

ESTUDO DA ESTABILIDADE DE NANOPARTÍCULAS UTILIZANDO ANÁLISE DE IMAGENS E MÉTODOS QUIMIOMÉTRICOS

Maykon Alves LEMES; Anselmo Elcana de OLIVEIRA; Denilson RABELO;

Mariana da Silva GODINHO.

Universidade Federal de Goiás, Instituto de Química, Campus II

maykonlemes@hotmail.com

Palavras – chave: *quimiometria, nanopartículas, imagens e PLS.*

INTRODUÇÃO

Partículas com dimensão entre 1 e 100 nanômetros são denominadas de nanopartículas. Esse tipo de material tem sido estudado para diversas finalidades e por diferentes áreas tais como biomédicas, fármacos e tecnológicas. A razão pela qual são realizadas essas pesquisas é devido às propriedades físico-química desses materiais e as possíveis aplicações.

Propriedades ferromagnéticas de nanopartículas são umas das características que motivam a manipulação e aplicação dessas, pois a partir de um campo magnético externo aplicado sobre um local contendo essas partículas pode-se controlá-las facilmente, como exemplo, aplicações de fármacos em regiões específicas. Nanopartículas magnéticas também podem ser usadas dispersando-as em fluidos de base (ferrofluidos ou nanofluidos) para aumentar a capacidade térmica do fluido e dessa forma melhorar a refrigeração de sistemas térmicos.¹

Porém para a aplicação destas nanopartículas vários estudos estão sendo realizados para verificar qual tipo de material fornece melhor resposta em cada situação. Em trabalhos sobre a aplicação de ferrofluidos em sistemas térmicos pesquisadores têm enfrentado problemas para desenvolver ferrofluidos estáveis, onde objetiva-se produzir nanofluidos com maior tempo de sedimentação das partículas. Estas pesquisas vêm sendo realizadas de forma a utilizarem diferentes materiais magnéticos tais como óxidos de ferro de alumínio de cobre entre outros, de maneira que possa obter fluidos magnéticos com boa estabilidade.²

Diante disso alguns métodos têm sido usados para avaliar a estabilidade de nanofluidos como, por exemplo, o potencial zeta e espectroscopia UV-visível, porém

esses são limitados. Sendo assim a análise de imagens aliada a quimiometria pode ser uma poderosa ferramenta aplicada na avaliação da sedimentação de ferrofluidos, visto que se trata de uma técnica que além de não destrutiva requer pouco tempo na aquisição dos dados.³

Neste tipo de análise as imagens obtidas podem ser decompostas em um conjunto de dados de canais RGB (Red Green Blue), onde estes constituem a matriz para tratamento quimiométrico.⁴ No presente trabalho o método quimiométrico utilizado foi a calibração multivariada PLS (Partial Least Square) para a previsão do tempo de decantação da ferrita. Este método consiste em um modelo de regressão em que os dados das matrizes dos sinais analíticos e da propriedade a ser avaliada são decompostos de forma a maximizar a correlação entre eles. A decomposição destes dados gera as componentes principais ou variáveis latentes que contem a máxima variância das informações dos dados originais.^{5,6}

Dessa forma o presente trabalho propõe a utilização de imagens digitais como ferramenta para a previsão do tempo de sedimentação de nanopartículas de ferrita de ferro dispersadas em óleo de transformador.

MATERIAIS E MÉTODOS

No processo de dispersão foi utilizado 1g de ferrita de ferro (Fe_2O_3) adicionado em um béquer com 50 mL de óleo mineral depois levado a ultrassom por 10 minutos. A mistura foi então transferida para um tubo de ensaio colocado em um aparato para a obtenção das imagens.

As imagens foram registradas por uma câmera digital Kodak modelo Easyshare C713 com resolução de 7.2 megapixels. O tratamento dos dados foi realizado com auxílio do software Matlab[®] R2010 utilizando o pacote Toolbox_62.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As imagens foram registradas em triplicatas num total de 45 imagens, sendo as primeiras 15 obtidas em intervalos de 15 minutos e as 30 restantes em intervalos de 30 minutos. O tratamento destas se deu no software Matlab[®] e iniciou-se pela escolha do tamanho das imagens, ou seja, da imagem original selecionou-se uma região da figura contendo o centro do tubo de ensaio com o fluido. Feito isso as

imagens foram decompostas em canais RGB obtendo então os histogramas de frequência obtendo assim a matriz de dados multivariados de dimensão 15x768.

O conjunto de dados foi pré-processados centrando os dados na média, onde calcula-se a média de todas as amostras e depois subtraí por cada amostra. O modelo foi construído utilizando 10 amostras para o conjunto de calibração e para o teste foram utilizadas 5 amostras.

O número de variáveis latentes que forneceu o menor erro médio quadrático do modelo de calibração RMSEC foi 5, cuja variância acumulada para o bloco X referente aos dados das imagens foi de 99,00% e para o bloco Y das respostas 99,87%. O modelo de validação foi construído com um erro médio quadrático de previsão RMSEP de 10,4 minutos. Na tabela 1 podem ser observados os dados de previsão com os seus respectivos erros relativos, verifica-se também que esses estão abaixo de 10% o que garante uma boa confiabilidade no modelo.

Tabela1. Dados experimentais e previstos no conjunto de validação e os erros.

