

CALCULAB: APLICATIVO MOBILE PARA LABORATÓRIO DE ANÁLISES QUÍMICAS INSTRUMENTAIS

Carla Batista Penna¹

Fausto Gonçalves Cintra²

Resumo

O presente trabalho tem como objetivo apresentar o desenvolvimento de um aplicativo, que facilita a obtenção de resultados através de representação gráfica para os profissionais e estudantes que utilizam em laboratório de análises químicas o equipamento espectrofotômetro de UV/visível. Devido a uma experiência pessoal e de colegas, foi possível identificar que, ao planejar e executar uma análise, há grande desperdício de tempo entre calcular, validar e padronizar os resultados obtidos, a fim de reconhecer as fontes de erros. Desse modo, neste trabalho foram apresentados conceitos e ferramentas que facilitam a validação do método analítico. Foi revelado, também, o referencial teórico que permite entender a análise instrumental química espectrofotométrica e as tecnologias que possibilitaram o desenvolvimento do aplicativo: o *framework* Flutter, o banco de dados MongoDB e o interpretador de JavaScript: Node.js. O aplicativo resultante permite armazenar os dados dos padrões e das amostras de forma centralizada, viabilizando o cálculo da análise de forma eficiente e a visualização dos resultados em gráficos facilmente interpretáveis. O trabalho integrou Tecnologia da Informação e Química, proporcionando uma redução do tempo gasto com os cálculos estatísticos.

Palavras-chave: Análise e Desenvolvimento de Sistemas. Análises Químicas. Espectrofotometria. Tecnologia da Informação.

Abstract

This paper aims at presenting the development of an application, which facilitates obtaining results through graphical representation for professionals and students who use the equipment UV/visible Spectrophotometer in a chemical analysis laboratory. Due to personal and colleagues' experience, it was possible to identify that while planning and executing an analysis, there is such a waste of time when calculating, validating and standardizing the obtained results in order to recognize the sources of errors. Thus, in this study, concepts and tools that facilitate the validation of the analytical method were presented. It was also shown the theoretical framework that allows the understanding of this instrumental chemical analysis, the technologies that enabled the development of the application: the Flutter framework, MongoDB database and the JavaScript interpreter: Node.js. The resulting application allows a centralized storage of standards and sample data, making it possible to calculate analysis

¹ Graduanda em Análise e Desenvolvimento de Sistemas pela Faculdade de Tecnologia de Franca "Dr. Thomaz Novelino" (Fatec Franca). Endereço eletrônico: carla.penna@fatec.sp.gov.br

² Mestre Interdisciplinar em Desenvolvimento Regional pelo Centro Universitário Municipal de Franca (Uni-FACEF). Docente da Faculdade de Tecnologia de Franca "Dr. Thomaz Novelino" (Fatec Franca). Endereço eletrônico: fausto.cintra@fatec.sp.gov.br

efficiently and view results in easily interpretable charts. The paper integrated Information Technology and Chemistry, providing a reduction in the time spent on statistical calculations.

Keywords: *Systems Analysis and Development. Chemical Analysis. Information Spectrophotometry. Information Technology.*

1 Introdução

As técnicas analíticas instrumentais que utilizam o espectrofotômetro em laboratórios são muito comuns. O espectrofotômetro é um importante equipamento empregado em análises químicas e, por sua versatilidade, é amplamente utilizado em diversas áreas, como, por exemplo, as indústrias químicas, farmacêuticas, laboratórios bioquímicos, de controle de qualidade para análises qualitativas e quantitativas, dentre outras aplicações (HIRANO et al., 2001).

Existem vários tipos de análises espectrofotométricas e cada uma delas é empregada em usos específicos. A espectrofotometria de ultravioleta e visível é reconhecida pelas vantagens relacionadas ao seu uso, em função da sua robustez, baixo custo operacional, grande número de aplicações, confiabilidade nos resultados e fácil manuseio (ALVES et al., 2010).

A espectrofotometria UV/visível faz uso das medidas de absorção de determinadas espécies químicas para sua caracterização e quantificação. Baseada na Lei de Lambert-Beer, possibilita a comparação da radiação absorvida ou transmitida por uma solução que apresente uma quantidade de soluto desconhecida, e uma quantidade conhecida da mesma substância denominada padrão (SKOOG et al., 2006).

Para garantir que a espectrofotometria UV/visível é apropriada para a finalidade a que se destina, é necessário validar o método analítico de acordo com parâmetros de validação. É preciso garantir que a metodologia atenda às exigências das aplicações analíticas e que assegure a confiabilidade dos resultados mediante alguns parâmetros experimentais, como linearidade, precisão, exatidão e robustez adequados ao método (BRITO et al., 2003).

O método, para ser considerado válido, requer que os parâmetros analisados se encontrem em conformidade com os parâmetros experimentais. O presente trabalho tem como objetivo apresentar o desenvolvimento de um aplicativo que facilite

a análise dos dados obtidos por parte do usuário, auxiliando a geração de resultados com mais facilidade, praticidade e rapidez.

Dessa forma, o aplicativo proposto neste trabalho visa diminuir o tempo gasto com essa atividade, facilitando a organização das informações dos padrões e amostras. Para garantir que os parâmetros descritos e analisados sejam aceitos, realizará cálculos estatísticos ilustrando, por meio de gráfico de dispersão, a resposta da concentração em relação à absorvância da amostra.

Ademais, este artigo traz informações sobre uma análise química instrumental específica, ressaltando a importância dos cálculos estatísticos relacionados a ela. Também expõe como uma solução *mobile* facilitará a geração de resultados, apresentando algumas telas do aplicativo desenvolvido com a tecnologia multiplataforma Flutter.

