

# Pag-aangkop ng mga Modelong Adsorption Pang-isotermal ni Langmuir (1916) at Freundlich (1906) sa R gamit ang PUPAIM

CHESTER C. DEOCARIS

ccdeocaris@pup.edu.ph

Politeknikong Unibersidad ng Pilipinas, Maynila

CARL LUIS P. FLESTADO

clpflestad@iskolarngbayan.pup.edu.ph

Politeknikong Unibersidad ng Pilipinas, Maynila

MARK LESTER C. GALICIA

mlcgalicia@iskolarngbayan.pup.edu.ph

Politeknikong Unibersidad ng Pilipinas, Maynila

JAN BERNEL P. PADOLINA

jppadolina@up.edu.ph

Pamantasan ng Lungsod ng Marikina

DIONE GUZMAN

Dheoneguzman007@gmail.com

Concepcion Integrated School

## ABSTRAK

Ang “adsorption” o adsorpsiyon ay ang panandaliang pagdikit ng mga atom, molekyul, o ions (*adsorbate*) sa ibabaw ng isang bagay na tinatawag na *adsorbent* (bagay na dinikitan). Karaniwang ginagamit sa mga teknolohiyang naghihiwalay ng mga kemikal (halimbawa ang pag tatangal ng nakakalasang kemikal sa tubig at hangin). Ginagamit sa pag aaral ng nasabing penomena ang mga modelong matematikal na kung tawagin ay *adsorption isotherms*. Mula sa mga eksperimento ng adsorpsiyon sa laboratoryo, malimit bigyang-wangis ang mga naitalang mga datos sa dalawang modelo ng isotermal adsorsyon. Ito ang mga modelo nina Freundlich (1906) at Langmuir (1916). Sa papel na ito ay ipaliliwanag ang pag-aangkop ng mga datos ng adsorpsiyon sa mga modelong nabanggit gamit ang mga punsiyon ng PUPAIM. Ang PUPAIM ay isang *package* na ginawa para sa pang-estadististikang lengguwahe na “R” upang makapag angkop sa mga kilala at nailathalang mga modelo ng isotermal adsorpsiyon. Isa sa mga katangian ng PUPAIM ay ang pagkakaroon nito ng mga ekwasyon na “non-linear” na karagdagan sa mga nakagawiang ekwasyon na linear. Ang nasabing R package ay nailathala sa respositoryo ng Comprehensive R Archive Network (CRAN) <https://cran.r-project.org/> at malayang magagamit ninuman. Ang papel na ito ay nagsisilbi ring pangalawang kalakip na babasahin o *vignette* para sa PUPAIM.

**Mga Susing Salita:** *Adsorpsiyon, Modelong Isothermal Adsorpsiyon, Freundlich, Langmuir, PUPAIM*

## ABSTRACT

Adsorption is a momentary attachment of atoms, molecules, or ions (adsorbate) to the surface of an adsorbent. Adsorption is usually used as a technique for separating chemicals (e. g., The removal of toxic chemicals present in the water and air). This phenomenon was studied using mathematical models called adsorption isotherm models. From the laboratory experiments of adsorption, the data obtained were commonly fitted with two models of isothermal adsorption. These two are the models of Freundlich (1906) and Langmuir (1916). This paper aimed to explain the fitting of adsorption data to the models mentioned using the functions of PUPAIM. The PUPAIM is a package developed for statistical software R to fit the well-known and published isothermal adsorption models. One of the features of PUPAIM was having an additional non-Linear equation to the usual Linear equations. The said R package was published to the repository of Comprehensive R Archive Network (CRAN) <https://cran.r-project.org/> and could be used freely by anyone. This paper also serves as a secondary reading attachment or vignette for PUPAIM.

**Keywords:** *Adsorption, Isothermal Adsorption Model, Freundlich, Langmuir, PUPAIM*



## ANG ADSORPSIYON, MGA MODELONG ISOTERMAL AT ANG MGA APLIKASYON NITO

Ang adsorpsiyon ay isang penomena kung saan ang pagdikit ng isang sangkap (maaaring isang atom, molecule, or ion) na tinatawag na “adsorbate” sa ibabaw ng isa pang sangkap na kung tawagin ay “adsorbent” (bagay na dinidikitan ng isang atom, molekylul, o ion). Bukod sa uri ng “adsorbate” at “adsorbent,” maaaring makaapekto sa proseso ng adsorpsiyon ang temperatura, bilang, at lapad ng ibabaw o mukha ng adsorbate sa adsorbent.

Ang mga obserbasyon sa proseso ng adsorpsiyon ay ginagawa sa isang sistema kung saan ang temperatura ay pinananatiling hindi nagbabago (*isothermal*). May dalawang uri ng interaksyon ng “adsorbent” sa “adsorbate,” una, ang **adsorpsiyong pisikal** (*physisorption*) kung saan ma-oobserbahan ang pagdidikit ng dalawang bagay sa pamamagitan ng puwersang INTER-molekyular (*Intermolecular force*). Maihahalintulad ito sa atraksiyon na nangyayari sa isang bakal at “magnet” o batobalani. Ang ikalawang interaksyon ay ang **kemisorpsiyon (o kemikal na adsorpsiyon)** kung saan ang dalawang bagay ay naghihiraman

ng elektron (covalent bonding) at sa kanilang pagbabahaginan ay nagkakaroon ng pagdurugtong sa dalawang bagay na ito (Atkins at de Paula 2014). Ang pag-aaral ng adsorpsiyon ay malawakang ginagamit sa mga aplikasyong na may kaugnayan sa pagtatanggal ng mga nakalalasang kemikal sa ating kapaligiran (Chen 2015). Kasama na rito ang paglilinis ng kontaminadong tubig, pagrekober ng mga kemikal na maaari pang pakinabangan sa ibang bagay, at mga pamamaraang nangangailangan ng separasyon at purpikasyon (Jadhav at Srivastava 2019).

