

DESENVOLVIMENTO E AVALIAÇÃO DE TÉCNICAS DE ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS DE MODELOS DE ADSORÇÃO MULTICOMPONENTE

DIEGO DEL FABRO KUNZLER

ORIENTADOR: MARCIO SCHWAAB

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA – ESCOLA DE ENGENHARIA - UFRGS

INTRODUÇÃO

A adsorção consiste na transferência de um soluto sobre a superfície de um sólido. Seu uso é amplo na área industrial, mas nota-se que há poucos trabalhos considerando a existência de mais de um tipo de adsorvato em solução. Este projeto propõe verificar o uso de uma extensão da Lei de Beer para multicomponentes para a calibração de um espectrofotômetro UV-Vis e estimar os parâmetros de adsorção para multicomponentes em batelada, utilizando o modelo de Langmuir Estendido e determinar as regiões de confiança destes parâmetros. Os adsorvatos utilizados foram os corantes tartrazina e amaranço e o adsorvente foi o óxido de magnésio.

METODOLOGIA

Foram determinados os espectros de absorvância da tartrazina e amaranço e seus comprimentos de máxima absorvância. Nestes pontos foi feita a calibração linear para multicomponentes baseada na Lei de Beer, através de uma regressão linear por mínimos quadrados, descartando qualquer ponto com absorvância superior a 1, e um tratamento estatístico utilizando a distribuição t de Student com 95% de confiança. Cada ponto foi realizado em triplicata. Foram realizados testes de validação, comparando os valores da concentração real com o calculado pela calibração. Posteriormente, os estudos de adsorção com óxido de magnésio foram realizados na temperatura de 40 °C por 48 horas com um agitador em banho-maria. Todos os pontos foram realizados em quadruplicata. Os dados obtidos foram utilizados em um estimador, sendo considerado o Modelo de Langmuir Estendido. Foram estimados os parâmetros, bem como suas regiões de confiança elípticas. Com estes parâmetros estimados, foram preditos os valores de concentração de equilíbrio, que foram comparados com os medidos experimentalmente.

EQUAÇÕES

Lei de Beer para Bicomponentes:

$$\begin{bmatrix} Abs_1 \\ Abs_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \end{bmatrix}$$

Equação de Langmuir Estendida:

$$q_{e,i} = \frac{q_m K_i C_{e,i}}{1 + \sum K_i C_{e,i}}$$

$q_{e,i}$ – quantidade adsorvida do componente i (mg/g)
 $C_{e,i}$ – concentração de equilíbrio do componente i (mg/L)
 q_m – capacidade máxima de adsorção do componente i (mg/L)

RESULTADOS

Os pontos máximos de absorvância para tartrazina e amaranço foram de 425 e 520 nm, respectivamente, como mostra a Figura 1. Os valores de absorvância e suas regiões de confiança são mostrados na Tabela 1. Com os testes de validação foram encontrados erros máximos de 3%. Para uma absorvância K_{ij} , i representa o comprimento de onda e j o corante. Os parâmetros do Modelo de Langmuir Estendido encontram-se na Tabela 2. Suas regiões de confiança são demonstradas na Figura 2. Pela Figura 3 é mostrado o teste de validação dos valores de C_e experimental com os calculados pelos estimador. Notou-se uma boa concordância entre os valores, que mostra que o Modelo de Langmuir Estendido é capaz de representar bem estes dados experimentais. Também foi feita uma comparação dos valores de C_e de cada corante com as concentrações iniciais de tartrazina e amaranço, mostrado na Figura 4. Nota-se a interferência mútua entre os corantes, aumentando a concentração de equilíbrio do corante conforme se eleva a concentração do outro.

