IONFLOW PIPELINE: AUTOMAÇÃO E INTEGRAÇÃO DE ANÁLISES ELETROQUÍMICAS

Autores: Emanuel de Souza Silva Oliveira[1], Lucas Cardoso[2], Emerson Sarmento Gonçalves[3,4], Bianca Fortes Palley[4].

[1]Universidade do Vale do Paraíba/Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento, Avenida Shishima Hifumi, 2911, Urbanova, São José dos Campos-SP, 12244-000, Brasil, eso414921@gmail.com.
[2]Instituto Federal de São Paulo, Rod. Pres. Dutra, km 145 - s/n - Jardim Diamante, São José dos Campos - SP, 12223-201, Brasil, lucascardosogomesoficial25@gmail.com.
[3]Instituto Tecnológico da Aeronáutica, Praça Marechal Eduardo Gomes, 50 - Vila das Acacias, São José dos Campos - SP, 12228-900, Brasil, emerson.goncalves@gp.ita.br.
[4]Instituto de Aeronáutica e Espaço, Praça Marechal Eduardo Gomes, 50 - Vila das Acacias, São José dos Campos - SP, 12228-904, Brasil, emerson.goncalves@gp.ita.br, fortes.bianca@yahoo.com.br.

Resumo

O processamento de ensaios eletroquímicos frequentemente exige a combinação de diferentes softwares, planilhas e etapas manuais, aumentando o tempo de análise e a possibilidade de inconsistências. Este trabalho apresenta o IonFlow Pipeline, uma ferramenta computacional desenvolvida para automatizar e integrar o tratamento de dados de voltametria cíclica (CV), carga e descarga galvanostática (GCD) e espectroscopia de impedância eletroquímica (EIS), incluindo método de Dunn e distribuição de tempos de relaxação (DRT). A arquitetura integra módulos analíticos a um Scientific Protocol, responsável pela consolidação de métricas e classificação multicritério. Como demonstração, o sistema foi aplicado a um estudo comparativo de eletrólitos em células com MXeno de nióbio. Em benchmark contra um fluxo tradicional baseado em NOVA, Excel e Origin, a análise completa foi reduzida de 408,4 para 5,3 min, correspondente a aceleração de aproximadamente 77,6 vezes e redução de 98,7% no tempo de processamento. Os resultados demonstram o potencial da ferramenta para reduzir o tempo de processamento e diminuir a necessidade de operações manuais, mantendo os dados e parâmetros experimentais organizados em um fluxo integrado.

Palavras-chave: Eletroquímica. Automação científica. Impedância eletroquímica. Análise de dados. Pipeline científico.

Área do Conhecimento: Engenharias, Engenharia Elétrica, Engenharia de Computação, Materiais e Componentes Elétricos.

Introdução

A caracterização eletroquímica de materiais destinados ao armazenamento de energia gera conjuntos de dados heterogêneos e complementares, obtidos por diferentes técnicas experimentais, como CV, EIS e GCD. Cada técnica fornece informações específicas sobre o comportamento eletroquímico do material, incluindo sua capacidade de armazenamento de carga, cinética de transferência de carga, resistência interna e estabilidade durante os ciclos. A análise dessas técnicas pode exigir transferência manual de dados entre softwares, planilhas e rotinas independentes, resultando em um maior tempo de análise, dificultando a padronização e reprodutibilidade do processamento dos dados.

Nesse contexto, pipelines científicos permitem transformar uma sequência fragmentada de tarefas em um fluxo reprodutível, no qual entradas, parâmetros, métricas e saídas permanecem organizados e rastreáveis. Para EIS, procedimentos consolidados incluem ajuste por circuitos equivalentes e análise de processos de relaxação (Barsoukov; Macdonald, 2005; Ciucci; Chen, 2015), enquanto dados de CV podem ser empregados na separação de contribuições cinéticas por métodos baseados na dependência com a velocidade de varredura.