Ilan sa mga modelong adsorpsiyong isothermal na kalimitang ginagamit sa mga pag-aaral ay ang modelo nina Langmuir (1916) at Freundlich (1906). May dalawang mga uri ng datos na hinahalili sa mga ekwasyon ng mga modelong ginagamit sa adsorpsiyong isothermal. Ito ang konsentrasyon ng *adsorbate sa equilibrium* ( $C_e$ ) at ang kapasidad ng *adsorpsiyon sa equilibrium* ( $Q_e$ ). Ang  $C_e$  ay direktang sukat ng mga natirang adsorbate matapos nitong ihalo sa adsorbent at umabot na ito sa “equilibrium” o hangganan kung saan ito maaari pang magkaroon ng reaksiyon. Samantalang ang bilang ng  $Q_e$  ay nakukuha gamit ang unang (1) ekwasyon.

$$Q_e = \frac{(C_0 - C_e)v}{m} \quad [1]$$

Kung saan ang  $C_0$  ay ang panimulang sukat o bilang ng konsentrasyon ng adsorbate,  $C_e$  ang sukat o bilang ng konsentrasyon ng adsorbate sa equilibrium,  $V$ , ang bolyum ng adsorbent, at  $m$  ang bigat ng adsorbent na ginamit. Ang isang pares ng  $C_e$  at  $Q_e$  ay nagsisilbing isang punto ng datos o obserbasyon na bumubuo sa isang koleksiyon o dami ng mga datos na galing sa pag-eksperimento ng adsorpsiyon na ginagawa sa laboratoryo.

Sa modelo ni Freundlich (1906) ay ginagamit sa paglalarawan ng mga adsorpsiyon na hindi ideyal at mababaligtad o rebersibol. Ang modelong ito ay angkop sa patong-patong na pagdikit ng maraming *adsorbate* (bagay na didikit) sa iisang *adsorbent* (bagay na dinidikit) o ibabaw ng isang bagay) (Chen 2015). Ang modelo ni Freundlich (1906) ay ipanaliliwanag ng non-Linear (eq 2) at Linear (eq 3) na mga ekwasyong:

$$Q_e = K_F C_e^{\frac{1}{n}} \quad [2]$$

$$\log(Q_e) = \log(K_F) + \frac{1}{n} \log(C_e) \quad [3]$$

Kung saan ang parametrong  $K_F$  ay ang kapasidad ng adsorpsiyon sa ibabaw ng isang adsorbent. Kilala rin ito sa bilang *Freundlich constant*. Ang parametrong ito ay may yunit na (L/mg). Samantala, ang parametrong  $n$  ay ang nag-uugnay sa tindi ng adsorpsiyon. Ang parametrong  $n$  ay kilala rin bilang *correction factor* ng modelo at pagkakaiba-iba ng puwesto sa adsorbate (Ayawei *et al.* 2017).

Ayon sa papel ni Giles (2008), ang modelo ng isothermal na adsorpsiyon ni Freundlich (1906) ay kadalasang ginagamit sa pag-aaral ng iba't ibang kulay ng hibla na nakukuha sa mga halaman. Inaalam din nito kung papaano nananatili o dumidikit ang kulay sa hibla. Panghuli, ito ay ginagamit din upang malaman kung papaano dumidikit ang mga pangkulay o pintura sa mga sinulid at tela. Ang mga material na *adsorbent* gaya ng Fuller's Earth

(isang uri ng putik), uling, at mga kombinasyon nito ay mabisa sa pagtanggap ng mga pangkulay sa mantika at langis. Ang adsorpsiyon ng mga molekyul na nagbibigay kulay o "pigments" gamit ang *adsorbent* na nabanggit ay umaayon sa modelo nina Freundlich (1906) at Achife (1989). Kinakitaan din ng higit na pagsang-ayon sa modelong Freundlich ang adsorpsiyon ng Cadmium ions (Batool 2018) at phenols (Subramanyam 2014) sa aktibong uling (*activated carbon*) bilang adsorbent.

Ang modelo naman ni Langmuir (1916) ay naglalarawan sa isang hilera ng adsorbate na nakadikit sa ibabaw ng adsorbent (o monolayer), at nagbibigay-bilang sa adsorpsiyon ng pangkat ng natatanging lokalidadong lugar ng proseso ng adsorpsiyon at ginagamit upang ilarawan ang pisikal at kemikal na adsorpsiyon (Sahu at Singh 2019). Ang modelong ito ay nagsasaad na ang lahat ng lugar ng adsorpsiyon ay may pare-parehong enerhiya at walang ugnayan sa pagitan ng mga magkakatabing molekula.