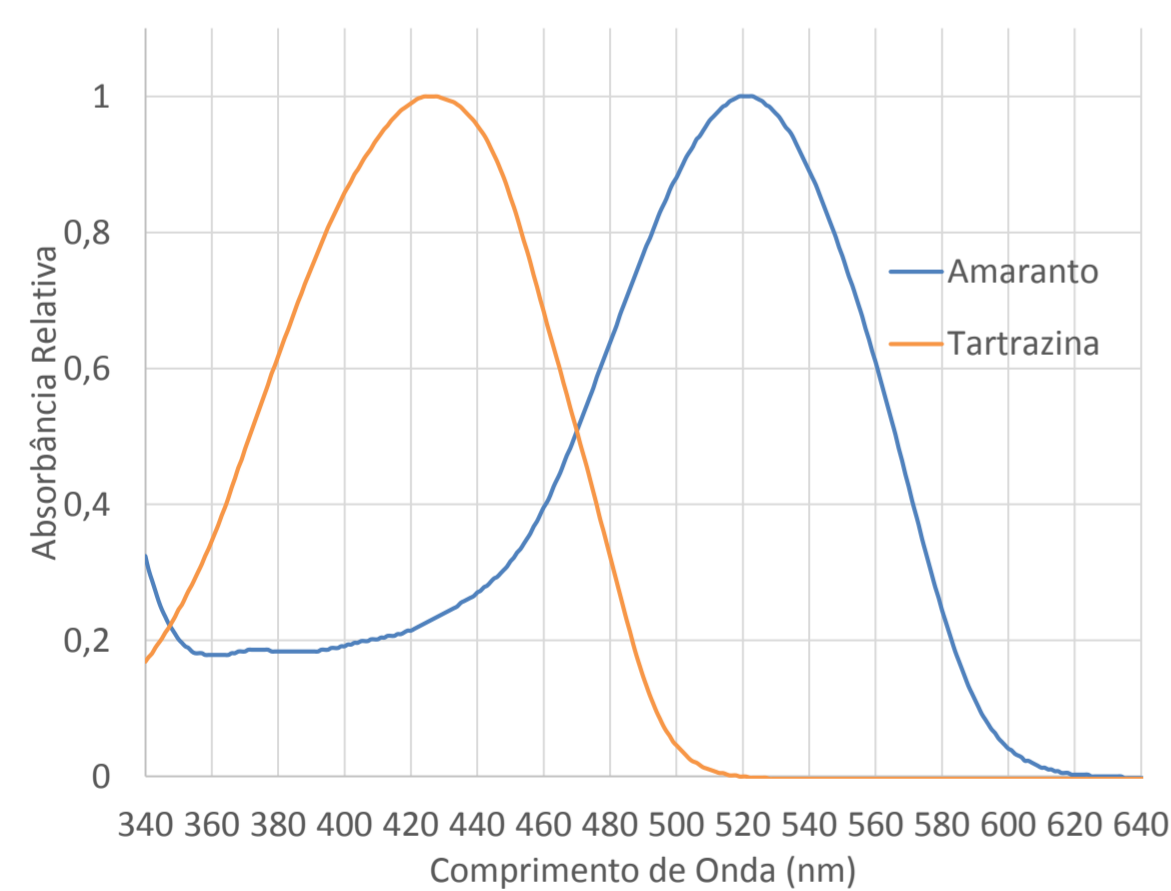


Figura 1 – Espectro de tartrazina e amaranço

Tabela 1 – Absorvância a 425 (1) e 520 (2) nm para tartrazina (1) e amaranço (2)

	k11	k21	k12	k22
a	0,043404	0,00029	0,008276	0,036779
var a	4,53E-09	1,1E-09	7,42E-09	7,47E-10
dp a	6,73E-05	3,32E-05	8,61E-05	2,73E-05
incA inf	0,043256	0,000217	0,008091	0,03672
incA sup	0,043552	0,000363	0,008461	0,036837

