

DA QUÍMICA VERDE À CIÊNCIA DE DADOS: AVALIAÇÃO DAS MÉTRICAS DE SUSTENTABILIDADE DE MÉTODOS DE DETERMINAÇÃO DE POLUENTES COM APOIO DA INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

Aline Maria de Jesus Machado Cardoso*

Eduarda Garcia Santana*

Vanessa Nunes Alves*

Resumo: Este trabalho, orientado pela Prof. Dr. Vanessa Nunes Alves e coorientado pela MSc. Eduarda Garcia Santana, tem como tema "Da química verde à ciência de dados: Avaliação das métricas de sustentabilidade de métodos de determinação de poluentes com apoio da inteligência artificial". A técnica empregada baseou-se na análise comparativa entre diferentes métodos de determinação do mesmo analito, um poluente metálico, em amostras de mesma natureza. A relevância ambiental desta pesquisa está na análise e correlação de dados da literatura com o apoio da inteligência artificial, utilizada para organizar, tratar e interpretar as informações. Esses dados foram aplicados nas ferramentas de métricas de sustentabilidade GAPI e AGREE, que avaliam o quão ambientalmente corretos são os métodos analíticos. Dessa forma, a pesquisa busca promover a aplicação e o desenvolvimento de procedimentos mais sustentáveis para superar os desafios nas análises químicas ambientais.

Palavras-chave: Poluente metálico; Métricas de sustentabilidade; GAPI; AGREE; Inteligência artificial

1. INTRODUÇÃO

A crescente preocupação global com a preservação ambiental e a saúde pública tem impulsionado a transição da química analítica convencional para a Química Analítica Verde. Tradicionalmente, métodos de análise química podem demandar grandes volumes de solventes orgânicos, elevado consumo energético, reagentes perigosos e geração significativa de resíduos. Esse paradoxo de analisar o meio ambiente utilizando procedimentos potencialmente poluidores também impulsionou o surgimento e a consolidação de técnicas analíticas mais sustentáveis (PŁOTKA-WASYLKA, 2021; CANNAVACCIUOLO, 2022).

* Instituto de Química – UFCAT: alinemariammc@gmail.com, eduardagarciasantana212@gmail.com, vanessa.nunes@ufcat.edu.br

Embora as técnicas analíticas convencionais para determinação de poluentes metálicos mais utilizadas ofereçam vantagens operacionais indiscutíveis, como a capacidade de analisar múltiplos elementos e alta sensibilidade, elas frequentemente falham em critérios de sustentabilidade ambiental (“greeness”). A dependência de métodos que operam sob altas temperaturas ou pressões resulta em um consumo energético considerável, somado à exigência de insumos de alto custo e impacto, como o grande volume de argônio necessário para a manutenção do plasma em um equipamento de Espectrometria de Massa com Plasma Indutivamente Acoplado, por exemplo. Além disso, a necessidade de tratamentos prévios das amostras expõe outro problema ecológico crítico, associado ao uso extensivo de solventes e produtos químicos tóxicos. Esses reagentes não apenas representam riscos ocupacionais à saúde humana, mas também ameaçam a integridade dos ecossistemas após o descarte, estando em desacordo com os princípios da Química Analítica Verde (PROVETE, 2024; ADEWOLE, 2025).

Nos últimos anos, ferramentas quantitativas de avaliação de sustentabilidade vêm sendo desenvolvidas para comparar os métodos analíticos sob a perspectiva ambiental. Entre essas ferramentas, destacam-se o *Green Analytical Procedure Index* (GAPI), e o *Analytical GREENness Metric* (AGREE), amplamente utilizados para avaliar o grau de aderência de métodos analíticos aos princípios da Química Analítica Verde (YIN, 2024; BHALODIA; DESAI, 2025). De forma complementar, a crescente disponibilidade de dados experimentais e o avanço da ciência de dados e da inteligência artificial (IA) têm possibilitado novas abordagens para análise, interpretação e otimização de métodos analíticos. Técnicas de inteligência artificial (IA) permitem identificar padrões, correlacionar variáveis e apoiar decisões na escolha de métodos mais sustentáveis sem comprometer o desempenho analítico (MOURAD; EL-YAZBI; YOUSSEF, 2025).