2 Referencial teórico

Não raro, muitos profissionais de laboratório passam grande parte do seu tempo de trabalho fazendo cálculos após finalizar uma análise química. Os cálculos são demorados, pois a fim de garantir dados válidos, as medidas são repetidas diversas vezes durante a análise. Assim, o tratamento dos dados obtidos é fundamental para poder garantir que sejam consistentes, confiáveis, exatos e interpretáveis.

A descrição e interpretação de dados é parte da estatística. Para a extração de informações dos resultados de uma análise química, é preciso tomar uma decisão sobre quais variáveis são importantes. Geralmente, perante essa necessidade, faz-se mister a elaboração de gráficos com base em diversas medidas dos cálculos das amostras e padrões.

2.1 Análises químicas

Os profissionais de laboratório que realizam análises químicas, utilizam conjuntos de técnicas visam identificar quantitativamente ou qualitativamente espécies químicas. Existem muitas definições para o termo “análises químicas”. Talvez o mais razoável seja definir como a aplicação de um processo ou uma série de processos para identificar ou quantificar uma substância, ou os componentes de uma

solução ou mistura ou, ainda, para a estrutura de um componente químico (VOGEL, 2002).

Para a escolha de um método de análise, alguns fatores importantes devem ser levados em conta, tais como: saber se a análise inclui a natureza da informação procurada, a quantidade de amostra disponível, a percentagem do constituinte a ser determinado e a utilização dos resultados da análise. Além de fazer a escolha pela precisão que se deseja do método, custos envolvidos na análise e tempo disponível também são relevantes (VOGEL, 2002).

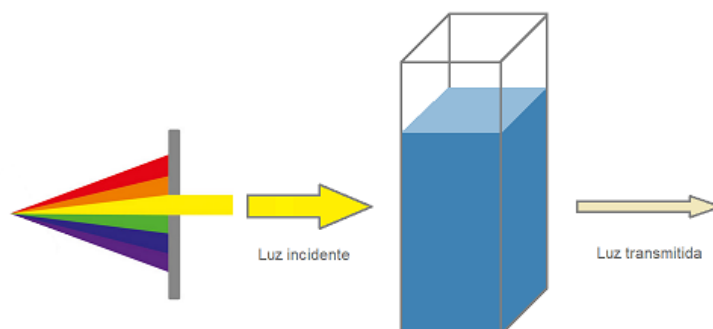
Nesse contexto, os chamados métodos instrumentais têm a vantagem de reduzir os erros por fator humano nas análises, mesmo que haja um custo elevado com o equipamento. Assim, o crescimento dos métodos instrumentais de análise modernos tem ocorrido paralelamente ao desenvolvimento das indústrias eletrônicas e de computadores (HOLLER et al., 2009).

2.1.1 Espectrofotometria de Absorção UV/visível

A espectrofotometria de absorção no ultravioleta e visível é uma técnica de análise instrumental química que faz uso das medidas de absorção da radiação eletromagnética nas regiões visível e ultravioleta do espectro. A região ultravioleta do espectro é geralmente considerada na faixa de 200 a 400 nanômetros, e a região do visível entre 400 a 800 nanômetros. Por cada espécie química possuir uma identificação espectrofotométrica, com essa técnica é possível caracterizar e quantificar uma amostra (HARRIS, 2005).

O espectrofotômetro de UV/visível é um equipamento que faz passar um feixe de luz através de uma solução contendo determinada espécie química, medindo a intensidade de luz que foi absorvida por essa solução (HARRIS, 2005). A Figura 1 mostra o comprimento de onda selecionado é dirigido para a solução contida em uma cubeta, onde parte da luz é absorvida e parte é transmitida.

Figura 1 - Direcionamento de comprimento de onda através de solução.



Fonte: a autora.

A absorvância é a propriedade que representa a fração de luz absorvida pela amostra no equipamento e a transmitância é a fração de luz que atravessa a amostra. Ambas são descritas pela Lei de Lambert-Beer, que relaciona a intensidade de luz incidente e a intensidade de luz transmitida que atravessa a amostra (HOLLER et al., 2009).

Essa análise instrumental é bastante útil quando se buscam dados quantitativos, ou seja, que visam a identificação da concentração de uma amostra, em razão da correspondência entre os valores de absorvância e de concentração. Uma série de soluções-padrão da substância a ser medida é preparada em concentrações conhecidas e lidas no equipamento em um comprimento de onda fixo. Usando a leitura da absorvância da amostra, obtemos sua concentração.

2.2 Tratamento dos dados gerados

Os dados são o resultado de um processo de análise. O tratamento dos dados obtidos em uma análise instrumental é fundamental para a validação do método analítico. O desenvolvimento de um método analítico, a adaptação ou implementação de método conhecido envolvem um processo de avaliação que determine sua eficiência na rotina do laboratório. Para que determinado método seja considerado validado, é importante que suas características estejam de acordo com os pré-requisitos estabelecidos (BRITO et al., 2003).

Um passo bastante importante e imprescindível é a escolha dos parâmetros a serem analisados, a qual está diretamente ligada ao tipo de ensaio, ou seja, se tem caráter quantitativo ou qualitativo, e, principalmente, se está de acordo com os requisitos determinados pelo órgão regulador (INMETRO, 2016).

Na análise de espectrofotometria de absorção UV/visível, para determinar a linearidade do método, é necessário construir uma curva analítica com os dados de uma solução padrão, para, a partir disso, calcular a concentração de analito em determinada amostra através de um gráfico analítico.