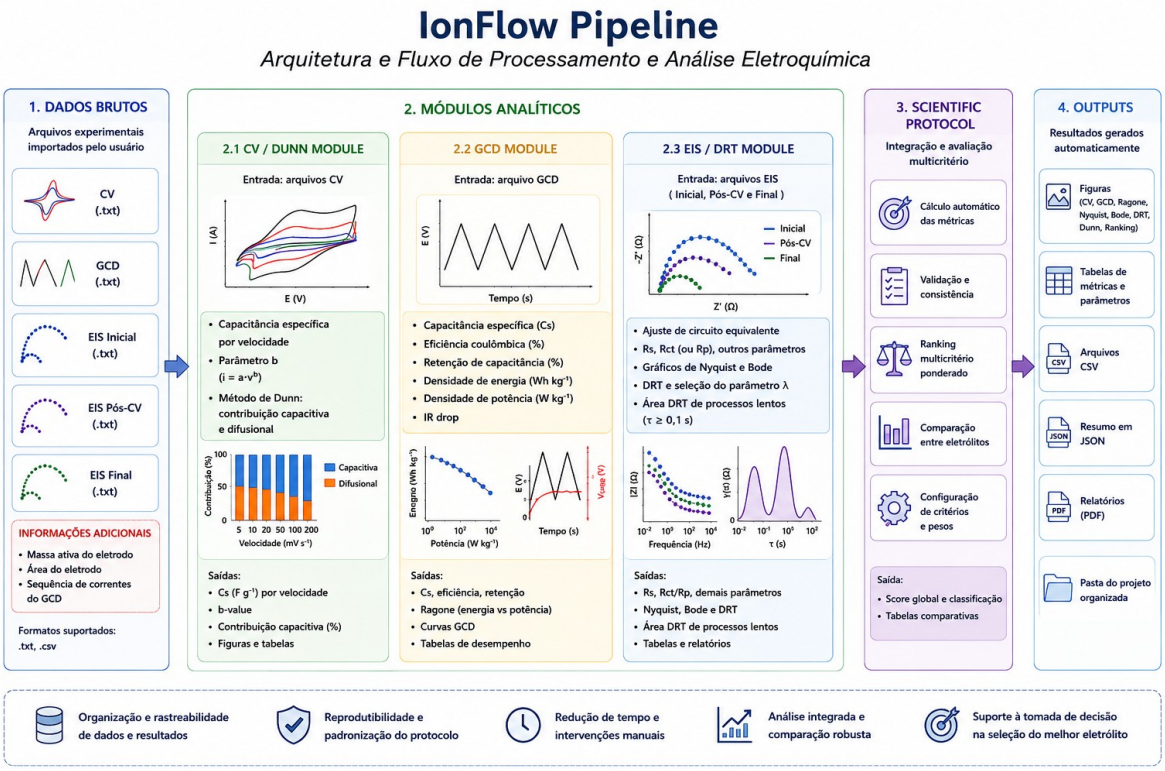
O objetivo deste trabalho foi desenvolver e avaliar operacionalmente o IonFlow Pipeline como uma plataforma integrada para automatização de análises eletroquímicas, reunindo módulos de CV/Dunn,

GCD e EIS/DRT, além de um protocolo científico para consolidação e classificação de resultados. A ferramenta foi avaliada quanto ao tempo de processamento em comparação com um fluxo tradicional de análise e demonstrada em um estudo comparativo de diferentes eletrólitos.

Metodologia

O IonFlow Pipeline foi organizado em quatro etapas principais: entrada dos dados experimentais, módulos analíticos, Scientific Protocol e geração de resultados. Os arquivos experimentais em formato TXT ou CSV são associados às informações da célula, como massa ativa, área do eletrodo e sequência de correntes utilizada no GCD. A partir dessas entradas, os módulos CV/Dunn, GCD e EIS/DRT executam os cálculos específicos de cada técnica. Os dados obtidos nas diferentes etapas de caracterização são integrados pelo Scientific Protocol, que permite a comparação sistemática das condições experimentais, a padronização do processamento e a geração automatizada das saídas analíticas. O fluxo de processamento desenvolvido é apresentado na Figura 1.

