como um determinado poluente se propaga no oceano. O primeiro pilar (Teoria) consistiria na proposição de modelos e teorias em que os cientistas elaboram modelos matemáticos complexos para prever a difusão de poluentes em meios aquosos. O segundo pilar (Experimento) os cientistas propõem experimentos (provas de conceito) realizáveis sob condições controladas (laboratórios) para verificar a validade dos modelos formulados no primeiro pilar. Uma vez validado, o modelo matemático é então implementado em um computador de forma a gerar um *modelo mímico virtual* que forneça resultados tão precisos quanto

possíveis da dispersão do poluente no meio físico real, constituindo o terceiro pilar (Técnica Computacional).

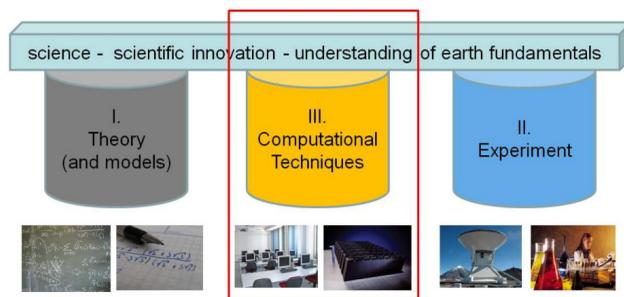


Figura 1. Os três pilares fundamentais da ciência computacional tradicional.¹⁹

Essas três vias de obtenção do conhecimento não devem ser vistas como adversárias, mas sim como complementares. Esta sinergia, que historicamente se originou nas áreas da Matemática, Física e Química, posteriormente se expandiu largamente para outras disciplinas menos óbvias como economia, biologia ou neurociência. Esses três pilares também são largamente utilizados nas engenharias, que fazem uso dos modelos para prever o comportamento de artefatos que ainda sequer existem. Neste sentido, não é surpreendente que num curso de engenharia (civil, mecânica, elétrica, química, bioquímica, etc), a maior parte do tempo de formação dos alunos seja dedicada à familiarização com os modelos (específicos da área) e suas respectivas técnicas de solução. Esse conhecimento servirá como guia para tomada de decisões em momentos posteriores.

Embora reconhecidamente relevantes e necessárias, o cientista precisa ter em mente que todas as informações providas pelos três pilares da ciência moderna não significam conhecimento da realidade em sua totalidade. Há sempre um grau de imperfeição ou uma limitação. Basta lembrar que os modelos computacionais, por mais complexos que sejam, são mimetizações dos sistemas reais (apoiados apenas nos seus aspectos quantizáveis) e não o sistema em si mesmo. Em última instância, o cientista deve avaliar as respostas que os modelos fornecem e julgar se há coerência ou não. Os critérios para este julgamento advêm do nível de familiaridade e expertise que o cientista

(ou analista) possui, além da capacidade de avaliação dos recortes da realidade em que os modelos se inserem.

O Desafio na Formação de Cientistas

Todo e qualquer processo de educação pressupõe um modelo, uma referência, um ideal, a ser buscado. Trata-se, portanto, de responder à pergunta “que tipo de ser humano se espera obter ao final do processo de educação?”, aqui entendida como educação científica. Conforme discutido na Seção 2, esse ideal do ser conhecedor passou por várias mudanças ao longo da história. Em cada época, à medida que os valores e as concepções de vida em sociedade foram se alterando, foi preciso atualizar a resposta para esta pergunta. Voltando o foco para a época atual, em vigora a produção e propagação de informações em alta velocidade, o processo de formação não é menos desafiador que sempre foi, mas precisa lidar com situações distintas daquelas do passado. Um reflexo do quadro atual pode ser alcançado por meio de quatro desafios, não exaustivos e não exclusivos.

Um primeiro desafio envolve as relações interpessoais. Por mais técnica que uma formação científica seja, ela se dá por meio de interações humanas, em especial entre os dois agentes: orientador e orientando. Trata-se de um compromisso mútuo. O orientador assume o papel de conduzir o orientando do seu estado atual até a plena autonomia científica. O orientando, por sua vez, assume a disposição em ser guiado por esse processo com diligência. Esse caminho de formação é eminentemente individualizado e pressupõe uma proximidade e respeito mútuo. O desafio se mostra nesta era cada vez mais digital, em que as relações interpessoais estão gradativamente sendo substituídas por relações virtuais, logo distantes. Para além disso, é comum a sobrecarga de atividades tanto por parte de orientadores quanto orientandos. Orientadores por vezes precisam acumular atividades de ordem administrativa, docentes, representativas, políticas, familiares, pressões por publicações, etc. Orientandos precisam conciliar atividades em disciplinas desconexas, com alto grau de profundidade e

especialização, busca por altos índices de aproveitamento a fim não perderem as bolsas (se as tiverem), etc., além de conduzirem suas próprias pesquisas. O resultado é que muitas vezes os orientandos acabam tendo pouco contato com seus orientadores, e por vezes, apresentam desempenho inadequado frente às responsabilidades que o aguardam. É preciso encontrar um ponto de equilíbrio, um justo termo que envolva um adequado nível de relação interpessoal entre esses agentes, apesar de todas as solicitações externas. Mesmo que os meios digitais possam tornar as comunicações mais cômodas, é necessário garantir que essas interações sejam tão efetivas e fecundas quanto possível.

Ainda nesta linha, outro ponto que merece atenção é que em tempos de múltiplas conectividades promovidos por redes sociais digitais, o aspirante a cientista deve compreender o fato de que os estudos e as reflexões são atividades eminentemente solitárias. Isto não quer dizer que o cientista deve se isolar do convívio social numa espécie de monacato. Ao contrário, deve-se sempre manter o contato com a realidade e com as circunstâncias de seu tempo, interagir com grupos locais, regionais, nacionais e estrangeiros. Isto é salutar. Mas, é preciso que se reserve um tempo para desenvolver e aprimorar as habilidades dialéticas; diálogos estes que serão mediados por textos (livros, artigos, teses, dissertações, entre outros). Neste sentido, o hábito da leitura seja em língua materna, seja em língua franca, é primordial. O cientista é chamado a desenvolver sua capacidade de perceber um mesmo assunto por diversos ângulos de vista, muitas vezes de forma multidisciplinar (por dois ou mais ângulos de vista simultâneos); estar apto a perscrutar os assuntos em diversos níveis e graduações a fim de identificar onde, e qual a melhor forma de contribuir. O cientista deve despertar em si a vontade genuína de buscar a verdade onde quer que ela apareça, sendo capaz de identificar em si mesmo os conhecimentos que lhe faltam para alcançar estas mesmas verdades, se tornar um autodidata por excelência.

O terceiro ponto está em linha com o que Ortega y Gasset,¹⁵ já na década de 1940, alertava para o problema originado pela especialização excludente (ou de massa).

Ao se distanciar da busca da unidade do conhecimento, as instituições de ensino estavam desintegrando as disciplinas e transformando-as cada vez mais numa multiplicidade de técnicas e especialidades. Como essas técnicas e especialidades seriam cada vez mais desconexas entre si, o resultado seria a formação de conhecedores que saberiam muito sobre muito pouco, ou saberiam tudo sobre quase nada; o que se evidencia como um paradoxo. O autor chama esses conhecedores de bárbaros modernos. Esse termo designaria os técnicos e especialistas que tiveram formações muito estritas, e, portanto, não tiveram a chance de abranger aspectos fundamentais da vida humana que estão para além do âmbito profissional, por exemplo, os valores fundamentais, o sentido e a moralidade das ações, a formação e a contribuição para o bem comum da sociedade; uma formação humanista abrangente. A consequência desse tipo de formação seria lançar no mercado de trabalho um conjunto de *bárbaros modernos* que estão dispostos a colocar seus serviços em prol a qualquer causa. Allan Bloom¹⁶ chega inclusive a encontrar relações entre a decadência da formação superior e as faltas morais em ascensão na sociedade. É preciso que não se perca de vista que o cientista de profissão é, antes de tudo, um ser humano, e, portanto, deve orientar suas ações de forma a promover os bens supremos e universais tais como a verdade, a justiça e o bem comum. Isso implica que o cientista deve buscar esses princípios, mesmo que as instituições de ensino não os ofertem. Evidentemente, esses apontamentos se aplicam para quaisquer outras profissões.

O último ponto envolve a definição do tema de pesquisa. Por mais simples que possa parecer este aspecto é primordial para a formação do cientista. Na perspectiva clássica, a definição é composta por dois elementos: gênero próximo e diferença específica. O desafio atual consiste exatamente em identificar esses dois elementos, frente às inúmeras publicações, em numeráveis áreas. É preciso identificar o que ainda não foi descoberto e que mereça atenção e esforço. Além disso, o tema precisa ser de interesse tanto para o aluno, para o orientador, para a instituição e para a ciência como um todo. Se houver falta de interesse em qualquer uma destas instâncias, a atividade científica correrá o risco

de não ser levada adiante, e consequentemente atrapalhar o processo de formação do cientista. A falta de cuidado na especificação do tema pode levar a repetições de pesquisas já realizadas e consequente mau uso de tempo e recurso. Não é raro que a especificação do tema atenda a interesses de diversos âmbitos: comerciais, políticos, tecnológicos, públicos, privados, regionais, internacionais, climáticos, ambientais, etc. Independente das motivações, é necessário que a proposta de investigação seja consistente, coerente, meritosa e busque a verdade e o bem. Assim, o cientista em formação terá contato com bons princípios de investigação que serão primordiais em suas atividades futuras.

Conclusão

No presente artigo, foi sustentado o entendimento de que os princípios que guiaram as investigações acerca da realidade no período da ciência clássica ainda são importantes e relevantes para a era atual. Este entendimento foi obtido a partir da análise histórica da evolução do conceito de ciência buscando extrair os princípios subjacentes que guiaram as investigações filosóficas e científicas. Estes princípios, em última análise, levam aos conceitos universais do bem e da verdade e se mostram ser caminhos sólidos para orientar a busca pelo conhecimento.

A partir desta constatação, foi discutido como a figura dos três pilares da ciência (teoria, experimentação e simulação) são uma transmutação daqueles princípios em forma de método, que pode ser aplicado em diversos âmbitos da realidade. Esta ação propiciou avanços extraordinários na tecnologia (medicina, engenharia, computação, etc.), em particular a partir do século XX.

Esse movimento de ascensão tecnológica tende a induzir as instituições de ensino a formar cientistas extremamente especializados. A especialização em si é algo positivo e meritório que propiciou o ganho de qualidade de conhecimento em várias áreas. Entretanto, é importante que o cientista, ao se especializar, não perca de vista outras áreas do conhecimento de suma importância para a vida humana em sociedade. Não se deve deixar de apreender os elementos da cultura que promovem o bem, a verdade e a beleza. Cultivar aspectos essencialmente humanos, para

além da técnica, faz com que o cientista tome consciência do seu papel primordial e oriente suas investigações de maneira reta e efetiva, respeitando os limites éticos e morais inerentes a todas as atividades.

Ao expressar o presente pensamento, o autor não teve a intenção de apresentar uma ideia definitiva e exaustiva do que é o conhecimento e a ciência, mas sim, de incentivar o leitor a refletir sobre estas questões e se voltar para os princípios discutidos, fomentar a busca por verdades cada vez mais profundas e profícuas, e aplica-las em suas atividades investigativas profissionais (ou não) com rigor prudente e ordem.

RESSALVAS

Todas as opiniões, hipóteses, conclusões ou recomendações expressas neste artigo são de responsabilidade do autor e não necessariamente refletem a visão da instituição ao qual esteja afiliado.

Referências

1. PLATÃO. *Teeteto*. 3ª. Lisboa : Gulbenkian, Fundação Calouste, Trad. de Adriana Manuela Nogueira e Marcelo Boeri, **2010**.
2. PAUL, NATORP. *Teoria das ideias de Platão: uma introdução ao idealismo*. São Paulo : Paulus, **2012**. Vol. 1 e 2.
3. CONTARATO, THIAGO SEBASTIÃO REIS. Hilemorfismo comum e o movimento substancial de geração e corrupção. *Aquinate*. **2017**, Vol. 31, pp. 46-60.
4. REALE, GIOVANNI. *Metafísica de Aristóteles*. 5ª. São Paulo : Edições Loyola, **2002**.
5. GUERIZOLI, RODRIGO. Hilemorfismo, essência e definição: Acordos e desacordos do debate medieval. *Analytica*. **2012**, pp. 67-84.
6. DESCARTES, RENÉ. *O discurso do método*. 2ª. São Paulo : Martins Fontes, **2001**.
7. STIVAL, MONICA LOYOLA. *Subjetividade Espaço E Tempo Em David Hume*. 1ª. São Paulo : Humanitas Fflch/Usf, **2015**.
8. KANT, IMMANUEL. *Crítica da razão pura*. 5ª. Lisboa : Fundação Calouste Gulbenkian , **2001**.
9. DILTHEY, WILHELM. *Ideias acerca de uma psicologia descritiva e analítica*. Covilhã : LusoSofia Press, **2008**.
10. CARVALHO, OLAVO DE. *Inteligência e Verdade. Ensaio de Filosofia*. 1ª. Rio de Janeiro : Vide, **2021**.
11. ARISTÓTELES em *Nova Perspectiva. Introdução à Teoria dos Quatro Discursos*. 1ª. Rio de Janeiro : Vide, **2016**.
12. CNI. *Retratos da sociedade brasileira: Educação básica*. Brasília : Gerência Executiva de Pesquisa e Competitividade, **2018**.
13. REAL, GISELLE CRISTINA MARTINS. Avaliação e qualidade no Ensino Superior: os impactos do período 1995-2002. *Educação e Pesquisa*. **2009**, pp. 573-584.
14. FERRETTI, CELSO JOÃO. A reforma do Ensino Médio e sua questionável concepção de qualidade da educação. *Ensino de Humanidades*. **2018**, pp. 25-42.
15. GASSET, JOSÉ ORTEGA y. *Mission of the university*. New York : Routledge Taylor & Francis group, **2014**.
16. BLOOM, ALLAN. *O declínio da cultura ocidental: da crise da universidade à crise da sociedade*. 2ª. São Paulo : Best Seller, **1987**.
17. KIRK, GEOFFREY, et al. *Os filósofos pré-socráticos*. 7ª. Lisboa : Cambridge University Press, **1983**.
18. RIEDEL, MORRIS, et al. Research advances by using interoperable e-science infrastructures. *Cluster Computing*. **2009**, pp. 357-372.
19. RIEDEL, MORRIS, et al. Classification of Different Approaches for e-Science Applications in Next Generation Computing Infrastructures. *IEEE Fourth International Conference on eScience*. **2008**, pp. 198-205.

Hugo L. Oliveira

Faculdade de Engenharia Civil, Arquitetura e Urbanismo, Universidade Estadual de Campinas, Avenida Albert Einstein, 951, CEP: 13083-852 - Campinas, SP - Brasil

E-mail: hugo.oliveira@unicamp.br

Estimativa da Área Foliar da Alface Repicada Por Meio de Redes Neurais Artificiais

Sabrina D. Oliveira, Frank F. Capuchinho, Diogo S. Sousa, Gustavo H. B. Pinheiro, Carlos E. B. Barbosa, Sueli M. F. Alves & Francisco R. Melo

As redes neurais artificiais (RNA's) são modelos matemáticos e existem diversas aplicações desta ferramenta na agricultura. Objetivou-se com este estudo avaliar a eficiência da RNA na estimativa da área foliar da alface. Utilizou-se folhas de alface e para o desenvolvimento da MLP foram inseridas como variáveis de entrada a largura e o comprimento das folhas determinados utilizando uma régua, e como saída a área foliar estimada pelo software ImageJ. Para comparação dos dados estimados e observados foram calculados indicadores estatísticos. A rede mostrou-se um método rápido e promissor na estimativa da área foliar para a cultura da alface.

Palavras-chave: *imagej; neurônios artificiais; lactuca sativa.*

Artificial neural networks (ANN's) are mathematical models and there are several applications of this tool in agriculture. The objective of this study was to evaluate the efficiency of ANN in estimating the leaf area of lettuce. Lettuce leaves were used and for the development of the MLP, the width and length of the leaves determined using a ruler were inserted as input variables, and the leaf area estimated by the ImageJ software as output. To compare the estimated and observed data, statistical indicators were calculated. The net proved to be a fast and promising method for estimating leaf area for lettuce.

Keywords: *imagej; artificial neurons; lactuca sativa.*

Introdução

A *Lactuca sativa* L. popularmente conhecida como alface, é uma hortaliça folhosa difundida no Brasil, que gera grande importância econômica para o país, devido apresentar em sua composição elevados teores de vitaminas, ser rica em fibras e sais minerais.¹

A cultura apresenta uma vasta variedade, sendo encontrada alface de folhas lisas ou crespas. A folha é responsável pelo processo respiratório e a compreensão da superfície foliar pode auxiliar no manejo da cultura, sendo possível observar a demanda hídrica da mesma e calcular o índice de área foliar.² De acordo com MEIRA e colaboradores³ a área foliar (AF) é uma importante aliada do monitoramento do desenvolvimento da planta e produtividade das culturas.

Para a estimativa da AF, existem diversas metodologias que são dadas em métodos diretos e indiretos, destrutivos ou não destrutivos. Na mensuração por meio de métodos diretos são utilizados equipamentos de custo elevado que possibilitam a determinação da AF diretamente na planta, sem que mesma seja destruída.⁴ Já a determinação indireta pode ser realizada por meio de dimensões lineares, onde modelos são ajustados e a determinação é distinta para cada cultura.⁵

Os métodos destrutivos são aqueles onde ocorre a destruição do tecido vegetal e os não destrutivos utilizam modelos matemáticos, conjuntos complexos de medidas, e a estimativa pode ser realizada também por meio de análise digital de imagens, com o auxílio de softwares, em que a desvantagem relacionada a esses métodos está em sua calibração, visto que se não calibrados de forma correta podem ser geradas mensurações imprecisas.⁶

Como alternativa aos métodos convencionais aplicados para a estimativa da AF, as redes neurais artificiais (RNAs) vem se destacando como um método econômico e promissor na resolução de diversos problemas agrônômicos. As RNAs simulam o funcionamento dos neurônios humanos e apresentam eficiência na resolução de sistemas não lineares complexos.⁷

Estudos vem sendo realizados com o intuito de comprovar a eficiência desta ferramenta na agricultura. AZEVEDO e colaboradores⁸ utilizou a RNA para prever a AF da aceroleira, com o intuito de verificar a eficiência da metodologia em comparação com modelos de regressão múltipla e observou resultados satisfatórios. O mesmo autor testou o uso da RNA na estimativa da área foliar da couve.⁸ ROCHA e colaboradores⁹ aplicou a técnica com o objetivo de obter estimativas do índice de área foliar da cultura do tomate industrial, no qual o autor concluiu que sistemas computacionais inteligentes possibilitam obter as estimativas desejadas.

Com isso, este trabalho teve como objetivo verificar a eficiência das redes neurais artificiais na estimativa da área foliar da cultura da alface.

Material e Métodos

Os dados utilizados para a realização deste estudo são oriundos de um experimento realizado na estação experimental da Empresa de Assistência Técnica e Extensão Rural (EMATER). Foram utilizadas 50 folhas de alface repicada, onde foram escolhidas folhas de interesse comercial para determinação dos seguintes parâmetros: largura (L), comprimento (C) e área foliar (AF).

A L e C foram determinados com o auxílio de uma régua graduada, no qual a mensuração foi realizada de forma manual e diretamente na folha. A AF da cultura foi estimada por meio do software ImageJ, que possui livre acesso. Foram separadas e identificadas folhas de interesse comercial, as imagens foram captadas com o auxílio de uma câmera digital, em seguida foram processadas e obtidos valores de AF em cm² (Figura 1).

Para a preparação e treinamento das redes foi utilizado o software de acesso livre GNU Octave versão 6.4.0. No treinamento foi utilizado o algoritmo de *back-propagation*, com topologia do tipo *Perceptron* de Múltiplas Camadas (MLP) para a aprendizagem das RNAs. Para o treinamento o conjunto de dados foi separado em dois tipos de variáveis, variável de saída e entrada (Tabela 1):¹⁰

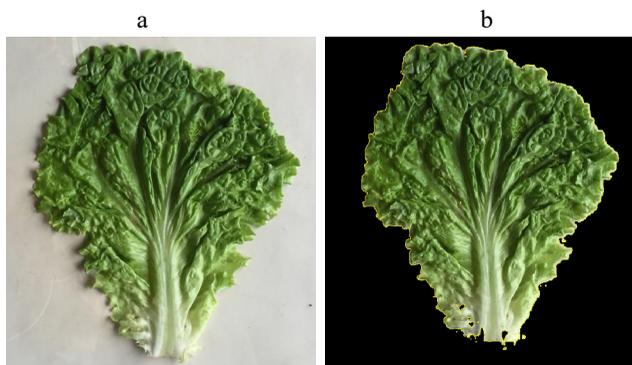


Figura 1. a) Imagem capturada na coleta de dados. b) Imagem gerada a partir do software ImageJ.

Tabela 1. Variáveis inseridas na camada de entrada e camada de saída da RNA na fase de treinamento.

Variáveis	
Entrada	Saída
L (cm)	AF ImageJ (cm ²)
C (cm)	

L igual a largura do limbo foliar; C igual ao comprimento; AF igual área

De acordo com recomendação de Alves¹¹ os dados foram separados de forma aleatória em três conjuntos:

- Conjunto de treinamento foi composto por 65% do total de dados (33 folhas);
- Conjunto de validação foi composto por 25% do total de dados (12 folhas);
- Conjunto de teste foi composto por 10% do total de dados (5 folhas).

Com o intuito de garantir a equalização dos dados, as variáveis foram normalizadas em uma faixa de 0 e 1 de acordo com a Equação 1:

$$V_n = 1 + \frac{V_{obs} - V_{max}}{V_{max} - V_{min}} \quad (1)$$

Em que: V_n igual valor normalizado, adimensional; V_{obs} igual valor observado a ser normalizado; V_{min} igual valor mínimo da amostra; V_{max} igual valor máximo da amostra.

O número máximo de épocas de treinamento foi arbitrado como 10000, o EQM (erro quadrático médio) mínimo para parada foi estabelecido como 1.0×10^{-4} . Foram testadas todas as combinações possíveis de rede e o critério de seleção da melhor rede foi o menor valor do Erro Quadrático Médio (EQM) encontrado nas RNAs.

A função hiperbólica dada por $T_{ansig} = 2/[1 + \exp(-2x) - 1]$ foi aplicada como função de ativação para os neurônios das camadas escondidas e para a camada de saída foi utilizada a função linear dada por. $lin(x)$ igual X

Posteriormente, os resultados estimados pela RNA foram desnormalizados retornando a sua grandeza original, para que ocorresse a comparação dos resultados estimados pela RNA, conforme Equação 2:

$$V_{dn} = V_{max} + (V_n - 1) * (V_{max} - V_{min}) \quad (2)$$

Em que: V_{dn} igual resultado desnormalizado; V_n igual valor normalizado; V_{min} igual valor mínimo da amostra; V_{max} igual valor máximo da amostra.

Os valores obtidos com o auxílio do software ImageJ de AF foram comparados aos valores estimados pela RNA, em que a comparação foi realizada com o intuito de verificar o índice de assertividade da rede. Para tal comparação foram calculados os seguintes indicadores:

- Coeficiente de correlação (r) 12, conforme Equação 3:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (E_i - E)(O_i - O)}{\sqrt{[\sum_{i=1}^n (E_i - E)^2][\sum_{i=1}^n (O_i - O)^2]}} \quad (3)$$

Em que: r igual coeficiente de correlação de Pearson; x_i igual valores estimados; y_i igual valores observados; x igual média dos valores estimados; y igual média dos valores observados; n igual quantidade de padrões de teste.

- Coeficiente de determinação (R^2), conforme Equação 4:

$$R^2 = r^2 \quad (4)$$

Em que: R^2 igual a coeficiente de determinação; r igual a coeficiente de correlação de Pearson.

- Índice de concordância (c),¹³ conforme Equação 5:

$$c = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (E_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (|E_i - O| + |O_i - O|)^2} \quad (5)$$

Em que: c igual índice de concordância de Willmont; x_i igual valores estimados; y_i igual valores observados; \bar{x} igual média dos valores estimados; \bar{y} igual média dos valores observados; n igual quantidade de padrões de teste.

- Índice de desempenho (id) (Equação 6):

$$id = r \cdot c \quad (6)$$

Em que: Id igual índice de desempenho; r igual coeficiente de correlação de Pearson; c igual índice de concordância de Willmont.

O Id da RNA foi classificado de acordo com Camargo e Sentelhas (1997),¹⁴ conforme a Tabela 2.

Tabela 2. Análise do índice de desempenho da RNA.

Valor de id	Desempenho
> 0,85	Ótimo
0,76 - 0,85	Muito bom
0,66 - 0,75	Bom
0,61 - 0,65	Mediano
0,51 - 0,50	Sofrível
0,41 - 0,50	Mau
< 0,41	Péssimo

Fonte: Camargo e Sentelhas (1997)

A comparação dos valores médios determinados pelo software ImageJ e os valores estimados pela RNA foi realizada aplicando o Teste-t student.

Resultados e Discussão

Foi possível estimar valores médios de AF por meio da rede desenvolvida. Com o intuito de verificar a assertividade da RNA foram calculados os seguintes indicadores estatísticos: Coeficiente de correlação (r), índice de concordância de Willmont (c), índice de desempenho (id) (Tabela 3).

Tabela 3. Coeficiente de correlação (r), coeficiente de determinação (R²), índice de concordância (c) e índice de desempenho (id), obtidos na comparação entre os dados de área foliar determinados experimentalmente (in locu) e estimados pela RNA.

Indicadores			
r	c	Id	Classificação Id
0,8161	0,9971	0,8137	Muito bom

AF- área foliar (cm²); Desempenho: Critérios de Classificação de Camargo e Sentelhas (1997).

Em relação ao coeficiente de correlação (r), foi observado um valor de $r = 0,8161$, apresentando uma elevada associação entre os valores determinados pelo ImageJ e os valores estimados pela RNA (Tabela 3), visto que de acordo com MARTINS e colaboradores (2016)¹⁵ quanto mais próximo de 1 melhor é o grau de associação, fato que confirma a capacidade da RNA em obter as estimativas desejadas. AZEVEDO e colaboradores (2019)⁸ estudando a aplicabilidade das RNAs em prever a AF da aceroleira encontrou valores superiores ($r = 0,9927$) aos encontrados neste estudo, comprovando a eficiência da RNA em comparação com modelos de regressão múltipla.

Com o intuito de avaliar o grau de exatidão entre os dados observados e os estimados pela RNA, avaliou-se o índice de concordância. Esta medida varia de 0 (nenhuma concordância) a 1 (concordância perfeita). Foi encontrado um valor de c de 0,9971, muito próximo de 1, constatando-se uma concordância forte entre os valores estimados e determinados pelo software (Tabela 3). SOARES e colaboradores (2015)¹⁶ observou uma concordância forte em seu estudo avaliando o desempenho de redes neurais artificiais na previsão da produtividade da cultura do milho.

Por meio da relação entre o coeficiente de correlação e o índice de concordância foi possível avaliar o índice de desempenho das estimativas e observou-se um id de 0,8137 (Tabela 3), classificado como muito bom segundo Camargo e Sentelhas (1997).¹⁴

A Figura 2 apresenta a relação entre os valores observados obtidos com o auxílio do software ImageJ e os valores estimados através da MLP. Foi observado um coeficiente de determinação (R²) de 0,6660 indicando que 66,60% da informação da AF da alfaca observada pode ser explicada

pela AF estimada pela RNA. AZEVEDO e colaboradores (2017)⁷ encontrou valores superiores aos deste estudo ($R^2=0,9643$) analisando a eficiência da MLP em prever a área foliar da cultura da couve. SOARES e colaboradores (2015)¹⁶ constaram em seu estudo que a RNA com topologia do tipo MLP treinada com algoritmo *backpropagation*, apresentam grande capacidade no desenvolvimento de ferramentas que auxiliem no setor agrícola.

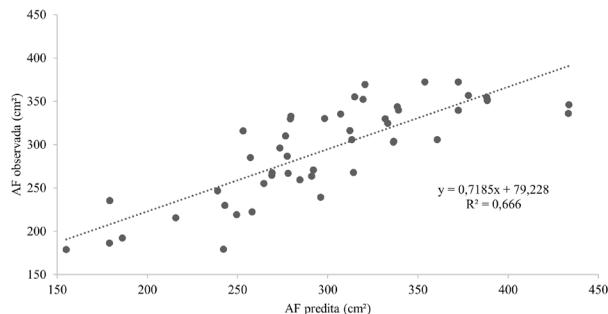


Figura 2. Relação entre os valores de área foliar (AF) observados e estimados pela RNA.

A Tabela 4 apresenta o resultado do Teste-t Student para a comparação entre os valores médios obtidos através do software ImageJ e os valores estimados pela RNA. Observa-se que não houve diferença significativa a 5 % de probabilidade entre os valores médios observados utilizando o software ImageJ com os valores estimados pela RNA desenvolvida, podendo-se afirmar que a rede consegue estimar a AF da cultura da alface.

Tabela 4. Teste-t para os valores médios determinados pelo software ImageJ e valores médios estimados pela RNA.

	Área foliar	
	ImageJ	RNA
Média	298,9967	294,0437
Variância	3831,7207	2969,8170
Observações	50,0000	
gl	49,0000	
p-value	0,6700	

AF: área foliar (cm²); Gl: graus de liberdade; p-value: teste de t-student significativo a 5% de probabilidade.

Conclusões

Foi observada uma correlação acima de 99% comprovando a eficiência da RNA em estimar valores de área foliar da cultura da alface. A RNA mostrou-se um método econômico e promissor para se obter estimativas de área foliar para a cultura da alface, visto que os métodos tradicionais necessitam de equipamentos caros, tempo e podem fornecer mensurações imprecisas quando não calibrados de forma correta.

