

GURUPI ISOTHERMS PLOT (GIP): UMA FERRAMENTA COM INTERFACE GRÁFICA INTUITIVA E GRATUITA COMO ALTERNATIVA PARA O CÁLCULO DE PARÂMETROS DE ISOTERMA DE ADSORÇÃO**Douglas A. Castro^a, Mateus P. S. Milhomem^a, Douglas H. Pereira^{a*} e Paulo V. B. Leal^b**^aDepartamento de Ciências Exatas e Biotecnológicas, Universidade Federal do Tocantins, 77410-530 Gurupi – TO, Brasil^bInstituto de Engenharia, Ciência e Tecnologia, Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri, 39440-000 Janaúba – MG, Brasil

Recebido em 08/02/2021; aceito em 22/03/2021; publicado na web em 14/04/2021

GURUPI ISOTHERMS PLOT (GIP): A TOOL WITH INTUITIVE AND FREE GRAPHIC INTERFACE AS AN ALTERNATIVE FOR THE CALCULATION OF ADSORPTION ISOTHERMA PARAMETERS. *Gurupi Isotherms Plot (GIP)* is a new software and has been developed to facilitate the study of absorptive processes. The adsorption isotherm parameters are determined by the GIP in a non-linearized way, and the current version is implemented to determine the parameters of Langmuir, Freundlich, Dubinin-Radushkevich, coefficient of determination (R^2) and average relative error (ARE). In order to facilitate the access and use of the program, a friendly graphical interface has been developed with a response time in seconds. It should also be noted that is a free software. The program was tested with different sets of absorptive data and showed an excellent correlation with the literature data proving its performance.

Keywords: adsorption; isotherms; free software.

INTRODUÇÃO

A escassez da água resultante do crescimento econômico e populacional é considerada como uma das ameaças mais importantes para a sociedade humana. Dentro das próximas décadas a água pode tornar-se o recurso mais estratégico, especialmente em regiões áridas e semi-áridas do mundo.¹ Desse modo, alternativas que promovam a sustentabilidade no uso da água, tais como, educação ambiental e tratamento de efluentes devem ser sempre planejadas.

A tecnologia de adsorção tem sido considerada como um dos processos mais eficientes e econômicos para a remoção de poluentes de correntes aquosas. O processo de adsorção é superior a muitos outros processos de tratamento em virtude do seu baixo custo e limite de operação.²

A dinâmica dos processos de adsorção de espécies químicas em solução em materiais sólidos, como minerais de argila, depende da distribuição destas espécies entre as fases sólidas e líquidas. O equilíbrio de adsorção é avaliado a partir das isotermas de adsorção que são representadas pelas concentrações das espécies químicas nas fases sólidas em relação às das fases líquidas.³

A determinação de isotermas de adsorção é uma ferramenta usada para caracterizar adsorventes. No entanto, a interpretação correta das isotermas requer a avaliação de alguns fatores, tais como: tamanho dos poros, propriedades do adsorvato e sua afinidade com o adsorvente, entre outros.⁴ Nesse contexto, a modelagem é importante para auxiliar na interpretação de resultados experimentais e útil para a determinação de propriedades.⁵

Diversos modelos isotérmicos foram desenvolvidos, cada um com características próprias, o que os tornam singulares na descrição de determinados sistemas de adsorção. Dentre os mais utilizados, para avaliação da adsorção química, destacam-se os modelos isotérmicos de Langmuir,^{6,7} Freundlich,⁸ Dubinin-Radushkevich,⁹ dentre outros.

O modelo de isoterma de Langmuir é frequentemente usado para descrever as isotermas de equilíbrio de adsorção em superfícies homogêneas. Originalmente, a isoterma de Langmuir foi descrita para

avaliar a adsorção de gases sobre sólidos. Entretanto, o modelo de isoterma também pode ser aplicado a distribuição de equilíbrio de adsorvato entre as fases líquida e sólida.¹⁰

O processo de adsorção em que uma superfície adsorvente heterogênea está envolvida na distribuição do adsorvato é explicado pelo modelo de Freundlich.¹¹ Desse modo, a isoterma de Freundlich propõe uma equação empírica que assume que a superfície do adsorvente é heterogênea e com sítios de adsorção em diferentes níveis de energia.¹²

A equação de Dubinin-Radushkevich (DR) é amplamente utilizada para a descrição da adsorção em materiais microporosos. A equação é de origem semiempírica e baseia-se nos pressupostos de uma variação na energia potencial entre as fases dessorvidas e adsorvidas e uma energia característica de um dado sólido. Essa equação proporciona um comportamento macroscópico de carga de adsorção para uma dada pressão.¹³ A isoterma de Dubinin-Radushkevich é útil para a estimativa da energia aparente e as características de adsorção.¹⁴

Investigações computacionais podem ser entendidas como um instrumento preditivo para a orientação de análises experimentais bem como auxílio na compreensão de resultados com o intuito de alcançar maior eficiência além de interpretar vários aspectos de um processo.¹⁵ De modo a minimizar os esforços necessários para se realizar ensaios de adsorção, a utilização de ferramentas computacionais que possibilitam não somente a redução do tempo empregado como o aumento da praticidade no tratamento e análise de dados são de suma importância.^{16,17}

Nesse contexto, o presente trabalho tem como objetivo a proposição de um software para tratamento de dados de análises de isoterma de adsorção, denominado *Gurupi Isotherms Plot (GIP)*, com intuito de disponibilizar, de forma gratuita, uma ferramenta computacional com interface gráfica intuitiva e amigável. Nessa primeira versão do software é possível calcular as isotermas a partir dos modelos de Langmuir, Freundlich e Dubinin – Radushkevich de forma rápida, simples e eficiente.

