

Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química 2

Jéssica Verger Nardeli
(Organizadora)

Atena
Editora
Ano 2020

Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química 2

Jéssica Verger Nardeli
(Organizadora)

Atena
Editora
Ano 2020

2020 by Atena Editora

Copyright © Atena Editora

Copyright do Texto © 2020 Os autores

Copyright da Edição © 2020 Atena Editora

Editora Chefe: Profª Drª Antonella Carvalho de Oliveira

Diagramação: Karine de Lima

Edição de Arte: Lorena Prestes

Revisão: Os Autores



Todo o conteúdo deste livro está licenciado sob uma Licença de Atribuição *Creative Commons*. Atribuição 4.0 Internacional (CC BY 4.0).

O conteúdo dos artigos e seus dados em sua forma, correção e confiabilidade são de responsabilidade exclusiva dos autores. Permitido o download da obra e o compartilhamento desde que sejam atribuídos créditos aos autores, mas sem a possibilidade de alterá-la de nenhuma forma ou utilizá-la para fins comerciais.

Conselho Editorial

Ciências Humanas e Sociais Aplicadas

Profª Drª Adriana Demite Stephani – Universidade Federal do Tocantins
Prof. Dr. Álvaro Augusto de Borba Barreto – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Alexandre Jose Schumacher – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso
Profª Drª Angeli Rose do Nascimento – Universidade Federal do Estado do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Antonio Carlos Frasson – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Prof. Dr. Antonio Gasparetto Júnior – Instituto Federal do Sudeste de Minas Gerais
Prof. Dr. Antonio Isidro-Filho – Universidade de Brasília
Prof. Dr. Carlos Antonio de Souza Moraes – Universidade Federal Fluminense
Prof. Dr. Constantino Ribeiro de Oliveira Junior – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Cristina Gaio – Universidade de Lisboa
Profª Drª Denise Rocha – Universidade Federal do Ceará
Prof. Dr. Deyvison de Lima Oliveira – Universidade Federal de Rondônia
Prof. Dr. Edvaldo Antunes de Farias – Universidade Estácio de Sá
Prof. Dr. Eloi Martins Senhora – Universidade Federal de Roraima
Prof. Dr. Fabiano Tadeu Grazioli – Universidade Regional Integrada do Alto Uruguai e das Missões
Prof. Dr. Gilmei Fleck – Universidade Estadual do Oeste do Paraná
Profª Drª Ivone Goulart Lopes – Istituto Internazionale delle Figlie di Maria Ausiliatrice
Prof. Dr. Julio Candido de Meirelles Junior – Universidade Federal Fluminense
Profª Drª Keyla Christina Almeida Portela – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Mato Grosso
Profª Drª Lina Maria Gonçalves – Universidade Federal do Tocantins
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Pereira da Silva – Universidade Federal do Maranhão
Profª Drª Miranilde Oliveira Neves – Instituto de Educação, Ciência e Tecnologia do Pará
Profª Drª Paola Andressa Scortegagna – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Rita de Cássia da Silva Oliveira – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Sandra Regina Gardacho Pietrobon – Universidade Estadual do Centro-Oeste
Profª Drª Sheila Marta Carregosa Rocha – Universidade do Estado da Bahia
Prof. Dr. Rui Maia Diamantino – Universidade Salvador
Prof. Dr. Urandi João Rodrigues Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. William Cleber Domingues Silva – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Willian Douglas Guilherme – Universidade Federal do Tocantins

Ciências Agrárias e Multidisciplinar

Prof. Dr. Alexandre Igor Azevedo Pereira – Instituto Federal Goiano
Prof. Dr. Antonio Pasqualetto – Pontifícia Universidade Católica de Goiás
Profª Drª Daiane Garabeli Trojan – Universidade Norte do Paraná

Profª Drª Diocléa Almeida Seabra Silva – Universidade Federal Rural da Amazônia
Prof. Dr. Écio Souza Diniz – Universidade Federal de Viçosa
Prof. Dr. Fábio Steiner – Universidade Estadual de Mato Grosso do Sul
Prof. Dr. Fágner Cavalcante Patrocínio dos Santos – Universidade Federal do Ceará
Profª Drª Girlene Santos de Souza – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Prof. Dr. Júlio César Ribeiro – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Profª Drª Lina Raquel Santos Araújo – Universidade Estadual do Ceará
Prof. Dr. Pedro Manuel Villa – Universidade Federal de Viçosa
Profª Drª Raissa Rachel Salustriano da Silva Matos – Universidade Federal do Maranhão
Prof. Dr. Ronilson Freitas de Souza – Universidade do Estado do Pará
Profª Drª Talita de Santos Matos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
Prof. Dr. Tiago da Silva Teófilo – Universidade Federal Rural do Semi-Árido
Prof. Dr. Valdemar Antonio Paffaro Junior – Universidade Federal de Alfenas

Ciências Biológicas e da Saúde

Prof. Dr. André Ribeiro da Silva – Universidade de Brasília
Profª Drª Anelise Levay Murari – Universidade Federal de Pelotas
Prof. Dr. Benedito Rodrigues da Silva Neto – Universidade Federal de Goiás
Prof. Dr. Edson da Silva – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
Profª Drª Eleuza Rodrigues Machado – Faculdade Anhanguera de Brasília
Profª Drª Elane Schwinden Prudêncio – Universidade Federal de Santa Catarina
Prof. Dr. Ferlando Lima Santos – Universidade Federal do Recôncavo da Bahia
Prof. Dr. Fernando José Guedes da Silva Júnior – Universidade Federal do Piauí
Profª Drª Gabriela Vieira do Amaral – Universidade de Vassouras
Prof. Dr. Gianfábio Pimentel Franco – Universidade Federal de Santa Maria
Profª Drª Iara Lúcia Tescarollo – Universidade São Francisco
Prof. Dr. Igor Luiz Vieira de Lima Santos – Universidade Federal de Campina Grande
Prof. Dr. José Max Barbosa de Oliveira Junior – Universidade Federal do Oeste do Pará
Profª Drª Magnólia de Araújo Campos – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Mylena Andréa Oliveira Torres – Universidade Ceuma
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federaci do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Paulo Inada – Universidade Estadual de Maringá
Profª Drª Renata Mendes de Freitas – Universidade Federal de Juiz de Fora
Profª Drª Vanessa Lima Gonçalves – Universidade Estadual de Ponta Grossa
Profª Drª Vanessa Bordin Viera – Universidade Federal de Campina Grande

Ciências Exatas e da Terra e Engenharias

Prof. Dr. Adélio Alcino Sampaio Castro Machado – Universidade do Porto
Prof. Dr. Alexandre Leite dos Santos Silva – Universidade Federal do Piauí
Prof. Dr. Carlos Eduardo Sanches de Andrade – Universidade Federal de Goiás
Profª Drª Carmen Lúcia Voigt – Universidade Norte do Paraná
Prof. Dr. Eloi Rufato Junior – Universidade Tecnológica Federal do Paraná
Prof. Dr. Fabrício Menezes Ramos – Instituto Federal do Pará
Prof. Dr. Juliano Carlo Rufino de Freitas – Universidade Federal de Campina Grande
Profª Drª Luciana do Nascimento Mendes – Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Marcelo Marques – Universidade Estadual de Maringá
Profª Drª Neiva Maria de Almeida – Universidade Federal da Paraíba
Profª Drª Natiéli Piovesan – Instituto Federal do Rio Grande do Norte
Prof. Dr. Takeshy Tachizawa – Faculdade de Campo Limpo Paulista

Conselho Técnico Científico

Prof. Me. Abrãao Carvalho Nogueira – Universidade Federal do Espírito Santo
Prof. Me. Adalberto Zorzo – Centro Estadual de Educação Tecnológica Paula Souza
Prof. Dr. Adaylson Wagner Sousa de Vasconcelos – Ordem dos Advogados do Brasil/Seccional Paraíba
Prof. Me. André Flávio Gonçalves Silva – Universidade Federal do Maranhão