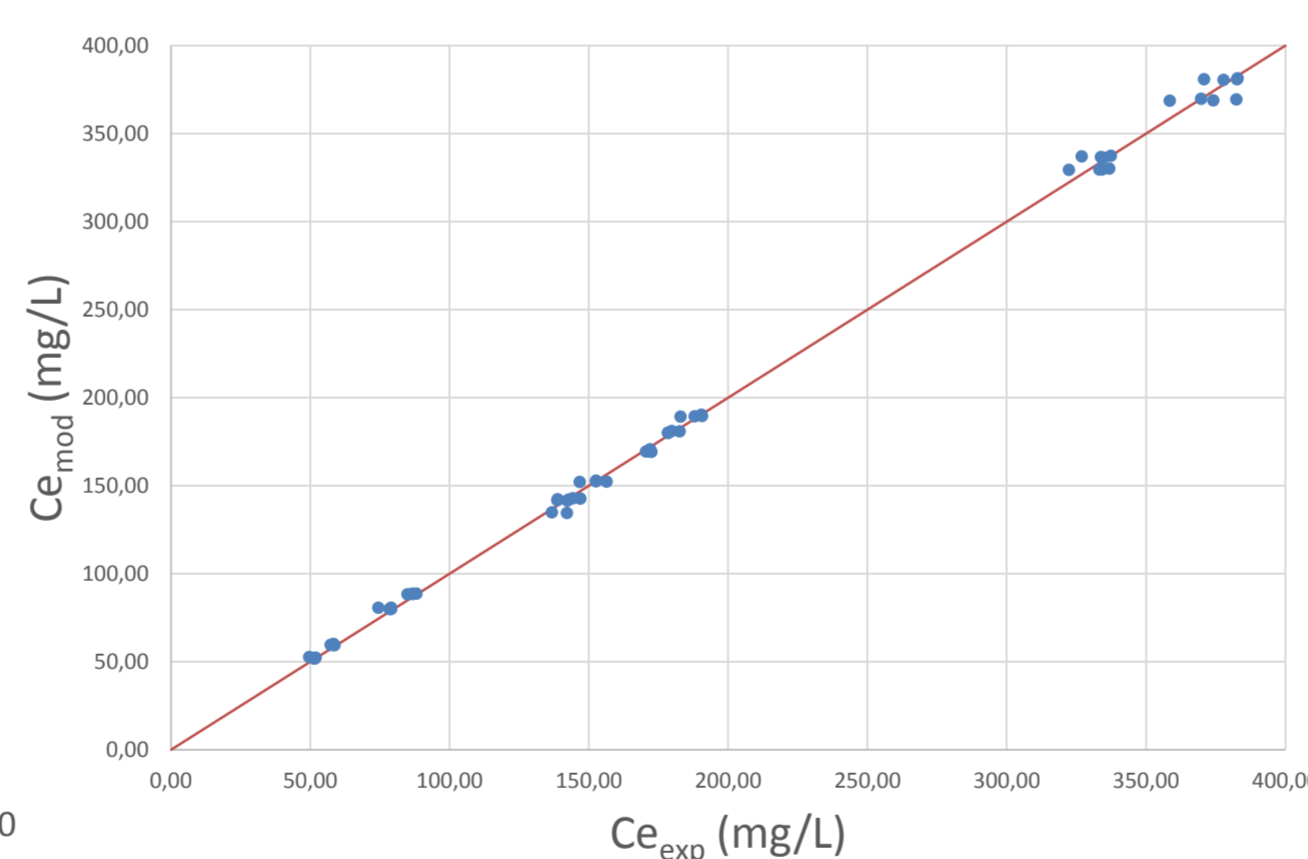


Figura 3 – Teste de validação do estimador

Tabela 2 – Parâmetros estimados para tartrazina (1) e amaranço (2)

	Param	LimInf	LimSup	DesvPad
Q_{max_1} (mg/g)	84,14	75,25	93,04	4,43
Q_{max_2} (mg/g)	86,56	81,31	91,81	2,61
K_1 (L/mg)	0,01356	0,00736	0,01976	0,00308
K_2 (L/mg)	0,04918	0,02851	0,06985	0,01030
Função Objetivo (mg/L) ²	956,411			

