

Propriedades matemáticas e estatísticas das isotermas de adsorção de Langmuir e Freundlich e do método de Gauss-Newton

Bruna de Oliveira Gonçalves^{1 4}

Fabricio Goecking Avelar^{2 4}

Luiz Alberto Beijo^{3 4}

O fenômeno de adsorção pode ser entendido como o acúmulo químico ou físico de uma substância ou material por mecanismos químicos, na interface entre a superfície sólida chamada de adsorvente, e a solução, chamada de adsorvato. Tal fenômeno pode ser descrito por equações matemáticas, chamadas de isotermas de adsorção, que relacionam diretamente o volume adsorvido em função da pressão ou concentração do adsorvente e com temperatura constante. Como exemplo de isotermas de adsorção é possível citar as isotermas de Langmuir e de Freundlich. Essas isotermas são modelos não lineares e a estimação de seus parâmetros pode ser feita através de linearização ou de métodos numéricos iterativos como, por exemplo, o método de Gauss-Newton. Propôs-se neste trabalho comparar a qualidade das estimativas dos parâmetros das isotermas de Langmuir e de Freundlich obtidas a partir de linearizações e pelo método iterativo de Gauss-Newton, a interpretação matemática dos parâmetros dessas isotermas e o estudo dos fundamentos matemáticos que garantem que o método de Gauss-Newton pode ser utilizado na estimação dos parâmetros de modelos não lineares. Concluiu-se que a forma linearizada dos modelos estudados fornece estimativas menos precisas e com menor acurácia do que a forma não linear e que método de Gauss-Newton realmente pode ser utilizado para a estimação dos parâmetros de modelos não lineares.

Palavras-chave: Adsorção, Modelos não lineares, Regressão, Métodos Iterativos, Simulação.

Referências

- [1] DRAPER, N. R.; SMITH, H. *Applied regression analysis*. 3. ed. New York: John Wiley e Sons, 1998.
- [2] MORETTIN, L. G. *Estatística Básica: Probabilidade e Estatística*. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2010.

¹UNIFAL - Universidade Federal de Alfenas. Email: brunag_25@hotmail.com.br

²UNIFAL - Universidade Federal de Alfenas. Email: fabricio@unifal-mg.edu.br

³UNIFAL - Universidade Federal de Alfenas. Email: luiz.beijo@unifal-mg.edu.br

⁴Agradecimento à FAPEMIG pelo apoio financeiro.