Profª Drª Andreza Lopes – Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento Acadêmico
 Profª Drª Andrezza Miguel da Silva – Universidade Estadual do Sudoeste da Bahia
 Prof. Dr. Antonio Hot Pereira de Faria – Polícia Militar de Minas Gerais
 Profª Ma. Bianca Camargo Martins – UniCesumar
 Profª Ma. Carolina Shimomura Nanya – Universidade Federal de São Carlos
 Prof. Me. Carlos Antônio dos Santos – Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro
 Prof. Ma. Cláudia de Araújo Marques – Faculdade de Música do Espírito Santo
 Prof. Me. Daniel da Silva Miranda – Universidade Federal do Pará
 Profª Ma. Dayane de Melo Barros – Universidade Federal de Pernambuco
 Prof. Me. Douglas Santos Mezacas -Universidade Estadual de Goiás
 Prof. Dr. Edwaldo Costa – Marinha do Brasil
 Prof. Me. Eliel Constantino da Silva – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita
 Profª Ma. Fabiana Coelho Couto Rocha Corrêa – Centro Universitário Estácio Juiz de Fora
 Prof. Me. Felipe da Costa Negrão – Universidade Federal do Amazonas
 Profª Drª Germana Ponce de Leon Ramírez – Centro Universitário Adventista de São Paulo
 Prof. Me. Gevair Campos – Instituto Mineiro de Agropecuária
 Prof. Me. Guilherme Renato Gomes – Universidade Norte do Paraná
 Profª Ma. Jaqueline Oliveira Rezende – Universidade Federal de Uberlândia
 Prof. Me. Javier Antonio Albornoz – University of Miami and Miami Dade College
 Profª Ma. Jéssica Verger Nardeli – Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho
 Prof. Me. José Luiz Leonardo de Araujo Pimenta – Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria Uruguay
 Prof. Me. José Messias Ribeiro Júnior – Instituto Federal de Educação Tecnológica de Pernambuco
 Profª Ma. Juliana Thaisa Rodrigues Pacheco – Universidade Estadual de Ponta Grossa
 Prof. Me. Leonardo Tullio – Universidade Estadual de Ponta Grossa
 Profª Ma. Lilian Coelho de Freitas – Instituto Federal do Pará
 Profª Ma. Liliani Aparecida Sereno Fontes de Medeiros – Consórcio CEDERJ
 Profª Drª Lívia do Carmo Silva – Universidade Federal de Goiás
 Prof. Me. Luis Henrique Almeida Castro – Universidade Federal da Grande Dourados
 Prof. Dr. Luan Vinicius Bernardelli – Universidade Estadual de Maringá
 Profª Ma. Marileila Marques Toledo – Universidade Federal dos Vales do Jequitinhonha e Mucuri
 Prof. Me. Rafael Henrique Silva – Hospital Universitário da Universidade Federal da Grande Dourados
 Profª Ma. Renata Luciane Polsaque Young Blood – UniSecal
 Profª Ma. Solange Aparecida de Souza Monteiro – Instituto Federal de São Paulo
 Prof. Me. Tallys Newton Fernandes de Matos – Faculdade Regional Jaguaribana
 Prof. Dr. Welleson Feitosa Gazel – Universidade Paulista

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(eDOC BRASIL, Belo Horizonte/MG)**

A946 Avanços das pesquisas e inovações na engenharia química 2
[recurso eletrônico] / Organizadora Jéssica Verger Nardeli. –
Ponta Grossa, PR: Atena, 2020.

Formato: PDF

Requisitos de sistema: Adobe Acrobat Reader.

Modo de acesso: World Wide Web.

Inclui bibliografia

ISBN 978-65-86002-51-5

DOI 10.22533/at.ed.515202403

1. Engenharia química – Pesquisa – Brasil. I. Nardeli, Jéssica
Verger.

CDD 660.76

Elaborado por Maurício Amormino Júnior – CRB6/2422

Atena Editora

Ponta Grossa – Paraná - Brasil

www.atenaeditora.com.br

contato@atenaeditora.com.br

APRESENTAÇÃO

A coleção “Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química volume 2” é uma obra que tem como foco principal a discussão e divulgação científica por meio de trabalhos com diferentes funcionalidades que compõe seus capítulos. O volume abordará em especial trabalhos que contribuem a nível educacional e aplicado tanto na área de engenharia química, química e tecnologias.

O objetivo central foi apresentar de forma categorizada e clara estudos correlacionados a energias renováveis, aproveitamento de resíduo agroindustrial, desenvolvimento de simulador de processos, simulação de custos de produção, e em especial estudos correlacionados a nível educacional por meio de jogos didáticos, quiz educativo com foco na aprendizagem de reações químicas e tabela periódica. Em todos esses trabalhos a linha condutora foi o aspecto relacionado à aproveitamento de resíduos, disseminação de conhecimento, otimização de procedimentos e metodologias, dentre outras abordagens importantes na área de exatas e engenharia. O avanço das pesquisas e divulgação dos resultados tem sido um fator importante para o desenvolvimento da ciência e estímulo de inovação.

Temas diversos e interessantes são, deste modo, discutidos aqui com a proposta de fundamentar o conhecimento de acadêmicos, mestres e todos aqueles que de alguma forma se interessam pela área de exatas e engenharia química aplicada e educacional. Possuir um material que demonstre evolução de diferentes metodologias, abordagens, otimização de processos, caracterização com técnicas substanciais, reutilização de resíduos de regiões específicas do país é muito relevante, assim como abordar temas atuais e de interesse tanto no meio acadêmico como social.

Deste modo a obra “Avanços das Pesquisas e Inovações na Engenharia Química volume 2” apresenta estudos fundamentados nos resultados práticos obtidos pelos diversos professores e acadêmicos que arduamente desenvolveram seus trabalhos que aqui serão apresentados de maneira concisa e didática. Sabemos o quão importante é a divulgação científica, por isso evidenciamos também a estrutura da Atena Editora capaz de oferecer uma plataforma consolidada e confiável para estes pesquisadores explorarem e divulgarem seus resultados.

Jéssica Verger Nardeli

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	1
EXTRAÇÃO SÓLIDO-LÍQUIDO DE ÓLEO DE BARU ASSISTIDA POR ENERGIA SOLAR	
Caroline Santos Silva Lucas Rodrigo Custódio Kássia Graciele dos Santos	
DOI 10.22533/at.ed.5152024031	
CAPÍTULO 2	12
APROVEITAMENTO DO RESÍDUO AGROINDUSTRIAL DO CAFÉ NA PRODUÇÃO DE BIOCHAR PARA IMOBILIZAÇÃO DE LIPASE <i>RHIZOPUS ORYZAE</i> E SÍNTESE DE PALMITATO DE CETILA	
Danyelle Andrade Mota Jefferson Cleriston Barros dos Santos Lays Carvalho de Almeida Álvaro Silva Lima Laiza Canielas Krause Cleide Mara Faria Soares	
DOI 10.22533/at.ed.5152024032	
CAPÍTULO 3	26
ANÁLISE DA PERDA AO FOGO DE CORPOS DE PROVA CERÂMICOS FORMULADOS COM CINZA LEVE PROVENIENTE DA GASEIFICAÇÃO DO CARVÃO MINERAL PULVERIZADO	
Gabryella Cerri Mendonça Cristiano Corrêa Ferreira Flávio André Pavan	
DOI 10.22533/at.ed.5152024033	
CAPÍTULO 4	34
ESTABILIDADE E COMPORTAMENTO REOLÓGICO DE POLPA DE CUPUAÇU (<i>Theobroma grandiniflorum</i>) EM DIFERENTES CONCENTRAÇÕES E TEMPERATURAS	
Simara Ferreira Borges Harvey Alexander Villa Vélez Romildo Martins Sampaio Valkerline Pinto Pires Audirene Amorim Santana	
DOI 10.22533/at.ed.5152024034	
CAPÍTULO 5	44
ESTIMATIVA DE VARIÁVEIS DE ESTADO EM MODELO DE HIDRÓLISE DE MATÉRIAS GRAXAS	
Camila Santana Dias Leandro Santos Monteiro Bruno Marques Viegas Diego Cardoso Estumano Nielson Fernando da Paixão Ribeiro	
DOI 10.22533/at.ed.5152024035	
CAPÍTULO 6	59
APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DE MODELOS DE BALANÇO POPULACIONAL PARA SISTEMAS PARTICULADOS	
Carlos Henrique Rodrigues de Moura Diego Cardoso Estumano João Nazareno Nonato Quaresma	

Emanuel Negrão Macêdo
Bruno Marques Viegas
Leandro Santos Monteiro
Diego Sousa Lopes

DOI 10.22533/at.ed.5152024036

CAPÍTULO 7 73

APLICAÇÃO DA TÉCNICA DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE
PARAMÉTRIOS EM MODELO DE BALANÇO POPULACIONAL DE CRISTALIZAÇÃO DE GIBBSITA
COM CINÉTICA CONSTANTE