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Poluentes metálicos e sua determinação analítica

Metais potencialmente tóxicos são amplamente monitorados em matrizes ambientais como água, solo, sedimentos e efluentes industriais. Técnicas analíticas tradicionais para sua determinação incluem a espectrometria de massas com plasma indutivamente acoplado (ICP-MS), que se destaca pela altíssima detectabilidade e

capacidade de análise de diversos elementos, permitindo a quantificação de metais em níveis baixos, além de análises isotópicas. A espectrometria de emissão atômica ou óptica com plasma indutivamente acoplado (ICP-AES ou ICP-OES) baseia-se na emissão de radiação característica dos elementos excitados no plasma, sendo amplamente utilizada para análises com boa precisão e ampla faixa de utilização.

Barata-Silva *et al.* (2025) investigaram a presença de íons metálicos em amostras biológicas (sangue, soro e urina) de bombeiros militares que atuaram no salvamento após o rompimento da barragem de rejeitos em Minas Gerais. Utilizando os equipamentos de ICP-MS e ICP OES, o estudo relatou que todas as amostras continham níveis acima dos valores de referência para a maioria dos íons metálicos, principalmente para o ferro, altamente presente no ambiente do desastre ambiental.

A espectrometria de absorção atômica (AAS) é uma técnica empregada para a determinação individual de metais, podendo ser classificada de acordo com o modo de atomização do analito, como chama, eletrotérmica e geração de hidreto, em função do elemento e da faixa de concentração..

A espectrometria de fluorescência atômica (AFS) caracteriza-se por elevada sensibilidade e seletividade, sendo especialmente aplicada à determinação de elementos como mercúrio, arsênio, selênio e antimônio. Por fim, a espectrometria de emissão por plasma induzido por laser (LIBS) permite análises rápidas e diretas, geralmente com mínimo ou nenhum preparo de amostra, sendo amplamente empregada na caracterização de sólidos, como solos e sedimentos, embora apresente limitações em termos de sensibilidade quando comparada às técnicas baseadas em plasma indutivamente acoplado (JIN, 2020).

Apesar dessas técnicas terem alta detectabilidade (capacidade de detectar quantidades mínimas)[E1] e seletividade (capacidade de distinguir substâncias em misturas complexas)[E2], elas geram desafios significativos à sustentabilidade no que tange às análises químicas de íons metálicos. Tais técnicas, frequentemente, podem necessitar de etapas de preparo de amostras, extremamente rigorosas, como a digestão ácida com reagentes concentrados e corrosivos, podendo oferecer riscos ocupacionais para os laboratoristas, já que esses processos geram um volume considerável de resíduos tóxicos. Além disso, essas técnicas demandam um consumo energético elevado para manter equipamentos de grande porte em operação. Entretanto, buscando vencer tais limitações, diversos estudos propõem alternativas que priorizam a eficiência e a redução de danos ambientais a partir da Química Analítica

Verde. Nesse contexto técnicas de microextração surgem como uma solução viável para reduzir o uso de solventes orgânicos, o desenvolvimento de sensores eletroquímicos e dispositivos espectroscópicos portáteis permitem a transição do laboratório para o local da coleta (in situ) (CAMPOS, 2015).

Buscando uma abordagem sustentável e inovadora, Oliveira et al. (2025) combinou a extração induzida pela quebra de microemulsão (EIMB) com a análise digital de imagens (DIA) para a determinação de ferro em amostras de gasolina, sendo esse um dos fatores de adulteração no combustível e extremamente necessário para o controle de qualidade e segurança ambiental. Ao reduzir o consumo de reagentes sem comprometer a confiabilidade do método, a abordagem EIMB-DIA mostrou-se uma alternativa eficaz para a quantificação de metais em matrizes complexas, como amostras de combustíveis.