Ang modelong isothermal na adsorpsiyon ni Langmuir (1916) ay may *non-Linear* (ekwasyon 4) at *Linear* (ekwasyon 5) na mga porma:

$$Q_e = \frac{Q_{max} \cdot C_e}{1 + bC_e} \quad [4]$$

$$\frac{C_e}{Q_e} = \frac{1}{Q_{max} \cdot b} + \frac{C_e}{Q_{max}} \quad [5]$$

$$\frac{C_e}{q_e} = \frac{1}{q_m K_L} + \frac{C_e}{q_m} \quad [6]$$

$$\frac{1}{q_e} = \left[ \frac{1}{q_m K_L} \right] \frac{1}{C_e} + \frac{1}{q_m} \quad [7]$$

$$q_e = q_m - \left[ \frac{1}{K_L} \right] \frac{q_e}{C_e} \quad [8]$$

$$\frac{q_e}{C_e} = K_L q_m - K_L q_e \quad [9]$$

Kung saan ang  $Q_{max}$  ang pinakamataas ng kapasidad ng adsorpsiyon na may yunit na mg/g at ang parametrong  $b$  ay ang tinatawag na Langmuir constant. Ang konstant na ito ay may yunit na L/mg.

Ipinapalagay ng modelo ni Langmuir (1916) ang pinakamataas na kapasidad ng adsorpsiyon na bumubuo ng isang hilera ng mga *adsorbate*. Pinatunayan din ng modelong ito ang kawalan ng interaksyon ng mga *adsorbate* (Langmuir 1916; Foo at Hamid 2010). Ang ekwasyon 6, 7, 8, at 9 ay mga karagdagang porma ng langmuir ekwasyon ayon kay Chen 2015.

Ilang mga halimbawa ng mga adsorbent na nagpapakita ng malakas na pagsang-ayon sa modelo ng adsorpsiyomg isothermal ni Langmuir (1916) ay ang mga sumusunod: Indion resin para sa Nitrates sa tubig (Milmile et al. 2011); magnesium oxide nanoparticles para sa mga tintang Levafix Fast Red CA at Indanthren Blue BC (Venkatesha et al. 2012); aserong-karbon para sa mga molekyl mula sa mga extract ng dahon ng *Osmathus fragans* (Li et al. 2012).

Kapwa ang mga modelo ni Freundlich at Langmuir ay madalas na ginagamit sa mga pag-aaral ng kapasidad ng adsorpsiyon ng mga *adsorbent* at sa proseso ng adsorpsiyon ng mga *adsorbate* gaya ng mga atom, molekyl, ion.

Sa paghahanap ng mga materyal na maaaring gamiting pansala at panlinis ng tubig at hangin, mahalagang salik ang mga parametro na makukuha sa pagkukuwenta gamit ang mga modelo ng isothermal na adsorpsiyon. Halimbawa, ang kinakikitaan ng malaking potensiyal na pang-alis ng mga tintang *tartrazine* na kadalasang ginagamit na pangkulay sa mga hibla ay ginagamitan ng balahibo ng manok bilang *adsorbent* (Mittal et al. 2007). Kagaya ng balahibo ng manok, marami pang materyal na galing sa mga hayop, halaman, at mikrobyo na kinakikitaan ng mga potensiyal na adsorbent. Ito ay tinatawag ding mga *biosorbent*. Ang dahon ng palmera at *water hyacinth* ay kilala bilang mga biosorbent na may kakayahang mag-alis ng mga nakalalasang metal o "heavy metal" sa mga tubig at hangin (Sadeek et al. 2015). Dahil sa lumalaking interes sa paghahanap at pag-aaral ng mga *adsorbent* para sa paglinis at pag-

sala ng tubig at hangin malaki ang maitutulong ng mabilisang pagkalkula ng mga salik ng adsorpsiyon. Kasama na rito ang pag-uugnay ng mga kilalang modelo ng isothermal na adsorpsiyon gaya ng kina Freundlich (1906) at Langmuir (1916).

## INTRODUKSIYON SA WIKANG ESTADISTIKA NA R

Ayon sa website ng R (<https://www.r-project.org/about.html>), ang R ay isang wika, instrumento, at komunidad para sa kompyutasyon at pagbuo ng mga grap estadistika o mga representasyon ng mga datos. Ang R ay nagbibigay ng iba't ibang uri ng mga analysis na pang estadistika gaya ng *Linear* at *non-Linear* na pag-uunay, mga klasikal na pagsusuring pang-estadistika, pagsusuri ng mga serye ng numero, at iba pang datos. Isa sa mga magandang katangian ng R ay madali at mabilis na paggawa ng mga talanguhit o mga paglalarawan na may kalidad para sa mga publikasyong pang-agham (Diyornal). Higit sa lahat ang R ay libreng magagamit na aplikasyon o mas kilala sa tawag na "open source" at sa ilalim ng mga tuntunin ng GNU kung saan mayroon itong pangkalahatang pampublikong lisensiya sa ilalim ng *Free Software Foundation*. Maaari ding magamit ang R sa iba't ibang mga kompyuter system gaya ng UNIX, Windows at MacOS. Napapalawak ang kakayahan ng R sa pamamagitan ng mga naiambag na mga *packages* na isinulat din ng iba't ibang propesyonal sa iba't ibang bahagi ng mundo. Sa kasalukuyan, mayroon nang 15,610 na mga package ang naitala sa Comprehensive R Archive Network (CRAN) <https://cran.r-project.org/web/packages/> kasama na rito ang PUPAIM para sa mga kalkulasyon ukol sa mga modelo ng adsorpsiyong isothermal.