Referências

- SILVA, C. B. da; SANTOS, M. A. L. dos; SANTOS, D. P. dos; SANTOS, C. G. dos; SANTOS, V. R. dos; SÁ, M. B. de. Productivity of lettuce grown in field and environment protected in response the irrigation blades and saline levels. *Research, Society and Development*, **2020**, 9, 10, 8549109143.
- COSTA, J. do N.; FERNANDES, R. N.; A. MARIA, M. de; ALMEIDA, C. L. de; LIMA, J. S.; VALNIR JÚNIOR, M. Métodos para estimativa da área foliar em alface. IN: V INOVAGRI International Meeting. QUITO: **2019**.
- MEIRA, L. A.; PEREIRA, L. E. T.; SANTOS, M. E. R.; TECH, A. R. B. USPLLeaf: Automatic leaf area determination using a computer vision system. *Revista Ciênc. Agron.*, **2020**, 51, 4, 20207300.
- GUIMARÃES, M. J. M.; COELHO FILHO, M. A.; GOMES JUNIOR, F. de A.; SILVA, M. A. M.; ALVES, C. V. O.; LOPES, I. Modelos matemáticos para a estimativa da área foliar de mandioca. *Revista de Ciências Agrárias*, **2019**, 62.
- SCHWAB, N. T.; STRECK, N. A.; REHBEIN, A.; RIBEIRO, B. S. M. R.; ULHMANN, L. O.; LANGNER, J. A.; BECKER, C. C. Dimensões lineares da folha e seu uso na determinação do perfil vertical foliar de gladiolo. *Bragantia*, Campinas, **2014**, 73, 2, (97-105).
- PINHEIRO, F. S.; LYRA, G. B.; ABREU, M. C.; ARTHUR JUNIOR, J. C.; SILVA, L. D. B.; LYRA, G. B.; SANTOS, E. O. Área foliar de mudas de urucum (*Bixa orellana* L.) estimada por diferentes métodos: uma análise comparativa. *Ciênc. Florest.*, **2020**, 30, 3.
- AZEVEDO, A. M.; ANDRADE JÚNIOR, V. C.; SOUSA JÚNIOR, A. S.; SANTOS, A. A.; CRUZ, C. D.; PEREIRA, S. L.; OLIVEIRA, A. J. M. Eficiência da estimação da área foliar de couve por meio de redes neurais artificiais. *Horticultura brasileira*, **2017**, 35, 1.
- AZEVEDO, A.M.; SILVEIRA, V.A.; OLIVEIRA, C.M.; PEDROSA, C.E.; LEMOS, V.T.; VALADARES, N.R.; GUIMARÃES, A.G. Predição da área foliar em acerola por redes neurais e regressão múltipla. *Revista Agrária Acadêmica*, **2019**, 2, 3, (96-105).

9. ROCHA, I.J.F.; ALVES, G.R.; BARBOSA, C.E.B.; ALVES, S.M.; MELO, F.R. Redes neurais artificiais aplicadas na estimativa do índice de área foliar utilizando imagens de sensoriamento remoto. *Brazilian Journal of Development*, Curitiba, **2022**, 8, 5, (36460-36478).
10. BRAGA, A.P.; CARVALHO, A.P.L.F.; LUDERMIR, T.B. *Redes Neurais Artificiais: Teorias e Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., **2014**. 226p.
11. ALVES, G.R. Estimativa da produtividade da soja com redes neurais artificiais 2016. 76p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Agrícola), Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, **2016**.
12. SCHNEIDER, P.R. Análise de regressão aplicada à Engenharia Florestal. Santa Maria: UFSM/CEPEF, **1998**. 236p.
13. WILLMONT, C.J. On the validation of models. *Physical Geography*, Palm Beach, v.2, n. 2, p.184-194, **1981**.
14. CAMARGO, Â. P.; SENTELHAS, P. C. Avaliação do desempenho de diferentes métodos de estimativa da evapotranspiração potencial no Estado de São Paulo, Brasil. *Revista Brasileira de Agrometeorologia*, **1997**, 5, 1, (87-97).
15. MARTINS, E. dos R. BINOTI, M. L. M. da S.; LEITE, H. G.; BINOTI, D. H. B.; DUTRA, G. C. Configuração de redes neurais artificiais para estimação do aflamento do fuste de árvores de eucalipto. *Revista Brasileira de Ciênc. Agrárias*, **2016**, 11, 1, (33-38).
16. SOARES, F. C.; ROBAINA, A. D.; PEITER, M. X.; RUSS, J. L. Predição da produtividade da cultura do milho utilizando rede neural artificial. *Ciênc. Rural*, Santa, **2015**, 45, 11, (1987-1993).

Sabrina D. Oliveira*, Frank F. Capuchinho, Diogo S. Sousa, Gustavo H. B. Pinheiro, Carlos E. B. Barbosa, Sueli M. F. Alves & Francisco R. Melo

Universidade Estadual de Goiás - Câmpus Central - Sede: Anápolis – CET - Br 153, Nº 3105.

*E-mail: sabrina9632oliveira@gmail.com

O Entendimento Estrutural de Moléculas Orgânicas e suas Aplicações como Aditivos para Biocombustíveis

Vitor S. Duarte & Hamilton B. Napolitano

As mudanças climáticas e a escassez de recursos naturais representam ameaças globais que afetam a sustentabilidade dos sistemas econômicos. Para enfrentar esses desafios, soluções estão sendo desenvolvidas, como a redução das emissões de poluentes e a busca por fontes de energia sustentáveis. Embora o sistema econômico dependa principalmente de combustíveis fósseis, que causam poluição e são limitados, as energias sustentáveis, como os biocombustíveis, estão ganhando importância como alternativas renováveis. No entanto, a estabilidade dos biocombustíveis é um obstáculo a ser superado, e soluções, como aditivos, estão sendo pesquisadas. Este artigo aborda as implicações dos biocombustíveis, os desafios que enfrentam e como a pesquisa estrutural e teórica pode contribuir para o desenvolvimento de aditivos para melhorar sua estabilidade.

Palavras-chave: *biocombustíveis; aditivos; entendimento estrutural.*

Climate change and the scarcity of natural resources pose global threats that impact the sustainability of economic systems. To address these challenges, solutions are being developed, such as reducing emissions and exploring sustainable energy sources. Although the economic system primarily relies on fossil fuels, which cause pollution and are limited, sustainable energies like biofuels are gaining importance as renewable alternatives. However, the stability of biofuels is a hurdle to overcome, and solutions, such as additives, are being researched. This article discusses the implications of biofuels, the challenges they face, and how structural and theoretical research can contribute to the development of additives to enhance their stability.

Keywords: *biofuels; additives; structural understanding.*

Introdução

Na atualidade existem problemas de nível global, um destes problemas que é transversal, é a escassez dos recursos naturais que são essenciais para manutenção da vida.^{1,2} Dividimos os recursos em duas categorias: renováveis e não renováveis, a diferença entre eles é o tempo de reabastecimento, sendo que os não renováveis são esgotados gradualmente ao longo do tempo. Eles não podem ser naturalmente reabastecidos dentro de um curto período em comparação com sua taxa de consumo, podendo levar milhares de anos para renovação, como os combustíveis fósseis.^{3,4} Neste contexto energético, deparamo-nos com uma quantidade limitada de combustíveis fósseis, ao lado do desafio da poluição gerada por eles.

A queima de combustíveis fósseis é um dos principais responsáveis pela poluição atmosférica.⁵ A combustão destes combustíveis gera a emissão de diversos poluentes e gases tóxicos, como o dióxido de carbono (CO₂), o dióxido de nitrogênio (NO₂), o monóxido de carbono (CO) e o dióxido de enxofre (SO₂). Esses gases são em sua maioria tóxicos, estão ligados a intensificação do efeito estufa, mudanças climáticas e por chuvas ácidas.⁵ Estudos mostram que a cada ano o número de mortes causada pela poluição do ar aumenta drasticamente, países como China e Índia são os países com maiores índices, cerca de 1 milhão de mortes cada país, com dados para o ano de 2015.⁶

Os principais combustíveis fósseis amplamente utilizados são o petróleo, o carvão mineral e o gás natural, representando coletivamente mais de 80% da matriz energética empregada pela humanidade.^{7,8} Além de ser associado à produção de combustíveis que geram poluição atmosférica, o petróleo é reconhecido como um dos principais poluentes dos oceanos. Estima-se que anualmente ocorram derramamentos de milhões de toneladas de petróleo nas águas oceânicas.^{9,10} Investir em combustíveis provenientes de fontes renováveis como uma alternativa aos combustíveis fósseis é uma ação fundamental para promover a sustentabilidade.

Os biocombustíveis são provenientes de fontes renováveis, podendo ser obtidos de biomassa renovável, podendo ser uma opção aos combustíveis fósseis.¹¹ No Brasil, o etanol e o biodiesel são os dois principais biocombustíveis empregados. O etanol é produzido a partir da cana-de-açúcar, enquanto o biodiesel é derivado de fontes renováveis, como óleos e gorduras. O biodiesel é uma opção de combustível promissora, além de possuir menores níveis de emissão de poluentes quando comparado a com outros combustíveis fósseis.¹² Muitos países adicionam uma porcentagem de biodiesel ao diesel comercial, atualmente o Brasil utiliza a porcentagem de 12% de biodiesel ao diesel (B12), e existem projeções do governo para que esse aumento seja gradativo a cada ano. Em meio a tantas vantagens descritas para o biodiesel, existem problemas relacionados a estabilidade oxidativa do biodiesel que afetam diretamente as propriedades e qualidade do produto.

Esse problema de estabilidade do biodiesel afeta desde o processo de produção até o consumidor final.¹³⁻¹⁵ A nível de estrutura molecular, o biodiesel é composto por uma mistura de ésteres metílicos ou etílicos, sendo rico em insaturações com grupos oxigenados polares, além do seu acentuado caráter higroscópico que retém mais água no combustível, contribuindo para a proliferação de microrganismos, esses aspectos contribuem efetivamente para que esse combustível seja mais suscetível a degradação.¹⁶⁻¹⁸ A degradação desse combustível, pode deixá-lo impróprio para uso, podendo gerar resíduos no combustível, que podem entupir o sistema de alimentação e danificar os motores.^{19,20} Todos esses problemas que estão relacionados a estabilidade do biodiesel acarretam numa resistência do mercado e dificultam sua consolidação na matriz energética. Logo desenvolver meios de mitigar esses problemas se faz necessário, tecnologias como aditivos que retardem a oxidação e degradação do combustível é uma opção viável. Moléculas orgânicas podem ser utilizadas como tais aditivos desde que apresentem propriedades como antioxidante, antimicrobianas etc.

Nessa revisão, apresentamos uma breve descrição do estado da arte para as implicações do uso dos biocombustíveis, como os problemas que impedem sua consolidação na matriz energética mundial, e as possíveis soluções. Nessa trajetória descrevemos como o entendimento estrutural e teórico pode auxiliar no desenvolvimento e aplicação de uma molécula bioativa que desempenhe o papel de um aditivo nesses biocombustíveis. Novas moléculas orgânicas podem ser investigadas através de uma abordagem estrutural e teórica em busca de fatores e aspectos estruturais que estejam ligados com as atividades necessárias em um aditivo. A partir dos aspectos estruturais e teórico, ensaios experimentais podem ser realizados com maior direcionamento e assertividade, o que pode economizar tempo e recursos.

Biocombustíveis

Um biocombustível é um tipo de combustível de origem biológica não fóssil, produzido a partir de processos que envolvem a biomassa e que tem o potencial de substituir completamente os combustíveis fósseis, normalmente derivados do petróleo e gás natural.^{21,22} O biodiesel é exemplo de biocombustível que pode ser obtido tanto de fontes animais quanto vegetais^{21,23} que são renováveis e pode ser produzido com alguns resíduos, como óleos utilizados em fritura ou sebo animal, cujo descartes representam problemas ambientais.²¹ A Tabela 01 mostra alguns tipos de biodiesel produzidos. Além ser um combustível renovável e uma fonte de energia alternativa, o biodiesel apresenta baixo índice de emissão de poluentes, reduz em 78% as emissões líquidas de CO comparado a outros combustíveis fósseis.²⁴ Contudo, a utilização do biodiesel está atrelada ao uso de aditivos, estes aditivos podem ter sua origem em moléculas orgânicas e são fundamentais para conservar as propriedades físico-químicas do combustível.²⁵

Tabela 1. Alguns tipos de biocombustíveis produzidos.

Combustível	Nome científico da matéria prima
Biodiesel de palma ²⁶	<i>Opuntia cochenillifera</i>
Biodiesel de laranjeira ²⁷	<i>Maclura pomifera</i>
Biodiesel de seringueira ²⁸	<i>Hevea brasiliensis</i>
Biodiesel de melancia ²⁹	<i>Citrullus lanatus</i>
Biodiesel de cardo-coalheiro ³⁰	<i>Cynara cardunculus</i>
Biodiesel de uma espécie de árvore ³¹	<i>Terminalia bellirica</i>
Biodiesel de mamona ³²	<i>Ricinus communis</i>
Biodiesel cardo-santo ³³	<i>Argemone mexicana</i>
Biodiesel de uma espécie de árvore ³⁴	<i>Milletia pinnata</i>
Biodiesel de peixe ³⁵	<i>Chondrichthyes</i>
Biodiesel de colza ³⁶	<i>Brassica napus</i>
Biodiesel de uma espécie de árvore ³⁷	<i>Pongamia pinnata</i>
Biodiesel de gergelim ³⁸	<i>Sesamum indicum</i>
Biodiesel de Hibiscus ³⁹	<i>Hibiscus sabdariffa</i>
Biodiesel de uma espécie de árvore ⁴⁰	<i>Madhuca longifolia</i>
Biodiesel de pinhão ⁴¹	<i>Jatropha curcas L.</i>
Biodiesel de girassol ⁴²	<i>Helianthus annuus</i>
Biodiesel de abóbora ⁴³	<i>Cucurbita</i>
Biodiesel de uma espécie de planta ⁴⁴	<i>Crambe</i>
Biodiesel de uma espécie de planta ⁴⁵	<i>Azadirachta indica</i>
Biodiesel de uma espécie de planta ⁴⁶	<i>Calophyllum inophyllum</i>
Biodiesel de bagaço ⁴⁷	<i>Olea europaea L.</i>
Biodiesel de amendoim ⁴⁸	<i>Arachis hypogaea</i>
Biodiesel de algodão ⁴⁵	<i>Gossypium hirsutum L.</i>
Biodiesel de soja ⁴⁴	<i>Glycine max</i>
Biodiesel de farelo ⁴⁹	<i>Oryza sativa</i>
Biodiesel de azeitona ⁵⁰	<i>Olea europaea L.</i>
Biodiesel de resíduos de óleo ⁴²	resíduos de óleo vegetal

Implicações dos Biocombustíveis e os Recursos Naturais

O mundo depende de energia, e mais de 80% da energia utilizada pela humanidade é proveniente de combustíveis fósseis.^{7,8} A combustão destes combustíveis é a principal fonte de poluição atual, sendo direta ou indiretamente responsáveis pelas mudanças climáticas, desencadeando catástrofes

naturais, perda de recursos naturais essenciais a vida, extinção de espécies da fauna e da flora, e a destruição de biomas.

De acordo com um monitoramento divulgado em 2018 pelo Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), a poluição tem causado perdas significativas de recursos naturais no Brasil. Entre 2000 e 2016, o país perdeu cerca de 7,5% de sua cobertura vegetal, com uma área de vegetação que diminuiu de 4.017.505 km² para 3.719.801 km².⁵¹ Sabemos que essa perda de cobertura vegetal não é exclusivamente causada pela poluição dos combustíveis fósseis, mas incluem o desmatamento, queimadas, expansão das fronteiras agrícolas etc. Segundo dados divulgados pelo Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) em 2018, o Cerrado Brasileiro perdeu cerca de 6.657 km², índice que aumentou em 2020 para 7.340 km² de área suprimida, atualmente a perda da vegetação do Cerrado é estimada em torno de 51%, além da poluição que tem impactos negativos na fauna e flora do Cerrado, o avanço do agronegócio é um dos principais fatores responsáveis pela supressão de sua vegetação.⁵²⁻⁵⁴ Sugerir soluções radicais, como conter a atividade agrícola e interromper completamente o uso de combustíveis fósseis, é uma tarefa complexa devido a uma estrutura de cadeia bem estabelecida, questões políticas profundamente enraizadas e leis ineficazes para lidar com a poluição. No entanto, devido à futura escassez dos combustíveis fósseis e à necessidade iminente de reduzir as emissões de gases do efeito estufa, há uma crescente demanda por combustíveis mais limpos e renováveis. A substituição dos combustíveis fósseis pelos biocombustíveis poderia preservar e salvar os recursos naturais e biomas, não só do Brasil, mas de todo mundo, através da redução dos índices de gases poluentes lançados na atmosfera.

Problemas da Estabilidade do Biodiesel

O biodiesel é um combustível altamente promissor, apresentando diversas vantagens em relação a outros tipos de combustíveis. Ele pode ser usado em motores de ciclo diesel com algumas adaptações, é biodegradável, tem baixos níveis de poluentes e é menos tóxico do que

os combustíveis fósseis convencionais.¹² Em veículos de combustão interna, produz redução de emissões de CO₂ e poluentes atmosféricos, além de favorecer a lubrificação do sistema de injeção de combustível aumentando a durabilidade das peças.²⁵

Contudo, a baixa estabilidade oxidativa do biodiesel é atualmente um ponto crítico sendo uma barreira na sua consolidação na matriz energética mundial.^{55,56} A oxidação do biodiesel se caracteriza por uma reação de transferência de elétrons ou hidrogênio de um composto para um agente oxidante e afeta o combustível em estágios iniciais de uso, durante o transporte e o armazenamento, quando entra em contato com ar, e quando expostos a altas temperaturas.⁵⁷ A oxidação do biodiesel influencia significativamente na sua qualidade, com o aumento da oxidação, o biodiesel se torna mais denso devido a hidrogenação das ligações insaturadas, tornando-o impróprio ao uso. A degradação do biodiesel está ligada a variações de outras propriedades físico-químicas, como variação iodométrica, índice de peróxidos, nível de acidez e viscosidade cinemática. Nesse cenário, a oxidação do biodiesel pode contribuir com vários problemas no sistema mecânico de um veículo, causando corrosão do motor e tubulações, além da obstrução e formação de depósitos no interior do motor.^{55,58} Para evitar a oxidação do biodiesel, existem alguns métodos, tais como a utilização de compostos com ação antioxidante e conservantes como é o caso dos aditivos.⁵⁹

Aditivos para (Bio)Combustíveis

Como vimos, o biodiesel possui um problema relacionado diretamente à sua estabilidade oxidativa, portanto o uso de compostos que retardem a oxidação e mitiguem esses problemas, se faz necessário. Os aditivos são compostos que retardam processos de degradação do combustível, melhoram seu desempenho e contribuem para longevidade do motor e peças do veículo.⁶⁰ A Figura 01 mostra a estrutura química de alguns dos aditivos comerciais mais utilizados atualmente.

O desenvolvimento de um aditivo é um processo complexo que consiste em uma série de testes visando avaliar o desempenho do composto, que vão desde a elucidação

molecular até a aplicação em misturas com combustíveis, estabelecendo a relação entre estrutura molecular e propriedades.⁶¹ Como a oxidação do biodiesel é associada com a proliferação de microrganismos (fungos e bactérias) que causariam sua oxidação,^{58,62–66} compostos ou moléculas com propriedades antimicrobianas ou antioxidantes são desejáveis como aditivos.^{12,67} Logo, a busca por moléculas orgânicas com tais propriedades é um caminho promissor nesse contexto de biocombustíveis e aditivos. Pontuemos que não é qualquer molécula orgânica que irá apresentar propriedades para alguma aplicação, existem classes de moléculas e grupos funcionais que ao longo do tempo têm se mostrado mais interessantes de uma perspectiva para aplicação, a conformação estrutural também é levada em consideração, devido a relação entre estrutura e atividade molecular.⁶⁸

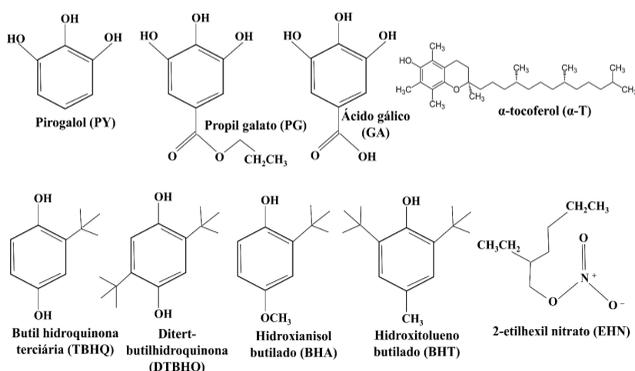


Figura 1. Estrutura química de alguns dos aditivos comerciais mais utilizados atualmente.

MOLÉCULAS ORGÂNICAS COM POTENCIAL PARA ADITIVOS DE BIOCOMBUSTÍVEIS

Na literatura encontramos algumas moléculas com atividades biológicas interessantes, vamos destacar aqui 3 classes, as Chalconas, as Quinolinonas e os Benzimidazóis. As Chalconas (1,3-diaril-2-propan-1-ona) são compostos orgânicos pertencentes a família dos flavonóides, obtidas em vários tipos de plantas ou por meio de síntese,^{69–71} suas estruturas são formadas por dois anéis aromáticos ligados por uma cadeia aberta formada por

uma porção olefina e um sistema carbonila α,β -insaturado, com diferentes substituintes nos anéis aromáticos^{70,71} (Figura 02(a)). Diversos trabalhos envolvendo chalconas e seus análogos mostram a sua ação antioxidante^{72–76} e antimicrobiana (antibactérias e antifungos).^{77–83} Xue et al. (2012)⁸⁴ realizou um estudo teórico da estrutura-atividade de chalconas-hidroxiladas com atividade antioxidante, enquanto Mittelbach et al. (2003)⁶² mostrou a influência de antioxidantes na estabilidade de oxidação do biodiesel.

Encontramos alguns trabalhos que mostram diretamente chalconas com propriedades para preservar a estabilidade oxidativa de uma mistura diesel-biodiesel.^{85–87} Da Silva et al. (2018)⁶⁹ avaliou hidroxí-chalconas como alternativas sintéticas para melhorar a estabilidade oxidativa do biodiesel, Lenardão et al. (2017)⁸⁸ cita o glicerol como principal coproduto na produção do biodiesel e mostra a utilização de chalconas no processo do glicerol como solvente na síntese orgânica e Piva et al. (2013)⁸⁷ solicitou uma patente no INPI sobre um grupo de chalconas com aplicação como reagente antioxidante em biodiesel.

As Quinolinonas (1-aza-naftaleno ou benzo[b]piridina) são compostos orgânicos de origem natural ou sintética,^{89–91} sendo uma base terciária fraca com caráter aromático heterocíclico, sua estrutura possui dois anéis, em que um carbono é substituído pelo heteroátomo nitrogênio (Figura 02(b)).^{92,93} Muitos trabalhos mostram atividades biológicas dessa classe de compostos, o núcleo quinolinona é comum em diversos fármacos comerciais (nedocromil, ciprofloxacino, norfloxacino, elvitegravir e ivacaftor)^{94,95} e encontramos diversos estudos relatando suas atividades antioxidante,^{96–100} antibacteriana^{101–104} e antifúngica.^{90,105–108} O núcleo quinolinona pode ser hibridizado com outras moléculas (com chalconas, por exemplo), a fim de potencializar alguma atividade desejada, podemos encontrar em diversos trabalhos que citam quinolinonas-chalconas (moléculas chalconas que contêm o núcleo quinolinona em sua estrutura química) com diversas atividades biológicas, como antioxidante,^{109–111} antimicrobiana,^{112–116} dentre outras.^{117–123}

Os benzimidazóis também são uma classe de moléculas orgânicas (naturais ou sintéticas) aromáticas

heterocíclicas formadas a partir do anel benzeno e imidazol^{124,125} (Figura 02(c)). Benzimidazóis são amplamente utilizados como fármacos¹²⁶ devido suas propriedades antimicrobianas^{127,128} e antioxidantes.¹²⁹⁻¹³¹ Além disso, vários fungicidas comerciais são feitos à base de benzimidazóis, como o carboxin,¹³² Benomyl,¹³³ carbendazim¹³⁴ e thiophanate-methyl.¹³⁵⁻¹³⁷

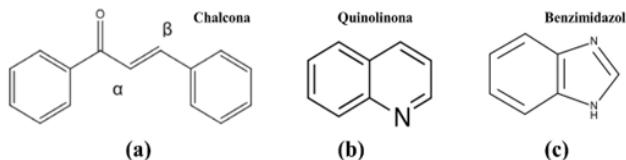


Figura 2. Estruturas químicas das Chalconas (a) Quinolinonas (b) e Benzimidazóis (c).

Entendimento Estrutural e Teórico de Moléculas

O conhecimento estrutural das moléculas é fundamental para determinar suas propriedades físico-químicas e biológicas. A estrutura molecular descreve a organização dos átomos na molécula, bem como as ligações e interações entre eles, o empacotamento molecular e o arranjo supramolecular. Essas informações permitem entender como a uma molécula interage com outras substâncias e como ela se comporta em diferentes condições. Em um aspecto físico-químico, é possível inferir que a presença de certos grupos funcionais em uma molécula pode indicar sua capacidade de se ligar a outras moléculas ou de participar de reações específicas. Esses grupos funcionais e a conformação molecular também estão relacionados com propriedades como, ponto de fusão, ponto de ebulição, densidade, viscosidade, solubilidade, condutividade elétrica, entre outras. É exemplo disso é que moléculas com ligações e interações fortes entre seus átomos tendem a ter pontos de fusão e ebulição mais altos do que moléculas com ligações mais fracas. Se considerarmos um aspecto biológico direcionado para a química medicinal, o conhecimento estrutural é fundamental no processo de desenvolvimento de fármacos e a compreensão de sua interação com alvos

biológicos. A estrutura molecular pode determinar sua eficácia, seletividade e toxicidade em relação a proteínas, enzimas, receptores e outros componentes biológicos.

Das técnicas que permitem a identificação da estrutura molecular de um composto, vamos destacar a metodologia cristalográfica da difração de raios X de monocristais, que é a melhor metodologia para caracterizar estruturalmente um composto, pois está fundamentada na densidade eletrônica.¹³⁸ Essa metodologia é altamente precisa e amplamente utilizada para determinar estruturas moleculares cristalinas, fornecendo informações detalhadas sobre a posição dos átomos na molécula, bem como suas possíveis interações e empacotamento molecular. No entanto, é necessário que a amostra esteja no estado cristalino, pois no cristal existe periodicidade atômica, ou seja, o arranjo dos átomos é recíproco em qualquer ponto equivalente do cristal.¹³⁹ Essa periodicidade ou repetitividade atômica permite estudos que possibilitam determinar a estrutura molecular.¹⁴⁰

A determinação da estrutura cristalográfica permite não apenas a identificação das espécies atômicas presentes, mas também a caracterização da conformação molecular e das interações responsáveis pelo empacotamento cristalino e arranjo supramolecular. Por meio da análise da estrutura cristalográfica, é possível estudar as distâncias e ângulos entre os átomos, a geometria das ligações químicas e a orientação dos grupos funcionais na molécula. Essas informações são cruciais para compreender as propriedades químicas e físicas dos materiais, bem como para otimizar processos de síntese e desenvolver novos materiais com propriedades desejáveis. Além disso, a análise da estrutura cristalográfica permite identificar as interações intermoleculares presentes na estrutura, como interações eletrostáticas, ligações de hidrogênio e forças de van der Waals. Essas interações são responsáveis pelo empacotamento dos cristais e pelo arranjo supramolecular, que influenciam diretamente as propriedades macroscópicas do material.^{140,141} Utilizamos alguns softwares que ajudam a identificar e quantificar as interações e o arranjo supramolecular, como o software Mercury¹⁴² que realiza análises através de parâmetros geométricos que foram obtidos experimentalmente na difração de raios X, bem

como o software CrystalExplorer¹⁴³ que nos permite uma análise das interações através da densidade eletrônica.

Os Cálculos de propriedades eletrônicas podem ser realizados através da análise teórica do modelo estrutural permitindo determinar algumas propriedades físico-químicas. Os cálculos de propriedades eletrônicas são realizados com base na otimização teórica dos dados experimentais. O cálculo dessas propriedades permite-nos avaliar alguns parâmetros como estabilidade cinética e química, reatividade molecular, regiões e grupos moleculares mais suscetíveis a interações, reações eletrofílicas/nucleofílicas, energias de excitação e ativação, comportamento molecular em diferentes tipos de meios (solventes) entre outros. Esses cálculos teóricos estão fundamentados em princípios da mecânica quântica através da resolução da função de onda, onde previsões probabilísticas são computadas para a molécula em estudo. O tempo computacional necessário para conseguir a otimização energética adequada deve ser avaliado com base na estrutura química e nas propriedades a serem calculadas.^{144,145} Em geral, esses cálculos são realizados usando a teoria do funcional de densidade (density functional theory - DFT) implementado no pacote do Gaussian09,¹⁴⁶ utilizando de funcionais e conjuntos de base específicos para cada molécula. Através dos cálculos teóricos podemos descrever propriedades eletrônicas: A estrutura molecular influencia as propriedades eletrônicas das substâncias. Ela determina a distribuição dos elétrons na molécula, afetando sua polaridade, potenciais de ionização, afinidade eletrônica e capacidade de conduzir corrente elétrica. Essas propriedades são importantes em muitas aplicações, como em dispositivos eletrônicos e em processos de catálise.

Conclusões

O mundo é majoritariamente dependente da matriz energética fóssil, além dos problemas relacionados à poluição que a queima desses combustíveis causa, também temos o problema de uma futura escassez desses recursos. Portanto investir em combustíveis de fontes renováveis e menos poluentes é um caminho promissor e necessário. Os problemas relacionados a baixa estabilidade oxidativa

de alguns combustíveis renováveis como o biodiesel é um dos problemas que impedem uma maior utilização deste combustível, logo novas tecnologias (como o uso de aditivos) são necessárias para aumentar a durabilidade e conservar as propriedades desse combustível.

O estudo estrutural das moléculas orgânicas pode fornecer aspectos estruturais que estão relacionados com a atividade da molécula, ao tempo que o estudo teórico permite prever propriedades físico-químicas além de prever índices energéticos, de posse dessas informações é possível direcionar moléculas que tenham uma ação biológica de conservação no biocombustível, com maior assertividade e eficiência.

