



UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS
CÂMPUS DE PALMAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MESTRADO PROFISSIONAL EM
PROPRIEDADE INTELECTUAL E TRANSFERÊNCIA DE TECNOLOGIA
PARA INOVAÇÃO - PROFNIT

LUCIANO DE SOUSA MORAES

**DESENVOLVIMENTO DE UMA SOLUÇÃO DE TECNOLOGIA DA
INFORMAÇÃO PARA GESTÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS**

Palmas/TO
2021

LUCIANO DE SOUSA MORAES

**DESENVOLVIMENTO DE UMA SOLUÇÃO DE
TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO PARA GESTÃO DE
MÉTODOS ANALÍTICOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela Banca Examinadora.

Orientador: Dr. Warley Gramacho da Silva
Coorientadora: Dra. Glêndara Aparecida de Souza Martins

Palmas/TO
2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da Universidade Federal do Tocantins

M827d Moraes, Luciano de Sousa.

Desenvolvimento de uma Solução de Tecnologia da Informação para Gestão de Métodos Analíticos . / Luciano de Sousa Moraes. – Palmas, TO, 2021.

75 f.

Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade Federal do Tocantins – Câmpus Universitário de Palmas - Curso de Pós-Graduação (Mestrado) Profissional em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação, 2021.

Orientador: Warley Gramacho da Silva

Coorientadora : Glêndara Aparecida de Souza Martins

1. Gestão de Métodos. 2. Inovação Tecnológica. 3. Métodos analíticos. 4. Gestão de Metodologias. I. Título

CDD 346.8

TODOS OS DIREITOS RESERVADOS – A reprodução total ou parcial, de qualquer forma ou por qualquer meio deste documento é autorizado desde que citada a fonte. A violação dos direitos do autor (Lei nº 9.610/98) é crime estabelecido pelo artigo 184 do Código Penal.

Elaborado pelo sistema de geração automática de ficha catalográfica da UFT com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

FOLHA DE APROVAÇÃO

LUCIANO DE SOUSA MORAES

DESENVOLVIMENTO DE UMA SOLUÇÃO DE TECNOLOGIA DA INFORMAÇÃO PARA GESTÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação. Foi avaliada para obtenção do título de Mestre em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação e aprovada em sua forma final pelo orientador e pela Banca Examinadora.

Data de aprovação: 17/06/2021

Banca Examinadora

Prof. Dr. Warley Gramacho da Silva, UFT

Prof. Dr. Allyson Takehiro Fujita, UEMG

Prof. Dr. Maxwell Diogenes Bandeira de Melo, UFT

Palmas, 2021

Dedico este trabalho aos meus pais, Luiz Moraes (in memoriam) e Olindina Maria, por toda dedicação e desafios enfrentados para que hoje eu pudesse estar realizando este objetivo de vida. À minha esposa Jocélia Pedrosa, pela motivação e compreensão nesse período dedicados a pesquisa e viagens.

“Quando traçamos objetivos e lutamos para alcançá-los, o universo conspira para que oportunidades apareçam. Devemos agarrá-las como se fossem a única da vida”
Luciano de S. Moraes

AGRADECIMENTOS

O ingresso na pós-graduação nesse país ainda não é tão acessível como deveria ser, ter essa oportunidade de conquistar esse tão sonhado título requer motivação, sorte, persistência, competência e contribuições de pessoas que fazem isso acontecer. São essas pessoas próximas como os amigos: Wanderson Pessoa, Rejane Marinho e Paulo Hernandes que inicialmente quero agradecer, pois me motivaram para que eu realizasse a seleção de ingresso, talvez sem essa motivação nem tentaria realizado o processo seletivo. Agraciado por Deus, pude ingressar e conhecer pessoas que tenho uma grande admiração.

Aos amigos, Rony Von, Mauricio, Wanderson e Turíbio, que trilharam o mesmo trajeto durante o período de aulas presenciais, essas viagens as quais posso intitular de “grandes aventuras”, pois eram mais de 500km somados ida e volta (Colinas do Tocantins/Palmas) para podermos assistir as aulas presenciais no Campus Palmas da Universidade Federal do Tocantins. Passamos por diversos apuros na BR153, mas com perseverança de nunca faltar nenhuma aula, essas viagens, as vezes pela manhã, tarde, noite/madrugadas eram realizadas com muita alegria e conhecimentos gerais que faziam cada viagem ser única.

Aos mestrandos do Profnit, ponto focal Palmas, onde pude fazer diversas amizades que serão para a vida, pela contribuição em diversas atividades e união da turma para que os desafios propostos fossem alcançados.

Ao orientador Dr. Warley Gramacho e a coorientadora Dra. Glêndara Martins pela confiança depositada e motivação para que eu conseguisse alcançar as metas estabelecidas. Aos professores do PROFNIT, pelas aulas enriquecedoras e por toda motivação durante o curso.

A minha esposa, Jocélia Pedrosa por todo o apoio, motivação e ajuda ao longo de todo os dias que dediquei ao mestrado. A minha mãe, Olindina, pela força em todas as fases da minha vida. Ao meu Pai, Luiz Moraes (falecido), que sempre passou para seus filhos, a importância do estudo. Aos meus irmãos: Luciude, Lucilene, Lucimar, Junior, Lucileide, Luzimar, Francimar, Lucileide, Renato e Ana Célia. Enfim, a todos os familiares e amigos que torcem pelas minhas conquistas.

RESUMO

A análise química aborda um conjunto de métodos, os quais permitem determinar a composição qualitativa e quantitativa das substâncias. Esses métodos desempenham um papel importante em muitas áreas da ciência e é utilizada na indústria de alimentos, agrícola, ambiental, farmacêutica, medicina, entre outras. Pesquisadores utilizam diariamente esses métodos analíticos em pesquisas, laudos técnicos, inovações tecnológicas e aulas práticas em laboratórios, no entanto, de acordo com a matéria-prima a ser analisada e a disponibilidade de infraestrutura, algumas adaptações são corriqueiras e necessárias. O produto desenvolvido neste trabalho é um Sistema de Gestão de Métodos Analíticos com especificações realizadas através do estudo de caso no Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos (LaCiMP) da Universidade Federal do Tocantins, Campus Palmas. Para o desenvolvimento da solução foi utilizada práticas de desenvolvimento ágil. O sistema WEB foi desenvolvido na linguagem de programação Python e framework Django, o produto conta com as funcionalidades: cadastrado de usuário, cadastro de métodos oficiais, permite a adaptação de um método oficial por qualquer usuário do sistema, compartilhamento de métodos entre usuários do sistema, geração de Qr code para cada método oficial e adaptado, diário profissional do pesquisador para realizar anotações de métodos adaptados, entre outras. Assim, a solução desenvolvida dará suporte a acadêmicos, docentes e pesquisadores em aulas práticas e rotinas laboratoriais, possibilitando a otimização da dinâmica da experimentação científica no ambiente laboratorial e a maximização da divulgação de adaptações realizadas no âmbito da prática metodológica.

Palavras-chaves: Gestão de métodos. Inovação Tecnológica, Métodos Analíticos.

ABSTRACT

Chemical analysis addresses a set of methods, which make it possible to determine the qualitative and quantitative composition of the substances. These methods play an important role in many areas of science and are used in the food, agricultural, environmental, pharmaceutical and medical industries, among others. Researchers use these analytical methods on a daily basis in research, technical reports, technological innovations and practical classes in laboratories, however, according to the raw material to be analyzed and the availability of infrastructure, some adaptations are common and necessary. The product developed in this work is an Analytical Methods Management System with specifications carried out through the case study at the Kinetic and Process Modeling Laboratory (LaCiMP) at the Federal University of Tocantins, Campus Palmas. Agile development practices were used to develop the solution. The WEB system was developed in the Python programming language and Django framework, the product has the following functionalities: user registration, registration of official methods, allows the adaptation of an official method by any user of the system, sharing of methods between system users, generation of Qr code for each official and adapted method, researcher's professional diary to make notes of adapted methods, among others. Thus, the developed solution will support academics, teachers and researchers in practical classes and laboratory routines, enabling the optimization of the dynamics of scientific experimentation in the laboratory environment and the maximization of the dissemination of adaptations made within the scope of methodological practice.

Key-words: Method management. Technological Innovation, Analytical Method

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1: Fluxograma de análise química quantitativa.....	18
Figura 2: Formato de um método analítico da AOAC INTERNATIONAL.....	20
Figura 3: Publicações de artigos por área.....	22
Figura 4: Sistema CONFLAB	25
Figura 5: Fluxograma da metodologia e desenvolvimento do produto de software	27
Figura 6: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos na base dados do INPI.....	31
Figura 7: Página inicial do Sistema de Gestão de Métodos Analíticos.....	33
Figura 8: Página de autenticação do usuário do sistema	34
Figura 9: Cadastro de usuário.....	34
Figura 10: Menu minha conta	35
Figura 11: Menu administração.....	36
Figura 12: Cadastro de método oficial	37
Figura 13: Listagem de métodos oficiais.....	37
Figura 14: PDF gerado pelo Sistema.....	38
Figura 15: Página Meus métodos adaptados	39
Figura 16: Lista de métodos adaptados	40

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Publicações de órgãos governamentais do Brasil relacionados a métodos oficiais e validação de métodos analíticos	21
Tabela 2: Registros de programa de computador no INPI	24
Tabela 3: Principais requisitos do sistema de gestão de métodos analíticos	28

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANVISA	Agência Nacional de Vigilância Sanitária
AOAC	Association of Official Analytical Collaboration
EMEA	European Medicine Agency
FDA	Food and Drug Agency
IAL	Instituto Adolfo Lutz
ICH	International Conference on Harmonisation
INMETRO	Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia
INPI	Instituto Nacional da Propriedade Industrial
IUPAC	International Union of Pure and Applied Chemistry
LaCiMP	Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos
MAPA	Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento
MHLW	Ministry of Health, Labour and Welfare
NIT	Núcleo de Inovação Tecnológica
PROFNIT	Programa de Pós-Graduação em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para a Inovação
UFT	Universidade Federal do Tocantins

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	14
1.1	Justificativa	15
1.2	Objetivos	15
1.2.1	Objetivo Geral	15
1.2.2	Objetivos Específicos	16
1.3	Estrutura do trabalho.....	16
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	17
2.1	Métodos analíticos.....	17
2.2	Limitantes no acesso a metodologias analíticas	21
2.3	Sistemas aplicados a gestão de laboratórios de análise química	23
3	METODOLOGIA.....	26
3.1	Local do estudo	26
3.2	Procedimentos metodológicos.....	27
3.2.1	Etapa 1: Levantamento bibliográfico.....	27
3.2.2	Etapa 2:Levantamento de Requisitos.....	28
3.2.3	Etapa 3: Criação do banco de dados	29
3.2.4	Etapa 4: Desenvolvimento do sistema e testes	30
3.2.5	Etapa 5: Proteção da criação.....	31
4	RESULTADOS E ANÁLISE.....	32
4.1	Sistema de Gestão Métodos Analíticos	32
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	41
3.2	Trabalhos futuros	42
3.3	Produtos de entrega do tcc.....	42
	REFERÊNCIAS	43
	ANEXO 1 – ARTIGO PUBLICADO	47
	ANEXO 2 – CERTIFICADO DE REGISTRO DE PROGRMA DE COMPUTADOR..	54
	APÊNDICE A - MANUAL DO USUÁRIO.....	55

1 INTRODUÇÃO

A química analítica estuda a elaboração e a teoria dos métodos de análise química, os quais permitem determinar a composição qualitativa e quantitativa das substâncias, desempenhando um papel importante em muitas áreas da ciência: alimentos, agrícola, ambiental, farmacêutica, medicina, entre outras. (FORTE, MELO PACHECO e QUEIROZ, 2019). A análise qualitativa trata dos métodos para determinar a natureza dos constituintes de uma substância revelando a identidade dos elementos e compostos de uma amostra, enquanto as análises quantitativas consistem nos métodos para determinar a proporção na qual os constituintes estão presentes em uma amostra. (SKOOG, 2016; HALL e TREADWELL, 1921).

Nesse contexto, existem diversas metodologias analíticas oficiais recomendadas pelos órgãos de controle nacionais e internacionais para padronizar e garantir a qualidade e confiabilidade dos resultados das análises. Assim, para que um método seja oficialmente reconhecido necessita ser validado seguindo os parâmetros estabelecidos. Segundo a Agência Nacional de Vigilância Sanitária - ANVISA esse processo de validação consiste em demonstrar que o método analítico produz resultados confiáveis e é adequado à finalidade a que se destina, de forma documentada e mediante critérios objetivos. (ANVISA,2017).

No âmbito global as associações científicas sem fins lucrativos, Association of Official Analytical Collaboration (AOAC) International, American Water Works Association, Water Environment Federation, entre outras, reúnem membros, organizações e especialistas dedicados ao desenvolvimento e validação de padrões, métodos e tecnologias de relevância global. Outro órgão oficialmente reconhecido por padronizar metodologias analíticas é o Instituto Adolfo Lutz que descreve protocolos para análise de água, alimentos, dentre outros. (ZENEON, PASCUET e TIGLEA, 2008).

De maneira geral, pesquisadores utilizam diariamente esses métodos analíticos em pesquisas, laudos técnicos, inovações tecnológicas e aulas práticas. No entanto, de acordo com a amostra a ser analisada e a disponibilidade de infraestrutura, algumas adaptações são corriqueiras e necessárias.

Assim, este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma solução de tecnológica para gestão de métodos analíticos para dar suporte a acadêmicos, docentes, pesquisadores e responsáveis técnicos em aulas práticas e rotinas laboratoriais, possibilitando aos usuários,

inclusive, além de adaptações, observações e compartilhamento de experiência técnica acerca do método em uso.

1.1 Justificativa

Os laboratórios analíticos desempenham uma série de funções, incluindo controle dos métodos analíticos utilizados, além da gestão de recursos materiais e humanos envolvido no processo de caracterização quantitativa e qualitativa de amostras. Baird et al (2017) destaca que a função de um laboratório analítico é produzir dados baseados em medições que sejam tecnicamente válidos, legalmente defensáveis e de qualidade conhecida. Nesse contexto, Cecchi (2003) considera que, de maneira geral, os processos analíticos são utilizados tanto para pesquisa de novas metodologias analítica, quanto para o desenvolvimento de novos produtos e controle de qualidade dos produtos existentes, gerando uma demanda por uma gestão operacional eficiente e cuidadosa. Para Skobelev et al. (2011) é imprescindível, portanto, o desenvolvimento de sistemas de gerenciamento de informações para implementação bem-sucedida dessas atividades de gestão.

Acerca do fluxo de informações geradas em laboratórios analíticos, Heinle et al. (2017) chamam a atenção para o grande volume de etapas, processos e recursos que requerem cuidado e precisão, criando a necessidade de ferramentas inovadoras para o gerenciamento de métodos, que vão além dos blocos de anotações e planilhas tradicionais de controle. Nesse sentido, a implementação de um produto inovador promoverá o aperfeiçoamento no ambiente produtivo, resultando em novos produtos, serviços ou processos ou que compreendam a agregação de novas funcionalidades ou características (BRASIL, 2016).

Assim, destaca-se a relevância do desenvolvimento de uma ferramenta de apoio para gerir, auxiliar na execução de métodos analíticos, manter uma base de dados de métodos oficiais e adaptados acessíveis, além de possibilitar o acesso rápido através da tecnologia QR Code, tornando-se uma ferramenta inovadora, com objetivo de ser implementado nos laboratórios de análise de alimentos da Universidade Federal do Tocantins.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

Desenvolver uma solução de Tecnologia da Informação para gestão de métodos analíticos para análise química, tendo como estudo de caso laboratórios de análise de alimentos da Universidade Federal do Tocantins.

1.2.2 Objetivos Específicos

1. Compreender o fluxo de execução, operacionalização e uso de metodologias analíticas aplicadas a análises químicas no ambiente laboratorial;
2. Definir os requisitos do sistema;
3. Modelar o banco de dados;
4. Implementar algoritmo para a geração de QR Code automático para cada método;
5. Codificar a sistema;
6. Proteger a criação através do registro de programa de computador.

1.3 Estrutura do trabalho

O trabalho está organizado em 5 capítulos correlacionados. O Capítulo 1, Introdução, apresentou por meio de sua contextualização o tema proposto neste trabalho. Da mesma forma foram estabelecidos os resultados esperados por meio da definição de seus objetivos.

O capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica, o capítulo 3 a metodologia utilizada, o capítulo 4 apresenta os resultados e análises; e por fim, no capítulo 5 são tecidas as considerações finais. São ainda propostas possibilidades de continuação da pesquisa desenvolvida a partir das experiências adquiridas com a execução do trabalho.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, busca-se compreender através de uma revisão de literatura os conceitos relacionados às metodologias analíticas aplicadas em análises químicas, além de identificar por meio de buscas, na base de registro de programa de computador do Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI) e em publicações de artigos nacionais e internacionais, sistemas desenvolvidos para laboratórios de química que podem estar associados a gestão de métodos analíticos.

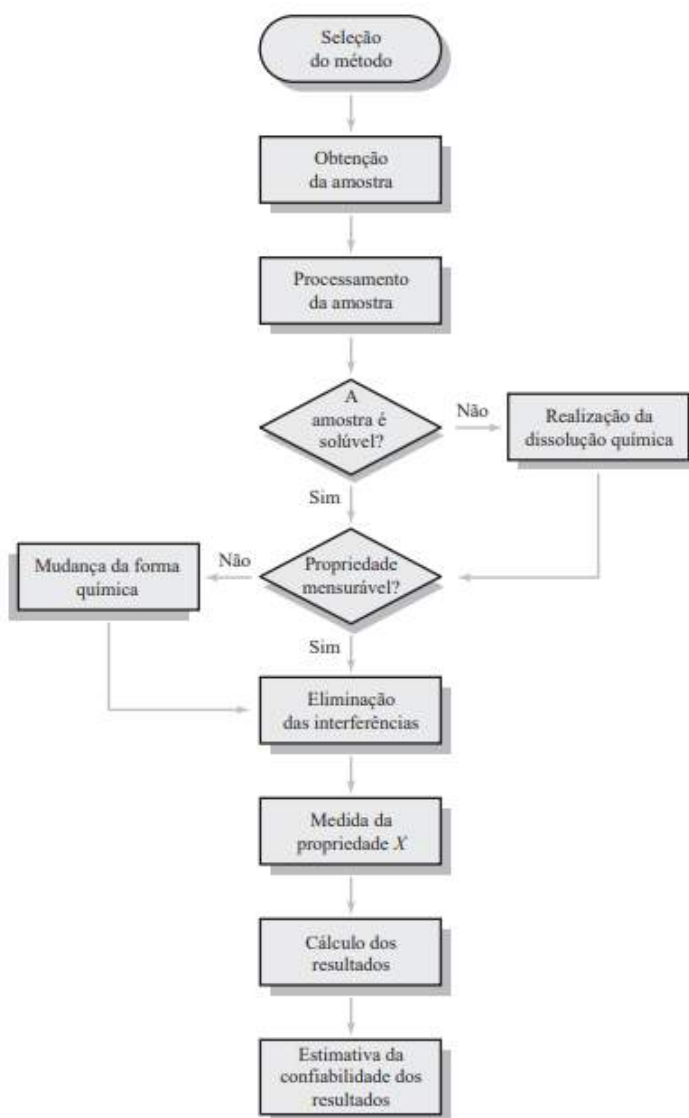
2.1 Métodos analíticos

Os métodos analíticos referem-se à forma de realização da análise e descrevem em detalhes as etapas necessárias para realizar cada teste analítico. Isso pode incluir: a amostra, preparo de reagentes, uso de aparelhos, uso de fórmulas para cálculos etc. A análise consiste na coleta de amostra, decomposição, separação, concentração, detecção e medição, tratamento e avaliação de dados analíticos. (FDA, 1995; ARIKAWA,2002).

Os métodos analíticos podem ser classificados em métodos clássicos e métodos instrumentais. Os métodos clássicos foram as únicas técnicas utilizadas até os surgimentos de instrumentos tecnologicamente apropriados, capazes de avaliar as propriedades físicas, como as propriedades elétricas, ópticas e térmicas das amostras (MATOS,2015)

[...] métodos instrumentais envolvem medidas de propriedades do sistema investigado, tais como as propriedades elétricas (voltagem, condutividade, corrente elétrica) e óticas (por exemplo, absorbância) destacando-se os métodos eletroanalíticos (potenciometria e condutometria) e os métodos espectrofotométricos (VASCONCELOS, 2019, p.49).

Nesse contexto, Skoog (2016) demonstra as etapas envolvidas em uma análise quantitativa que podem ser visualizadas na Figura 1. Para cada análise é realizado etapas predefinidas incluindo a seleção do método. Estes métodos são encontrados de forma abundante em bases científicas e em publicações oficiais de órgãos governamentais.

