

XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Campus Itapetininga

AUTOMAÇÃO E VALIDAÇÃO DE PARÂMETROS TOPOGRÁFICOS EM MICROSCOPIA DE FORÇA ATÔMICA VIA INTEGRAÇÃO PYTHON-PYGWY

Matheus Mendes Beati – PIBIC/IFSP¹

Yasmin Luísa Gomes Lourenço – PIBITI/IFSP²

Prof. Dr. Allan Victor Ribeiro - IFSP³

Introdução

A microscopia de força atômica (MFA) consolidou-se como uma das principais técnicas de caracterização de superfícies em escala nanométrica, sendo amplamente aplicada na investigação de biomateriais. Por meio da varredura de uma ponta acoplada a um cantiléver, a MFA permite a obtenção de imagens topográficas de alta resolução e a extração de parâmetros quantitativos como rugosidade, altura média e distribuição de picos e vales (Eaton, 2010; Cascudo, 2018).

A aquisição de imagens em alta resolução gera grandes volumes de dados, tornando o processamento complexo e suscetível à subjetividade do operador quando realizado manualmente. Por este motivo a coleta e análise de dados para um grande conjunto de amostras acaba se tornando algo desafiador. Nesse contexto, a linguagem Python destaca-se como alternativa robusta para automação do fluxo de trabalho em análises de MFA, viabilizando, por meio do ambiente PyGwy integrado ao Gwyddion (Klapetek; Necas; Anderson, 2004; Nečas; Klapetek, 2012; Contel, 2025).

Ferramentas que visam otimizar a caracterização superficial baseada na coleta e análise de parâmetros topográficos são imprescindíveis para demandas contemporâneas em ciência dos materiais e vem sendo objeto de pesquisas recentes (Beton, 2021; Contel, 2025). Apesar dos avanços, ainda há lacunas na padronização e reprodutibilidade da análise topográfica, especialmente em fluxos de processamento em larga escala.

Neste sentido, o trabalho apresenta uma abordagem inovadora para a automação da análise de imagens de microscopia de força atômica (MFA), com foco na padronização, reprodutibilidade e eficiência do processamento de dados topográficos. Por meio da implementação de um fluxo computacional completo, o trabalho se destaca ao integrar rotinas computacionais em linguagem Python ao ambiente PyGwy do software Gwyddion, permitindo a extração automatizada de um amplo conjunto de parâmetros normativos.

¹Estudante do curso de Engenharia de Computação, IFSP – Birigui/SP. mendes.beati@aluno.ifsp.edu.br. Orcid: <https://orcid.org/0009-0001-9256-3446>

²Estudante do curso de Engenharia de Computação, IFSP – Birigui/SP. yasmin.luisa@aluno.ifsp.edu.br. Orcid: <https://orcid.org/0009-0002-9869-7979>

³Doutor em Ciência dos Materiais, IFSP – Birigui/SP. E-mail do autor: allanvrb@ifsp.edu.br. Orcid: <https://orcid.org/0000-0002-3000-6118>

XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Câmpus Itapetininga

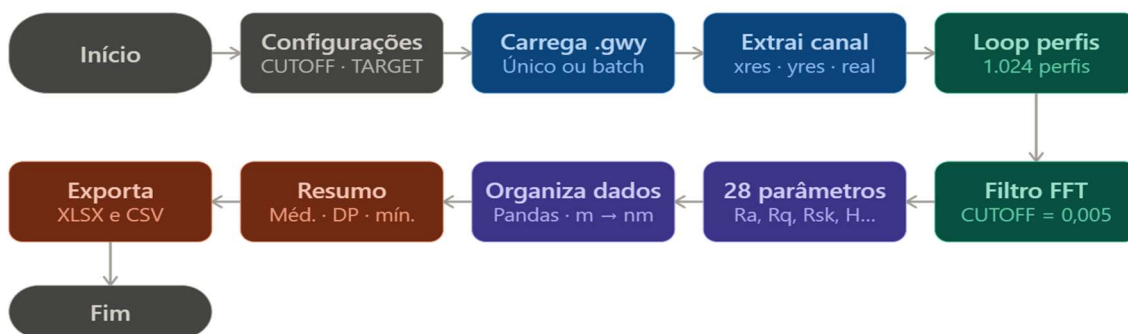
Metodologia

O trabalho foi estruturado em quatro etapas principais: (1) a pesquisa bibliográfica referente a técnica de MFA e o uso das bibliotecas Python de integração com o Gwyddion; (2) seleção do conjunto de imagens de MFA e tratamento preliminar das imagens; (3) desenvolvimento do script em Python para obtenção dos parâmetros topográficos unidimensionais das imagens de MFA; e por fim, (4) a validação da base de dados.