*e-mail: doug@uft.edu.br

PARTE EXPERIMENTAL

Desenvolvimento do software

O software *GIP* foi inicialmente desenvolvido para três modelos isotérmicos: Langmuir,^{6,7} Freundlich⁸ e Dubinin-Radushkevich⁹ descritos pelas equações (1) – (3). São elas:

$$Q_e = \frac{Q_m K_L C_e}{1 + K_L C_e}, \quad (1)$$

$$Q_e = K_F C_e^{\frac{1}{n}}, \quad (2)$$

$$Q_e = Q_m e^{-b_{DR} \left[RT \ln \left(1 + \frac{1}{C_e} \right) \right]^2}, \quad (3)$$

em que Q_e é a quantidade de adsorvato adsorvido por unidade de massa do adsorvente, Q_m é a quantidade de adsorvato adsorvido, C_e é a concentração do adsorvato no equilíbrio, R a constante dos gases, T a temperatura, K_L é a constante de Langmuir, K_F a constante de Freundlich, n representa a intensidade de adsorção e b_{DR} é a constante de Dubinin-Radushkevich.

Para ajustar os dados obtidos experimentalmente, a saber Q_e e C_e , busca-se minimizar a soma das distâncias entre amostras e isothermas. Em outras palavras, busca-se determinar, por exemplo Q_m e K_L , para o modelo isotérmico de Langmuir, de modo a minimizar a soma dos quadrados dos erros de aproximação entre os valores tabelados (experimentais) e a isoterma. Analogamente, obtém-se os coeficientes para os demais modelos isotérmicos. Para tal, utilizou-se o método dos quadrados mínimos, de forma a obter as equações (4) – (6), dadas por:

$$f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{x_1 x_2 C_e}{1 + x_2 C_e} - Q_e \right)^2, \quad (4)$$

$$f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^n \left(x_1 C_e^{\frac{1}{x_2}} - Q_e \right)^2, \quad (5)$$

$$f(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^n \left(x_1 e^{-x_2 \left[RT \ln \left(1 + \frac{1}{C_e} \right) \right]^2} - Q_e \right)^2. \quad (6)$$

Para obter os pontos de mínimo das equações (4) – (6), calculou-se as derivadas parciais em relação a cada uma das variáveis, igualando cada uma delas a zero $\left(\frac{df}{dx_1} = 0, \frac{df}{dx_2} = 0 \right)$. Isso gera um sistema não-linear para cada uma das isothermas.

Não é o caso do *GIP* mas, cabe mencionar que em algumas análises de modelos isotérmicos são considerados os dados linearizados uma vez que, a regressão linear é, de fato, mais fácil de usar e interpretar, mas em contraponto pode não fornecer bons ajustes. Mesmo que a regressão linear possa modelar diferentes curvas, pode ocorrer de não se enquadrar de forma adequada a curva específica do diagrama de dispersão. O emprego de regressão não-linear, apesar de mais trabalhoso, pode fornecer resultados de ajustes mais precisos. Desse modo o software foi desenvolvido levando em consideração dados não-lineares por serem mais adequados e precisos para análise de modelos isotérmicos.

As resoluções dos sistemas não-lineares foram realizadas pelo uso do método de Newton e os parâmetros de interesse para cada isoterma determinados. De fato, para que haja convergência do método iterativo

para a solução do problema de minimização do resíduo é necessário que este se inicie das bacias de atração corretas. Visando amplo uso dessa ferramenta computacional, com base na matriz utilizada e fornecida pelo usuário, são estimadas as regiões de interesse para se buscar os coeficientes das isothermas. Por se tratar de uma região grande, é feita uma partição do domínio em subretângulos e cada vértice é usado como aproximação inicial para o método iterativo. Atingido o critério de parada, por exemplo uma quantidade máxima de iterações, o resultado é comparado com o obtido anteriormente para saber quais coeficientes manter. Uma das comparações é a imagem das equações (4)-(6) nos pontos candidatos a mínimo da função. Inicialmente, a implementação numérica do algoritmo, necessária para resolver numericamente os sistemas não lineares, foi realizada em linguagem C, com o software Dev-C++.¹⁸

A implementação numérica para os testes estatísticos, coeficiente de determinação, R^2 , e erro relativo médio, ERM, junto ao algoritmo, foi realizada com a utilização das equações (7) – (8), dadas por

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (Q_e^{exp} - Q_e^{cal})^2}{\sum (Q_e^{exp} - Q_e^{med})^2}, \quad (7)$$

$$ERM = \sum \left| \frac{Q_e^{exp} - Q_e^{cal}}{Q_e^{exp}} \right|, \quad (8)$$

em que Q_e^{exp} é a quantidade de adsorvato obtida experimentalmente, Q_e^{cal} é a quantidade de adsorvato adsorvida obtida através do cálculo das equações isotérmicas (após a obtenção dos parâmetros desejados) e Q_e^{med} é a quantidade média de adsorvato adsorvida obtida experimentalmente.

Após os testes de funcionalidade o código foi reescrito em linguagem Java, através da IDE Apache Netbeans.¹⁹ Essa escolha facilitou o desenvolvimento da interface.

O software foi depositado para registro junto ao INPI pela Universidade Federal do Tocantins (UFT) e com a finalização dos trâmites do processo, o mesmo estará disponível, de forma gratuita, na página do programa de Pós-Graduação em Química da UFT, www.uft.edu.br/ppgq.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O programa e suas funcionalidades

O programa *GIP* foi desenvolvido para ser um *software* de interface amigável, de fácil uso no que diz respeito a determinação dos coeficientes das isothermas de adsorção. O usuário deve fornecer apenas, por exemplo, os dados experimentais de Q_e e C_e , no caso das isothermas de Langmuir e Freundlich. Já no caso de usar a isoterma de Dubinin-Radushkevich deve-se ainda fornecer a temperatura em Kelvin. Na versão apresentada estão implementados três modelos isotérmicos para a escolha do usuário: Langmuir, Freundlich e Dubinin-Radushkevich. A Figura 1 apresenta a interface do programa. Pode-se observar que o programa possui a opção de **Idioma**, permitindo ao usuário escolher entre o uso em Português, Inglês ou Espanhol. Ao lado da caixa de idiomas é possível observar uma caixa de diálogo denominada Modelos Isotérmicos com a lista dos modelos implementados e disponíveis para a escolha do usuário.

