



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Desenvolvimento de Software de adsorção para estimação de parâmetros
Autor	CAROLINA TEIXEIRA MENGUER
Orientador	MARCIO SCHWAAB

O fenômeno da adsorção está vinculado ao procedimento de transferência de uma substância presente em fase fluida para a superfície de um sólido. Os modelos que descrevem a adsorção possuem parâmetros, sendo que o método de estimação de tais parâmetros está interligado ao ajuste desses valores, de modo com que os resultados obtidos com o modelo sejam o mais próximo possível dos resultados experimentais. Nas equações não lineares das isotermas, as estimações devem ser realizadas através do uso de métodos numéricos. Entretanto, a linearização continua sendo muito usada e, mesmo na estimação não linear, a análise estatística dos resultados geralmente não é realizada de forma completa. Assim, para facilitar a utilização destas ferramentas avançadas de estimação de parâmetros, este projeto de pesquisa tem como objetivo o desenvolvimento de um software para a estimação de parâmetros de modelos de equilíbrio de adsorção. Diversas rotinas estão disponíveis na linguagem Fortran. Entretanto, para facilitar o uso destas, estão sendo construídas rotinas na linguagem Python, as quais utilizam as rotinas em Fortran na forma de DLL's, e permitem a construção de interfaces mais amigáveis para os usuários. Até o momento, estão sendo realizados testes para determinar a melhor forma de fazer a interface entre as linguagens. As medições dos tempos mostraram que a resolução numérica do equilíbrio de adsorção feita somente em Fortran efetua os códigos sessenta vezes mais rápido em comparação ao Python. Quando o arquivo DLL é gerado em Fortran e importado em Python, evidencia-se que o tempo de execução é igual a 0.20 segundos. Assim, foi definida a forma de construção da interface e as próximas etapas consistirão na geração das DLL's restantes e a construção de uma interface em Python.