O gráfico analítico deve apresentar os dados estatísticos de intersecção, da equação da regressão linear, o coeficiente de correlação e a concentração estimada das soluções padrão. Assim, torna-se necessário o uso de um número suficiente de soluções padrão para definir adequadamente a relação entre a concentração e a resposta do equipamento. O gráfico analítico pode ser construído usando-se, no mínimo, cinco valores de concentração (BRITO et al., 2003).

Para avaliar a proximidade entre várias medidas efetuadas na mesma solução é fundamental precisão no processo analítico, para garantir que, a partir do gráfico analítico, os resultados sejam confiáveis e satisfatoriamente interpretados. A repetitividade de medidas expressa a precisão nas mesmas condições de operação (equipamento, analista, reagentes, dia e mesmas condições ambientais) em pequeno espaço de tempo. Usualmente, é expressa como o desvio-padrão, a variância ou o coeficiente de variação de diversas medidas (BRITO et al., 2003).

2.2.1 Cálculos

As medidas da tendência central são indicadores que permitem uma primeira ideia do modo como se distribuem os dados, informando sobre o valor, ou valores, da variável aleatória. A média aritmética é uma medida de tendência central, ela se dá pelo quociente entre a soma de todos os valores observados e o número total de observações (BUSSAB; MORETTIN, 2013).

As medidas de dispersão traduzem a variação de um conjunto de dados em torno da média aritmética, ou seja, da maior ou menor variabilidade dos resultados obtidos. Permitem identificar até que ponto os resultados se concentram ou não ao redor da tendência central de um conjunto de observações (BUSSAB; MORETTIN, 2013). O desvio padrão (σ) é uma medida de dispersão, sendo capaz de identificar o erro em um conjunto de dados, sendo parâmetro para substituir um dos valores coletados pela média aritmética. Sua fórmula matemática é:

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 F_i}{n-1}}$$

Onde n é o número de elementos, x é a variável pesquisada e F é a frequência simples. Já os intervalos de confiança são usados para indicar a confiabilidade de uma estimativa. É importante para indicar a margem de incerteza (ou imprecisão) frente a um cálculo efetuado. Quanto mais estreito for o intervalo de confiança, maior é a probabilidade de a porcentagem da população de estudo representar o número real da população de origem dando maior certeza quanto ao resultado do objeto de estudo (BUSSAB; MORETTIN, 2013).

O coeficiente de correlação linear e a regressão linear são duas medidas estatísticas estreitamente relacionadas, que visam estimar uma relação que possa existir entre duas variáveis na população. A correlação resume o grau de relacionamento entre duas variáveis e a regressão tem como resultado uma equação matemática que descreve o relacionamento entre variáveis (BUSSAB; MORETTIN, 2013). O coeficiente de correlação de Pearson mede o grau da correlação linear entre duas variáveis quantitativas, onde o valor de r é um índice adimensional com valores situados entre -1,0 e 1,0. Sua equação é:

$$r = \frac{n \cdot \sum x_i y_i - (\sum x_i) \cdot (\sum y_i)}{\sqrt{[n \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2] \cdot [n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2]}}$$

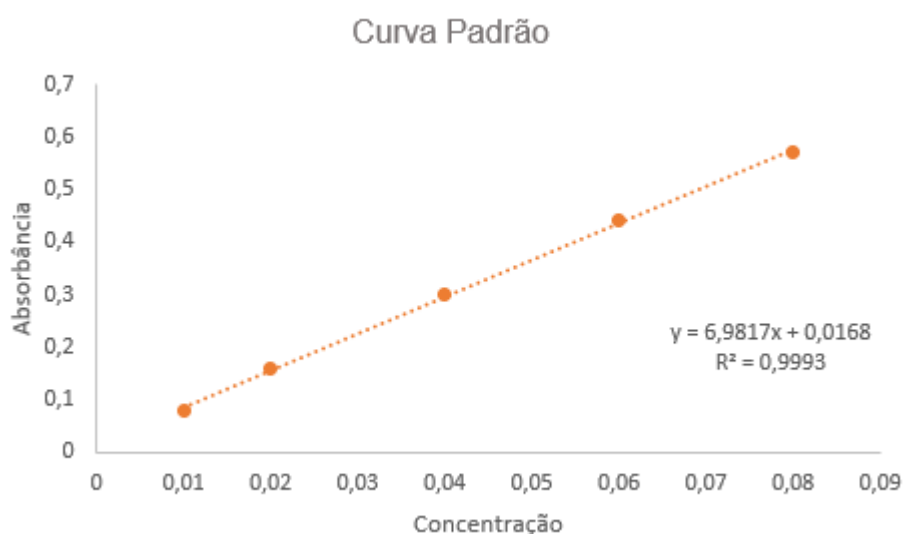
A regressão linear é uma equação para se estimar um valor esperado de uma variável dependente, dados os valores das variáveis independentes. Essa relação representa-se por meio de um modelo matemático. A equação de relação linear simples é definida pela equação da reta:

$$y = ax + b$$

Onde y é a variável dependente, resposta medida, e x corresponde à variável independente. Para investigar a relação entre duas variáveis, x e y , podemos representar os valores das variáveis em um gráfico de dispersão. Nesse contexto, a curva-padrão é utilizada para determinar quantitativamente uma propriedade de uma amostra desconhecida a partir de amostras com propriedades conhecidas. A

curva-padrão corresponde à relação gráfica entre os valores de absorvância e os valores de concentração (BRITO et al., 2003). A Figura 2 mostra um exemplo de uma curva-padrão de uma amostra em um certo comprimento de onda. A inclinação da reta corresponde à absorvância do analito. Assim o ajuste linear aos pontos experimentais nesse tipo de gráfico nos dá diretamente o valor da absorvância molar no comprimento de onda estudado.