2.2. Química Analítica Verde e Métricas de Sustentabilidade

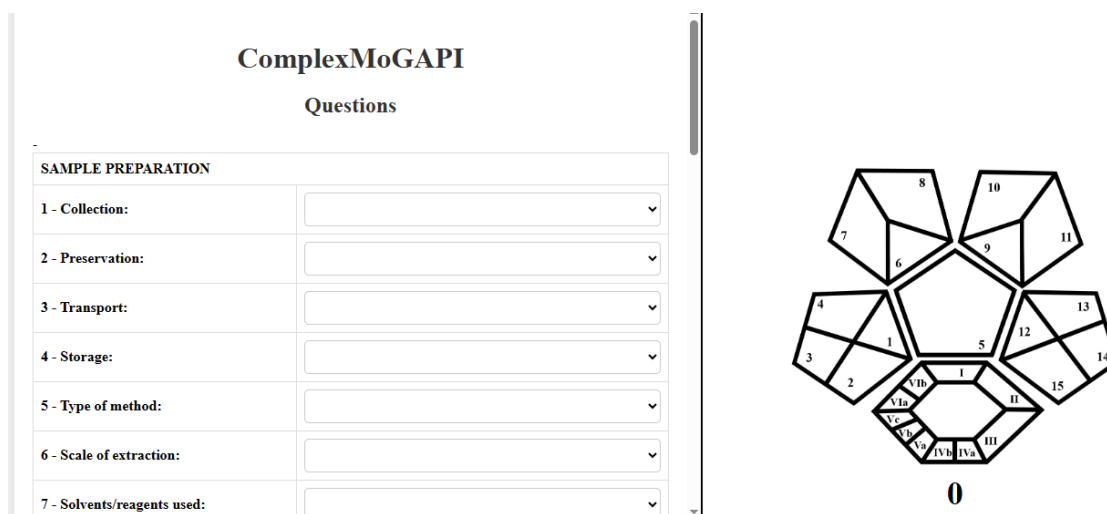
A base conceitual da Química Verde é sustentada pelos 12 princípios propostos por Anastas e Warner em 1998, que orientam a prevenção da poluição, o uso de substâncias menos tóxicas, a redução do consumo de energia e a minimização da geração de resíduos. Esses princípios são amplamente reconhecidos como um marco na área e funcionam como um guia para alinhar práticas químicas aos objetivos de sustentabilidade, contribuindo para o enfrentamento de desafios ambientais e climáticos globais (ANASTAS; WARNER, 2000).

No contexto da Química Analítica Verde, os 12 princípios foram adaptados para considerar as particularidades dos procedimentos analíticos, como preparo de amostras, consumo de reagentes, tempo de análise e geração de resíduos. A partir dessa adaptação, tornou-se possível avaliar de forma mais sistemática o desempenho ambiental de métodos analíticos, indo além de critérios tradicionais como sensibilidade e precisão. Assim, a Química Analítica Verde propõe que a escolha de um método analítico leve em conta não apenas sua eficiência técnica, mas também seus impactos ambientais ao longo de todo o processo.

Para quantificar o quão “verde” é um método analítico, foram desenvolvidas ferramentas métricas específicas, como o GAPI (Green Analytical Procedure Index) e o AGREE (Analytical GREEnness Metric). O GAPI avalia o ciclo de vida completo do procedimento analítico por meio de um conjunto de campos gráficos coloridos em verde,

amarelo e vermelho, que representam, respectivamente, baixo, médio e alto impacto ambiental, desde a coleta da amostra até o tratamento final dos resíduos. Já o AGREE baseia-se diretamente nos 12 princípios da Química Analítica Verde e apresenta o resultado em um diagrama circular, com uma pontuação global variando de 0 a 1, o que facilita a comparação visual e objetiva entre diferentes métodos analíticos. As Figuras 1 e 2 apresentam a aparência das ferramentas GAPI e AGREE, respectivamente.