## ANG MGA MODELONG FREUNDLICH AT LANGMUIR SA PUPAIM

Ang papel na ito ay naglalarawan kung papaano inaangkop ang mga datos mula sa mga eksperimentong adsorpsiyon sa mga modelo ni Freundlich (1906) at Langmuir (1916) gamit ang punsiyon ng PUPAIM v2.0. sa pamamagitan ng R (Saroyda et al. 2019). Ang PUPAIM ay isang koleksiyong ng 28 na mga modelo na isothermal adsorpsiyon na maaaring gamitin sa mga sumusunod: 1) pag-

estima o pagsukat ng mga parameters ng mga modelo isotermal na adsorpsiyon; 2) pagbilang ng mga sukat ng kamalian (error measures) at kaangkupan ng pinasok na datos sa napiling modelo; 3) paggawa ng grap o talangguhit para sa datos na kaugnay sa napiling modelo.

Sa naunang bersiyon ng PUPAIM (v1.0) na inilimbag noong 2019, ito ay naglalaman lamang ng mga modelong may ekwasyong Linear. Ayon sa demostrasyon nina Sahin at Tapadia (2015) sa adsorpsiyon ng mineral na limonite sa flouride na nakahalo sa tubig, higit na mainan sa gamitin ang mga ekwasyong non-Linear sa pag-estima ng mga parametro ng mga modelong adsorpsiyon isotermal. Kung kaya't noong 2022, nailabas ang bagong bersiyon ng PUPAIM (v2.0) na naglalaman ng karagdagang mga punsiyon ng mga modelo ng isotermal adsorpsiyon na batay sa non-Linear na ekwasyon. Sa kasalukuyan ang bersiyon ng PUPAIM (v3.0) ay may dagdag na mas maraming bilang ng mga modelong isothermal adsorpsiyon kaysa sa nakaraang bersiyon nito (v2.0). Karagdagan pa rito ay ang pagkakalimbag ng unang kalakip babasahin o *vignette* ng PUPAIM ukol sa modelo ng isotermal adsorpsiyon na dinisenyo ni Henry na may isang parametro (Deocaris at De Osio 2020). Ang PUPAIM v3.0 ay matatagpuan at makokopya mula sa website ng CRAN (<https://CRAN.R-project.org/package=PUPAIM>) kung saan ito ay nakareserba at libreng magagamit ng publiko.

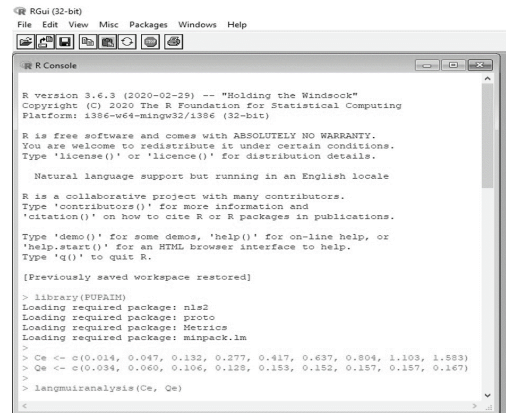
Ang *langmuiranalysis* at *freundlichanalysis* ay ang mga punsiyon na magagamit upang mang-angkop ng datos sa mga non-Linear na porma ng modelong Langmuir (1916) at *Freundlich* (1906). Samantalang ang mga punsiyong *langmuir.LMI*, and *freundlich.LM* ay magagamit sa pag-aangkop ng mga datos gamit ang pormang *Linear* ng mga modelo.

## PAG-AANGKOP NG MGA DATOS SA MGA MODELONG ISOTERMAL ADSORPSIYON NINA FREUNDLICH (1906) AT LANGMUIR (1916) GAMIT ANG MGA NON-LINEAR NA EKWASYON

I sa sa mga balakid sa pag-estimasyon ng mga parametro ng mga isothermal model ng adsorpsiyon gamit ang mga non-Linear ekwasyon ay ang pagtukoy sa gagamiting

panimulang sukat sa mga parametro. Ito ay nasolusyunan sa paggamit ng mga punsiyon ng “Non-Linear regression with brute-force (*nls2*),” R package na isinulat ni Grothendieck (2013) at sa paglalagay ng mga saklaw na sukat ng mga parametrong hinango sa mga kahalintulad na mga pag-aaral gamit ang mga modelong nabanggit.

Upang mapagana ang PUPAIM, ang komand na “*library(PUPAIM)*” ay isusulat sa R console upang matawag ang naka-install na PUPAIM sa R console. Ang pag-aangkop ng mga datos sa ninanis na modelo ay magagawa sa dalawang hakbang. Una, ang pagsusulat sa R console ng mga *object* na naglalaman ng mga datos ng Ce at Qe. Ikalawa, ang pagtawag sa punsiyon ng modelong gagamitin sa pagsusulat pangalan ng modelo kalakip ang mga Ce at Qe na objects. Matapos ilikha ang mga object para sa Ce at Qe, maaari nang tawagin ang punsiyon ng modelong gagamitin at nakapaloob sa parenthesis ang mga pangalan ng *object* para sa Ce at Qe. Halimbawa: *langmuiranlaysis(Ce, Qe)*. Makikita sa unang larawan (Larawan blg.1) kung papaano isinusulat ang mga komand para sa modelong Langmuir (1916) na may *non-Linear* na ekwasyon sa R console.