Figura 2 – Exemplo de curva-padrão de absorvância *versus* concentração.



Fonte: a autora.

Pode-se observar que, com o aumento da concentração das soluções, a absorvância aumenta proporcionalmente, conforme é descrito na Lei de Lambert-Beer, e segundo a expressão:

$$Abs = \alpha Cl$$

Onde α é a absorvância molar da substância, l é a distância que a luz atravessa pelo corpo e C é a concentração de substância absorvente no meio. A equação da reta demonstra a correlação entre as variáveis absorvância e concentração, uma vez que o valor de coeficiente de determinação (R^2) se aproxima de 1.

Como visto até aqui, os cálculos estatísticos realizados para a validação do método analítico necessitam de uso de ferramentas de estatística e análise de dados. Face a isso, propõe-se o desenvolvimento de uma aplicação especializada para a

resolução deste problema, tirando proveito das últimas tecnologias disponíveis para tornar os dados e resultados mais acessíveis aos envolvidos.

2.3 Tecnologias

Ao longo dos últimos anos, a tecnologia utilizada nos dispositivos móveis evoluiu significativamente, com funcionalidades e sistemas operacionais cada vez mais robustos, permitindo o desenvolvimento de muitas aplicações em linguagens de programação diversas. Em razão dos muitos modos de se desenvolver um aplicativo, os *frameworks* que geram códigos multiplataforma de desenvolvimento têm se destacado por agilizar o processo de desenvolvimento e diminuir custos de manutenção. Neste capítulo, serão apresentados os conceitos relacionados às escolhas tecnológicas utilizadas para o desenvolvimento do aplicativo apresentado neste trabalho.

2.3.1 Flutter

O Flutter é um *framework* de código aberto utilizado para criação de aplicativos de alta performance e fidelidade para as plataformas iOS e Android a partir de uma única base de código. Ele foi criado pela Google e utiliza Dart como linguagem de programação. Seu fluxo de desenvolvimento é orientado ao *design*, e os *widgets* são os blocos básicos da interface de usuário de um aplicativo criado com Flutter (FLUTTER, 2020).

Existem *widgets* para definir elementos estruturais, de estilo e de *layouts*, com *design* específico para as plataformas Android e iOS. O Flutter foi projetado para facilitar a criação de novos *widgets* e a personalização dos existentes. Por não utilizar os *widgets* fornecidos com o dispositivo e operar seu próprio mecanismo de renderização de alto desempenho para desenhá-los tornou-se diferente da maioria das outras opções para criação aplicativos móveis (FLUTTER, 2020).

2.3.2 Node.js

O Node.js é uma plataforma de desenvolvimento de aplicações *web*, baseado na *engine* V8 do Chrome, permitindo rodar código em Javascript no lado do servidor com o propósito de acelerar o desempenho de uma aplicação. É de código aberto e tem por característica ser orientado a eventos, não-bloqueante e bastante leve sem perder eficiência. Ele é portátil pelas plataformas Windows, Mac e Linux, assim

possibilitando a elaboração de diferentes aplicações *web* apenas utilizando um código em Javascript (NODE.JS, 2020).

Com a linguagem Javascript, o Node.js não necessita trabalhar com a sincronização de *threads*. O Node ser *single thread* é um diferencial no desenvolvimento, os chamados fluxos de execução simplificam o processo de demanda, evitando a interrupção (NODE.JS, 2020). Existe um enorme ecossistema e uma grande variedade de bibliotecas. Além disso, possui um gerenciador de pacotes NPM (*Node Package Manager*) que torna o processo de instalação de novas bibliotecas muito simples e fácil.

2.3.3 MongoDB

O MongoDB é um banco de dados não estruturado e orientado a documentos, projetado para facilitar o desenvolvimento e o dimensionamento. Os dados são armazenados em estruturas JSON (*JavaScript Object Notation*) com esquema dinâmico, possibilitando o armazenamento de registros sem a preocupação com o número de campos, de tipos e valores. O MongoDB também é facilmente integrável com o ambiente Javascript. (MONGODB, 2020).

Todas essas tecnologias apresentadas possuem uma documentação detalhada. Por esse motivo podem ser facilmente integradas, levando em consideração os benefícios e as dificuldades durante o desenvolvimento. Diante disso, essas tecnologias possibilitaram o desenvolvimento de um aplicativo consistente.