Os dados experimentais para serem inseridos são: a quantidade de adsorvato adsorvido por unidade de massa do adsorvente Q_e e a concentração do adsorvato no equilíbrio C_e . A medida que os valores escolhidos são inseridos no campo **Dados**, o número de amostras (**N. Amostras**) vai se modificando. O programa também pode ser

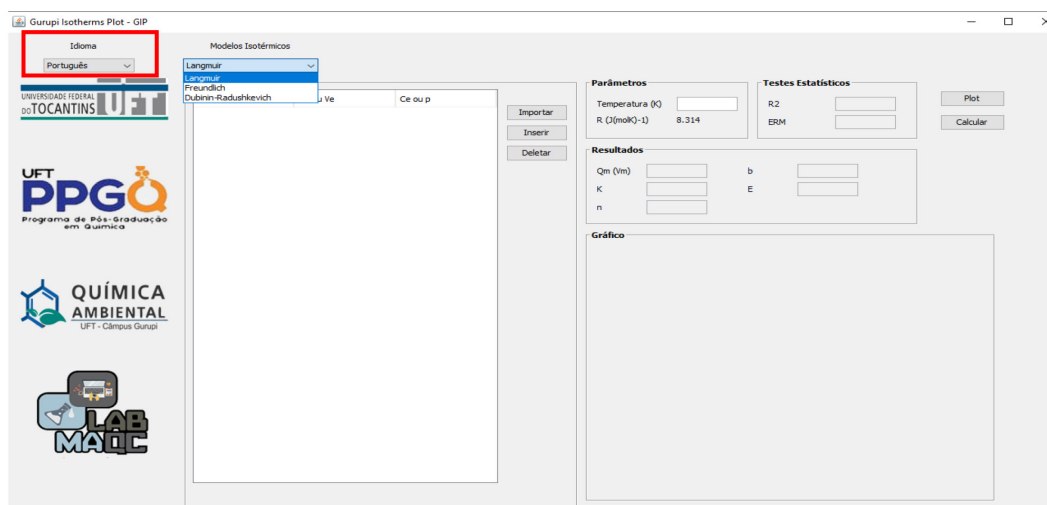


Figura 1. Interface gráfica do programa Gurupi Isotherms Plot

utilizado para gás, inserindo as variáveis de quantidade de adsorvato adsorvido por unidade de volume do adsorvente V_e ao invés de Q_e e pressão do adsorvato no equilíbrio p ao invés de C_e .

Os dados determinados experimentalmente podem ser inseridos manualmente no programa com o botão **Inserir** ou importados de uma planilha em .xlsx com a opção de **Importar**. Para usar a funcionalidade de importação de documento, é necessário que haja uma planilha previamente preenchida (apenas com números) de modo que na primeira coluna vão os valores de C_e e na segunda coluna os valores de Q_e . É importante destacar que as casas decimais devem ser separadas por ponto e não por vírgula e que os modelos isotérmicos foram implementados considerando o Sistema Internacional (SI).

Nessa versão, ao pressionar o botão **Plot** tem-se o gráfico apenas com os dados amostrais. Para o usuário obter os valores dos coeficientes que fazem com que a isoterma melhor ajuste aos dados experimentais, é necessário que seja pressionado o botão **Calcular**. Assim, além dos coeficientes ainda é gerado o gráfico que apresenta os dados experimentais, a isoterma selecionada para análise e os erros. Seleção feita no campo **Modelos isotérmicos**. A Figura 2 apresenta um exemplo prático do programa funcionando.

Outra funcionalidade do programa pode ser encontrada com um clique no botão direito sobre o gráfico. Com esse comando o usuário tem acesso a opções para edição do mesmo, dentre elas: copiar, salvar como, imprimir, ampliar ou reduzir eixos e escala automática, como representado na Figura 3a. Nesse contexto, o software permite que o usuário analise regiões específicas de interesse como região de baixo grau de ocupação dos sítios, Figura 3b, além de alteração de cores do plano de fundo do gráfico, conforme a Figura 3c.

Performance e validação do software

Para verificar a precisão do software, confiabilidade e a performance, diversos testes foram realizados, com dados obtidos de diferentes literaturas disponíveis. Foram consideradas tanto adsorção de líquidos quanto gás. O comparativo ocorreu com as seguintes referências: Leal *et al.*,^{20,21} que utilizaram métodos não lineares para a análise dos modelos isotérmicos, Magriotis *et al.*²² e Magriotis *et al.*,²³ que utilizaram métodos lineares para a análise dos modelos isotérmicos e com exemplos de livros-texto utilizados na área, tais como: Atkins e Paula,²⁴ Castellan²⁵ e McQuarrie e Simon²⁶ que também utilizaram métodos lineares para a análise dos modelos isotérmicos.

O adsorvente utilizado nas literaturas Leal *et al.*^{20,21} foi a caulinita rosa, obtida na cidade de Ijaci – MG, tratada com ácido em diferentes concentrações e peróxido de hidrogênio, respectivamente. No caso