Referências

1. H. RATTNER, *Revista de Administração de Empresas*.
2. T. HANCOCK, *Health Promot Int*, **2011**, 26, ii168–ii172.
3. T. GÜNEY, *International Journal of Sustainable Development & World Ecology*, **2019**, 26, 389–397.
4. H.-T. PAO AND H.-C. Fu, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2013**, 25, 381–392.
5. BLACKSMITH INSTITUTE AND G. C. SWITZERLAND, *The World's Worst Pollution Problems: Assessing Health Risks at Hazardous Waste Sites*, **2012**.
6. K. VOHRA, A. VODONOS, J. SCHWARTZ, E. A. MARAIS, M. P. SULPRIZIO AND L. J. MICKLEY, *Environ Res*, **2021**, 195, 110754.
7. N. ARMAROLI AND V. BALZANI, *Chem Asian J*, **2011**, 6, 768–784.
8. *International Energy Agency, Key world energy statistics*, **2010**.
9. M. BLUMER, H. L. SANDERS, J. F. GRASSLE AND G. R. HAMPSON, *Environment: Science and Policy for Sustainable Development*, **1971**, 13, 2–12.
10. A. H. S. SOLBERG, *Proceedings of the IEEE*, **2012**, 100, 2931–2945.
11. Ministério de Minas e Energia, *Biocombustíveis*, <http://www.brasil.gov.br/noticias/infraestrutura/2011/11/biocombustiveis>.
12. M. L. MEDEIROS, A. M. M. T. CORDEIRO, N. QUEIROZ, L. E. B. SOLEDADE, A. L. SOUZA AND A. G. SOUZA, *Energy & Fuels*, **2014**, 28, 1074–1080.
13. S. KUMAR, K. YADAV AND G. DWIVEDI, *Mater Today Proc*, **2018**, 5, 19255–19261.

14. J. PULLEN AND K. SAEED, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2012**, 16, 5924–5950.
15. R. K. SALUJA, V. KUMAR AND R. SHAM, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2016**, 62, 866–881.
16. N. KUMAR, *Fuel*, **2017**, 190, 328–350.
17. F. SUNDUS, M. A. FAZAL AND H. H. MASJUKI, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2017**, 70, 399–412.
18. M. R. JAKERIA, M. A. FAZAL AND A. S. M. A. HASEEB, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2014**, 30, 154–163.
19. J. PULLEN AND K. SAEED, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2012**, 16, 5924–5950.
20. M. TRINDADE, in *Green Energy and Technology*, **2018**, p. 186.
21. S. N. NAIK, V. V. GOUD, P. K. ROUT AND A. K. DALAI, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2010**, 14, 578–597.
22. A. DEMIRBAS, *Appl Energy*, **2009**, 86, S108–S117.
23. M. NAQVI AND J. YAN, IN *HANDBOOK OF CLEAN ENERGY SYSTEMS*, JOHN WILEY & SONS, Ltd, Chichester, UK, **2015**, pp. 1–18.
24. BiodieselBR, BiodieselBR.
25. K. VARATHARAJAN AND D. PUSHPARANI, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2018**, 82, 2017–2028.
26. M. S. CAVALCANTE, L. R. V. CONCEIÇÃO, R. R. C. BASTOS, A. C. G. COSTA, G. N. ROCHA FILHO AND J. R. ZAMIAN, *Congresso Brasileiro de Química*, **2012**, 1.
27. F. SALOUA, C. SABER AND Z. HEDI, *Bioresour Technol*, **2010**, 101, 3091–3096.
28. A. RAMADHAS, S. JAYARAJ AND C. MURALEEDHARAN, *Fuel*, **2005**, 84, 335–340.
29. J. XAVIER, *JOURNAL OF BIOLOGICAL SCIENCES*, **2020**, 20, 88–93.
30. M. LAPUERTA, O. ARMAS, R. BALLESTEROS AND J. FERNANDEZ, *Fuel*, **2005**, 84, 773–780.
31. M. CHAKRABORTY, D. C. BARUAH AND D. KONWER, *Fuel Processing Technology*, **2009**, 90, 1435–1441.
32. M. A. R. NASCIMENTO, E. S. LORA, O. J. VENTURINI, M. R. MALDONADO, R. V. ANDRADE, P. S. P. C. JR. AND M. A. HAIKAL, *Enc. Energ. Meio Rural*, **2006**, 10.
33. D. SINGH AND S. P. SINGH, *Biomass Bioenergy*, **2010**, 34, 545–549.
34. K. SURESHKUMAR, R. VELRAJ AND R. GANESAN, *Renew Energy*, **2008**, 33, 2294–2302.
35. G. I. MARTINS, D. SECCO, H. A. ROSA, R. A. BARICCATTI, B. D. DOLCI, S. N. MELEGARI DE SOUZA, R. F. SANTOS, T. R. BENETOLI DA SILVA AND F. GURGACZ, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2015**, 42, 154–157.
36. A. ABUHABAYA, J. D. FIELDHOUSE AND D. BROWN, *Future Technologies in Computing and Engineering Annual Researchers' Conference (CEARC'10)*, **2010**, 71–76.
37. N. BANAPURMATH, P. TEWARI AND R. HOSMATH, *Renew Energy*, **2008**, 33, 1982–1988.
38. A. SAYDUT, M. DUZ, C. KAYA, A. KAFADAR AND C. HAMAMCI, *Bioresour Technol*, **2008**, 99, 6656–6660.
39. P. NAKPONG AND S. WOOTTHIKANOKKHAH, *Fuel*, **2010**, 89, 1806–1811.
40. S. PUHAN, N. VEDARAMAN, B. V. B. RAM, G. SANKARNARAYANAN AND K. JEYCHANDRAN, *Biomass Bioenergy*, **2005**, 28, 87–93.
41. M. U. KAISAN, S. ABUBAKAR, B. ASHOK, D. BALASUBRAMANIAN, S. NARAYAN, I. GRUJIC AND N. STOJANOVIC, *Biofuels*, **2021**, 12, 757–768.
42. A. ABUHABAYA, J. D. FIELDHOUSE AND D. BROWN, *Evaluation of Properties and use of waste vegetable oil (WVO), pure vegetable oils and standard diesel as used in a compression ignition engine*, **2010**.
43. P. SCHINAS, G. KARAVLAKIS, C. DAVARIS, G. ANASTOPOULOS, D. KARONIS, F. ZANNIKOS, S. STOURNAS AND E. LOIS, *Biomass Bioenergy*, **2009**, 33, 44–49.
44. M. R. RIGOTTE, *Desempenho de conjunto motor-gerador utilizando biocombustíveis sob cargas variadas*, **2014**.
45. M. U. KAISAN, S. ABUBAKAR, B. ASHOK, D. BALASUBRAMANIAN, S. NARAYAN, I. GRUJIC AND N. STOJANOVIC, *Biofuels*, **2021**, 12, 757–768.
46. P. K. SAHOO, L. M. DAS, M. K. G. BABU AND S. N. NAIK, *Fuel*, **2007**, 86, 448–454.
47. S. ÇAYNAK, M. GÜRÜ, A. BIÇER, A. KESKIN AND Y. İÇİNGÜR, *Fuel*, **2009**, 88, 534–538.
48. C. KAYA, C. HAMAMCI, A. BAYSAL, O. AKBA, S. ERDOGAN AND A. SAYDUT, *Renew Energy*, **2009**, 34, 1257–1260.
49. S. SINHA, A. K. AGARWAL AND S. GARG, *Energy Convers Manag*, **2008**, 49, 1248–1257.
50. S. KALLIGEROS, F. ZANNIKOS, S. STOURNAS, E. LOIS, G. ANASTOPOULOS, C. TEAS AND F. SAKELLAROPOULOS, *Biomass Bioenergy*, **2003**, 24, 141–149.
51. Agência Brasil, [https://agenciabrasil.ebc.com.br/economia/noticia/2020-03/de-2000-2018-brasil-perdeu-76-de-suas-florestas-diz-ibge#:~:text=Um levantamento publicado hoje \(26,42%2C4%25 do território.](https://agenciabrasil.ebc.com.br/economia/noticia/2020-03/de-2000-2018-brasil-perdeu-76-de-suas-florestas-diz-ibge#:~:text=Um levantamento publicado hoje (26,42%2C4%25 do território.)

52. Terrabrasilis, Mapa de vegetação, <http://terrabrasilis.dpi.inpe.br/>.
53. Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais.
54. World Wide Fund for Nature (WWF), Ameaças ao Cerrado, [https://www.wwf.org.br/natureza_brasileira/questoes_ambientais/biomas/bioma_cerrado/bioma_cerrado_ameacas/#:~:text=Depois da Mata Atlântica%2C o,água \(bloqueio por terra\)](https://www.wwf.org.br/natureza_brasileira/questoes_ambientais/biomas/bioma_cerrado/bioma_cerrado_ameacas/#:~:text=Depois da Mata Atlântica%2C o,água (bloqueio por terra).).
55. G. KNOTHE AND L. F. RAZON, , DOI:10.1016/j.pecc.2016.08.001.
56. R. ALIZADEH, P. D. LUND AND L. SOLTANISEHAT, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2020**, 134, 110326.
57. G. KNOTHE, *Fuel Processing Technology*, **2007**, 88, 669–677.
58. N. KUMAR, *Fuel*, **2017**, 190, 328–350.
59. G. KARAVALAKIS AND S. STOURNAS, *Energy & Fuels*, **2010**, 24, 3682–3686.
60. C. ALAGU, B. NAGAPPAN, J. JAYARAMAN AND A. ARUL GNANA DHAS, *Environmental Science and Pollution Research*, **2018**, 25, 17634–17644.
61. K. VARATHARAJAN AND D. S. PUSHPARANI, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2018**, 82, 2017–2028.
62. M. MITTELBAACH AND S. SCHOBBER, *J Am Oil Chem Soc*, **2003**, 80, 817–823.
63. J. PULLEN AND K. SAEED, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2012**, 16, 5924–5950.
64. Z. YAAKOB, B. N. NARAYANAN, S. PADIKKAPARAMBIL, S. UNNI K. AND M. AKBAR P., *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **2014**, 35, 136–153.
65. B. W. STAMPS, C. L. BOJANOWSKI, C. A. DRAKE, H. S. NUNN, P. F. LLOYD, J. G. FLOYD, K. A. EMMERICH, A. R. NEAL, W. J. CROOKES-GOODSON AND B. S. STEVENSON, *Front Microbiol*, DOI:10.3389/fmicb.2020.00167.
66. T. JOSE AND K. ANAND, *Fuel*, **2016**, 177, 190–196.
67. D. SINGH, D. SHARMA, S. SONI, S. SHARMA, P. SHARMA AND A. JHALANI, *Fuel*, **2020**, 262, 116553.
68. A. DUDEK, T. ARODZ AND J. GALVEZ, *Comb Chem High Throughput Screen*, **2006**, 9, 213–228.
69. C. C. DA SILVA, B. S. PACHECO, DE F. COELHO, SAMANTHA, L. M. BERNEIRA, M. A. Z. DOS SANTOS, L. P. PIZZUTI AND C. M. PEREIRA, in *Increased Biodiesel Efficiency*, **2018**, pp. 81–110.
70. C. ZHUANG, W. ZHANG, C. SHENG, W. ZHANG, C. XING AND Z. MIAO, *Chem Rev*, **2017**, 117, 7762–7810.
71. C. B. PATIL, S. K. MAHAJAN AND S. A. KATTI, *Journal of Pharmaceutical Sciences and Research*, **2009**, 1, 11–22.
72. S. FRANCESCHELLI, M. PESCE, I. VINCIGUERRA, A. FERRONE, G. RICCIONI, P. ANTONIA, A. GRILLI, M. FELACO AND L. SPERANZA, *Molecules*, **2011**, 16, 5720–5734.
73. C. SULPIZIO, A. ROLLER, G. GIESTER AND A. ROMPEL, *Monatshefte für Chemie - Chemical Monthly*, , DOI:10.1007/s00706-016-1812-9.
74. B. P. BANDGAR, S. S. GAWANDE, R. G. BODADE, J. V. TOTRE AND C. N. KHOBRADE, *Bioorg Med Chem*, **2010**, 18, 1364–1370.
75. Y. OHKATSU AND T. SATOH, *Journal of the Japan Petroleum Institute*, **2008**, 51, 298–308.
76. B. MATHEW, A. A. ADENIYI, M. JOY, G. E. MATHEW, A. SINGH-PILLAY, C. SUDARSANAKUMAR, M. E. S. SOLIMAN AND J. SURESH, *J Mol Struct*, **2017**, 1146, 301–308.
77. P. M. SIVAKUMAR, V. PRABHAWATHI AND M. DOBLE, *SAR QSAR Environ Res*, **2010**, 21, 247–263.
78. Ü. Ö. ÖZDEMİR, P. GÜVENÇ, E. ŞAHİN AND F. HAMURCU, *INORGANICA CHIM ACTA*, **2009**, 362, 2613–2618.
79. O. O. AJANI, C. A. OBAFEMI, O. C. NWINYI AND D. A. AKINPELU, *Bioorg Med Chem*, **2010**, 18, 214–221.
80. W. A. SILVA, C. K. Z. ANDRADE, H. B. NAPOLITANO, I. VENCATO, C. LARIUCCI, M. M. R. C. DE CASTRO AND A. J. CAMARGO, *J Braz Chem Soc*, **2013**, 24, 133–144.
81. H. N. ELSOHLY, A. S. JOSHI, A. C. NIMROD, L. A. WALKER AND A. M. CLARK, *Planta Med*, **2001**, 67, 87–89.
82. A. DAS RAJAT GHOSH, **2014**, 3, 578–595.
83. Y. DENG, Y. HE, T. ZHAN AND Q. HUANG, *Carbohydr Res*, **2010**, 345, 1872–1876.
84. Y. XUE, Y. ZHENG, L. AN, L. ZHANG, Y. QIAN, D. YU, X. GONG AND Y. LIU, *Comput Theor Chem*, **2012**, 982, 74–83.
85. C. A. MOREIRA, E. C. M. FARIA, J. E. QUEIROZ, V. S. DUARTE, M. DO N. GOMES, A. M. DA SILVA, R. L. G. DE PAULA, C. H. J. FRANCO, E. H. DE S. CAVALCANTI, G. L. B. DE AQUINO and H. B. NAPOLITANO, *Fuel Processing Technology*, **2022**, 227, 107122.
86. C. DA SILVA, B. PACHECO, S. DE FREITAS, L. BERNEIRA, M. DOS SANTOS, L. PIZZUTI AND C. DE PEREIRA, *Increased Biodiesel Efficiency*, **2018**, 81–110.
87. Patent BR 10 **2013** 030049 7 A2, 2013.
88. E. J. ; LENARDÃO, A. M. ; BARCELLOS, F. ; PENTEADO, D. ; ALVES and G. PERIN, **2017**, 192–237.
89. V. V. KOUZNETSOV, C. M. MELÉNDEZ GÓMEZ, J. L. V. PEÑA AND L. Y. VARGAS-MÉNDEZ, in *Discovery and Development of Therapeutics from Natural Products Against Neglected Tropical Diseases*, Elsevier, **2019**, pp. 87–164.

90. A. OLIVA, K. M. MEEPAGALA, D. E. WEDGE, D. HARRIES, A. L. HALE, G. ALIOTTA AND S. O. DUKE, *J Agric Food Chem*, **2003**, 51, 890–896.
91. Y.-L. CHEN, K.-C. FANG, J.-Y. SHEU, S.-L. HSU AND C.-C. TZENG, *J Med Chem*, **2001**, 44, 2374–2377.
92. L. M. NAINWAL, S. TASNEEM, W. AKHTAR, G. VERMA, M. F. KHAN, S. PARVEZ, M. SHAQUIQUZZAMAN, M. AKHTER and M. M. ALAM, *Eur J Med Chem*, **2019**, 164, 121–170.
93. A. MARELLA, O. P. TANWAR, R. SAHA, M. R. ALI, S. SRIVASTAVA, M. AKHTER, M. SHAQUIQUZZAMAN and M. M. ALAM, *Saudi Pharmaceutical Journal*, **2013**, 21, 1–12.
94. P. SHI, L. WANG, K. CHEN, J. WANG and J. ZHU, *Org Lett*, **2017**, 19, 2418–2421.
95. E. RAGA, M. ESCOLANO, J. TORRES, F. RABASA-ALCAÑIZ, M. SÁNCHEZ-ROSELLÓ AND C. DEL POZO, *Adv Synth Catal*, **2019**, 361, 1102–1107.
96. L. SAVEGNAGO, A. I. VIEIRA, N. SEUS, B. S. GOLDANI, M. R. CASTRO, E. J. LENARDÃO AND D. ALVES, *Tetrahedron Lett*, **2013**, 54, 40–44.
97. M.-A. YOON, T.-S. JEONG, D.-S. PARK, M.-Z. XU, H.-W. OH, K.-B. SONG, W. S. LEE AND H.-Y. PARK, *Biol Pharm Bull*, **2006**, 29, 735–739.
98. M. SANKARAN, C. KUMARASAMY, U. CHOKKALINGAM and P. S. MOHAN, *BIOORG MED CHEM LETT*, **2010**, 20, 7147–7151.
99. C. PRAVEEN, P. DHEENKUMAR, D. MURALIDHARAN and P. T. PERUMAL, *Bioorg Med Chem Lett*, **2010**, 20, 7292–7296.
100. M. ORHAN PUSKULLU, B. TEKINER AND S. SUZEN, *Mini Rev Med Chem*, **2013**, 13, 365–372.
101. D. KAMINSKY and R. I. MELTZER, *J Med Chem*, **1968**, 11, 160–163.
102. U. FUHR, E. M. ANDERS, G. MAHR, F. SÖRGEL and A. H. STAIB, *ANTIMICROB AGENTS CHEMOTHER*, **1992**, 36, 942–948.
103. D. T. W. CHU and P. B. FERNANDES, **1991**, pp. 39–144.
104. M. P. WENTLAND and J. B. CORNETT, **1985**, pp. 145–154.
105. R. MUSIOL, M. SERDA, S. HENSEL-BIELOWKA and J. POLANSKI, *Curr Med Chem*, **2010**, 17, 1960–1973.
106. B. ZHANG, *Arch Pharm (Weinheim)*, **2019**, 352, 1800382.
107. A. POLAK, *Mycoses*, **1990**, 33, 172–178.
108. O. MOUSSAOUI, S. BYADI, M. EDDINE HACHIM, R. SGHYAR, L. BAHISIS, K. MOSLOVA, A. ABOULMOUHAJIR, Y. K. RODI, Č. PODLIPNIK, E. M. EL HADRAMI and S. CHAKROUNE, *J Mol Struct*, **2021**, 1241, 130652.
109. J. P. S. FERREIRA, S. M. CARDOSO, F. A. ALMEIDA PAZ, A. M. S. SILVA and V. L. M. SILVA, *New Journal of Chemistry*, **2020**, 44, 6501–6509.
110. I. KOSTOPOULOU, A. DIASSAKOU, E. KAVETSOU, E. KRITSI, P. ZOUMPOULAKIS, E. PONTIKI, D. HADJIPAVLOU-LITINA and A. DETSI, *Mol Divers*, **2021**, 25, 723–740.
111. I. HAMLAOUI, R. BENCHERAIET, R. BENSEGUENI and M. BENCHARIF, *J Mol Struct*, **2018**, 1156, 385–389.
112. C. H. PRAVEEN KUMAR, M. S. KATAGI and B. P. NANDESHWARAPPA, *Chemical Data Collections*, **2022**, 42, 100955.
113. S. SARVESWARI, V. VIJAYAKUMAR, R. SIVA and R. PRIYA, *Appl Biochem Biotechnol*, **2015**, 175, 43–64.
114. M. I. ABDULLAH, A. MAHMOOD, M. MADNI, S. MASOOD and M. KASHIF, *Bioorg Chem*, **2014**, 54, 31–37.
115. C.-J. ZHENG, S.-M. JIANG, Z.-H. CHEN, B.-J. Ye and H.-R. PIAO, *Arch Pharm (Weinheim)*, **2011**, 344, 689–695.
116. N. S. RAO, A. B. SHAIK, S. R. ROUTHU, S. M. A. HUSSAINI, S. SUNKARI, A. V. S. RAO, A. M. REDDY, A. ALARIFI AND A. KAMAL, *ChemistrySelect*, **2017**, 2, 2989–2996.
117. Y.-F. GUAN, X.-J. LIU, X.-Y. YUAN, W.-B. LIU, Y.-R. LI, G.-X. YU, X.-Y. TIAN, Y.-B. ZHANG, J. SONG, W. LI AND S.-Y. ZHANG, *MOLECULES*, **2021**, 26, 4899.
118. S. MIRZAEI, F. HADIZADEH, F. EISVAND, F. MOSAFFA AND R. GHODSI, *J Mol Struct*, **2020**, 1202, 127310.
119. K. V. SASHIDHARA, S. R. AVULA, V. MISHRA, G. R. PALNATI, L. R. SINGH, N. SINGH, Y. S. CHHONKER, P. SWAMI, R. S. BHATTA AND G. PALIT, *Eur J Med Chem*, **2015**, 89, 638–653.
120. J. C. COA, E. GARCÍA, M. CARDA, R. AGUT, I. D. VÉLEZ, J. A. MUÑOZ, L. M. YEPES, S. M. ROBLEDO and W. I. CARDONA, *Medicinal Chemistry Research*, **2017**, 26, 1405–1414.
121. D. ATUKURI, V. S. S. R. V. L. P. R and R. M.M, *Bioorg Chem*, **2020**, 105, 104419.
122. M. F. A. MOHAMED and G. E.-D. A. ABUO-RAHMA, *RSC Adv*, **2020**, 10, 31139–31155.
123. M. ROUSSAKI, B. HALL, S. C. LIMA, A. C. DA SILVA, S. WILKINSON and A. DETSI, *Bioorg Med Chem Lett*, **2013**, 23, 6436–6441.
124. M. R. GRIMMETT, *Imidazole and Benzimidazole Synthesis*, Academic Press, San Diego, **2005**.
125. T. BENINCORI and F. SANNICOLÒ, *J Heterocycl Chem*, **1988**, 25, 1029–1033.

126. CH. ROSENBLUM and H. T. MERIWETHER, *Journal of Radioanalytical Chemistry*, **1970**, 6, 379–384.
127. N. SINGH, A. PANDURANGAN, K. RANA, P. ANAND, A. AHAMAD and A. K. TIWARI, *International Current Pharmaceutical Journal*, **2012**, 1, 110–118.
128. F. FEI AND Z. ZHOU, *Expert Opin Ther Pat*, **2013**, 23, 1157–1179.
129. V. A. KOSOLAPOV, A. A. SPASOV, V. A. ANISIMOVA and O. N. ZHUKOVSKAYA, in *Antioxidants*, IntechOpen, **2019**.
130. S. RAJASEKARAN, R. GOPALKRISHNA and A. CHATTERJEE, *International Journal of Drug Development and Research*, **2012**, 4, 303–309.
131. A. TS. MAVROVA, D. YANCHEVA, N. ANASTASSOVA, K. ANICHINA, J. ZVEZDANOVIC, A. DJORDJEVIC, D. MARKOVIC and A. SMELCEROVIC, *Bioorg Med Chem*, **2015**, 23, 6317–6326.
132. S. R. M. DE BITTENCOURT, J. O. M. MENTEN, C. A. DOS S. ARAKI, M. H. D. DE MORAES, A. DA R. RUGAI, M. J. DIEGUEZ and R. D. VIEIRA, *Revista Brasileira de Sementes*, **2007**, 29, 214–222.
133. R. M. HAUPTMANN, J. M. WIDHOLM and J. D. PAXTON, *Plant Cell Rep*, **1985**, 4, 129–132.
134. CAS Number: 10605-21-7, **2019**.
135. E. NAUHA, H. SAXELL, M. NISSINEN, E. KOLEHMAINEN, A. SCHÄFER and R. SCHLECKER, *CrystEngComm*, **2009**, 11, 2536.
136. *APVMA. Australian Pesticide and Veterinary Medicines Authority*, **2010**.
137. USEPA. United States Environmental Protection Agency., .
138. B. D. (Bernard D. Cullity and S. R. Stock, *Elements of x-ray diffraction*, Prentice Hall, **2001**.
139. J. PICKWORTH. GLUSKER and K. N. TRUEBLOOD, *Crystal structure analysis : a primer*, Oxford University Press, **2010**.
140. CARMELO. GIACOVAZZO, *Fundamentals of crystallography*, Oxford University Press, **2011**.
141. M. M. WOOLFSON, *An introduction to X-ray crystallography*, Cambridge University Press, United Kingdom, 2nd edn., **1997**.
142. C. F. MACRAE, I. J. BRUNO, J. A. CHISHOLM, P. R. EDGINGTON, P. MCCABE, E. PIDCOCK, L. RODRIGUEZ-MONGE, R. TAYLOR, J. VAN DE STREEK and P. A. WOOD, *J Appl Crystallogr*, , DOI:10.1107/S0021889807067908.
143. M. A. S. S.K. WOLFF, D.J. GRIMWOOD, J.J. MCKINNON, M.J. TURNER, D. JAYATILAKA, M. J. TURNER, J. J. MCKINNON, S. K. WOLFF, D. J. GRIMWOOD, P. R. SPACKMAN, D. JAYATILAKA and M. A. SPACKMAN, *University of Western Australia*, **2012**.
144. A. D. MCLEAN AND G. S. CHANDLER, *J Chem Phys*, **1980**, 72, 5639–5648.
145. R. KRISHNAN, J. S. BINKLEY, R. SEEGER and J. A. POPLER, *J Chem Phys*, **1980**, 72, 650–654.
146. M. J. ; FRISCH, G. W. TRUCKS, H. B. SCHLEGEL, G. E. SCUSERIA, M. A. ROBB, J. R. CHEESEMAN, G. SCALMANI, V. BARONE, B. MENNUCCI, G. A. PETERSSON, H. NAKATSUJI, M. CARICATO, X. LI, H. P. HRATCHIAN, A. F. IZMAYLOV, J. BLOINO, Z. G., J. L. SONNENBERG, M. HADA, M. EHARA, K. TOYOTA, R. FUKUDA, J. HASEGAWA, M. ISHIDA, T. NAKAJIMA, H. Y., O. KITAO, H. NAKAI, T. VREVEN, J. A. MONTGOMERY JR., J. E. PERALTA, F. OGLIARO, M. BEARPARK, J. J. HEYD, K. N. BROTHERS E.; KUDIN, V. N. STAROVEROV, R. KOBAYASHI, N. J., K. RAGHAVACHARI, A. RENDELL, J. C. BURANT, S. S. IYENGAR, J. TOMASI, M. COSSI, N. REGA, J. M. MILLAM, M. KLENE, J. E. KNOX, J. B. CROSS, V. BAKKEN, C. ADAMO, J. J., R. GOMPERTS, R. E. STRATMANN, O. YAZYEV, A. J. AUSTIN, R. CAMMI, C. POMELLI, J. W. OCHTERSKI, R. L. MARTIN, K. MOROKUMA, V. G. ZAKRZEWSKI, G. A. VOTH, P. SALVADOR, J. J. DANNENBERG, S. DAPPRICH, A. D. DANIELS, Ö. FARKAS, J. B. FORESMAN, J. V. ORTIZ, J. CIOSLOWSKI and D. J. FOX, .

Vitor S. Duarte* & Hamilton B. Napolitano

Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, GO, Brasil.

*E-mail: vitor.sduarte@seduc.go.gov.br

Fundamentos da Dinâmica Molecular *Ab Initio*

Nayara D. Coutinho, Lilian T. F. M. Camargo & Ademir J. Camargo

A dinâmica molecular surge como uma ferramenta poderosa na descrição dos comportamentos dinâmicos microscópicos de diferentes tipos de sistemas encontrados na ciência. As equações utilizadas para se obter as posições e as velocidades dos átomos no sistema são baseadas nas leis de Newton. A simplicidade destas equações acopladas ao desenvolvimento de potenciais cada vez mais robustos tem permitido a interpretação e solução de vários desafios da química moderna. E recentemente, o desenvolvimento de computadores mais eficientes tem permitido o avanço da dinâmica molecular *ab initio*, onde as forças que atuam sobre o núcleo são calculadas a partir de cálculos de estrutura eletrônica que são executados em tempo real, à medida que a trajetória é gerada. As aplicações deste método permeiam o estado da arte da química, permitindo a simulação de compostos biológicos, desenvolvimento de novos fármacos e materiais, compreensão de mecanismos moleculares e reacionais, interações de curto e longo alcance, identificação de estados de transições e compreensão de comportamentos cinéticos não convencionais. Este trabalho tem como objetivo fornecer os fundamentos teóricos das principais abordagens dentro da dinâmica molecular *ab initio*: Dinâmica molecular de Erhenfest, Dinâmica molecular de Born-Oppenheimer e Dinâmica molecular de Car-Parrinello.