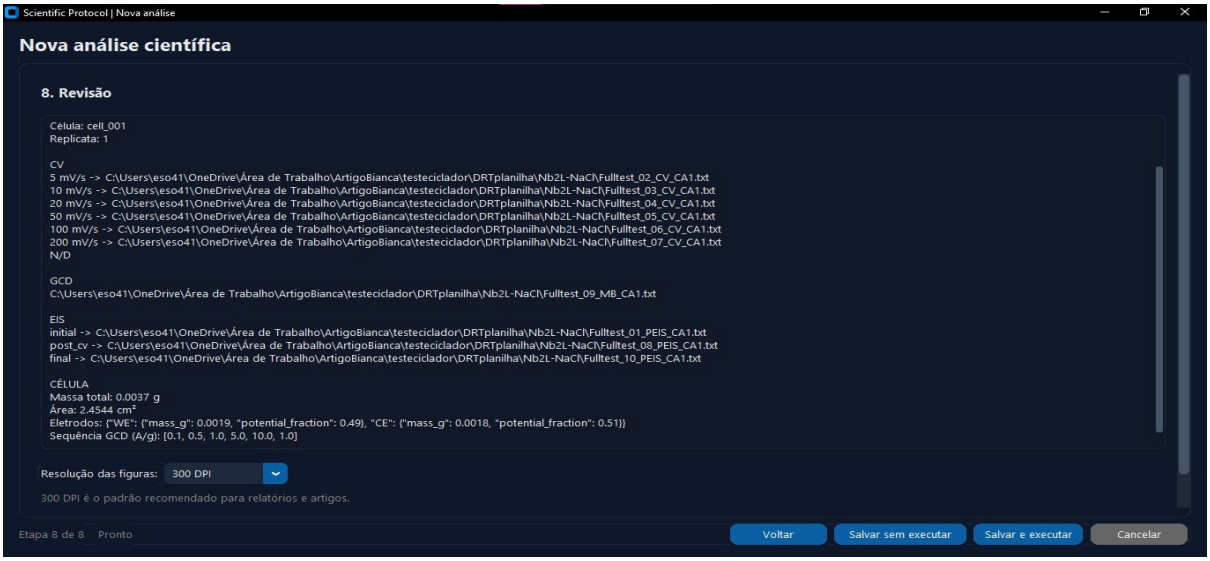
Figura 1 - Arquitetura e fluxo de processamento do IonFlow Pipeline.



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

A interface do Scientific Protocol foi desenvolvida para conduzir o usuário por uma nova análise sem exigir a edição manual do arquivo de configuração. O usuário seleciona os arquivos de CV e informa suas respectivas velocidades de varredura, adiciona o arquivo GCD e os espectros EIS inicial, pós-CV e final e, posteriormente, informa os parâmetros da célula. Antes da execução, os dados inseridos são apresentados em uma tela de revisão, permitindo verificar arquivos e parâmetros experimentais. A Figura 2 apresenta essa etapa da interface.

Figura 2 - Tela de revisão de uma nova análise no Scientific Protocol.