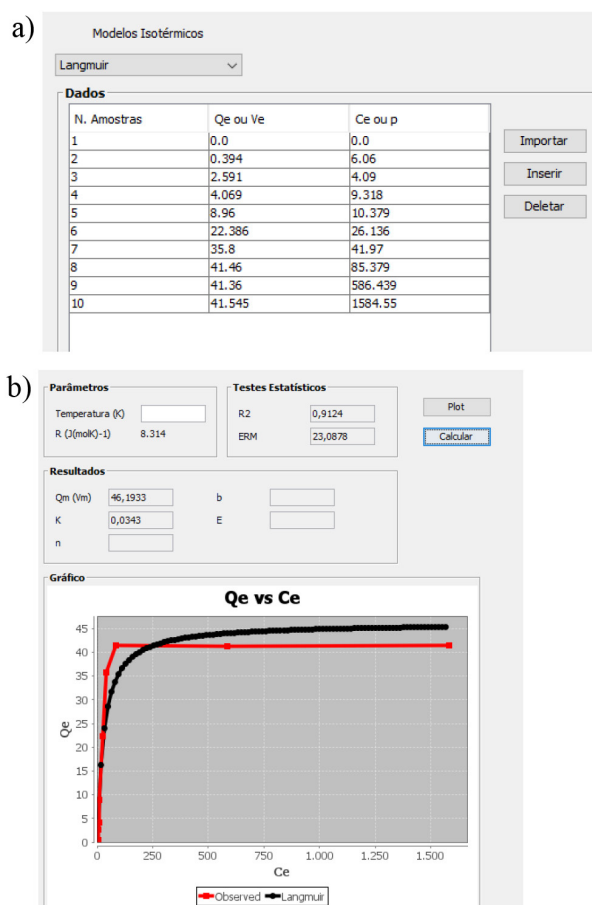


Figura 2. a) Parâmetros encontrados experimentalmente e adicionados no GIP; b) resultados obtidos após a execução do programa

de Magriotis *et al.*,²² as caulinitas: rosa, branca e amarela, obtidas na cidade de Ijaci – MG, que receberam essa nomenclatura pela coloração. Já no trabalho de Magriotis *et al.*,²³ foram utilizados como adsorvente, a caulinita rosa, carvão ativado comercial (Marca Cromoline) e uma zeólita desenvolvida pelo grupo.

No caso da comparação com os livros didáticos, foi considerado somente o desenvolvimento dos exercícios.

Desse modo, a nomenclatura utilizada nas tabelas se deu a partir dos adsorventes, no caso das referências dos artigos: caulinita rosa (CR), caulinita amarela (CA), caulinita branca (CB), caulinita

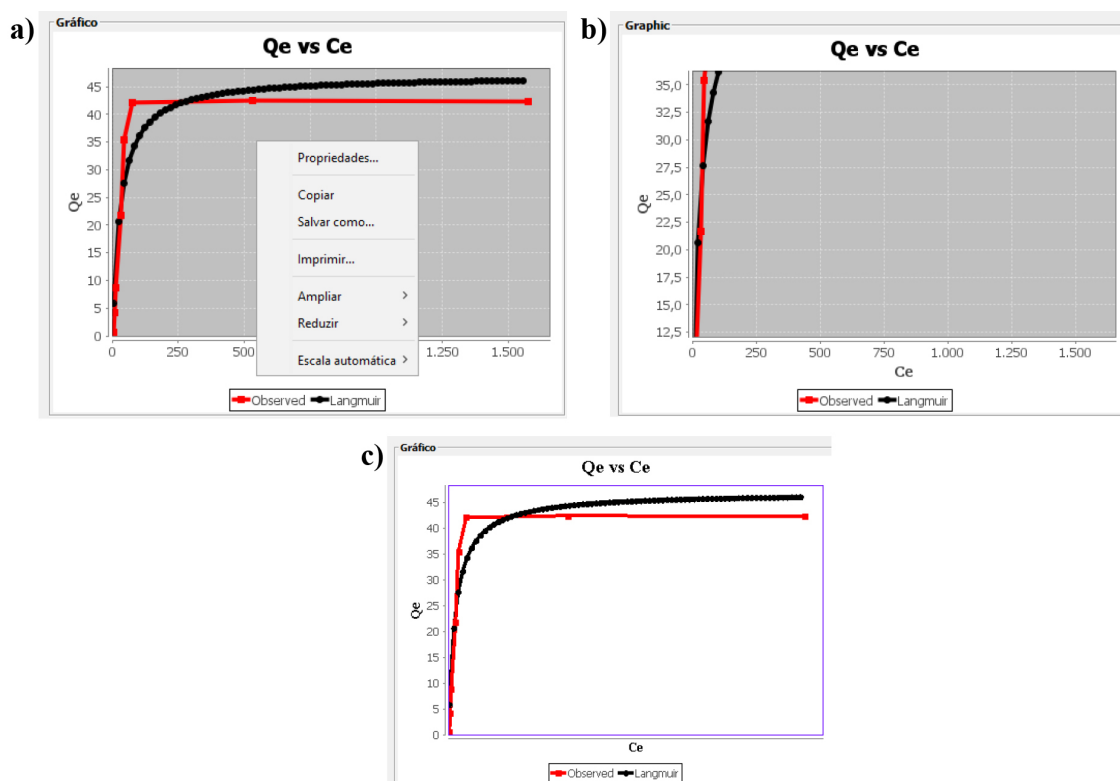


Figura 3. a) Propriedades dos gráficos gerados pelo GIP; b) imagem de uma região de baixo grau de ocupação dos sítios e c) gráfico com cores e alteradas

tratada com peróxido de hidrogênio (CP), caulinita tratada com ácido 1 mol L^{-1} (KA-01), caulinita tratada com ácido 2 mol L^{-1} (KA-02), carvão ativado (CARV) e zeólita (ZEO). Para os exercícios dos livros a nomenclatura utilizada nas tabelas se deu pela abreviação dos nomes dos autores e número do exercício: Atkins (ATK – 25.1, ATK – 25.7), Castellan (CAS – 18.21) e McQuarrie (MC – 29.66). As Tabelas 1 e 2 apresentam as matrizes de dados usadas.

A escolha do conjunto de dados considerou alguns pontos importantes: o primeiro foi a utilização de dados publicados em artigos de um grupo de pesquisa que atua na área. O segundo foi a comparação com livros textos que são utilizados no meio acadêmico e que apresentam dados amostrais para a fase líquida e para a fase gasosa, auxiliando na validação do software em diferentes fases.

Outro ponto a considerar é que o conjunto de dados proposto nos exercícios dos livros em conjunto com o software *GIP* pode ser utilizado também de forma didática por professores nas disciplinas em que os modelos isotérmicos são estudados. Cabe destacar que a utilização das matrizes em questão teve por finalidade avaliar a eficiência e confiabilidade do software, com o intuito de validar o programa, por meio de comparação com dados existentes na literatura e não efetuar uma análise sobre os ajustes dos dados aos modelos isotérmicos dos autores.

