



## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA XXVIII SIC

paz no plural



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2016: SIC - XXVIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2016
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Desenvolvimento de ferramentas computacionais para o estudo da adsorção de corantes em batelada e em leito fixo
<b>Autor</b>	NATÁLIA BASSO TOLAZZI
<b>Orientador</b>	MARCIO SCHWAAB

## SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA 2016

### **Desenvolvimento de ferramentas computacionais para o estudo da adsorção de corantes em batelada e em leito fixo.**

Aluna: Natália Basso Tolazzi  
Orientador: Marcio Schwaab  
Departamento de Engenharia Química  
Escola de Engenharia  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A estimação de parâmetros tem grande relevância no estudo do equilíbrio de adsorção líquido-sólido, pois permite a obtenção das estimativas dos valores dos parâmetros das isotermas, além de possibilitar a seleção da melhor isoterma que se ajusta aos dados experimentais. Além da estimação dos valores dos parâmetros, é de fundamental importância a avaliação da precisão destes valores. Como estes parâmetros geralmente apresentam erros significativos e uma alta correlação entre eles, a análise da precisão paramétrica tem que ser feita através de regiões de confiança ao invés de intervalos de confiança. Ainda, outra importante análise a ser feita é a comparação e a discriminação dos diversos modelos propostos na literatura (Langmuir, Freundlich, Sips, Redlich-Peterson, entre outros) através do planejamento de experimentos.

Neste trabalho de pesquisa, regiões de confiança dos parâmetros foram determinadas usando a aproximação elíptica e o método da razão de verossimilhança, utilizando inicialmente dados experimentais de adsorções de azul de metileno em carvão ativo apresentados no trabalho de Kumar e Sivanesan (2006). Foram selecionados dados em diferentes faixas experimentais. Os resultados com estes dados mostraram de forma clara que a aproximação elíptica não é capaz de produzir regiões de confiança apropriadas e que a mudança da faixa experimental de medição dos dados utilizados tem uma grande influência na precisão dos parâmetros. Isso porque quando os pontos experimentais estão concentrados em uma pequena região experimental, não é possível uma estimação precisa de todos os parâmetros e as incertezas experimentais ficam muito grandes. Por outro lado, quando os dados estão concentrados em uma pequena região, os ajustes de qualquer modelo ficam bons e não é possível a comparação entre eles. Dessa forma, é evidente a necessidade de dados bem distribuídos ao longo de toda a faixa experimental. Ainda, percebeu-se a importância de se conhecer a variância experimental dos dados, pois a consideração que o modelo é perfeito, utilizando a função objetivo para o cálculo da variância, pode não ser uma boa aproximação.

Por fim, estas análises também foram realizadas utilizando dados próprios obtidos em experimentos de adsorção em batelada de corante tartrazina em óxido de magnésio. Foram realizados estudos de equilíbrio realizando sextuplicatas, a fim de conhecer com precisão a variância experimental dos dados. Os parâmetros para diversos modelos propostos na literatura foram estimados e as regiões de confiança obtidas foram melhores que aquelas obtidas com os dados de Kumar e Sivanesan, sem regiões muito amplas ou abertas, mostrando de forma clara a importância de um bom planejamento inicial de experimentos e da realização de réplicas. Ainda assim, as funções objetivo de alguns modelos ajustados foram muito próximas, o que impossibilita a discriminação destes modelos, isto é, estatisticamente estes modelos são equivalentes. Portanto, a partir dos resultados obtidos para a adsorção em equilíbrio, novos experimentos foram planejados com objetivo de discriminação dos modelos a fim de selecionar a melhor isoterma que se ajusta aos dados experimentais.