Carlos Henrique Rodrigues de Moura
Diego Cardoso Estumano
João Nazareno Nonato Quaresma
Emanuel Negrão Macêdo
Bruno Marques Viegas
Leandro Santos Monteiro
Diego Sousa Lopes

DOI 10.22533/at.ed.5152024037

CAPÍTULO 8 85

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE
PARÂMETROS EM MODELOS DE CURVAS DE RUPTURA

João Paulo de Souza Coutinho
Ianka Cristine Benicio Amador
Bruno Marques Viegas
Nielson Fernando da Paixão Ribeiro
Diego Cardoso Estumano

DOI 10.22533/at.ed.5152024038

CAPÍTULO 9 100

DESCRIÇÃO FÍSICA DE FIBRAS DE COCO (*COCO NUCIFERA L.*) SUBMETIDAS A TRATAMENTO
EM DIFERENTES CONDIÇÕES DE MACERAÇÃO

Nayara Maria Monteiro da Silva
Carla Arnaud de Azevedo
Alefhe Bernard Cordovil Mascarenhas
Raíssa Cristine Santos de Araújo
Gabriela Nascimento Vasconcelos
Rafael Maia de Oliveira
Elza Brandão Santana
Lênio José Guerreiro de Faria

DOI 10.22533/at.ed.5152024039

CAPÍTULO 10 116

DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR DE PROCESSOS USANDO LINGUAGEM VISUAL BASIC
FOR APPLICATIONS (VBA) PARA A OXIDAÇÃO DO TOLUENO

Herbert Senzano Lopes
Vanja Maria de Franca Bezerra
Matheus Henrique Antonio Aboukalam da Cruz
Osvaldo Chiavone-Filho
Carlson Pereira de Souza

DOI 10.22533/at.ed.51520240310

CAPÍTULO 11 123

O USO DA EXPERIMENTAÇÃO COMO FERRAMENTA FACILITADORA PARA O ENSINO DE REAÇÃO DE DUPLA TROCA

Luciane Neves Ribeiro
Charles Garcia da Cunha
Joseane Cunha da Conceição
Layze Maria da Silva e Silva
Lindsey Bianca Araújo Fialho
Suzianne Saldanha da Silva
Vitor dos Santos de Carvalho
Miracleide de Araújo Batista Carneiro
Kelly das Graças Fernandes Dantas
Patrícia Santana Barbosa Marinho

DOI 10.22533/at.ed.51520240311

CAPÍTULO 12 130

O LÚDICO ATRAVÉS DE JOGOS DIDÁTICOS COMO AUXÍLIO EM AULAS DE TABELA PERIÓDICA PARA ALUNOS DO 9º ANO

Manoel Leão Lopes Junior
Lourivaldo Silva Santos
Marivaldo José Costa Corrêa
Raílda Neyva Moreira Araújo
Haroldo da Silva Ripardo Filho
Luely Oliveira da Silva
Catarina Estumano Bandeira
Lucio Flavio Pires Santos
Jéssica de Souza Viana
Felipe Augusto da Silva Bezerra

DOI 10.22533/at.ed.51520240312

CAPÍTULO 13 140

SIMULAÇÃO EM SUPERPRO DESIGNER DOS CUSTOS DE PRODUÇÃO DO FUNGO *Metarhizium anisopliae* POR FERMENTAÇÃO EM ESTADO SOLIDO

Antonio Dheyson da Silva Oliveira
Rodrigo Silva Dutra
Sebastian Ospina Corral
Cristian Orlando Avila
Carlos Eduardo Orrego
Lina María Grajales

DOI 10.22533/at.ed.51520240313

CAPÍTULO 14 152

O PROCESSO DE FISCALIZAÇÃO DO CONSELHO REGIONAL DE QUÍMICA 6ª REGIÃO PA/AP

Denise de Mello Lima
Dionis Rogério Costa Peixoto
Cristiane Maria Leal Costa
Célio Augusto Gomes de Souza
Antonio Claudio Lima Moreira Bastos
Allysson Bruno Almeida Ramos

DOI 10.22533/at.ed.51520240314

CAPÍTULO 15 159

QUIZ EDUCATIVO: UMA PROPOSTA METODOLÓGICA PARA O ENSINO DE TABELA PERIÓDICA

Layze Maria da Silva e Silva

Luciane Neves Ribeiro
Joseane Cunha Da Conceição
Vitor Dos Santos De Carvalho
Suzianne Saldanha Da Silva
Lindsey Bianca Araujo Fialho
Charles Gracia da Cunha
Miracleide De Araújo Batista Carneiro
Kelly Das Graças Fernandes Dantas
Patrícia Santana Barbosa Marinho

DOI 10.22533/at.ed.51520240315

CAPÍTULO 16 164

ATIVIDADE ALELOPÁTICA DA BIOMASSA DO FUNGO *ASPERGILLUS SP*, ISOLADO COMO ENDOFÍTICO DA ESPÉCIE *Paspalum maritimum* TRIN

Manoel Leão Lopes Junior
Lourivaldo Silva Santos
Marivaldo José Costa Corrêa
Raílida Neyva Moreira Araújo
Haroldo da Silva Ripardo Filho
Luely Oliveira da Silva
Lucio Flavio Pires Santos
Jéssica de Souza Viana
Felipe Augusto da Silva Bezerra

DOI 10.22533/at.ed.51520240316

CAPÍTULO 17 173

ATIVIDADE FITOTÓXICA DA BIOMASSA PRODUZIDA PELO FUNGO ENDOFÍTICO *Glomerella cingulata*

Manoel Leão Lopes Junior
Lourivaldo Silva Santos
Marivaldo José Costa Corrêa
Raílida Neyva Moreira Araújo
Haroldo da Silva Ripardo Filho
Luely Oliveira da Silva
Lucio Flavio Pires Santos
Jéssica de Souza Viana
Felipe Augusto da Silva Bezerra

DOI 10.22533/at.ed.51520240317

CAPÍTULO 18 181

CHEMICAL CONSTITUENTS AND LARVICIDAL ACTIVITY OF ESSENTIAL OIL FROM *Murraya koenigii* (L.) Spreng. (RUTACEAE) AGAINST *Aedes aegypti* (DIPTERA: CULICIDAE)

Camila Aline Romano
Matheus Gabriel de Oliveira
Matheus de Sousa Melo Morais
Andressa Tuane de Santana Paz
Liliane de Sousa Silva
Heloisa Helena Garcia da Silva
Ionizete Garcia da Silva
Adelair Helena dos Santos
José Realino de Paula

DOI 10.22533/at.ed.51520240318

CAPÍTULO 19 192

ESTIMATIVA DA CURVA DE RUPTURA DO PROCESSO DE ADSORÇÃO ATRAVÉS DO ALGORITMO

DE REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA

Ianka Cristine Benicio Amador
Bruno Marques Viegas
Diego Cardoso Estumano
Emanuel Negrão Macêdo
Nielson Fernando da Paixão Ribeiro

DOI 10.22533/at.ed.51520240319

CAPÍTULO 20 205

DETERMINAÇÃO DO PERFIL ÓTIMO DE TEMPERATURA PARA UM BIOPROCESSO EM BATELADA DE PRODUÇÃO DE PENICILINA REPRESENTADO POR UM MODELO MATEMÁTICO

Samuel Conceição de Oliveira
Angel Gustavo Tolaba

DOI 10.22533/at.ed.51520240320

CAPÍTULO 21 218

AVANÇOS RECENTES E PERSPECTIVAS FUTURAS NA MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO DE REMOÇÃO DE SULFATO DE ÁGUAS RESIDUÁRIAS INDUSTRIAIS EM BIORREATOR ANAERÓBIO DE LEITO FIXO OPERADO EM BATELADAS SEQUENCIAIS

Samuel Conceição de Oliveira
Arnaldo Sarti

DOI 10.22533/at.ed.51520240321

SOBRE A ORGANIZADORA..... 228

ÍNDICE REMISSIVO 229

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV PARA ESTIMATIVA DE PARÂMETROS EM MODELOS DE CURVAS DE RUPTURA

Data de submissão: 03/12/2019

Data de aceite: 16/03/2020

João Paulo de Souza Coutinho

Universidade Federal do Pará, ITEC, Faculdade de Engenharia Química
Belém - Pará

Ianka Cristine Benicio Amador

Universidade Federal do Pará, ITEC, Faculdade de Engenharia Química
Belém - Pará

Bruno Marques Viegas

Universidade Federal do Pará, ITEC, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia
Belém – Pará