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

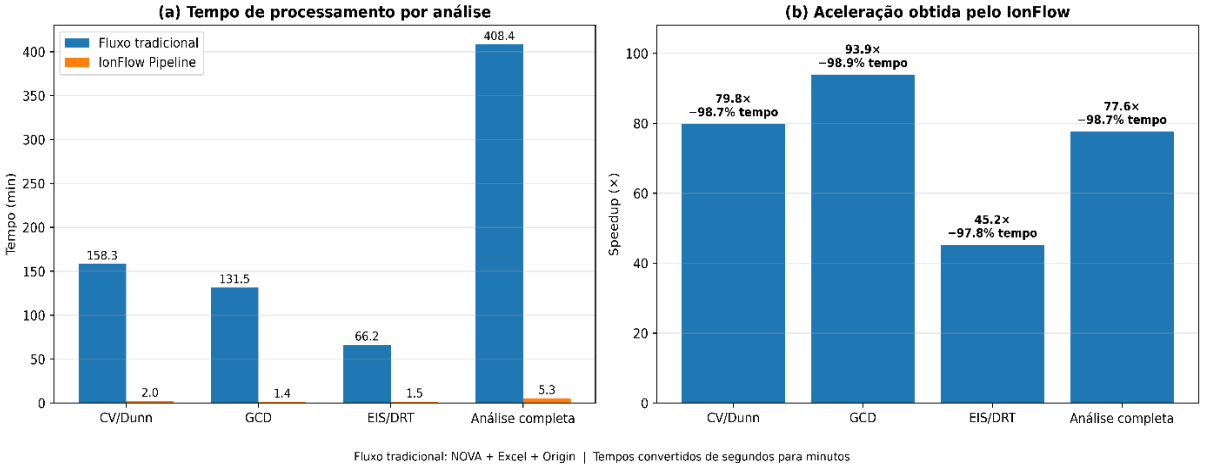
Para quantificar o ganho operacional, foi realizado um benchmark entre o IonFlow Pipeline e um fluxo tradicional baseado no uso combinado de NOVA, Excel e Origin. Os dois fluxos utilizaram os mesmos arquivos experimentais brutos e foram executados pelo mesmo operador, com início a partir dos arquivos obtidos diretamente dos ensaios. Foram cronometradas separadamente as etapas de CV/Dunn, GCD, EIS/DRT e o processamento completo. O fluxo pelo IonFlow foi repetido três vezes, enquanto, devido ao elevado tempo necessário para o processamento convencional, o fluxo tradicional completo foi cronometrado uma vez; as etapas de CV/Dunn e EIS/DRT foram adicionalmente repetidas. Os valores apresentados correspondem ao conjunto utilizado para comparação direta entre os dois procedimentos. O fator de aceleração (speedup) foi calculado pela razão entre o tempo do fluxo tradicional e o tempo do IonFlow. Os fatores de aceleração foram calculados a partir dos tempos não arredondados das medições, enquanto os tempos apresentados no texto e nas figuras foram arredondados para uma casa decimal.

Resultados

O IonFlow reduziu o tempo de processamento em todas as etapas avaliadas. A análise CV/Dunn passou de 158,3 para 2,0 min, correspondendo a uma aceleração de 79,8 vezes. Para GCD, o tempo passou de 131,5 para 1,4 min, com aceleração de 93,9 vezes, enquanto EIS/DRT passou de 66,2 para 1,5 min, com aceleração de 45,2 vezes. Na análise completa, o tempo foi reduzido de 408,4 para 5,3 min, correspondendo a uma aceleração de aproximadamente 77,6 vezes e redução de 98,7% no tempo de processamento (Figura 3). O tempo do processamento completo inclui também etapas de organização, transferência, consolidação e geração das saídas finais, não correspondendo apenas à soma dos tempos individuais dos três módulos.

Figura 3 - Benchmark entre o IonFlow Pipeline e o fluxo tradicional de análise eletroquímica.

Figura 3 — Benchmark IonFlow × fluxo tradicional



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

Como aplicação demonstrativa, os resultados obtidos para os diferentes eletrólitos foram processados pelo Scientific Protocol. As métricas foram normalizadas e ponderadas conforme os critérios definidos para o estudo. Nessa análise, o NaCl 1 M apresentou a maior pontuação global (*score* = 63,4%), com cobertura completa dos critérios. O resultado representa o melhor compromisso global segundo a configuração utilizada e não superioridade do NaCl 1 M em todos os parâmetros individuais. A Figura 4 apresenta a classificação gerada pelo programa.

Figura 4 - Saída do Scientific Protocol para classificação automática dos eletrólitos.

Classificação automática dos eletrólitos

Melhor eletrólito (score disponível)	Maior score disponível	Cobertura do vencedor
**NaCl 1M	63,4%	1

