

AVALIAÇÃO ESTATÍSTICA DO AJUSTE DE MODELOS CINÉTICOS EM BIOSSORÇÃO DE CORANTE SINTÉTICO

Anderson Marcos Dias Canteli (UFPR), Fernando Augusto Pedersen Voll (UFPR),
Agnes De Paula Scheer (UFPR); E-mail: andersonmdcanteli@gmail.com

No estudo da cinética de adsorção em batelada, diversos modelos são aplicados aos dados experimentais com o intuito de compreender os fenômenos que estão ocorrendo. Para a escolha do modelo que melhor representa os dados experimentais, geralmente se utiliza o coeficiente de determinação (R^2). Entretanto, o uso do R^2 para a escolha entre modelos não lineares têm sido criticada pela literatura. O objetivo deste trabalho foi propor testes estatísticos combinados com uma função de ranqueamento para determinar qual modelo cinético reacional apresenta maiores evidências de ser considerado o “best fit”. Os dados experimentais de cinética de adsorção utilizados neste trabalho foram obtidos utilizando o amarelo tartrazina como adsorvato e o casulo do bicho-da-seda (*Bombyx mori*) como biossorvente. Alíquotas de uma solução de 20 mg L⁻¹ foram mantidas em contato com o biossorvente por tempos pré-estabelecidos em incubadora com controle de temperatura (20, 30 e 40 °C) e agitação (160 rpm) até que o equilíbrio de adsorção fosse atingido (95% de confiança). A concentração na fase líquida foi obtida utilizando a metodologia de espectrofotometria de absorção UV-VIS ($\lambda_{max} = 427$ nm). Foram ajustados aos dados experimentais os modelos de Pseudo-primeira ordem, Pseudo-segunda ordem, Elovich, Elovich simplificado, Avrami e Blanchard utilizando uma rotina desenvolvida em Matlab. As equações dos modelos foram utilizadas no formato não linear. Após regressão, todos os modelos foram submetidos a avaliação de cinco testes (95% de confiança): i) verifica se o valor de R^2 é maior do que 0.90; ii) verifica se a média dos resíduos é igual a zero; iii) verifica se os resíduos apresentam distribuição normal; iv) verifica se o valor absoluto dos parâmetros é maior do que o valor absoluto do seu respectivo desvio e; v) verifica se o ajuste não linear foi satisfatório (teste do chi-quadrado). Para ser considerado como estatisticamente satisfatório, o modelo deve passar pelos cinco testes propostos. Em seguida, os modelos foram ranqueados utilizando o critério de Akaike corrigido (AICc). Dentre os seis modelos avaliados, apenas os modelos de Elovich, Elovich simplificado e Blanchard passaram nos cinco testes estatísticos propostos. O valor de AICc indicou que o modelo de Elovich foi considerado com fortes evidências de ser o melhor ajuste nas três

temperaturas avaliadas. Portanto, o modelo de Elovich foi considerado como a melhor representação dos dados experimentais. A análise estatística combinada com o ranqueamento de modelos se apresentou como uma ferramenta importante para a interpretação dos resultados.

Palavras-chave: adsorção em batelada, akaike, avaliação estatística