Nielson Fernando da Paixão Ribeiro

Universidade Federal do Pará, ITEC, Faculdade de Engenharia Química
Belém – Pará

Diego Cardoso Estumano

Universidade Federal do Pará, ICB, Faculdade de Biotecnologia
Belém – Pará

RESUMO: Na indústria química há diversos processos que tem como principal fenômeno a separação de espécies químicas e um dos processos utilizados é a adsorção em uma coluna de leito fixo. Uma das variáveis importantes a ser analisada é caracterizada

pela curva de ruptura, que descreve a concentração de efluentes variando no tempo e a modelagem matemática desse processo proporciona dados necessários para previsões futuras. Neste cenário, a determinação das variáveis que influenciam a transferência de massa e a cinética de adsorção é uma das principais adversidades do processo. Este trabalho tem por objetivo aplicar uma análise Bayesiana para a estimativa de parâmetros e variáveis de estado dos modelos matemáticos de Thomas e Yoon-Nelson. E para a estimativa de parâmetros de tais modelos do processo de adsorção, foram utilizados os princípios do método de Monte Carlo via Cadeia de Markov, que necessita do cálculo da função de verossimilhança para realizar a avaliação da distribuição de probabilidade. Foram utilizadas medidas simuladas do processo de adsorção, que foram geradas a partir de um modelo matemático proveniente de um balanço de massa em uma coluna de leito fixo, com o intuito de evitar o crime inverso.

PALAVRAS-CHAVE: Adsorção, MCMC, Estimativa de Parâmetros.

ABSTRACT: In chemical industry there are several processes whose main phenomenon is the separation of chemical species, and one of this processes used is adsorption in a fixed bed column. One of the important variables to be analyzed is characterized by the breakthrough curve, which describes the effluent concentration varying on time, and the mathematical modeling in this process provides necessary informations to future predictions. In this scenario, determining the variables that influence mass transfer and adsorption kinetics is one of the main adversities in this process. This work aims to apply a Bayesian analysis for parameters and state variables estimation of Thomas and Yoon-Nelson mathematical models. And to estimate the parameters of such adsorption process models, were used Markov Chain Monte Carlo method principles, which requires likelihood function calculation to evaluate the probability distribution. Adsorption process simulated measurements were used, which were generated from a mathematical model derived from a mass balance in a fixed bed column, in order to avoid the inverse crime.

KEYWORDS: Adsorption, MCMC, Parameter Estimation.

1 | INTRODUÇÃO

A contaminação do ecossistema por metais pesados é um problema universal, eles se acumulam em tecidos vivos em toda a cadeia alimentar. Estes poluentes tóxicos podem causar envenenamento, câncer, danos cerebrais e psicológicos, quando entram na corrente sanguínea e se acumulam acima de níveis toleráveis no corpo humano e em outros seres vivos (Abia e Asuquo, 2008). O crescimento da indústria química desencadeou uma série de problemas ambientais, e nos últimos anos, aumentou a conscientização sobre os impactos ambientais que são causados por metais pesados, e dessa maneira, novas tecnologias estão sendo utilizadas no tratamento de efluentes industriais (Abia e Asuquo, 2008; Khitous *et al*, 2016).

A adsorção é uma operação unitária fundamentada nos princípios de transferências de massa, na qual uma solução de adsorbato é exposta a um sólido capaz capturá-lo seletivamente da solução. Contudo, alguns parâmetros influenciam nessa remoção, como as propriedades químicas e físicas do adsorbato e do adsorvente, temperatura do sistema e o pH da solução (Ruthven, 1984).

O desempenho do processo de adsorção em uma coluna de leito fixo pode ser descrito através da curva de ruptura, a qual é determinada ao avaliar a dinâmica da concentração na saída do leito. Com a finalidade de simular a curva de ruptura, há diversos modelos analíticos presentes na literatura, como exemplo os modelos desenvolvidos por Thomas, (1944), Yoon-Nelson, (1984), Clark, (1987), e Wolborska, (1989).

Em tais estimativas dos parâmetros utilizou-se medidas simuladas a partir de

um modelo descrito por uma equação diferencial parcial e na solução do problema inverso, utilizou-se os modelos analítico propostos por Thomas, (1944), Yoon-Nelson, (1984). Esta estratégia foi utilizada no intuito de evitar o crime inverso (Kaipio e Somersalo, 2004). Nos casos de estudo foram avaliados diferentes estimativas iniciais e probabilidade de distribuição a priori dos parâmetros.

2 | ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

O coeficiente de sensibilidade J_{ij} , definido na equação (1), é uma medida da sensibilidade da curva de ruptura em relação às variações do parâmetro. Pequenos valores de magnitude de J_{ij} indicam que grandes variações no parâmetro causam pequenas mudanças na curva de ruptura. Nestes casos, as estimativas dos parâmetros podem ser difíceis, porque o mesmo perfil da curva de ruptura pode ser obtido para uma grande faixa de valores de parâmetros. Além da magnitude grande para o coeficiente de sensibilidade, é necessário analisar quais parâmetros são linearmente dependentes, pois não é possível estimar simultaneamente parâmetros com dependência linear de seus coeficientes de sensibilidade reduzidos, X_{ij} (Beck et al., 1985).

$$J_{ij} = \frac{\partial C_{m,i}}{\partial P_j} \quad (1)$$

$$X_{ij} = J_{ij} \times P_{ij} \quad (2)$$

Em que P_j são os parâmetros dos modelos e $C_{m,i}$ é a variável de estado do modelo.

3 | MODELO DE FORÇA MOTRIZ LINEAR E GERAÇÃO DE MEDIDAS

Nesse trabalho, o modelo matemático de Força Motriz Linear (LDF) proposto por Glueckauf e Coates, (1947) foi utilizado para gerar medidas simuladas. Tais medidas são geradas adicionando incertezas gaussianas com média zero e desvio-padrão de 0,01.

O processo de adsorção em uma coluna de leito fixo é modelado considerando as seguintes hipóteses:

1. As partículas de adsorvente são esféricas e macroporosas.
2. O processo é considerado isotérmico e isobárico.
3. Não ocorrem mudanças nas propriedades do fluido e nem na coluna.
4. Não existe variação de vazão volumétrica e nem de velocidade do líquido.

5. Fluxo unidirecional em z.

A partir de um balanço de massa da espécie química “i” no interior do leito em um elemento diferencial dz , o perfil de concentração do leito pode ser dado pela seguinte equação (Borba et al, 2011; Khitous *et al*, 2016):

$$-D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + v_s \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_L}{\epsilon_L} \frac{\partial q_e}{\partial t} = 0 \quad (3)$$

Na qual a o primeiro e o segundo termo representam, respectivamente, a transferência de massa na coluna de leito fixo devido aos efeitos dispersivo e convectivos. O terceiro e o quarto termo representam, respectivamente, as taxas de acúmulo da espécie química “i” nas fases líquida e sólida.

O balanço na fase sólida é dado pelo modelo da Equação (4). Assim, a transferência de massa no interior do adsorvente é dada pela seguinte equação:

$$\frac{\partial q_e}{\partial t} = -K_s (q_e - q_e^*) \quad (4)$$

Substituindo a Equação (4) na Equação (3), resulta em:

$$D_{ax} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + v_s \frac{\partial C}{\partial z} + \frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\rho_L}{\epsilon_L} K_s (q_e - q_e^*) = 0 \quad (5)$$

As condições iniciais do modelo matemático são:

$$\text{CI1: } t = 0, \quad 0 \leq z \leq L, \quad C = 0, \quad q_e = 0$$

As condições de contorno foram propostas por Danckwerts, (1953).

$$\text{CC1: } t > 0, \quad z = 0, \quad D_{ax} \frac{\partial C}{\partial z} = v_s (C(0,t) - C_0)$$

$$\text{CC2: } t > 0, \quad z = L, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0$$

Em que K_s é o coeficiente geral de transferência de massa no adsorvente, C é a concentração da espécie química “i” no elemento diferencial, a velocidade intersticial do fluido é v_s , ϵ_L é a porosidade do leito adsorvente, ρ_L é a densidade do leito, D_{ax} é o coeficiente de dispersão axial do leito, q_e é a concentração da espécie química “i” na fase sólida, q_e^* é a concentração da espécie química “i” na fase sólida no estado de equilíbrio, L é o comprimento do leito e C_0 é a concentração de alimentação na entrada da coluna de leito fixo.

No modelo LDF foi utilizado o Método das Linhas para solucioná-lo, seguindo método apresentado por Schiesser e Griffiths, 2009.