Eletrólito	Capacitância específica [F/g]	Retenção de capacitância [%]	Eficiência coulômbica [1 A/g] [%]	Densidade de energia [Wh/kg]	Densidade de potência [W/kg]	Contribuição capacitiva [%]	Rs [Ω]	Rct/Rp [Ω]	Área DRT de processos lentos [Ω]	Score disponível	Cobertura	Status de Protocolo	Classificação
***H_2SO_4 1M	4,50	127,95	99,84	0,02	2701,60	100,00	2,46	4775,53	2654,10	36,6%	100,0%	Completo	8
***NaOH 1M	17,43	N/D	98,08	0,05	7574,70	99,00	0,07	2609573,61	6509,00	46,7%	88,9%	Parcial	5
*Na_2SO_4 1M	19,00	61,60	99,75	0,26	6343,30	98,00	2,31	2663,49	1000,20	47,2%	100,0%	Completo	4
*Li_2SO_4 1M	7,00	107,00	99,05	0,07	5357,45	97,00	4,60	20586,19	20165,10	31,5%	100,0%	Completo	9
**LiCl WiS	30,00	109,40	90,55	2,62	988,40	82,00	5,90	84,01	139,25	49,6%	100,0%	Completo	3
**LiOH 1M	17,44	304,70	97,84	0,05	7226,40	99,00	1,36	19804,33	444,18	62,6%	100,0%	Completo	2
*KCl 1M	18,00	N/D	99,86	0,70	1797,20	95,00	6,16	12528,97	8448,28	39,8%	88,9%	Parcial	6
*KOH 1M	4,00	65,60	11,88	0,05	8081,40	96,00	0,44	2853721,09	2759,74	38,1%	100,0%	Completo	7
**NaCl 1M	**38,98**	**134,30**	**99,16**	**0,38**	**5259,50**	**97,00**	**1,49**	**2090,61**	**384,28**	**63,4%**	**100,0%**	Completo	**1**

Configuração dos critérios de classificação

Critério	Unidade	Direção	Peso	Peso normalizado	Observação
Capacitância específica	F/g	Maior é melhor	20,00	20,00%	Desempenho de armazenamento de carga
Retenção de capacitância	%	Maior é melhor	15,00	15,00%	Estabilidade ao longo da ciclagem
Eficiência coulômbica	%	Maior é melhor	10,00	10,00%	Reversibilidade carga/descarga
Densidade de energia	Wh/kg	Maior é melhor	15,00	15,00%	Energia específica do dispositivo
Densidade de potência	W/kg	Maior é melhor	10,00	10,00%	Capacidade de entrega rápida de energia
Contribuição capacitiva	%	Maior é melhor	5,00	5,00%	Cinética superficial pelo método de Dunn
Resistência série (Rs)	Ω	Menor é melhor	10,00	10,00%	Perdas ôhmicas do sistema
Resistência de transferência/polarização	Ω	Menor é melhor	10,00	10,00%	Cinética interfacial
Área DRT de processos lentos	Ω	Menor é melhor	5,00	5,00%	Soma das áreas dos picos DRT com τ ≥ 0,1 s (menor área, menor intensidade de processos lentos)
TOTAL			100,00	100,00%	

Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

Discussão

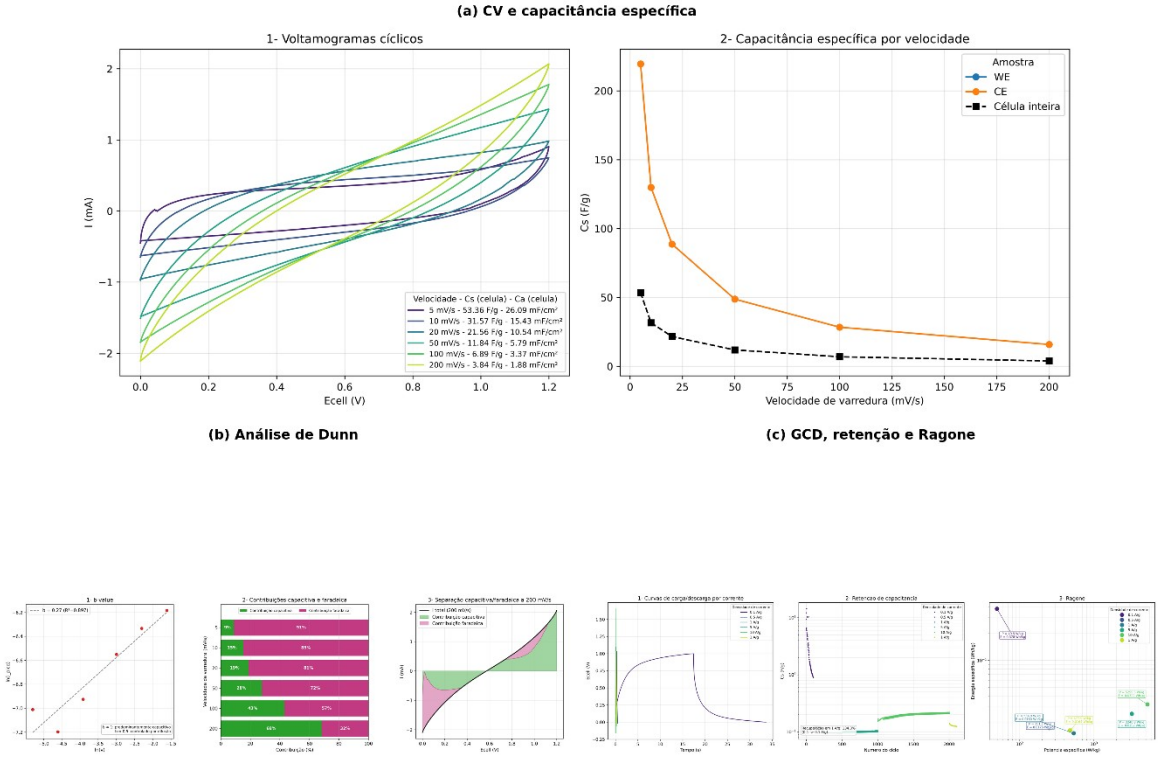
O benchmark mostrou que o maior ganho quantitativo do IonFlow foi a redução do tempo necessário para processar o conjunto de dados. A análise completa, que exigiu aproximadamente 6 h 48 min no fluxo tradicional, foi concluída em 5,3 min pelo pipeline. A diferença decorre principalmente da automatização de etapas que, no fluxo tradicional avaliado, exigiram operações sucessivas de importação, cálculo, tratamento e geração de gráficos em diferentes programas. Além do ganho temporal medido, a organização dos arquivos experimentais, parâmetros da célula e resultados em um mesmo fluxo reduz a necessidade de transferências manuais entre diferentes programas. Essa

característica pode favorecer a padronização e a rastreabilidade das análises, embora esses aspectos não tenham sido quantificados no benchmark realizado.

A automatização de fluxos de trabalho eletroquímicos também vem sendo explorada em outras plataformas. Duke et al. (2024), por exemplo, desenvolveram o ExpFlow, uma interface gráfica destinada ao registro padronizado de procedimentos eletroquímicos e à automatização de etapas de cálculo e processamento. Os autores destacam que a organização de procedimentos em formatos estruturados e legíveis por máquina pode favorecer a reprodutibilidade e reduzir a dependência de operações manuais. Embora o IonFlow tenha escopo distinto, voltado à integração das análises CV/Dunn, GCD e EIS/DRT e à comparação multicritério, ambos os trabalhos evidenciam a tendência de utilização de workflows computacionais para padronizar e automatizar o tratamento de dados eletroquímicos. A aplicação demonstrativa também mostrou que o Scientific Protocol consegue integrar métricas provenientes de diferentes técnicas em uma classificação única. Essa classificação funciona como ferramenta de síntese e apoio à comparação, e não como substituição da interpretação eletroquímica. O resultado depende dos critérios, pesos, disponibilidade dos dados e regras de normalização definidos pelo pesquisador.