Figura 1: Fluxograma de análise química quantitativa

Fonte:(SKOOG, 2016)

Para execução de métodos analíticos, também são utilizadas técnicas analíticas, que são os procedimentos ou instrumentação utilizados para a determinação qualitativa ou quantitativa da concentração de um composto. São exemplos de técnicas: titulações, espectroscopias, cromatografia e análise gravimétrica entre outras (OMICSONLINE, 2020). Um exemplo de uso de técnica analítica, ocorre quando pretende-se realizar a análise de água, quando ocorre a concentração de contaminantes, sendo necessário o uso de técnicas analíticas de alta sensibilidade para detectá-los e quantificá-los (SANTOS, GONÇALVES e COUTO, 2008)

Dada a importância de uso de métodos analíticos, órgãos oficiais como o Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia (INMETRO) destaca que é de fundamental

importância que os laboratórios disponham de meios, critérios e objetivos para comprovar e validar os métodos de ensaio que executam conduzem a resultados confiáveis e adequados à qualidade pretendida (INMETRO, 2020). A validação de método é uma das medidas universalmente reconhecidas como parte necessária de um sistema abrangente de garantia de qualidade. No intuito de padronizar estes procedimentos, a União Internacional de Química Pura e Aplicada - IUPAC disponibiliza diretrizes sobre a validação de métodos de análise em laboratório (IUPAC,2020). Essas diretrizes fornecem recomendações mínimas sobre procedimentos que devem ser empregados para garantir a validação adequada dos métodos (THOMPSON, ELLISON e WOOD, 2002).

Neste contexto, os métodos analíticos são considerados normalizados quando são desenvolvidos por um organismo de normalização. Já os métodos analíticos não normalizados são aqueles desenvolvidos pelo próprio laboratório, ou adaptado a partir de métodos normalizados e validados, ou seja, são aqueles desenvolvidos ou adaptados para atender especificidades da análise (INMETRO, 2007, 2013).

No início da década de 1990 as agências reguladoras dos Estados Unidos, Japão e Europa: FDA - Agência Federal do Departamento de Saúde e Serviços Humanos dos Estados Unidos, MHLW – Trabalho e Bem Estar do Japão, EMEA- Agência Europeia de Medicamentos, respectivamente, organizaram a Conferência Internacional de Harmonização - ICH, na qual tinha como umas das metas, a publicação de guias contendo as características e parâmetros a serem consideradas durante a validação dos procedimentos analíticos (ICH, 1995).

Existem diversas associações e órgãos internacionais que desenvolvem, validam e publicam métodos analíticos, entre eles está a Association of Official Analytical Collaboration - AOAC INTERNATIONAL, referenciada em diversas publicações de métodos analíticos. A associação reúne governos, indústrias e academia para desenvolver e validar métodos de análise com objetivo garantir a segurança e a integridade de alimentos.

Figura 2: Formato de um método analítico da AOAC INTERNATIONAL

Guia para o formato do método
(O método mostrado está incompleto para permitir espaço para descrição)

O número do localizador identifica um método por capítulo, subcapítulo e sequência dentro do subcapítulo para facilitar a localização. 50 = Capítulo 50, 2 = subcapítulo 2; 10 = 10º método encontrado no capítulo 50, subcapítulo 2.

Declaração de aplicabilidade específica: utilidade e limitações no escopo do método e outras informações pertinentes.

Declaração de advertência específica: precauções e possíveis perigos no transporte, incluindo segurança, informações sobre equipamentos técnicas e práticas e manuseio seguro de produtos químicos, ácidos, alcalis, microorganismos e solventes.

Os símbolos de cálculo são definidos e devem mostrar unidades corretas.

Definição dos símbolos de cálculo e exibe unidades corretas.

O método pode incluir produtos químicos. Serviço de resumos (CAS) números de registro, identificadores únicos usados para pesquisar uma série de recuperação de dados do sistema.

50.2.10

AOAC Official Method 2016.05

Analysis of Vitamin D₂ and Vitamin D₃ in Fortified Milk Powders, Infant Formulas, and Adult/Pediatric Nutritional Formulas

Liquid Chromatography–Tandem Mass Spectrometry

First Action 2016
Final Action 2017

AOAC–ISO Method*

(Applicable to the determination of total vitamin D₂ and vitamin D₃ in fortified milk powders, infant formulas, and adult/pediatric nutritional formulas.)

Caution: Refer to the Material Safety Data Sheets for all chemicals prior to use. Use all appropriate personal protective equipment and follow good laboratory practices.

A. Princípio

Samples are saponified at high temperature, and then lipid-soluble components are extracted into isooctane. A portion of the isooctane layer is transferred and washed, and an aliquot of 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione (PTAD) is added to derivatize vitamin D to form a high-molecular-mass, easily ionizable adduct.

B. Aparelho

(a) *Ultra-high-performance LC (UHPLC) system.*—Nexera (Shimadzu, Kyoto, Japan) or equivalent LC system, consisting of a dual pump system, sample injector unit, degasser unit, and column oven.

C. Reagentes

(a) *Vitamin D₂ (ergocalciferol).*—CAS No. 50-14-6, purity: ≥99%.

D. Preparação do Reagente

(a) *PTAD solution (10 mg/mL).*—To a 5 mL volumetric flask, add 50 mg PTAD, then add 4 mL acetone, and dissolve; dilute to volume with acetone. Expiry: 1 day.

E. Preparação Padrão

Vitamin D is sensitive to light. Perform all steps under UV-shielded lighting. If vitamin D₂ is exclusively required for analysis, then standards pertaining to vitamin D₂ need not be used and vice versa.

J. Cálculos

(a) *Concentration of SIL vitamin D₂ in SILD₂SS.*—

$$\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{Determined}} = \frac{\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{Std}(100\mu\text{g/mL})} \times 10000}{E_{1\text{cm}}^{1\%}}$$

where SILD₂SS_{Determined} = concentration of *de*-vitamin D₂ in the stock standard (μg/mL); SILD₂SS_{Std(100μg/mL)} = UV absorbance of the stock standard at 265 nm (cm⁻¹); E_{1cm}^{1%} = extinction coefficient for vitamin D₂ in ethanol (461 dL/g-cm); and 10000 = concentration conversion factor (g/dL to μg/mL).

References: *J. AOAC Int.* **99**, 1321(2016)
DOI: 10.5740/jaoacint.16-0160 (First Action)
J. AOAC Int. **101**, 256(2018)
DOI: 10.5740/jaoacint.17-0149 (Final Action)
J. AOAC Int. **95**, 292(2012) (AOAC SMPR 2011.004)
DOI: 10.5740/jaoac.int.11-0440

CAS-50-14-6 (ergocalciferol)

Revised: January 2019

O número do método é uma modificação permanente que identifica um método por ano e sequência de adoção. 2016 = Primeira Ação 2016, 05 = 5º método adotado em 2016.

O título normalmente inclui analito e matriz, técnica e status oficial (Primeira Ação, Ação final, revisada primeiro Ação, Revogada).

Os métodos são divididos em várias seções descritivas, incluindo especificações para laboratório necessário; aparelho, reagente, preparativos. Veja também Definição de Termos e Notas explicativas.

Referências direcionam o usuário para validação publicada, estudos (único e / ou multilaboratório), subseqüente revisões e relevantes SMPRs®. Outros informativos, referências podem ser incluídas.

Data de revisão no final do método significa que o método recebeu menor revisões editoriais (que não afeta os procedimentos do método).

xxi

© 2019 AOAC INTERNATIONAL

Fonte: OMA(2021) traduzido pelo autor.

A Figura 2 apresenta um exemplo do formato de um método publicado pela AOAC, através do programa Official Methods of Analysis (OMA), responsável por manter a coleção de métodos químicos e microbiológicos, usados na indústria, agências reguladoras, organizações de pesquisa, laboratórios de análise e instituições acadêmicas. Muitos países e organizações contribuem com sua expertise para o desenvolvimento de padrões e validação de métodos. (AOAC,2020).

No Brasil o INMETRO e ANVISA são os responsáveis pela publicação de normas de validação de métodos analíticos. O Instituto Adolfo Lutz realiza publicações de métodos analíticos e disponibiliza para laboratórios e comunidade científica em geral, centenas de métodos analíticos para análise de alimentos.

O Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento - MAPA também realiza publicações sobre métodos analíticos referente a fertilizantes e corretivos; controle de leite e produtos derivados; e alimentos de origem animal. Algumas dessas publicações estão listadas na Tabela 1 e abrangem guias e manuais contendo métodos amplamente reconhecidos e procedimentos de validação.

Tabela 1: Publicações de órgãos governamentais do Brasil relacionados a métodos oficiais e validação de métodos analíticos

ÓRGÃO	PUBLICAÇÃO
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento -MAPA	Manual de Métodos Analíticos Oficiais para Fertilizantes e Corretivos
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento -MAPA	Manual de Garantia da Qualidade Analítica Áreas de Identidade e Qualidade de Alimentos e de Insumos
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento- MAPA	Métodos Analíticos Oficiais Físico-Químicos para Controle de Leite e Produtos Lácteos
Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento -MAPA	Métodos Analíticos Oficiais para Análises de Alimentos de origem animal
Instituto Adolfo Lutz	Métodos físico-químicos para análise de alimentos
Agência Nacional de Vigilância Sanitária - ANVISA	RDC Nº 166 - Critérios para validação de métodos analíticos empregados em insumos farmacêuticos, medicamentos e produtos biológicos em todas as suas fases de produção
Instituto Nacional de Metrologia, Qualidade e Tecnologia - INMETRO	DOQ-CGCRE-008: Orientação sobre validação de métodos analíticos

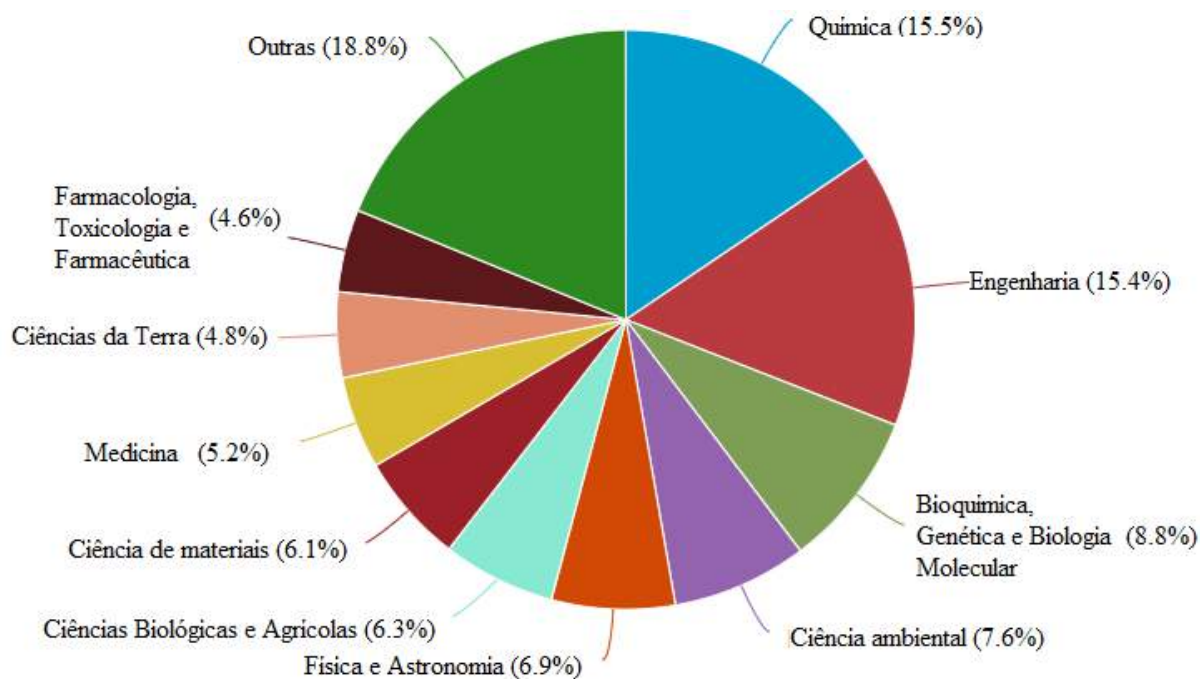
Fonte: Elaborado pelo autor.

2.2 Limitantes no acesso a metodologias analíticas

Existe uma grande variedade de metodologias publicadas em diversas bases de dados, em revistas científicas, em documentos oficiais de órgãos governamentais e associações

internacionais. Essa afirmação pode ser confirmada, ao realizar uma busca na plataforma SCOPUS utilizando os termos TITLE-ABS-KEY ("analytical method") AND (LIMIT-TO (DOCTYPE , "ar")), na qual, resultaram em mais de 87 mil publicações entre 1896 a 2020.

Figura 3: Publicações de artigos por área



Fonte:(SCOPUS, 2020) traduzido pelo autor

Esta busca apresenta no gráfico da Figura 3 apresenta as publicações de artigos por área, demonstrando a amplitude de áreas associadas a química analítica e enfatiza a importância de métodos analíticos para diversos fins. Para um método ser reconhecido e ser padronizado por um órgão regulador, é necessário à validação, realizada por um estudo interlaboratorial, que avalie o desempenho do método. Tal estudo de validação envolve tempo e custos para os membros participantes do estudo (MANO, TAKABATAKE e KITTA, 2020).

Se um método existente for modificado para atender aos requisitos específicos ou um método totalmente novo for desenvolvido, o laboratório deve se assegurar de que as características de desempenho do método atendam aos requisitos para as operações analíticas pretendidas. Para métodos modificados (normalizados ou não) ou desenvolvidos pelo laboratório, existe uma série de parâmetros a serem avaliados para garantir a adequação do método ao uso pretendido. (INMETRO, 2020). Nesse sentido, os sistemas de gestão de laboratório usualmente apresentam características de suporte, porém sem compartilhamento de informações e adaptações, gerando duplicação de esforços e, conseqüentemente aumento

de custos e dispêndio de tempo no uso de recursos humanos e materiais para aplicação e desenvolvimento de métodos.

2.3 Sistemas aplicados a gestão de laboratórios de análise química

Um Sistema de Gerenciamento de Informações de Laboratório é um produto de software aplicativo baseado em computador usado no laboratório para gerenciar análises e amostras padrão, resultados de testes, equipe de laboratório e equipamentos analíticos, bem como para o objetivo de gerar relatórios e outras funções (SKOBELEV et al, 2011).

Nesse contexto, Mclelland(1998) destaca como um sistema de gerenciamento de informações de laboratório é percebido dependendo do ponto de vista usuário:

- Para um analista, é de fato o sistema de computador que faz interface com seu analisador, calcula, armazena e imprime resultados;
- Para um gerente de laboratório, é o sistema que permite rastrear amostras, identifica seu atual status, audita seus tempos de resposta e fornece dados sobre sua base de clientes de forma organizada;
- Para um analista de sistemas de informações de gerenciamento, no entanto, o produto pode e deve ser um sistema alimentador, que transmite dados de gerenciamento de recursos para o mainframe corporativo e;
- Para um contador, ele pode integrar os custos do laboratório na fatura do cliente.

Atualmente, os sistemas de gestão em sua maioria são desenvolvidos na arquitetura cliente-servidor, no qual o processamento de requisições e banco de dados estão localizadas no servidor¹, enquanto a interface gráfica do sistema está presente no cliente².

É possível exemplificar essa arquitetura quando se realiza uma busca no Google®. Ao acessar a página inicial é carregado no dispositivo do usuário a interface gráfica do sistema de busca do Google® e quando executamos a busca de qualquer expressão, esta requisição é enviada para algum servidor localizado em alguma parte do mundo, onde é processado e em seguida é retornado para o dispositivo, a página com resultado da busca.

¹ Computador dedicado a hospedar serviços: página de internet, sistemas, e-mails, banco de dados e etc.

² Cliente é um software utilizado para acessar serviços disponíveis no servidor. Exemplo: navegador de internet

Em busca realizada na base de dados de consulta de registros de programas de computador do Instituto Nacional da Propriedade Industrial - INPI, utilizando o termo de busca, “Laboratório and química”, e critério de busca “qualquer uma das palavras”, foram encontrados entre 1993 a 2020, 52 processos de pedidos de registro de programa de computador. Entre eles estão listados na Tabela 2 alguns registros que podem estar relacionados a gestão métodos analíticos.

Tabela 2: Registros de programa de computador no INPI

CÓDIGO DE REGISTRO	ANO DO PEDIDO	TÍTULO
BR 51 2018 052037 5	2018	CFQ - Calculadora Físico-Química
BR 51 2017 001004 8	2017	Sistema inteligente para controle de reagentes utilizados nas práticas laboratoriais do curso em licenciatura em química
BR 51 2016 001346 0	2016	ILABORATORY: Laboratório virtual de química
BR 51 2015 000222 8	2015	LABWIN-Software de metrologia química
BR 51 2019 000570 8	2019	BIT LABS - Aplicação para gerenciamento de laboratório de bromatologia
05277-5	2010	SILAS Sistema Informatizado para laboratórios de análise

Fonte: Dados extraídos da INPI(2020)

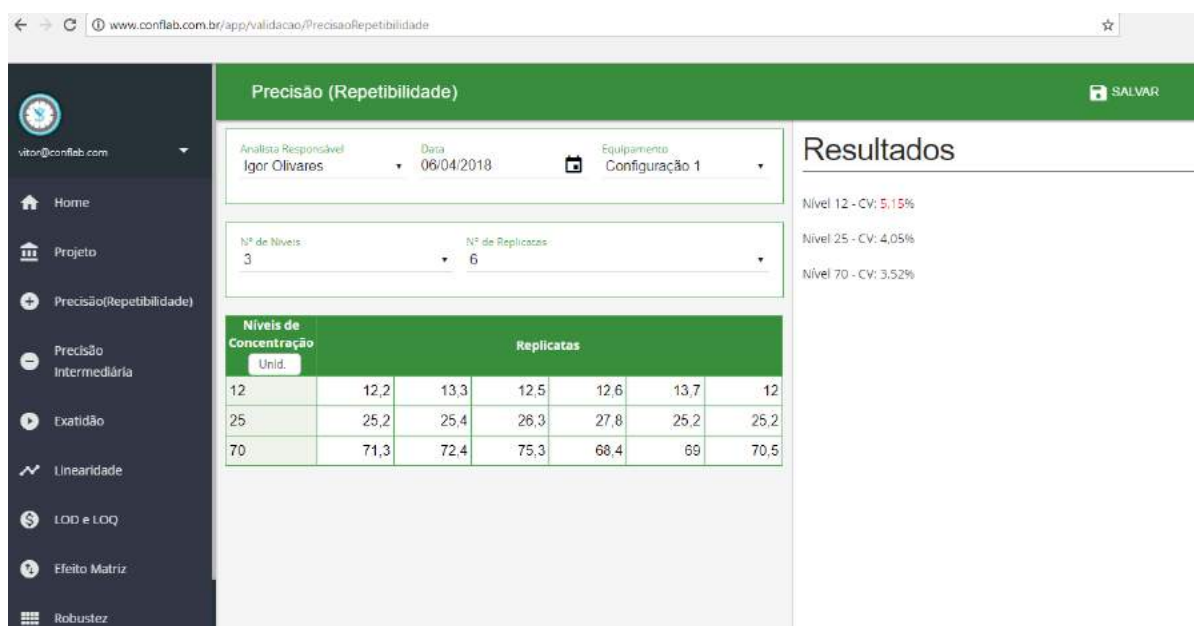
O iLaboratory é um aplicativo para iphone desenvolvido na Universidade Federal do ABC que atua como um simulador de laboratório de química limitando-se reprodução de experimentos de teste de chama e teste úmido (BERTOLINI et al, 2013).

O Sistema LABWIN é um software proprietário que se propõe ao gerenciamento de dados de laboratórios e de processos industriais; gerenciamento de programas de ensaios de proficiência (interlaboratoriais), validação de métodos, cálculos de incertezas, controle de documentos de qualidade e outras funções (LABWIN,2020). No entanto, o sistema é focado para ambientes industriais, não sendo ideal para ambientes acadêmicos.

O Sistema Informatizado para Laboratórios de Análise - SILAS também é software proprietário desenvolvido para análise: química de solo, física de solo, foliar ou tecido vegetal, sementes; calcário, sal mineral e fertilizantes; nutrientes (aminoácidos) e outros (SILAS,2020). Nesse contexto, trata-se de um software específico e que apresenta funcionalidades direcionadas para análise, não especificamente para gestão de métodos analíticos.