4 | MODELO DE THOMAS

O modelo analítico desenvolvido por Thomas considera que a taxa de adsorção é representada pela cinética de Langmuir. O modelo também leva em consideração um parâmetro muito importante para o processo de adsorção, que é a capacidade máxima de remoção de adsorbato pelo adsorvente (Thomas, 1944; El-Naas et al, 2017). O modelo de Thomas é representado pela Equação (6):

$$\frac{C_t}{C_0} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{K_{TH}q_e m}{Q} - K_{TH}C_0 t\right)} \quad (6)$$

Em que q_e é a capacidade de remoção da coluna, K_{TH} é o coeficiente cinético, m é a massa de adsorvente no leito e Q é a vazão volumétrica do sistema.

5 | MODELO DE YOON-NELSON

O modelo proposto por Yoon–Nelson, 1984, leva em consideração a afinidade do adsorvente em remover o adsorbato da solução, e foi inicialmente desenvolvido para adsorção de gases, porém também pode ser utilizado para representar dados experimentais e simulados de adsorção em leito fixo de efluentes líquidos, além de ser o modelo mais simples para descrever esse processo (Han et al, 2009; Aksu and Gonen, 2004). A Eq. (7) descreve o modelo desenvolvido por Yoon-Nelson.

$$\frac{C_t}{(C_0 - C_t)} = \exp(K_{YN}t - K_{YN}\tau) \quad (7)$$

Em que τ é o tempo equivalente à metade da curva de ruptura, levando em consideração que o momento em que a concentração efluente se torna constante $C_t/C_0=1$, o adsorvente já está saturado. E K_{YN} é taxa constante do modelo de Yoon-Nelson.

6 | MÉTODO DE MONTE CARLO VIA CADEIA DE MARKOV

A estatística Bayesiana consiste na utilização de todas as informações possíveis

de um determinado fenômeno com o propósito de reduzir a incerteza em problemas de inferência estatística. Ao passo que uma nova informação é gerada, ela é combinada com a informação anterior e essa interação é armazenada em uma base de dados estatísticos. O mecanismo utilizado para combinar a nova informação apontada pela medida com a informação anterior é representado pelo teorema de Bayes (Ozisik e Orlande, 2000). Na estatística Bayesiana, a solução de problemas inversos se dá na análise da densidade de probabilidade a posteriori (Kaipio e Somersalo, 2004). O teorema de Bayes é descrito na Equação (8).

$$\pi_{\text{posterior}}(\mathbf{P}) = \pi(\mathbf{P} | \mathbf{Y}) = \frac{\pi_{\text{prior}}(\mathbf{P})\pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})}{\pi(\mathbf{Y})} \quad (8)$$

Na qual $\pi_{\text{posterior}}(\mathbf{P})$ é a densidade posterior de probabilidade $\pi_{\text{prior}}(\mathbf{P})$, é a densidade de probabilidade a priori dos parâmetros, isto é, a informação codificada para os parâmetros disponível antes das medidas $\pi(\mathbf{Y} | \mathbf{P})$, é a função de verossimilhança e $\pi(\mathbf{Y})$ é a densidade marginal de probabilidade das medidas, que desempenha o papel de uma constante de normalização.

A função de verossimilhança expressa a densidade de probabilidade das medidas \mathbf{C} dados os parâmetros \mathbf{P} . Assumindo que os erros de medidas são gaussianos, com média zero e conhecida a matriz de covariância, a função de verossimilhança é dada pela Equação (9) (Beck e Arnold, 1977).

$$\pi(\mathbf{C} | \mathbf{P}) = (2\pi)^{-1/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\mathbf{C} - \mathbf{C}(\mathbf{P})]^T \mathbf{W}^{-1} [\mathbf{C} - \mathbf{C}(\mathbf{P})] \right\} \quad (9)$$

Na qual, \mathbf{W} é matriz de covariância, $\mathbf{C}(\mathbf{P})$ é o modelo C_t / C_o em função dos parâmetros, e \mathbf{C} são os dados simulados de C_t / C_o em função do tempo.

O MCMC é uma técnica numérica que pode ser utilizada para estimar a constante de normalização, e uma das formas de aplicar o MCMC é com a utilização do algoritmo de Metropolis-Hastings (Metropolis *et al*, 1953; Hastings, 1970).

1. Inicializa-se o contador de iterações da cadeia $i=0$ e arbitra-se um valor inicial $\mathbf{P}^{(0)}$.
2. Gera-se um candidato \mathbf{P}^* da distribuição $p(\mathbf{P}^* | \mathbf{P}^{i-1})$, sendo que $\mathbf{P}^* = \mathbf{P}^{i-1}(1 + \mathbf{w}\xi)$. Em que \mathbf{w} é o passo de procura e ξ é uma variável aleatória proveniente de $N(0,1)$.
3. Calcula-se a probabilidade de aceitação $\alpha(\mathbf{P}^{i-1} | \mathbf{P}^*)$.
4. Gera-se um número randômico u , com distribuição uniforme.
5. Se $u \leq \alpha(\mathbf{P}^{i-1} | \mathbf{P}^*)$, aceita-se o parâmetro e faz-se $\mathbf{P}^{i+1} = \mathbf{P}^*$, caso contrário faz-se $\mathbf{P}^{i+1} = \mathbf{P}^i$.

6. Incrementa-se o contador de i para $i+1$ e volta-se ao passo 2.

Os parâmetros dos modelos matemáticos propostos por Thomas e Yoon-Nelson foram estimados pelo MCMC.

7 | RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a solução dos modelos de Força Motriz Linear, Thomas e Yoon-Nelson, é necessário determinar valores para as constantes presentes nesses modelos. A Tabela 1 apresenta os valores das constantes adotadas para a solução de destes modelos.

Constante	Unidade	Priori utilizada
K_s	$cm^3.mg^{-1}.s^{-1}$	5000
v_s	$cm.s^{-1}$	2
ϵ_L	----	0,4
ρ_L	$g.cm^{-3}$	1,2
D_{ax}	$cm^2.s^{-1}$	9×10^{-5}
L	cm	1,2
C_0	$mg.L^{-1}$	30
Q	$mL.min^{-1}$	5,5417
m	g	1
K_{TH}^{ref}	$mL.min^{-1}.mg^{-1}$	18
q_e^{ref}	$mg.g^{-1}$	3,9
K_{YN}^{ref}	min^{-1}	0,5
τ^{ref}	min	23

Tabela 1: constantes utilizadas na solução dos modelos LDF, Thomas e Yoon-Nelson.

Os valores das constantes foram utilizados para a solução do modelo LDF pelo Método das Linhas, para a geração de medidas simuladas e análise do coeficiente

de sensibilidade reduzido. E para explorar melhor o método MCMC, é interessante realizar estudos de casos que permitam avaliar a eficiência da técnica e asseverar se o algoritmo está enviesado.

Na estimativa do parâmetro q_e do modelo de Thomas e τ do modelo de Yoon-Nelson, foi adotada uma distribuição de probabilidade a priori gaussiana para os parâmetros. A seguir apresenta-se na Tabela 2 os estudos de caso realizados nesse trabalho.

Caso	Estimativa inicial	Média do parâmetro	Desvio padrão
1	0,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,2 P^{ref}
2	1,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,2 P^{ref}
3	2,0 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,2 P^{ref}
4	1,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,1 P^{ref}
5	1,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,2 P^{ref}
6	1,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,4 P^{ref}
7	1,5 P^{ref}	0,5 P^{ref}	0,2 P^{ref}
8	1,5 P^{ref}	1,0 P^{ref}	0,2 P^{ref}
9	1,5 P^{ref}	1,5 P^{ref}	0,2 P^{ref}

Tabela 2: Casos de estudo.

Sendo que o P^{ref} representa o q_e^{ref} para o modelo de Thomas e τ^{ref} para o modelo de Yoon-Nelson.

7.1 Análise de Sensibilidade

No presente trabalho os coeficientes de sensibilidade reduzido foram calculados utilizando a Equação 2 para os parâmetros do modelo de Thomas e Yoon-Nelson.