Para obtenção dos parâmetros topográficos foram utilizadas imagens de MFA de amostras de grafite pirolítico altamente orientado (HOPG) e biomateriais. Na Figura 1 é apresentado o fluxograma que ilustra o procedimento de obtenção dos parâmetros topográficos unidimensionais aplicado às imagens obtidas por Microscopia de Força Atômica (MFA).

O script foi desenvolvido em linguagem Python e executado no ambiente PyGwy — interface de *scripting* nativo do software Gwyddion (Nečas; Klapetek, 2012). Foram calculados automaticamente 28 descritores topográficos normativos, organizados em cinco categorias: amplitude (Ra, Rq, Rt, Rv, Rp, Rtm, Rvm, Rpm, R3z, Rz e Ry), estatísticos (Rsk e Rku), ondulação (Wa, Wq e Wy), textura e espaçamento (Pt e Sm), e híbridos e funcionais (La, Lq, Da, Dq, L, L0, Lr e Altura Sueca H). Subsequentemente foi realizada a organização, exportação e validação dos dados, sendo estes exportados em planilha .xlsx.

Figura 1: Fluxograma do computacional automatizado proposto, destacando as etapas de processamento, filtragem e extração de parâmetros.



Fonte: Autor.

Resultados

O script desenvolvido no ambiente PyGwy foi executado com sucesso para o conjunto de imagens de MFA selecionadas, processando imagens com resolução de 512×512 pixels. A seguir é apresentado um fluxo computacional que combina decomposição espectral via FFT gaussiana, nivelamento por mínimos quadrados e cálculo sistemático de 28 descritores topográficos, contemplando dimensões espaciais, estatísticas e funcionais da superfície analisada. Diferentemente de abordagens convencionais, o método desenvolvido elimina a dependência de operações manuais, reduzindo significativamente a variabilidade associada ao

XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Campus Itapetininga

operador, indicando aumento significativo da confiabilidade na comparação entre diferentes amostras.

Desenvolvimento do script em Python (PyGwy)

O processamento automatizado das imagens de MFA foi realizado por meio de um script desenvolvido em linguagem Python, executado no ambiente PyGwy. A escolha desse ambiente permitiu acesso direto à API interna do Gwyddion, viabilizando a integração entre as rotinas computacionais desenvolvidas e as funcionalidades de leitura e manipulação dos arquivos no formato .gwy.

Decomposição multiescala por filtro FFT gaussiano

O núcleo do processamento consiste na separação das componentes de rugosidade e ondulação do perfil topográfico. O algoritmo replica a lógica do módulo roughness.c do Gwyddion, utilizando frequência de corte normalizada (CUTOFF = 0,0050), compatível com os parâmetros padrão da *Roughness Tool* do software. Para cada perfil extraído, o sinal é tratado para evitar artefatos de borda na Transformada de Fourier (FFT) e em seguida submetido à decomposição em dois componentes: o perfil de rugosidade (passa-alta) e o perfil de ondulação (passa-baixa). O script percorre sistematicamente 512 perfis horizontais e 512 perfis verticais por imagem, totalizando 1.024 perfis analisados por arquivo, com nivelamento individual por mínimos quadrados para remoção de inclinações residuais. Como limitação, destaca-se a dependência da escolha do parâmetro de corte na filtragem FFT, que pode influenciar a separação entre rugosidade e ondulação.

Cálculo dos 28 parâmetros topográficos

Após a filtragem, são calculados automaticamente 28 descritores topográficos normativos, organizados em cinco categorias: amplitude (R_a , R_q , R_t , R_v , R_p , R_{tm} , R_{vm} , R_{pm} , R_{3z} , R_z e R_y), estatísticos (R_{sk} e R_{ku}), ondulação (W_a , W_q e W_y), textura e espaçamento (P_t e S_m), e híbridos e funcionais (L_a , L_q , D_a , D_q , L , L_0 , L_r e Altura Sueca H). Os valores são convertidos das unidades internas do software para nanômetros e micrômetros conforme a grandeza de cada parâmetro.