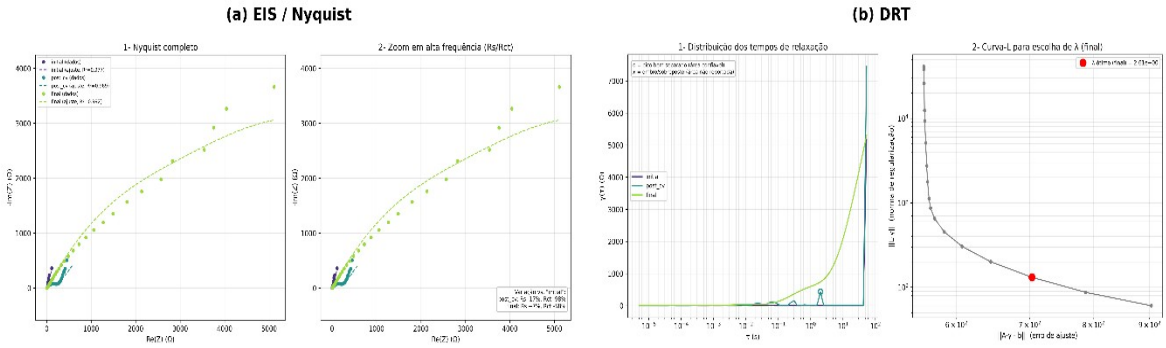
Os valores de aceleração devem ser interpretados considerando as condições específicas do benchmark. O fluxo tradicional utilizado como referência foi baseado na combinação NOVA, Excel e Origin e representa o procedimento adotado neste estudo. Dessa forma, os fatores de aceleração obtidos não devem ser generalizados diretamente para todos os softwares ou rotinas de análise eletroquímica. Benchmarks futuros com diferentes usuários, conjuntos de dados e ferramentas de referência poderão avaliar a reprodutibilidade do ganho observado. Como o número de repetições não foi uniforme entre os dois fluxos, os valores obtidos devem ser interpretados como uma estimativa operacional do ganho temporal, e não como uma comparação estatística definitiva entre os métodos.

Figura 5 - Exemplos de resultados gerados automaticamente pelos módulos analíticos do IonFlow Pipeline, incluindo análises de CV/Dunn e GCD.



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

Figura 6 - Exemplos de resultados gerados automaticamente pelos módulos analíticos do IonFlow Pipeline, incluindo análises de EIS e DRT.



Fonte: elaborado pelo próprio autor (2026).

Conclusão

O IonFlow Pipeline integrou em um único fluxo o processamento de CV/Dunn, GCD, EIS/DRT e a classificação multicritério dos resultados. No benchmark realizado, o processamento completo foi reduzido de 408,4 para 5,3 min, correspondendo a uma aceleração de aproximadamente 77,6 vezes e redução de 98,7% no tempo em relação ao fluxo tradicional avaliado. A aplicação aos dados experimentais mostrou ainda que o Scientific Protocol permite organizar diferentes métricas e utilizá-las em uma comparação multicritério configurável. Os resultados demonstram principalmente o ganho operacional obtido pela automatização, enquanto avaliações futuras com outros conjuntos de dados, usuários e fluxos de referência serão necessárias para determinar a generalização desse desempenho.

Referências

ANASORI, B.; LUKATSKAYA, M. R.; GOGOTSI, Y. 2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage. Nature Reviews Materials, v. 2, 16098, 2017.

BARSOUKOV, E.; MACDONALD, J. R. Impedance Spectroscopy: Theory, Experiment, and Applications. 2. ed. Hoboken: Wiley, 2005.

CIUCCI, F.; CHEN, C. Analysis of electrochemical impedance spectroscopy data using the distribution of relaxation times. Electrochimica Acta, v. 167, p. 439-454, 2015.

DUKE, R. et al. ExpFlow: a graphical user interface for automated reproducible electrochemistry. Digital Discovery, v. 3, p. 163–172, 2024. DOI: 10.1039/D3DD00156C.

ORAZEM, M. E.; TRIBOLLET, B. Electrochemical Impedance Spectroscopy. Hoboken: Wiley, 2008.

SIMON, P.; GOGOTSI, Y. Materials for electrochemical capacitors. Nature Materials, v. 7, p. 845-854, 2008.

Agradecimentos

Ao Instituto de Aeronáutica e Espaço (IAE), à Universidade do Vale do Paraíba (UNIVAP), ao CNPq/PIBIC (187025/2025-8 e 186109/2025-3), à Fapesp (2026/03509-1), ao INIC, às instituições envolvidas, à equipe do laboratório pelo suporte ao desenvolvimento do trabalho.