



## XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2023
<b>Local</b>	Campus Centro - UFRGS
<b>Título</b>	Desenvolvimento de ferramentas computacionais para a estimacão 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

O fenômeno de adsorção consiste na adesão de substâncias presentes em uma fase fluida à superfície de um sólido. Esta adesão continua até que seja alcançada uma condição de equilíbrio. Modelos matemáticos que descrevem este equilíbrio são denominadas isotermas de adsorção. Estes modelos possuem parâmetros, cuja estimação deve estar ajustada de forma que a isoterma se aproxime o máximo possível aos dados experimentais. Para a estimação de parâmetros das isotermas não lineares, é necessário o uso de métodos numéricos de otimização iterativa. Assim, 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 com os dados. Diversas rotinas destes modelos já estão disponíveis na linguagem Fortran, porém a linguagem "R" é melhor para visualizações estatísticas e mais atual, permitindo a construção de interfaces mais amigáveis para usuários. Até então foi realizada a parte da otimização não linear para o caso de equilíbrio, utilizando as seguintes isotermas: Henry, Freundlich, Langmuir, Sips, Redlich-Peterson, Toth, Jovanovich e Temkin. Como método de otimização foram programados o método de Otimização por Enxame de Partículas (PSO - Particle Swarm Optimization), um método de otimização global, e o método de Gauss-Newton, um método de otimização local. Estas rotinas foram avaliadas e foram capazes de minimizar a função objetivo mesmo em problemas complexos, onde modelos como o de Sips e Redlich-Peterson recaem no modelo de Freundlich. As próximas etapas consistem na criação de rotinas para apresentação dos resultados na forma de tabelas e gráficos, bem como a criação de uma interface amigável usando o pacote RShiny.