Figura 1 – Aparência da ferramenta GAPI



ComplexMoGAPI

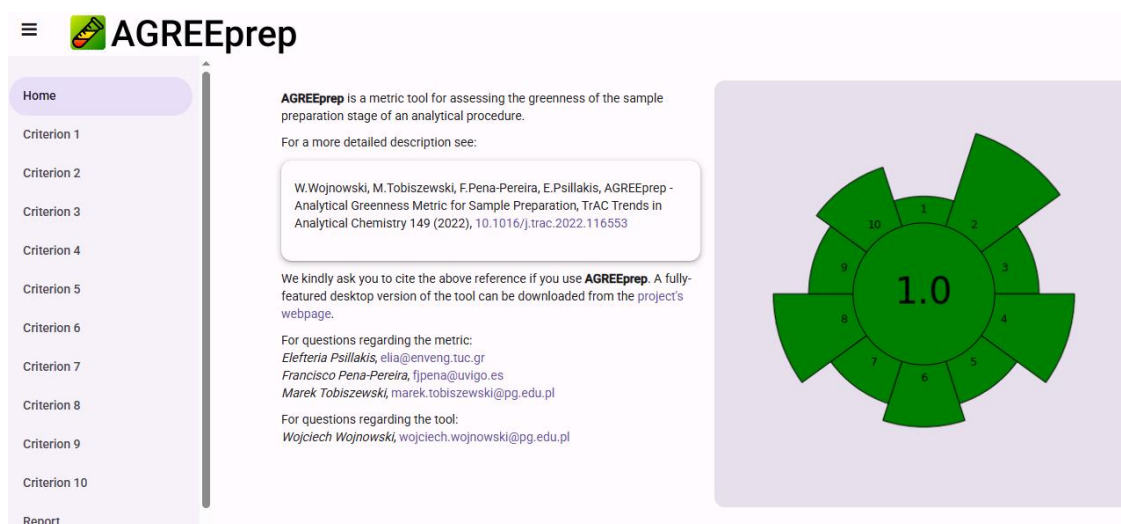
Questions

SAMPLE PREPARATION	
1 - Collection:	
2 - Preservation:	
3 - Transport:	
4 - Storage:	
5 - Type of method:	
6 - Scale of extraction:	
7 - Solvents/reagents used:	

The circular diagram on the right consists of 15 numbered segments (1-15) arranged in a circular pattern, with a central area labeled '0'.

Fonte: Autora (2026)

Figura 2 – Aparência da ferramenta AGREE



AGREEprep

Home

- Criterion 1
- Criterion 2
- Criterion 3
- Criterion 4
- Criterion 5
- Criterion 6
- Criterion 7
- Criterion 8
- Criterion 9
- Criterion 10
- Report

AGREEprep is a metric tool for assessing the greenness of the sample preparation stage of an analytical procedure.

For a more detailed description see:

W.Wojnowski, M.Tobiszewski, F.Pena-Pereira, E.Psillakis, AGREEprep - Analytical Greenness Metric for Sample Preparation, TrAC Trends in Analytical Chemistry 149 (2022), 10.1016/j.trac.2022.116553

We kindly ask you to cite the above reference if you use **AGREEprep**. A fully-featured desktop version of the tool can be downloaded from the project's webpage.

For questions regarding the metric:
Eleftheria Psillakis, elia@enveng.tuc.gr
Francisco Pena-Pereira, fpena@uvigo.es
Marek Tobiszewski, marek.tobiszewski@pg.edu.pl

For questions regarding the tool:
Wojciech Wojnowski, wojciech.wojnowski@pg.edu.pl

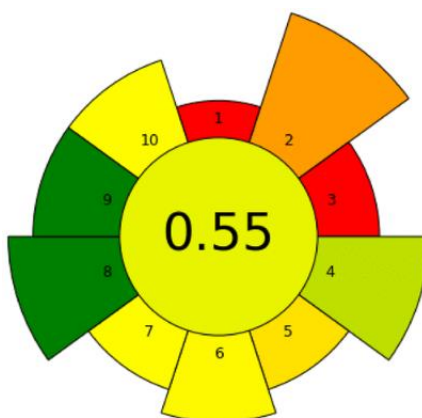
The circular diagram on the right shows a score of 1.0 in the center, surrounded by 10 green segments numbered 1 to 10.