Fora da base de dados do INPI foram encontrados os softwares proprietários ConfLab e o EffiValidation: O Software ConfLab (Figura 4) apresenta o módulo de validação, que contempla todos os testes estatísticos; o módulo de incerteza que faz uma estimativa utilizando de informações da validação além dos equipamentos aplicados na execução do método; e o módulo de controle da qualidade capaz de monitorar os resultados durante a rotina a partir de cartas de controle (CONFLAB, 2021).

Figura 4: Sistema CONFLAB



Fonte: CONFLAB (2021)

Não obstante, o EffiValidation - Software de Validação de Métodos ANVISA, realiza a validação de método e avaliação de dados estatísticos: a estimativa de incertezas, gráficos de controle, calibrações analíticas de comparação Inter laboratorial; O software gerência laboratório: para gerenciar Amostras, especificações, métodos, equipamentos, materiais de referência e resultados fora da especificação (DCTECH, 2021).

De maneira geral, observa-se que os softwares presentes no mercado visam o atendimento a uma demanda específica, com limitações de funcionalidades para a operacionalização e gestão de laboratórios analíticos para fins acadêmicos, lançando, portanto, uma demanda por esse produto. O capítulo seguinte apresenta a metodológica utilizada para o desenvolvimento do produto tecnológico.

3 METODOLOGIA

Este capítulo apresenta a metodologia utilizada para alcançar os objetivos do trabalho, a pesquisa foi motivada com intuito de desenvolver uma solução de tecnologia da informação para gestão de métodos analíticos a ser implementado nos laboratórios de análise de alimentos da Universidade Federal do Tocantins (UFT). Neste sentido, a pesquisa pode ser caracterizada de natureza aplicada, pois segundo GIL (2008, p.27) esse tipo de pesquisa “tem como característica fundamental o interesse na aplicação, utilização e consequências práticas dos conhecimentos”.

Sob o ponto de vista da forma de abordagem do problema, a pesquisa realizou um estudo de caso no laboratório de Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos (LaCiMP) do Campus universitário de Palmas-UFT, onde realiza análises químicas e adaptações de métodos para análise de alimentos. Quanto ao desenvolvimento do sistema foi utilizado a metodologia de desenvolvimento ágil, onde as entregas e módulos do sistema foram realizadas de forma incremental. Nesta abordagem “o software não é desenvolvido como uma única unidade, mas como uma série de incrementos - cada incremento inclui uma nova funcionalidade do sistema” SOMERVILLE (2011, p.39).

3.1 Local do estudo

Trata-se do Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos (LaCiMP) do Campus universitário de Palmas da Universidade Federal do Tocantins, localizado no Bloco 2, Sala 6, que faz parte do rol de laboratórios do curso de Engenharia de alimentos, além de atender as áreas de saúde, engenharias, agrárias e biotecnológicas.

O LaCiMP atualmente é coordenado pelos pesquisadores: Dr. Thiago Lucas de Abreu Lima e Dra. Glêndara Aparecida de Souza Martins; e apoio administrativo da técnica em laboratório Josineide Pereira de Sousa. O laboratório desenvolve atividades de análise de umidade, lipídios, acidez titulável, pH, atividade antioxidante, açúcares redutores e não redutores (titulação), densidade entre outros (UFT, 2020).

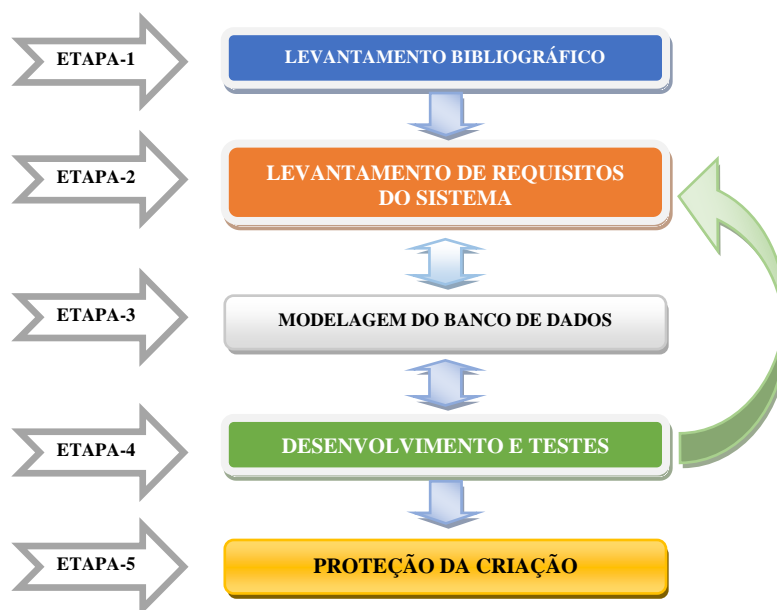
De maneira geral, para desenvolver as atividades de análise, os pesquisadores e alunos utilizam métodos analíticos oficiais e dependendo da especificidade de cada análise, esses

métodos podem ser adaptados. No entanto, não há um sistema informatizado específico para gestão de métodos analíticos implantado na UFT que possa gerenciar e armazenar essas metodologias analíticas, gerando um volume de métodos adaptados, mas sem uma forma de controle adequada, podendo ocasionar um retrabalho ao adaptar um método já realizado por diferentes pesquisadores ao longo do tempo.

3.2 Procedimentos metodológicos

Nesta sessão, será demonstrados os procedimentos metodológicos da pesquisa e etapas realizados para o desenvolvimento da solução de tecnologia da informação para gestão de métodos analíticos. As etapas da pesquisa e do desenvolvimento do sistema está representada na Figura 5 e serão detalhadas a seguir.

Figura 5: Fluxograma da metodologia e desenvolvimento do produto de software



Fonte: Elaborado pelo autor

3.2.1 Etapa 1: Levantamento bibliográfico

Primeiramente, a pesquisa iniciou-se com uma revisão da literatura, através de uma pesquisa bibliográfica, com a leitura e fichamento de obras e artigos, partindo-se da bibliografia básica e produções acadêmicas relacionadas às metodologias analíticas para análise química. A vantagem da pesquisa bibliográfica segundo GIL (2002, p.45) “reside no fato de permitir ao investigador a cobertura de uma gama de fenômenos muito mais amplo do

que aquele que poderia pesquisar diretamente”. O levantamento bibliográfico realizado, contribuiu para compreender o fluxo de execução e operacionalização de metodologias analíticas aplicadas a análises químicas, o que colaborou para levantamento de requisitos do sistema definidos na etapa seguinte.

3.2.2 Etapa 2: Levantamento de Requisitos

Devido a pandemia do COVID-19, tornou-se inviável a realização de coleta de dados presenciais no laboratório, então optou-se por realizar o levantamento de requisitos do sistema através reuniões por videochamada e grupo de WhatsApp® com os stakeholders do projeto, e assim compreender a dinâmica de uso de métodos analíticas no ambiente laboratorial e o que se espera do sistema, levando em consideração as funcionalidades da solução. “Um requisito compreende uma característica ou funcionalidade que o sistema deve possuir ou uma restrição que deve satisfazer para atender uma necessidade do usuário” (DEVMEDIA, 2020). Os requisitos definidos levaram em consideração o tempo para desenvolvimento e o cronograma da pesquisa, os principais requisitos estão listados na Tabela 3.

Tabela 3: Principais requisitos do sistema de gestão de métodos analíticos

CÓDIGO	REQUISITOS DO SISTEMA
R001	O sistema deve cadastrar métodos analíticos oficiais
R002	No cadastro dos métodos analíticos oficiais deve-se levar em consideração o modelo de publicação de métodos analíticos da AOAC e do Instituto Adolf Lutz possuindo os seguintes atributos base: origem, classificação, código, título, descrição, material, reagente(s), procedimento, cálculo e referência bibliográfica
R003	O sistema deve possibilitar a adaptação a partir de um método oficial já cadastrado na plataforma
R004	O sistema deve gerar um Qr code para cada método cadastrado e adaptado no sistema
R005	O sistema de deve gerar possibilitar a geração de PDF para cada método oficial/adaptado
R006	O sistema deve gerenciar o controle de acesso através de autenticação com login e senha
R007	O sistema de deve listar todos os métodos adaptados a partir de cada método oficial

R008	O sistema deve permitir o compartilhamento de métodos adaptados para permissão de comentários aos membros da equipe de adaptação.
R009	O sistema deve possuir um diário profissional do pesquisador, onde deve armazenar todos os comentários dos seus métodos adaptados
R010	O sistema deve possibilitar a busca de métodos oficiais e adaptados
R011	O sistema deve ser acessado por qualquer dispositivo conectado a internet
R012	O sistema deve exibir a quantidade de métodos cadastrados e adaptados no banco de dados na página inicial do sistema
R013	O sistema deve possuir a opção de cadastro de novo usuário do sistema
R014	O sistema deve possuir a opção de listar todos os métodos cadastrado pelo usuário administrador do sistema
R015	O sistema deve possuir a opção de fale conosco, para envio de sugestão e feedback dos usuários do sistema para a equipe de desenvolvimento.
R016	O sistema deve cadastrar a origem de cada método oficial
R017	O sistema deve possibilitar o cadastro de classificações de métodos

Fonte: Elaborado pelo autor

Para cada requisito ou grupo de requisitos dependentes era então definido o modulo do sistema que seria codificado, implementado e realizado os testes. Após o levantamento de requisitos foi então iniciado a etapa de desenvolvimento e criação do banco de dados com base em cada requisito.

3.2.3 Etapa 3: Criação do banco de dados

Com base nos requisitos levantados, iniciou-se então a fase de desenvolvimento(codificação) em conjunto com modelagem do banco dados, para cada requisito foi definido a estratégia de relacionamento das tabelas de banco de dados. Esta etapa é uma das mais importantes, uma vez que se fosse identificado algum equívoco no relacionamento das tabelas ao final do desenvolvimento, todo o tempo dedicado a codificação do sistema poderia ser perdido, uma vez que, poderia ter de refazer todo ou parte o código do modulo específico. Para ELMASRI (2005, p.3) “um banco de dados é projetado, construído e povoado por dados, atendendo a uma proposta específica. Possui um grupo de usuários definido e algumas aplicações preconcebidas, de acordo com o interesse desse grupo de

usuários”. O banco de dados escolhido para a implementação das tabelas durante o desenvolvimento foi o SQLITE, contudo o sistema permite a migração de forma rápida para qualquer Sistema de Gerenciamento de Banco de Dados (SGBD).

3.2.4 Etapa 4: Desenvolvimento do sistema e testes

Para o desenvolvimento do Sistema de Gestão de Métodos Analíticos foi utilizado práticas de desenvolvimento ágil, nessa abordagem “o sistema é desenvolvido em uma série de versões. Os usuários finais e outros stakeholders do sistema são envolvidos na especificação e avaliação de cada versão. Eles podem propor alterações ao software e novos requisitos que devem ser implementados em uma versão posterior do sistema” SOMERVILLE (2011, p.39). Neste sentido cada modulo do sistema desenvolvido foi realizado testes e alterações quando necessárias.

A solução foi desenvolvida utilizando a linguagem de programação Python e o framework Django. A escolha dessa linguagem de programação se deu pelo fato de ser uma tecnologia para desenvolvimento ágil e com uma vasta documentação disponível na web.

A aplicação web foi hospedada na plataforma PythonAnywhere, com o seguinte endereço URL, <http://sgmetodos.pythonanywhere.com/>, onde os envolvidos no projeto puderam acessar por meio de qualquer dispositivo através do navegador de internet e assim visualizar, testar cada modulo implementado e retornar com o feedback, sem a necessidade de demonstração presencial.

Para cada módulo codificado, era realizado uma reunião de apresentação através da plataforma Meet com os stakeholders do projeto, com o objetivo de realizar a aprovação do requisito implementado e caso o feedback fosse positivo, era então iniciado o desenvolvimento do modulo seguinte, caso contrário era analisado, realizado as possíveis alterações e marcado uma nova reunião de aprovação.

Para o controle de versões do sistema foi utilizado a plataforma Github®, onde foi armazenado de forma segura todo o código-fonte e controle de todas as alterações realizadas durante o desenvolvimento da solução. Todo o processo de codificação foi escrito no editor Visual Studio Code em um notebook com o sistema operacional Windows® 10, core i5, 4GB de RAM e 500GB de HD.

O desenvolvimento da solução iniciou-se com a implementação da segurança, controle de acesso e permissões de cada tipo de usuário no sistema, partindo do cadastro e acesso as áreas específicas do sistema. Buscou-se utilizar as melhores práticas de desenvolvimento de

software, além de seguir a documentação oficial do framework Django, na qual, foi fundamental para correção de erros que surgiram durante na codificação.

A partir dessa segurança implementada, todas as funcionalidades do sistema, que foram sendo codificada, obedeceu aos critérios de segurança e controle de acesso. Foi implementado no sistema as funcionalidades de cadastro de métodos oficiais, geração de Qr Code, adaptação de método oficial, compartilhamento de métodos adaptados, geração de métodos em formato de PDF entre outras. Ao finalizar a codificação e teste de todas as funcionalidades do sistema previstas no levantamento de requisitos (Tabela 3), a solução então estava pronta para requerer a proteção da criação realizada na etapa seguinte.

3.2.5 Etapa 5: Proteção da criação

Ao final do desenvolvimento do produto, foi protocolado junto ao Núcleo de Inovação Tecnológica da Universidade Federal do Tocantins (NIT-UFT) o pedido de registro do programa de computador.

Apesar de não ser obrigatório por lei, o registro de programa de computador é fundamental para comprovar a autoria de seu desenvolvimento perante o Poder Judiciário, podendo ser muito útil em casos de processos relativos a concorrência desleal, cópias não autorizadas, pirataria, etc., garantindo, assim, maior segurança jurídica ao seu detentor para proteger o seu ativo de negócio. A validade do direito é de 50 anos a partir do dia 1º de janeiro do ano subsequente à sua publicação ou, na ausência desta, da sua criação (INPI,2020).

O Certificado de Registro de Programa de Computador foi emitido e pode ser encontrado na Base de Dados do INPI (Figura 6), intitulado Sistema de Gestão de Métodos Analíticos.

Figura 6: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos na base dados do INPI

Instituto Nacional da Propriedade Industrial Ministério da Economia							
Consulta à Base de Dados do INPI							
» Consultar por: Pesquisa Base Programas Finalizar Sessão							[Início Ajuda?]
Programa de Computador							
Nº do Pedido:	BR 51 2021 001390 5						
Data do Depósito:	23/06/2021						
Linguagem:	DJANGO / PYTHON						
Campo de Aplicação:	FQ-16						
Tipo Programa:	GI-01						
Título:	Sistema de Gestão de Métodos Analíticos						
Nome do Titular:	FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS						
Nome do Autor:	GLÊNARA APARECIDA DE SOUZA MARTINS / LUCIANO DE SOUSA MORAES / WARLEY GRAMACHO DA SILVA						
Nome do Procurador:							
Petições							
Pgo	Protocolo	Data	Img	Serviço	Cliente	Delivery	Data
✓	870210056591	23/06/2021	-	730	FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS		-
Publicações							
RPI	Data RPI	Despacho	Img	Complemento do Despacho			
2634	29/06/2021	730					

4 RESULTADOS E ANÁLISE

A solução desenvolvida possui características únicas: cadastro, adaptação e compartilhamento de métodos analíticos entre pesquisadores, docentes e alunos, o que garante a introdução de inovação no ambiente laboratorial da Universidade Federal do Tocantins. Além disso, após o registro do programa de computador, a solução desenvolvida poderá ser transferida para outros laboratórios e outras universidades e institutos federais. Na sessão seguinte será e apresentado a solução desenvolvida e as principais funcionalidades do produto.

4.1 Sistema de Gestão Métodos Analíticos

O Sistema de Gestão de Métodos Analíticos é uma solução web desenvolvida para o gerenciamento de métodos analíticos oficiais e adaptados aplicados à análise química. A solução é capaz de armazenar e gerenciar milhares de metodologias analíticas, utilizadas no ambiente acadêmicos e industriais. Para o levantamento de requisitos do sistema e desenvolvimento do produto, o trabalho teve como estudo de caso o Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos da Universidade Federal do Tocantins, onde aplica métodos oficiais e realiza adaptações por diversos pesquisadores da área de alimentos. Existe diversas metodologias analíticas aplicadas em diferentes áreas, contudo, o foco desta solução tecnológica é direcionado aos métodos relacionados a área de alimentos.

O sistema está na versão 1.56 e está hospedado em um ambiente acessível por qualquer dispositivo, através do navegador de internet no seguinte endereço eletrônico: <http://sgmetodos.pythonanywhere.com/> . A solução foi desenvolvida de forma responsiva, ou seja, as páginas do sistema se ajustam, alterando o layout, de acordo com o tamanho das telas que estão sendo exibidas, podem ser em celulares, tablets ou computadores/notebooks.

Para realização de testes e apresentação do sistema, foi o realizado o cadastrado de métodos oficiais e classificações extraída do livro digital, *Métodos físico-químicos para análise de alimentos*, produzido pelo Instituto Adolf Lutz em parceria da ANVISA, entretanto o sistema está preparado para o cadastro de metodológicas analítica de diversas fontes/publicações, a base de dados foi desenvolvida para o armazenamento e manipulação de milhares de informações, com segurança e escalabilidade.

Figura 7: Página inicial do Sistema de Gestão de Métodos Analíticos



Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Conforme apresentado na Figura 7, a página inicial do sistema conta com um menu principal localizado na parte superior da tela, onde apresenta os itens de menu:

- **Início**, apresenta a página inicial do sistema;
- **Métodos oficiais**, exibe a lista completa com todos os métodos oficiais cadastrado no sistema;
- **Métodos adaptados**, exibe a lista completa com todos os métodos adaptados através do sistema;
- **Contato**, página destinada ao feedback do usuário;
- **Sobre nós**, página contendo a descrição do sistema e autores;
- **Entrar**, página de autenticação do usuário;
- **Cadastre-se**, página de cadastro de novo usuário.

Além do menu principal, a página inicial do sistema (Figura 7) exibe um quadro da base de dados, onde apresenta de forma resumida o quantitativo de métodos oficiais cadastrados e adaptações realizadas através da plataforma. Como forma de facilitar a busca e o acesso ao método com o menor número de cliques, o sistema exibe as classificações de métodos cadastrado no sistema, incluindo o quantitativo de métodos para cada classificação, e

ao clicar em qualquer uma delas, o sistema retorna a lista de todos os métodos relacionados. As classificações cadastradas no sistema foram extraídas obra, Métodos Físico-Químicos para Análise de Alimentos - 4ª Edição 1ª Edição Digital, publicada pelo Instituto Adolf Lutz em parceria com Agência Nacional de Vigilância Sanitária (Anvisa). O sistema permite o cadastro e alteração de classificação a depender do usuário administrador do sistema.

Figura 8: Página de autenticação do usuário do sistema

SG-Métodos

Autenticação

CPF

Digite apenas números ex.: 0000000000

Senha

[Entrar](#)

[Recuperar senha](#) ou [Cadastre-se](#)

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos analíticos

Figura 9: Cadastro de usuário

Novo Cadastro

CPF

Nome completo

E-mail

Senha

Confirmação de senha

[Cadastrar](#)

Ao inscrever-se, você concorda com nossos [Termos de uso](#) e nossa [Política de privacidade](#).

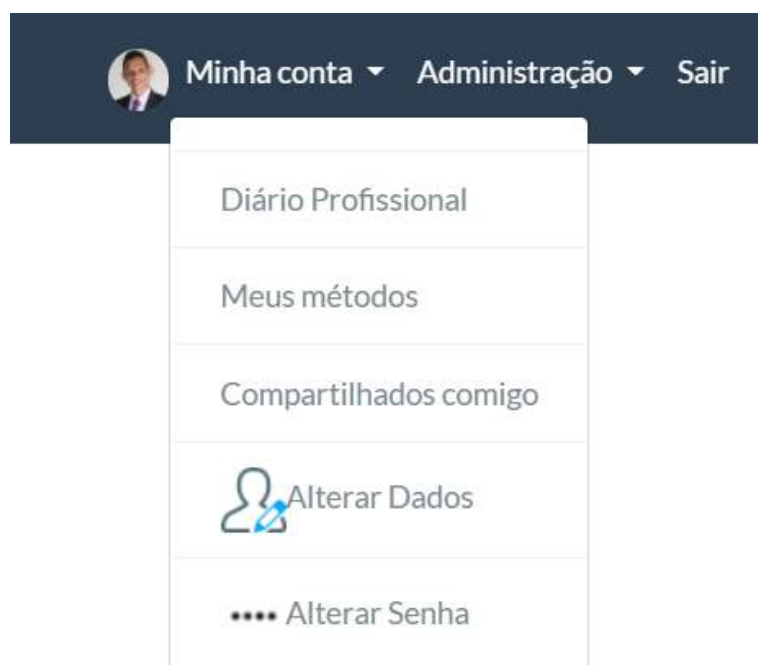
Já possui cadastro? [Fazer login](#)

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Para que os usuários do sistema tenham acesso todas as funcionalidades da solução, é necessário realizar o cadastro na plataforma (Figura 9) através do item de menu **Cadastre-se** e em seguida efetuar a autenticação, no sistema utilizando os dados utilizados no cadastro: CPF e senha pessoal, conforme exibido na Figura 8.

