



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2024: SIC - XXXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2024
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Desenvolvimento de ferramentas computacionais para a estimação de parâmetros de isothermas de adsorção
<b>Autor</b>	DAVID NICILOVITZ CHAPPER
<b>Orientador</b>	MARCIO SCHWAAB

Título: Desenvolvimento de ferramentas computacionais para a estimação de parâmetros de isotermas de adsorção

Aluno: David Nicilovitz Chapper

Orientador: Prof. Marcio Schwaab

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Na adsorção ocorre a adesão de substâncias na fase fluida à superfície de um sólido. Modelos matemáticos descrevem este fenômeno calculando a concentração de adsorvente em instantes do processo e no equilíbrio. Estes modelos possuem parâmetros, cuja estimação deve estar ajustada o mais próximo possível dos dados experimentais. Na estimação de parâmetros de isotermas não lineares, é necessário o uso de métodos numéricos de otimização iterativa. Este projeto de pesquisa tem como objetivo o desenvolvimento de ferramentas computacionais em "R" para a estimação de parâmetros de modelos de equilíbrio de adsorção, além da visualização destes modelos em contraposição aos dados. A linguagem "R" foi utilizada por ser melhor para visualizações estatísticas e mais atual, permitindo a construção de interfaces mais amigáveis para usuários. Foi realizada a parte da otimização não linear para o caso de equilíbrio, utilizando diversas isotermas. Foram utilizados o método de Newton para o cálculo inicial da concentração de equilíbrio, o método de Gauss-Newton para o ajuste não linear dos dados às isotermas e para casos mais extremos o método PSO (Particle Swarm Optimization). Além disso, foi realizado o cálculo de diversas informações estatísticas, como o desvio padrão dos parâmetros, as matrizes de correlação e covariância, e o as regiões de confiança. Foi criada uma interface gráfica no qual é possível inserir dados experimentais, estimar os parâmetros, e representar os resultados, seja em tabelas (parâmetros estimados, desvio padrão, matriz de correlação e covariância), ou gráficos (ajuste não linear em contraposição aos dados, regiões de confiança).