Organização dos dados, exportação e validação

Os resultados de todos os perfis são organizados em uma base de dados estruturada utilizando a biblioteca Pandas, com geração automática de resumo estatístico — média, desvio padrão, mínimo e máximo — agrupado por arquivo e orientação de perfil. Os dados são exportados em planilha .xlsx com duas abas (Dados e Resumo) e em arquivos .csv delimitados por ponto e vírgula, assegurando compatibilidade com ferramentas de inteligência artificial (IA) generativa e softwares estatísticos como o GraphPad Prism e Jamovi. Por fim, os parâmetros gerados pelo script foram comparados com os valores extraídos manualmente pela *Roughness Tool* do Gwyddion, adotando o mesmo protocolo de processamento em ambos os casos, com o objetivo de verificar a concordância quantitativa entre as abordagens e garantir a confiabilidade da base de dados antes de sua utilização nas etapas seguintes do projeto.

Base de dados gerada

Ao final do processamento, o script gerou automaticamente planilhas .xlsx com os valores individuais de cada perfil e o resumo estatístico por grupo, além de arquivos .csv compatíveis com os softwares Prism e Jamovi. A base de dados abrange os 28

XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Câmpus Itapetininga

parâmetros topográficos de forma padronizada e validada com relação aos valores apresentados pela interface do software Gwyddion.

Conclusão

O desenvolvimento e validação de um script automatizado em Python integrado ao PyGwy possibilitou a extração padronizada de parâmetros topográficos de imagens de MFA. A combinação do filtro FFT gaussiano para separação rugosidade–ondulação, do nivelamento linha a linha por mínimos quadrados e do cálculo de 28 descritores normativos resultou em uma metodologia robusta, reproduzível e independente da subjetividade do operador.

O tempo de processamento mostrou-se significativamente inferior ao requerido pela extração manual no Gwyddion, evidenciando o ganho de eficiência proporcionado pela automação. A automação proposta não apenas reduz o tempo de processamento, como também estabelece um novo padrão de análise para estudos envolvendo MFA. Além disso permite a aplicação da metodologia em diferentes classes de materiais.

O fluxo computacional proposto estabelece um novo referencial metodológico para análise topográfica automatizada em MFA, com potencial de aplicação em larga escala. Como perspectivas futuras, destacam-se a integração com modelos de aprendizado de máquina, ferramentas de inteligência artificial generativa e análise estatística com Prism e Jamovi. Assim, o estudo contribui de forma significativa para o avanço das técnicas de caracterização de superfícies em nanociência e biomateriais, consolidando uma abordagem robusta, escalável e alinhada às demandas contemporâneas de ciência de dados aplicada.

Referências

BETON, J. G. *et al.* TopoStats – a program for automated tracing of biomolecules from AFM images. **Methods**, Amsterdam, v. 193, p. 68–79, 2021.

CASCUDO, Oswaldo *et al.* Contribuição à caracterização nanoestrutural de pastas de cimento por meio da técnica de Microscopia de Força Atômica. **Matéria**, Rio de Janeiro, v. 23, n. 1, p. e-11953, 2018. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/rmat/a/63PZyKsKBzWrwr4M6txbHf/?lang=pt>. Acesso em: 10 fev. 2026.

CONTEL, Lucas *et al.* O uso da linguagem python na coleta e gerenciamento de dados de parâmetros topográficos em imagens de microscopia de força atômica. In: Coletânea do X Congresso de Iniciação Científica do IFSP Itapetininga -Da Róz, Alessandra Luzia; Shigunov Neto, Alexandre; e Fortunato, Ivan (org.). Itapetininga: **Edições Hipótese**, 2025. p. 136. Disponível em: https://drive.google.com/file/d/1YT7zMgYHew_EWDG5TQOyr3eKONbRzNTr/view. Acesso em: 12 dez. 2025.

XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Campus Itapetininga

EATON, P.; WEST, P. Atomic Force Microscopy. Oxford: Oxford University, 2010.

KLAPETEK, Petr; NECAS, David; ANDERSON, Christopher. **Gwyddion user guide**.

Brno: Czech Metrology Institute, 2004. Disponível em:

<https://gwyddion.net/download/user-guide/gwyddion-user-guide-en.pdf>. Acesso em:

18 fev. 2026.

NEČAS, David; KLAPETEK, Petr. Gwyddion: an open-source software for SPM data analysis. **Central European Journal of Physics**, Varsóvia, v. 10, n. 1, p. 181-188,

2012. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.2478/s11534-011-0096-2>.

Acesso em: 18 mar. 2026.