O cadastro de um novo usuário da plataforma (Figura 9) foi desenvolvido objetivando uma maior agilidade do processo, pois requer apenas os dados: CPF, nome, e-mail e senha. Os usuários logados no sistema poderão incluir mais informações não obrigatórias: uma foto de perfil, link do currículo lattes, escolaridade, gênero, instituição de origem e data de nascimento.

Figura 10: Menu minha conta



Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Todos os usuários do sistema possuem acesso ao menu **Minha conta** (Figura 10), no qual é exibido os itens de menu:

- **Diário Profissional**, página específica para registro de anotações diárias por método;
- **Meus métodos**, página para exibição de todos os métodos adaptados ou adicionados a sua lista.
- **Compartilhados comigo**, página com lista de todos os métodos que foram compartilhados com o usuário, permitindo comentário.
- **Alterar dados**, página de alteração de dados pessoais realizados no cadastro de usuário.

- **Alterar senha**, página de alteração de senha do usuário.

Além de poderem realizar buscas de metodologias, através do código, título, descrição e classificação do método. Já os usuários com permissão de coordenador(a) detêm permissões administrativas do sistema e possui acesso ao menu **Administração** (Figura 11), com os seguintes itens de menu: Cadastrar Origem, Cadastrar Classificação, Cadastrar Método e Métodos Cadastrados.

Figura 11: Menu administração



Fonte: Sistema de Gestão de Método Analítico

Os demais usuários do sistema poderão realizar: adaptações de métodos oficiais, compartilhamentos de adaptações entre usuários do sistema, registro no diário profissional, geração de PDF, Qr Code etc. A Figura 12 apresenta a página de cadastro de métodos oficiais, para o cadastro de um novo método, o sistema requer o preenchimento dos campos: origem do método oficial, classificação, código único, título, descrição, material, reagentes, cálculo, procedimento e referência bibliográfica, sendo obrigatório, apenas os que estiverem com o caractere *. Além disso, ao final do cadastro há a opção para tornar público o método cadastrado, com esta opção marcada, o método em questão estará disponível e poderá ser visualizado e/ou adaptado por qualquer usuário do sistema, já com a opção não marcada, o método será visível apenas pelo próprio usuário, essa opção será útil, quando o cadastro ainda não estiver completo, e assim o usuário poderá completá-la a qualquer momento, sem que os outros usuários visualizem o método.

Figura 12: Cadastro de método oficial

The screenshot shows the 'NOVO MÉTODO' registration form. It features a dark blue header with navigation links: 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos oficiais', and 'Contato'. On the right, there are links for 'Minha conta' and 'Administração'. The form itself is light gray and contains the following fields:

- Origem:** A dropdown menu.
- Classificação:** A dropdown menu.
- Código:** A text input field.
- Título:** A text input field.
- Descrição:** A rich text editor with a toolbar containing various text formatting options like bold, italic, underline, and text color.

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

A solução permite a listagem de todos os métodos cadastrados através do menu **Métodos oficiais**, onde cada método listado é exibido em formato de card (Figura 13), ou seja, um container de conteúdo flexível e extensível, com cabeçalhos e rodapés, uma larga variedade de conteúdo e cores de background contextuais (GETBOOTSTRAP, 2021), e apresenta informações básicas: Classificação, ícone oficial, código e título do método; e as opções para gerar Qr code, gerar PDF e listar todas as adaptações realizadas a partir do método oficial. O método poderá ser visualizado por completo clicando no título.

Figura 13: Listagem de métodos oficiais

The screenshot displays the 'MÉTODOS ANALÍTICOS OFICIAIS' list. At the top, there is a dark blue header with navigation links: 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos Oficiais', 'Métodos Adaptados', 'Sobre', and 'Contato'. On the right, there are links for 'Minha conta' and 'Administração'. Below the header, there is a search bar with three input fields: 'Busca por código', 'Busca por título, descrição', and 'Classificação', followed by a red 'Buscar' button. A green 'CADASTRAR MÉTODO' button is located in the top right corner. The main content area shows three cards, each representing a method:

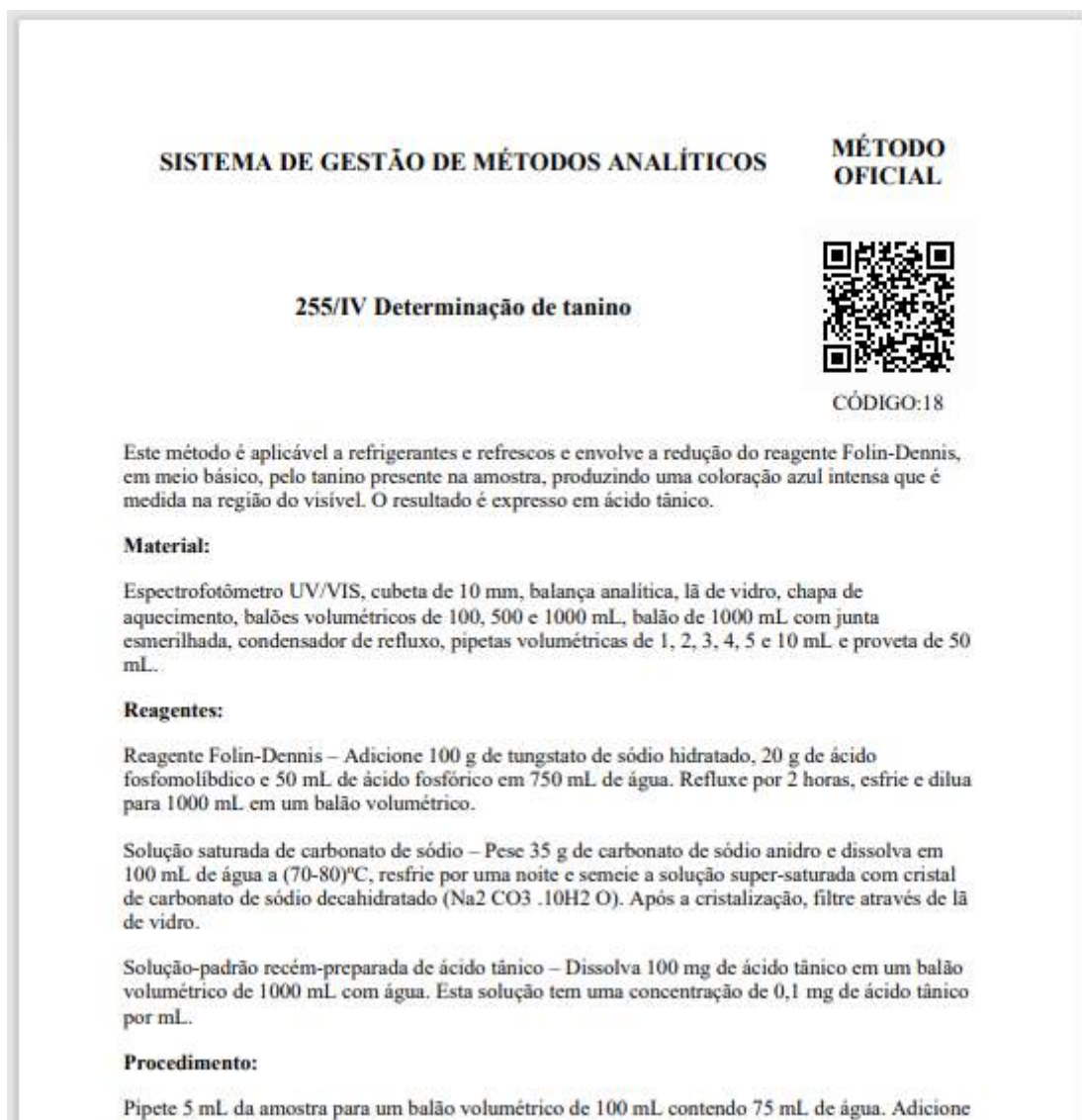
- Óleos e gorduras:** Card for '322/IV Determinação do índice de refração'. It includes a QR code icon, a PDF icon, and a document icon. The card was registered on 13/05/2021 at 05:54:40h.
- Conservas vegetais, frutas e produtos de frutas:** Card for '322/IV Leite de coco - Determinação de lipídios pelo método de Gerber'. It includes a QR code icon, a PDF icon, and a document icon. The card was registered on 13/05/2021 at 05:51:29h.
- Embalagens e equipamentos em contato com Alimento:** Card for '292/IV Embalagens plásticas - Determinação de metais em corantes e pigmentos'. It includes a QR code icon, a PDF icon, and a document icon. The card was registered on 13/05/2021 at 05:51:29h.

At the bottom right of the cards, there is a link: 'Adicionar aos meus métodos'.

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

A geração do Qr code implementada no sistema de forma automática, objetiva a divulgação e o acesso aos métodos gerados na solução de forma mais rápida. Outra funcionalidade implementada no sistema é a geração do PDF do método. A Figura 14 apresenta método cadastrado no sistema em gerado em formato de PDF.

Figura 14: PDF gerado pelo Sistema



Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Outra funcionalidade primordial do sistema é a possibilidade de realizar adaptações a partir de métodos oficiais. O procedimento implementado no sistema é bem simples, qualquer usuário do sistema, após encontrar o método oficial desejado, poderá clicar no botão *Adicionar aos meus métodos* disponíveis no cardê, em sequência o sistema criará uma cópia do método oficial, gerará um novo código e redirecionará o usuário para a página *Meus métodos Adaptados*.

A figura 15 apresenta a página *Meus métodos adaptados* onde é listado todos os métodos que o usuário adaptou ou adicionou para adaptação e para realizar uma adaptação o usuário deverá clicar no botão *Adaptar método*, assim o sistema exibirá uma página de edição do método e o usuário poderá realizar qualquer alteração desejada.

Figura 15: Página Meus métodos adaptados

The screenshot displays the 'Meus métodos adaptados' page. At the top, a dark navigation bar contains the following links: 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos Oficiais', 'Métodos Adaptados', and 'Contato'. To the right of these links are user options: 'Minha conta', 'Administração', and 'Sair'. A green notification banner at the top reads: 'Foi criado uma copia do método, agora você modifica-lo/adapta-lo como desejar.' Below the notification is a large light gray area with a 'DIÁRIO PESSOAL' button in the top right corner and a 'Meus métodos adaptados' header in the center. A search bar with the placeholder 'Busca por método' and a red 'Buscar' button is located below the header. The main content area features a table with the following structure:

Método	Qr code	Ação
Privado 322/IV-A10 Leite de coco - Determinação de lipídios pelo método de Gerber		Adaptar método

Below the table, it indicates 'página 1 de 1'. At the bottom of the page, a dark footer bar displays 'Versão 1.56'.

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Todos os métodos adaptados e públicos, poderão ser visualizados por todos os usuários através do menu principal *Métodos adaptados* (Figura 16) ou através do botão *Lista de todos os métodos adaptados* disponível no carde do método oficial. Cada método adaptado também é listado em formato de carde, e para cada carde é exibido o código, título, datas de criação e alteração, e a lista de usuários que fizeram parte da adaptação. Os métodos adaptados poderão ser compartilhados entre usuários do sistema através do botão compartilhar, assim o usuário fará parte da equipe de adaptação do método, e poderá realizar comentários e registrar em seu diário profissional do pesquisador. Além disso, os métodos que não estiverem públicos poderão ser visualizados apenas pelos membros da equipe de adaptação.

Figura 16: Lista de métodos adaptados

The screenshot displays the 'MÉTODOS ANALÍTICOS ADAPTADOS' interface. At the top, a dark navigation bar contains the following elements: 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos Oficiais', 'Métodos Adaptados', and 'Contato'. On the right side of this bar, there are links for 'Minha conta', 'Administração', and 'Sair'. Below the navigation bar, a grey header prominently displays 'MÉTODOS ANALÍTICOS ADAPTADOS'. The main content area features a search bar with three input fields: 'Busca por código', 'Busca por título, descrição', and 'Classificação', followed by a red 'Buscar' button. Below the search bar, three method cards are displayed. Each card is titled 'Adaptado' and contains a red box with a code (e.g., '278/IV-A1'), a title, and buttons for 'Materias', 'Reagentes', 'Procedimento', and 'Cálculo'. The cards also show QR codes, document icons, the last update date, and the name of the person who adapted the method.

Fonte: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

A Figura 16 apresenta a página contendo todas as adaptações de um método oficial, onde também é exibido em formato de card. É possível observar que o código do método adaptado gerado pelo sistema é composto pelo código do método oficial concatenado com os caracteres “-A”, acrescido de numeral. Para cada adaptação é exibido o usuário autor da adaptação. Em resumo, todas as funcionalidades do sistema poderão ser visualizadas através do Apêndice I, Manual do Usuário.

Por fim, o Sistema de Gestão Métodos Analíticos desenvolvido, tem um propostas diferente dos sistemas encontrados durante a pesquisa, focado no ambiente acadêmico, a solução possui uma interface simples e de fácil compreensão, a princípio, esta solução está voltado para a realização de adaptações de métodos oficiais, diferente dos sistemas disponíveis encontrados no mercado, que em sua maioria é direcionado para validação de métodos. Entretanto, o sistema está preparado para que no futuro próximo seja implementado outras funcionalidades, podendo incluir elementos de validação de métodos, o que garantirá a manutenção da base de dados existente e um maior valor agregado para a solução, contribuição para a comunidade científica da área de química analítica.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com a grave crise mundial de saúde atribuída a pandemia de COVID-19 que atinge toda a sociedade, concluir este trabalho foi um grande desafio. Todos os objetivos tiveram que ser realizados de forma remota, no entanto, apesar destas dificuldades, podemos considerar que os resultados foram alcançados em sua totalidade, uma vez que, todas as etapas foram executadas.

A solução de tecnologia da informação para gestão de metodologias analíticas foi desenvolvida a partir da revisão de literatura e da coleta de requisitos do sistema, através do estudo de caso do Laboratório de Cinética e Modelagem de Processos (LaCiMP) do Campus universitário de Palmas da UFT, no qual, contribuiu para a compreensão do fluxo de execução, operacionalização e uso de metodologias analíticas aplicadas a análises de alimentos no ambiente laboratorial. A partir dos dados obtidos, a modelagem do banco de dados e a codificação da solução, tornaram-se mais intuitiva, o sistema então pode ser desenvolvido de forma dinâmica e incremental. O estudo das metodologias analíticas da área de alimentos contribuiu para identificação de padrões entre os formatos de publicações de métodos oficiais, no qual, refletiu para implementação de um formato no sistema. O processo de codificação do sistema e a utilização de práticas ágeis, foi determinante para as entregas de todos os módulos do sistema. A implementação da geração de Qr Code para cada método oficial/adaptado no sistema, facilitará o acesso as metodologias de forma mais rápida, utilizando a câmera de smartphones. Além disso, o Instituto Nacional de Propriedade Industrial deferiu o pedido de registro da solução e foi emitido o certificado de registro de programa de computador.

Espera-se que com a introdução do Sistema de Gestão de Métodos Analíticos possa contribuir no suporte a acadêmicos, docentes e pesquisadores em aulas práticas em todos os laboratórios de análises química da Universidade Federal do Tocantins. Por fim, considerando que o sistema possa ter outras funcionalidades não desenvolvidas neste estudo, se faz viável o desenvolvimento de novos estudos e a darem continuidade a implementação de novas funcionalidades no sistema, objetivando o fortalecer a ferramenta e contribuir para área de química analítica.

3.2 Trabalhos futuros

Ao longo do desenvolvimento deste trabalho, puderam ser identificadas algumas possibilidades de melhoria e de continuação a partir de futuras pesquisas, as quais incluem:

- Implementação de uma forma de extração automática de métodos oficiais de sua origem sem a necessidade de cadastro manual;
- Implementação de um aplicativo com funcionalidades básicas integrados no sistema principal;
- Implementação de calculadoras com as fórmulas predefinidas para realização de cálculos utilizados para validação de métodos analíticos que incluem os parâmetros: precisão, exatidão e seletividade, efeito matriz, faixa de trabalho, limite de detecção, e limite de quantificação.

3.3 Produtos de entrega do TCC

1. Artigo, intitulado “Information Technology Solutions for Management of Analytical Methods” publicado na revista International Journal of Computer Applications (Anexo 1).
2. Certificado de Registro de Programa de Computador, emitido pelo Instituto Nacional de Propriedade Industrial (INPI) (Anexo 2).
3. Manual do usuário do Sistema de Gestão de Método Analíticos (Apêndice A).

REFERÊNCIAS

- ANVISA. **Resolução da diretoria Colegiada RDC nº 166, de 24 de julho de 2017**. 2017. Disponível em: <http://portal.anvisa.gov.br/legislacao/?inheritRedirect=true#/visualizar/353660>. Acesso em: 25 jun. 2020.
- AOAC. About AOAC INTERNATIONAL. **AOAC**, 2020. Disponível em: <https://www.aoac.org/about-aoac-international/>. Acesso em: 24 Junho 2020.
- AOAC, Official methods of analysis of Association of Official Analytical Chemists, 15ed. **AOAC**, 1990.
- ARIKAWA, Yoshiko. **Basic education in analytical chemistry**. In: Analytical Sciences/Supplements Proceedings of IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2001 (ICAS 2001). The Japan Society for Analytical Chemistry, 2002. p. i571-i573. Disponível em: https://www.jstage.jst.go.jp/article/analscisp/17icas/0/17icas_0_i571/_article/-char/ja/. Acesso em: 28. jun. 2020.
- BAIRD, Rodger B. et al. **Standard methods for the examination of water and wastewater, 23rd**. Water Environment Federation, American Public Health Association, American Water Works Association, 2017.
- BAUR, Fred J.; ENSMINGER, Luther G. **The association of official analytical chemists (AOAC)**. Journal of the American Oil Chemists' Society, v. 54, n. 4, p. 171-172, 1977.
- BERTOLINI, C. T.; BRAGA, J. C.; PIMENTEL, E.; RAMOS, S. Laboratório Virtual interativo para reprodução de experimentos de química através de dispositivos móveis. Brazilian Symposium on Computers in Education (Simpósio Brasileiro de Informática na Educação-SBIE). 2013. p. 285.
- GETBOOTSTRAP. Cards. 2021. Disponível em: <https://getbootstrap.com.br/docs/4.1/components/card/>. Acesso em: 19 jun. 2021.
- BRASIL. Presidência da República Casa Civil. **Lei Nº 13.243, de 11 de janeiro de 2016**. Disponível em: http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_Ato2015-2018/2016/Lei/L13243.html. Acesso em: 02 maio. 2020.
- CAMPOS, V. F. **Gerenciamento da rotina do trabalho do dia-a-dia**. Nova Lima: INDG Tecnologia e Serviços, 2004.
- CECCHI, Heloísa Máscia. **Fundamentos teóricos e práticos em análise de alimentos**. Ed. UNICAMP, 2003.
- CONFLAB. **Validação. Incerteza. Carta de Controle: ciclo aqac (analytical quality assurance)**. Ciclo AQAC (Analytical Quality Assurance). 2021. Disponível em: <https://www.conflab.com.br/home/Sobre>. Acesso em: 13 jan. 2021.
- DCTECH. **EffiValidation | Software de Validação de Métodos ANVISA**. 2021. Disponível em: <https://www.dctech.com.br/produto/effivalidation-software-de-validacao-de-metodos-anvisa/>. Acesso em: 21 jan. 2021.

DEVMIDIA. Artigo Engenharia de Software 10 - **Documento de Requisitos**. Disponível em: <https://www.devmedia.com.br/artigo-engenharia-de-software-10-documento-de-requisitos/11909>. Acesso em: 13. fev.2021.

ELMASRI, Ramez et al. **Sistemas de banco de dados**. 2005.

FDA. **Text on Validation of Analytical Procedures**, 1995. Disponível em: <https://www.fda.gov/media/71724/download>. Acesso em: 27 junho 2020.

FORTE, C. M. S.; MELO PACHECO, L. C.; QUEIROZ, Z. F. **Química Analítica I**. 2^a. ed. Fortaleza – Ceará. Ed UECE. 2019.

GIL, ANTONIO CARLOS et al. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo: Atlas, 2002.

GIL, A. C. **Métodos e técnicas de pesquisa social**. 6. ed. São Paulo: Atlas, 2008.

GREENFIELD, H; SOUTHGATE, DAT. **Food composition data: Production, management and use**. 2ed. Food and Agriculture Organization of United Nations (FAO), Rome. 288p, 2003.