3 Material e métodos ou desenvolvimento

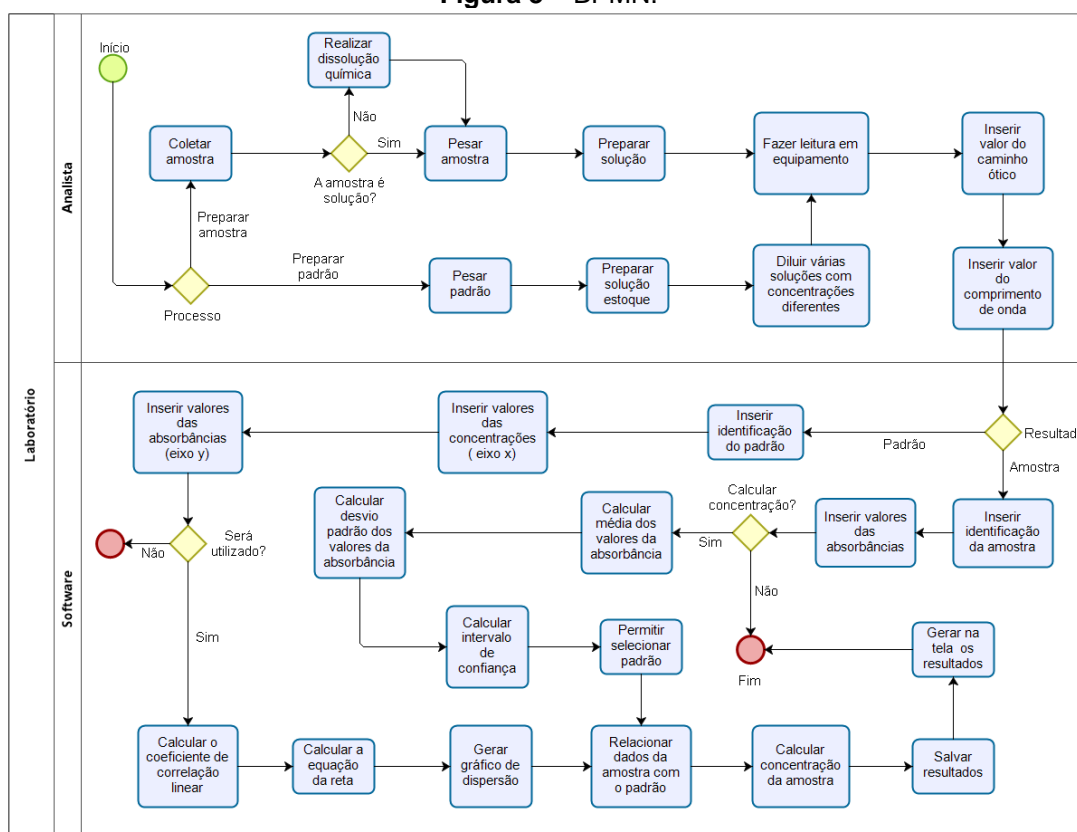
Para o desenvolvimento do aplicativo, foi essencial analisar os requisitos do sistema e as necessidades do usuário. Inicialmente o problema foi identificado a partir de experiência pessoal em trabalhos feitos em laboratório químico de análises instrumentais. Mais adiante, com o intuito de coletar informações preliminares para as especificações de requisitos, foi necessário entrevistar ex-colegas de profissão para que o sistema a ser desenvolvido viesse ao encontro de suas necessidades.

Na especificação de requisitos, foram listados os principais requisitos funcionais e não-funcionais, os quais descreveram o passo a passo de cada funcionalidade, bem como suas devidas restrições. Em virtude disso, a elaboração de

modelos de diagramas, antes de desenvolver o aplicativo, mostrou-se basilar para o entendimento do que foi exposto.

Um dos diagramas utilizados é o BPMN (*Business Process Model and Notation*). Esse diagrama é um conjunto de padrões gráficos que especificam símbolos usados em diagramas e modelos de processos. Ele permite modelar diferentes aspectos de fluxos de processos e fluxos de trabalho. Além da padronização de símbolos, o BPMN busca uniformizar a terminologia e técnica de modelagem (PRESSMAN, 2002). Com a elaboração do BPMN foi possível mapear o processo de uma análise em laboratório, conforme a Figura 3:

Figura 3 – BPMN.

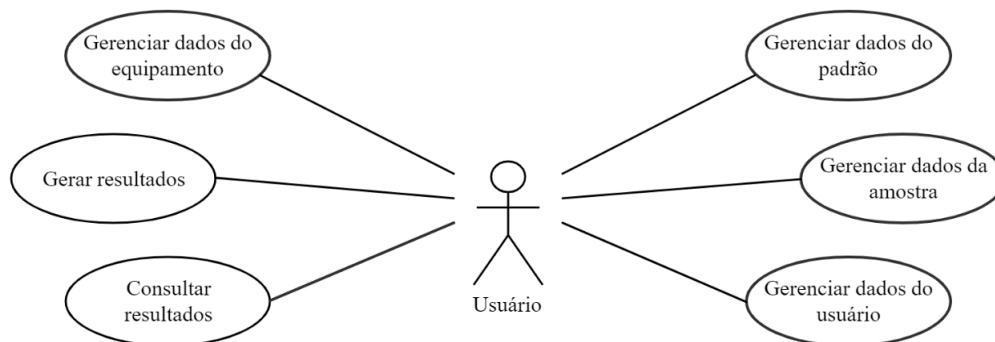


Fonte: a autora.

Os diagramas que auxiliaram o desenvolvimento do aplicativo desenvolvido foram dois, o de casos de uso e de entidade-relacionamento. O aplicativo pode ser dividido em duas estruturas principais: a interface (*front-end*) e a parte por trás da aplicação (*back-end*). Na Linguagem de Modelagem Unificada (UML), o diagrama de casos de uso demonstra e exemplifica as diferentes maneiras de interação entre um usuário e o sistema (PRESSMAN, 2002). A Figura 4 ilustra como a interface do sistema permitirá o usuário cadastrar, editar, excluir e visualizar os dados de usuário,

do padrão, da amostra e do equipamento, podendo também gerar os resultados e depois consultá-los.

Figura 4 - Diagrama de casos de uso.