Os dados das Tabelas 1 e 2 foram inseridos no software *GIP* e foram calculados os parâmetros para as isotermas de Langmuir, Freundlich, Dubinin-Radushkevich, R^2 e ERM. Para avaliar a precisão do *GIP*, foram avaliados os desvios entre os valores das literaturas e os encontrado pelo software, equação (9), dada por:

$$\text{Desvio} = |\text{Valor da Literatura} - \text{Valor encontrado pelo GIP}| \quad (9)$$

Performace do *GIP* em comparação com resultados não linearizados

Os resultados encontrados para o software *GIP*, levando em

consideração a comparação com dados não linearizados, estão representados na Tabela 3. Os valores entre parênteses são os desvios encontrados conforme a equação 9. Ao avaliar o comparativo com os resultados não linearizados, Tabela 03, foi possível observar que os resultados do *GIP* apresentaram boa correlação com os valores da literatura. Os resultados dos desvios aproximaram-se de zero para a maioria dos resultados analisados. Desse modo, foi possível observar que o *GIP* apresentou boa precisão quando comparado a dados não linearizados.

Performace do *GIP* em comparação com resultados linearizados em fase líquida

Os resultados encontrados para o software *GIP* em comparação com os dados linearizados estão representados na Tabela 4.

O comparativo com os parâmetros linearizados em fase líquida, Tabela 4, apresentam um maior desvio entre os valores (ref – *GIP*) em relação ao comparativo com os dados não linearizados. Porém esse fato pode ser justificado pela diferença de métodos empregados para a obtenção dos parâmetros, uma vez que, o software considera métodos não linearizados. No entanto, é possível observar a precisão do software em relação aos melhores ajustes dos modelos isotérmicos descritos nas referências.

Performace do *GIP* em comparação com resultados linearizados em fase gasosa

Para a fase gasosa foram avaliados três matrizes e os resultados estão representados na Tabela 5.

Foi possível observar, na análise de matrizes com adsorvatos gasosos que o *GIP* respondeu com precisão aos resultados dos exemplos/problemas. Os desvios observados podem estar relacionados as diferenças no método de análise, uma vez que as referências nesse caso consideraram métodos linearizados para a análise enquanto o

Tabela 1. Valores de Q_e e C_e determinado para em diferentes matrizes, com suas respectivas temperaturas de análise

Tratamento ácido 1 mol L ⁻¹ – (KA-01)											Referência
Ce (mg L ⁻¹)	0	4,320	8,640	12,200	33,110	45,910	78,100	531,510	1576,970	T (K)	Leal <i>et al.</i> ²⁰
Qe(mg g ⁻¹)	0	0,568	4,130	8,780	21,690	35,400	42,190	42,420	42,30	298,15	
Tratamento ácido 2 mol L ⁻¹ – (KA-02)											Leal <i>et al.</i> ²¹
Ce (mg L ⁻¹)	0	1,590	3,640	5,230	11,060	19,770	32,650	60,150	488,330	1531,500	
Qe (mg g ⁻¹)	0	0,841	2,636	4,477	8,894	23,023	46,735	48,797	46,740	46,850	298,15
Caulinita Rosa (CR)											Leal <i>et al.</i> ²¹
Ce (mg L ⁻¹)	0	1,370	4,710	22,940	59,730	81,950	131,990	645,300	1634,800	T (K)	
Qe (mg g ⁻¹)	0	2,860	4,520	7,710	19,030	31,810	32,800	35,470	36,510	298,15	
Tratamento com peróxido (CP)											Magriotis <i>et al.</i> ²²
Ce (mg L ⁻¹)	0	6,060	4,090	9,318	10,379	26,136	41,970	85,379	586,439	1584,550	
Qe (mg g ⁻¹)	0	0,394	2,591	4,069	8,960	22,386	35,800	41,460	41,360	41,545	298,15
Caulinita Branca (CB)											Magriotis <i>et al.</i> ²²
Ce (mg L ⁻¹)	0	39,594	43,940	42,970	85,950	226,940	594,617	950,860	3488,693	T (K)	
Qe (mg g ⁻¹)	0	1,040	2,610	5,700	11,400	17,310	30,540	34,610	31,131	298,15	
Caulinita Amarela (CA)											Magriotis <i>et al.</i> ²³
Ce (mg L ⁻¹)	0	6,702	12,743	28,129	62,110	166,320	382,386	T (K)			
Qe (mg g ⁻¹)	0	4,330	5,726	7,187	13,789	23,368	21,761	298,15			
Carvão Ativado (CARV)											Magriotis <i>et al.</i> ²³
Ce (mg L ⁻¹)	0	19,070	34,520	75,120	98,160	384,440	810,290	T (K)			
Qe (mg g ⁻¹)	0	8,090	16,540	32,490	50,180	61,550	68,970	298,15			
Zeólita (ZEO)											Atkins e Paula ²⁴
Ce (mg L ⁻¹)	0	3,776	6,735	15,023	108,148	225,308	683,792	1207,786	T (K)		
Qe (mg g ⁻¹)	0	2,622	4,326	8,498	49,185	77,469	81,620	79,222	298,15		
Problema 25.7 – Atkins e Paula (2012) (ATK 25.7)											Atkins e Paula ²⁴
Ce (mg L ⁻¹)	0	0,050	0,100	0,500	1,000	1,500	T (K)				
Qe (mg g ⁻¹)	0	0,040	0,060	0,120	0,160	0,190	298,15				

Tabela 2. Valores de p e V_m determinado para em diferentes matrizes, com suas respectivas temperaturas de análise

Exemplo 25.1 – Atkins e Paula (2012) (ATK 25.1)										Referência
p (Kpa)	0	10,200	18,600	25,500	31,500	36,900	41,600	46,100	T (K)	Atkins e Paula ²⁴
V _e (cm ³)	0	13,300	26,700	40,000	53,300	66,700	80,000	93,300	273	
Problema 18.21 – Castellan (2011) (CAS 18.21)										Castellan ²⁵
p (mmHg)	0	100,000	200,000	300,000	400,000	T (K)				
V _e (cm ³)	0	9,750	14,500	18,200	21,400	273,15				
Problema 29.66 – McQuarrie e Simon (1997) (MC 29.66)										McQuarrie e Simon ²⁶

software utiliza métodos não linearizados. A comparação é válida pois, apesar da diferença dos métodos, foi possível observar que a tendência de ajuste ao melhor modelo isotérmico, proposto por tais literaturas, foi seguida.