**Larawan blg. 1:** Ang mga komand na sinusulat sa pag-uugnay ng Ce at Qe na datos sa modelong Langmuir (1916).

Kaagad ding inilalabas ng R ang resulta ng pag-uugnay sa modelong napili. Ang mga resulta na ilalabas ng PUPAIM ay ang mga sumusunod:

1. Ang mga estimasyon ng mga parametro ng modelo. Sa halimbawang ginamit sa itaas, ang mga parametro ng Langmuir na

" $Q_{max}$ " ay may sukat na 0.172 +/- 0.003 at

```
R Console
>
> langmuiranalysis(Ce, Qe)
[1] "Langmuir Isotherm Analysis"
Formula: Qe ~ (Qmax * b * Ce)/(1 + (b * Ce))
Parameters:
  Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
Qmax 0.172775 0.003672 47.051 5.12e-10 ***
b    12.310513 1.344058 9.159 3.81e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.0055 on 7 degrees of freedom

Algorithm "port", convergence message: relative convergence (4)
```

**Larawan blg. 2:** Mga estima ng mga parametro mula sa non-Linear na ekwasyon ng modelong Langmuir (1916) para sa adsorpsiyong isothermal.

2. Ang mga maling sukat ng  $Q_e$  (predicted  $Q_e$ ) gamit ang mga parametrong nabanggit sa itaas at ang datos ng  $C_e$  ay ang mga sukat ng kamalian (Errors) na Relative Mean Square Error (RMSE), Mean Absolute Error (MAE), Relative Absolute Error (RAE) at Standard Error (SE). Ang mga sukat ng pag-uugnay ng mga modelo na Akaike Information Criterion (AIC) at Bayesian Information Criterion (BIC). Sa **Larawan blg 3**, ang mga sumusunod ay ang nakalkulang mga sukat ng kamalian ng ipinasok datos sa mga maling balyu ng  $Q_e$ : RMSE = 0.00485; MAE = 0.00386; MSE =  $2.35 \times 10^{-5}$ ; RAE = 0.101; SE = 0.558; AIC = -64.4; at BIC = -63.8. Dahil sa maliit na bilang ng mga kamalian, masasabing angkop ang modelong ginamit sa datos ng naobserbahang  $C_e$  at  $Q_e$ .

```
R Console
$ Predicted Values
[1] 0.02539978 0.06332632 0.10695594 0.13359747 0.14460625 0.15323471 0.5
[8] 0.16092408 0.16434228

$ Relative Mean Square Error
[1] 0.00485023

$ Mean Absolute Error
[1] 0.003863256

$ Mean Squared Error
[1] 2.352473e-05

$ Relative Absolute Error
[1] 0.1014668

SACC
[1] -64.37623

SBIC
[1] -63.78456

$ Standard Error Estimate
[1] 0.5578131
```

**Larawan blg. 3:** Mga sukat ng kamalian (error) ng modelong Langmuir (1916) sa datos ng  $C_e$  at  $Q_e$  na ginamit.

3. Ang relasyong *Linear* ng mga maling bilang ng  $Q_e$  gamit ang modelong Langmuir (1916)

at ang inobserbahang  $Q_e$ . Sa halimbawa sa **Larawan blg. 4**, may malakas at positibong relasyon ang maling bilang ng  $Q_e$  at ang inobserbahang  $Q_e$  at pinapakita ito ng adjusted R-squared na 98.7%. Ang halos perpektong (malapit sa 100%) R-squared na balyu ay nangangahulugan na ang angkop ang modelong ginamit sa datos ng naobserbahan sa  $C_e$  at  $Q_e$ .

```
R Console
Call:
lm(formula = Qe ~ predict(fit246))

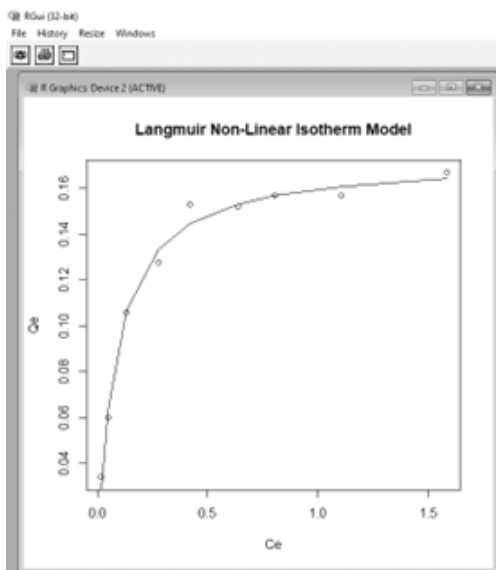
Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.005806 -0.003307 -0.000850  0.003378  0.008518

Coefficients:
(Intercept) 0.004284 0.004960 0.853 0.422
predict(fit246) 0.969778 0.037841 25.620 3.52e-08 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 0.005234 on 7 degrees of freedom
Multiple R-squared: 0.9895, Adjusted R-squared: 0.9879
F-statistic: 456.8 on 1 and 7 DF, p-value: 3.519e-08
```

**Larawan blg. 4:** Ang pag-uugnayan sa datos ng  $Q_e$  sa maling  $Q_e$  (predicted  $Q_e$ ) gamit ang modelong Langmuir (1916)

4. Ang grap na *scatterplot* na may linya or kurba ng ekwasyon ng modelong ginamit. Makikita sa **Larawan blg. 5** ang *non-Linear* na grap para sa modelong ng adsorpsiyong isothermal ni Langmuir (1916).



