

REGRESSÃO NÃO LINEAR EM PROCESSOS DE ADSORÇÃO: ANÁLISE COMPARATIVA DOS SOFTWARES EXCEL 365, RSTUDIO, JUPYTER NOTEBOOK, ORIGIN E MATLAB

Joacy B. Lima¹; Cicero W. B. Bezerra¹; Francisco A. Silva²; Izaias S. Marques²; Victor L. F. Pinheiro²; Walinson F. Martins² e Leonardo B. Cantanhede²

¹*Departamento de Química, Universidade Federal do Maranhão, São Luís - Maranhão, Brasil;*

²*Departamento de Química, Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Maranhão, São Luís - Maranhão, Brasil*

Palavras-Chave: métodos iterativos, cinética de adsorção, isoterma de adsorção

Introdução

No estudo dos processos de adsorção, é fundamental considerar tanto os aspectos termodinâmicos quanto os cinéticos para uma compreensão completa do fenômeno. Os estudos termodinâmicos se referem à energia interfacial final e se concentram nas condições de equilíbrio alcançadas quando o adsorvato se distribui na superfície do adsorvente de maneira estável, permitindo a avaliação da capacidade máxima de adsorção e das características termodinâmicas do sistema, tais como a entalpia, a entropia de adsorção, e a energia de Gibbs do processo. Os ensaios cinéticos determinam a rapidez com que o processo de adsorção ocorre, estabelecendo o tempo de contato para que o sistema alcance o equilíbrio, definindo, portanto, a eficiência do processo em aplicações práticas.

Em ambos os estudos, cinéticos e termodinâmicos da adsorção, utilizam-se modelos matemáticos para a descrição do comportamento temporal do processo. Do ponto de vista matemático, as equações cinéticas, segundo os modelos de Elovich, de pseudo-primeira e de pseudo-segunda ordens, bem como as isotermas segundo os modelos de Langmuir, Freundlich, Sips, Fritz-Schlunder, Redlich-Peterson, Dubinin Radushkevich e Temkin, são classificadas como não lineares em relação aos seus parâmetros. A linearização dessas equações pode introduzir erros nos valores dos parâmetros (Bates & Watts, 1988) tornando necessário o uso de softwares que realizem o processo de regressão não linear e uma análise estatística desses parâmetros.

A análise de regressão não linear e a estatística dos parâmetros não são tarefas simples, uma vez que a maioria dos softwares exige conhecimentos avançados em programação na linguagem específica dos softwares, o que pode dificultar o seu uso por usuários sem habilidades em programação. Assim, a elaboração de uma planilha eletrônica no Excel que permita realizar regressão não linear e análise estatística dos parâmetros obtidos é uma necessidade atual, na medida que aumentam os estudos e as publicações envolvendo o tema adsorção, tornando acessíveis essas ferramentas para usuários com conhecimentos limitados em programação computacional.

A regressão não linear simples é um método estatístico-matemático que modela a relação entre uma variável dependente “y” e uma variável independente “x” de forma não linear em relação aos parâmetros “ θ ” que pode ser adequadamente representada pela equação: $y = f(x_i; \theta) + \varepsilon_i$; $i = 1, \dots, n$; onde: ε representa o erro ou resíduo entre a variável dependente experimental e o valor ajustado pela regressão, e i representa o número de dados experimentais (Mazucheli & Achcar, 2002; Mattos, 2013; Silva, E. M., et al, 2019; Chiacchio, E. J, 1993).

O método dos mínimos quadrados é um dos mais utilizados para análise de regressão não linear e consiste em minimizar o valor da soma dos quadrados dos erros ou resíduos. O algoritmo de Gauss-Newton é um dos mais utilizados para obtenção dos parâmetros θ_k .

Embora a importância das técnicas de regressão não linear seja evidente, a literatura científica ainda carece de estudos abrangentes sobre o tema. A maioria dos trabalhos publicados utiliza modelos lineares, que podem introduzir erros significativos na determinação dos parâmetros cinéticos e isotérmicos. Portanto, este trabalho visa preencher essa lacuna ao explorar detalhadamente a aplicação de regressões não lineares em estudos de adsorção, destacando sua importância e contribuindo para o avanço das práticas e do conhecimento na área.