Palavras-chave: *dinâmica molecular ab initio; dinâmica molecular de born-oppenheimer; dinâmica molecular de car-parrinello.*

Molecular dynamics emerges as a powerful tool in describing the microscopic dynamic behaviors of different types of systems found in science. The equations used to obtain the positions and velocities of atoms in the system are based on Newton's laws. The simplicity of these equations, coupled with the development of increasingly robust potentials has allowed the interpretation and solution of various challenges in modern chemistry. Recently, the development of more efficient computers has enabled the progress of *ab initio* molecular dynamics, where the forces acting on the nuclei are calculated from electronic structure calculations that are performed on-the fly as the trajectory is generated. The application of this method permeates the state-of-the-art in chemistry, allowing for the simulation of biological molecules, the development of new drugs and materials, understanding of molecular and reactive mechanisms, short and long-range interactions, identification of transition states, and understanding of unconventional kinetic behavior. This paper aims to provide the theoretical fundamentals of the main approaches within *ab initio* molecular dynamics: Erhenfest Molecular Dynamics, Born-Oppenheimer Molecular Dynamics, and Car-Parrinello Molecular Dynamics

Keywords: *erhenfest molecular dynamics; born-oppenheimer molecular dynamics; and car-parrinello molecular dynamics.*

Introdução

O aumento no desempenho de computadores ao longo das últimas décadas, juntamente com avanços na matemática, química e física, levou ao nascimento de uma nova forma de fazer ciência, que está na intersecção da teoria com o experimento, referida como ciência computacional, que permite elaborar experimentos computacionais sob condições perfeitamente controláveis e reprodutíveis.¹ Atualmente, os resultados obtidos através das simulações computacionais^{2,3} estão cada vez mais condizentes com os resultados experimentais, chegando, em alguns casos, a realizar boas predições a respeito de dados que não são facilmente mensuráveis.⁴⁻⁷

Dentro deste contexto, uma técnica bastante promissora é a dinâmica molecular, que tem como objetivo modelar o comportamento dinâmico microscópico de diferentes tipos de sistemas encontrados na química,⁸⁻¹⁰ física¹¹ e biologia.¹²⁻¹⁴ A história da Dinâmica Molecular começa nos anos 1950, quando os primeiros computadores realizaram simulações de sistemas simples.¹⁵ Nas duas últimas décadas o crescimento desta técnica foi exponencial, proporcionando em 2013, que pesquisadores da área ganhassem o prêmio Nobel de Química.¹⁶

Um dos maiores desafios da Dinâmica Molecular consiste no cálculo das forças interatômicas.^{17,18} Nas simulações clássicas elas são calculadas a partir de funções empíricas as quais reproduzem dados experimentais ou obtidos a partir de cálculos acurados por estrutura eletrônica.^{17,19} As equações utilizadas para se obter as posições e as velocidades dos átomos no sistema são baseadas nas leis de Newton. Essas equações são integradas numericamente e o resultado são as posições e as velocidades dos átomos. Devido a simplicidade das equações envolvidas na Dinâmica Molecular Clássica, esta é uma excelente ferramenta no estudo de sistemas grandes, o que gera um tempo de cálculo que é relativamente curto quando comparado com dinâmicas quânticas e semiquânticas.^{17,20}

No entanto, as Dinâmicas Moleculares Clássicas (DMC) possuem algumas limitações. Fenômenos essencialmente

quânticos, como o tunelamento, não podem ser descritos. Outra dificuldade própria da DMC é a necessidade antecipada da determinação dos potenciais fixos. Apesar dos progressos na elaboração desses potenciais, muitas vezes a possibilidade de transferência para sistemas diferentes dos quais tenham sido providos é restrito.

Com o objetivo de eliminar tais dificuldades, as dinâmicas moleculares onde as forças são calculadas a partir de cálculos de estrutura eletrônica têm sido muito atrativas. As dinâmicas moleculares *ab initio* (DMAI) calculam as forças que atuam sobre o núcleo a partir de cálculos de estrutura eletrônicas que são executados em tempo real (*on-the-fly*) à medida que a trajetória é gerada. Diferentemente da DMC (método semiempírico), na dinâmica *ab initio* as variáveis eletrônicas são calculadas a cada passo da simulação e não mais definidas *a priori* como potenciais de interação fixo.²⁰ A principal vantagem dessa ferramenta é que ela contabiliza vários fenômenos físico-químicos sob diferentes condições externas (pressão, temperatura e ambiente molecular) sem precisar da superfície de energia potencial.

As aplicações das dinâmicas moleculares *ab initio* permeiam o estado da arte em diferentes campos da ciência, possibilitando a simulação de compostos biológicos, o desenvolvimento de novos fármacos e materiais, compreensão de mecanismos moleculares,^{21,22} identificação de interações de curto e longo alcance,^{22,23} e de estados de transições, bem como a compreensão de comportamentos cinéticos não convencionais.²⁴⁻²⁹ Dentre deste contexto, este estudo pretende fornecer uma visão abrangente da DMAI, com foco nos fundamentos teóricos e abordagens das principais abordagens dentro desse campo. Especificamente, discutiremos três métodos proeminentes da DMAI: Dinâmica molecular de Erhenfest, Dinâmica molecular de Born-Oppenheimer e Dinâmica molecular de Car-Parrinello.^{20,30}

O artigo está organizado da seguinte forma: As seções 2 e 3 fornecem uma base teórica da dinâmica molecular, incluindo as equações que governam as simulações. A seção 4, 5 e 6 aprofundam nos três mais conhecidos métodos da DMAI, discutindo seus conceitos subjacentes, pontos fortes e

limitações. Nas seções 7 e 8 são apresentados os conceitos de ondas planas e pseudopotenciais que são amplamente utilizados para a solução da estrutura eletrônica nas DMAI. Na seção 9 são discutidas algumas das propriedades que podem ser extraídas a partir das DMAI. Por fim, a seção 10 conclui o artigo e delinea direções futuras e desafios no campo da DMAI.

Equações do Movimento

A dinâmica Molecular é fundamentada nos princípios da mecânica clássica e consiste basicamente na solução numérica, passo-a-passo, das equações clássicas do movimento. Considerando um sistema com N partículas que se move sob a influência de um potencial, e que estas partículas podem ser descritas por suas posições e pelo momento, a união de todas as posições (ou momento) é definido como \mathbf{R} . Desta forma, o Hamiltoniano do sistema é definido como:

$$\mathcal{H}(\mathbf{R}^N, \mathbf{P}^N) = \sum_{I=1}^N \frac{\mathbf{P}_I^2}{2M_I} + U(\mathbf{R}^N). \quad (1)$$

As forças em cada partícula são derivadas a partir do potencial

$$\mathbf{F}(\mathbf{R}^N) = -\frac{\partial U(\mathbf{R}^N)}{\partial \mathbf{R}_I}. \quad (2)$$

Assim, as equações do movimento podem ser obtidas a partir da formulação clássica de Hamilton,

$$\dot{\mathbf{R}}_I = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{P}_I} = \frac{\mathbf{P}_I}{M_I}, \quad (3)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_I = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{R}_I} = \mathbf{F}_I(\mathbf{R}^N). \quad (4)$$

As equações do movimento também podem ser derivadas a partir do formalismo Lagrangeano, onde a Lagrangeana

$$\mathcal{L}(\mathbf{R}^N, \dot{\mathbf{R}}^N) = \sum_{I=1}^N \frac{1}{2} M_I \dot{\mathbf{R}}_I^2 - U(\mathbf{R}^N) \quad (5)$$

e a equação de Euler-Lagrange associada

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{R}}_I} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{R}_I} \quad (6)$$

levam ao mesmo resultado. As duas formulações são equivalentes, no entanto, é mais comum na literatura o uso do formalismo Lagrangeano para descrever dinâmicas moleculares *ab initio*.¹⁷

O procedimento padrão para a solução das equações do movimento consiste em discretizar as equações diferenciais acopladas, ou seja, transformá-las em diferenças finitas. Então, partindo da conjectura de que o potencial de interação, e, portanto, as forças entre as partículas, são funções contínuas e diferenciáveis, assim, se as condições iniciais do sistema no instante t_0 são conhecidas, a posição e a velocidade e qualquer outra variável dinâmica podem ser adquiridas em um instante posterior $t + \Delta t$ com a precisão adequada. Esse processo é conhecido integração numérica.

Integração das Equações do Movimento

O principal objetivo da integração numérica das equações de movimento é encontrar uma expressão que defina as posições $\mathbf{R}(t+\Delta t)$ em termos das já conhecidas posições no tempo t . Existe uma variedade de algoritmos, todos baseados em expansões do tipo da série de Taylor. Devido a simplicidade e precisão, os algoritmos mais utilizados nas dinâmicas moleculares são o Verlet e o *Velocity Verlet*.¹⁷ O algoritmo de Verlet utiliza as posições e as acelerações dos átomos no tempo t e as posições do passo anterior $\mathbf{R}(t-\Delta t)$, para determinar as novas posições no tempo $t+\Delta t$, de acordo com as seguintes equações:

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}(t)\Delta t^2 \quad (7)$$

$$\mathbf{R}(t - \Delta t) = \mathbf{R}(t) - \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{1}{2} \mathbf{a}(t)\Delta t^2 \quad (8)$$

Somando-se as duas equações e isolando, obtêm-se:

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = 2\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t - \Delta t) + \mathbf{a}(t)\Delta t^2. \quad (9)$$

Substituindo a aceleração na Equação (9), obtêm-se:

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = 2\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{F}}{M}(t)\Delta t^2 \quad (10)$$

As forças podem ser calculadas usando a equação $\mathbf{F} = -\nabla U(\mathbf{R}^N)$. Este algoritmo tem a vantagem de ser simples, acurado, estável e ser bastante popular entre os simuladores. No entanto, tem a desvantagem de não calcular as velocidades diretamente a partir das forças. Embora não sejam necessárias para encontrar as novas posições, o seu conhecimento é por vezes necessário, como por exemplo, para calcular a energia cinética K , cuja avaliação é necessária para testar a conservação da energia total e verificar se as simulações de DM estão procedendo de forma correta. No algoritmo de Verlet as velocidades podem ser calculadas como:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{\mathbf{R}(t + \Delta t) - \mathbf{R}(t - \Delta t)}{2\Delta t} \quad (11)$$

Como referido anteriormente, a principal limitação do algoritmo de Verlet é que as velocidades no instante t só são calculadas após obter as posições no instante t , provocando um grande armazenamento de dados na memória do computador. Com o objetivo de sanar tal dificuldade, modificações no algoritmo de Verlet foram feitas, dando origem ao *Velocity Verlet*. As posições no instante $t + \Delta t$ são derivadas usando a expansão de Taylor:

$$\mathbf{R}(t + \Delta t) = \mathbf{R}(t) + \mathbf{v}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{a}(t)}{2}\Delta t^2. \quad (12)$$

A Equação (12) depende das velocidades, a qual pode-se calcular como segue:

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{a}'(t)}{2}\Delta t^2. \quad (13)$$

Usando o método das diferenças finitas para frente, $\mathbf{a}'(t)$ é obtido:

$$\mathbf{a}'(t) = \frac{\mathbf{a}(t + \Delta t) - \mathbf{a}(t)}{\Delta t}. \quad (14)$$

Substituindo (14) em(13):

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \mathbf{a}(t)\Delta t + \frac{\mathbf{a}(t + \Delta t) - \mathbf{a}(t)}{2\Delta t}\Delta t^2, \quad (15)$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{a}(t + \Delta t) + \mathbf{a}(t)}{2}\Delta t, \quad (16)$$

$$\mathbf{v}(t + \Delta t) = \mathbf{v}(t) + \frac{\mathbf{F}(t + \Delta t) + \mathbf{F}(t)}{2M}\Delta t. \quad (17)$$

Este algoritmo é, com certeza, um dos mais frequentemente utilizados em simulações moleculares, devido, principalmente, à sua facilidade de implementação. Uma estratégia geral é o seguinte:

- Dado $\mathbf{R}(t)$ e $\mathbf{v}(t)$ e no instante t , primeiramente é calculada a força em cada partícula, usando o campo de força;
- Novas posições são obtidas aplicando a Equação 12;
- Novas forças são calculadas para novas posições;
- Volta a etapa 1..

Após conhecer as trajetórias das partículas no espaço de fase, o próximo passo consiste em obter as propriedades macroscópicas do sistema. Partindo da hipótese de ergodicidade, essas propriedades podem ser facilmente obtidas ao realizar médias temporais a partir da solução das equações do movimento.

Deste modo, pode-se determinar, a temperaturas finitas, as propriedades termodinâmicas, como capacidade térmica, energia livre, entropia e pressão, bem como, a estrutura microscópica do sistema, que envolvem, por exemplo, comprimento de ligação e distribuição de ângulos de ligação.

CONTROLE DA TEMPERATURA

As simulações padrões de DM ocorrem no *ensemble* microcanônico, onde a temperatura não é uma variável fixa e predefinida. No entanto, é interessante que a simulação de uma infinidade de sistemas físico-químicos ocorra a uma temperatura média controlada.¹⁷

Durante estas simulações o controle da temperatura pode ser obtido através de um processo conhecido como termostato, que nada mais é, do que acoplar ao sistema um banho térmico com uma temperatura fixa. O termostato mais utilizado, atualmente, nas simulações de dinâmica molecular é conhecido como Termostato de Nosé-Hoover.³¹

A proposta feita por Nosé, consiste em implementar uma Lagrangeana estendida, na qual é introduzida um grau de liberdade extra e seu momento conjugado, que acopla o sistema simulado e o banho térmico externo.

Assumindo que um sistema com N partículas, com coordenadas R'_i , massa M'_i , energia potencial $U(R^N)$ e momento P'_i , um grau de liberdade adicional, s é introduzido ao sistema agindo como sistema externo a este sistema simulado. Também são introduzidas variáveis virtuais (posição R_i , momento, P_i , e tempo, t) as quais são relacionadas com as variáveis reais (R'_i, P'_i, t) como:

$$\mathbf{R}'_i = \mathbf{R}_i, \quad (18)$$

$$\mathbf{P}'_i = \frac{\mathbf{P}_i}{s}, \quad (19)$$

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{s} \quad (20)$$

$$s' = s$$

A Lagrangeana estendida do sistema, em função do número de partículas N e da variável s em termos das variáveis virtuais é dada por:

$$\mathcal{L}_{\text{NOSE}} = \sum_{i=1}^N \frac{M_i s^2 \dot{\mathbf{R}}_i^2}{2} - U(\mathbf{R}^N) + \frac{Q}{2} \dot{s}^2 - g k_B T \ln s, \quad (21)$$

onde Q é massa efetiva associada a variável s e o parâmetro g é igual ao número de graus de liberdade do sistema. A dependência logarítmica do potencial sobre a variável s é essencial para controlar a temperatura.

Os momentos conjugados de R'_i e s são:

$$\mathbf{P}_i = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{NOSE}}}{\partial \dot{\mathbf{R}}_i} = M_i s^2 \dot{\mathbf{R}}_i, \quad (22)$$

$$P_s = \frac{\partial \mathcal{L}_{\text{NOSE}}}{\partial \dot{s}} = Q \dot{s}. \quad (23)$$

Assim, a Hamiltoniana estendida do sistema para N partículas em função da variável s em termos das variáveis virtuais é:

$$\mathcal{H}_{\text{NOSE}} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i s^2} + U(\mathbf{R}^N) + \frac{P_s^2}{2Q} + g k_B T \ln s. \quad (24)$$

Partindo do formalismo Hamiltoniano as equações de movimento são definidas como:

$$\frac{d\mathbf{R}_i}{dt'} = \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{NOSE}}}{\partial \mathbf{P}_i} = \frac{\mathbf{P}_i}{M_i s^2}, \quad (25)$$

$$\frac{d\mathbf{P}_i}{dt'} = -\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{NOSE}}}{\partial \mathbf{R}_i} = -\frac{\partial U}{\partial \mathbf{R}_i} = \mathbf{F}, \quad (26)$$

$$\frac{ds}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}_{\text{NOSE}}}{\partial P_s} = \frac{P_s}{Q}, \quad (27)$$

$$\frac{dP_s}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}_{\text{NOSE}}}{\partial s} = \frac{\sum_i \frac{\mathbf{P}_i^2}{M_i s^2} - g k_B T}{s}, \quad (28)$$

Vale ressaltar que a hamiltoniana estendida, $\mathcal{H}_{\text{NOSE}}$ é conservada quando o sistema estendido envolve as equações de movimento. Assim, este método produz um *ensemble* microcanônico para o sistema estendido.

Mesmo sendo uma boa ferramenta, o termostato de nosé apresenta limitação. As velocidades são escalonadas em função de s (que é variável durante a simulação). Desta forma, não há correspondência direta entre as velocidades e tempo no sistema estendido e real. Em 1986, Hoover desenvolveu uma formulação alternativa que resolvia este problema introduzindo um coeficiente de atrito termodinâmico, ξ . A nova hamiltoniana estendida é descrita como:

$$\mathcal{H}_{\text{NH}} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} + U(\mathbf{R}^N) + \xi^2 \frac{Q}{2} + g k_B T s, \quad (29)$$

e as equações do movimento:

$$\dot{\mathbf{R}}_i = \frac{\mathbf{P}_i}{M_i}, \quad (30)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_i = -\frac{\partial U(\mathbf{R}^N)}{\partial \mathbf{R}_i} - \xi \mathbf{P}_i, \quad (31)$$

$$\dot{\xi} = \frac{s' P'_s}{Q}, \quad (32)$$

$$\dot{\xi} = \frac{\left(\sum_i \frac{\mathbf{P}_i^2}{2M_i} - g k_B T \right)}{Q}, \quad (33)$$

$$\frac{\dot{s}}{s} = \frac{dl \ln s}{dt} = \xi. \quad (34)$$

As mudanças implementadas por Hoover nas equações de movimento, consistem na adição de um termo semelhante ao termo de atrito na equação da força (Equação 31) e a equação que governa a mudança do coeficiente ξ é dada pela equação 33. Assim o mecanismo de resposta, trabalha para manter a média da energia cinética em um valor constante. Desta forma, a energia cinética flutua em torno de um valor médio e a temperatura é controlada em T. Note que novamente Q é um importante parâmetro de escolha que ajusta o acoplamento entre o banho térmico e o sistema.¹⁷

No entanto, as vezes o termostato de Nosé-Hoover apresenta problemas de ergodicidade. Essa dificuldade pode ser resolvida pela termostatização do termostato original por outro termostato ou por uma cadeia de termostato. Esse método é conhecido como termostato de cadeia. Esta técnica possui maior eficiência no controle da temperatura, além de restaurar a ergodicidade do sistema. Assim, a quasi-Hamiltoniana de um sistema com N partículas acopladas a M cadeias de Nosé-Hoover é dada por

$$\mathcal{H}_{NHC} = U(\mathbf{R}^N) + \sum_{I=1}^N \frac{P_I^2}{2M_I} + \sum_{j=1}^M \frac{Q_j \xi_j^2}{2} + gK_B T s_1 + \sum_{j=2}^M K_B T s_j \quad (35)$$

E as equações do movimento:

$$\dot{\mathbf{R}}_I = \frac{\mathbf{P}_I}{M_I} \quad (36)$$

$$\dot{\mathbf{P}}_I = \mathbf{F}_I - \xi_1 \mathbf{P}_I \quad (37)$$

$$\dot{\xi}_1 = \frac{1}{Q_1} \left(\sum_I \frac{P_I^2}{M_I} - gK_B T \right) - \xi_1 \xi_2 \quad (38)$$

$$\dot{\xi}_j = \frac{1}{Q_j} (Q_{j-1} \xi_{j-1}^2 - K_B T) - \xi_1 \xi_{j+1} \quad (39)$$

$$\dot{\xi}_M = \frac{1}{Q_M} (Q_{M-1} \xi_{M-1}^2 - K_B T) \quad (40)$$

É importante destacar que a adição de $M - 1$ equações de movimento formam uma cadeia unidimensional simples, o que facilita sua implementação. Conseqüentemente, as cadeias de Nosé-Hoover se destacam como uma das abordagens mais eficientes para termostatizar um sistema canônico.

Dinâmica Molecular de Ehrenfest

Em 1927 foi proposta a dinâmica molecular de Ehrenfest, nesta dinâmica adota-se uma abordagem clássica para os núcleos atômicos, enquanto para os elétrons a abordagem é quântica. A dinâmica molecular de Ehrenfest assume que a evolução do sistema quântico é dominada pela dinâmica dos elétrons, enquanto os núcleos respondem as mudanças da distribuição eletrônica. Uma das vantagens desta dinâmica é que a função de onda é minimizada uma única vez e propagada ao longo da trajetória. Em contrapartida, devido à grande velocidade dos elétrons em relação aos núcleos, é necessário utilizar um passo de integração pequeno, acarretando alta demanda computacional, o que representa uma desvantagem para este método.³² Na presente dinâmica, o processo é diabático, implicando, na prática, que o sistema pode iniciar em uma superfície de Born-Oppenheimer, progredir nessa superfície por um determinado período e, posteriormente, fazer uma transição para outra superfície.

Dinâmica Molecular de Born-Oppenheimer

Uma boa aproximação para adicionar efeitos quânticos às simulações de dinâmica molecular consiste em resolver o problema de estrutura eletrônica estático para cada passo da dinâmica, dado um conjunto de posições nucleares fixas para um dado instante. Assim, a parte eletrônica do sistema se reduz na solução do problema quântico independente do tempo, ou seja, os núcleos são propagados utilizando as leis da mecânica clássica enquanto os elétrons são resolvidos simultaneamente utilizando a equação de Schrodinger independente do tempo. Desta forma, a dependência temporal da parte eletrônica do sistema é imposta e ditada pela dependência paramétrica da dinâmica dos núcleos.^{33,34}

Então, a separação dos graus de liberdade eletrônicos e nucleares permite efetuar a evolução temporal dos núcleos sob a influência de um potencial $U(\mathbf{R}^N)$ calculado para cada configuração dos núcleos, que é dada por:

$$U(\mathbf{R}^N) = \min_{\Psi_0} \{ \langle \Psi_0 | H_e | \Psi_0 \rangle \}. \quad (41)$$

No qual o potencial, $U(\mathbf{R}^N)$ depende apenas das coordenadas eletrônicas. Esse potencial é conhecido como potencial de Born-Oppenheimer.

Assim, a Lagrangeana da dinâmica de Born-Oppenheimer pode ser definida como:

$$\mathcal{L}_{BO} = \sum_I \frac{1}{2} M_I \dot{\mathbf{R}}_I^2 - \min_{\Psi_0} \{ \langle \Psi_0 | H_e | \Psi_0 \rangle \}. \quad (42)$$

E as equações do movimento descritas como:

$$M_I \ddot{\mathbf{R}}_I = -\nabla \left[\min_{\Psi_0} \{ \langle \Psi_0 | H_e | \Psi_0 \rangle \} \right], \quad (43)$$

$$E\Psi_0 = H_e\Psi_0. \quad (44)$$

Em princípio pode-se utilizar qualquer método de estrutura eletrônica para a solução das equações da dinâmica molecular de Born-Oppenheimer. No entanto, na prática é necessário que se faça uma escolha criteriosa do método a ser usado levando em consideração o custo computacional agregado. Um dos métodos mais utilizados é a Teoria do Funcional da Densidade, pois oferece um bom equilíbrio entre custo computacional e acurácia dos parâmetros calculados.³³

Dinâmica Molecular de Car-Parrinello

Em 1985, os pesquisadores Roberto Car e Michelle Parrinello formularam a dinâmica molecular de Car-Parrinello, em que uma lagrangeana estendida foi proposta na forma da Equação 45.³⁵ Nesta dinâmica, o sistema é dividido em dois subsistemas: o subsistema iônico, composto pelos núcleos e elétrons da camada interna, o qual é tratado classicamente seguindo as leis de Newton, e o subsistema eletrônico, formado pelos elétrons mais externos, que são tratados quanticamente. Esta abordagem combina a vantagem de minimizar a função de onda uma única vez da Dinâmica Molecular de Erhensfest, e a vantagem de permitir passos de integração maiores, como na dinâmica de Born-Oppenheimer

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{CP} = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2} M_{\alpha} \dot{\mathbf{R}}_{\alpha}^2 + \mu \sum_i \langle \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) | \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \rangle \\ & - \langle \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle \\ & + \sum_{ij} \Lambda_{ij} (\langle \varphi_i(\mathbf{r}) | \varphi_j(\mathbf{r}) \rangle - \delta_{ij}). \end{aligned} \quad (45)$$

Observe que o primeiro termo da lagrangeana representa à energia cinética nuclear, sendo que M_{α} representa a massa do núcleo e $\dot{\mathbf{R}}_{\alpha}$ representa as velocidades iônicas. O segundo termo é a energia eletrônica fictícia, onde o parâmetro μ é chamado de massa fictícia, que tem a função de manter a adiabaticidade do sistema, isto é, garantir que não ocorra transferência entre as energias cinéticas dos subsistemas iônicos e eletrônicos. O terceiro termo é dado pela energia potencial do sistema que é tratado quanticamente. O último termo representa restrições holonômicas de ortonormalidade da função de onda. Sendo Λ_{ij} o multiplicador de Lagrange e δ_{ij} o vínculo que garante a ortonormalidade.²⁰ Em geral impõe-se restrição de ortonormalidade apenas as funções de onda eletrônicas, não sendo impostas ao núcleo.

A Equação 45 pode ser reformulada utilizando o formalismo da teoria de Kohn-Sham,³⁶ no terceiro termo, resultando na lagrangeana estendida (Equação 46):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{CP} = & \sum_{\alpha} \frac{1}{2} M_{\alpha} \dot{\mathbf{R}}_{\alpha}^2 + \mu \sum_i \langle \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) | \hat{\varphi}_i(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \rangle - E_{KS}[\varphi_i, \mathbf{R}] \\ & + \sum_{ij} \Lambda_{ij} (\langle \varphi_i(\mathbf{r}) | \varphi_j(\mathbf{r}) \rangle - \delta_{ij}). \end{aligned} \quad (46)$$

O princípio da ação mínima, S , é um postulado fundamental da mecânica clássica, que estabelece que a trajetória seguida por um sistema físico é aquela que minimiza o funcional de ação. Portanto, ao aplicar a equação de Euler-Lagrange (Equação 47) para minimizar o funcional de ação descrito pela Equação (48), considerando \mathcal{L} a Lagrangeana de Car-Parrinello (Equação 46), obtém-se as equações de movimentos do núcleo (Equação 49) e elétrons (Equação 50):

$$\frac{d}{dt} \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \dot{q}} - \frac{\delta \mathcal{L}}{\delta q} = 0, \quad (q = \mathbf{R}_i, \dot{\varphi}_i^*). \quad (47)$$

$$S = \int \mathcal{L}[\varphi(t), \dot{\varphi}(t), R(t), \dot{R}(t), t] dt \quad (48)$$

$$M_\alpha \ddot{\mathbf{R}}_\alpha = \mathbf{F}_\alpha = - \frac{\partial E_{KS}[\mathbf{R}_\alpha, \varphi_i]}{\partial \mathbf{R}_\alpha}; \quad (49)$$

$$\mu_\alpha \ddot{\varphi}_i = - \frac{\delta E_{KS}[\mathbf{R}_\alpha, \varphi_i]}{\delta \varphi_i^*} + \sum_j \Lambda_{ij} \varphi_j. \quad (50)$$

Após obter as equações de movimento que fornecem informações sobre sua aceleração, é necessário utilizar algum algoritmo para integrar as equações e obter a trajetória do sistema, conforme seção 2.

Adiabaticidade na Dinâmica Molecular de Car-Parrinello

Preservar a adiabaticidade do sistema no contexto da Dinâmica Molecular de Car-Parrinello é de extrema importância para assegurar a integridade da função de onda no estado fundamental. Qualquer intercâmbio de energia entre os subsistemas eletrônico e iônico pode resultar na saída do estado fundamental, comprometendo a confiabilidade da simulação. Portanto, as simulações de Dinâmica Molecular de Car-Parrinello requerem a manutenção da separação energética entre os subsistemas. Para garantir a adiabaticidade, os parâmetros: massa fictícia (μ) e o tamanho dos passos de integração devem ser escolhidos cuidadosamente, levando em consideração critérios que permitam manter um custo computacional razoável para a simulação.^{20,37} Assim, é importante encontrar um equilíbrio entre a precisão das simulações e a eficiência computacional.

Ondas Planas

As funções de onda planas são amplamente empregadas na expansão dos orbitais de Kohn-Sham, oferecendo diversas vantagens. Essas funções de base ondulatória apresentam propriedades ortogonais, o que facilita cálculos e análises. Além disso, a transformada de Fourier permite a conversão

entre o espaço real e o espaço recíproco, proporcionando uma abordagem matemática simples e coerente e possuem formulação simples, conforme demonstrado na Equação (51). Uma característica fundamental das funções de onda planas é a capacidade de considerar a periodicidade do sistema, conforme estabelecido pelo teorema de Bloch.

A principal desvantagem do uso desse tipo de função de base reside na exigência de uma grande quantidade de ondas planas para expandir os orbitais. Portanto, para tornar o conjunto finito, é necessário truncar as funções de base em uma determinada energia de corte, ao expandir os orbitais. Uma abordagem comumente adotada é a utilização de ondas planas exclusivamente para descrever os elétrons de valência, e os pseudopotenciais descrevem os elétrons da camada interna.

$$\varphi_{ik} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_G C_{i,k+G} e^{i(G+k).r}. \quad (51)$$

Sendo que: Ω é o volume da cela periódica, o termo $\frac{1}{\sqrt{\Omega}}$ é a constante de normalização, utilizado para normalizar os coeficientes da expansão de Fourier, G representa o vetor de rede recíproca, que são usados para descrever a periodicidade das funções de onda no espaço recíproco $C_{i,k+G}$ e é o coeficiente de expansão de Fourier, que especifica a amplitude da onda plana.

Pseudopotenciais e Pseudofunções

A aproximação de pseudopotenciais, inicialmente proposta por Phillips em 1958 e posteriormente refinada por Yin em 1982, representa uma abordagem altamente vantajosa na expansão das funções de onda eletrônicas, pois permite uma redução significativa no número de ondas planas necessárias. Esses pseudopotenciais têm a finalidade de substituir os potenciais de Coulomb que descrevem a interação entre os elétrons e o núcleo atômico.

Devido à contribuição limitada nas interações químicas, os elétrons de camada interna, podem ser substituídos, de forma prática, por um pseudopotencial e os elétrons de valência utilizando pseudofunções de ondas, que são mais suaves e desprovidas de nós, o que leva a um número

reduzido de ondas planas durante o cálculo, resultando em um tempo computacional menor. A formulação do pseudopotencial envolve a busca por uma pseudofunção que coincida de maneira precisa com a função real em uma distância específica do núcleo, conhecida como raio de corte. Essa etapa é essencial para garantir a adequada correspondência entre as propriedades dessas funções.

Existem dois tipos de pseudopotenciais: os de norma conservada e os de norma não conservada. No caso dos pseudopotenciais de norma conservada, é fundamental que a função de onda exata coincida com a pseudofunção além do raio de corte. Essa condição garante que a energia e a densidade eletrônica sejam consistentes com a função real para todos os elétrons. Dessa forma, é estabelecida uma coerência precisa entre as propriedades dessas funções.

Existem dois tipos de pseudopotenciais: os de norma conservada e de norma não conservada. O primeiro pseudopotencial usado em Dinâmica Molecular de Car-Parrinello foram de normas conservadas, desenvolvidas por Martins e Troullier.³⁸ Posteriormente Laasonen e seus colaboradores³⁹ aplicaram neste tipo de simulações pseudopotenciais de norma não conservada, desenvolvidas por Vanderbilt.⁴⁰

Nos pseudopotenciais de norma conservada,⁴¹ exige-se que a função de onda coincida com a pseudofunção além do raio de corte, assegurando que a energia e a densidade eletrônica coincidam com a função de todos os elétrons. Por outro lado, nos pseudopotenciais de norma não conservada esta situação é mais relaxada, permitindo que as funções de ondas sejam mais suaves, reduzindo a necessidade de muitas ondas planas, gerando como resultado um tempo computacional aprimorado.