Tempo medido (min)	Tempo previsto (min)	Erro relativo (%)
45	49,05	8,99
75	76,13	1,50
135	125,89	-6,75
165	156,32	-5,26
285	265,95	-6,68

O gráfico da figura 1 mostra a relação entre o tempo previsto e o medido das 5 amostras usada no conjunto teste, o coeficiente de correlação dos dados foi de 0,9997.

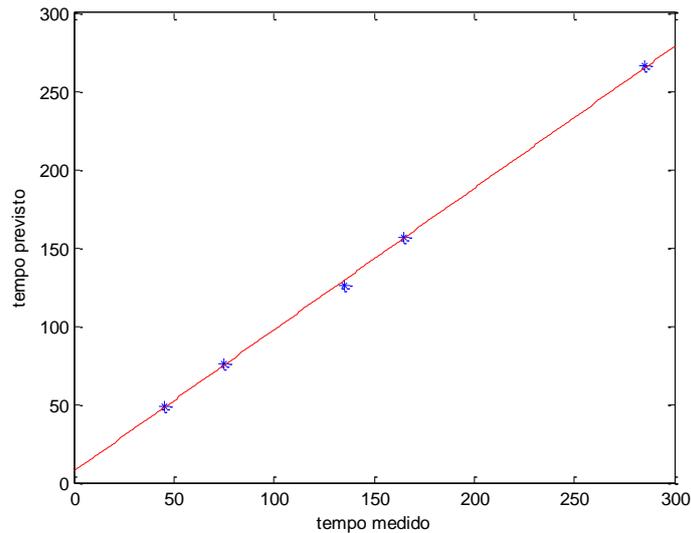


Figura 1. Gráfico do conjunto de validação com a relação entre o tempo medido e o tempo previsto.

Os dados de T^2 e dos resíduos foram também utilizados para avaliar o modelo, como pode ser analisado pela figura 2 percebe-se que o modelo não possui outlier (amostra anômala), pois as amostras estão dentro do nível de confiança 95% em T^2 . No gráfico também observa-se que as amostras 12 e 14 possuem resíduo alto porém essas separadamente não influenciam no modelo devido o baixo valor de T^2 . Verifica-se também que a quantidade de resíduos é baixa (1%), o que significa que 99% das informações das cinco variáveis latentes foram utilizadas na calibração.

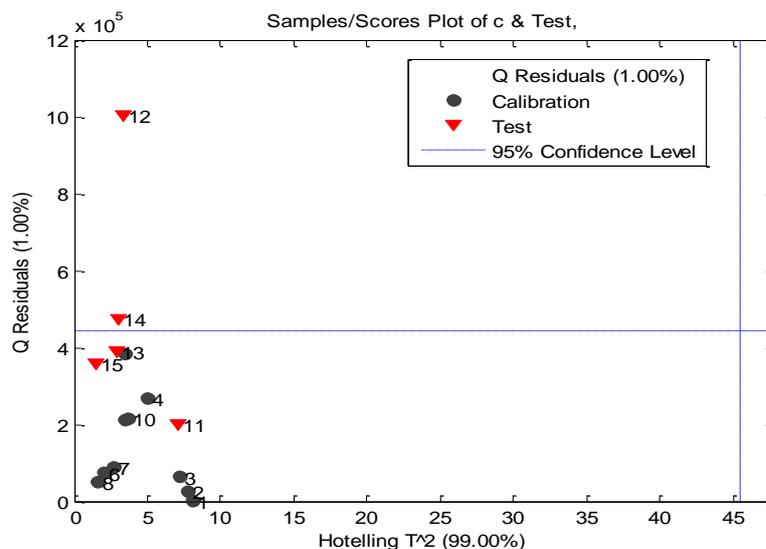


Figura 2. Gráfico dos resíduos em função de T^2 .

CONCLUSÃO

A análise de imagens aliada ao método quimiométrico de calibração multivariada demonstrou ser eficiente na avaliação da previsão da estabilidade do fluido magnético, pois o modelo obtido conseguiu estimar o tempo de sedimentação das amostras do conjunto de calibração com baixo erro de previsão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Das.S,K.C., Stephen,Y. Wenhua, Pradeep.T.*Nanofluids sciec and technology*. John Wiley & Sons, USA, 2008.
2. Hwang.Y.,Lee.J.K, Lee.C.H,Jung.Y.,Cheong.S.,Lee.C.G,Ku.B.,Jang.S.*Stability and thermal conductivity characteristics of nanofluidos*. Thermochemica Acta, 455, **2007**, 70–74.
3. Li, Yanjiao. Zhou, Jingen. Tung, Simon. Schneider, Eric, Xi, Shengqi. *A review on development of nanofluid preparation and characterization*. Powder technology, **2009**.
4. Godinho.M.S,Pereira.R.O,Ribeiro.K.O,Schimidt,F.,Oliveira,A.E,Oliveira,S.B., *Classificação de refrigerantes através de análise de imagens e análise de Componentes principais (pca)*. Quim. Nova, 31, **2008**, 1485-1489.
5. Braga,J.W. *Avaliação de figuras de mérito em calibração multivariada, aplicada na determinação de carbamazepina por espectroscopia no infravermelho próximo e médio*. Dissertação, UNICAMP, SP, **2004**.
6. Yu. H., MacGregor. J. F., *Multivariate image analysis and regression for prediction of coating content and distribution in the production of snack foods*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 67, **2003**, (125– 144).