HALL, T.; TREADWELL, F. P. **Analytical Chemistry: Qualitative Analysis**. New York: John Wiley & Sons, Inc, v. 1, 1921.

HEINLE, Cassie Elizabeth et al. MetaLIMS, a simple open-source laboratory information management system for small metagenomic labs. **GigaScience**, v. 6, n. 6, p. gix025, 2017.

IAL. **Instituto Adolfo Lutz**. Apresentação.2020. Disponível em: <http://www.ial.sp.gov.br/ial/o-ial/apresentação>. Acesso em: 2 jun.2020.

ICH.International Conference on Harmonisation. **ICH Topic Q 2 (R1) Validation of Analytical Procedures: Text and Methodology**. 1995. Disponível em: https://www.ema.europa.eu/en/documents/scientific-guideline/ich-q-2-r1-validation-analytical-procedures-text-methodology-step-5_en.pdf. Acesso em:04 jul.2020

INMETRO. Coordenação Geral de Acreditação. **DOQ-CGCRE-008: orientação sobre validação de métodos analíticos**. Rio de Janeiro, jun. 2007. 25p. Revisão nº 02. Disponível em: http://www.inmetro.gov.br/Sidoq/Arquivos/CGCRE/DOQ/DOQ-CGCRE-8_02.pdf. Acesso em:24 jun. 2020.

_____. Coordenação Geral de Acreditação. **DOQ-CGCRE-008: orientação sobre validação de métodos analíticos**. Rio de Janeiro, jun. 2020. 30p. Revisão nº 09.

_____. Coordenação Geral de Acreditação. **DOQ-CGCRE-020:Definições de termos utilizados nos documentos relacionados à acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência**. Rio de Janeiro, abril. 2013. 12p. Revisão nº 06. Disponível em: http://inmetro.gov.br/sidoq/arquivos/Cgcre/DOQ/DOQ-Cgcre-20_06.pdf. Acesso em: 29 jun. 2020.

INPI. Instituto Nacional da Propriedade Industrial. **pePI - Pesquisa em Propriedade Industrial**. 2020. Disponível em: <https://gru.inpi.gov.br/pePI/jsp/programas/ProgramaSearchBasico.jsp>. Acesso 2.jul 2020.

_____. Programas de Computador. 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/inpi/pt-br/servicos/perguntas-frequentes/programas-de-computador#faq1.0>. Acesso em: 01 out. 2020.

IUPAC. WHAT WE DO. **IUPAC**, 2020. Disponível em: <https://iupac.org/what-we-do/>. Acesso em: 24 jun. 2020.

LABWIN. Laboratory Software. **Histórico**. 2020. Disponível em: <https://www.labwin.com.br/Site/News.aspx?Site=Historico>. Acesso em: 13 jul. 2020.

MANO, Junichi; TAKABATAKE, Reona; KITTA, Kazumi. **Development and Standardization of Analytical Methods for Increasing Varieties of Genetically Modified Crops**. Japan Agricultural Research Quarterly: JARQ, v. 54, n. 2, p. 113-119, 2020.

MCLELLAND, A. (1998). "What is a LIMS - a laboratory toy, or a critical IT component?" (PDF). Royal Society of Chemistry. p. 1.

MATOS, Simone Pires de. **Técnica de Análise de Química**: métodos clássicos e instrumentais. São Paulo: Érica, 2015.

Official Methods of Analysis of AOAC INTERNATIONAL (OMA). **Guide to Method Format**.2021. Disponível em: http://www.eoma.aoac.org/Guide_to_Method_Format.pdf. Acesso em 3 maio. 2020.

SANTOS, L. M. G.; GONÇALVES, J. M.; COUTO, S. Determinação simultânea de As, Cd e Pb em amostras de água purificada para hemodiálise por espectrometria de absorção atômica com forno de grafite, após otimização multivariada baseada no uso de planejamento experimental. **Química Nova**, São Paulo, v. 31 no.5, 2008. Disponível em: https://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0100-40422008000500006. Acesso em: 26 jun. 2020.

SILAS. Sistema Informatizado para Laboratórios de Análise. **Megatecnologia-si**.2020. Disponível em: <http://megatecnologia-si.com.br/silas/secao.htm?idSecao=10>. Acesso em: 13 jul. 2020.

SOMERVILLE, I. **Engenharia de Software**. 9. ed. São Paulo: Pearson Education -BR, 2011.

SKOOG, D. A. **Fundamentos de Química Analítica**, Editora Thomson, tradução da 8ª edição, 2006. Skoog, DA; West, DM; Holler, FJ Fundamentals of Analytical Chemistry. 1992.

SKOBELEV, D. O. et al. Laboratory information management systems in the work of the analytic laboratory. **Measurement Techniques**, v. 53, n. 10, p. 1182-1189, 2011.

THOMPSON, M., S.L.R. ELLISON, and R. WOOD, **Harmonized guidelines for single-laboratory validation of methods of analysis - (IUPAC technical report)**. Pure and Applied Chemistry, 74(5): p. 835-855, 2002.

UFT. Universidade Federal do Tocantins. **Laboratórios da UFT - Câmpus de Palmas.** Disponível em: <https://ww2.uft.edu.br/index.php/nit/vitrine-tecnologica/portfolio-de-laboratorios/palmas-01> Acesso em: 01 fev. 2021.

VASCONCELOS, Nadja Maria Sales de. **Fundamentos de Química Analítica Quantitativa.** 2. ed. Fortaleza: Eduece, 2019. 194 p.

ZENEBON, O.; PASCUET, N. S.; TIGLEA, P. Métodos físico-químicos para análise de alimentos. 4 ed. digital. São Paulo: Instituto Adolfo Lutz, 2008. 1020p. Disponível em: <http://www.ial.sp.gov.br/ial/publicacoes/livros/metodos-fisico-quimicos-para-analise-de-alimentos>. Acesso em: 05 abr. 2020

ANEXO 1 – ARTIGO PUBLICADO

International Journal of Computer Applications (0975 – 8887)
Volume 183– No.4, May 2021

Information Technology Solutions for Management of Analytical Methods

Luciano de Sousa Moraes
 Tocantins Institute of Science and
 Technology,
 Colinas do Tocantins/Tocantins -
 Brazil

Glêndara Aparecida de Souza
 Martins
 Food Engineering Department
 University Federal of Tocantins
 Palmas/Tocantins - Brazil

Warley Gramacho da Silva
 Computer Science Department
 Federal University of Tocantins
 Palmas/Tocantins - Brazil

ABSTRACT

This article aimed to perform a literature review on analytical methods and the information technology solutions developed for the management of analytical methods applied in academic and laboratory environments. Searches were carried out in the computer program registration database of the Brazilian National Institute of Industrial Property (INPI) and national and international publications. The literature points out that there are few systems developed for the academic area. Therefore, there is a necessity for the development of new solutions that meets the needs of professors and students in the area of analytical chemistry, for the management of methods used and adapted in academic environments.

General Terms

Analytical methods, innovation, technology, method management, information technology solutions

Keywords

Analytical methods, innovation, technology, method management

1. INTRODUCTION

Analytical chemistry studies the elaboration and theory of chemical analysis methods, which make it possible to determine the qualitative and quantitative composition of substances, playing an important role in many areas of science: food, agricultural, environmental, pharmaceutical, medicine, among others [1]. The qualitative analysis deals with the methods for determining the nature of the constituents of a substance by revealing the identity of the elements and compounds in a sample, while quantitative analyzes consist of the methods for determining the proportion in which the constituents are present in a sample [2,3].

In this context, there are several official analytical methodologies recommended by national and international control bodies to standardize and guarantee the quality and reliability of the analysis results. For a method to be officially recognized, it needs to be validated following the established parameters. According to the National Health Surveillance Agency - ANVISA, this validation process consists of demonstrating that the analytical method produces reliable results and is suitable for the purpose for which it is intended, in a documented manner and according to objective criteria [4].

Most international analytical methods are adopted and described by AOAC International, a leader in analytical excellence, where it promotes food security, food integrity and public health, bringing together members, organizations and experts dedicated to the development and validation of standards, globally recognized methods [5]. In Brazil, one of

the bodies officially recognized for standardizing analytical methodologies is the Adolfo Lutz Institute, which describes protocols for analysis of water, food, among others [6].

In general, researchers use these analytical methods daily in research, technical reports, technological innovations, and practical classes. However, according to the raw material to be analyzed and the availability of infrastructure, some adaptations are common and necessary.

The analytical laboratories perform a series of functions, including control of the analytical methods used, in addition to the management of material and human resources involved in the process of quantitative and qualitative characterization of samples. In this context, Cecchi [7] highlights that, in general, analytical processes are used both for research of new analytical methodologies, as for the development of new products and quality control of existing products, generating a demand for efficient operational management and careful. For Skobelev et al. [8] it is essential, therefore, the development of information management systems for the successful implementation of these management activities.

Regarding the flow of information generated in analytical laboratories, Heinle et al. [9] draw attention to the large volume of steps, processes and resources that require care and precision, creating the need for innovative tools for method management, which go beyond the traditional control notebooks and spreadsheets. In this sense, innovation will promote improvement in the production environment, resulting in new products, services or processes or that comprise the aggregation of new functionalities or characteristics [10].

2. ANALYTICAL METHODS

The analytical methods refer to the way of carrying out the analysis and describe in detail the steps necessary to carry out each analytical test. Those may include the sample, preparation of reagents, use of apparatus, handling of formulas for calculations, and others. The analysis consists of sample collection, decomposition, separation, concentration, detection and measurement, treatment, and evaluation of analytical data. [11,12].

In this context, Skoog [2] demonstrates the steps involved in quantitative analysis, which can be seen in Figure 1.

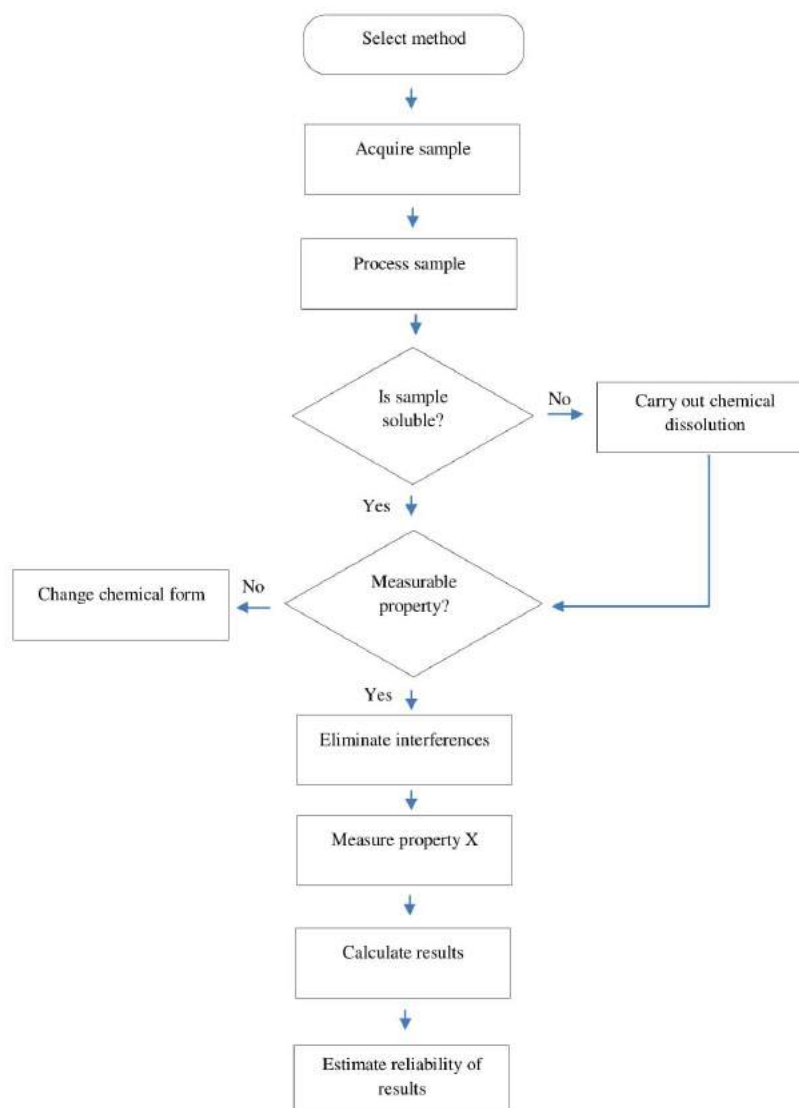


Figure 1:Flowchart of quantitative chemical analysis

To perform analytical methods, analytical techniques are also used, which are the procedures or instrumentation used for the qualitative or quantitative determination of the concentration of a compound. Examples of techniques are: titrations, spectroscopies, chromatography, and gravimetric analysis.

An example of the use of analytical technique occurs when the intention is to carry out the analysis of water, when the concentration of contaminants occurs, being necessary the use of analytical techniques of high sensitivity to detect and quantify them [13].

Given the importance of using analytical methods, official bodies such as the National Institute of Metrology, Quality and Technology (INMETRO) emphasize that it is of fundamental importance that laboratories have the means, criteria and objectives to prove and validate the test methods they perform lead to reliable results and adequate to the desired quality [14].

Method validation is one of the measures universally recognized as a necessary part of a comprehensive quality assurance system. In order to standardize these procedures,

the International Union of Pure and Applied Chemistry - IUPAC provides guidelines on the validation of analytical methods in the laboratory [15]. These guidelines provide minimum recommendations on procedures that should be employed to ensure proper validation of methods [16].

Analytical methods are standardized when they are developed by a standardization body. Non-standardized analytical methods are those developed by the laboratory itself or adapted from standardized and validated methods, that is, they are those developed or adapted to meet the specificities of the analysis [17,18].

In the early 1990s, regulatory agencies in the United States, Japan, and Europe: FDA - Food and Drug Agency, MHLW - Ministry of Health, Labor and Welfare, EMEA- European Medicine Agency respectively, organized the International Conference on Harmonization-ICH, which had as one of its goals the publication of guides containing the characteristics to be considered during the validation of the analytical procedures [19].

In Brazil, INMETRO and ANVISA are responsible for the publication of standards for the validation of analytical methods. The Adolfo Lutz Institute is the principal reference in the publication of analytical methods and performs hundreds of tested and reliable analytical methods available to laboratories and the scientific community, in general [20].

The Ministry of Agriculture, Livestock and Supply - MAPA also publishes publications on analytical methods related to fertilizers and correctives; control of milk and dairy products; and food of animal origin. Some of these publications are listed in Table 1 and cover guides and manuals containing widely recognized methods and validation procedures.

Table 1: Publications by Brazilian government agencies related to official methods and validation of analytical methods

Government agency	Publication
Ministry of Agriculture, Livestock and Supply - MAPA	Manual of Official Analytical Methods for Fertilizers and Remedies
Ministry of	Official Physical-Chemical

Agriculture, Livestock and Supply - MAPA	Analytical Methods for Control of Milk and Dairy Products
Ministry of Agriculture, Livestock and Supply - MAPA	Official Analytical Methods for Food Analysis of Animal Origin
Instituto Adolfo Lutz -IAL	Physico-chemical methods for food analysis
National Health Surveillance Agency - ANVISA	RDC Nº 166- Criteria for the validation of analytical methods used in inputs pharmaceuticals, medicines and biological products in all their production phases
National Institute of Metrology, Quality and Technology - INMETRO	DOQ-CGCRE-008: Guidance on validation of analytical methods

There are several international associations and bodies that develop, validate and publish analytical methods, among them is the Association of Official Analytical Collaboration - AOAC INTERNATIONAL, a world reference in the study of analytical methods. Many countries, including Brazil, reference and recommend the use of validated and adopted methods by the association. AOAC INTERNATIONAL brings together governments, industries, and academia to develop and validate analytical methods that guarantee the safety and integrity of food and other products that impact public health worldwide [5].

In addition, AOAC has the Official Methods of Analysis (OMA) program, which maintains the most comprehensive collection of chemical and microbiological methods available in the world, used in industry, regulatory agencies, research organizations, analysis laboratories, and academic institutions. Many countries and organizations contribute their expertise to the development of standards and method validation. [5].

Figure 2 presents an example of the format of a method published by AOAC

Guide to Method Format

(Method shown is incomplete to allow space for description.)

<p>Locator number identifies a method by chapter, subchapter, and sequence within the subchapter for ease of location. 50 = Chapter 50; 2 = subchapter 2; 10 = 10th method found in chapter 50, subchapter 2. The locator number is not a permanent number and is included only for convenient accessibility.</p>	<p>50.2.10</p> <p style="text-align: center;">AOAC Official Method 2016.05</p> <p style="text-align: center;">Analysis of Vitamin D₂ and Vitamin D₃ in Fortified Milk Powders, Infant Formulas, and Adult/Pediatric Nutritional Formulas</p> <p style="text-align: center;">Liquid Chromatography–Tandem Mass Spectrometry</p> <p style="text-align: center;">First Action 2016 Final Action 2017</p> <p style="text-align: center;">AOAC–ISO Method*</p> <p>(Applicable to the determination of total vitamin D₂ and vitamin D₃ in fortified milk powders, infant formulas, and adult/pediatric nutritional formulas.)</p> <p><i>Caution:</i> Refer to the Material Safety Data Sheets for all chemicals prior to use. Use all appropriate personal protective equipment and follow good laboratory practices.</p> <p>A. Principle</p> <p>Samples are saponified at high temperature, and then lipid-soluble components are extracted into isooctane. A portion of the isooctane layer is transferred and washed, and an aliquot of 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione (PTAD) is added to derivatize vitamin D to form a high-molecular-mass, easily ionizable adduct.</p> <p>B. Apparatus</p> <p>(a) <i>Ultra-high-performance LC (UHPLC) system.</i>—Nexera (Shimadzu, Kyoto, Japan) or equivalent LC system, consisting of a dual pump system, sample injector unit, degasser unit, and column oven.</p> <p>C. Reagents</p> <p>(a) <i>Vitamin D₂ (ergocalciferol).</i>—CAS No. 50-14-6, purity: ≥99%.</p> <p>D. Reagent Preparation</p> <p>(a) <i>PTAD solution (10 mg/mL).</i>—To a 5 mL volumetric flask, add 50 mg PTAD, then add 4 mL acetone, and dissolve; dilute to volume with acetone. Expiry: 1 day.</p> <p>E. Standard Preparation</p> <p>Vitamin D is sensitive to light. Perform all steps under UV-shielded lighting. If vitamin D₂ is exclusively required for analysis, then standards pertaining to vitamin D₂ need not be used and vice versa.</p> <p>J. Calculations</p> <p>(a) <i>Concentration of SIL vitamin D₂ in SILD₂SS.</i>—</p> $\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{D}_2\text{concn}} = \frac{\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{abs}(\lambda, \text{max})}}{E_{1\text{ cm}}^{1\%}} \times 10000$ <p>where $\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{D}_2\text{concn}}$ = concentration of <i>d6</i>-vitamin D₂ in the stock standard (µg/mL); $\text{SILD}_2\text{SS}_{\text{abs}(\lambda, \text{max})}$ = UV absorbance of the stock standard at 265 nm (cm⁻¹); $E_{1\text{ cm}}^{1\%}$ = extinction coefficient for vitamin D₂ in ethanol (46 l dL/g·cm); and 10000 = concentration conversion factor (g/dL to µg/mL).</p> <p>References: <i>J. AOAC Int.</i> 99, 1321(2016) DOI: 10.5740/jaoacint.16-0160 (First Action) <i>J. AOAC Int.</i> 101, 256(2018) DOI: 10.5740/jaoacint.17-0149 (Final Action) <i>J. AOAC Int.</i> 95, 292(2012) (AOAC SMPR 2011.004) DOI: 10.5740/jaoac.int.11-0440</p> <p>CAS-50-14-6 (ergocalciferol)</p> <p><i>Revised: January 2019</i></p>	<p>Method number is a permanent codification that identifies a method by year and sequence of adoption. 2016 = First Action 2016; .05 = 5th method adopted in 2016.</p> <p>Title typically includes analyte and matrix, technique, and official status (First Action, Final Action, Revised First Action, Repealed). May include adoption by other organizations.</p> <p>Methods are divided into several descriptive sections, including specifications for necessary laboratory apparatus and reagent preparations. See also <i>Definition of Terms and Explanatory Notes</i>.</p> <p>References direct the user to published validation studies (single- and/or multilaboratory), subsequent revisions, and relevant SMPRs®. Other informative references may be included.</p> <p>Revision date at the end of method signifies that the method received minor editorial revisions (that do not affect method procedures).</p>
<p>Applicability statement specifies utility and limitations on scope of method and other pertinent information.</p>		
<p>Cautionary statement specifies precautions and possible hazards in carrying out method, including safety information on equipment, techniques and practices, and safe handling of chemicals, acids, alkalies, microorganisms, and solvents.</p>		
<p>Calculation symbols are defined and show correct units.</p>		
<p>Method may include Chemical Abstracts Service (CAS) registry numbers, unique identifiers used to search a number of data-retrieval systems.</p>		

Figure 2: Format of an analytical method published by AOAC INTERNATIONAL

3. LIMITATIONS ON ACCESS TO ANALYTICAL METHODOLOGIES

There is a wide variety of methodologies published in different databases, in scientific journals, in official documents from government agencies and international associations. A search on the SCOPUS platform using the

terms TITLE-ABS-KEY ("analytical method") AND (LIMIT-TO (DOCTYPE, "ar")), resulted in more than 92 thousand publications between 1896 to 2021. Figure 2 shows the publications of the articles by area, where the amplitude of the areas associated with analytical chemistry is verified.