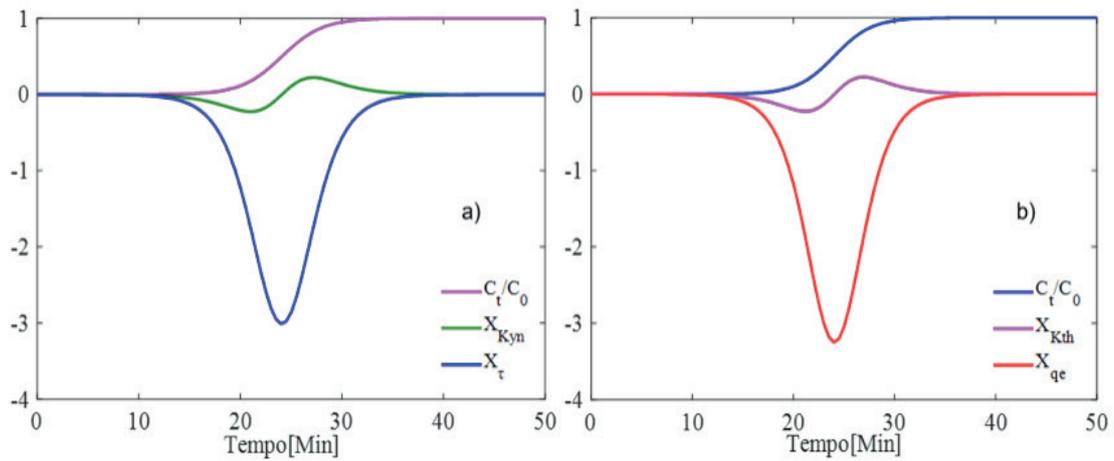


Figura 1: Análise do coeficiente de sensibilidade reduzido. a) Modelo de Yoon-Nelson, b) Modelo de Thomas.

Na Figura 1 é possível avaliar que a magnitude dos parâmetros K_{TH} e K_{YN} foi muito baixa, de modo que os parâmetros não apresentaram influência significativa para a solução do modelo direto. Também é possível notar que não há dependência linear entre os parâmetros, logo ainda é possível estimar o parâmetro K_{TH} do modelo de Thomas e o K_{YN} do modelo de Yoon-Nelson.

Os parâmetros τ e q_e apresentaram elevada magnitude e não mostraram dependência linear, sendo assim possível sua estimativa. Os parâmetros τ e q_e foram utilizados nas estimativas, desse modo é possível evitar a multiplicidade de soluções e assim satisfazer o critério de unicidade das estimativas a seguir.

7.2 Análise da Média da Priori

No estudo dos casos 7, 8 e 9 é avaliado o efeito que a média da distribuição a priori dos parâmetros τ e q_e . O objetivo do estudo é avaliar se as Cadeias de Markov convergem para valores aproximados alterando a distribuição a priori dos parâmetros. A seguir, são apresentadas na Figura 2 as Cadeias de Markov para estes casos de estudo.

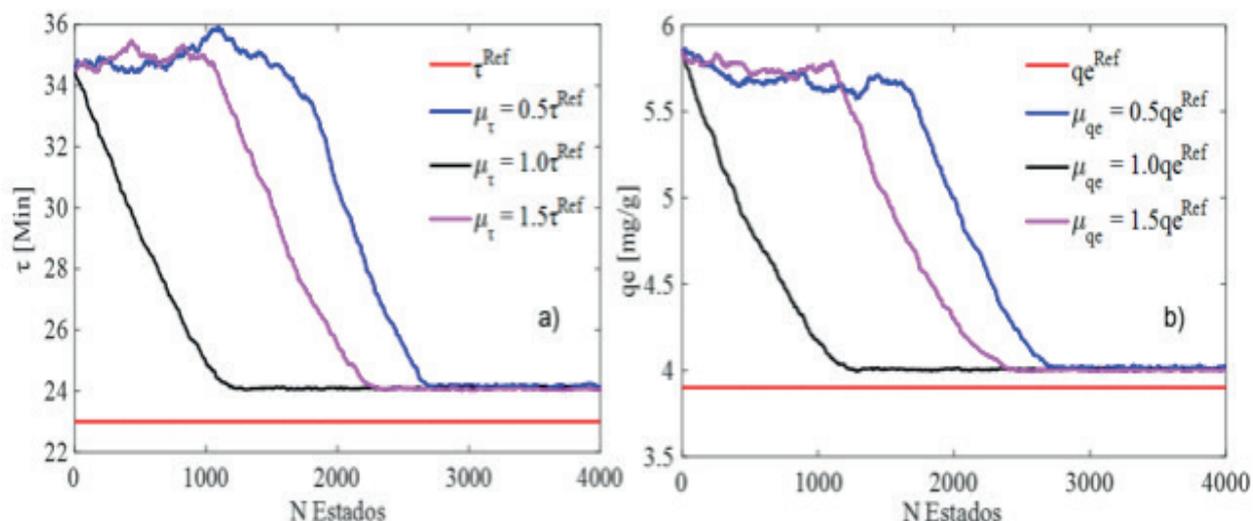


Figura 2: Efeito da média da priori nas Cadeias de Markov. a) Modelo de Yoon-Nelson, b) Modelo de Thomas.

Ao analisar os resultados apresentados na Figura 2, observa-se que apesar de usar diferentes médias para a distribuição de probabilidade a priori dos parâmetros, a distribuição de probabilidade a posteriori tem médias bem próximas. Desta maneira, assegura-se que apesar de informações a priori diferentes, a informação atualizada com o teorema de Bayes leva para a mesma distribuição de probabilidade e isso ocorre devido a informação dos dados simulados, o qual é inserido a incerteza na função de verossimilhança.

Caso	μ (Média)	q_e^{ref} (mg/g)	q_e^{est} (mg/g)	τ^{ref} (min)	τ^{est} (min)
7	0,5	3,9	4,0166 (4,0053; 4,0305)	23	24,1698 (24,0999; 24,2431)
8	1,0	3,9	4,0052 (3,9966; 4,0140)	23	24,0902 (24,0446; 24,1481)
9	1,5	3,9	4,0013 (3,9942; 4,0065)	23	24,0652 (24,0208; 24,1162)

Tabela 3: Análise da média da priori.

Em todos os casos, os resultados apresentados na Tabela 3 mostram que os parâmetros convergiram para um valor médio de $q_e = 4,007$ [mg/g] e $\tau = 24,1084$ [min]. Ao comparar com o valor de referência, verifica-se que os desvios das estimativas foram baixos e ao analisar o intervalo de credibilidade de 99% observa-se que houve um baixo nível de incerteza nas estimativas, com isso, conclui-se que a estimativa teve exatidão, uma vez que houve acurácia e precisão.

7.3 Análise da Estimativa Inicial da Priori

Análogo ao estudo dos casos anteriores, foram realizadas estimativas do parâmetro, contudo dessa vez a estimativa inicial que foi avaliada.

Caso	Estimativa Inicial	q_e^{ref} (mg/g)	q_e^{est} (mg/g)	τ^{ref} (min)	τ^{est} (min)
1	0,5	3,9	4,0050 (3,9981; 4,0162)	23	24,0958 (24,0522; 24,1627)
2	1,5	3,9	4,0047 (3,9922; 4,0178)	23	24,0955 (24,0463; 24,1446)
3	2	3,9	4,0047 (3,9976; 4,0142)	23	24,0898 (24,0386; 24,1363)

Tabela 4: Análise da estimativa inicial da priori.

Os resultados apresentados na Tabela 4 mostram que mesmo com diferentes estimativas iniciais, a distribuição a posteriori convergiu para valores próximos, com um valor médio de $q_e = 4,0048$ [mg/g] e $\tau = 24,0937$ [min].

Na Figura 4 é apresentado o parâmetro de referência e a influência da estimativa inicial da priori nas Cadeias de Markov para a estimativa do parâmetro, como foi feito no estudo dos casos 1, 2 e 3.

