

Estimativa dos parâmetros das isotermas de adsorção de Cd^{2+} em pó da casca de coco verde por regressão não-linear em planilha eletrônica.

Tiago Rodrigues dos Santos (IC)^{1*}, Ari Clecius Alves de Lima (PG)¹, Ronaldo Ferreira do Nascimento (PQ)¹, Francisco Wagner de Sousa (PG)¹.

¹Departamento de Química Analítica e Físico-Química, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici s/n, Bl. 939, 60455-760, Fortaleza, CE. *tiago_ufc@ig.com.br.

Palavras Chave: regressão não-linear, isotermas, adsorção, cádmio, coco.

Introdução

Vários modelos de isotermas são usados para estudo dos fenômenos de adsorção, dentre os quais, os de Langmuir, Freundlich, Temkin, Redlich-Peterson e outros. Para os modelos que contém dois parâmetros a estimativa dos seus valores pode ser feita por linearização das equações das isotermas. No entanto, para os modelos que contém três parâmetros, é difícil a estimativa por linearização. Não obstante, nem sempre os parâmetros obtidos linearmente são os que melhor se ajustam aos dados experimentais. Assim sendo, o presente trabalho é importante no sentido de apresentar o procedimento de regressão não-linear dos dados através de processos iterativos no Microsoft Excel[®].

Resultados e Discussão

Este trabalho utilizou dados de adsorção de Cd^{2+} em pó da casca de coco verde tratado quimicamente¹. Cada isoterma foi trabalhada em sua forma original não-linearizada (Tabela 1).

Tabela 1. Isotermas empregadas neste trabalho.

Langmuir	$q_e = \frac{a_L q_m C_e}{1 + a_L C_e}$
Freundlich	$q_e = a_F C_e^{b_F}$
Redlich-Peterson	$q_e = \frac{a_R q_m C_e}{1 + a_R C_e^{b_R}}$
Temkin	$q_e = B \ln(A_T C_e)$

*Na isoterma de Temkin, $B = RT/b_T$

O processo de otimização requer a escolha de uma função erro para avaliar o ajuste da isoterma aos dados experimentais. Trabalhou-se com cinco funções erro². A iteração foi aplicada utilizando a ferramenta *Solver* do Excel, pelo método de Newton, fazendo-se variar os parâmetros (células variáveis) de cada isoterma de forma a obter o valor mínimo para cada função erro (célula de destino). A minimização de cada função erro gera valores diferentes para cada parâmetro, de modo que não é seguro identificar diretamente quais os valores ótimos. Por isso, para se fazer uma comparação mais significativa entre os valores, foi adotado um

procedimento² de normalização e combinação dos erros iterados de forma a produzir um valor chamado “soma dos erros normalizados” (SEN) para os parâmetros ajustados em cada isoterma. Os valores dos parâmetros cuja soma dos erros normalizados é a menor podem ser considerados os ótimos para aquela isoterma². A comparação dos valores de SEN entre as isotermas permite identificar qual o modelo que melhor se ajustou aos dados experimentais: o que apresentar o menor valor de SEN. No presente estudo, a isoterma de Redlich-Peterson foi a que alcançou menor valor de SEN para os dados trabalhados. A Figura 1 exibe um gráfico de q_e vs. C_e construído com a curva experimental e todas as isotermas, segundo os parâmetros ótimos obtidos.

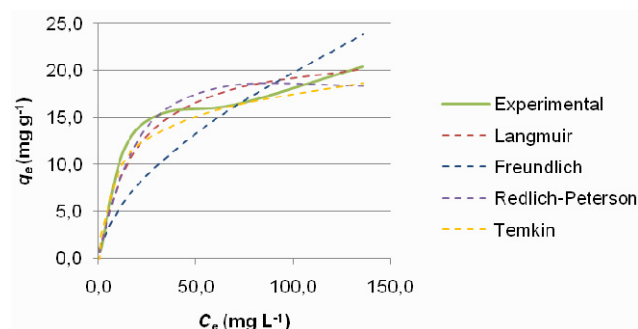


Figura 1. Isotermas de adsorção de Cd^{2+} em pó da casca de coco verde obtidas por regressão não-linear e a curva experimental.

Conclusões

Os dados obtidos permitem concluir que o modelo de Redlich-Peterson é o que melhor se ajusta aos dados deste experimento pelo fato de apresentar o menor valor da SEN.

Agradecimentos

CNPq e FUNCAP.

¹ Sousa, F. W. *Química Nova*. 2007, 30, 5, 1153-1157.

² Ho, Y. S.; Porter, J. F. e McKay, G. *Water, Air and Soil Pollution*. 2002, 141, 1-33.