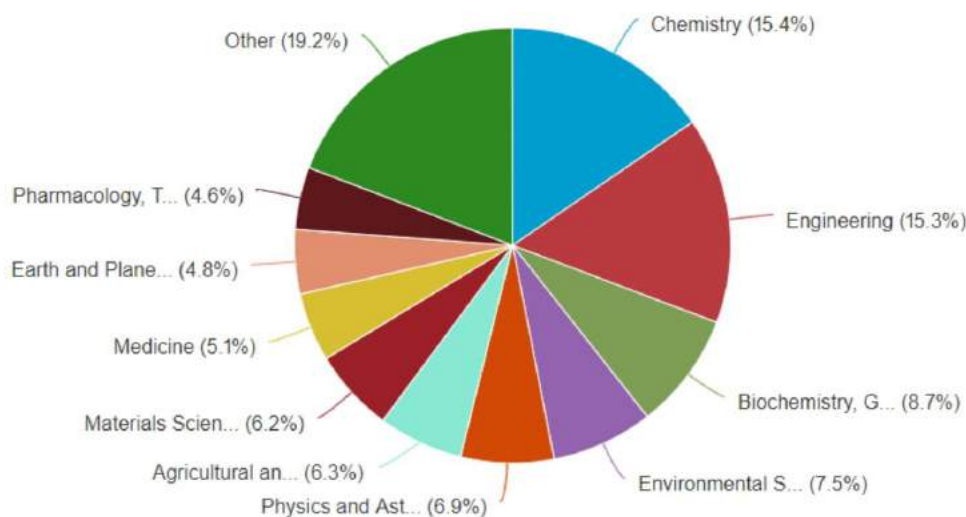


Figure 3: Documents by subject area

For a method to be recognized and standardized by a regulatory body, it is necessary for validation, carried out by an interlaboratory study, to assess the performance of the method. Such a validation study involves time and costs for the members participating in the study [21].

If an existing method is modified to meet specific requirements or an entirely new method is developed, the laboratory must ensure that the performance characteristics of the method meet the requirements for the intended analytical operations. For modified methods (standardized or not) or developed by the laboratory, there are a series of parameters to be evaluated to ensure the suitability of the method for the intended use [22].

In this sense, laboratory management systems usually have support characteristics, but without sharing information and adaptations, generating duplication of efforts and, consequently, increasing costs and spending time in the use of human and material resources for the application and development of methods.

4. SYSTEMS APPLIED TO MANAGEMENT OF CHEMICAL ANALYSIS LABORATORIES

A Laboratory Information Management System is a computer-based application software product used in the laboratory to manage standard analyzes and samples, test results, laboratory staff, and analytical equipment, as well as for the purpose of generating reports and other functions [23].

In this context, Mclelland [24] highlights how a laboratory information management system is perceived depending on the user's point of view:

- For an analyst, it is, in fact, the computer system that interfaces with its analyzer, calculates, stores, and prints results;
- For a laboratory manager, it is the system that allows you to track samples, identify your current status, audit your response times and provide better data on your customer base than he has already obtained from the best-organized paper records;
- For a management information systems analyst, however, the product can and should be a feeder system, transmitting resource management data to the corporate mainframe and;
- For an accountant, he can integrate laboratory costs into the customer's invoice.

Currently, management systems are mostly developed in the client-server architecture, in which the request processing and database are located on the server, while the system's graphical interface is present on the client. Figure 4 presents the client-server architecture.

It is possible to exemplify this architecture when performing a search on Google. When accessing the homepage, the graphical interface of the Google search system is loaded on the device and when a search for an expression is performed, this request is sent to a server, where it is processed and then the result is returned to the client. Figure 4 represents the

schema of the client-server architecture.

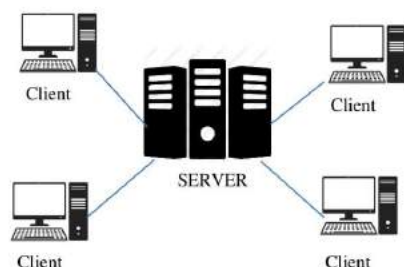


Figure 4: Client-server architecture

In a search carried out in the database of records of computer program records of the Brazilian National Institute of Industrial Property – INPI, using the search term, “Laboratório and química”, and search criteria “any of the words”, were found among 1993 to 2020, 52 computer program registration application processes. Among them are listed in Table 2 some records that may be related to management analytical methods.

Table 2: Computer program records at the Brazilian National Institute of Industrial Property (INPI)

CODE	YEAR OF ORDER	TITLE
BR 51 2018 052037 5	2018	CFQ- Physicochemical Calculator
BR 51 2017 001004 8	2017	Intelligent system for control of reagents used in laboratory practices of the course in degree in chemistry
BR 51 2016 001346 0	2016	ILABORATORY: Virtual chemistry laboratory
BR 51 2015 000222 8	2015	LABWIN-Chemical metrology software
BR 51 2019 000570 8	2019	BIT LABS - Application for management of bromatology laboratory
05277-5	2010	SILAS-Computerized System for Analysis Laboratories

ILaboratory is an iPhone application developed at the Federal University of ABC that acts as a chemistry lab simulator limited to reproducing flame test and wet test experiments [25].

The LABWIN System is proprietary software that proposes to manage data from laboratories and industrial processes; management of proficiency testing programs (interlaboratory), validation of methods, calculation of uncertainties, control of quality documents, and other functions [26]. However, the system is focused on industrial environments and is not ideal for academic environments.

The Computerized System for Analysis Laboratories - SILAS is also proprietary software developed for analysis: soil chemistry, soil physics, leaf or plant tissue, seeds; limestone, mineral salt, and fertilizers; nutrients (amino acids), and

others [27]. In this context, it is a specific software and it has functionalities aimed at analysis, not specifically for the management of analytical methods.

5. CONCLUSION

In general, it is observed that the software present in the market aim to meet a specific demand, with limitations of functionalities for the operationalization and management of academic analytical laboratories, thus launching a demand for an analytical methods management system that serve both the academic and industrial audiences.

The research in the literature showed the importance of developing, in future works, a management solution for analytical methods that can support students, and professors, in practical classes, laboratory routines. Besides, it allows to optimize the dynamics of scientific experimentation in the laboratory and maximize the sharing of adaptations made within the scope of practice.

6. REFERENCES

- [1] Forte, C. M. S.; Melo Pacheco, L. C.; Queiroz, Z. F. 2019. *Química Analítica I*. 2ª. ed. Fortaleza – Ceará. Ed UECE.
- [2] Skoog, DA; West, DM; Holler, FJ. 1992. *Fundamentals of Analytical Chemistry*. [27]
- [3] Hall, T.; Treadwell, F. P. 1921. *Analytical Chemistry: Qualitative Analysis*. New York: John Wiley & Sons, Inc, v. 1.
- [4] ANVISA. 2017. Resolução da diretoria Colegiada RDC nº 166, de 24 de julho de 2017.
- [5] AOAC. 2020. About AOAC INTERNATIONAL. AOAC.
- [6] Zenebon, O.; Pascuet, N. S.; Tiglia, P. 2008. *Métodos físico-químicos para análise de alimentos*. 4 ed. digital. São Paulo: Instituto Adolfo Lutz. 1020p.
- [7] Cecchi, Heloísa Máscia. 2003. *Fundamentos teóricos e práticos em análise de alimentos*. Ed. UNICAMP.
- [8] Skobelev, D. O. et al. 2011. *Laboratory information management systems in the work of the analytic laboratory*. *Measurement Techniques*, v. 53, n. 10, p. 1182-1189.
- [9] Heinle, Cassie Elizabeth et al. 2017. *MetaLIMS, a simple open-source laboratory information management system for small metagenomic labs*. *GigaScience*, v. 6, n. 6, p. gix025.
- [10] BRASIL. 2016. Presidência da República Casa Civil. Lei Nº 13.243, de 11 de janeiro de 2016.
- [11] FDA. 1995. *Text on Validation of Analytical Procedures*.
- [12] Arikawa, Yoshiko. 2002. *Basic education in analytical chemistry*. In: *Analytical Sciences/Supplements Proceedings of IUPAC International Congress on Analytical Sciences 2001 (ICAS 2001)*. The Japan Society for Analytical Chemistry. p. i571-i573.
- [13] Santos, L. M. G.; Gonçalves, J. M.; Couto, S. 2008. *Determinação simultânea de As, Cd e Pb em amostras de água purificada para hemodiálise por espectrometria de absorção atômica com forno de grafite, após otimização multivariada baseada no uso de planejamento experimental*. *Química Nova*, São Paulo, v. 31 no.5.

- [14] INMETRO. 2020. Coordenação Geral de Acreditação. DOQ-CGCRE-008: orientação sobre validação de métodos analíticos. Rio de Janeiro. 30p. Revisão nº 09.
- [15] IUPAC. 2020. What we do. IUPAC.
- [16] Thompson, M., S.L.R. Ellison, and R. Wood. 2002. Harmonized guidelines for single-laboratory validation of methods of analysis - (IUPAC technical report). *Pure and Applied Chemistry*, 74(5): p. 835-855.
- [17] INMETRO. 2007. Coordenação Geral de Acreditação. DOQ-CGCRE-008: orientação sobre validação de métodos analíticos. Rio de Janeiro. 25p. Revisão nº 02
- [18] INMETRO. 2013. Coordenação Geral de Acreditação. DOQ-CGCRE-020: Definições de termos utilizados nos documentos relacionados à acreditação de laboratórios, produtores de materiais de referência e provedores de ensaios de proficiência. Rio de Janeiro. 12p. Revisão nº 06.
- [19] ICH. 1995. International Conference on Harmonisation. ICH Topic Q 2 (R1) Validation of Analytical Procedures: Text and Methodology.
- [20] IAL. 2020. Instituto Adolfo Lutz. Apresentação
- [21] Mano, Junichi; Takabatake, Reona; Kitta, Kazumi. 2020. Development and Standardization of Analytical Methods for Increasing Varieties of Genetically Modified Crops. *Japan Agricultural Research Quarterly: JARQ*, v. 54, n. 2, p. 113-119.
- [22] INMETRO. 2020. Coordenação Geral de Acreditação. DOQ-CGCRE-008: orientação sobre validação de métodos analíticos. Rio de Janeiro. 30p. Revisão nº 09.
- [23] Skobelev, D. O. et al. 2011. Laboratory information management systems in the work of the analytic laboratory. *Measurement Techniques*, v. 53, n. 10, p. 1182-1189.
- [24] McLelland, A. 1998. "What is a LIMS - a laboratory toy, or a critical IT component?" (PDF). *Royal Society of Chemistry*, p. 1.
- [25] Bertolini, C. T.; Braga, J. C.; Pimentel, E.; Ramos, S. 2013. Laboratório Virtual interativo para reprodução de experimentos de química através de dispositivos móveis. *Brazilian Symposium on Computers in Education (Simpósio Brasileiro de Informática na Educação-SBIE)*, p. 285.
- [26] Labwin. 2020. Laboratory Software. Historioco.
- [27] Silas. 2020. Sistema Informatizado para Laboratórios de Análise. Megatecnologia-si.

ANEXO 2 – CERTIFICADO DE REGISTRO DE PROGRAMA DE COMPUTADOR



REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL
MINISTÉRIO DA ECONOMIA
INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL
DIRETORIA DE PATENTES, PROGRAMAS DE COMPUTADOR E TOPOGRAFIAS DE CIRCUITOS INTEGRADOS

Certificado de Registro de Programa de Computador

Processo Nº: **BR512021001390-5**

O Instituto Nacional da Propriedade Industrial expede o presente certificado de registro de programa de computador, válido por 50 anos a partir de 1º de janeiro subsequente à data de 01/01/2021, em conformidade com o §2º, art. 2º da Lei 9.609, de 19 de Fevereiro de 1998.

Título: Sistema de Gestão de Métodos Analíticos

Data de criação: 01/01/2021

Titular(es): FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DO TOCANTINS

Autor(es): WARLEY GRAMACHO DA SILVA; LUCIANO DE SOUSA MORAES; GLÉNDARA APARECIDA DE SOUZA MARTINS

Linguagem: PYTHON; DJANGO

Campo de aplicação: FQ-16

Tipo de programa: GI-01

Algoritmo hash: SHA-512

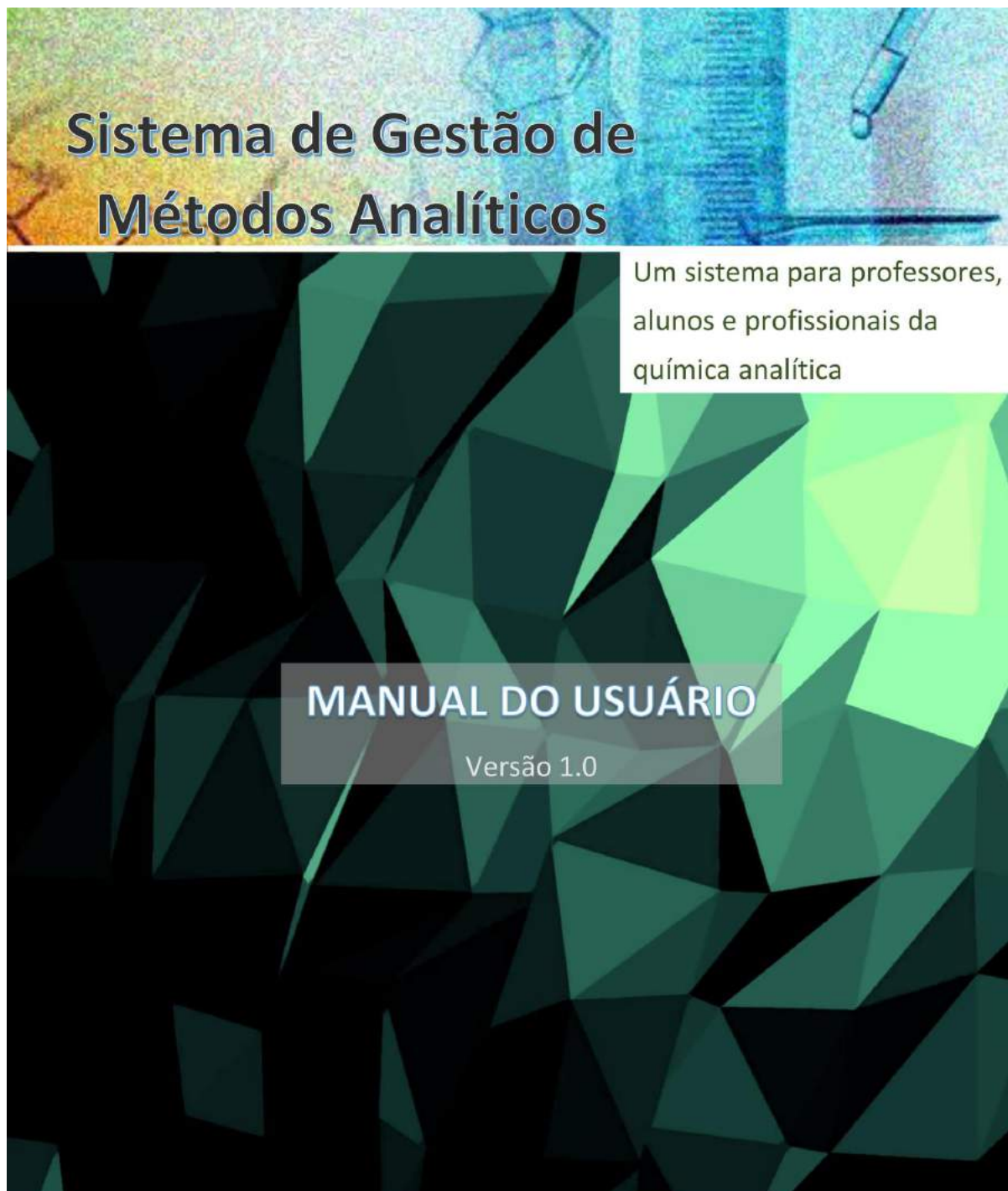
Resumo digital hash:

6a41ec20df4634369fef39916c81381e8dcc80439cbe1148f0fc08ed2fc86a69c40e675351112869fc15c54f98fedbd2f3cee
eda23c63c7f887e0d05112eb5a3

Expedido em: 29/06/2021

Aprovado por:
Carlos Alexandre Fernandes Silva
Chefe da DIPTO

APÊNDICE A - MANUAL DO USUÁRIO



Autores:

Luciano de Sousa Moraes

Dr. Warley Gramacho da Silva

Dr^a. Glêndara Aparecida de Souza Martins

SUMÁRIO

1. Sobre o Sistema de Gestão de Métodos Analíticos.....	3
2. Visão geral do sistema: Página inicial	4
3. Cadastro de usuário	5
4. Autenticação / Login	6
4.1 Recuperação de senha.....	6
4.2 Tipo de usuários / Permissões de acesso	7
5. Cadastro de métodos oficiais	8
6. Listagem de métodos oficiais cadastrados pelo usuário	9
7. Listagem de todos os métodos analíticos oficiais.....	10
8. Visualizando um método	11
9. Editando um método.....	12
10. QR Code	13
11. Gerando um PDF de um método oficial ou adaptação	14
12. Adaptando um método oficial.....	15
13. Lista de métodos adaptados.....	17
14. Adaptando um método com grupo usuários.....	18
15. Diário Profissional.....	20
16. Contato	21



1.SOBRE O SISTEMA DE GESTÃO DE MÉTODOS ANALÍTICOS

O sistema de gestão de métodos analíticos é uma plataforma web desenvolvida para o cadastro e adaptações de métodos analíticos utilizados em laboratórios por professores, pesquisadores, alunos e profissionais da química analítica.

Desenvolvido com uma tecnologia responsiva, o sistema pode ser acessado por qualquer dispositivo (smartphone, notebook e tablet) através do navegador de internet. O objetivo da ferramenta é dar suporte em aulas práticas e rotinas laboratoriais, possibilitando a otimização da dinâmica da experimentação científica no ambiente laboratorial e a maximização da divulgação de adaptações realizadas no âmbito da prática metodológica.

A plataforma é fruto de uma proposta de dissertação do programa de pós-graduação em Propriedade Intelectual e Transferência de Tecnologia para Inovação- PROFNIT, no ponto focal da Universidade Federal do Tocantins - UFT, o sistema foi idealizado e desenvolvido pelos pesquisadores Dr. Warley Gramacho da Silva e a Dr^a. Glêndara Aparecida de Souza Martins; e o acadêmico Luciano de Sousa Moraes.



Figura 1

2. VISÃO GERAL DO SISTEMA: PÁGINA INICIAL

Nesta seção listaremos as funcionalidades do sistema apresentadas na página inicial da plataforma.

Menu Principal

Ao clicar no menu métodos são listados todos os métodos oficiais cadastrados nos sistemas.

Área de acesso e gestão do sistema

Todos os usuários precisam estar autenticado para ter acesso aos métodos e outras funcionalidades. Para um novo cadastro basta clicar em cadastre-se.




Figura 2

Esta é página inicial do sistema onde é listado todas as classificações de métodos padronizados no sistema. Essas classificações foram implementadas conforme as publicações de métodos oficiais do Instituto Adolfo Lutz, referência nacional na publicação de métodos analíticos do Brasil. Para cada classificação o sistema apresenta o quantitativo de métodos cadastrados na plataforma, além de servir como uma busca rápida ao clicar na classificação.

3. CADASTRO DE USUÁRIO

Para utilizar as funcionalidades do sistema cada usuário necessita estar cadastrado na base dados da plataforma. Para isso é preciso clicar no link do menu "Cadastre-se" localizado no canto superior direito, então será exibido uma página de cadastro. O usuário deverá preencher os dados solicitados conforme figura 3.

SG-Métodos Início Métodos Contato Entrar Cadastre-se

Novo Cadastro

CPF

Nome completo

E-mail

Senha

Confirmação de senha

[Cadastrar](#)

Ao inscrever-se, você concorda com nossos [Termos de uso](#) e nossa [Política de privacidade](#).