Fonte: Autora (2026)

O EIMB-DIA, método supracitado proposto por Oliveira *et al.* (2025), teve seu grau de sustentabilidade analítica calculado utilizando a ferramenta AGREEprep, em

que fatores como preparação de amostras, consumo de reagentes e energia, geração de resíduos e a adoção de práticas laboratoriais mais sustentáveis são levados em consideração. O resultado obtido pela ferramenta é um pictograma, apresentado na Figura 3, com valor parcialmente favorável na minimização do impacto ambiental e alinhado com aos princípios da sustentabilidade ambiental.

Figura 3 - Pictograma AGREEprep de Fe(III) detectado na gasolina pelo método de Oliveira *et al.* (2025)



Fonte: Oliveira *et al.* (2025)

2.3. Aplicação da Inteligência Artificial na Química Verde

A ciência de dados tem se tornado cada vez mais relevante na química analítica, especialmente por facilitar o tratamento e a interpretação de grandes volumes de dados experimentais. Técnicas de aprendizado de máquina permitem identificar padrões, relacionar variáveis e prever o desempenho de métodos analíticos, o que contribui para otimizar procedimentos e apoiar decisões mais precisas (YANO, 2022).

Além disso, ferramentas de inteligência artificial vêm sendo aplicadas no desenvolvimento e aprimoramento de métodos analíticos. Com elas, é possível selecionar condições experimentais mais adequadas com menos ensaios, reduzindo o consumo de reagentes, o tempo de análise e os custos operacionais. Esse uso também aumenta a confiabilidade dos resultados, tornando os processos mais eficientes e robustos (LUO, 2023).

No campo da sustentabilidade, métricas como GAPI e AGREE fornecem indicadores sobre o impacto ambiental dos métodos analíticos. Esses dados podem ser usados em modelos computacionais para comparar técnicas, classificar métodos de acordo com seu nível de sustentabilidade e prever o desempenho ambiental de novas

abordagens. Assim, a inteligência artificial contribui não apenas para avanços técnicos, mas também para práticas mais sustentáveis na química analítica (MOURAD; EL-YAZBI; YOUSSEF, 2025).

3. MATERIAIS E MÉTODOS

O presente estudo foi desenvolvido a partir de uma revisão bibliográfica sistematizada, realizada nas bases de dados Portal de Periódicos CAPES (CAFE CAPES) e Google Scholar, com o objetivo de identificar artigos científicos relevantes e atualizados relacionados ao tema da pesquisa. Foram priorizadas publicações no período de 2021 a 2025, a fim de garantir a atualidade das informações analisadas.

A estratégia de busca utilizou as seguintes palavras-chave, em português e inglês, combinadas por operadores booleanos quando aplicável: poluentes metálicos, ferro, métodos de determinação analítica, química verde, métricas de sustentabilidade, GAPI, AGREE e inteligência artificial. A seleção dos artigos considerou critérios de relevância temática, clareza metodológica e aplicabilidade das técnicas analíticas para a determinação do teor de ferro em diferentes matrizes.

A partir do conjunto de trabalhos selecionados, dois artigos-base que realizaram a determinação analítica do teor de ferro foram escolhidos para análise aprofundada (DE PAULA, 2021; SANTANA; ALVES, 2024). As metodologias descritas nesses artigos foram avaliadas quanto aos seus aspectos de sustentabilidade analítica por meio da aplicação das métricas Green Analytical Procedure Index (GAPI) e Analytical GREENness Metric (AGREE). A ferramenta GAPI, disponível em <https://fotouhmansour.github.io/ComplexMoGAPI/>, foi utilizada para avaliar o impacto ambiental das etapas do procedimento analítico, considerando desde o preparo de amostras até a determinação final. Complementarmente, a métrica AGREE, acessível em <https://agreeprep.anvil.app>, foi aplicada para quantificar o grau de aderência das metodologias aos 12 princípios da Química Analítica Verde, permitindo uma análise comparativa do nível de sustentabilidade ambiental das técnicas empregadas nos estudos selecionados.