Nesse contexto, é possível destacar o problema proposto por Castellan.²⁵ No problema, o autor propõe um conjunto de dados que se ajusta perfeitamente ao modelo de Freundlich. Esse fato foi facilmente detectado, com o auxílio do *GIP*, a partir da análise de R^2 que foi igual a 1,00 e de um erro relativo médio muito baixo (0,006), além dos gráficos experimental e calculado que foram análogos. No intuito de verificar o ajuste dos dados aos outros modelos implementados, foi possível confirmar o melhor ajuste para a isoterma de Freundlich, conforme proposto pelo exercício. A Figura 4 apresenta o resultado obtido no *GIP* do problema para a isoterma de Freundlich.

Performace geral do *GIP*

De maneira geral os resultados obtidos pelo *GIP* comprovam a eficiência do método empregado no software para os parâmetros das isotermas analisadas, seja para os parâmetros linearizados como os não linearizados e para as fases líquida ou gasosa. A Figura 5 mostra a dispersão dos desvios encontrados (Tabela 3-5) e, como observado, a maior parte dos desvios se encontra próximo de zero.

A obtenção dos valores de R^2 e de erro relativo médio (ARE) foram outros critérios importantes para a comparação dos resultados do software com algumas das referências. Em especial aquelas que consideram esses fatores em suas análises.

Cabe destacar que o cálculo é realizado em poucos segundos após o início mostrando assim um bom desempenho em termos de velocidade.

Tabela 3. Comparativo dos dados obtidos no GIP e os descritos por Leal *et al.*^{20,21} que consideram métodos não lineares na análise. Desvios entre os valores encontrados pelo GIP e das literatura estão representados entre parênteses

Isoterma de Langmuir											
	Qm(mg g ⁻¹)		K _L (L mg ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]		
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP			
KA-01	46,990 (0,000)	46,990	0,033 (0,000)	0,033	0,917 (0,000)	0,917	11,939 (0,006)	11,933	Leal <i>et al.</i> ²⁰		
KA-02	52,570 (0,000)	52,570	0,050 (0,000)	0,050	0,882 (0,000)	0,882	8,839 (0,112)	8,951			
CP	46,190 (0,003)	46,193	0,034 (0,000)	0,034	0,912 (0,000)	0,912	23,061 (0,027)	23,088	Leal <i>et al.</i> ²¹		
CR	39,950 (0,610)	39,340	0,023 (0,200)	0,223	0,928 (0,000)	0,929	2,201 (0,141)	2,060			
Isoterma de Freundlich											
	KF (mg ^(1-1/n) g ⁽⁻¹⁾ L ^(1/n))		N	R ²		ERM		[ref]			
	[ref]	GIP		[ref]	GIP	[ref]	GIP				[ref]
KA-01	11,147 (0,267)	11,414	4,409 (0,695)	5,104	0,695 (0,010)	0,685	31,076 (0,023)	31,053	Leal <i>et al.</i> ²⁰		
KA-02	11,381 (0,000)	11,381	4,577 (0,000)	4,577	0,635 (0,000)	0,635	21,702 (2,035)	23,737			
CP	8,402 (0,000)	8,402	4,157 (0,000)	4,157	0,682 (0,000)	0,682	37,748 (2,136)	39,884	Leal <i>et al.</i> ²¹		
CR	7,945 (3,459)	4,486	4,394 (1,178)	3,216	0,774 (0,019)	0,755	7,314 (4,184)	3,130			
Isoterma de Dubinin-Raduskevich											
	Qm (mg g ⁻¹)		b _{DR} (mol ² kJ ⁻²)		E _{ads} (kJmol ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	
KA-01	42,970 (0,000)	42,970	0,0000872 (0,000)	0,0000871	75,730 (0,030)	75,760	0,963 (0,000)	0,963	3,186 (0,000)	3,186	Leal <i>et al.</i> ²⁰
KA-02	49,460 (0,000)	49,460	0,0000387 (0,000)	0,0000386	113,600 (0,140)	113,740	0,9730 (0,000)	0,9730	3,568 (0,000)	3,568	
CP	40,930 (0,326)	40,604	0,00004 (0,000)	0,0000316	107,630 (0,050)	107,680	0,978 (0,006)	0,972	3,004 (0,946)	2,058	Leal <i>et al.</i> ²¹
CR	36,510 (1,100)	35,410	0,0002 (0,000)	0,00022	50,000 (1,986)	48,014	0,950 (0,009)	0,941	3,004 (0,004)	3,000	

Tabela 4. Comparativo dos dados obtidos no GIP e os descritos por Magriotis *et al.*^{22,23} e Atkins e Paula²⁴ que consideram métodos lineares na análise. Desvios entre os valores encontrados pelo GIP e das literatura estão representados entre parênteses