Parâmetros Estruturais e Eletrônicas

As simulações de Dinâmica Molecular (DM) são uma poderosa ferramenta para obter informações relevantes sobre sistemas investigados. Elas fornecem *insights* sobre a formação de interações intermoleculares e intramoleculares, como a ligação de hidrogênio, que pode ser explorada

através de diversas abordagens, incluindo a análise de Funções de Distribuição Radial de Pares (FDRP) e de Tempo Médio de Residência (TMR), bem como as propriedades geométricas, como distância interatômica e ângulos internos, e propriedades energéticas, como a Energia de Helmholtz. Essas informações combinadas fornecem uma compreensão abrangente do sistema em estudo, permitindo uma análise detalhada de suas propriedades estruturais e energéticas.

Conclusões

É notável os avanços que estamos sinalizando dentro da abordagem da dinâmica molecular *ab initio*, principalmente, no que diz respeito ao desenvolvimento de novas teorias capazes de descrever eventos raros, transições cônicas e efeitos quânticos, como energia do ponto zero e tunelamento. No entanto, o custo computacional ainda representa um desafio significativo para a aplicação na simulação de sistemas grandes.

À medida que a capacidade computacional continua a evoluir, os futuros desenvolvimentos devem se concentrar na ampliação do tamanho dos sistemas simulados e na expansão da escala temporal com precisão, permitindo assim a investigação de sistemas mais complexos, como grandes biomoléculas e materiais poliméricos, possibilitando uma compreensão mais abrangente e detalhada de seus comportamentos dinâmicos. Acreditamos que os avanços devem ser direcionados ao aprimoramento de algoritmos capazes de acelerar os cálculos de DMAI, reduzir a demanda de memória e aprimorar a escalabilidade das simulações em plataformas de computação de alto desempenho.

Portanto, a dinâmica molecular *ab initio* continua sendo uma ferramenta essencial para o estudo da estrutura e dinâmica de sistemas químicos complexos. Com avanços contínuos e a superação dos desafios computacionais, espera-se que essa abordagem contribua significativamente para o progresso científico e tecnológico, abrindo novas oportunidades para a compreensão e o desenvolvimento de materiais e fármacos mais eficientes e sustentáveis.

Referências

- CHIN, Y. P.; SEE, N. W.; JENKINS, I. D.; KRENSKE, E. H. ;*Org Biomol Chem* **2022**, *20*, 2028.
- VIEIRA, I.; CAMARGO, L. T. F. M.; RIBEIRO, L.; RODRIGUES, A. C. C.; CAMARGO, A. J. ;*J Mol Model* **2019**, *25*, 116.
- SANTOS, S. C.; FORTES, G. A. C.; CAMARGO, L. T. F. M.; CAMARGO, A. J.; FERRI, P. H. ;*LWT* **2021**, *137*, 110366.
- DITLER, E.; LUBER, S. ;*Wiley Interdiscip Rev Comput Mol Sci* **2022**, *12*.
- SALO-AHEN, O. M. H.; ALANKO, I.; BHADANE, R.; BONVIN, A. M. J.; HONORATO, R. V.; HOSSAIN, S.; JUFFER, A. H.; KABEDEV, A.; LAHTELA-KAKKONEN, M.; LARSEN, A. S.; LESCRINIER, E.; MARIMUTHU, P.; MIRZA, M. A.; MUSTAFA, G.; NUNES-ALVES, A.; PANTSAR, T.; SAADABADI, A.; SINGARAVELU, K.; VANMEERT, M. ;*Processes* **2020**, *9*, 71.
- COUTINHO, N. D.; MACHADO, H. G.; CARVALHO-SILVA, V. H.; DA SILVA, W. A. ;*Physical Chemistry Chemical Physics* **2021**, *23*, 6738.
- CARVALHO, P. DE S.; DINIZ, L. F.; DA SILVA, G. T. S. T.; COUTINHO, N. D.; DOS SANTOS, P. G.; CARVALHO-SILVA, V. H.; RIBEIRO, C.; ELLENA, J. ;*Cryst Growth Des* **2021**, *21*, 1122.
- MA, S.; CHEN, P.; XU, J.; XIONG, X. ;*J Mater Sci* **2022**, *57*, 1123.
- WANG, J.; JIANG, X. Z.; LUO, K. H. ;*Fuel* **2023**, *331*, 125806.
- YAN, Z.; LIU, R.; LIU, B.; SHAO, Y.; LIU, M. ;*Energies (Basel)* **2023**, *16*, 1176.
- LIAO, J.; ZHANG, A.; QING, S.; ZHANG, X.; LUO, Z. ;*Powder Technol* **2022**, *395*, 584.
- VIDAL-LIMON, A.; AGUILAR-TOALÁ, J. E.; LICEAGA, A. M. ;*J Agric Food Chem* **2022**, *70*, 934.
- ZHU, J.; WANG, J.; HAN, W.; XU, D. ;*Nat Commun* **2022**, *13*, 1661.
- STEVENS, J. A.; GRÜNEWALD, F.; VAN TILBURG, P. A. M.; KÖNIG, M.; GILBERT, B. R.; BRIER, T. A.; THORNBURG, Z. R.; LUTHEY-SCHULTEN, Z.; MARRINK, S. J. ;*Front Chem* **2023**, *11*.
- ALDER, B. J.; WAINWRIGHT, T. E. ;*J Chem Phys* **1959**, *31*, 459.
- KARPLUS, M. ;*Angewandte Chemie - International Edition* **2014**, *53*, 9992.
- FRENKEL, D.; SMIT, B. Understanding Molecular Simulation. *Understanding Molecular Simulation* **2002**, 63–107.
- MARX, D.; ED, J. G.; NEUMANN, J. VON; MARX, D.; HUTTER, J. *Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation*; NIC Series, 2000; Vol. 1.
- RINO, J. P.; STUDART, N. ;*Quim Nova* **2001**, *24*, 838.
- MARX, D.; HUTTER, J. *Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods*; Cambridge University Press, 2009.
- REZENDE, M. V. C. S.; COUTINHO, N. D.; PALAZZETTI, F.; LOMBARDI, A.; CARVALHO-SILVA, V. H. ;*J Mol Model* **2019**, *25*, 227.
- SANCHES-NETO, F. O.; COUTINHO, N. D.; CARVALHO-SILVA, V. H. ;*Physical Chemistry Chemical Physics* **2017**, *19*, 24467.
- RODRIGUES, A. C. C.; DE M. CAMARGO, L. T. F.; FRANCISCO LOPES, Y.; SALLUM, L. O.; NAPOLITANO, H. B.; CAMARGO, A. J. ;*J Mol Liq* **2021**, *343*, 117451.
- COUTINHO, N. D.; CARVALHO-SILVA, V. H.; DE OLIVEIRA, H. C. B.; AQUILANTI, V. *The HI + OH → H<inf>2</inf>O + I reaction by first-principles molecular dynamics: Stereodirectional and anti-Arrhenius kinetics*; 2017; Vol. 10408 LNCS.
- REZENDE, M. V. C. S.; COUTINHO, N. D.; PALAZZETTI, F.; LOMBARDI, A.; CARVALHO-SILVA, V. H. ;*J Mol Model* **2019**, *25*.
- COUTINHO, N. D.; SILVA, V. H. C.; DE OLIVEIRA, H. C. B.; CAMARGO, A. J.; MUNDIM, K. C.; AQUILANTI, V. ;*Journal of Physical Chemistry Letters* **2015**, *6*.
- COUTINHO, N. D.; AQUILANTI, V.; SILVA, V. H. C.; CAMARGO, A. J.; MUNDIM, K. C.; DE OLIVEIRA, H. C. B. ;*Journal of Physical Chemistry A* **2016**, *120*.
- COUTINHO, N. D.; SANCHES-NETO, F. O.; CARVALHO-SILVA, V. H.; DE OLIVEIRA, H. C. B.; RIBEIRO, L. A.; Aquilanti, V. ;*J Comput Chem* **2018**, *39*.
- COUTINHO, N. D.; SILVA, V. H. C.; DE OLIVEIRA, H. C. B.; CAMARGO, A. J.; MUNDIM, K. C.; AQUILANTI, V. ;*J Phys Chem Lett* **2015**, 1553.
- HUTTER, J. ;*Lect. Notes, Phys. Chem. Institute, Univ.* **2002**.
- MARX, D.; HUTTER, J. *Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation*; 2000; Vol. 1.
- EHRENFEST, P. ;*Zeitschrift für Physik* **1927**, *45*, 455.
- MARX, D.; ED, J. G.; NEUMANN, J. VON; MARX, D. *Ab initio molecular dynamics : Theory and Implementation*; 2000.
- PAQUET, E.; VIKTOR, H. L. ;*Advances in Chemistry* **2018**, *2018*, 1.
- CAR, R.; PARRINELLO, M. ;*Phys Rev Lett* **1985**, *55*, 2471.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. ;*Physical Review* **1965**, *140*, A1133.
- MARX, D.; HUTTER, J. ;*Modern methods and algorithms of quantum chemistry* **2000**, *1*, 301.
- TROULLIER, N.; MARTINS, J. L. ;*Phys Rev B* **1991**, *43*, 1993.
- LAASONEN, K.; LABORATORIES, A. B.; CAR, R.; VANDERBILT, D. **1993**, *47*, 142.
- VANDERBILT, D. ;*Phys Rev B* **1990**, *41*, 7892.
- TROULLIER, N.; MARTINS, J. L. ;*Phys Rev B* **1993**, *43*, 1993.

Nayara D. Coutinho¹, Lilian T. F. M. Camargo^{2*} & Ademir J. Camargo³

1. Faculdade Senai Roberto Mange, Anápolis, Goiás

2. Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás - Câmpus Anápolis, Anápolis, Goiás

3. Grupo de Química Teórica e Estrutural de Anápolis, Universidade Estadual de Goiás, Anápolis, GO, Brazil

*E-mail: lilianthaty@yahoo.com.br

Biorremediação Fúngica e Estudo de Fitotoxicidade de Efluente Industrial Proveniente de Planta Produtora de Pesticidas

Isabella C. S. Santos, Rodrigo H. Silva, Carlos E. B. Barbosa, Rafael B. Ferreira & Paula L. M. Souza

Efluentes industriais contendo classes de pesticidas sintéticos como os organoclorados mais estáveis e tóxicos para o meio ambiente e os piretróides que se destacam por agir rapidamente contra vários tipos de insetos sendo menos tóxicos para os mamíferos, podem acarretar em riscos ao meio ambiente e à saúde humana se seus lançamentos forem inadequados. O objetivo desse trabalho foi estudar a versatilidade dos microrganismos e as inúmeras vantagens relacionadas aos fungos filamentosos, em específico *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244 aplicado como biocatalisador no estudo de biorremediação de efluentes industriais proveniente de planta produtora de pesticidas. Para tal foram realizados os ensaios de fitotoxicidade com sementes de pepino (*Cucumis sativus*) e a determinação da DQO pelo método de refluxo fechado para avaliação da eficiência no tratamento. As amostras de efluente tratado nos tempos de 24, 48, 72 e 96 horas foram atóxicas para as sementes de pepino, não apresentando diferenças estatísticas significativas para os parâmetros de germinação das sementes e desenvolvimento das raízes. Para a análise de DQO, foi avaliada a diminuição da carga poluidora do efluente em 91,7 % já nas primeiras 24 horas de exposição aos biofilmes fúngicos, atingindo 99,7 % em 96 horas. A biorremediação fúngica demonstrou ser um método eficaz na aceleração da degradação de pesticidas representado pela sua alta porcentagem em remoção de compostos tóxicos.

Palavras-chave: *efluentes; pesticidas; cunninghamella echinulata; fitotoxicidade; DQO.*

Industrial effluents containing classes of synthetic pesticides such as the more stable and toxic organochlorines for the environment and the pyrethroids that stand out for acting quickly against various types of insects while being less toxic to mammals, can pose risks to the environment and human health if improperly discharged. The objective of this study was to investigate the versatility of microorganisms and the numerous advantages associated with filamentous fungi, specifically *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244, applied as a biocatalyst in the study of industrial effluent bioremediation from a pesticide production plant. To this end, phytotoxicity assays were performed using cucumber seeds (*Cucumis sativus*) and the determination of COD (Chemical Oxygen Demand) by the closed reflux method to evaluate the treatment efficiency. The treated effluent samples at 24, 48, 72, and 96 hours were non-toxic to cucumber seeds, showing no statistically significant differences in seed germination parameters and root development. For COD analysis, a reduction of 91.7% in the pollutant load of the effluent was observed within the first 24 hours of exposure to fungal biofilms, reaching 99.7% at 96 hours. Fungal bioremediation proved to be an effective method in accelerating the degradation of pesticides, as evidenced by its high percentage of removal of toxic compounds.

Keywords: *effluents; pesticides; cunninghamella echinulata; phytotoxicity; COD.*

Introdução

Inúmeros problemas ambientais, diversos provocados por ações humanas, dentre eles a poluição de efluentes industriais com metais pesados que apresentam características biocumulativas, nocivo para os seres humanos e para o meio ambiente, estão estimados proporcionalmente ao crescimento populacional. Dentre as principais vias de contribuição humana sobressai a aplicação de pesticidas e fertilizantes, mineração e lançamento de efluentes industriais sem tratamento. É importante destacar que a toxicidade está ligada diretamente com a quantidade de metal disponível e também ao tempo de exposição.¹

Os pesticidas compõem um dos grupos mais relevantes de poluentes ambientais, com vários deles listados como poluentes prioritários de recursos hídricos naturais.² O termo pesticida engloba uma ampla gama de compostos químicos empregados para combater, matar ou controlar várias pragas que consiste em dois ingredientes principais: o ativo que desempenha o controle de pragas e o inerte complementado com comestíveis óleos, ervas e celulose ao componente ativo para produção de pesticidas melhorando sua eficácia.³

Com a carência de métodos definidos e viáveis para o tratamento de águas residuais agroindustriais contaminadas por pesticidas, o desenvolvimento de sistemas para sua desintoxicação tornou-se indispensável. Os sistemas de tratamento de base biológica, aparece como possível solução sustentável, como a biorremediação que se utiliza microrganismos de caráter natural.²

A biorremediação é uma tecnologia que utiliza versatilidade metabólica microbiana para eliminação ou redução a níveis aceitáveis de poluentes presentes no meio.⁴ Estudos descrevem que a degradação de substâncias xenobióticas por microorganismos é significativa³ além de constituírem um grupo biológico muito diversificado e pouco conhecido não há necessidade de estabelecer um processo novo para cada microrganismo, a tendência é de transferir os genes equivalentes a algum dos microrganismos conhecidos, adaptados às condições industriais.⁵

O fungo filamentosso *Cunninghamella echinulata*, amplamente discutido sobre sua capacidade de converter

xenobióticos da mesma maneira que mamíferos, possibilita a biotransformação de pesticidas e os metabólitos gerados, conhecidos e avaliados quanto ao seu potencial toxicológico visto que os fungos e pesticidas são comumente encontrados no ambiente.⁶

O uso de bioindicadores de toxicidade tornou-se relevante para avaliar o efeito de pesticidas no ambiente e em testes de fitotoxicidade na avaliação do efeito dos pesticidas e metais pesados em organismos vivos através do uso de algumas espécies de plantas em protocolos padronizados.⁷

Diante disso realizou-se a aplicação da *Cunninghamella achinulata* ATCC 9244 como biocatalisador na biorremediação de efluente industrial contendo pesticidas como uma opção considerável entre os tratamentos biológicos convencionais.

Materiais e Métodos

AMOSTRAGEM DO EFLUENTE

Em 17 de setembro de 2019, no turno vespertino, nos dirigimos à indústria situada em Goiás que nos concedeu o efluente para o estudo. De um reator comportando efluente industrial bruto contendo pesticidas, foi retirado uma amostra simples de 5 L com auxílio de um béquer e transferido para um galão de plástico com tampa rosqueável. Após a coleta, a amostra foi encaminhada ao laboratório da Faculdade Fama e conservada em geladeira.

MANUTENÇÃO E REPIQUE DA CEPA EM MEIO DE CULTURA SÓLIDO

A cepa *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244, pertencem à coleção American Type Culture Collection (ATCC), Rockville, Maryland, USA, disponibilizada pela Prof^a. Dr^a. Paula, foi conservada em ágar batata inclinado e armazenada em estufa a 28 °C por 5 dias. Para o repique, foram ressuspendidos os esporos do microrganismo com glicerol estéril 25%, no interior de uma bancada de fluxo laminar vertical, transferidos em triplicata, para tubos de ensaio rosqueados contendo ágar batata inclinado, posteriormente incubados em estufa por 7 dias, a 28 °C. Ao final da incubação, observaram-se o crescimento e os aspectos morfológicos da colônia.⁸

Preparação do Meio Reacional

Errlenmeyers com capacidade de 250 mL, contendo 50 mL de meio líquido de cultura Potato dextrose soy medium - PDSM (2 g de peptona bacteriológica (Biolog), 8 g de dextrose (Vetec), 2 g de lecitina de soja (Biolog), 2 g de fosfato de potássio monobásico (Anidrol), 2 g de cloreto de sódio (Anidrol) e 1,2 g de extrato de levedura (Biolog) para 400 mL de água destilada), foram autoclavados a 121 °C por 15 minutos.

Cultivo de Células Imobilizadas em Meio de Cultura Líquido Cunninghamella Echinulata ATCC 9244:

As cepas de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244 foram semeadas em meio líquido de cultura PSDM (duas gotas de esporos ressuspensos do ágar batata inclinado) em Errlenmeyers de boca larga com capacidade de 250 mL com molas de aço inoxidável em contato com o vidro dos frascos de cultivo e acomodadas firmemente no fundo dos frascos. Estes foram mantidos em mesa agitadora (Quimis) a 150 rpm por 7 dias.

Incubação do Efluente Industrial Bruto com Biofilmes de Cunninghamella Echinulata Atcc 9244:

Após o crescimento do biofilme, o meio de cultura líquido PDSM foi desprezado e substituído, asépticamente por método de flambagem, por 50 mL de efluente industrial bruto proveniente de planta produtora de pesticidas, situada em Goiás, e reincubadas nas mesmas condições de agitação por mais 96 horas. Alíquotas de 2,5 mL foram retiradas a cada 24 horas e submetidas a análise de DQO e aos estudos de fitotoxicidade.

Preparo das Sementes de Pepino para o Teste de Fitotoxicidade

Para os testes de germinação, 210 sementes de pepino (TopSeed) previamente lavadas e selecionadas foram colocadas em placas de Petri forradas com papel filtro, anteriormente posta em Capela de Fluxo Laminar com lâmpada UV por 15 minutos para esterilização, dissociados em triplicata, umedecidos com 2,5 mL do efluente tratado para os tempos de 24, 48, 72, 96 horas, efluente bruto,

controle negativo (água destilada) e controle positivo (solução de sulfato de zinco heptahidratado 10mg/L), após posicionada as 10 sementes, espaçadamente com o intuito de não inibir o crescimento das outras e assim preparadas foram encubadas em estufa por 5 dias a 28 °C. Após a incubação, a germinação das sementes de cada placa fora observada obedecendo o critério de validação.

Determinação da Demanda Química de Oxigênio (Dqo) pelo Método do Refluxo Fechado com o Bloco Digestor

Para determinação da DQO, as amostras do efluente bruto e as obtidas nos tempos de 24, 48, 72 e 96 horas de incubação com os biofilmes fúngicos, foram diluídas na proporção 1:50 e, em capela, adicionadas à solução digestora previamente preparada (1,5 mL) e ácido sulfúrico (3,5 mL), em tubos de ensaio com o volume final de 7,5 mL. Após a digestão em bloco digestor (HACH Modelo DRB 200) feita a 150 °C por 2 horas, as amostras foram esfriadas e lidas em colorímetro (HACH Modelo DR 900) configurado para análise de DQO.

Resultados e Discussão

MANUTENÇÃO E REPIQUE DA CEPA EM MEIO DE CULTURA SÓLIDO

As cepas de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244, empregadas na realização desse estudo, demonstrada na Figura 1, apresentou crescimento adequado, apresentaram aspecto algodonoso e variação de cor entre cinza e marrom, característicos do microrganismo. Um exemplar foi designado e seus esporos ressuspensos para incubação em meio de cultura líquido.



Figura 1. Exemplar de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244, da coleção de cepas da Faculdade FAMA.

Preparação do Meio Reacional CULTIVO DE CÉLULAS IMOBILIZADAS NO MEIO DE CULTURA LÍQUIDO

O meio de cultura PDSM mostrou-se apropriado ao cultivo do microrganismo. Verificou-se durante o processo de incubação e agitação, a morfologia e crescimento dos micélios de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244 ao longo do suporte mobilizador, e a viabilidade celular foi observada através da formação do halo de crescimento (Figura 2).

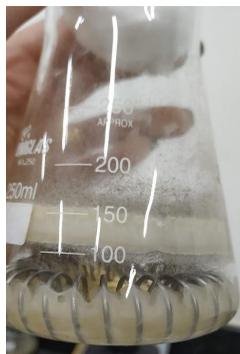


Figura 2. Formação do halo de crescimento.

Os fungos filamentosos são morfologicamente complexos e podem exibir formas variadas.⁹ Seu crescimento pode ocorrer na forma de hifas dispersas no meio de cultura, na forma filamentosa, à pellets com hifas formando pequenas esferas, que ocorre devido à agregação de esporos no início da germinação. Esse processo necessita da presença de nutrientes e parâmetros de condições reacionais como concentração do substrato, pH, temperatura, viabilidade celular, agitação e aeração devido à alta complexidade dos tipos morfológicos e sua interação com o meio reacional.

As molas de aço inoxidável, que apresentam estabilidade mecânica, química, térmica e biológica, além de proporcionar imobilização fácil e acessível, foram matrizes apropriadas à imobilização, comportando quantidades significativas de células viáveis, não limitando a transferência de massa entre microrganismo e meio de cultura, certificando a eficiência do suporte no processo de imobilização celular.⁸

A agitação, a fim de viabilizar a homogeneização do meio, relevante para a imobilização celular, conduzidas a 150 rpm foi adequada para a formação homogênea do biofilme, não sendo observadas danificações de micélios no meio de cultura.

Os aspectos morfológicos vistos na Figura 3 das cepas de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244 imobilizadas, apresentaram aspecto algodoadoso, com coloração levemente bege.



Figura 3. Biofilmes de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

INCUBAÇÃO DO EFLUENTE INDUSTRIAL BRUTO COM BIOFILMES DE CUNNINGHAMELLA ECHINULATA ATCC 9244

O efluente industrial bruto apresentava coloração esbranquiçada conforme Figura 4.



Figura 4. Aspecto do efluente industrial bruto antes e imediatamente após a incubação com biofilme de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

As amostras retiradas nos tempos de 24, 48, 72 e 96 horas, tornaram-se aparentemente “mais claras”, (Figura 5) sugerindo a adsorção à biomassa fúngica. Esse mecanismo físico é comum às comunidades microbianas,

tais como bactérias, leveduras, fungos filamentosos e algas, e ocorrem principalmente a nível de parede celular, através de mecanismos de adsorção física, química e de caráter eletrostático (10; 11). No monitoramento da biotransformação do piretróide λ -cialotrina, também observou esse comportamento associado às comunidades microbianas, sugerindo que o microrganismo primeiramente internaliza os xenobióticos para, então, metabolizá-los.⁶



Figura 5. Efluente industrial bruto após 24 horas de incubação com biofilme de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

Teste de Fitotoxicidade

AVALIAÇÃO DA GERMINAÇÃO DAS SEMENTES

Após o término médio de germinação, foram determinadas o comprimento da raiz de cada semente apresentadas na Figura 6 com auxílio de um paquímetro, para realização de análise estatística e efeitos tóxicos apresentados na germinação das sementes.

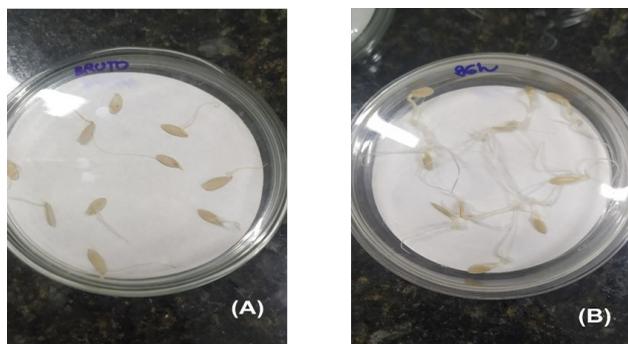


Figura 6. Desenvolvimento das sementes de pepino com efluente bruto (A) e com efluente tratado para o tempo de 96 horas (B).

Os efeitos demonstrados sobre a germinação das sementes e comprimento das raízes de cada semente germinada de pepino expostas ao efluente tratado para os tempos de 24, 48, 72, 96 horas, efluente bruto e controle negativo (água destilada) foram avaliados estatisticamente pelo software GraphPAD (livre). Os resultados dos desvios das médias da germinação das sementes, em cm, estão apresentados no gráfico da Figura 7.

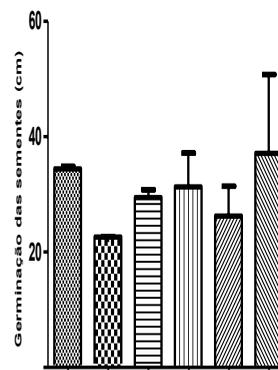


Figura 7. Desvios das médias da germinação das sementes de pepino (cm) após 120 horas de incubação.

O ensaio de fitotoxicidade emprega sementes de plantas sensíveis às substâncias tóxicas como indicativos de qualidade do ambiente.¹² O teste de fitotoxicidade, com o auxílio do teste de germinação, visa avaliar os efeitos das toxinas presentes no meio de cultivo de plantas, identificando águas contaminadas através do índice de germinação, em que sua principal diferença é o tempo que o bioindicador permanece exposto ao potencial contaminante.¹³ Não foram observadas diferenças significativas entre as amostras de efluente industrial incubada com o biofilme fúngico nos tempos de 24, 48, 72 e 96 horas e o controle negativo (água destilada).

Isso sugere que tanto o efluente bruto quanto o tratado não apresentam toxicidade frente às sementes de *C. sativus* e fornecem condições de germinação das sementes semelhantes à da água. Além disso, não foram gerados compostos fitotóxicos ao longo da biorremediação do efluente bruto.

No desenvolvimento de pesticidas, a ausência de fitotoxicidade é uma das propriedades consideradas e associadas à atividade inseticida, juntamente com a eficácia em baixas concentrações e facilidade de obtenção, manipulação e aplicação, por exemplo.¹⁴

Determinação da DQO pelo Método do Refluxo Fechado com o Bloco Digestor

Após as amostras serem preparadas (Figura 8), foram colocadas em Bloco digestor por 120 minutos e lidas após resfriamento natural em colorímetro.



Figura 8. Amostras preparadas para análise de DQO.

Os dados obtidos a partir da leitura de DQO em colorímetro estão descritos na Tabela 1.

Tabela 1. Dados de DQO (mg O₂/L) obtidos para as amostras do efluente bruto e as obtidas nos tempos de 24, 48, 72 e 96 h de incubação com biofilme de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

Amostra	DQO (mg O ₂ /L)
Bruto	76.650
24 h	6.400
48 h	8.950
72 h	271
96 h	266

A análise dos dados mostra uma diminuição significativa da DQO nas amostras de efluente a partir de 24 horas de exposição ao biofilme fúngico, apresentando porcentagem de remediação em torno de 91%.

É possível observar uma dessorção a partir do tempo de 48 horas, que pode estar associada a dinâmica dos compostos pelos compartimentos intra e extracelulares do microorganismo (11; 8).

Essa movimentação pode ser observada novamente a partir do tempo de 72 horas, em que se verifica uma outra diminuição considerável da DQO, sugerindo que os compostos são internalizados e então metabolizados pelo sistema fúngico, podendo ser “externalizados” para o meio de cultura.⁶

Estudos recentes (ver ⁶) descrevem sobre a biodegradação da cialotrina por fungos filamentosos que, o pesticida presente é detectável na biomassa após 24 h, findando após 96 h de exposição, sendo a maior parte da λ -cialotrina degradada em 120 h. Esses dados sugerem que o pesticida é inicialmente adsorvido pela biomassa e subsequentemente metabolizado.

Da análise dos dados contidos na Tabela 1, foi possível construir o gráfico da Figura 9, em que se pode observar um tratamento eficiente do efluente em estudo, com porcentagem de remediação superior a 99%.

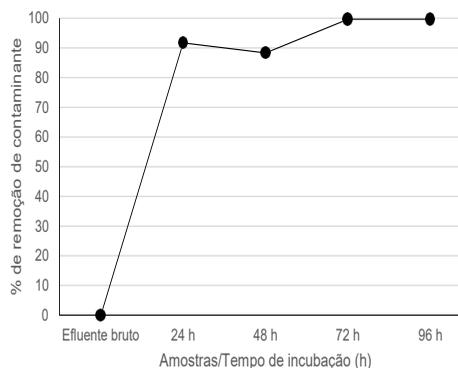


Figura 9. Percentual de remoção dos contaminantes na biorremediação de efluente industrial catalisada por biofilme de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

A DQO é um importante parâmetro de caracterização de efluentes industriais. Assim, a proposta de biorremediação apresentada neste trabalho mostra-se apto para aplicação industrial.

Conclusões

A partir dos resultados obtidos verifica-se, que o método de imobilização celular foi realizado com êxito, podendo ser observada a formação de biofilme de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244.

A biorremediação do efluente industrial bruto proveniente de planta produtora de pesticidas foi monitorada pela determinação da DQO, apresentando porcentagem de diminuição de DQO de 91,7 % em 24 horas de exposição aos biofilmes fúngicos, chegando a 99,6 % em 72 horas.

Do ensaio de fitotoxicidade frente às sementes de *C. sativus*, foi possível inferir que não foram biossintetizadas substâncias tóxicas ao longo do processo de biorremediação, não sendo verificada diferenças significativas entre o controle negativo (água deionizada) e o efluente bruto. A biorremediação fúngica mostrou ser um método eficiente, podendo complementar e/ou substituir processos químicos e físicos nos tratamentos de efluentes, além de ter sido alternativa “limpa” para a remediação de compostos tóxicos de difícil tratamento.