4. DISCUSSÃO DE RESULTADOS

Os critérios avaliados pela ferramenta AGREE incluem o preparo e acondicionamento da amostra, o uso de materiais perigosos, a sustentabilidade,

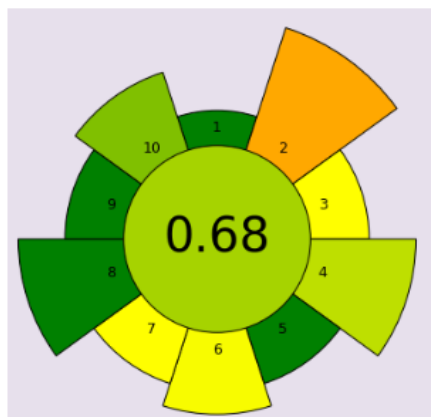
renovabilidade e reutilização dos materiais empregados, a geração de resíduos, a economia no tamanho da amostra, a produtividade analítica (throughput da amostra), o nível de integração e automação do procedimento, o consumo de energia, a configuração pós-preparo da amostra para a etapa analítica e, por fim, a segurança do operador. Cada um dos 12 princípios da química analítica verde é avaliado individualmente por meio de perguntas orientadoras na ferramenta, nas quais o usuário atribui uma pontuação normalizada entre 0 e 1, sendo 0 desempenho totalmente desfavorável sob o ponto de vista da química verde e 1 para o desempenho ideal, alinhado à química verde. Dessa forma, valores intermediários representam níveis graduais de conformidade. As Figuras 4 e 5 apresentam os resultados obtidos ao inserir os dados para os trabalhos de De Paula (2021) e Santana e Alves (2024). O trabalho de De Paula (2021) obteve menor índice (0,64) que o de Santana e Alves (2024) (0,68), devido ao maior impacto do volume das amostras e do desperdício.

Figura 4 – Resultado do método de De Paula (2021) no AGREE



Fonte: Autora (2026)

Figura 5 – Resultado do método de Santana e Alves (2024) no AGREE



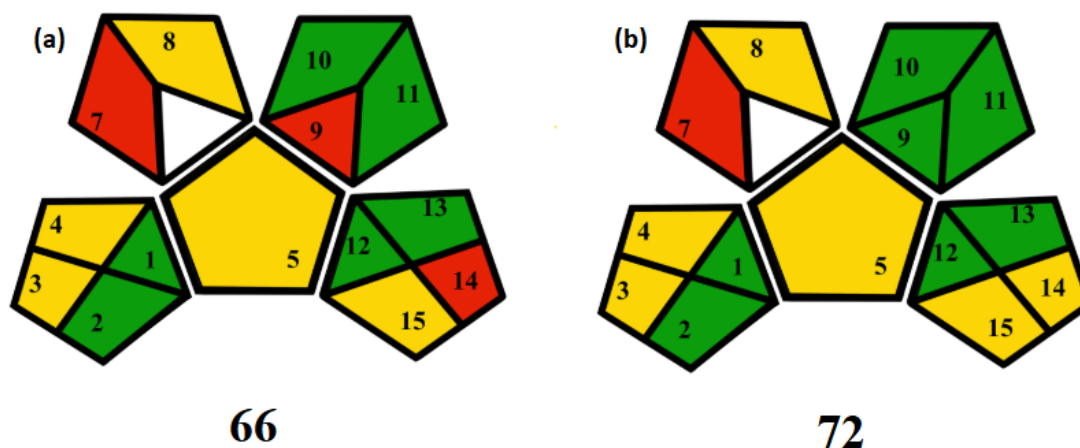
#	Critério		Pontuação	Peso
1.	Posicionamento da amostra para preparação:	Não definido	1,00	1
2.	Materiais perigosos:	1 [g ou mL]	0,33	5
3.	Sustentabilidade, renovabilidade e reutilização de materiais:	Os materiais não são sustentáveis nem renováveis, mas são reutilizados VÁRIAS VEZES.	0,50	2
4.	Desperdício:	1 [g ou mL]	0,63	4
5.	Economia de tamanho da amostra	Massa ou volume da amostra: 0 [g ou mL]	1,00	2
6.	Taxa de transferência de amostras:	9 [amostras/h]	0,52	3
7.	Integração e automação	Etapas de preparação da amostra: 2 etapas ou menos, sistemas semiautomatizados	0,50	2
8.	Consumo de energia:	6 [W]	1,00	4
9.	Configuração pós-preparação da amostra para análise:	Deteção simples e acessível: smartphones, scanners de mesa, tiras de papel, etc.	1,00	2
10.	Segurança do operador:	1 perigo	0,75	3

