

pyMono: Biblioteca para estimação da parâmetros de isothermas monocomponentes

Pedro Henrique Teodoro de Mendonça

Universidade Tecnológica Federal do Paraná – PR

Antonio Augusto Ignacio

Universidade Tecnológica Federal do Paraná – PR

Giuvane Conti

Universidade Tecnológica Federal do Paraná – PR

Carlos Eduardo Borba

Evandro Alves Nakajima

Universidade Tecnológica Federal do Paraná – PR

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de uma biblioteca Python “pyMono” para a estimação de parâmetros de modelos de isothermas de adsorção. A adsorção, que começou a ser estudada no século XVIII, é crucial para diversas aplicações industriais e ambientais. Na construção hierárquica de um modelo matemático para representar o processo de adsorção, a primeira etapa é a definição de um modelo de isoterma de adsorção. Modelos teóricos como as isothermas de Langmuir, Sips, Toth, BET e GAB, são fundamentais para entender e prever o equilíbrio de adsorção nas interfaces gás-sólido e líquido-sólido. A biblioteca pyMono permite a criação e análise de isothermas experimentais de forma simples, rápida e gratuita, suportando diversos modelos teóricos. Ela foi estruturada para ser usada em qualquer ambiente Python 3.0, requerendo bibliotecas adicionais como numpy, scipy, matplotlib e csv. O software possibilita a criação de isothermas diretamente a partir de listas de pressão/concentração e quantidade adsorvida ou pela importação de arquivos .xlsx ou .csv. Além disso, oferece funções para estimação de parâmetros, cálculo de erros e comparação visual entre dados experimentais e simulados. Para validar a ferramenta, foram utilizados dados de adsorção de materiais de estudos recentes, abrangendo diferentes adsorventes e condições experimentais. A validação incluiu a análise de 40 isothermas de artigos publicados entre 2022 e 2023, utilizando diferentes modelos teóricos para determinar a precisão dos parâmetros estimados, para os quais o erro absoluto médio foi inferior a 10% foram obtidos por pelo menos um modelo. A pyMono mostrou-se eficaz na obtenção de parâmetros de adsorção, contribuindo para o avanço de estudos nessa área. O trabalho destaca a importância da adsorção em processos de purificação e separação na indústria, e a biblioteca desenvolvida representa uma ferramenta valiosa para pesquisadores que trabalham com adsorção.

Palavras-chave: pyMono, Adsorção, Isothermas, Estimação de parâmetros.