

DESENVOLVIMENTO DE UMA INTERFACE GRÁFICA DE USUÁRIO PARA CINÉTICA DE ADSORÇÃO

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

O processo de adsorção possui grande relevância em estudos científicos, pois é utilizado em diversas indústrias (alimentícia farmacêutica, petroquímica e têxtil, por exemplo). Modelos teóricos, empíricos ou estatísticos são ajustados aos dados experimentais com o intuito de compreender o fenômeno que está ocorrendo. O objetivo deste trabalho foi desenvolver um software de interface gráfica de usuário para regressão de modelos cinéticos-reacionais em MATLAB. Através da interface gráfica, o usuário tem acesso a um estudo estatístico para determinar se a cinética de adsorção atingiu o equilíbrio, através do teste de comparação múltipla (Tukey-Kramer, Dunn-Sidak, Bonferroni ou Scheffe). O usuário escolhe dentre seis modelos cinéticos (Pseudo-primeira Ordem, Pseudo-segunda Ordem, Elovich, Elovich simplificado, Avrami e Blanchard), quais serão ajustados aos dados experimentais. O ajuste é avaliado através de cinco testes estatísticos (Teste 01: verifica se o coeficiente de determinação é maior do que um valor pré-estabelecido; Teste 02: verifica se a média dos resíduos é igual a zero; Teste 03: verifica se os resíduos apresentam distribuição normal (três testes disponíveis: Kolmogorov-Smirnov, Anderson-Darling ou Lilliefors); Teste 04: verifica se o valor absoluto de um parâmetro do modelo é maior do que o valor absoluto do desvio próprio parâmetro e ; Teste 05: aplica o teste chi-quadrado). É possível alterar o nível de significância dos testes (padrão 5 %). A escolha do modelo que possui maiores evidências de ser a melhor representação dos dados experimentais é feita utilizando o critério de Akaike corrigido. Através da interface, o usuário tem acesso aos resultados dos modelos ranqueados do mais provável para o menos provável de ser a melhor representação dos dados, bem como gráficos individuais onde são apresentados os dados experimentais, o ajuste do modelo e a região de confiança paramétrica do modelo. Também é apresentado um gráfico contendo todos os modelos selecionados para ajustar os dados. Através de uma planilha em Excel, o usuário recebe os valores calculados para os parâmetros dos modelos, os desvios dos parâmetros, matriz de correlação entre os parâmetros, além de seis funções de erro comumente utilizados pela literatura. A interface gráfica foi desenvolvida utilizando o software Matlab

(MathWorks, USA). O software foi testado com dados de biossorção do corante amarelo tartrazina em casulo do bicho-da-seda, apresentando resultados similares ao software Origin-Pro 8.5, com a grande vantagem de apresentar os testes estatísticos como output, não haver a necessidade de inserir manualmente as equações dos modelos e todos os modelos serem ajustados com apenas um clique.

Palavras-chave: matlab, guide, adsorção, avaliação estatística