Já possui cadastro? [Fazer login](#)

Figura 3

Ao clicar em "Cadastrar" o sistema redirecionará para a sua página pessoal, contendo seus dados. O usuário poderá incluir uma foto e acrescentar mais informações pessoais.

SG-Métodos Início Métodos Contato Minha conta Administração Sair

Meus dados



CPF

Foto
 Atualmente: [images/profiles/2020/04/26/luciano3e4.jpg](#)
 Limpar

Modificar:
 Nenhum arquivo selecionado

Nome completo

Figura 4

4. AUTENTICAÇÃO / LOGIN

Para autenticar no sistema basta clicar no menu "Entrar" localizado no canto superior direito da página inicial do sistema. O usuário deverá inserir os mesmos dados realizado no cadastro do usuário.

SG-Métodos Início Métodos Contato Entrar Cadastra-se

O usuário poderá recuperar sua senha clicando nesse link e utilizando o e-mail cadastrado no sistema

Autenticação

CPF

Digite apenas números ex. 000000000

Senha

Entrar
[Recuperar senha ou Cadastre-se](#)

Figura 5

4.1 RECUPERAÇÃO DE SENHA

Se o usuário esqueceu a senha de acesso, o sistema permite realizar esta recuperação/alteração de senha. Para isso o usuário deverá clicar no menu "Recuperar senha", em seguida o sistema exibirá uma página solicitando para que o mesmo insira o e-mail que o usuário utilizou no seu cadastro inicial.

SG-Métodos Início Métodos Contato Entrar Cadastra-se

Alteração de senha
 Entre com o e-mail usado quando você realizou o cadastro no sistema.

Email*

Enviar

Figura 7

SG-Métodos Início Métodos Contato Entrar Cadastra-se

Um e-mail foi enviado com instruções para alteração de senha. Por favor acesse sua caixa de entrada.

Figura 6



Ao inserir o e-mail cadastrado e clicar no botão "Enviar", você receberá na sua conta de e-mail, um link e instruções para cadastrar uma nova senha.

4.2 TIPO DE USUÁRIOS / PERMISSÕES DE ACESSO

O Sistema possui quatro tipos de usuários são eles: Usuário externo, Estudante, Docente/pesquisador e coordenador(a). Todos os usuários possuem estas opções conforme figura 8.

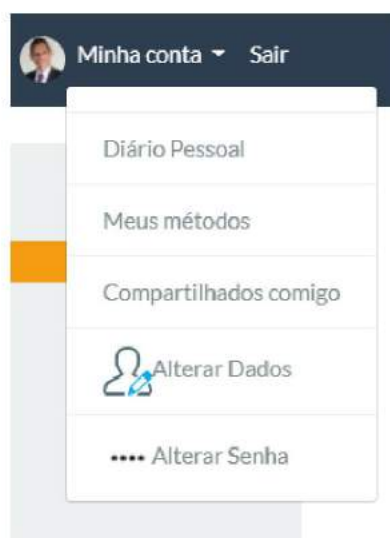


Figura 8

Dentre esses tipos de usuários apenas o perfil de coordenador possui permissão de acesso ao menu "Administração" é possível realizar o cadastro de métodos oficiais na plataforma.

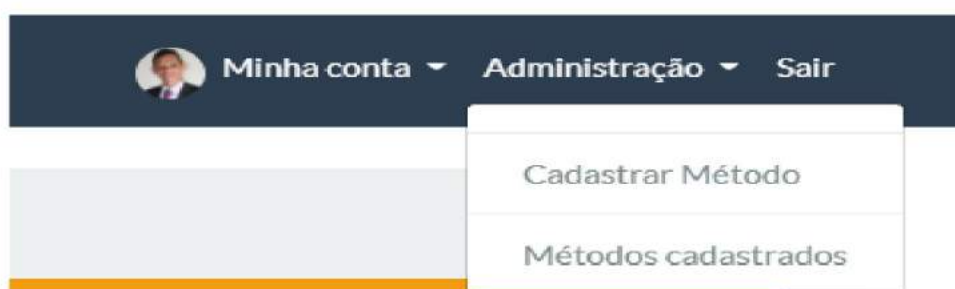


Figura 9



5. CADASTRO DE MÉTODOS OFICIAIS

Ao clicar no link "**Cadastrar Método**" do menu **Administração**, o sistema exibirá a tela de cadastros de métodos oficiais. O procedimento é bem simples e auto explicativo. Será obrigatório selecionar a origem do método a ser cadastrado por exemplo Instituto Adolf Lutz. Uma vez que o sistema só permitirá o cadastro de métodos oficiais.

A imagem mostra a interface de usuário do sistema SG-Métodos. No topo, há uma barra de navegação com os links 'Início', 'Métodos oficiais' e 'Contato'. À direita, há uma barra de usuário com 'Minha conta', 'Administração' e 'Sair'. O formulário principal, intitulado 'NOVO MÉTODO', contém os seguintes campos:

- Origem:** Um menu suspenso com uma seta para baixo.
- Classificação*:** Um menu suspenso com uma seta para baixo.
- Código*:** Um campo de texto.
- Título*:** Um campo de texto.
- Descrição:** Uma área de texto com uma barra de ferramentas de formatação (negrito, itálica, sublinhado, etc.).

Figura 10

Os dados necessários para cadastro de um novo método estão listados a seguir:

Origem: Ex. Instituto Adolfo Lutz

Classificação: Ex. Bebidas

Código: Ex. 001/I

Título: Açúcares - Sacarose por desvio polarimétrico direto

Descrição

Material

Reagente(s)

Procedimento

Cálculo

Referência bibliográfica

Público ? Selecionando esta opção, todos os usuários poderão visualizar o método. Recomendamos selecionar apenas quando concluir o cadastro.



Ao clicar em **SALVAR**, o sistema redirecionará para a página "Métodos cadastrados"

6. LISTAGEM DE MÉTODOS OFICIAIS CADASTRADOS PELO USUÁRIO

A página "Métodos cadastrados" exibirá todos os métodos que o usuário cadastrou seguindo a ordem por data de cadastro.

SG-Métodos Início Métodos oficiais Contato Minha conta Administração Sair

Métodos cadastrados

O usuário poderá realizar a busca por método, classificação ou publicado

NOVO MÉTODO

Busca por método Classificação Publicado? Buscar

Procedimentos e Determinações Gerais **Privado**

D11/IV Densidade

Procedimento

Açúcares e produtos correlatos **Público**

169/IV Açúcares - Sacarose por desvio polarimétrico direto

Materiais Reagentes Procedimento Cálculo

Procedimentos e Determinações Gerais **Público**

010/IV Índice de refração

Figura 11

Os métodos são visualizados no sistema em formato de card, possui em seu cabeçalho a classificação, no corpo a logomarca da origem do método, título do método e os ícones com as opções de QRcode, Gerá PDF e listagem de métodos adaptados.

Procedimentos e Determinações Gerais **Público**

005/IV Reação para amônia - Prova de Éber

Materiais Reagentes Procedimento

Procedimentos e Determinações Gerais **Privado**

004/IV Reação para gás sulfídrico - Prova de Éber

Materiais Reagentes Procedimento

Figura 12



7. LISTAGEM DE TODOS OS MÉTODOS ANALÍTICOS OFICIAIS

Ao clicar no menu principal "Métodos oficiais" o sistema exibirá todos os métodos públicos cadastrados por todos os usuários.

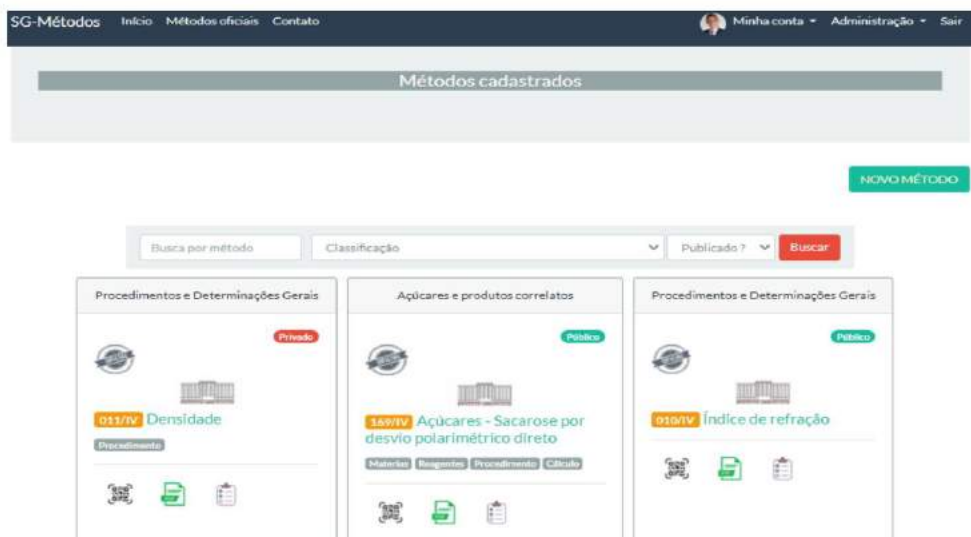


Figura 13

Todos os usuários visualizam os cards dos métodos conforme figura 13.

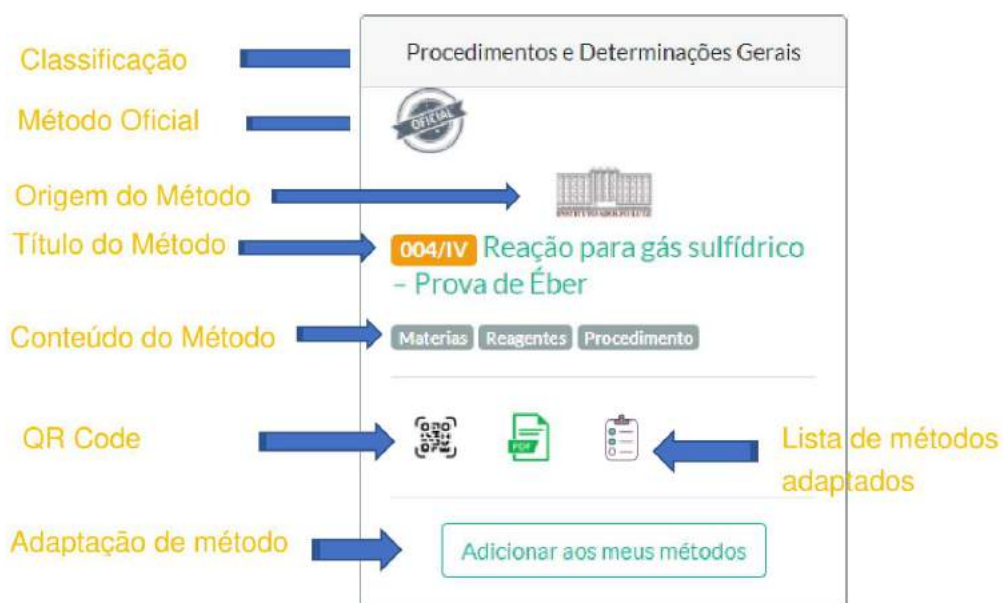
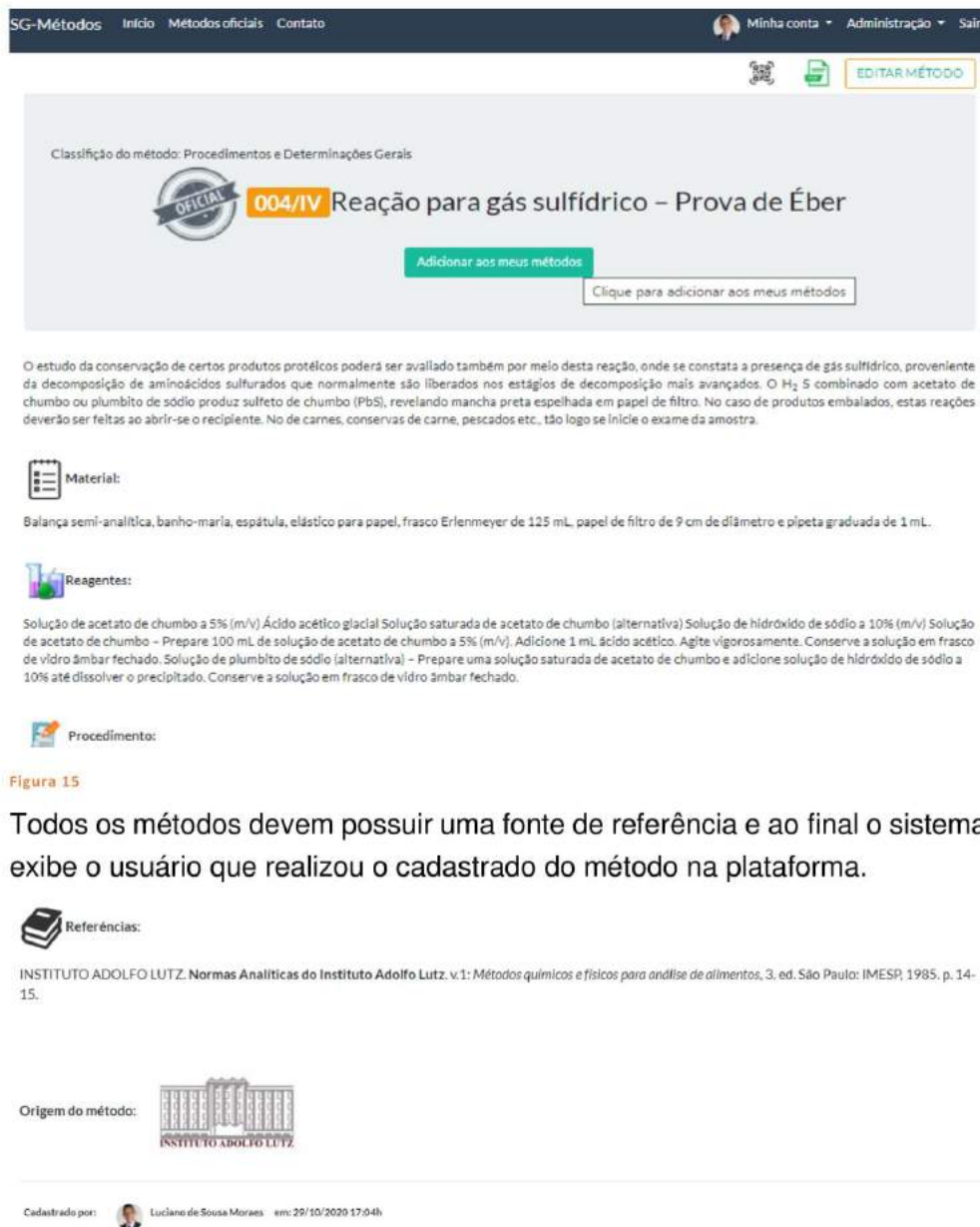




Figura 14

8. VISUALIZANDO UM MÉTODO


Para visualizar o conteúdo de um método, o usuário deverá clicar no link do título do método.



SG-Métodos Início Métodos oficiais Contato Minha conta Administração Sair


  [EDITAR MÉTODO](#)

Classificação do método: Procedimentos e Determinações Gerais

 **004/IV** Reação para gás sulfídrico – Prova de Éber

[Adicionar aos meus métodos](#) Clique para adicionar aos meus métodos

O estudo da conservação de certos produtos protéicos poderá ser avaliado também por meio desta reação, onde se constata a presença de gás sulfídrico, proveniente da decomposição de aminoácidos sulfurados que normalmente são liberados nos estágios de decomposição mais avançados. O H_2S combinado com acetato de chumbo ou plumbito de sódio produz sulfeto de chumbo (PbS), revelando mancha preta espelhada em papel de filtro. No caso de produtos embalados, estas reações deverão ser feitas ao abrir-se o recipiente. No de carnes, conservas de carne, pescados etc., tão logo se inicie o exame da amostra.

 **Material:**

Balança semi-analítica, banho-maria, espátula, elástico para papel, frasco Erlenmeyer de 125 mL, papel de filtro de 9 cm de diâmetro e pipeta graduada de 1 mL.

 **Reagentes:**

Solução de acetato de chumbo a 5% (m/v) Ácido acético glacial Solução saturada de acetato de chumbo (alternativa) Solução de hidróxido de sódio a 10% (m/v) Solução de acetato de chumbo – Prepare 100 mL de solução de acetato de chumbo a 5% (m/v). Adicione 1 mL ácido acético. Agite vigorosamente. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado. Solução de plumbito de sódio (alternativa) – Prepare uma solução saturada de acetato de chumbo e adicione solução de hidróxido de sódio a 10% até dissolver o precipitado. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado.




 **Procedimento:**

Figura 15

Todos os métodos devem possuir uma fonte de referência e ao final o sistema exibe o usuário que realizou o cadastrado do método na plataforma.

 **Referências:**

INSTITUTO ADOLFO LUTZ. Normas Analíticas do Instituto Adolfo Lutz, v.1: Métodos químicos e físicos para análise de alimentos, 3. ed. São Paulo: IMESP, 1985, p. 14-15.

Origem do método: 


Cadastrado por:  Luciano de Sousa Moraes em: 29/10/2020 17:04h

Figura 16

9. EDITANDO UM MÉTODO

Para editar o conteúdo de um método, o usuário deverá clicar no botão "EDITAR MÉTODO", em seguida o sistema exibirá a página de edição de método, similar a página de cadastro de métodos.

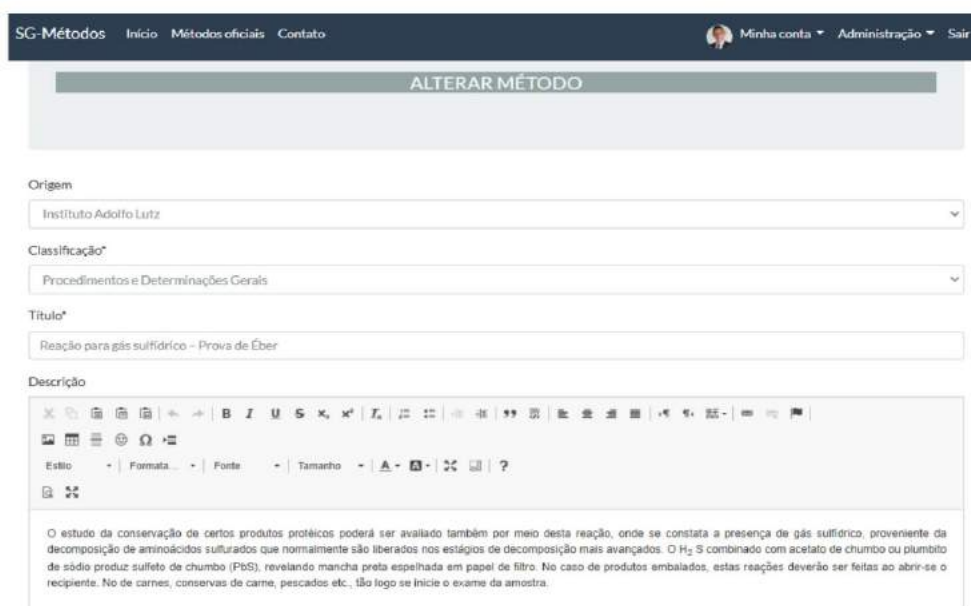


Figura 17

Para salvar as alterações do conteúdo, o usuário deverá clicar no botão "EDITAR" conforme tela a baixo.

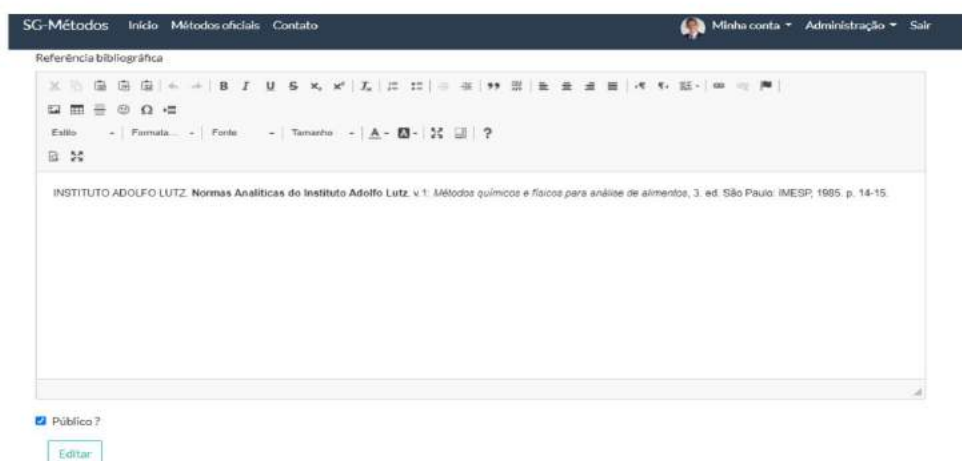


Figura 18

10. QR CODE

QR Code é um código de barras, bidimensional, que pode ser escaneado usando a câmera de smartphones. Para facilitar a divulgação ou acesso cada método oficial ou uma adaptação de método cadastrado, o sistema gera de forma automática um QR code específico com um link de acesso.