**Larawan blg. 5:** Ang grap ng pag-uugnay ng modelong Langmuir (1916) sa datos ng  $Q_e$  at  $C_e$ .

**PAG-UUGNAY NG MGA DATOS SA MGA MODELONG ISOTERMAL ADSORPSIYON NINA FREUNDLICH (1906) AT LANGMUIR (1916) GAMIT ANG MGA LINEAR NG EKWASYON**

Ang mga punsiyon *freundlich*. *LM* at *langmuir.LM1* ay magagamit upang makapag-ugnay ng mga datos sa mga modelong adsorpsiyon nina Freundlich (1906) at Langmuir (1916) na may ekwasyong may pormang *Linear*. Ang modelo ni Langmuir (1916) ay mayroong apat na ekwasyong *Linear* na mula sa deribatibo ng *non-Linear* na ekwasyon. Ang apat na *Linear* na ekwasyon ng Langmuir (1916) ay maaaring magbigay ng magkakaibang balyu ng pagkakamali (error) at mga parametro. Mula sa obserbasyon nina Sahil and Tapadia (2015) sa adsorbsiyon ng mineral na linomite sa adsorbate na Flouride, mas kinikilingan ng kanilang mga datos ang ekwasyong Langmuir Linear 1 at 2. Ang ekwasyong Langmuir Linear 1 (ekwasyon 5) ay ang pinakamadaldas ding gamitin na porma ng Langmuir Linear na ekwasyon. Sa PUPAIM, magagamit ang Langmuir *Linear* 1 sa pagtawag ng punsiyon na *langmuir.LM1*.

Sa pag-uugnay ng mga datos para sa mga modelo ng isotermal na adsorpsiyon, tinatawag ang punsiyon at ang mga *obejct* ng *Ce* at *Qe* gaya ng: > *freundlich*. *LM* (*Ce*, *Qe*). Hindi katulad ng sa *non-Linear*, inilalabas ng mga *Linear* na punsiyon ng PUPAIM ang mga estimasyon ng *slope* at *intercept* ng isang regresyong *Linear*.

At mula sa *slope* at *intercept*, kinakalkula ng PUPAIM ang mga parametro ng napiling modelo ng isotermal na adsorpsiyon. Ipinapakita sa Larawan blg. 6, ang mga parametro ng regresyong *Linear* para sa Freundlich (1906) kasama ang mga sukat ng kaangkuhan sa modelo (adjusted R-squared = 0.9174) at mga kinalkulang parametro ng modelong isotermal na adsorpsiyon ( $K_f = 0.172$  at  $n = 2.96$ ).

```

> Ce <- c(0.014, 0.047, 0.132, 0.277, 0.417, 0.437, 0.804, 1.103, 1.503)
> Qe <- c(0.034, 0.060, 0.104, 0.128, 0.153, 0.182, 0.197, 0.197, 0.147)
> freundlich.LM(Ce, Qe)
[1] "Freundlich Isotherm Analysis"

Call:
lm(formula = y ~ x)

Residuals:
    Min       1Q   Median       3Q      Max
-0.001404 -0.005142 -0.008725  0.009002  0.004034

Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) -0.743396   0.030305 -24.180 4.01e-08 ***
            0.330117   0.035467   9.301 3.05e-05 ***
---
Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

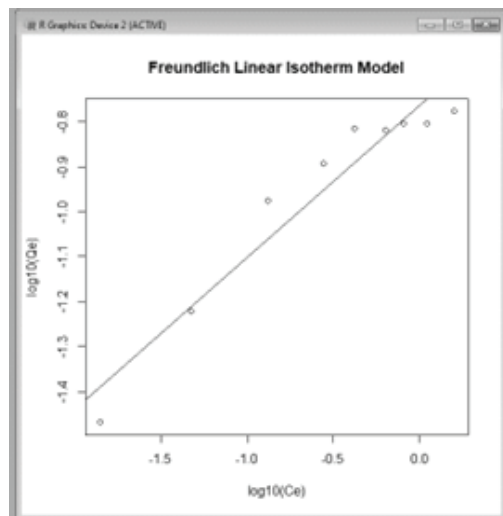
Residual standard error: 0.04889 on 7 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.9279,    Adjusted R-squared:  0.9174
F-statistic: 93.9 on 1 and 7 DF, p-value: 3.056e-05

[1] "Freundlich Parameters"
Kf
[1] 0.1724504
n
[1] 2.967104

$ Fitted Values
      1      2      3      4      5      6      7
-1.3902849 -1.2123904 -1.0407300 -0.9618716 -0.8917930 -0.8295697 -0.7963762
    
```

**Larawan Blg. 6:** Resulta ng pag-uugnay gamit ang modelong Freundlich (1906)

Kahalintulad din ng *non-Linear* na mga punsiyon, inilalabas din ng mga *Linear* na punsiyon ang ang mga balyu ng kamalian ng modelong ginamit sa pag-aangkop gaya ng AIC, BIC, RMSE, MAE, MSE, RAE at SE. Inilalabas din ng mga *Linear* na punsiyon ang grap ng pag-aangkop ng datos sa napiling modelo. Ipinapakita sa Larawan Blg. 7 ang grap ng pag-uugnay ng datos ng *Ce* at *Qe* sa modelong adsorpsiyong isotermal ni Freundlich (1906).



**Larawan Blg. 7:** Ang grap ng pag-uugnay ng datos ng *Ce* at *Qe* sa modelong isotermal na adsorpsiyon ni Freundlich (1906).