Isoterma de Langmuir											
	Qm(mg g ⁻¹)		K _L (L mg ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]		
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP			
CA	25,780 (1,118)	26,898	0,0200 (0,002)	0,018	0,966 (0,006)	0,960	-----	0,957	Magriotis <i>et al.</i> ²²		
CB	34,670 (3,403)	38,073	0,0056 (0,001)	0,0042	0,971 (0,024)	0,947	-----	6,097			
CARV	78,080 (0,002)	78,082	0,0107 (0,000)	0,0107	0,991 (0,027)	0,964	-----	1,229	Magriotis <i>et al.</i> ²³		
ZEO	86,710 (3,855)	90,565	0,018 (0,005)	0,0125	0,987 (0,007)	0,980	-----	2,156			
Isoterma de Freundlich											
	KF (mg ^{1-1/n} kg ⁻¹ L ^{1/n})		N	R ²		ERM		[ref]			
	[ref]	GIP		[ref]	GIP	[ref]	GIP				[ref]
CA	3,650 (0,966)	2,684	3,879 (1,204)	2,675	0,886 (0,021)	0,907	-----	1,227	Magriotis <i>et al.</i> ²²		
CB	4,200 (1,549)	2,651	3,879 (0,836)	3,043	0,855 (0,074)	0,781	-----	11,557			
CARV	6,696 (0,00)	6,696	2,778 (0,00)	2,778	0,972 (0,079)	0,893	-----	2,324	Magriotis <i>et al.</i> ²³		
ZEO	10,220 (3,275)	6,945	3,217 (0,534)	2,683	0,961 (0,097)	0,864	-----	7,637			
ATK 25.7	0,160 (0,000)	0,160	2,400 (0,110)	2,290	-----	0,999	-----	0,126	Atkins e Paula ²⁴		
Isoterma de Dubinin-Raduskevich											
	Qm (mg g ⁻¹)		b _{DR} (mol ² kJ ⁻²)		E _{ads} (kJ mol ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	
CA	-----	22,098	-----	0,0001773	-----	53,100	-----	0,864	-----	2,491	Magriotis <i>et al.</i> ²²
CB	-----	30,332	-----	0,0014305	-----	18,700	-----	0,917	-----	3,538	
CARV	-----	64,091	-----	0,0004132	-----	34,790	-----	0,945	-----	1,880	Magriotis <i>et al.</i> ²³
ZEO	-----	82,437	-----	0,0009427	-----	23,030	-----	0,968	-----	3,115	

Tabela 5. Comparativo dos dados obtidos no *GIP* e os descritos por Atkins e Paula,²⁴ Castellan²⁵ e Macquarrie e Simon,²⁶ que consideram métodos lineares na análise. Desvios entre os valores encontrados pelo *GIP* e das literatura estão representados entre parênteses

Isoterma de Langmuir											
	Vm (^a cm ³ ; ^b m ³)		K _L (^d kPa ⁻¹ ; ^e mmHg ⁻¹ bar ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]		
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP			
ATK 25.1a	111,000 ^a (2,783)	113,783 ^a	0,00751 ^d (0,00)	0,0072 ^d	–	0,9999	–	0,049	Atkins e Paula ²⁴		
CAS 18.21	–	32,626 ^a	–	0,004 ^e	–	0,997	–	0,094	Castellan ²⁵		
MC 29.66	–	1,713 ^b	–	0,001 ^f	–	0,306	–	1,867	Macquarrie e Simon ²⁶		
Isoterma de Freundlich											
	KF (^a cm ³ ; ^b m ³)		N	R ²		ERM		[ref]			
	[ref]	GIP		[ref]	GIP	[ref]	GIP				
ATK 25.1a	–	1,678 ^a	–	1,364	–	0,999	–	0,159	Atkins e Paula ²⁴		
CAS 18.21	0,717 ^a (0,005)	0,722 ^a	1,760 (0,008)	1,768	–	1,000	–	0,006	Castellan ²⁵		
MC 29.66	0,026 ^b (0,000)	0,026 ^b	4,540 (0,104)	4,644	–	0,995	–	0,160	Macquarrie e Simon ²⁶		
Isoterma de Dubinin-Raduskevich											
	Vm (^a cm ³ ; ^b m ³)		b _{DR} (mol ² J ⁻²)		E _{ads} (kJ mol ⁻¹)		R ²		ERM		[ref]
	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	[ref]	GIP	
ATK 25.1a	–	45,056 ^a	–	0,0001407	–	59,600	–	0,923	–	1,414	Atkins e Paula (2012) ²⁴
CAS 18.21	–	20,537 ^a	–	0,0016399	–	17,460	–	0,967	–	0,353	Castellan (2011) ²⁵
MC 29.66	–	0,052 ^b	–	0,0000015	–	577,130	–	0,992	–	0,165	Macquarrie e Simon (1997) ²⁶

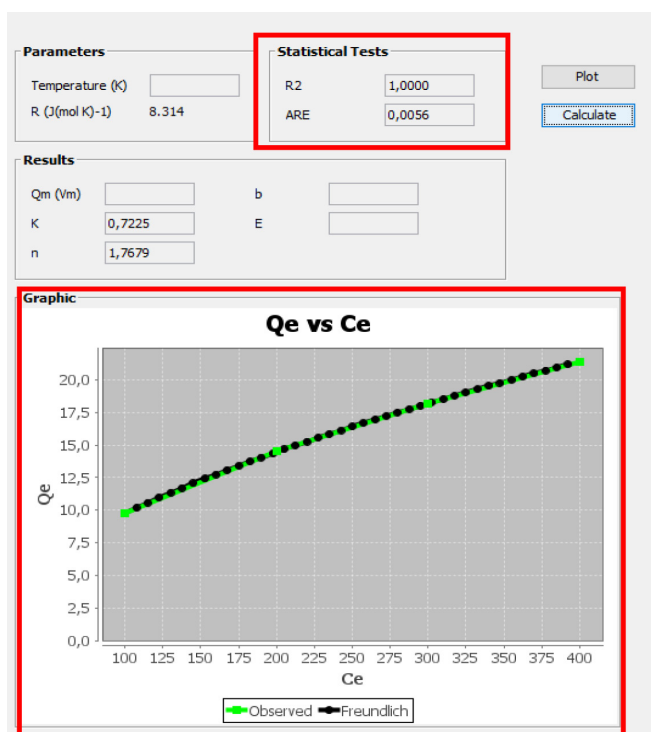


Figura 4. Resultado obtido do programa *Gurupi Isotherms Plot* para o problema proposto por Castellan²⁵

CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou o software *GIP*, que permite calcular parâmetros das isotermas de Langmuir, Freundlich, Dubinin-Radushkevich. A partir do teste do programa, com dados obtidos da literatura, foi possível observar uma excelente precisão do software. Os parâmetros de coeficiente de determinação (R^2) e erro relativo

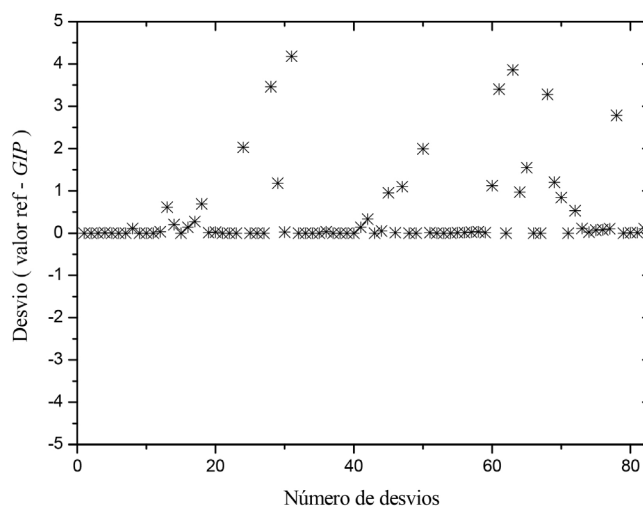


Figura 5. Gráfico dos desvios calculados entre os valores das referências e os valores do *GIP*

médio (ERM) também estão implementados no programa, permitindo, assim, que o usuário já tenha dados estatísticos para seus resultados. O software é livre, apresenta um interface de fácil uso e uma resposta rápida (na casa de segundos). Desse modo, o *Gurupi Isotherms Plot* apresenta-se como uma alternativa gratuita, rápida e eficiente para auxiliar alunos e pesquisadores em estudos de processos adsorptivos.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. Douglas Henrique Pereira agradece a Pró-Reitoria de Pesquisa, Pós-Graduação e Inovação (PROPESQ) e a Universidade Federal do Tocantins (UFT) pelo aporte financeiro (Edital N°29 /2020).

REFERÊNCIAS

1. Gohari, A.; Eslamian, S.; Mirchi, A.; Abedi-Koupaei, J.; Bavani, A.; Madani, K.; *J. Hydrol.* **2013**, *491*, 23.
2. Poonkuzhali, K.; Rajeswari, V.; Saravanakumar, T.; Viswanathamurthi, P.; Park, S.M.; Govarthan, M.; Sathishkumar, P.; *J. Hazard. Mater.* **2014**, *272*, 89.
3. Tavares, L. C.; Lemos, V. P.; Pinheiro, M. H. T.; Filho, H. A. D.; Fernandes, K. G.; *Cerâmica* 2013, *59*, 640.
4. Kwiatkowski, M.; Duda, J. T.; Duda, J. M.; *Colloids Surf., A* **2014**, *457*, 449.
5. Knani, S.; Aouaini, F.; Bahloul, N.; Khalfaoui, M.; Hachicha, M.A.; Lamine, A. B.; *Physica A: Statistical Mechanics and its applications* **2014**, *400*, 57.
6. Langmuir, I.; *J. Am. Chem. Soc.* **1916**, *38*, 2221.
7. Langmuir, I.; *J. Am. Chem. Soc.* **1918**, *40*, 1361.
8. Freundlich, H.; *Trans. Faraday Soc.* **1932**, *28*, 195.
9. Dubinin, M. M.; *Chem. Rev.* **1960**, *60*, 235.
10. Massoumi, A.; Ghaemy, M.; *Carbohydr. Polym.* **2014**, *108*, 206.
11. Rout, P.R.; Bhunia, P.; Dash, R. R.; *J. Environ. Chem. Eng.* **2014**, *2*, 1331.
12. Luna, M. D. G.; Flores, E. D.; Genuino, D. A. D.; Futralan, C. M.; Meng-Wei, W.; *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.* **2013**, *44*, 646.
13. Nguyen, C.; Do, D. D.; *Carbon* 2001, *39*, 1327.
14. Rangabhashiyam, S.; Anu, N.; Nandagopal, M. S. G.; Selvaraju, N.; *J. Environ. Chem. Eng.* 2014, *2*, 398.
15. Deka, B. C.; Bhattacharyya, P. K.; *Comput. Theor. Chem.* 2015, *1051*, 35.
16. Boulinguez, B.; Cloirec, P. L.; Wolbert, D.; *Langmuir* **2008**, *24*, 6420.
17. Foo, K.; Hameed, B.; *Chem. Eng. J.* **2010**, *156*, 2.
18. <https://sourceforge.net/projects/orwelldevcpp/>, acessada em março 2021.
19. www.netbeans.org, acessada em março 2021.
20. Leal, P. V. B.; Magriotis, Z. M.; Sales, P. F.; Papini, R. M.; Viana, P. R. M.; *J. Environ. Manage.* **2017**, *197*, 393.
21. Leal, P. V. B.; Magriotis, Z. M.; Sales, P. F.; Papini, R. M.; Viana, P. R. M.; *Matéria* **2019**, *24*.
22. Magriotis, Z. M.; Leal, P. V. B.; Sales, P. F.; Papini, R. M.; Viana, P. R. M.; *J. Hazard. Mater.* **2010**, *184*, 465.
23. Magriotis, Z. M.; Leal, P. V. B.; Sales, P. F.; Papini, R. M.; Viana, P. R. M.; Arroyo, P. A.; *Appl. Clay Sci.* **2014**, *91-92*, 55.
24. Atkins, P.; Paula, J.; *Físico-química*, 8ª ed.; LTC: Rio de Janeiro, 2012.
25. Castellan, G.; *Fundamentos de Físico-química*, LTC: Rio de Janeiro, 2011.
26. McQuarrie, D. A.; Simon, J. D.; *Physical Chemistry: A molecular approach*, University Science Books: Sausalito, 1997.