Fonte: Autora (2026)

A GAPI é uma ferramenta qualitativa–semiquantitativa desenvolvida para avaliar o grau de sustentabilidade ambiental de métodos analíticos, desde a coleta da amostra até o tratamento de resíduos. A partir de um conjunto de critérios organizados em etapas dos procedimentos realizados, é feita uma classificação segundo um sistema de cores, que indica o nível de impacto ambiental, sendo verde relativo a baixo impacto ambiental, amarelo, um impacto moderado e vermelho, a condição mais desfavorável, de alto impacto ambiental. O resultado final é um pictograma com a atribuição das cores, que permitem identificar quais etapas do método são ambientalmente críticas e de um valor atribuído a cada cor (3 para verde, 2 para amarelo e 1 para vermelho) e

multiplicado pelo número de critérios analisados. Ao final uma pontuação é atribuída a cada análise, sendo aquela ≥ 75 lida como “sustentabilidade excelente”, de 50 a 74 como “sustentabilidade aceitável” e < 50 como “sustentabilidade inaceitável”. No caso desse trabalho foram analisados os critérios relacionados à preparação da amostra, aos reagentes e solventes e à instrumentação, em que cada um tem seus subcritérios, totalizando 16 pontos de avaliação. A partir dos resultados para cada um dos métodos analisados, presente na Figura 6 (a) e (b), tem-se que o método de Santana e Alves (2024) mostrou-se mais ambientalmente sustentável que o de De Paula (2021).

Figura 6 – Resultados dos métodos de (a) De Paula (2021) e (b) Santana e Alves (2024) no AGREE



Fonte: Autora (2026)

5. CONCLUSÕES

O presente trabalho evidenciou que, embora técnicas analíticas tradicionais para a determinação de poluentes metálicos, como ICP-MS, ICP-OES e AAS, apresentem elevada sensibilidade e confiabilidade, elas ainda impõem desafios relevantes sob a perspectiva da sustentabilidade ambiental. Nesse cenário, as abordagens alternativas configuram-se como estratégias inovadoras como a combinação EIMB-DIA, e demonstram que é possível manter o desempenho analítico ao mesmo tempo em que se reduz o impacto ambiental. A aplicação das métricas GAPI e AGREE mostrou-se fundamental para identificar pontos críticos dos métodos avaliados e comparar, de forma objetiva, o grau de sustentabilidade ambiental das diferentes abordagens, evidenciando vantagem para metodologias que demandam menores volumes de

amostra, menos reagentes e menor consumo energético.

Adicionalmente, o uso de ferramentas de inteligência artificial, incluindo chatbots de IA como ChatGPT, Gemini e Microsoft Copilot, mostrou-se promissor no apoio à análise integrada de dados de sustentabilidade e desempenho analítico. Essas ferramentas permitem explorar correlações entre os resultados obtidos pelas métricas GAPI e AGREE e as características metodológicas dos procedimentos analíticos, facilitando a interpretação dos dados e a tomada de decisão. Assim, a IA surge como um recurso complementar estratégico para a Química Analítica Verde, ao apoiar a seleção e a otimização de métodos mais sustentáveis, reduzir etapas experimentais desnecessárias e fortalecer uma abordagem mais eficiente, consciente e alinhada aos princípios do desenvolvimento sustentável.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos professores da Especialização em Análises Químicas Ambientais do Instituto de Química da Universidade Federal de Catalão, em especial à Profa. Dra. Vanessa Nunes Alves que acolheu a proposta desse trabalho e à Msc. Eduarda Garcia Santana por coorientá-lo.