Figura 19

Ao clicar no ícone QR Code, o sistema exibirá o QR CODE em uma página específica.



Figura 20



11. GERANDO UM PDF DE UM MÉTODO OFICIAL OU ADAPTAÇÃO

Para gerar uma um PDF de um método oficial ou adaptação, o usuário deverá clicar no ícone PDF, o sistema então criará um pagina com os padrões de uma um papel A4. Assim o usuário poderá imprimir ou salvar no formato PDF.

Método

004/IV Reação para gás sulfídrico – Prova de Éber

O estudo da conservação de certos produtos protéicos poderá ser avaliado também por : onde se constata a presença de gás sulfídrico, proveniente da decomposição de aminas que normalmente são liberados nos estágios de decomposição mais avançados. O H_2S combinado com acetato de chumbo ou plumbito de sódio produz sulfeto de chumbo (PbS), revelando mancha preta espelhada em papel de filtro. No caso de produtos embalados, estas reações deverão ser feitas ao abrir-se o recipiente. No de carnes, conservas de carne, pescados etc., tão logo se inicie o exame da amostra.

Material:

Balança semi-analítica, banho-maria, espátula, elástico para papel, frasco Erlenmeyer de 125 mL, papel de filtro de 9 cm de diâmetro e pipeta graduada de 1 mL.

Reagentes:

Solução de acetato de chumbo a 5% (m/v) Ácido acético glacial Solução saturada de acetato de chumbo (alternativa) Solução de hidróxido de sódio a 10% (m/v) Solução de acetato de chumbo – Prepare 100 mL de solução de acetato de chumbo a 5% (m/v). Adicione 1 mL ácido acético. Agite vigorosamente. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado. Solução de plumbito de sódio (alternativa) – Prepare uma solução saturada de acetato de chumbo e adicione solução de hidróxido de sódio a 10% até dissolver o precipitado. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado.

Procedimento:

Transfira 10 g da amostra homogeneizada para um frasco Erlenmeyer de 125 mL. Feche com dois discos sobrepostos de papel de filtro com auxílio de elástico. Com uma pipeta, embeba a superfície do papel com solução de acetato de chumbo (ou plumbito de sódio). Coloque o frasco em banho-maria de modo que o fundo do frasco fique a 3 cm acima do nível da água fervente. Aqueça por 10 minutos. O aparecimento de mancha preta no papel de filtro em contato com os vapores indica a presença de gás sulfídrico. Considere em bom estado de conservação – reação negativa – as amostras que apresentarem uma reação de gás sulfídrico.

Figura 21

Em cada método é incluído um QR code para facilitar o acesso ao método oficial e posterior adaptações para os usuários interessados.



12. ADAPTANDO UM MÉTODO OFICIAL

Para adaptar um método oficial o usuário deverá primeiramente clicar no botão **Adicionar aos meus métodos**, assim o sistema criará uma cópia e adicionará a sua lista de métodos, onde o usuário poderá realizar qualquer alteração que desejar.

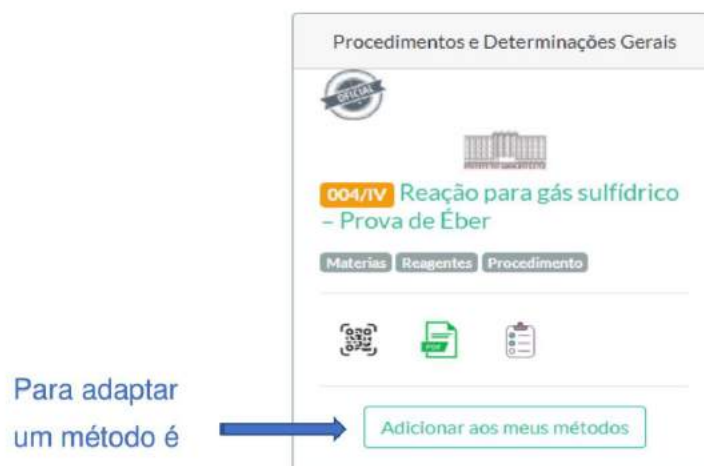


Figura 22

SG Métodos Início Métodos oficiais Contato Minha conta Administração Sair

EDITAR MÉTODO

Classificação do método: Procedimentos e Determinações Gerais

004/IV Reação para gás sulfídrico – Prova de Éber

Adicionar aos meus métodos

Clique para adicionar aos meus métodos

O estudo da conservação de certos produtos protéicos poderá ser avaliado também por meio desta reação, onde se constata a presença de gás sulfídrico, proveniente da decomposição de aminoácidos sulfurados que normalmente são liberados nos estágios de decomposição mais avançados. O $H_2 S$ combinado com acetato de chumbo ou plumbito de sódio produz sulfeto de chumbo (PbS), revelando mancha preta espalhada em papel de filtro. No caso de produtos embalados, estas reações deverão ser feitas ao abrir-se o recipiente. No de carnes, conservas de carne, pescados etc., tão logo se inicie o exame da amostra.

Material:
Balança semi-analítica, banho-maria, espátula, elástico para papel, frasco Erlenmeyer de 125 mL, papel de filtro de 9 cm de diâmetro e pipeta graduada de 1 mL.

Reagentes:
Solução de acetato de chumbo a 5% (m/v) Ácido acético glacial Solução saturada de acetato de chumbo (alternativa) Solução de hidróxido de sódio a 10% (m/v) Solução de acetato de chumbo - Prepare 100 mL de solução de acetato de chumbo a 5% (m/v). Adicione 1 mL ácido acético. Agite vigorosamente. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado. Solução de plumbito de sódio (alternativa) - Prepare uma solução saturada de acetato de chumbo e adicione solução de hidróxido de sódio a 10% até dissolver o precipitado. Conserve a solução em frasco de vidro âmbar fechado.

Procedimento:

Figura 23



A página meus métodos adaptados contém todos os métodos que foram adicionados e que foram realizadas adaptações.

Por padrão o sistema gerar um novo código para cada método, adicionando ao código do método **-A +n^o de adaptações realizadas**, além disso o sistema altera a publicação para **privada**, assim apenas o seu usuário poderá visualizar, enquanto não alterar para público após as adaptações necessárias.

SG-Métodos Início Métodos oficiais Contato Minha conta Administração Sair

Foi criado uma copia do método, agora você modifica-lo/adapta-lo como desejar.

DIÁRIO PESSOAL

Meus métodos adaptados

Busca por método

Método	Qr code	Ação
Privado 004/IV-A1 Reação para gás sulfídrico – Prova de Éber		<input type="button" value="Adaptar método"/>
Privado 010/IV-A1 Índice de refração		<input type="button" value="Adaptar método"/>
Privado 006/IV-A1 Ponto de fusão - Substâncias facilmente reduzíveis a pó		<input type="button" value="Adaptar método"/>

Figura 24

Ao clicar em **Adaptar método** o sistema exibirá a página de adaptação, similar a tela edição de método.

SG-Métodos Início Métodos oficiais Contato Minha conta Administração Sair

Método da Lista do Usuário: Leticiana de Sousa Moraes

ADAPTAÇÃO DE MÉTODO

Classificação*

Título*

Descrição

Figura 25



13. LISTA DE MÉTODOS ADAPTADOS

Para cada método oficial há um ícone [Lista de métodos adaptados](#), onde é exibido todos as adaptações realizadas por todos os usuários do sistema.



Figura 27



Figura 26

14. ADAPTANDO UM MÉTODO COM GRUPO USUÁRIOS

O sistema permite compartilhar uma adaptação com outros usuários do sistema. Assim os usuários podem contribuir com a adaptação incluindo comentários. Para compartilhar é preciso visualizar o método adaptado e clicar no botão **Compartilhar**.

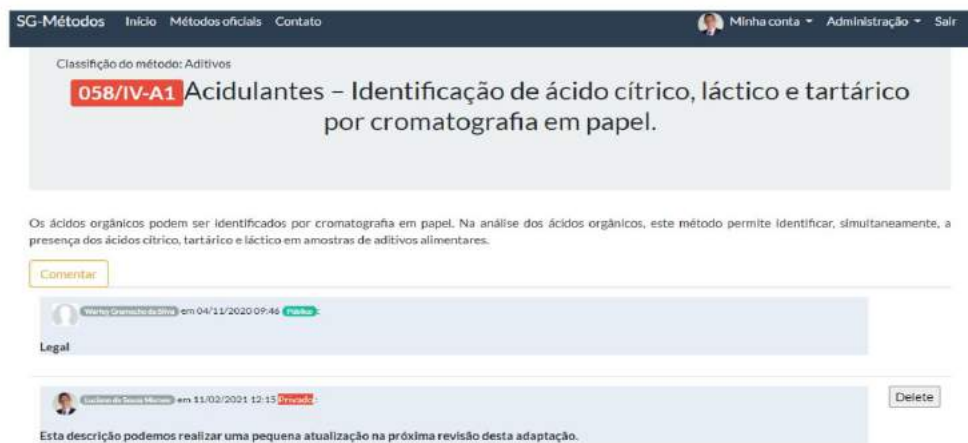


Figura 28

É preciso inserir o e-mail do usuário, para que seja dado permissão para o mesmo poder realizar comentários.

Ao clicar em enviar o sistema enviará um e-mail para o usuário com o link de acesso ao método.

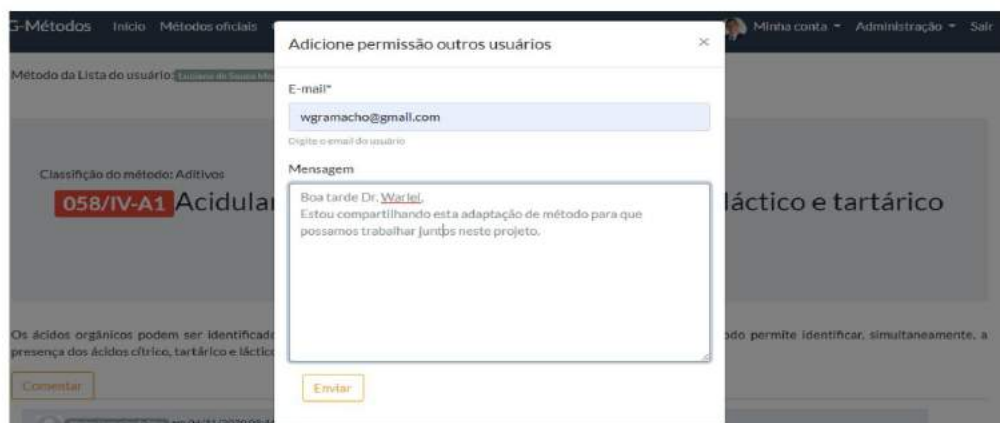


Figura 29



No rodapé do método é exibido os membros da equipe (todos os usuários que foram compartilhados).



Figura 30

Para acessar os métodos compartilhados com o usuário, basta clicar no menu [Minha conta](#) e em seguida no submenu [Compartilhados comigo](#).



Figura 31

Agora os membros estão com permissão para realizar comentários ao clicar no botão [Comentar](#)

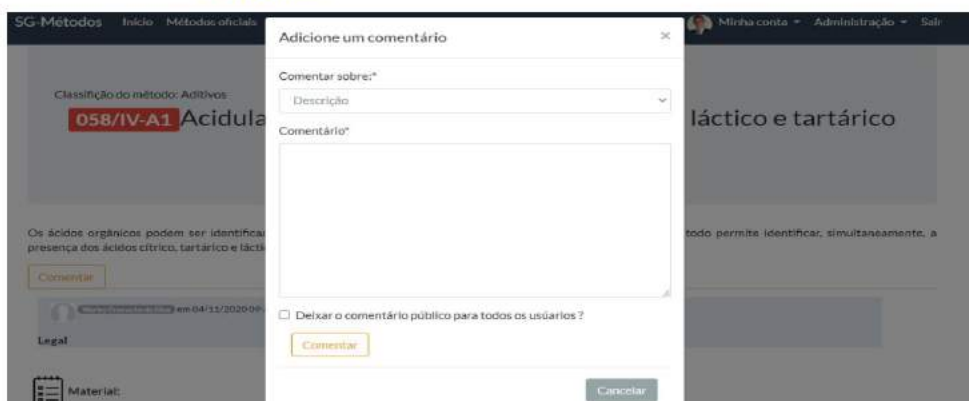


Figura 32





Para deletar um comentário, basta clicar no botão **delete**

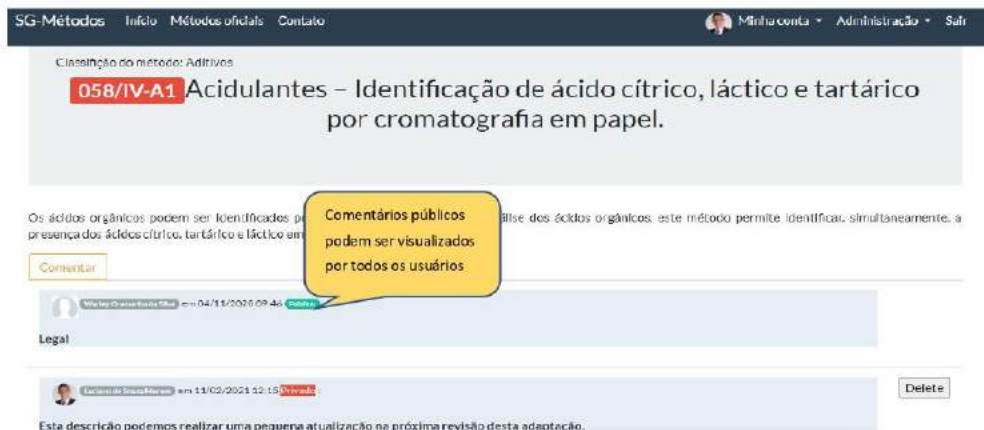


Figura 33

15. DIÁRIO PROFISSIONAL

O sistema possui um diário do pesquisador, nesta página o usuário poderá cadastrar diversos comentários, para cada método que o mesmo adaptou ou que está adaptando.

Para acessar o diário profissional do pesquisado basta clicar no menu Minha conta em seguida [Diário Profissional](#).

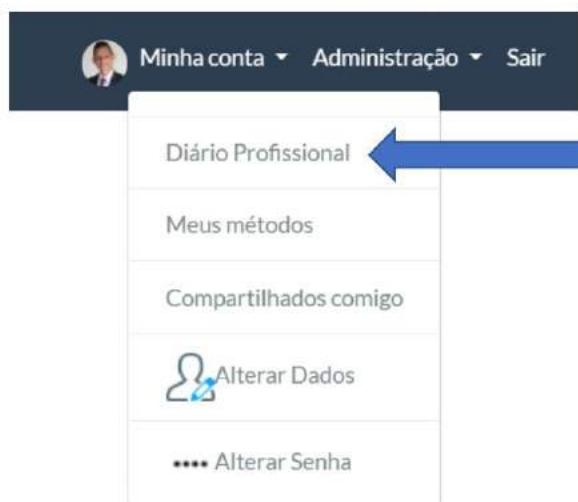
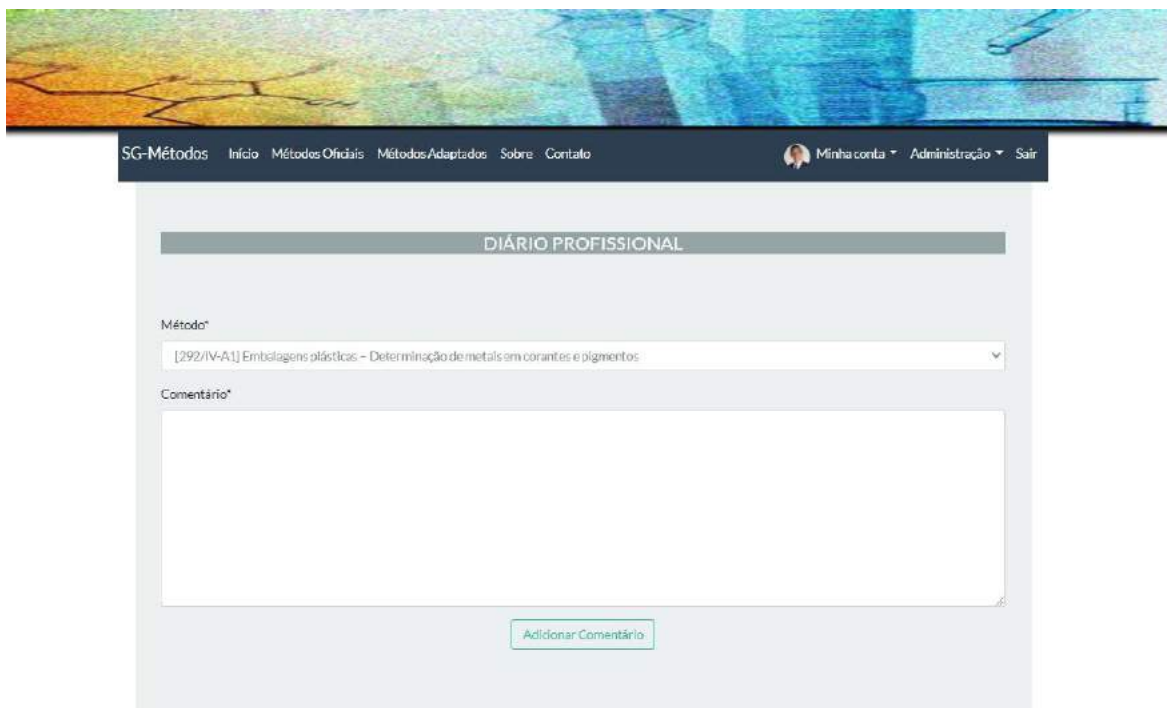


Figura 34





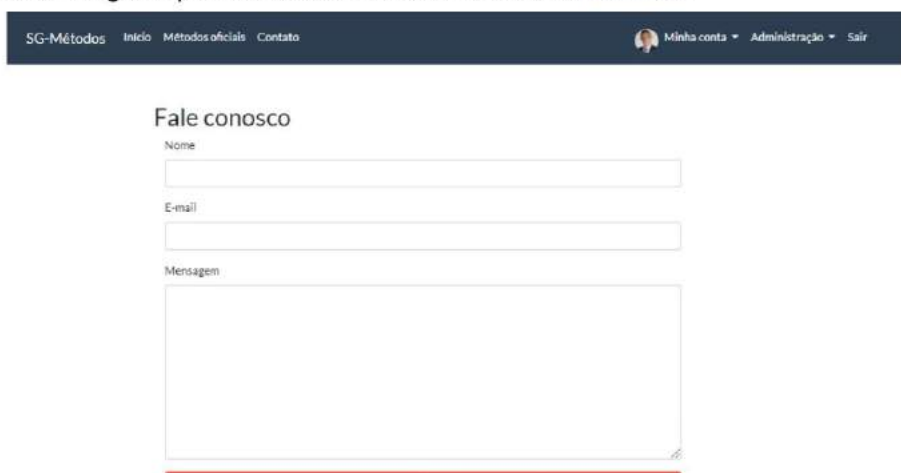
The screenshot shows the 'DIÁRIO PROFISSIONAL' (Professional Diary) form. At the top, there is a navigation bar with 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos Oficiais', 'Métodos Adaptados', 'Sobre', and 'Contato'. On the right side of the navigation bar, there are links for 'Minha conta', 'Administração', and 'Sair'. The main form area has a title 'DIÁRIO PROFISSIONAL' and a dropdown menu for 'Método*' with the selected option '[292/IV-A1] Embalagens plásticas - Determinação de metais em corantes e pigmentos'. Below the dropdown is a large text area for 'Comentário*'. At the bottom of the form is a button labeled 'Adicionar Comentário'.

Figura 35

O usuário poderá adicionar quantos comentários desejar, ficando registrado a data, o método e o comentário.

16. CONTATO

O sistema permite qualquer usuário enviar alguma sugestão, dúvida ou realizar algum questionamento através do menu [Contato](#).



The screenshot shows the 'Fale conosco' (Contact Us) form. At the top, there is a navigation bar with 'SG-Métodos', 'Início', 'Métodos Oficiais', and 'Contato'. On the right side of the navigation bar, there are links for 'Minha conta', 'Administração', and 'Sair'. The main form area has a title 'Fale conosco' and three input fields: 'Nome', 'E-mail', and 'Mensagem'. The 'Mensagem' field is a large text area. At the bottom of the form is a red horizontal line.

Figura 36