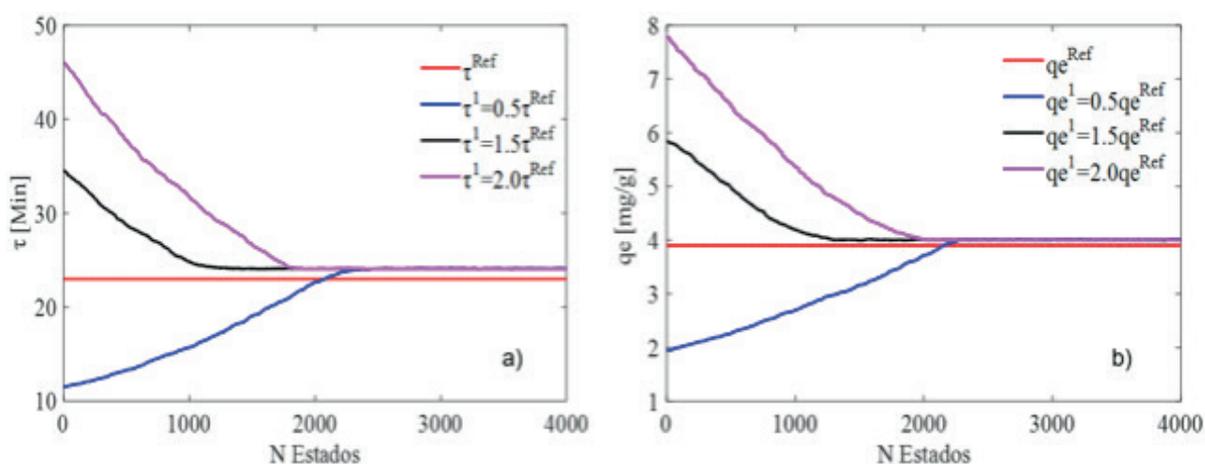


Figura 4: Efeito da estimativa inicial da priori nas Cadeias de Markov. a) Modelo de Yoon-Nelson, b) Modelo de Thomas.

A partir da observação dos resultados da Figura 4 e da Tabela 4, é possível concluir que o valor da estimativa inicial possui bastante influência sobre o período de aquecimento das Cadeias de Markov, indo de 1300 a 2300 estados de aquecimento da cadeia para o parâmetros q_e , e de 980 até 2200 estados de aquecimento para o parâmetro τ , não interferindo, contudo, na distribuição de equilíbrio a posteriori.

7.4 Análise do Desvio Padrão da Priori

Também foi realizado um estudo para avaliar o desvio padrão da priori adotada nas estimativas, como mostrado na Tabela 2.

Caso	σ (Desvio padrão)	q_e^{ref} (mg/g)	q_e^{est} (mg/g)	τ^{ref} (min)	τ^{est} (min)
4	0,1	3,9	4,0040 (3,9935; 4,0134)	23	24,0922 (24,0353; 24,1520)
5	0,2	3,9	4,0044 (3,9943; 4,0134)	23	24,0900 (24,0412; 24,1587)
6	0,4	3,9	4,0049 (3,9927; 4,0147)	23	24,0901 (24,0165; 24,1360)

Tabela 5: Análise do desvio padrão da priori.

Os resultados apresentados na Tabela 5 mostram que mesmo com diferentes valores de desvio padrão adotados, a distribuição a posteriori convergiu para valores próximos, com um valor médio de $q_e = 4,0044$ [mg/g] e $\tau = 24,0908$ [min].

Na Figura 5 é apresentado o parâmetro de referência e a influência do desvio padrão da priori nas Cadeias de Markov para a estimativa dos parâmetros.

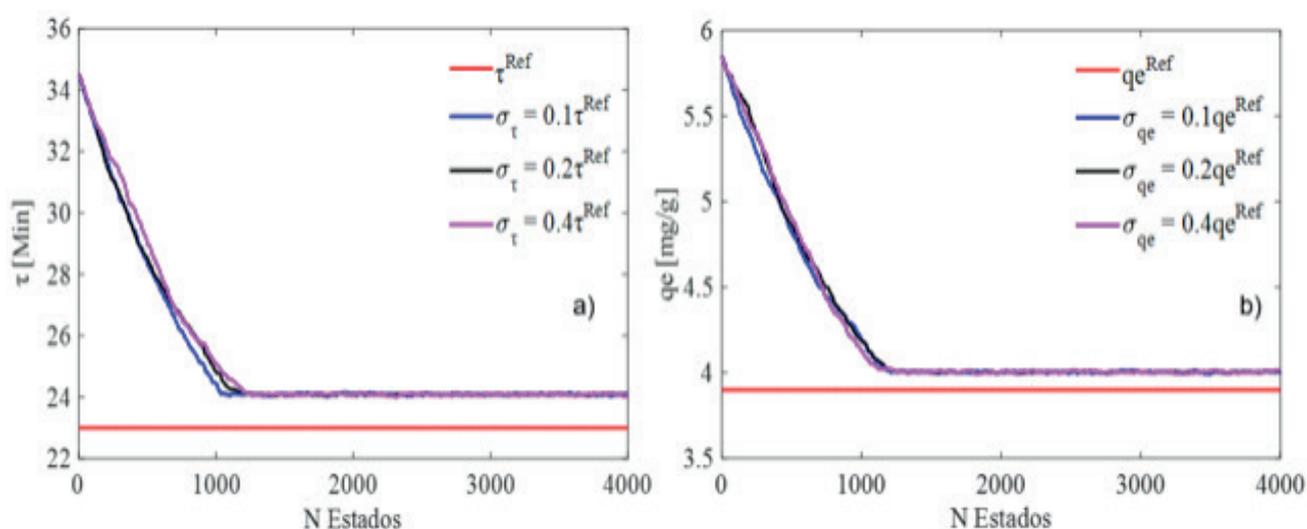


Figura 5: Efeito do desvio padrão da priori nas Cadeias de Markov. a) Modelo de Yoon-Nelson, b) Modelo de Thomas.

De acordo com observação dos resultados apresentado na Figura 5 e da Tabela 5, é possível inferir que o valor do desvio padrão não possui influência sobre o período de aquecimento das Cadeias de Markov, cerca de 1300 estados de aquecimento para q_e e τ . Também é possível notar que o desvio padrão não interferiu na distribuição de equilíbrio a posteriori.

Para o caso 5, a curva de ruptura com o valor estimado q_e^{est} do modelo de Thomas e τ^{est} do modelo de Yoon-Nelson são apresentadas na Figura 6, juntamente das medidas simuladas geradas a partir do modelo LDF com desvio de 1%.

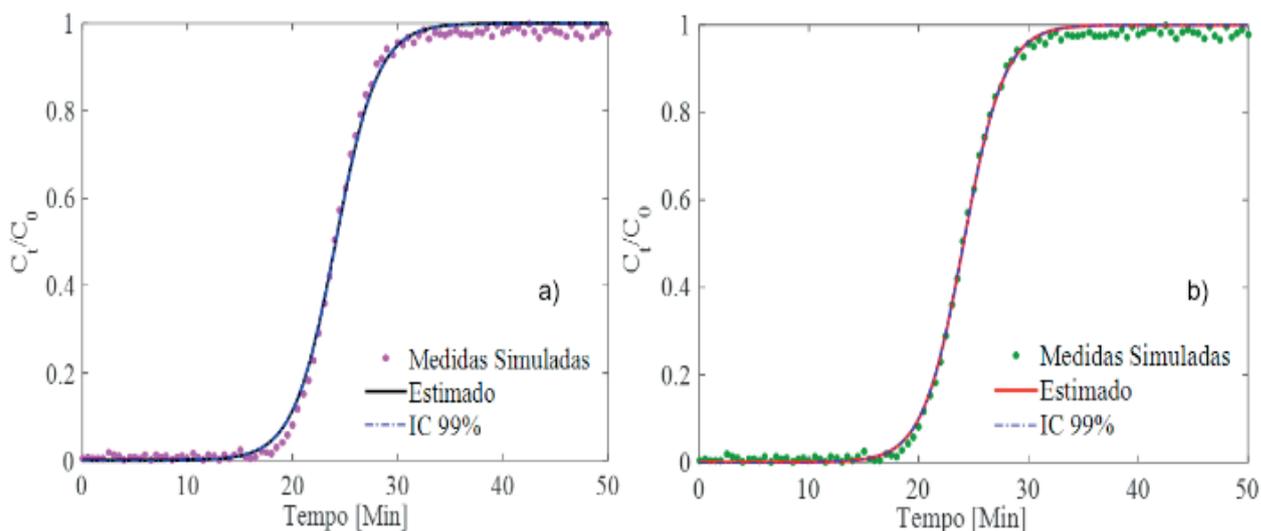


Figura 6: Curva de ruptura. a) Modelo de Yoon-Nelson, b) Modelo de Thomas.

Os resultados apresentados na curva de ruptura mostram que os modelos de Thomas e Yoon-Nelson são adequados para a representar dados simulados do modelo LDF. De acordo com a Figura 6 da curva de ruptura e condições apresentadas na Tabela 1, a quantidade máxima que poderia ser adsorvida nos poros do adsorvente é de aproximadamente $q_e = 3,9$ [mg/g]. sendo assim, para todos os casos, os valores de q_e^{est} condizem com o fenômeno físico de adsorção em leito fixo. Também é possível notar que o tempo final foi de aproximadamente 50 min, e o valor médio estimado para o parâmetro τ foi de aproximadamente $\tau = 24,1$ [min]. Desse modo, para todos os casos estudados, os valores de τ^{est} condizem com o fenômeno de um processo de adsorção em leito fixo nessas condições.