Aos órgãos de fomento e à UFCAT pela oportunidade de aprimorar os estudos em um curso de excelência.

REFERÊNCIAS

- ADEWOLE, E.A. et al. Green Analytical Chemistry, Sustainable Methods for Chemical Analysis – A Review. **Iconic Research And Engineering Journals**, [s. l.], v. 9, n. 3, p. 1814-1822, set. 2025.
- ANASTAS, P.T.; WARNER, J.C. **Green chemistry: theory and practice**. Oxford university press, 2000.
- BARATA-SILVA, Cristiane et al. Biomonitoramento dos bombeiros militares que trabalharam em Brumadinho/MG, Brasil, após o rompimento da barragem de rejeitos. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 30, p. e20002023, 2025.
- BHALODIA, A.; DESAI, S. Comprehensive assessment of greenness of ICP-OES methods for determination of metals. **Green Analytical Chemistry**, v. 12, p. 100222, 2025.
- CAMPOS, C.D.M. et al. Preparo de amostras assistido por campo elétrico: Fundamentos, avanços, aplicações e tendências. **Química Nova**, v. 38, p. 1093-1106, 2015.
- CANNAVACCIUOLO, C. et al. Natural deep eutectic solvents (NADESs) combined with sustainable extraction techniques: A review of the green chemistry approach in food analysis. **Foods**, v. 12, n. 1, p. 56, 2022.
- DE PAULA, S. et al. Determinação do teor de ferro utilizando o aplicativo PhotoMetrix PRO®: a tecnologia a favor do ensino de Química. **Revista Virtual de Química**, v. 13, n. 1, 2021.
- JIN, M. et al. Review of the distribution and detection methods of heavy metals in the environment. **Analytical methods**, v. 12, n. 48, p. 5747-5766, 2020.
- LUO, Y. Chemistry in the era of artificial intelligence. **Precision Chemistry**, v. 1, n. 2, p. 127-128, 2023.
- MOURAD, S.S.; EL-YAZBI, A. F.; YOUSSEF, R. M. Advanced Artificial Intelligence for Efficient and Rapid Evaluation of Analytical Procedures Greenness and Sustainability. International Conference on Machine Intelligence and Smart Innovation (ICMISI). IEEE, 2025. p.48-51.
- OLIVEIRA, J.A.N. et al. Green and Efficient Determination of Iron (III) in Gasoline Using Microemulsion-Based Extraction and Digital Image Analysis. **ACS omega**, 2025.
- PŁOTKA-WASYLKA, J. et al. Green analytical chemistry as an integral part of

sustainable education development. **Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry**, v. 31, p. 100508, 2021.

PROVETE, C.S. et al. Comparison of the Performance of ICP-MS, CV-ICP-OES, and TDA AAS in Determining Mercury in Marine Sediment Samples. **ACS omega**, v. 9, n. 50, p. 49229-49238, 2024.

SANTANA, E.G.; ALVES, V.N. Dispositivos em Papel e Análise por Processamento de Imagens para Determinação de Íons Ferro em Matrizes Aquosas. **Revista Processos Químicos**, v. 19, n. 36, p. 35-41, 2024.

YANO, J. et al. The case for data science in experimental chemistry: examples and recommendations. **Nature Reviews Chemistry**, v. 6, n. 5, p. 357-370, 2022.

YIN, L. et al. Green analytical chemistry metrics for evaluating the greenness of analytical procedures. **Journal of Pharmaceutical Analysis**, v. 14, n. 11, p. 101013, 2024.