

Aplicação de um Modelo Gaussiano Assimétrico na Deconvolução de Curvas Cinéticas de Biofilmes obtidos do Mesocarpo do Melão (*Cucumis Melo L.*)

Jorge M. V. Capela,¹ Marisa V. Capela²
DEFM/IQ-UNESP, Araraquara, SP
Diógenes dos Santos Dias,³ Clóvis A. Ribeiro⁴
DQAFQI/IQ-UNESP, Araraquara, SP

Na análise de processos envolvendo reações em fase condensada estimuladas termicamente há interesse no ajuste de modelos às curvas cinéticas $d\alpha/dT$, sendo α , $0 < \alpha < 1$ o grau de conversão da reação e T a temperatura absoluta. Embora o ajuste possa ser realizado utilizando-se a função gaussiana, em processos não isotérmicos as curvas $d\alpha/dT$ apresentam características assimétricas e os melhores resultados são obtidos com a função assimétrica de Fraser-Suzuki, definida por

$$FS(x) = a \exp \left\{ -\ln 2 \left[\frac{1}{\gamma} \ln \left(1 + \gamma \frac{x - x_0}{w} \right) \right]^2 \right\}, \quad (1)$$

sendo a a amplitude, x_0 o centro e w a meia largura em meia altura (“Half-Width at Half Maximum” ou “HWHM”). O parâmetro γ é tal que $(1/\gamma) \ln(1 + \gamma(x - x_0)/w) \rightarrow (x - x_0)/w$, quando $\gamma \rightarrow 0$ isto é, a função de Fraser-Suzuki torna-se a função gaussiana [1–4].

Este trabalho tem como objetivo analisar a deconvolução de curvas cinéticas da decomposição térmica de biofilmes obtidos do mesocarpo do melão (*Cucumis Melo L.*).

Foram realizados ajustes de modelos constituídos pela soma de funções gaussianas e de três funções de Fraser Suzuki a dados de obtidos de experimentos não isotérmicos executados em três razões lineares de aquecimento, $\beta = 5, 10$ e 20 °C/min.

A Figura 1 mostra, para $\beta = 10$ °C/min, os valores experimentais $d\alpha/dT$ (pontos), a sobreposição das curvas cinéticas intermediárias (linhas pontilhadas) e o ajuste da soma das funções intermediárias (linha sólida), tanto no caso gaussiano (Figura 1a) quanto no caso de Fraser-Suzuki (Figura 1b). Também são apresentados os coeficientes de determinação R^2 e os gráficos quantil-quantil (qq-plot) para os erros residuais definidos pelos desvios entre os valores experimentais e os ajustados. Foram obtidos resultados semelhantes para $\beta = 5$ e 20 °C/min.

¹jorge.capela@unesp.br

²marisa.capela@unesp.br

³dignes@gmail.com

⁴clovis.ribeiro@unesp.br

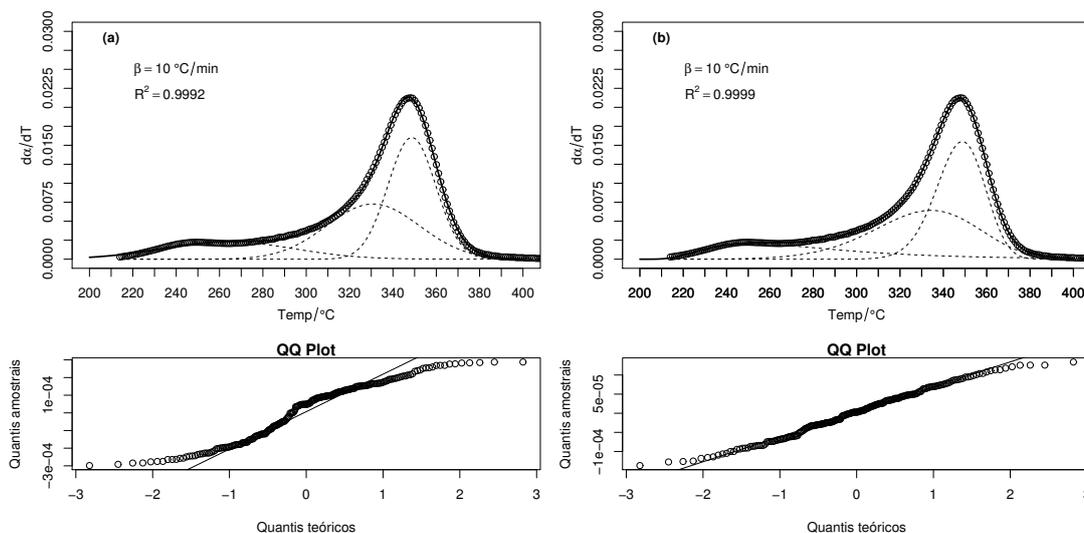


Figura 1: Valores experimentais $d\alpha/dT$ (pontos) obtidos na razão de aquecimento $\beta = 10$ °C/min, curvas cinéticas intermediárias (linhas pontilhadas) e ajuste da soma das funções intermediárias (linha sólida), além dos gráficos quantil-quantil (qq-plot) para os erros residuais: (a) Modelo gaussiano, (b) Modelo Fraser-Suzuki

Em todas as razões de aquecimento foi possível observar que as curvas cinéticas são constituídas pela soma de três curvas intermediárias, $d\alpha/dT = d\alpha_1/dT + d\alpha_2/dT + d\alpha_3/dT$. Isto sugere tratar-se de um processo complexo onde estão envolvidas três reações intermediárias sobrepostas.

Os coeficientes de determinação $R^2 = 0.9992$ para o caso do ajuste gaussiano e $R^2 = 0.9999$ para o caso de Fraser-Suzuki indicam que a qualidade do ajuste é um pouco melhor para este último modelo, o que também foi confirmado pela análise da dispersão dos resíduos dos resíduos. Além disso, verificou-se nos gráficos quantil-quantil que o modelo de Fraser-Suzuki possui resíduos com uma distribuição mais próxima da normal.

Conclui-se que a deconvolução das curvas cinéticas de biofilmes obtidos do mesocarpo de melão com a utilização de um modelo gaussiano assimétrico como o de Fraser-Suzuki produz resultados com melhor qualidade de ajuste. Futuramente pretende-se avaliar também a deconvolução de curvas cinéticas de outros tipos de biofilmes.

Referências

- [1] A. Felinger. **Data analysis and signal processing in chromatography**. Amsterdam: Elsevier, 1998. ISBN: 0-444-82066-3.
- [2] R. D.B. Fraser e E. Suzuki. “Resolution of overlapping bands. Functions for simulating band shapes”. Em: **Analytical Chemistry** 41.1 (1969), pp. 37–39.
- [3] L. Miranda, M. V. Capela e J. M. V. Capela. “Um estudo da função de Fraser-Suzuki e sua aplicabilidade à cinética não-isotérmica de reações competitivas”. Em: **C.Q.D.– Revista Eletrônica Paulista de Matemática** 14 (fev. de 2019), pp. 47–56. DOI: 10.21167/cqdvo114ermac2019231696641mmvcjmvc4756.
- [4] A. Perejón et al. “Kinetic analysis of complex solid-state reactions. A new deconvolution procedure”. Em: **The Journal of Physical Chemistry B** 115.8 (2011), pp. 1780–1791.