Referências

- DIAS, G.; HIPÓLITO, M.; SANTOS, F.; LOUREGA, R.; MATTIA, J. de; EICHLER, P.; ALVES, J. Biorremediação de efluentes por meio da aplicação de microalgas uma revisão. *Química Nova*, v.42, n. 8, p. 891-899, **2019**.
- PAPAZLATANI, C. V.; KARAS, P. A.; TUCAT, G.; KARPOUZAS, D. G. Expanding the use of biobeds: Degradation and adsorption of pesticides contained in effluents from seed-coating, bulb disinfection and fruitpackaging activities. *Journal of Environmental Management*, n. 248, p. 1-10, **2019**.
- DAR, M.A.; KAUSHIK, G.; CHIU, J.F.V. Pollution status and biodegradation of organophosphate pesticides in the environment. *Abatement of Environmental Pollutants*, p. 25-66, **2020**.
- COLLA, L.M.; PRIMAZ, A.L.; LIMA, M.; BERTOLIN, T.E.; Costa, J.A.V. isolamento e seleção de fungos para biorremediação a partir de solo contaminado com herbicidas triazínicos. *Ciência e Agrotecnologia*, v. 32, n. 3, **2008**.
- MALAJOVICH, M.A. BIOTECNOLOGIA 2011. Rio de Janeiro: Edições da Biblioteca Max Feffer do Instituto de Tecnologia ORT, **2012**. 320p.
- PALMER-BROWN, W.; SOUZA, P. L. de M.; MURPHY, C. D. Cyhalothrin biodegradation in *Cunninghamella elegans*. *Environmental Science and Pollution Research*, v. 26, n. 2, p. 1414-1421, **2018**.
- SIONE, S.M.J.; RAMÍREZ, A.C.; SASAL, M.C.; PARAVANI, E.V.; WILSON, M.G.; GABIOUD, E.A.; POLLA, W.; REPETTI, M.R.; OSZUST, J.D. Fitotoxicidade de un formulado comercial de glifosato sobre *Lemna gibba* L. *Ecología Austral*, v. 28, n. 1, p. 1-11, **2018**.
- SOUZA, P.L. de M. N-Glicosilação de 5-(1-(3-fluorofenil)-1H-pirazol-4-il)-1H-tetrazol catalizada por células fúngicas livres e imobilizadas de *Cunninghamella echinulata* ATCC 9244. **2015**. 81 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Farmacêuticas) - Universidade Federal de Goiás, Goiânia, **2015**.
- RODRIGUES, K. de A. Uso de reatores biológicos com fungos para remoção de fenol de água residuária sintética. **2006**. 145 f. Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos – Universidade de São Paulo, São Carlos, **2006**.
- RUSSO, M.E.; NATALE, F. di; PRIGIONE, V.; TIGINI, V.; MARZOCHELLA, A.; VARESE, G.C. Adsorption of acid dyes on fungal biomass: Equilibrium and kinetics characterization. *Chemical Engineering Journal*, v. 162, p. 537-545, **2010**.
- ARAÚJO, K.C.F.; COSTA, E.M. de M.B.; PAZINI, F.; VALADARES, M.C.; OLIVEIRA, V. de. Bioconversion of quercetin and rutin and the cytotoxicity activities of the transformed products. *Food and Chemical Toxicology*, v. 51, p. 93-96, **2013**.
- BRITO, L.B. Avaliação Ecotoxicológica do Antibiótico Amoxicilina considerando sua presença no ambiente aquático. **2016**. 59 f. Dissertação (Mestrado em ciências farmacêuticas) - Universidade Federal de Goiás, Goiânia. **2016**.
- PEDUTO, T. A. G.; JESUS, T. A. de; KOHATSU, M. Y. Sensibilidade de diferentes sementes em ensaio de fitotoxicidade. *Revista Brasileira de Ciência Tecnologia e Inovação*, v.4, n. 2, p.200-212, **2019**.
- PASTRELLO, M. Avaliação do risco de praguicidas em batata, cenoura e mandioquinha na área de São José do Rio Pardo utilizando o método de QuEChERS por LC-MS/MS. **2015**. 151 F. Dissertação (Mestrado em Toxicologia e Análises Toxicológicas) – Universidade de São Paulo, São Paulo, **2015**.

**Isabella C. S. Santos,
Rodrigo H. Silva, Carlos E. B.
Barbosa*, Rafael B. Ferreira
& Paula L. M. Souza**

Faculdade Metropolitana de Anápolis - Av. Fernando Costa, nº 49 - Vila Jaiara St. Norte, Anápolis - GO.;

*E-mail: carloskun.ce@gmail.com

A Influência das Queimadas na Qualidade do Ar da Cidade de Goiânia-GO

Núbia A. Campos, Tiago G. Ribeiro & Sandro M. Pimenta

A poluição atmosférica é a presença de substâncias que tornam o ar impróprio para a saúde e bem-estar. As queimadas, sejam naturais ou provocadas pelo homem, são fontes significativas de poluição do ar. A queima de biomassa libera gases e partículas suspensas que prejudicam a qualidade do ar e afetam a saúde humana. Este estudo analisou o impacto das queimadas no aumento das partículas suspensas em Goiânia. Os dados de concentração foram coletados pela SEMAD em 2018 e 2019, em três pontos da cidade. A análise revelou uma relação direta entre os focos de queimada e o aumento dos níveis de partículas suspensas. Estudos mais aprofundados são necessários para avaliar os efeitos dessas concentrações na saúde e garantir dados para um plano de gestão da qualidade do ar que atenda os padrões estabelecidos pela legislação atual.

Palavras-chave: *partículas totais em suspensão; poluição; queimadas; qualidade do ar.*

Air pollution is the presence of substances that render the air unfit for health and well-being. Natural and anthropogenic wildfires are significant sources of air pollution. Biomass burning releases gases and suspended particles that degrade air quality and impact human health. This study examined the impact of wildfires on the increase of suspended particles in Goiânia. Concentration data was collected by SEMAD in 2018 and 2019 at three locations in the city. The analysis revealed a direct relationship between wildfire occurrences and elevated levels of suspended particles. Further in-depth studies are required to assess the health effects of these concentrations and provide data for an air quality management plan that meets current legislative standards.

Keywords: *total particles in suspension; pollution; burned; air quality.*

Introdução

Entende-se por poluição atmosférica, toda e qualquer forma de matéria ou substância introduzida no ar com intensidade, concentração, tempo ou características capazes de torná-lo impróprio ou nocivo à saúde, prejudicial à fauna e à flora, ao uso e gozo da propriedade e à qualidade de vida da comunidade.¹

Historicamente, nas áreas metropolitanas o problema da poluição do ar tem-se constituído numa das mais graves ameaças à qualidade de vida de seus habitantes, sendo responsável pelo agravamento de doenças respiratórias e cardíacas.²

Dentre as principais fontes de emissão de poluentes atmosféricos encontram-se as emissões industriais, o intenso tráfego de veículos automotores, a queima de lixo, e outras ações naturais ou antropogênicas, com destaque para as queimadas florestais ocorridas em grande escala. Embora seja bastante criticada por cientistas e ambientalistas, essa prática ainda é muito comum no Brasil.³⁻⁷

A queima de biomassa, pode ser caracterizada como uma combustão incompleta que tem como produtos iniciais dióxido de carbono (CO_2), monóxido de carbono (CO) e água. Após essa etapa, passa a liberar partículas orgânicas, dentre elas o Material Particulado em Suspensão (MPS).⁸

O MPS é um dos poluentes mais relevantes, isso se deve ao fato de que, suas características físicas e químicas abrangem uma gama de classes de poluentes constituídos por poeira, fumaça, partículas totais em suspensão (PTS) e todo material sólido e líquido resultante de reações químicas ocorridas na atmosfera a partir gases como dióxido de enxofre (SO_2), óxidos de nitrogênio (NO_x) e compostos orgânicos voláteis (COVs) que, devido ao pequeno tamanho, mantém-se suspenso no ar.⁹

As Partículas Totais em Suspensão (PTS) podem ser divididas em dois grupos conforme seu tamanho, sendo: particulados com diâmetros maiores que $2,5\mu\text{m}$ e menores que $10\mu\text{m}$, denominados particulados da moda grossa (PM_{10}) e aqueles com diâmetros menores de $2,5\mu\text{m}$, chamados de particulados da moda fina ($\text{PM}_{2,5}$). Os efeitos na saúde também variam conforme o tamanho das partículas, sendo as menores mais nocivas. Isso porque quanto menor a dimensão e a densidade das partículas, maior sua permanência

no ar e maior sua capacidade de atingir os alvéolos pulmonares. As partículas mais grossas geralmente ficam retidas no nariz e garganta, enquanto as mais finas podem atingir os pulmões e causar doenças respiratórias, cardíacas e até mesmo câncer.¹⁰⁻¹²

As altas temperaturas produzidas pela queima da vegetação, faz com que os minerais contidos no solo se evaporem e ao entrar em contato com o oxigênio da atmosfera, transformem-se em óxidos em suspensão que podem ser introduzidos no organismo humano através da respiração. Esses compostos são capazes de atingir distintas porções das vias aéreas responsáveis pelas trocas gasosas nos pulmões.¹³⁻¹⁵

Os efeitos da concentração desses poluentes podem ser mais visíveis, principalmente durante o inverno, período em que ocorre um aumento significativo do número de internações por problemas cardiorrespiratórios. Um estudo realizado no centro da cidade de Goiânia, mostrou que: as concentrações de partículas finas ($\text{MP}_{2,5}$) e grossas (MP_{10}) apresentaram variação sazonal com uma redução de 80% no período chuvoso. No período de seca, as maiores concentrações de MP_{10} e $\text{MP}_{2,5}$ são influenciadas pela queima de vegetação e de resíduos. Apesar da poluição atmosférica por queimadas ser visível, os impactos relacionados neste âmbito, por não serem perceptíveis a curto prazo, culminam em diminuta atenção da sociedade trazendo consequências principalmente à saúde humana.^{16,17,8}

Desse modo, a qualidade do ar não depende somente da quantidade de poluentes lançados pelas fontes emissoras, mas também de como a atmosfera reage a esses poluentes, dispersando-os ou concentrando-os. Os fatores climáticos como velocidade e direção dos ventos, precipitação e temperatura determinam uma maior ou menor concentração ou diluição de poluentes no ar.¹⁸

Portanto, a poluição atmosférica é uma questão ambiental que não pode ser ignorada e continua a representar uma ameaça para a saúde a nível mundial. O ar livre de poluentes é um requisito básico para a saúde e o bem-estar da população, sendo considerado pela Organização das Nações Unidas como um dos objetivos da sustentabilidade.^{4,19-21}

Diante deste fato, a Legislação Brasileira estabeleceu padrões de qualidade do ar para concentrações de PTS para curtos e longos períodos. Para o período de 24 horas (curto), o padrão de qualidade é $240\mu\text{g}/\text{m}^3$, cujas concentrações de poluentes que ultrapassarem esse padrão poderão afetar a

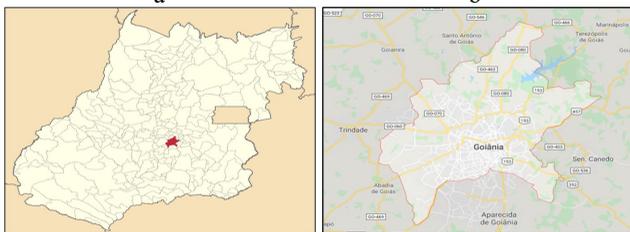
saúde da população. Para longos períodos foram definidas as médias geométricas anuais nos valores de $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Os padrões de qualidade do ar são estabelecidos pela resolução.²²

Assim, o presente trabalho busca avaliar a influência das queimadas nas concentrações de PTS em áreas urbanas da cidade de Goiânia-GO, de forma a contribuir com a ampliação do conhecimento da comunidade técnico-científica e da população goiana sobre o tema.

Materiais e Métodos

CARACTERIZAÇÃO DA ÁREA DE ESTUDO

A pesquisa foi desenvolvida na cidade de Goiânia (Figura 1), município brasileiro, capital do estado de Goiás. Dista 209 km de Brasília, localizada em pleno cerrado, um dos biomas mais devastados do Brasil, possui uma população estimada de 1.516.113 habitantes (IBGE, 2019).



Figuras 1 a e b. Localização do Município de Goiânia, onde o estudo foi realizado. Fonte: Wikipédia (2019).

De acordo com a classificação de Köppen²³, Goiânia está localizada em uma região de clima tipo Aw, tropical úmido, caracterizado por duas estações bem definidas: uma seca, que corresponde ao outono e inverno, e outra úmida, com chuvas torrenciais, que correspondem ao período de primavera e verão. Os maiores índices de precipitação ocorrem de outubro a março e valores mínimos de abril a setembro, mostrando uma distribuição irregular da pluviosidade ao longo do tempo.²⁰

Coleta e Identificação dos Pontos de Amostragem

Os dados de concentração de PTS foram obtidos a partir da amostragem realizada pela Secretaria de Meio Ambiente e Desenvolvimento Sustentável - SEMAD.

A coleta foi realizada utilizando o método do Amostrador de Grande Volume (AGV), neste método o ar é filtrado e as particuladas totais em suspensão ficam retidas no filtro de amostragem. A concentração do poluente é dada pela razão da diferença entre a massa final e inicial do filtro pelo volume total de ar amostrado, corrigido para 25°C e 760 mmHg , em um período de 24 horas.²⁴

A SEMAD, monitora três pontos da cidade, sendo os mesmos localizados: na Praça Cívica (PC), na Escola de Engenharia da Universidade Federal de Goiás (EE) e na Praça do Trabalhador (PT); todos os pontos encontram-se localizados no centro da cidade e são caracterizados pelo intenso tráfego de veículos.²⁴

Entretanto, devido a problemas no AGV, não foi possível obter os dados de monitoramento da Praça do Trabalhador. O Quadro 1 e a Figura 3 apresentam a localização dos pontos monitorados pela SEMAD.

Quadro 1. Localização dos pontos de monitoramento

Ponto de amostragem	Localização	Coordenadas dos pontos
Praça Cívica	Praça Dr. Pedro Ludovico Teixeira, Setor. Central, Goiânia - GO	$16^\circ40'51,90'' \text{ S}$ $49^\circ15'17,30'' \text{ O}$
Escola de Engenharia da Universidade Federal de Goiás -UFG	Avenida Universitária, Setor Leste Universitário, Goiânia - GO	$16^\circ40'37,89'' \text{ S}$ $49^\circ14'30,45'' \text{ O}$
Praça do Trabalhador	Praça do Trabalhador, Setor Central, Goiânia - GO	$16^\circ39'48,60'' \text{ S}$ $49^\circ15'39,10'' \text{ O}$

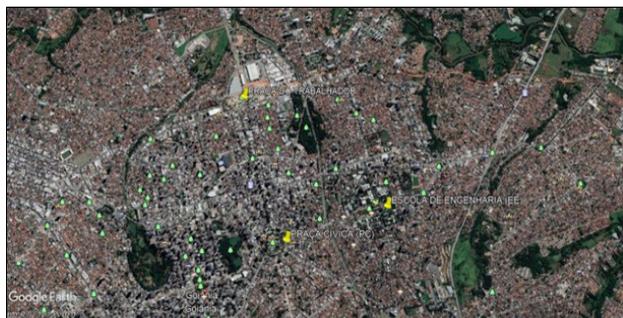


Figura 3. Localização dos pontos monitorados. Fonte: Google Earth (2020).

Método de Amostragem

Para medição dos particulados em suspensão no ar ambiente, foi utilizado o Amostrador de Grande Volume (AGV) para Partículas Totais em Suspensão com vazão variável, denominado AGV PTS ou simplesmente AGV. O equipamento foi instalado conforme as normas da Associação brasileira de Normas Técnicas (ABNT), mais especificamente de acordo com a NBR 9547/97, nos pontos especificados.

O AGV, devidamente instalado no local de medição, puxa uma certa quantidade de ar ambiente que passa por um filtro instalado dentro de uma casinhola de abrigo, durante um período de amostragem de 24 horas (nominais). A vazão imprimida pelo aparelho, dentro da faixa de 1,1 m³/min a 1,7 m³/min, bem como a geometria da entrada da casinhola, dependendo da velocidade e da direção do vento, favorece a coleta de partículas de até 25-50 Qm (diâmetro aerodinâmico). Os filtros empregados são específicos para uma eficiência mínima de 99 por cento para a coleta de partículas FDO (Ftalato de Dioctil) de 0,3 Qm.

O filtro é pesado (após equilibração de umidade) antes e após a coleta para se determinar o ganho líquido em peso (massa). O volume de ar amostrado, corrigido para condições padrão (25°C, 760 mmHg), é determinado a partir da vazão medida e do tempo de amostragem. A concentração das partículas totais em suspensão no ar ambiente é computada dividindo-se a massa de partículas coletada pelo volume de ar amostrado e é expressa em microgramas por metro cúbico ($\mu\text{g}/\text{m}^3$).

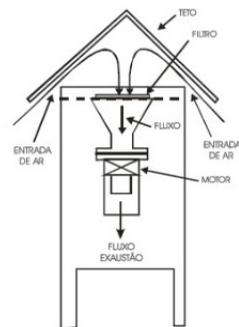


Figura 4. Esquema de funcionamento do AGV- PTS. Fonte: Manual do AGV-PTS.

Quantificação das Queimadas

Para a quantificação e mapeamento dos focos de queimadas dentro do município de Goiânia, nos períodos de 2018 e 2019, foram utilizados os dados disponibilizados pelo INPE. O INPE, tem entre seus objetivos desenvolver tecnologias e aplicações com satélites artificiais e produtos relacionados ao tempo e clima. Na plataforma são disponibilizadas dentre outras informações, o registro de focos de incêndio, estimativa e previsão de riscos de queima da vegetação, e as emissões produzidas pelas queimadas.

As imagens são obtidas por satélites, dentre quais destacamos o AQUA-M-M, AQUA-M-T, tido como referência segundo pesquisadores do INPE, o GOES-13, GOES-16 e MSG-03. Os dados coletados pelos satélites são processados nas várias estações e disponibilizados ao público.

O banco de dados de queimadas do INPE é mantido em parceria com outros institutos e órgãos governamentais dentre eles, o Departamento de Meio Ambiente e Assuntos Rurais - DEFRA, o Banco Mundial, a Fundação de Ciências, Aplicações e Tecnologias Espaciais- FUNCATE e o Ministério do Meio Ambiente - MMA.

De posse desses dados, buscou-se comparar os níveis de concentração de PTS coletados nos pontos de amostragem com o número de focos de queimadas registrados no período mais crítico, o que geralmente ocorre nos meses de julho a setembro, nos anos de 2018 e 2019 e avaliar a influência das queimadas no aumento da concentração de PTS e possivelmente na diminuição da qualidade do ar na cidade de Goiânia.

Resultados e Discussão

A Figura 5 apresenta os valores máximos diários das concentrações médias diárias de PTS na EE e na PC no período de 2018.

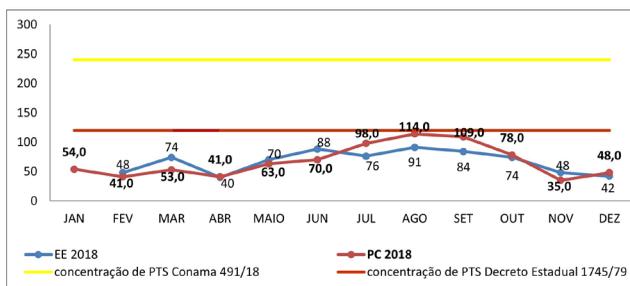


Figura 5. Concentrações máximas diárias de PTS na EE e na PC, no ano de 2018. Fonte: Goiás, 2018.

A Figura 6 apresenta os valores máximos diários das concentrações médias diárias de PTS na EE e na PC no período de 2019.

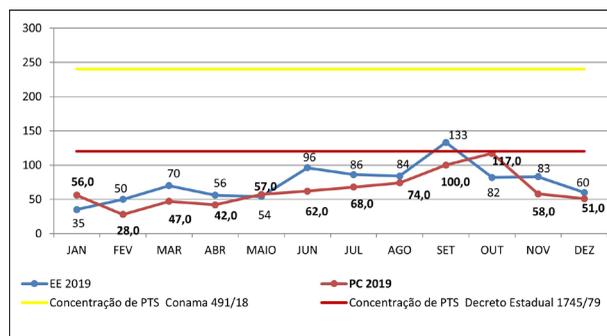


Figura 6. Concentrações médias mensais de PTS na EE e PC, no ano de 2019. Fonte: Goiás, 2019.

Nas Figuras 5 e 6 é possível observar a relação entre as máximas diárias das concentrações de PTS e os limites estabelecidos pelas legislações vigentes à época. Nesse período, os padrões de qualidade do ar em Goiás eram estabelecidos pela Resolução CONAMA 03/90 e pelo Decreto Estadual nº 1745, de 06 de dezembro de 1979 que regulamenta a Lei 8.544/78 do Estado de Goiás. O artigo 33 do decreto 1745/79, dispõe sobre os padrões de qualidade do ar para PTS, sendo: Concentração média anual: $40\mu\text{g}/\text{m}^3$; Concentração máxima diária: $120\mu\text{g}/\text{m}^3$.²

Nota-se que a legislação estadual se mostrava mais restritiva em relação à Resolução CONAMA 03/90, a qual definia para o período de 24 horas (curto), o padrão de qualidade do ar primário ($240\mu\text{g}/\text{m}^3$), cujas concentrações de poluentes que ultrapassem esse padrão poderão afetar a saúde da população e o secundário ($150\mu\text{g}/\text{m}^3$), no qual as concentrações de poluentes atmosféricos estão abaixo do que se prevê para o mínimo efeito adverso sobre o bem estar da população, assim como o mínimo dano à flora e a fauna. Para longos períodos foram definidas as médias geométricas anuais nos valores de $80\mu\text{g}/\text{m}^3$ (primário) e $60\mu\text{g}/\text{m}^3$ (secundário).

Entretanto, a Resolução CONAMA 03/90 mencionada acima foi revogada em 2018 e substituída pela Resolução CONAMA 491/2018, a qual define valores de $240\mu\text{g}/\text{m}^3$ para períodos de 24 horas e $80\mu\text{g}/\text{m}^3$ para a concentração média anual, mantendo o disposto na Resolução CONAMA 03/90. Enquanto a Lei 8.544/78 e o Decreto 1.745/79 foram revogados em 2019 e 2020 respectivamente.

Ao analisar os índices de concentração de partículas em suspensão na EE e na PC no ano de 2018 apresentados na Figura 5, nota-se que, embora ambos os locais sejam caracterizados pelo de intenso tráfego de veículos, os valores encontrados na PC no período de agosto a setembro superaram os valores da EE, chegando a quase alcançar o limite estabelecido pela lei estadual. Entretanto, a EE pode ter seus valores de concentração subestimados devido ao local contar com um nível de arborização mais elevado em comparação com a PC. A presença de vegetação tende a reduzir os níveis gasosos e as partículas em suspensão sobretudo no período de crescimento foliar, período no qual ocorrem as maiores taxas de fotossíntese e a interceptação ou deposição seca por meio dos estomas e das superfícies cuticulares.²⁵

Na Figura 6, os dados de 2019 apresentam níveis de concentração mais elevados em relação ao mesmo período de 2018, chegando a ultrapassar os limites estabelecidos no Decreto 1745/79. Um ponto importante a ser observado é o fato de que as maiores concentrações foram encontradas na EE, refutando a hipótese levantada para os resultados obtidos em 2018.

Nota-se que a concentração das PTS sofre um aumento de 36,85% na EE e de 26% na PC no período compreendido entre agosto e setembro, o que pode estar relacionado com a sazonalidade climática. Os níveis mais elevados de PTS coincidem com o período mais crítico de estiagem das chuvas.

As Figuras 7 e 8 demonstram os dados de precipitação dos anos de 2018 e 2019 respectivamente. Os maiores índices são registrados nos meses de janeiro a março e de outubro a dezembro. Ao comparar as Figuras 5, e 6 com as figuras 7 e 8, observa-se que nos períodos de maior precipitação pluviométrica, a concentração de PTS é menor. Esse comportamento inversamente proporcional pode ser explicado pelo fato de que muitas partículas em suspensão são removidas do ar pela ação das chuvas.²⁴ O que reafirma a estreita relação entre a qualidade do ar e as condições meteorológicas.



Figura 7. Precipitação média registrada no ano de 2018 pela Estação Goiânia A002. Fonte: Fonte INMET (2020).



Figura 8. Precipitação média registrada no ano de 2019 pela Estação Goiânia A002. Fonte INMET (2020).

Comparando a regularidade de chuvas dos anos de 2018 e 2019, pode-se afirmar que o ano de 2019, embora tenha registrado picos de maior volume, passou por períodos mais prolongados de estiagem em relação a 2018. Além do longo período de estiagem, Goiânia enfrenta anualmente, os efeitos provocados pelas queimadas, que ocorrem no mesmo período e contribuem expressivamente com a emissão de gases de efeito estufa e material particulado, causando alterações das características físicas e químicas da atmosfera.^{26,27}

Instrumento considerado indispensável por produtores rurais, a prática das queimadas é bastante utilizada no Brasil para os mais diversos fins. Dentre os quais destacam-se: a limpeza e renovação de pastagem, o preparo do solo para o plantio, o desfolhamento da cana-de-açúcar para o corte e nas práticas do desmatamento. No meio urbano, as queimadas são utilizadas principalmente na limpeza de lotes baldios. A queima da biomassa é considerada um dos principais fatores causadores de impactos sobre o clima. Em contrapartida, as alterações climáticas aumentam as condições de potenciais riscos de queimadas e incêndios acidentais na cobertura vegetal.²⁸

O Material Particulado emitido pelas queimadas e transportado pelos ventos, torna-se presente na atmosfera urbana podendo provocar alterações como: a diminuição da radiação solar, o aumento da concentração de núcleos de condensação, intensificando as precipitações e provocando o “smog” fotoquímico, que reduz a visibilidade, além de prejuízos materiais provocados pela sujeira e até corrosão nas superfícies de casas e edifícios, móveis e objetos.¹⁸ As Figuras 9 e 10 apresentam os focos de queimadas registrados e monitorados pelo INPE. Os dados se referem ao período de agosto a setembro dos anos de 2018 e 2019 respectivamente.

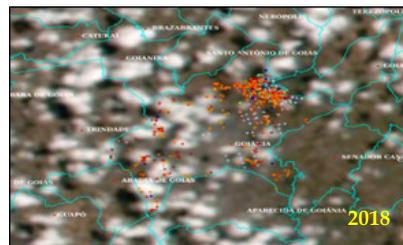


Figura 9. Focos de queimadas registrados em Goiânia no período de Ago a Set no ano de 2018. Fonte INPE (2020).

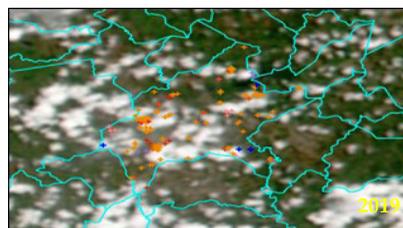


Figura 10. Focos de queimadas registrados em Goiânia no período de Ago a Set nos anos de 2018 e 2019. Fonte INPE (2020).

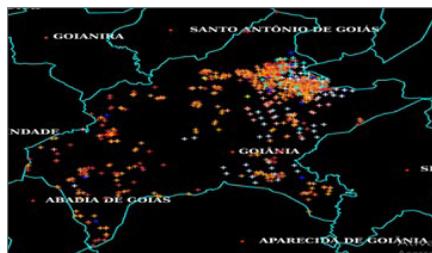
O período de menores índice de precipitação, somado ao aumento da temperatura, cria as condições propícias para o aparecimento de focos de queimadas.

No ano de 2019, observa-se uma maior quantidade e concentração de focos de queimadas em relação ao mesmo período de 2018. No Estado de Goiás, em todo o ano de 2018 foram detectados 3110 focos, sendo 1070 somente no mês de setembro. Enquanto em 2019 esses números chegaram a 7160 focos durante todo o ano, sendo 4149 só no mês de setembro (INPE, 2020). O grande aumento no número de focos de 2018 para 2019 é preocupante e reflete as consequências da negligência com a proteção ambiental que País enfrente por parte dos governantes.

As imagens a seguir apresentam os focos registrados pelo INPE ao longo do período de estiagem do ano de 2019. Na Figura 11, relacionam-se os focos registrados no período de maio a julho de 2019. Já a Figura 12 refere-se aos focos registrados no período de agosto a outubro de 2019.



Figuras 11. Focos de queimadas registrados em Goiânia (mai - Jul de 2019). Fonte: INPE (2020).



Figuras 12. Focos de queimadas registrados em Goiânia (Ago - Out de 2019). Fonte: INPE (2020).

Ao comparar a evolução dos focos de queimadas registrados pelo INPE é possível estabelecer uma relação de interdependência entre as variáveis, uma vez que, os meses que registraram

os maiores índices de queimadas são também os meses que apresentam os níveis mais elevados de concentração de PTS.

Além da emissão de particulados, as queimadas são responsáveis pela emissão de gases de efeito estufa. Esses gases colaboram diretamente com o aumento da temperatura e do aquecimento global. A temperatura é um parâmetro diretamente relacionado com a poluição do ar uma vez que, sua correlação com a intensidade da luz solar, pode influenciar nas reações fotoquímicas e conseqüentemente na formação de poluentes secundários. As queimadas naturais ou antrópicas, geram externalidades negativas ao meio ambiente em razão do aumento da emissão de MP e de gases para a atmosfera, como o CO₂, CO, NO e N₂O, que prejudicam a qualidade do ar e ainda aumentam os efeitos danosos à saúde humana.²⁹⁻³¹

As Figuras 13 e 14 apresentam os gráficos com o comparativo entre as temperaturas média e máxima registradas pelo Instituto Nacional de Meteorologia - INMET dos anos de 1931 a 2010. Observa-se que nesse período houve um acréscimo nas temperaturas média e máxima de mais de 2 e 1 grau respectivamente, o que como já mencionado, contribui para o aparecimento de focos de queimada.