Layon ng R *package* na PUPAIM na mapadali ang pagkalkula at pagsasalarawan ng mga salik ng adsorpsiyon. Madaling makukuha ng mga gumagamit ng PUPAIM ang mga: 1) estimasyon ng mga parametro ng modelong ginamit sa pag-aangkop ng datos; 2) estimasyon ng mga pagkakamali ng napiling modelo sa datos na pinag uugnay; at 3) ang grap ng pag-aangkop ng datos sa modelong isothermal adsorpsiyon. Sa pananaliksik na ito, inilarawan ang paggamit ng mga modelong Freundlich (1906) at Langmuir (1916) sa parehong non-Linear at Linear na porma ng ekwasyon. Ang pag-aaral ng mga salik ng adsorpsiyon ay may higit kahalagahan sa industriya at sa pangangalaga ng kalikasan. Ang PUPAIM ay higit na mapakikinabangan ng mga mag-aaral at mga mananaliksik na may layuning mapalawak ang kaalaman sa konsepto ng adsorpsiyon. Sa kasalukuyan, mayroong dalawang package sa CRAN na gumagawa ng adsorpsiyon analysis, ito ay ang PUPAIM at SorptionAnalysis (Chattopadhyay 2017), ngunit ang SorptionAnalysis ay mayroong tatlong (3) modelo lamang at linyar lamang ang kayang gamitin samantalang ang PUPAIM ay kayang bumuo ng limampu't-limang (55) modelo at kayang gumamit ng linyar at non-linyar na ekwasyon. Karagdagan pa rito, nagamit na rin ang PUPAIM sa iba't ibang pag-aaral katulad ng mga gawa nina Galamini et al. 2020, Rechberger et al. 2021, Kogut et al. 2022, Aracagok 2022, Navone et al. 2022, at Smoak at Schnoor, 2023.

Ang mga tao sa likod ng PUPAIM ay patuloy na pinapabuti ang *package* na ito sa pamamagitan ng paglilimbag ng mga makabagong bersiyon ng PUPAIM sa hinaharap. At bilang nauna (o isa sa mga naunang) R *package* na inilimbag mula sa Pilipinas, minabuti ng aming grupo na unahin din ang paglilimbag ng kalakip na babasahin (o *vignette*) na ito sa wikang Filipino. ♦

## MGA SANGGUNIAN

- Achife, E. C., at J. A. Ibemesi. "Applicability of the Freundlich and Langmuir Adsorption Isotherms in the Bleaching of Rubber and Melon Seed Oils." *Journal of the American Oil Chemists Society* (1989): 247-52.
- Aracagok, Y.D. "Biosorption of Remazol Brilliant Blue R Dye onto Chemically Modified and Unmodified *Yarrowia Lipolytica* Biomass." *Archives of Microbiology* (2022): 128.
- Atkins, P., at J. de Paula. *Physical Chemistry*. 10th Edition. Oxford: Oxford University Press, 2014.
- Ayawei, N., A. N. Ebelegi, at D. Wankasi. "Modelling and Interpretation of Adsorption Isotherms." *Hindawi Journal of Chemistry*. (2017).
- Batool, F., J. Akbar, S. Iqbal, S. Noreen, at S. N. Bukhari. "Study of Isothermal, Kinetic, and Thermodynamic Parameters for Adsorption of Cadmium: An Overview of Linear and NonLinear Approach and Error Analysis." *Hindawi Bioinorganic Chemistry and Applications* (2018).
- Chen, X. "Modeling of Experimental Adsorption Isotherm Data." *Information* (2015): 14-22.
- Deocaris, C.C., at L. P. de Osio. "Fitting Henry's Adsorption Isotherm Model in R Using the PUPAIM Package." *Asia Pacific Journal of Research* 1 (2020): 47-51
- Dichiara, A. B., S. F. Harlander, at R. E. Rogers. "Mixed Bed Adsorption of Diquat Dibromide from Aqueous Solution Using Carbon Nanotubes." *RSC Advances* (2015): 61508-61512.
- Freundlich, H.M.F. "Over the Adsorption in Solution." *The Journal of Physical Chemistry* (1906): 385-471.
- Galamini, G., G. Ferretti, V. Medoro, N. Tesaro, B. Faccini, at M. Coltorti. "Kinetics, and Thermodynamics of NH<sub>4</sub><sup>+</sup> Adsorption in Raw Liquid Manure by Using Natural Chabazite Zeolite-Rich Tuff." *Water* 12, no. 10 (2020): 2944. <https://doi.org/10.3390/w12102944>.