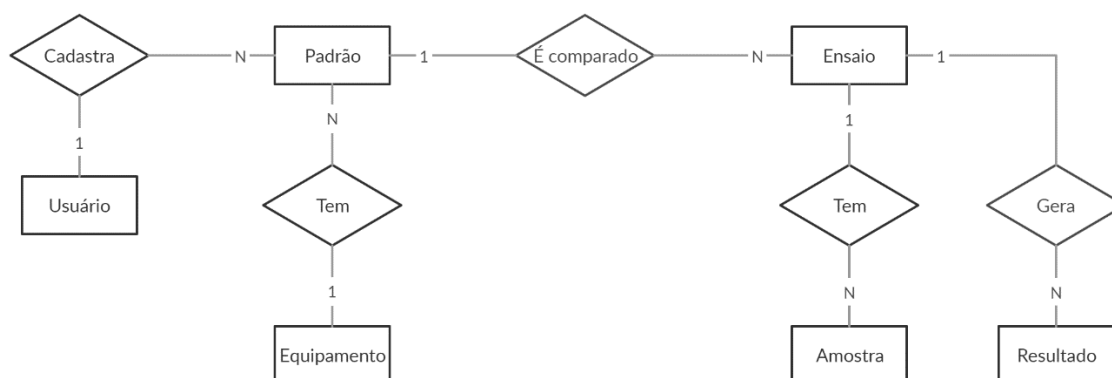


Fonte: a autora.

Um projeto de um banco de dados tem como ponto de partida os requisitos do sistema e as regras de negócio inerentes ao domínio do problema. Com a utilização de ferramentas de projeto ou modelagem, é necessário atender a uma série de critérios de qualidade. A partir da compreensão dos requisitos, o Diagrama Entidade-Relacionamento é elaborado (HEUSER, 2009).

No diagrama, uma entidade representa um fato do mundo real e seus dados são valores de propriedades associadas a esse fato. Já as relações são representações da forma como uma entidade se associa a outras entidades (HEUSER, 2009). O Diagrama Entidade-Relacionamento ilustrado na Figura 5 foi elaborado para o desenvolvimento do banco de dados do aplicativo.

Figura 5 - Diagrama de entidade-relacionamento.



Fonte: a autora.

4 Resultados e discussão

Para o desenvolvimento do aplicativo Calculab foi utilizado o *framework* Flutter. Foram realizadas diversas pesquisas e cursos antes da decisão da adoção dessa tecnologia multiplataforma para o desenvolvimento. Após entender o funcionamento dos *widgets*, que são as estruturas básicas para formar a interface do aplicativo, escrever o código foi muito prático e intuitivo.

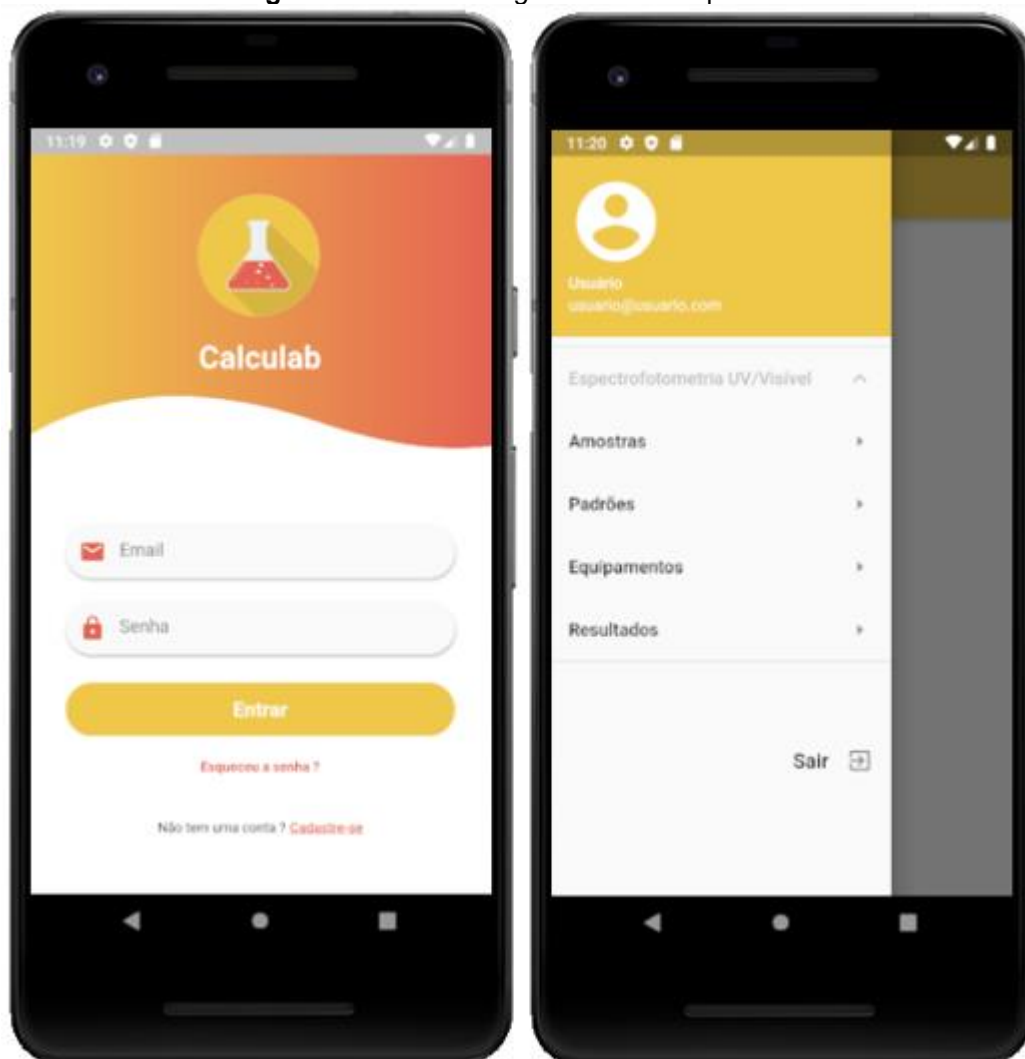
Este capítulo abrange essencialmente o que já está pronto no aplicativo, as funcionalidades que foram pensadas e desenvolvidas. O aplicativo desenvolvido é uma relação direta entre o sistema e o usuário. Em um primeiro momento, o usuário ao fazer o acesso ao sistema, insere e grava os dados. Em seguida, consegue visualizar na tela os resultados calculados pelo sistema.