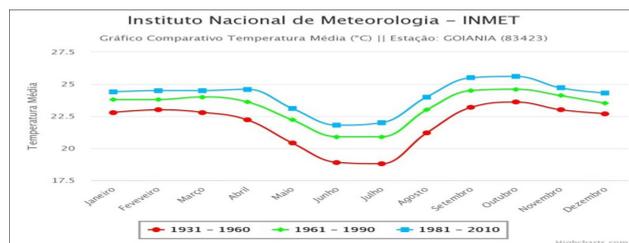


Figura 13. Temperaturas médias registradas pela Estação Goiânia (Cód. 83423). Fonte: INMET (2020).

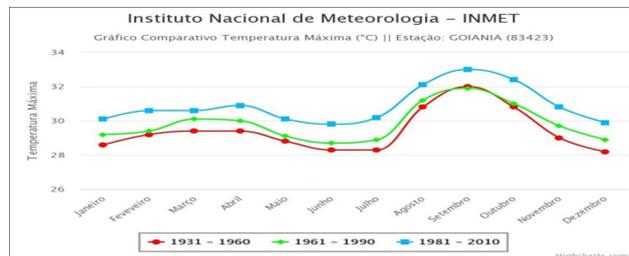


Figura 14. Temperaturas máximas registradas pela Estação Goiânia (Cód.83423).Fonte: INMET (2020).

Outra variável que não pode ser esquecida é a velocidade e direção do vento. O vento é o principal mecanismo de transporte dos poluentes atmosféricos. A velocidade e direção dos ventos, podem correlacionar informações que permitem o conhecimento da direção das massas de poluentes do ar, identificar as fontes contribuintes e avaliar os resultados de medições.³¹ De acordo com dados do INMET a velocidade do vento atinge níveis mais elevados no período compreendido entre os meses de agosto e setembro. As Figuras 15 e 16 apresentam a velocidade do vento referente aos períodos analisados.



Figura 15. Velocidade do vento registrada em 2018 pela Estação Goiânia (Cód. A002). Fonte: INMET (2020).

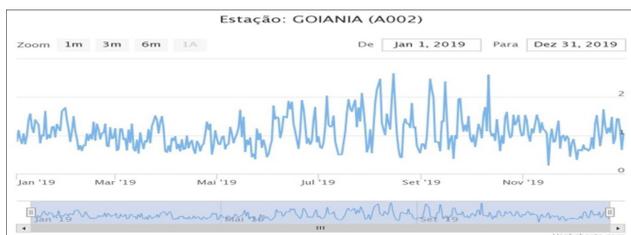


Figura 16. Velocidade do vento registrada em 2019 pela Estação Goiânia (Cód. A002). Fonte: INMET(2020).

O vento pode ainda transportar partículas suspensas de áreas mais distantes e mais acometidas pelas queimadas para os grandes centros urbanos. Os efeitos destas emissões excedem, portanto, a escala local e afetam regionalmente toda a composição e propriedades físicas e químicas da atmosfera.³² Desse modo, a combinação entre: as altas temperaturas, baixo índice de precipitação e o aumento da velocidade dos ventos registrados principalmente nos meses de agosto e setembro, é determinante para o aparecimento e propagação dos focos de incêndio na região de Goiânia.

O anexo I da resolução CONAMA 491/18 refere-se às concentrações máximas de poluentes atmosféricos. A comparação entre as máximas concentrações mensais de PTS, coletadas na EE e na PC nos anos de 2018 e 2019, com o padrão estabelecido pela Resolução CONAMA 491/18 são apresentadas nas Figuras 17 e 18.

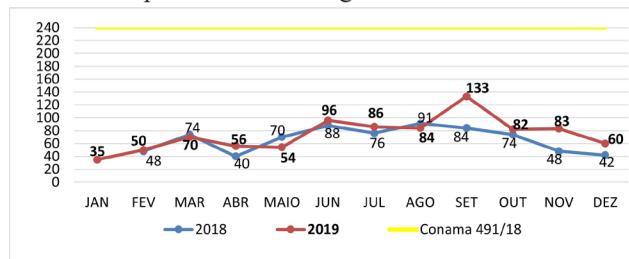


Figura 17. Concentrações médias mensais de PTS na EE no período analisado. Fonte: SEMAD (2019).

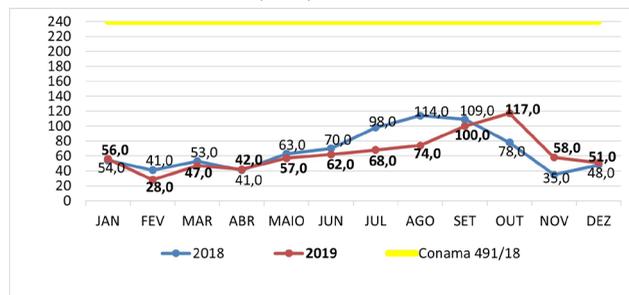


Figura 18. Concentrações médias mensais de PTS na PC no período analisado. Fonte: SEMAD (2019).

Muito embora os valores amostrados para o período de 24 horas se apresentem abaixo dos valores máximos de referência estabelecidos pela Resolução CONAMA 491/18, os *padrões de qualidade do ar* devem estar em consonância com o conhecimento científico a respeito dos riscos e impactos da poluição atmosférica sobre a saúde humana e o meio ambiente, devendo ser periodicamente revisados, com base em estudos aprofundados. Com relação aos valores médios anuais, os mesmos se encontram dentro dos padrões estabelecidos pela Resolução CONAMA 491/18. Entretanto, ao comparar com o Decreto 1745/79, as concentrações médias anuais excedem os limites de 40 µg/m³ estabelecidos, conforme se verifica na Figura 19.

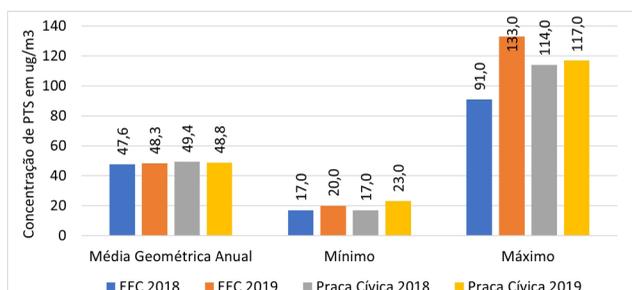


Figura 19. Concentrações médias de PTS na PC no período analisado. Fonte: SEMAD (2019).

A Organização Mundial da Saúde - OMS, defende que essa abordagem deve levar em consideração, os riscos à saúde, viabilidade técnica, fatores econômicos, políticos e sociais de cada País. As circunstâncias locais devem ser consideradas antes de se adotar os valores propostos como padrões nacionais.³³

Apesar dos níveis de concentração não ultrapassarem os valores médios diários de referência estabelecidos pela CONAMA 491/18, percebe-se nitidamente que as concentrações de PTS são mais elevadas nos meses em que também ocorrem o aumento dos focos de queimadas.

Ainda que em níveis abaixo dos padrões de qualidade do ar, as PTS podem causar efeitos negativos à saúde. O aumento do número de visitas hospitalares, o aumento de inalações e do uso de broncodilatadores, aumento no número de internações, são sintomas observados no período de maior incidência de queimadas.³⁴

A grande amplitude na variação da concentração de PTS em períodos relativamente curtos, altera as características naturais do ar. Desse modo, a elevação da concentração de PTS na atmosfera, principalmente no mês de setembro, faz com que nesse período, haja uma maior incidência de doenças respiratórias no município de Goiânia.^{20,35}

Considerações Finais

O comportamento evolutivo dos focos monitorados pelo INPE ao longo do período de estiagem, evidencia a relação direta entre os baixos índices de precipitação e o aparecimento dos focos de queimadas.

O período no qual se registra o maior número de focos de queimadas coincide com o período em que as concentrações de PTS chegam aos níveis mais elevados.

Embora os focos geralmente tenham origem em pontos mais distantes dos centros urbanos, os poluentes gerados na queima da biomassa são transportados até eles de acordo com a velocidade e direção do vento. Esses poluentes, em especial as partículas suspensas, permanecem no ar e podem ser facilmente inaladas.

Com relação à análise das concentrações coletadas nos dois pontos de monitoramento, verificou-se que os níveis aferidos se encontram dentro dos limites estabelecidos como padrões para a qualidade do ar pela Resolução CONAMA 491/18, tanto para o período de 24 horas, quanto para o padrão anual. Entretanto, quando comparados aos limites estabelecidos no Decreto 1.745/79, essas concentrações chegam a ultrapassar tais valores.

Ainda que em níveis abaixo dos limites estabelecidos, as PTS podem causar efeitos negativos à saúde. Fica evidente que a legislação se traduz em um aspecto meramente referencial. É de suma importância que levantamentos de PTS em ambientes de background sejam realizados. Dessa forma é possível manter um controle sistemático dos níveis de concentração e seus efeitos sobre o ar e a saúde.

Desse modo, evidencia-se a necessidade da realização de novas pesquisas na área de poluição atmosférica, sobretudo com relação às PTS, suas fontes de emissão e seus efeitos na saúde, contribuindo com o conhecimento científico e proporcionando uma melhor reflexão acerca do tema e colaborando para que as políticas e leis sobre padrões de qualidade do ar sejam mais eficientes e venham de encontro à saúde e à verdadeira qualidade de vida.

Referências

- BRASIL. Ministério do Meio Ambiente (MMA) disponível em: <https://mma.gov.br/cidades-sustentaveis/qualidade-do-ar.html>. acesso em: 27 de julho de 2020.
- HORA, K. E. R.; SOUZA, S. B. S. Características das condições de tempo e clima e poluição do ar em Goiânia. in: *Anais do III congresso brasileiro de gestão ambiental*. Goiânia. 1-14p. 2012.
- ALVARES JR, O. M.; LACAVA, C. I. V.; FERNANDES, P. S. Emissões atmosféricas: tecnologias e gestão ambiental. *Senai*. Brasília. 373p., 2002.

4. BORREGO, C.; COSTA, A. M.; GINJA, J.; AMORIM, M.; COUTINHO, M.; KARATZAS, K.; SIOUMIS, T. H.; KATSIFARAKIS, N.; KONSTANTINIDIS, K.; DE VITO, S.; ESPOSITO, E.; SMITH, P.; ANDRÉ, N.; GÉRARD, P.; FRANCIS, L. A.; CASTELL, N.; SCHNEIDER, P.; VIANA, M.; MINGUILLÓN, M. C.; REIMRINGER, W.; OTJES, R. P.; VON SICARD, O.; POHLE, R.; ELEN, B.; SURIANO, D.; PFISTER, V.; PRATO, M.; DIPINTO, S.; PENZA, M. Assessment of air quality microsenors versus reference methods: theeunet air joint exercise. *Elsevier, Atmospheric Environment*, v. 147, p. 246-263, **2016**.
5. FEARNISIDE, P.M. Desmatamento na Amazônia: dinâmica, impactos e controle. *Acta Amazônica*. Manaus, v.36, n. 3 p. 365-400, **2006**.
6. FISHBAIN, B.; LERNER U.; CASTELL N.; COLE-HUNTER T.; POPOOLA O.; BRODAY D. M.; IÑIGUEZ T. M.; NIEUWENHUIJSEN M.; JOVASEVIC-STOJANOVIC M.; TOPALOVIC D.; JONES R. L.; GALEA K. S.; ETZION Y.; KIZEL F.; GOLUMBIC Y. N.; BARAM-TSABARI A.; TAMAR YACOBI T.; DRAHLER D.; ROBINSON J. A.; KOCMAN D.; HORVAT M.; SVECOVA V.; ARPACI A.; BARTONOVA A. An evaluation tool kit of air quality micro-sensin gunits. *Elsevier: Science Of The Total Environment*, v. 575, p. 639 - 648, **2017**.
7. FREIBERG, M. R.; PASQUALETTO, A. Diagnóstico da qualidade do ar de Goiânia-GO. Pontifícia Universidade Católica de Goiás, Goiânia, 2009. Disponível em: www.pucgoias.edu.br/ucg/prope/cpgss/arquivosupload/36/file/continua/diagn%c3%93stic o%20da%20qualidade%20do%20ar%20de%20goi%c3%82nia-go.pdf. Acesso em 15 nov. **2019**.
8. SILVA JUNIOR, J. L. R.; PADILHA, T. F.; REZENDE, J. E.; RABELO, E. C. A.; FERREIRA, A. C. G.; RABAHI, M. F. Efeito da sazonalidade climática na ocorrência de sintomas respiratórios em uma cidade de clima tropical. *J. Bras. Pneumol.*, São Paulo, v. 37, n. 6, p. 759-767, **2011**. Disponível em: https://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=s1806-37132011000600009&lng=en&nrm=iso. Acesso em: 26 junho. **2020**.
9. CETESB, Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. Qualidade do ar. Disponível em: <http://www.cetesb.sp.gov.br/ar/Informações-Básicas/21-Poluentes>. Acessado em março de **2020**.
10. ANDRADE, V. S.; ARTAXO, P.; HACON, S.; CARMO, C. N. Influência do material particulado (pm2.5) de queimadas e variáveis meteorológicas na morbidade respiratória de crianças em Manaus, AM. *Revista Geonorte*, Edição Especial, v.1, n.4, p.744 -758, **2012**.
11. ARBEX, M. A.; SANTOS, U. P.; MARTINS, L. C.; SALDIVA, P. H. N.; PEREIRA, L. A. A.; BRAGA, A. L. F. A poluição do ar e o sistema respiratório. *J. Bras. Pneumologia*, São Paulo, v. 38, n. 5, p. 643-655, 2012. Disponível em: <https://www.scielo.br/pdf/jbpneu/v38n5/v38n5a15.pdf>. Acesso em: 20 abr. **2020**.
12. YANAGI, Y.; ASSUNÇÃO, V. J.; BARROZO, V. L. Influência do material particulado atmosférico na incidência e mortalidade por câncer no Município de São Paulo, Brasil. *Cadernos de Saúde Pública*, Rio de Janeiro, v.28, n.9, p.1737-48, **2012**.
13. BRAGA, A.; PEREIRA, L. A. A. P.; SALDIVA, P.H. N. Poluição atmosférica e seus efeitos na saúde humana. *Jornal Brasileiro de Pneumologia*, São Paulo, supl. 1, p. 10-16, **2001**.
14. DANNI-OLIVEIRA, I.M. Poluição do ar como causa de morbidade e mortalidade da população urbana. *Revista RA'E GA, Ed.UFPR*, Curitiba, n. 15, p. 113-126, **2008**.
15. GOUVEIA, N., FREITAS, C.U., MARTINS, L.C., MARCÍLIO, I. O. Hospitalizações por causas respiratórias e cardiovasculares associadas à contaminação atmosférica no município de São Paulo, Brasil. *Cadernos de Saúde Pública*, São Paulo, v. 22, n. 12, p. 2669-2677, Dez. **2006**.
16. ANDRADE, D. O.; BOTELHO, C.; SILVA JR, J. L. R.; FARIA, S. S.; RABAHI, M. F. Sazonalidade climática e hospitalizações em crianças menores de cinco anos com doença respiratória, Goiânia/GO. *Hygeia*, v. 11, n. 20, p. 99-105, Jun. 2015. Disponível em: <http://www.seer.ufu.br/index.php/hygeia/article/view/27623>. Acesso em: 25 jun. **2020**.
17. COSTA, E. C. Caracterização do material particulado inalável na atmosfera e na vegetação urbana da cidade de Goiânia. *Biblioteca Digital de Teses e Dissertações, UFG*, Goiânia, 143 p., **2011**.
18. TORRES, F. T.P.; MARTINS, I.a. Fatores que influenciam na concentração do material particulado inalável na cidade de Juiz de Fora (MG). *Revista Caminhos de Geografia*, Juiz de Fora - MG, v. 4, n. 16 p. 23 - 39, **2005**.
19. ONU. United Nations Open Working Group on Sustainable Development Goals. United Nations Copyright.; **2016**. Disponível em: <https://sustainabledevelopment.un.org/>. Acesso em: 22 jul. 2019.
20. RIBEIRO, T.G.; BOAVENTURA, G.R.; CUNHA, L.S.; PIMENTA, S.M. Indicadores geoquímicos na avaliação da qualidade ambiental: bacia hidrográfica do Ribeirão Anicuns em Goiânia, Goiás. *Tese (doutorado em geociências aplicadas)* - Universidade de Brasília, Brasília, p. 160, **2017**.
21. RUSSO, P. R. A qualidade do ar no município do rio de janeiro: análise espaço-temporal de partículas em suspensão na atmosfera. *Revista de Ciências Humanas*, v. 10, n.1, p. 78-93, **2010**.
22. CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente). Resolução CONAMA n. 491 de 19 de novembro de 2018. Dispõe sobre os padrões de qualidade do ar. Disponível em: <http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=740>. acesso em: 18 set. **2020**.
23. Köppen, w 1931. Grundriss der Klimakunde. Berlim: Walter de Gruyter, 390 pp. in: *Ayoade* 2003. J. O. Introdução à Climatologia para os trópicos. Rio de Janeiro: Bertrand Brasil, 332 pp, **2003**.
24. PASSOS, F. F.C.; GODOI, E. L.; ARAÚJO, E.S. Poluição do ar: análise da concentração de partículas totais em suspensão em Goiânia, Goiás. in: *anais do XIV encontro nacional de estudantes de engenharia ambiental, blucher engineering proceedings*, São Paulo, v.3 n.2. p. 595-602. **2016**.

25. FELICIANO, M.; MAIA, F.; RODRIGUES, F.; RIBEIRO, A.; GONÇALVES, A.; NUNES, L. O papel da vegetação urbana no controle das concentrações de PM₁₀, in Feliciano, M.; Gonçalves, A.; Ribeiro, A.C.; Maia, F. Ed. 2009. Qualidade do ambiente urbano: novos desafios. Bragança: *Instituto Politécnico*. p. 39-45. ISBN 978-972-745-105-0, **2009**.
26. PAZ, R. L. F.; AMORIM, A. O.; MEDEIROS, R.M. Caracterização da velocidade e direção do vento na região sul na cidade de Goiânia – Goiás. *Apresentação no XVI Congresso Brasileiro de Agrometeorologia*, Belo Horizonte, Minas Gerais, 22 a 25 de setembro de **2009**.
27. YAMASOE, M.A.; ARTAXO, P.; MIGUEL, A.H.; ALLEN, A. G. Chemical composition of aerosol particles from direct emissions of biomass burnings in the Amazon Basin: Water-soluble species and trace elements. *Atmospheric Environment*, v. 34, pp. 1641-1653, **2000**.
28. JUSTINO, F. B; SOUZA, S.S; SETZER, A. Relação entre “focos de calor” e condições meteorológicas no Brasil. in: *Anais do XII congresso brasileiro de meteorologia*, Foz de Iguaçu-PR, 1-9 p. **2002**.
29. MENDONÇA, M. J. C.; DIAZ, M. C. V.; NEPSTAD, D.; MOTTA, R. S.; ALENCAR, A.; GOMES, J. C.; ORTIZ, R. A. The economic cost of the use of fire in the Brazilian Amazon. *Ecological Economics*, v. 49, p. 89-105, **2004**.
30. ROSEIRO, M. N. V. Morbidade por problemas respiratórios em Ribeirão Preto/SP, de 1995 a 2001, segundo indicadores ambientais, sociais e econômicos. *Dissertação (mestrado em enfermagem em saúde pública)* – escola de enfermagem de Ribeirão Preto, São Paulo, p. 150, **2002**.
31. VIEIRA, N. R. Poluição do ar: indicadores ambientais. *Editora E-Papers*, Rio de Janeiro. 220 p., **2009**.
32. FREITAS, S. R.; LONGO, K. M.; SILVA DIAS, M. A. F.; SILVA DIAS, P. L. Emissões de queimadas em ecossistemas da América do Sul. *Estudos avançados*, São Paulo, v. 19, n. 53, p. 167-185, Abr. 2005. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0103-40142005000100011&lng=en&nrm=iso. Acesso em: 02 out. **2020**.
33. OMS. Who air guidelines global update. Reported in a working group meeting, Scherfigsvej, DK 2100, Copenhagen, Denmark, 485 p., **2005**.
34. LOPES, F. S.; RIBEIRO, H. Mapeamento de internações hospitalares por problemas respiratórios e possíveis associações à exposição humana aos produtos da queima da palha de cana-de-açúcar no estado de São Paulo. *Rev. Bras. Epidemiologia*, v.9, n.2, p.215-25, **2006**.
35. SMS, Secretaria Municipal de Saúde de Goiânia. Informativo: com o período seco secretaria municipal de saúde atenta para cuidados com a saúde. SMS, Goiânia. 2017. Disponível em: <http://www.saude.goiania.go.gov.br/html/noticia/15/07/com-periodo-seco-sms-atentacuidados-saude.shtml>. Acesso em: 13 set. **2020**.

Núbia A. Campos¹, Tiago G. Ribeiro^{2*} & Sandro M. Pimenta¹

¹ Instituto Federal de Goiás – IFG, Câmpus Goiânia, Rua 75, nº 46, Centro, CEP 74.055-110, Goiânia, Goiás, Brasil.

² Instituto Federal de Goiás – IFG, Câmpus Aparecida de Goiânia, Avenida Universitária Vereador Vagner da Silva Ferreira (antiga Rua Mucuri), Qd 1, Lt 1-A, Parque Itatiaia, CEP: 74968-755, Aparecida de Goiânia, Goiás, Brasil.

*E-mail: tiago.ribeiro@ifg.edu.br

Eficiência da Aplicação do Pó de Rocha na Fase Vegetativa da Cultura do Milho

Kalebe K. I. Nagatani, Mouzarty S. Loreno, Rafael B. Ferreira, Sabrina D. Oliveira & Carlos E. B. Barbosa

A prática da rochagem tem se destacado como uma abordagem sustentável para adubação, ganhando crescente adoção na fertilização do solo. Essa técnica oferece uma ampla gama de micronutrientes e macronutrientes, demonstrando um considerável potencial para enriquecer, corrigir e revitalizar o solo. Este estudo teve como propósito analisar e avaliar a nutrição mineral durante o cultivo de milho, utilizando o fertilizante FMX como alternativa ao cloreto de potássio. O foco foi também identificar possíveis deficiências nutricionais e avaliar o impacto nos custos de produção. O experimento foi conduzido em um delineamento de blocos casualizados, com quatro repetições e cinco tratamentos por bloco. Esses tratamentos foram: T1 (testemunha), T2 (95 kg ha⁻¹ de KCl), T3 (190 kg h ha⁻¹ de KCl), T4 (1125 kg ha⁻¹de FMX) e T5 (2250 kg ha⁻¹de FMX). O pó de rocha foi aplicado antes do plantio, enquanto o cloreto de potássio foi aplicado em cobertura, junto com a adubação nitrogenada. Os resultados obtidos não indicaram diferenças significativas entre os tratamentos que receberam o fino de micaxisto e aqueles que receberam o cloreto de potássio. Essa igualdade estatística entre os tratamentos sugere que a utilização do FMX é viável, já que apresentou resultados estatisticamente equivalentes ao fertilizante químico solúvel.

Palavras-chave: *Recondicionador; Remineralizador; Zea Mays*

Rock fertilization has been gaining prominence as a sustainable fertilization approach, showing current growth in soil enrichment. This technique offers a wide array of micronutrients and macronutrients, holding substantial potential for soil enrichment, correction, and rejuvenation. This study aimed to analyze and evaluate mineral nutrition during corn cultivation using FMX fertilizer as an alternative to potassium chloride. The focus was also on identifying potential nutritional deficiencies and assessing the impact on production costs. The experiment followed a randomized block design, with four replications and five treatments per block. These treatments were: T1 (control), T2 (95 kg ha⁻¹ of KCl), T3 (190 kg ha⁻¹ of KCl), T4 (1125 kg ha⁻¹ of FMX), and T5 (2250 kg ha⁻¹ of FMX). The rock powder was applied before planting, whereas potassium chloride was applied as a top dressing along with nitrogen fertilization. The results obtained did not indicate significant differences between the treatments that received micaxisto fines and those that received potassium chloride. This statistical equivalence among the treatments suggests that the use of FMX is feasible, as it yielded statistically equivalent results to the soluble chemical fertilizer.

Keywords: *Soil conditioner; Remineralizer; Zea Mays.*

Introdução

O Brasil é um país que tem uma grande diversidade em produção agrícola, e as mais cultivadas são as culturas que produzem grãos, o milho é uma destas culturas que tem uma produtividade em grande escala. Na agricultura brasileira produzindo cerca de 85,75 milhões de toneladas deste cereal segundo,¹ tendo também uma influência importante para o setor de exportações, como um dos principais commodities exportado.²

O milho tem uma grande importância econômica para produção agrícola, por ser uma cultura produzida em grande escala, visando diminuir os custos de produção, é visto a necessidade de tecnologias com potencial sustentável contribuindo para a produção com custos mais viáveis. Com isso surgiu a tecnologia rochagem sendo utilizada como adubação no Brasil, foi divulgada e usada como alternativa de fertilizante nos anos de 1950, no estado de Minas Gerais pelos pesquisadores Josué Guimarães e Vlademir Ilchenj.³

A fertilização é uma prática utilizada e realizada desde a Grécia Antiga, a relatos que Plínio (62-113 d.C.), já utilizava a rochagem, este dizia que o calcário (rocha sedimentar que possui minerais com quantidades acima de 30% de carbonato de cálcio) e podendo ser utilizada de forma moída e distribuída com uma camada fina acima do solo, então dessa forma é uma adubação que consiste com período residual para cultura ao longo dos anos.⁴

A rochagem é uma forma de adubação sustentável que vem crescendo atualmente como forma de fertilização dos solos, porém vale ressaltar que os europeus utilizavam esse método como adubação a muitos anos como por exemplo podemos citar o livro “Pães de Pedra” feito em 1898 por Julius Hensel, em Leipzig na Alemanha, que descreve relatos de aumento da fertilidade dos solos com utilização que eles denominavam farinha de rochas,⁵ como diz,⁶ que dessa maneira discorre sobre essas atividades retratando de formas mais técnicas.⁷

Durante as décadas de 1970 a 1980, as buscas em forma de pesquisa tiveram maior sentido ao saber que a

rochagem poderia ter um grande poder agrônômico, por possuir quantidades interessantes de potássio e outros nutrientes para serem utilizados em diversas culturas, sendo uma alternativa para obtenção de fertilizantes.⁸

Dessa maneira, o remineralizado de solo, trata-se na adição de rochas moídas, que são rejeitos de mineradoras e pedreiras surgindo assim o pó de rocha, tendo potencial de fertilizar corrigir e rejuvenescer o solo. Devido ter diversas quantidades de micronutrientes e macro nutrientes os quais são fósforo, potássio, cálcio, silício e entre outros minerais. Podendo ser uma alternativa promissora na produção agrícola, com grande potencial exclusivamente para cultivos agroecológicos, tendo capacidade de ser utilizado como adubação.⁹ Assim, o objetivo deste trabalho foi verificar a eficiência do pó de rocha como adubação na cultura do milho com finalidade para grãos.

Materiais e Métodos

DESCRIÇÃO DO LOCAL E CLIMA

O experimento foi realizado na Fazenda Escola Romildo Ramos FAMA, situada em Anápolis-GO, localizada nas coordenadas geográficas de latitude 16°18'43''S e longitude 48°53'33''O e altitude de 1017 m. De acordo com a classificação de Köppen Geiger, a região de Anápolis tem um clima Aw, com estações secas e chuvosas bem definidas, caracterizado por inverno seco e verão chuvoso de clima tropical.¹⁰

DELINEAMENTO EXPERIMENTAL

O experimento foi executado em delineamento de blocos casualizados (DBC) com 5 tratamentos e quatro repetições, totalizando 20 parcelas. A área experimental é constituída por vinte parcelas medindo 1,0 x 1,5 m, a área total do experimento de cultivo e de 30 m².

A adubação de nitrogênio e fosforo foi igual para todos os tratamentos, constituindo-se com a quantidade de 180 kg N (1000 kg/sulfato de amônio) e 100 kg P₂O₅ (550 kg de mega phos), tendo a alteração nas dosagens e diferentes fertilizantes em adubação potássica.

Tabela 1. Componentes dos tratamentos.

Tratamentos	Adubação Potássica Química Solúvel	Adubação Potássica Com Fino De Micaxisto
T1	0	0
T2	(45 Kg K ₂ O) 95 Cloreto de Potássio	0
T3	(90 Kg K ₂ O) 190 Cloreto de Potássio	0
T4	0	(45 Kg K ₂ O) 1125 de FMX
T5	0	(90 Kg K ₂ O) 2250 de FMX

PREPARO DO SOLO

Todos os tratamentos receberam fertilizantes minerais, aplicados de maneira uniforme sobre a superfície das parcelas e a quantidade a ser aplicada foram calculadas de acordo com a necessidade da cultura, as parcelas receberam fertilizantes nitrogenados e fosfatados com quantidades iguais, em função das análises futuras que visa a comparação entre o fertilizante potássio químico solúvel e um remineralizador (pó de micaxisto) como fonte potássica, as dosagens destes produtos potássicos possuem doses em quantidades diferentes. As indicações para adubação e correção do solo na área do experimento tem como base o livro cerrado correção do solo e adubação.¹¹

As características químicas do solo onde foi implantado o experimento, está descrita (Tabela 2) em uma análise de solo, a onde foi realizado amostragem nas profundidades de 00-20 centímetros.

Tabela 2. Caracterização química pré-semeadura do milho na área experimental no município de Anápolis-GO, na profundidade de 00-20 cm.

Características Químicas							Características Físicas			
cmolc/dm ³						mg/dm ³		%		
pH	Ca	Mg	K	Al	H+Al	P	K	Argila	Silte	Areia
5,2	1	0,4	0,06	0	1,6	0,8	25,4	51	12	37
mg/dm ³						Dados complementares				
S	Na	Zn	Cu	Fe	Mn	CTC	sat. Bases	Ca/CTC	Mg/CTC	K/CTC
2	1,5	0,4	4,1	33,2	11,5	3,07	47,77%	32,57%	13,03%	1,95%

O local da área experimental foi demarcado e feito uma roçagem com roçadeira manual, na data 16/06/2022, no mesmo dia foi aplicado o calcário. A marcação das parcelas e aplicação do pó de rocha foi no dia 30/07/2022, depois desse processo de limpeza e correção da área, foi montada a irrigação na data 02/08/2022 a 04/08/2022. A irrigação utilizada no experimento foi localizada composta por mangueiras de gotejo de ½ polegada, com espaçamento de 20 cm entre os gotejadores e vazão de 1,5 L/h.