- Giles, C. H. "The History and Use of the Freundlich Adsorption Isotherm." *Journal of the Society of Dyers and Colourists* (2008): 287–91.
- Grothendieck, G. "nls2: Non-Linear Regression with brute force. R Package version 0.2." Inakses noong Enero 7, 2021. <https://CRAN.R-project.org/package=nls2>.
- Jadhav, A. J., at V. C. Srivastava. "Multicomponent Adsorption Isotherm Modeling Using Thermodynamically Inconsistent and Consistent Models." *AlChE Journal* (2019).
- Kogut, I., F. Armbruster, D. Polak, S. Kaur, S. Hussey, T. Thiem, at M. Szwast. "Antibacterial, Antifungal, and Antibiotic Adsorption Properties of Graphene-Modified Nonwoven Materials for Application in Wastewater Treatment Plants." *Processes* (2022): 2051
- Langmuir, I. "The Constitution and Fundamental Properties of Solids and Liquids: Part I. Solids." *Journal of American Chemical Society*, (1916): 2221–2295.
- Li, L., X. Zhang, J. Lei, J. He, S. Zhang, at F. Pan. "Adsorption and Corrosion Inhibition of Osmanthus Fragran Leaves Extract on Carbon Steel." *Corrosion Science* (2012): 82–90.
- Milmile, S. N., J. V. Pande, S. Karmakar, A. Bansiwale, T. Chakrabarti, at R. B. Biniwale. "Equilibrium Isotherm and Kinetic Modeling of the Adsorption of Nitrates by Anion Exchange Indion NSSR Resin." *Desalination* (2011): 38–44.
- Mittal, A., L. Kurup, at J. Mittal. "Freundlich and Langmuir Adsorption Isotherms and Kinetics for the Removal of Tartrazine from Aqueous Solutions Using Hen Feathers." *Journal of Hazardous Materials* (2007): 243–48.
- Navone, L., K. Moffitt, K., at W. A. Johnston. "Bioengineered Textiles with Peptide Binders that Capture SARS-CoV-2 Viral Particles." *Commun Mater* (2022).
- Rechberger, M. V., F. Zehetner, at M. H. Gerzabek. "Phosphate Sorption-Desorption Properties in Volcanic Topsoils along a Chronosequence and a Climatic Gradient on the Galápagos Islands." *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*. (2021): 479–91.
- Sahin, R., at K. Tapadia. "Comparison of Linear and non-Linear Models for the Adsorption of Fluoride onto Geo-material: Limonite." *WaterSciTechnol* (2015): 2262–2269.
- Sadeek, S. A., N. A. Negam, H. H. H. Hefni, at M. M. A. Wahab. "Metal Adsorption by Agricultural Biosorbents: Adsorption Isotherm, Kinetic and Biosorbents Chemical Structures." *International Journal of Biological Macromolecules* (2015): 400–09.
- Sahu, O., at N. Singh. "Significance of Bioadsorption Process on Textile Industry Wastewater." *The Impact and Prospects of Green Chemistry for Textile Technology* (2019): 367–416.
- Saroyda, J. R., R.Y.S. Cruz, R.J.C. Antonio, C.L.P. Flestado, J.R.S. Magalon, K. Z. P. Zagala, C. L. B. Barbacena, J.M. Bumatay, L. F. Bautista, at C. C. Deocarís. "PUPAIM: A Collection of Physical and Chemical Adsorption Isotherm Models." 2019. <https://cran.r-project.org/web/packages/PUPAIM/index.html>. Web.
- Smoak, R.A., at J. L. Schnoor. "Nickel Hyperaccumulator Biochar Sorbs Ni(II) from Water and Wastewater to Create an Enhanced Bio-ore." *ACS Environmental* (2023): 24–33.
- Subramanyam, B., at A. Das. "Linearised and non-Linearised Isotherm Models Optimization Analysis by Error Functions and Statistical Means." *Journal of Environmental Health Science and Engineering* (2014).

Venkatesha, T. G., R. Viswanatha, Y. Arthoba Nayaka, at B. K. Chethana, "Kinetics and Thermodynamics of Reactive and Vat Dyes Adsorption on MgO Nanoparticles." *Chemical Engineering Journal* (2012): 198–99.

Foo, K.Y., at B. H. Hameed. "Insights into the Modeling of Adsorption Isotherm Systems." *Chemical Engineering Journal* (2010): 2–10.



Si Ginoong CHESTER C. DEOCARIS sa kasalukuyang Assistant Professor 3 sa departamento ng mga agham na Pang-Pisikal sa Kolehiyo ng Agham sa Politeknokong Unibersidad ng Pilipinas (PUP). Si Ginoong Deocarís ay may degri na Master ng Agham sa Biochemistry mula sa Unibersidad ng Pilipinas sa Maynila at mga lisensiya na ginawad ng Komisyon sa Regulasyon ng mga Propesyon sa Pagkimiko at Guro. Ang penomena ng adsorpsiyon ay isa sa mga interes ni Ginoong Deocarís sa larangan ng pananaliksik sa Kapnayan.

Sina Ginoong CARL LUIS P. FLESTADO at Ginoong MARK LESTER C. GALICIA ay nagtapos sa Politeknikong Unibersidad ng Pilipinas ng BS Chemistry noong 2022, Si Ginoong Flestado ay nanungkulan bilang opisyal ng PUP Chemistry Society. Samantalang si Ginoong Galicia ay dating kinatawan ng PUP at Pangalawang Pangulo para sa mga Akademikong Gawain sa Philippine Association of Chemistry Students (PACS Inc.). Sa parehong taon ng kanilang pagtatapos ay naging registered chemical technician din sila.

Si Ginoong JAN BERNEL P. PADOLINA ay isang mananaliksik (URA 1) sa Politeknikong Unibersidad ng Pilipinas (PUP) at guro sa Pamantasan ng Lungsod ng Marikina (PLMAR), kasalukuyan ding nag-aaral sa Unibersidad ng Pilipinas sa Los Baños upang makompleto ang digri na Master ng Agham sa Biochemistry. Siya ay isa ring propesyonal na guro at registered chemical technician na may iba't ibang interes sa pag-aaral na nakaugnay sa haykapnayan at isa na rito ang konsepto ng adsorpsiyon.

Si Ginoong DIONE GUZMAN ay dating naging tagapagturo sa asignaturang Filipino sa pang-sekondaryang edukasyon sa New Era University at kasalukuyang guro sa Concepcion Integrated School (CIS). Nagtapos siya sa Pamantasan ng Lungsod ng Marikina na may kursong Batsilyer sa Sekondaryang Edukasyon medyor sa Filipino at kasalukuyang nagpapakadalubhasa sa kursong Master ng Artes sa Filipinolohiya. Siya ay may adbokasiyang bigyang-importansiya at lawak ang paggamit ng wika, kultura at panitikang Pilipino.