Serão apresentadas a seguir as imagens de algumas telas do aplicativo. Evidencia-se que a interface é bastante simples, facilitando a utilização por parte do usuário. Após o processo de desenvolvimento da interface, passou-se para a integração com o *back-end*, implementando, com isso, o banco de dados. Nesse processo, diversos desafios foram enfrentados, mas o processo decorreu como planejado e o aplicativo, tendo o aplicativo respondido às expectativas.

4.1 Telas do Aplicativo

A Figura 6 mostra duas telas do sistema: a tela de *login* do aplicativo, à esquerda e, à direita, a tela inicial após o acesso do usuário. Na tela de *login*, o usuário deve informar o e-mail de usuário e senha cadastrados, caso não esteja cadastrado, deverá tocar sobre o *link* onde encontra-se a pergunta “Não tem uma conta? Cadastre-se”. Ao optar por fazer o cadastro, o usuário é direcionado a uma tela simples de cadastro. No entanto, se o usuário já tiver um cadastro e fizer o *login* no aplicativo, ele será direcionado para a tela inicial do sistema.

Figura 6 – Telas de *Login* e Inicial do aplicativo.



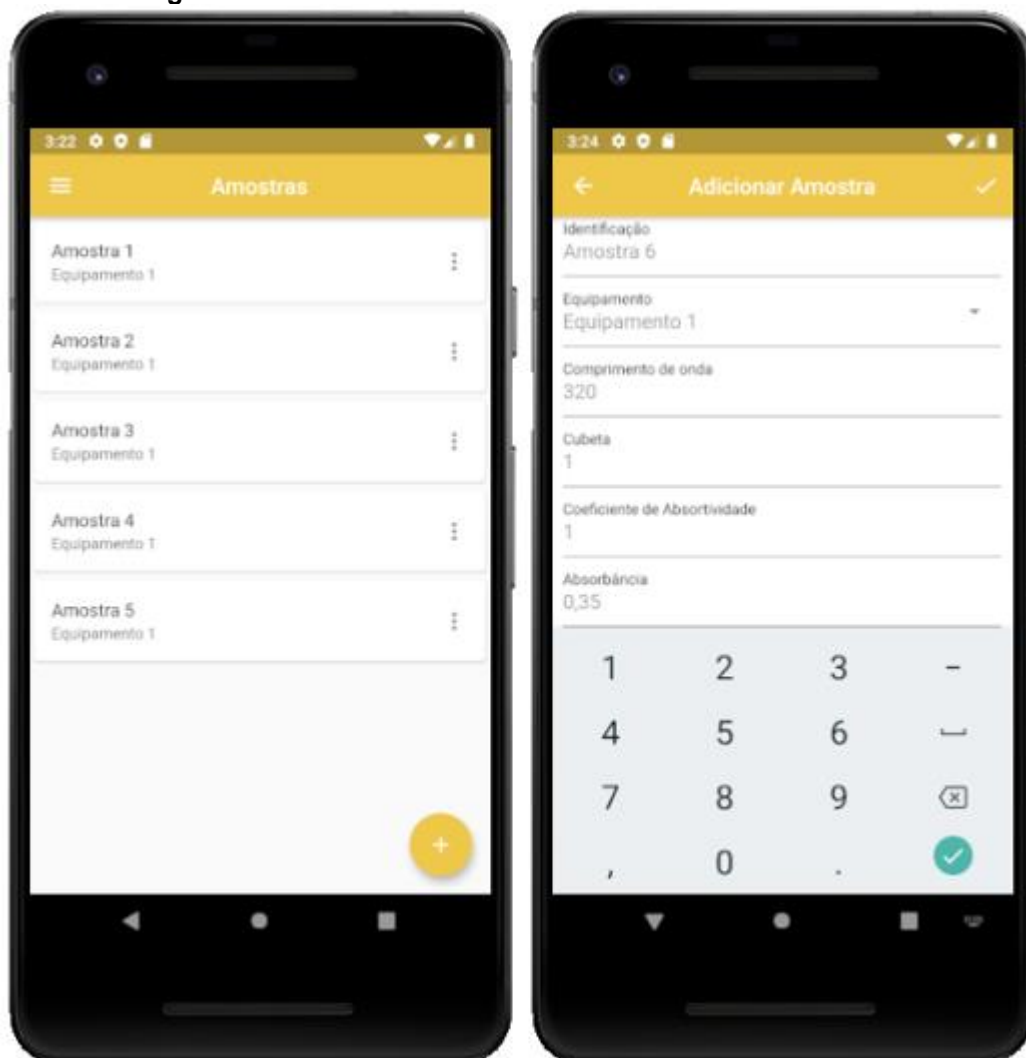
Fonte: a autora.