O experimento foi efetuado em sistema direto, onde a área foi dessecada com herbicida roundup com uma dosagem de 3 Lha-1 do produto comercial. A semeadura foi realizada manualmente no 15/09/2022, a adubação de plantio foi de 30 kg ha-1 de N, 100 kg ha-1 de P₂O₅ e 60 kg ha-1 de K₂O. Sendo utilizado o sulfato de amônio como fonte de nitrogênio, mega phos como fertilizante fosfatado e o cloreto de potássio fornecendo o potássio, para os tratamentos com pó de rocha, foram aplicados a dosagem referente a 3000 kg ha-1 de fino de micaxisto.

Após o surgimento de plantas invasoras, foi feito uma capina manual para controle destas plantas invasoras, isso foi realizado no dia 24/10/2022.

CARACTERÍSTICAS AVALIADAS

Área foliar: (AF) Foi determinada pela equação, utilizando dados coletados do comprimento, número de folhas e largura foliar, adotando o fator de correção de 0,75.¹²

Número de folhas: A contagem do número de folhas (NF) por planta, foi a parti da média do número de folhas de cinco plantas no estágio vegetativo.¹³

Altura de planta: Para avaliar a altura das plantas de milho (AP) foi utilizado uma trena métrica, calcula-se a média de cinco plantas em cada parcela, medindo-se da superfície até a base do pendão, utilizando-se uma trena.¹⁴

Diâmetro do colmo: Com o auxílio de uma fita métrica foi aferida a medida de diâmetro do caule (DC) das plantas de milho.

ANÁLISE ESTATÍSTICA

Os dados coletados serão submetidos à Análise de Variância e teste F a 5% de probabilidade. Quando pertinente, onde foi aplicado teste de Tukey (5%). As análises de teste de média foram realizadas utilizando o software Sisvar 5.6.¹⁵

Resultados e Discussão

Verifica-se, a partir dos dados apresentados na Tabela 3, que não foram encontradas diferenças estatisticamente significativas ($p > 0,05$) para as características avaliadas. Os coeficientes de variação das características agrônomicas AP, NF e DC estão dentro dos parâmetros recomendados por (16), que é abaixo de 30%. No entanto, observa-se que a característica AF apresenta um coeficiente de variação acima do adequado, indicando a presença de valores discrepantes.

Tabela 3. Resumo da análise de variância realizadas para: altura de planta (AP), número de folhas (NF), diâmetro do colmo (DC) e área foliar (AF).

		QM			
FV	GL	AP	NF	DC	AF
Tratamento	4	95,375	0,175	0,899	1266901
Bloco	3	15,116	0,183	0,101	1185410
Erro	12	52,408	0,308	0,775	2859010
Total corrigido	19	-	-	-	-
CV(%)	-	8,16	10,01	14,22	37,59

* Significativo pelo teste F a 5% de probabilidade.

FV igual Fonte de variação, GL igual Graus de liberdade, QM igual Quadrado médio, CV% igual ao Coeficiente de variação em %.

Os resultados avaliados permitiram o cálculo das médias para cada característica. A análise de variância foi realizada com base nesses dados, seguida pelo teste de Tukey com um nível de significância de 5%. Ao observar a tabela acima, podemos concluir que não foram encontradas diferenças significativas entre os tratamentos avaliados na análise estatística de variância.

Tabela 4. Teste de Tukey a 5% de probabilidade para todas as variáveis vegetativas.

Tratamentos	AP (cm)	NF	DC (cm)	AF
T1	96,25 A	5,50 A	7,02 A	4579,75 A
T2	83,50 A	5,25 A	5,97 A	3730,50 A
T3	90,50 A	5,50 A	6,00 A	4195,50 A
T4	87,25 A	5,75 A	5,85 A	4781,75 A
T5	86,25 A	5,75 A	6,12 A	5204,50 A

AP igual a Altura de planta; DC igual ao diâmetro de colmo; NF igual ao número de folha; AF igual a área foliar, médias seguidas da mesma letra na coluna, não se diferenciam estatisticamente pelo teste de Tukey a 5% de probabilidade. T1-testemunha; T2-90 kg ha⁻¹ de KCl; T3-190 kg ha⁻¹ de KCl; T4-1125 kg ha⁻¹ de FMX; T5-2250 kg ha⁻¹ de FMX.

No que diz respeito à altura das plantas (AP), não foi observada diferença significativa entre os tratamentos. No entanto, houve um aumento linear na altura das plantas na testemunha em comparação com os demais tratamentos. Esse aumento pode ser atribuído a fatores bióticos que afetaram negativamente os componentes abióticos dos tratamentos (conforme apresentado na Tabela 4).

No caso do diâmetro do colmo (DC), não foram encontradas diferenças significativas entre os tratamentos. No entanto, o segundo maior valor foi observado no tratamento com uma dosagem de 5250 kg ha⁻¹ de FMX, resultando em um diâmetro médio de 6,12 cm. O maior valor para o DC foi observado na média da testemunha, indicando que fatores específicos permitiram que a testemunha se destacasse em relação aos demais tratamentos (conforme explicado na Tabela 4).

A avaliação do número de folhas (NF) revelou que, apesar de não haver diferença estatisticamente significativa entre todos os tratamentos, aqueles que receberam pó de rocha apresentaram as médias mais altas. A contribuição positiva para esse aumento no número de folhas nos tratamentos que receberam FMX se deve à liberação gradual

do micaxisto fino, que atendeu às demandas da planta nas várias fases de crescimento. Estudos anteriores também destacam que cerca de 68% do potássio absorvido pelas plantas permanece na parte vegetativa, enquanto apenas 32% são alocados nos grãos. Isso confirma a vantagem dos tratamentos que utilizam pó de rocha como fonte de potássio, devido à sua liberação mais lenta em comparação com o cloreto de potássio solúvel, que pode resultar em perdas por lixiviação ou volatilização (conforme detalhado na Tabela 4).

A análise da área foliar (AF) indicou um aumento linear nessa característica agrônômica nos tratamentos T4 e T5, apesar de não haver significância estatística. Isso sugere que, mesmo com influências negativas de fatores bióticos, os tratamentos que usaram o fino de micaxisto como fonte de potássio tiveram um resultado positivo devido à liberação gradual desse remineralizador, conforme discutido na literatura. Essa abordagem favoreceu a utilização desse produto (detalhes na Tabela 4).

Os resultados da análise estatística indicam que o FMX teve eficácia comparável à do cloreto de potássio, suprindo as necessidades do milho. A cultura se desenvolveu adequadamente sem apresentar deficiências nutricionais evidentes nos tratamentos que utilizaram o fino de micaxisto como fonte de potássio em comparação com aqueles que receberam o fertilizante químico cloreto de potássio. A utilização de agrominerais tem demonstrado efeitos positivos no crescimento, produção e nutrição das plantas.^{17,18} Esses resultados promissores também foram confirmados em estudos com pastagens, onde a aplicação de pó de basalto hidrotermatizado resultou em aumentos significativos na matéria seca.¹⁹ Conforme,²⁰ maiores doses do remineralizador de solo levaram a aumentos na produtividade do milho.

Um ponto essencial a ser considerado é a correção do solo por meio da calagem, conforme indicado pela análise do solo. Quando associada ao pó de rocha, essa prática mostrou resultados equivalentes em termos de estrutura e produtividade quando comparada a fertilizantes químicos solúveis. Assim, a utilização do remineralizador é viável, já que não resulta em rendimento inferior ao fertilizante

químico durante o estágio vegetativo do milho. De acordo com,²¹ o remineralizador de solo pode ser uma alternativa eficaz para diversas culturas.

Conclusões

Conclui-se que os resultados obtidos revelam o potencial do uso de micaxisto fino na cultura do milho, especialmente durante a fase vegetativa, demonstrando características adequadas em relação à altura, número de folhas, área foliar e diâmetro do colmo.

Com base nos resultados estatísticos, surge a hipótese de que a adubação convencional com potássio poderá ser substituída total ou parcialmente pelo micaxisto fino, sem acarretar modificações nos aspectos agrônômicos e econômicos da cultura do milho. Isso não apenas contribui para a criação de um ambiente mais sustentável, mas também potencializa a produção com custos reduzidos e maior produtividade.

Observa-se, de acordo com as informações expostas no estudo, que a área sujeita à adubação convencional com potássio, que envolveu a aplicação inicial e posterior complementação na fase V4, acarretou maiores custos operacionais e exerceu uma certa pressão sobre o solo, resultando em maior compactação quando comparada à área experimental tratada com FMX. Isso confere vantagem aos tratamentos que empregaram o remineralizador de solo, uma vez que sua aplicação ocorre durante o preparo do solo. Essa vantagem é corroborada por evidências estatísticas que confirmam a ausência de diferenças produtivas e agrônômicas entre a adubação convencional e a adubação com pó de rocha.

Recomenda-se a realização de estudos adicionais para aprofundar o conhecimento sobre a fase reprodutiva da cultura do milho e compreender melhor a dinâmica química desse composto no solo.

Referências

1. CONAB, Companhia Nacional de Abastecimento. Último levantamento da safra **2020/21** confirma redução na produção de grãos. 2021. Disponível em <<https://www.conab.gov.br/ultimas-noticias/4234-ultimo-levantamento-da-safra-2020-21-confirma-reducao-na-producao-de-graos>>. Acesso em: 03 de maio **2022**.

2. FARMNEWS. Dados de exportação de milho e soja do Brasil em fevereiro de 2021. FARMNEWS 2021. Disponível em <
3. MARTINS E.S. THEODORO S.H. 2009. Apresentação do Congresso Brasileiro de Rochagem. In: Anais do I Congresso Brasileiro Rochagem, 1:3-4.
4. SILVEIRA, R. T. G. Uso de rochagem pela mistura de pó de basalto e rocha fosfatada como fertilizante natural de solos tropicais lixiviados. 2016. viii, 98 f., il. Dissertação (Mestrado em Geociências Aplicadas) - Universidade de Brasília, Brasília, 2016.
5. HENSEL, J. (1898). Pães de Pedra (Brot aus Steinen, durch mineralische Dúngung der Felder) (2ª ed.). Leipzig.
6. MISSOUX M. Sur l'emploi de la poudre des roches granitiques comme excitant de la vegetation. Comptes rendus de l'Académie des Sciences, v.36, p.245, 1853.
7. VAN STRAATEN, P. Farming with rocks and minerals: challenges and opportunities. *Annals of the Brazilian Academy of Sciences*, p. 732-747, 2006.
8. CONGRESSO BRASILEIRO DE ROCHAGEM, 1., 2010, Brasília. *Anais...* Brasília: EMBRAPA Cerrados, 322 p. 2010.
9. NUNES, J. M. G.; KAUTZMANN, R. M.; OLIVEIRA, C. Evaluation of the natural fertilizing potential of basalt dust wastes from the mining district of Nova Prata (Brazil). *Journal of Cleaner Production*, v.84, p.649-656, 2014.
10. CARDOSO, M. R. D. MARCUZZO, F. F. N.; BARROS, J. R. Classificação Climática de Köppen Geiger para o Estado de Goiás e o Distrito Federal. *Acta Geográfica, Boa Vista*, v. 8, n. 16, p. 40-55, 2014.
11. SOUSA, D.M.G. & LOBATO, E., eds. Cerrado: Correção do solo e adubação. Planaltina, Embrapa Cerrados, 2004. 416p
12. MONTGOMERY, E.G. Correlation studies of com. Annual report. Nebraska Agricultural Experiment Station, 24:108-159,1911.
13. STRECK, Nereu Augusto et al. Temperatura base para aparecimento de folhas e filocrono da variedade de milho BRS Missões. *Ciência Rural*, v. 39, p. 224-227, 2009.
14. SILVA, Juslei Figueiredo da et al. Milho safrinha em espaçamento reduzido consorciado com populações de plantas de *Brachiaria ruziziensis*. 2014.
15. FERREIRA.D.F. SISVAR: A Computer Statistical Analysis. Ciências e Agrotecnologia. Lavras-MG, v.35, n.6, p.1039-1042, 2011.
16. PAES, M.C.D.; Aspectos Físicos, Químicos e Tecnológicos do Grão de Milho, Circular técnica, Sete Lagoas – MG, n. 75, dez. 2006.
17. SILVA, A.; ALMEIDA, J. A.; SCHMITT, C.; COELHO, C. M. M. Avaliação dos efeitos da aplicação de basalto moído na fertilidade do solo e nutrição de *Eucalyptus benthamlii*. *Revista Floresta*. Curitiba, PR, v. 42, n. 1, p. 69 - 76, jan./mar. 2012.
18. SILVA, D.J. et al. Eficiência de um resíduo de mineração como fonte de potássio em cultivos sequenciais de soja, milho e melão. In: II Congresso Brasileiro de Rochagem, 2, 2013, Poços de Caldas (MG), 2013, Resumos p. 51.
19. DALACORTE, L., KORCHAGIN, J., ABREU, C. T., TONINI, V., MULLER, R., & BORTOLUZZI, E. C. Componentes da acidez do solo e produção de pastagem em campo 42 nativo submetido à aplicação de pó-de-basalto hidrotermalizado. In: XXXV Congresso Brasileiro de Ciência do Solo. Natal-RN. 2015.
20. ALMEIDA JUNIOR, J. J.; SMILJANIC, K. B. A.; MATOS, F. S. A.; DA SILVA, A. R.; ARAÚJO, S. L., & GOMES, J. P. S. Análise das variáveis tecnológicas do milho em função das doses crescentes de condicionador pó de rocha. In: Anais Colóquio Estadual de Pesquisa Multidisciplinar (ISSN-2527-2500) & Congresso Nacional de Pesquisa Multidisciplinar, 2019. Disponível em: < <https://publicacoes.unifimes.edu.br/index.php/coloquio>>, acessado em 29/11/2022.
21. MELO, V. F.; UCHÔA, S. C. P.; DIAS, F. O.; BARBOSA, G. F. Doses de basalto moído nas propriedades químicas de um Latossolo Amarelo distrófico da savana de Roraima. *Acta Amazonica*, Manaus, v. 42, n. 4, p. 471-476, 2012. Disponível em Acessado em: 29 de novembro de 2022.

**Kalebe K. I. Nagatani¹,
Mouzarty S. Loreno¹,
Rafael B. Ferreira¹, Sabrina
D. Oliveira², Carlos E. B.
Barbosa¹**

¹ Faculdade Metropolitana de Anápolis - Av. Fernando Costa, nº 49 - Vila Jaiara St. Norte, Anápolis - GO, Brasil.

² Universidade Estadual de Goiás - Br 153 Quadra Área Km 99 Zona Rural, Anápolis - GO, Brasil.

*E-mail: carloskun.ce@gmail.com

Prospectando Estratégias para Impulsionar o Setor Produtivo Privado de Anápolis: Sinergia entre Academia e Indústria

Introdução

O crescimento do PIB da Cidade de Anápolis vem desacelerando, relativamente, nestas últimas décadas quando comparado com o Produto Interno Bruto (PIB) de outros municípios. Estudos sobre as projeções e evoluções do PIB dos municípios de Goiás mostram que Anápolis passará de segundo PIB municipal goiano para a quarta posição nas próximas duas décadas, caso se mantenham os padrões de crescimento atual, como apresentado nos gráficos das Figuras 1 e 2.

Importante ainda destacar que a Reforma Tributária em curso, cujo texto já foi aprovado na Câmara dos Deputados e está em análise pelo Senado Federal, contém, entre outras, previsão do fim dos benefícios fiscais, de qualquer natureza, inclusive financeira, de forma gradual, mas com data limite em 2032. Consequentemente, a partir de 2032 não restariam ativos quaisquer benefícios já concedidos pelo Governo de Goiás para empresas se instalarem em seu território.

Sabe-se que boa parte das indústrias que compõem o Distrito Agroindustrial de Anápolis (DAIA) ali se instalaram em função dos arrojados programas de benefícios fiscais goianos, desde a década de 1990, a se destacar os programas (1) *Fomentar*, (2) *Produzir* e (3) *PróGoiás*. É de se imaginar que se não existirem outras vantagens comparativas para as indústrias que se encontram no Estado, e principalmente em Anápolis, muito dependente da atividade econômica do DAIA, que estas empresas se mobilizarão para outros Estados de logística mais barata e mão-de-obra mais qualificada.

Soma-se a isso o fato de que a nova tributação sobre bens e serviços, no formato de um IVA, será calculada com base no destino, ou seja, recolhida aos cofres da UF onde ocorreu o consumo e não no local de sua produção. Isso vai gerar grande perda de arrecadação pelo Estado, e

também pelo município, que hoje fica com 25% do Imposto sobre Circulação de Mercadorias e Serviços (ICMS) gerado no Estado, a maior parte disso proporcional ao valor agregado na localidade. Logo, também a prefeitura de Anápolis terá pouca condição de fazer pesados investimentos, pois sua capacidade financeira deve ser impactada significativamente. Isso nos leva à necessidade de outros diferenciais competitivos na cidade, e entre estes diferenciais destacamos: cadeia de prestadores de serviços de alto nível, mão-de-obra qualificada, conexão ativa entre *Academia e Setor Produtivo*, desenvolvimento tecnológico, entre outros. Dentro deste contexto, surge a necessidade de se dialogar com os principais atores da indústria e do comércio local a fim de identificar gargalos tecnológicos e de se pensar estratégias para suprir estas demandas com base entre a sinergia da academia com o setor produtivo de Anápolis. Este contato passa a ser uma oportunidade única para catalogar demandas e propor instrumentos alicerçados em ciência, tecnologia e inovação com a potencialidade de serem aplicadas para impulsionar o crescimento e a competitividade do setor produtivo Goiano.

Um ambiente que trate desses assuntos e promova sinergia entre a academia de ciências e o setor produtivo tem a capacidade para promover um papel crucial no desenvolvimento socioeconômico e tecnológico de uma nação. Essa iniciativa permitirá criar um espaço de diálogo, colaboração e intercâmbio de conhecimentos entre essas duas esferas, buscando benefícios mútuos e avanços significativos em diversas áreas do conhecimento. Além disso, esse espaço colaborativo também proporciona uma oportunidade valiosa para que o setor produtivo compartilhe suas necessidades, desafios e demandas, permitindo que a academia alinhe várias de suas linhas de pesquisas e inovações para atender às demandas do mercado.

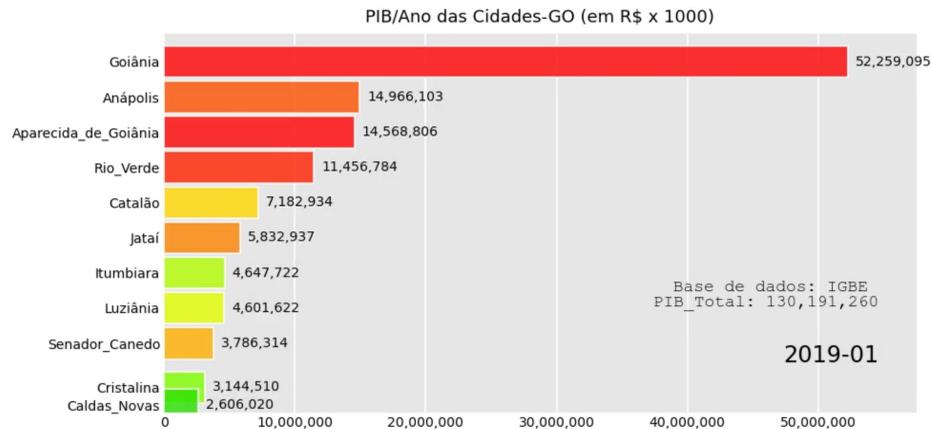


Figura 1. Projeção dos maiores PIB dos municípios de Goiás indicando Anápolis na segunda posição.

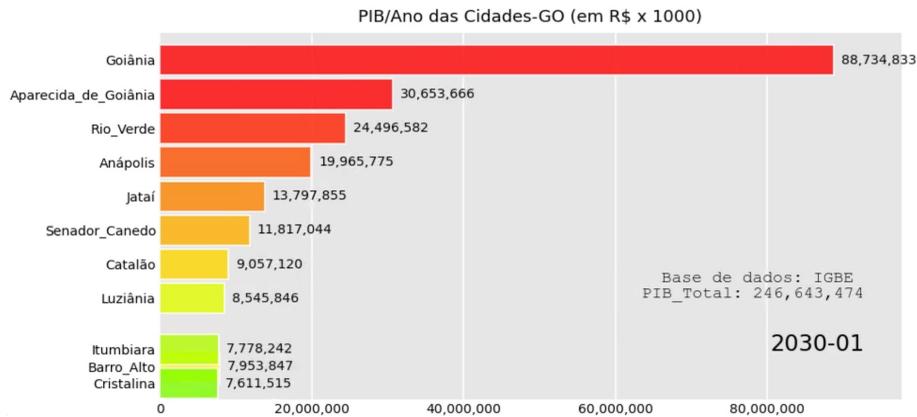


Figura 2. Evolução dos maiores PIB dos municípios de Goiás indicando Anápolis na quarta posição caso se mantenham os padrões de crescimento atual. Dados simulados a partir de ajuste de um modelo baseado em leis de potência temporal.

Entre os principais alvos que podem levar a sinergia entre a academia e o setor produtivo, destacam-se:

- **Indústria 4.0:** Inserção do Setor Produtivo de Anápolis e Região nas novas tecnologias e gestão na visão da Indústria 4.0.
- **Troca de Conhecimento:** Facilitar a troca bidirecional de conhecimento técnico e científico entre acadêmicos e profissionais da indústria, incentivando o aprendizado contínuo e a disseminação de descobertas relevantes.

- **Inovação Tecnológica:** Fomentar a pesquisa aplicada e o desenvolvimento de tecnologias inovadoras, com foco em soluções práticas para desafios da indústria e da sociedade em geral.
- **Formação de pessoal especializado:** Formar técnicos por demanda ou por formação continuada.
- **Transferência de Tecnologia:** Promover a transferência de tecnologias, patentes e conhecimentos gerados nas instituições de P&D para o setor produtivo, acelerando a incorporação de inovações no mercado.

- **Colaboração em Projetos:** Estimular a colaboração em projetos de pesquisa conjuntos, envolvendo acadêmicos e empresas, para abordar questões complexas e multifacetadas.
- **Desenvolvimento de Talentos:** Contribuir para a formação de profissionais altamente qualificados, capazes de atuar tanto no meio acadêmico quanto na indústria, fortalecendo a sinergia entre esses ambientes.
- **Políticas Públicas e Regulamentação:** Contribuir para o desenvolvimento de políticas públicas baseadas em evidências científicas e tecnológicas, visando o crescimento econômico sustentável e a melhoria da qualidade de vida da sociedade.
- **Competitividade e Sustentabilidade:** Buscar soluções para aumentar a competitividade da indústria nacional, promovendo práticas sustentáveis e responsáveis.
- **Empreendedorismo e Startups:** Estimular o empreendedorismo científico e a criação de startups a partir de pesquisas e tecnologias desenvolvidas na academia.

O objetivo principal dessa ágora tecnológica é criar um espaço produtivo entre o setor produtivo e as instituições de P&D buscando benefícios mútuos e avanços significativos nas Áreas do Conhecimento correlatas à indústria de Anápolis e região.

Ao alcançar esses objetivos, um fórum de interação entre a academia de ciências e o setor produtivo pode catalisar avanços significativos na sociedade, promovendo o desenvolvimento econômico e tecnológico, o bem-estar da população e o progresso sustentável como um todo. O diálogo amplo e colaborativo entre essas duas esferas é essencial para enfrentar desafios complexos e alcançar resultados inovadores que beneficiem a todos os envolvidos.

Valter H. Carvalho-Silva^{1*}
Hamilton B. Napolitano¹
Bruno M. D'Abadia² & Kleber
C. Mundim³

¹ Universidade Estadual de Goiás - Br 153 Quadra Área Km 99 Zona Rural, Anápolis - GO, Brasil.

² Câmara dos Deputados Federais - Palácio do Congresso Nacional, Câmara dos Deputados, Praça dos Três Poderes, Brasília - DF, Brasil.

³ Universidade de Brasília - Brasília - GO, Brasil.

*E-mail: fatioleg@ueg.br

Instruções para Envio de Artigos para a Revista Processos Químicos

Prezado(a) autor(a),

Para que seu artigo possa entrar em nosso processo de avaliação, visando à possível publicação na revista Processos Químicos, o texto deverá satisfazer às seguintes condições:

- ▶ Utilizar somente o editor Microsoft Word, numerando todas as páginas;
 - ▶ Conter, no máximo, 40 laudas, incluindo Figuras, Tabelas, Esquemas etc.;
 - ▶ Conter Resumo e *Abstract*, ambos com até 100 palavras;
 - ▶ Conter Palavras-chave e *Keywords*, ambos com até 3 palavras;
 - ▶ Título com, no máximo, 20 palavras;
 - ▶ Titulação do autor (créditos). Dados pessoais do autor: endereço, telefone, e-mail;
- ▶ As figuras, tabelas, esquemas etc. devem ser colocados após as referências e devidamente identificados. Se escaneados, devem ser em alta resolução (800 dpi/ bitmap para traços) com extensão TIF ou JPEG. As fotos ou desenhos com cor (300 dpi/grayscale) devem ser enviados com extensão tif/jpg, para não termos problemas ao aplicá-las no padrão da Revista. Outras extensões possíveis: CDR, EPS ou CDX. No caso particular de esquemas contendo estruturas químicas, estas deverão ter sempre a mesma dimensão, para que possam ser reduzidas uniformemente. Considerar que as figuras deverão ter largura máxima de uma coluna (8,5 cm) ou, excepcionalmente, de 2 colunas (17,5 cm).
- ▶ As figuras (gráficos, esquemas, etc.) deverão ter qualidade gráfica adequada (usar somente fundo branco).

► A primeira página deverá conter o título do trabalho, nome e endereço dos autores (para a revista, a menor unidade é o departamento). Havendo autores com diferentes endereços, estes deverão se seguir imediatamente ao nome de cada autor. Os autores devem ser agrupados por endereço. Indicar com asterisco(*) o autor para correspondência, colocando seu e-mail no rodapé desta página (um só e-mail). A segunda página deverá conter o título, o resumo e o *abstract* do trabalho;

► As referências bibliográficas deverão ser numeradas e todas citadas ao final do artigo. Será utilizada a abreviatura da revista como definida no *Chemical Abstracts Service Source Index* (ver <http://www.cas.org/sent.html>). Caso a abreviatura autorizada de uma determinada revista não possa ser localizada e não for óbvio como o título deve ser abreviado, deve-se citar o título completo. Exemplos de citações:

1. Varma, R. S.; Singh, A. P.; J. Indian Chem. Soc. **1990**, 67, 518.
2. Provstyanoi, M. V.; Logachev, E. V.; Kochergin, P. M.; Beilis, Y. I.; Izv. Vyssh. Uchebn. Zadev.; Khim. Khim. Tekhnol. **1976**, 19, 708.
3. Lemos, T. L. G.; Andrade, C. H. S.; Guimarães, A. M.; Wolter-Filho, W.; Braz-Filho, R.; J. Braz. Chem. Soc. **1996**, 7, 123;
4. Ângelo, A. C. D.; de Souza, A.; Morgon, N. H.; Sambrano, J. R.; Quim. Nova **2001**, 24, 473.
5. Regitz, M. Em Multiple Bonds and Low Coordination in Phosphorus Chemistry; Regitz, M.; Scherer, O. J., eds.; Georg Thieme Verlag: Stuttgart, **1990**, cap. 2.
6. Cotton, F.A.; Wilkinson, G.; Advanced Inorganic Chemistry, 5th ed., Wiley: New York, **1988**.

► Espaço duplo entre linhas;

► Fonte: *Times New Roman* 12;

► A linguagem empregada deve ser atual. Isso implica a não utilização de termos, tais como: destarte, outrossim, descrever-se-á.

► O texto deve apresentar discurso impessoal, ou seja, expressões, tais como: constatamos, verificamos, utilizamos devem ser substituídas por constatou-se, foi verificado, utilizou-se.

► Enviar uma cópia do artigo, acompanhada de carta de encaminhamento à Editoria da Revista Processos Químicos, por meio do site www.rpqsenai.org.br. Mais informações podem ser obtidas mediante endereço eletrônico: revistapq.senai@fieg.com.br.

LABORATÓRIO DE POLIMORFISMO MOLECULAR



COMO PODEMOS TE AJUDAR?

Materiais Sólidos podem apresentar diferentes arranjos arquitetônicos de suas estruturas cristalinas (polimorfismo molecular). Este fenômeno, conhecido como polimorfismo, pode impactar a Identificação e Quantificação de Fases e Pureza do Material de Partida.

Algumas técnicas de caracterização no estado sólido são frequentemente empregadas para identificação e elucidação estrutural em sólidos farmacêuticos, entre elas se destaca a Difractometria dos raios X, com ampla aplicação nos seguintes controles: Cimento, Calcário, Gesso, Cal Livre, Minerais, entre outros.

A implantação do Controle de Polimorfismo Molecular visa atender à demanda de controle estrutural (polimorfismo) de amostras sólidas do setor produtivo de mineração (entre outros).

QUEM SOMOS?

A Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange é uma das mais importantes instituições tecnológicas de Anápolis, com histórico compromisso com a difusão de conhecimento aplicado ao desenvolvimento industrial. Ao longo dos anos, tem apoiado as indústrias por meio da formação de recursos humanos e da prestação de serviços de Tecnologia e Inovação (assistência ao setor produtivo, serviços de laboratório, pesquisa aplicada e informação tecnológica, entre outros).

A implantação do Controle de Polimorfismo Molecular visa atender a demanda de controle estrutural (polimorfismo) de amostras sólidas dos setores produtivos, em que se destacam as indústrias do setor Minerquímico.



NOSSOS SERVIÇOS

- Realizar análises de difração dos raios-X de materiais sólidos do setor produtivo de mineração
- Desenvolvimento tecnológico no controle estrutural junto ao setor produtivo

Faculdade de Tecnologia SENAI Roberto Mange
polimorfismo.senai@sistemafieg.org.br
(62) 3902-6227 | (62) 9 9866-1638

SENAI
PELO FUTURO DO TRABALHO

FIEG
PELO FUTURO DA INDÚSTRIA