8 | CONCLUSÃO

O método de Monte Carlo via Cadeia de Markov foi explorado no presente trabalho para estimar parâmetros de modelos matemáticos que se ajustam à dados simulados de adsorção de uma espécie química “i” em uma coluna de leito fixo.

Com base no que foi apresentado, os resultados estimados dos parâmetros do modelos de Thomas e Yoon-Nelson pelo MCMC foram satisfatórios e congruentes.

9 | AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer ao CNPq, ao NACEMP - Núcleo Amazônico de Catálise e Modelagem de Processos e a CAPES pelo projeto Procad Amazônia 2018 número de processo 88881.200618/2018-01.

REFERÊNCIAS

- ABIA, A. A., ASUQUO, E. D. **Sorption of Pb(II) and Cd(II) Ions onto Chemically Unmodified and Modified Oil Palm Fruit Fibre Adsorbent: Analysis of Pseudo Second Order Kinetic Models**, Indian Journal of Chemical Technology, Vol. 15, p. 341-348, 2008.
- AKSU, Z., GONEN, F. **Biosorption of phenol by immobilized activated sludge in a continuous packed bed: prediction of breakthrough curves**, Process Biochem., p. 1-16, 2003.
- BECK, J. V., ARNOLD, K. J. **Parameter Estimation in Engineering and Science**. Wiley-Interscience, New York, 1977.
- BORBA, C. E., SILVA, E. A., SPOHR, S., SANTOS, G. H. F., GUIRARDELLO, R. **Application of the Mass Action Law to Describe Ion Exchange Equilibrium in a Fixed-Bed Column**, Chemical Engineering Journal, Vol. 172 p. 312– 320, 2011.
- CLARK, R. M. **Evaluating The Cost and Performance of Field-Scale Granular Activated Carbon Systems**, Environ. Sci, Technol., Vol. 21, p. 573–580, 1987.
- DANCKWERTS, P. V. **Continuous Flow Systems: Distribution of Residence Times**, Chemical Engineering Science, Vol. 2, p. 1-13, 1953.
- EL-NAAS, M. H., ALHAIJA, M. A., AL-ZUHAIR, S. **Evaluation of an Activated Carbon Packed Bed For the Adsorption of Phenols From Petroleum Refinery Wastewater**, Environmental Science and Pollution Research, Vol. 24 p. 7511–7520, 2017.
- GLUECKAUF, E., COATES, J. J. **Theory of Chromatography Part Iv: The Influence of Incomplete Equilibrium on the Front Boundary of Chromatograms and on the Effectiveness of Separation**, Journal of the Chemical Society, p. 1315-1321, 1947.
- HAN, R., WANG, Y., ZHAO, X., WANG, Y., XIE, F., CHENG, J., TANG, M. **Adsorption of Methylene Blue by Phoenix Tree Leaf Powder in a Fixed-Bed Column: Experiments and Prediction of Breakthrough Curves**, Desalination, Vol. 245, p. 284–297, 2009.
- HASTINGS, W.K. **Monte Carlo Sampling Methods Using Markov Chains and Their Applications**, Biometrika, Vol. 57 p. 97-109, 1970.
- KAIPPIO, J. P., SOMERSALO, E. **Computational and Statistical Methods for Inverse Problems**, Springer, Berlin, 2004.
- KHITOUS, M., SALEM, Z., HALLICHE, D. **Sorption of Cr (VI) by MgAl-NO₃ Hydrotalcite In Fixed-Bed Column: Experiments and Prediction of Breakthrough Curves**, Korean J. Chem. Eng., Vol. 33, p. 638-648, 2016.
- METROPOLIS, N., ROSENBLUTH, A. W., ROSENBLUTH, M. N., TELLER, A. H., TELLER, E. **Equation of State Calculations by Fast Computing Machines**, Journal of Chemical Physics. Vol. 21, p. 1087–1091, 1953.
- ÖZISIK, M. N., ORLANDE, H. R. B. **Inverse Heat Transfer**, Taylor & Francis, New York, 2000.
- RUTHVEN, D. M. **Principles of Adsorption And Adsorption Processes**. John Wiley & Sons, Ltd, New York, 1984.
- SCHIESSER, W. E., GRIFFITHS, G. W. **A Compendium of Partial Differential Equation Models: Method of Lines Analysis With Matlab**, Cambridge University Press, New York, 2009.
- THOMAS, H. C. **Heterogeneous Ion Exchange In A Flowing System**, J. Am. Chem. Soc., Vol. 66, p.

1664–1466, 1944.

WOLBORSKA, A. **Adsorption on Activated Carbon of P-Nitrophenol from Aqueous Solution**, Water Res., Vol. 23 p. 85–91, 1989.

YOON, Y. H., NELSON, J. H. **Application of Gas Adsorption Kinetics. I. A Theoretical Model For Respirator Cartridge Service Time**, Am. Ind. Hyg. Assoc. J., Vol. 45, p.509–516, 1984.

ÍNDICE REMISSIVO

A

Aedes aegypti 181, 182, 189, 190, 191
Algoritmo 37, 49, 64, 65, 69, 76, 77, 78, 90, 92, 192, 197, 199, 201, 210
Análise do coeficiente de sensibilidade 66, 67, 78, 83, 91, 93
Atividade alelopática 164, 165, 166, 171
Atividade fitotóxica 173, 174

B

Balanço Populacional 59, 60, 61, 62, 63, 70, 73, 74, 75, 83, 84

C

Carvão mineral 26, 28, 32, 33, 220
Coeficiente de aglomeração 62, 63, 65, 66
Comportamento reológico 34, 36, 38, 40, 41, 42, 43
Concentrador solar 1, 3, 4, 5, 9, 11
Concentrador solar biangular 1, 3, 4, 11
Conselho Regional de Química 152, 153
Curva de ruptura 85, 86, 87, 89, 96, 97, 192, 194, 201, 202
Custos de produção 140, 141, 142, 143, 144, 145, 148, 150

E

Energia solar 1, 3, 5, 6, 10, 11
Energias renováveis 1, 2
Ensino 32, 123, 124, 125, 126, 127, 128, 129, 130, 131, 132, 133, 134, 136, 137, 138, 139, 159, 160, 161, 162, 164, 173
Extração sólido-líquido 1, 2, 3, 4

F

Fibras de coco 100, 102, 103, 105, 106, 107, 109, 112, 113, 114, 115
Fiscalização do CRQ 152, 153

G

Gaseificação do carvão 26, 32

H

Hidrólise de matérias graxas 44, 45, 46, 56

I

Imobilização de lipase 12, 21, 23

J

Jogos didáticos 130, 131, 133, 134, 138

L

Larvicidal activity 181, 183, 186, 187, 190

Lixiviação 1, 2, 3, 5, 6

Lixiviação assistida por energia solar 5, 6

M

Maceração 40, 100, 101, 102, 105, 106, 107, 108, 109, 110, 111, 112, 113, 114, 168

Modelo de balanço populacional 62, 63, 73, 83

Monte Carlo via Cadeia de Markov 59, 60, 64, 67, 70, 73, 74, 76, 79, 83, 85, 89, 97

O

Óleo de Baru 1, 6, 9, 10

Oxidação do tolueno 116, 121

P

Perda ao fogo 26, 27, 29, 30, 31, 32

Polpa de cupuaçu 34, 36, 37, 38, 40, 41, 42

Processo de adsorção 85, 86, 87, 89, 97, 192, 194

Q

Quiz educativo 159, 160, 161, 162

R

Reação de dupla troca 123, 125

Reamostragem por importância 192

Resíduo agroindustrial 12, 14

Resíduo agroindustrial do café 12

S

Simulador de processos 116, 117

Sistemas particulados 10, 59, 60, 65, 70, 151

Superpro Designer 140, 141, 143, 144, 148, 150

Sustentabilidade 1, 114

T

Tabela Periódica 130, 131, 133, 134, 136, 137, 138, 139, 159, 160, 161, 163

Taxa de crescimento por coagulação 66

U

Unidade experimental de extração sólido-líquido 4

V

Variáveis de estado 44, 45, 47, 51, 54, 55, 56, 57, 74, 75, 77, 78, 80, 81, 82, 83, 85, 192, 194, 196, 202, 203, 206, 210, 218, 224, 225, 227

 **Atena**
Editora

2 0 2 0