Na tela inicial do sistema, ao tocar sobre o menu lateral do aplicativo, o usuário pode visualizar suas informações pessoais na parte superior, com seu nome e e-mail. Logo abaixo ao selecionar a opção de análise "Espectrofotometria UV/visível", é expandida uma lista com mais opções para que o usuário acesse as telas de amostras, padrões, equipamento e resultados.

A Figura 7 mostra, à esquerda, a tela de consulta dos cadastros de amostras realizados e, à direita, a tela de cadastro de amostra. No menu lateral do aplicativo, ao se tocar sobre "Amostras", o usuário é direcionado à tela de consulta das amostras que já foram registradas por ele. Ao selecionar algum registro, o usuário pode ver os dados que foram adicionados para determinada amostra. Essa tela contém também um botão flutuante para adicionar um novo registro de amostra, levando o usuário à tela seguinte, "Adicionar Amostra", onde poderá inserir os dados relacionados aos

resultados obtidos na análise. As telas de padrão e equipamento, que também aparecem listadas no menu lateral, seguem esse mesmo padrão.

Figura 7 – Telas de consulta de amostra e cadastro de amostra.



Fonte: a autora.

A Figura 8 exibe a tela onde o usuário irá escolher qual resultado deseja obter. Ele seleciona uma amostra e um padrão cadastrados anteriormente e toca sobre botão de geração de resultado. O sistema mostrará na tela o gráfico da curva-padrão, gerando a equação da reta e o coeficiente de determinação a partir dos dados do padrão escolhido. Mostra, também, as informações da amostra escolhida. Caso o usuário insira mais de um valor de absorbância, a média dos valores será calculada, trazendo informações de desvio padrão e intervalo de confiança. Para mostrar o resultado da concentração da amostra, o sistema vai relacionar a absorbância média à equação da reta para gerar o valor.

Figura 8 – Tela de resultado.



Fonte: a autora.

Se o usuário desejar obter novos resultados, basta selecionar nova amostra e novo padrão. Também será possível obter só os resultados de cada um deles individualmente, deixando de escolher algum deles, ficando sem seleção a lista suspensa. Tocando sobre o botão de gerar resultado, somente aparecem na tela os respectivos resultados. Para sair do aplicativo ou acessar outras telas, basta tocar sobre o menu lateral.

Considerações finais

O objetivo deste trabalho foi desenvolver uma aplicação que auxiliasse na comparação entre amostra e padrão de análise espectrofotométrica de UV/visível, gerando resultados que validem o método escolhido. Ao longo do desenvolvimento

deste projeto, foi possível aprofundar os conhecimentos sobre todas as tecnologias usadas para desenvolvê-lo.

O aplicativo facilitará a organização dos dados obtidos em laboratório e otimizará o tempo gasto com utilização de outros sistemas que geram gráficos e fazem cálculos estatísticos mantendo as informações todas em único lugar. Assim, este aplicativo será mais uma ferramenta de ajuda para qualquer usuário que trabalhe com análises espectrofotométricas.

Para trabalhos futuros, poderiam ser feitas algumas mudanças e acréscimos no sistema. A primeira adição que deveria ser feita é o lançamento do aplicativo também para a versão *web*, permitindo uma abrangência maior ao serviço. Nesta primeira versão, o aplicativo está disponível somente para plataforma Android, pois o Flutter versão *web* ainda está na sua versão beta.

Também seria interessante adicionar mais parâmetros a essa análise, a fim de obter uma validação mais precisa do método analítico. Poder-se-ia adicionar também mais tipos de análises químicas que necessitam de tratamento de dados, possibilitando ao usuário concentrar em um único aplicativo diversos tipos de resultados e organização de análises.

Referências

ALVES, L. D. S. et al. Desenvolvimento de método analítico para quantificação do efavirenz por espectrofotometria no UV-VIS. **Química Nova**. São Paulo, v. 33, n. 9, p. 1967-1972, 2010.

BRITO, N. M. et al. Validação de métodos analíticos: Estratégia e Discussão. **Pesticidas: Revista de Ecotoxicologia e Meio Ambiente**. Curitiba, v.13, p. 129-146, 2003.

BUSSAB, W. O.; MORETTIN, P. A. **Estatística Básica**. 8. ed. São Paulo: Saraiva, 2013.

FLUTTER. **Technical overview**. Disponível em: <https://flutter.dev/docs/resources/technical-overview>, Acesso em: 24 fev. 2020.

HARRIS, C Daniel. **Análise Química Quantitativa**. 6. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2005.

HEUSER, C. A. **Projeto de banco de dados**. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 2009.

HIRANO, Z. M. B. et al. **Bioquímica - manual prático**. Blumenau: EDIFURB, 2001.

HOLLER, F. J.; SKOOG, D. A.; CROUCH, S. R. **Princípios de análise instrumental**. 6. ed. Porto Alegre: Bookman, 2009.

INMETRO. **DOQ - CGCRE – 008: Orientação sobre validação de métodos analíticos**. Revisão 05, 2016.

MONGODB. **Introduction to MongoDB**. Disponível em: <https://docs.mongodb.com/manual/introduction/>, Acesso em: 29 fev. 2020.

NODE.JS. **About Node.js**. Disponível em: <https://nodejs.org/en/about/>, Acesso em: 25 fev. 2020.

PRESSMAN, R. S. **Engenharia de software: Uma abordagem profissional**. 7. ed. Rio de Janeiro: McGraw-Hill, 2002.

SKOOG, D. A. et al. **Fundamentos de química analítica**. 8ª ed. São Paulo: Thomson Learning, 2006.

VOGEL, Arthur I. **Análise Química Quantitativa**. 6 ed. Rio de Janeiro: LTC editora, 2002.