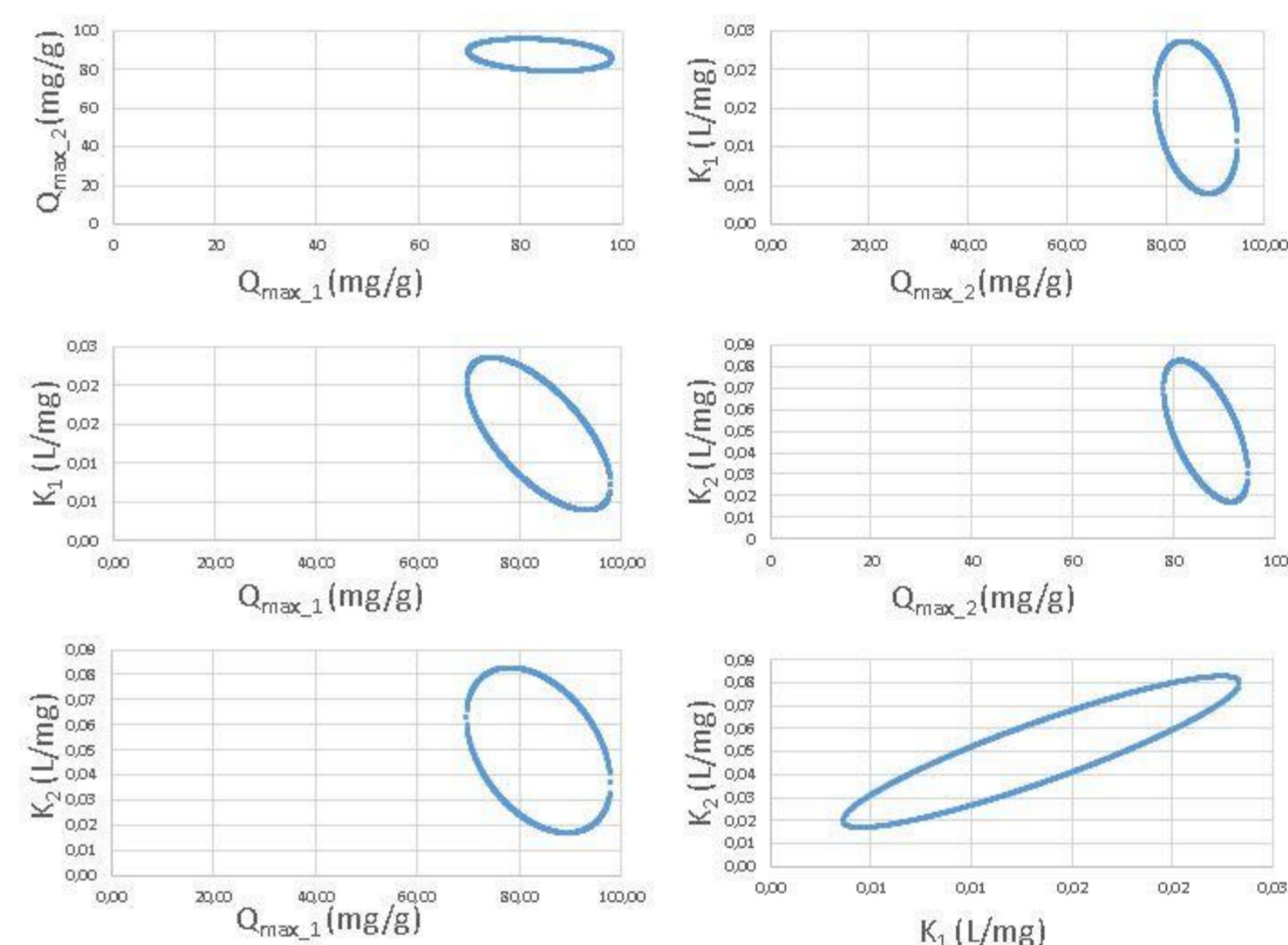


Figura 2 – Regiões de confiança dos parâmetros estimados

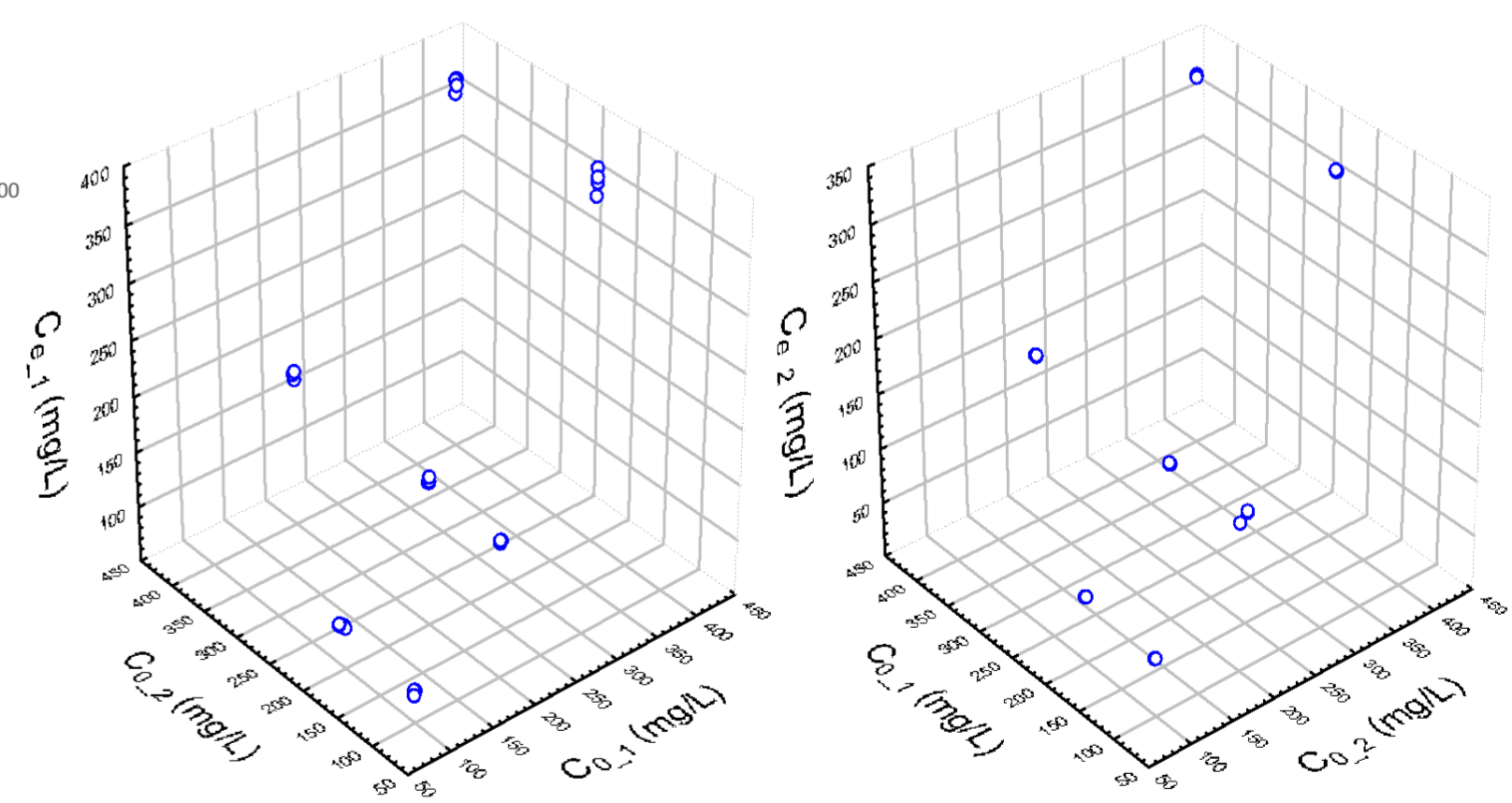


Figura 4 – Influência da presença de outro corante na concentração de equilíbrio

CONCLUSÃO

Pode-se concluir que para a mistura de tartrazina e amaranço é possível utilizar uma calibração linear baseada na extensão de Lei de Beer. Apesar de ser um método simples e com maiores restrições, os resultados obtidos pelos testes de validação provaram a sua eficácia. Outro ponto importante que se pode concluir é que o programa estimador utilizado para determinar os parâmetros do modelo de adsorção resultou em valores de C_e condizentes com os pontos experimentais, que mostra a capacidade do Modelo de Langmuir Estendido de representar bem estes dados experimentais da adsorção em soluções de tartrazina e amaranço.

AGRADECIMENTOS