Dentre os programas disponíveis no mercado, selecionamos Excel 365, RStudio (versão 2022.12.0), Jupyter Notebook (versão 6.4.12), Origin (versão 6.0) e Matlab (versão R2023b) para comparar a eficiência de regressões não lineares em estudos de adsorção, considerando tanto aspectos cinéticos quanto termodinâmicos. A escolha desses programas reflete a necessidade de explorar as vantagens e limitações de cada plataforma no contexto de regressões não lineares aplicadas aos estudos de adsorção. A diversidade de ferramentas, incluindo opções populares e especializadas, garante que nossos resultados sejam robustos e comparáveis, proporcionando uma base sólida para futuras pesquisas e aplicações práticas no tratamento de águas e outros processos de adsorção. Essa abordagem multifacetada assegura uma análise abrangente e rigorosa, contribuindo significativamente para o avanço das práticas e do conhecimento na área de adsorção.

Material e Métodos

Os dados experimentais utilizados para as análises de regressão não linear foram obtidos a partir de estudos envolvendo dois adsorventes: a casca do tamarindo (*Tamarindus indica* L), denominado CT e a semente de tamarindo, ST, ambos ativados com ozônio. O adsorvato utilizado nos dois estudos foi o azul de metileno, em meio aquoso, com pHs de 5,5 e 8,0, respectivamente.

Os softwares utilizados para a realização das regressões não lineares e análises estatísticas dos parâmetros obtidos foram: Excel 365, RStudio (versão 2022.12.0), Jupyter Notebook (versão 6.4.12), Origin (versão 6.0) e Matlab (versão R2023b).

A escolha dos softwares foi baseada em uma análise criteriosa das características, funcionalidades e popularidade de cada plataforma e visou garantir uma análise abrangente, robusta, confiável e alinhada com as práticas mais comuns na área de adsorção.

Excel é amplamente utilizado devido à sua acessibilidade e facilidade de uso. Sua interface gráfica intuitiva permite a manipulação direta de dados e gráficos, facilitando a visualização e análise rápida de resultados (Samuel, J. R.; Binyomin, A., 2015; Esteves, E., 2010; Microsoft, 2024).

O RStudio utiliza a linguagem de programação R e é extremamente poderoso para análise estatística e gráfica. Suas capacidades avançadas de modelagem estatística, incluindo regressões não lineares complexas, são suportadas por uma vasta comunidade de usuários e uma extensa biblioteca de pacotes. Sendo gratuito, RStudio oferece uma alternativa acessível e robusta para análises detalhadas. (Hair, J. F. et al, 2021; Esteves, E., 2011; Posit, 2024).

O Jupyter Notebook fornece um ambiente de programação interativo que suporta várias linguagens, incluindo Python, R e Julia. Sua flexibilidade permite a combinação de código, visualizações e texto explicativo em um único documento, ideal para análise iterativa e visualização de dados.

Origin foi desenvolvido especificamente para análise e gráficos científicos, conhecido por suas robustas capacidades de análise de dados e regressão não linear. Sua interface gráfica avançada permite a manipulação detalhada de gráficos e dados, com ferramentas especializadas para estudos de adsorção (Deschenes, L. A., 2000; Edwards, P. M., 2002; May, R. A., 2009; Origin, 2024).

Matlab utiliza uma linguagem de programação de alto nível, especialmente adequada para cálculos matemáticos, análise de dados e visualização. Suas ferramentas versáteis permitem modelagem matemática, análise estatística e criação de gráficos avançados.

O estudo comparativo dos softwares envolveu a utilização de modelos matemáticos com apenas dois parâmetros: cinética de pseudo-segunda ordem e isotermas segundo o modelo de Langmuir.

Resultados e Discussão

A discussão dos resultados foi feita por tipo de software utilizando os dados da cinética de pseudo-segunda ordem e da isoterma segundo o modelo de Langmuir.

Microsoft Excel 365

A elaboração de uma planilha eletrônica no Excel para os cálculos de regressão não lineares não requer conhecimento de linguagem de programação, apenas a digitação das equações nas células, utilizando para isso algumas funções próprias do Excel o que torna uma operação relativamente simples. Uma vez digitadas as equações, a planilha funciona como um aplicativo para análise de regressão não linear simples, que pode ser utilizada em notebooks ou smartphones.

Os parâmetros desejados por regressão não linear simples em uma planilha eletrônica podem ser obtidos de duas formas: a primeira através da ferramenta suplementar solver que oferece recursos avançados em análise de regressão usando métodos iterativos e a segunda forma através do método dos mínimos quadrados utilizando o algoritmo de Gauss-Newton. Em ambas as formas utilizam o método dos mínimos quadrados sendo necessário criar uma coluna dos resíduos além das colunas das variáveis dependente e independente contendo os dados experimentais.

O método utilizando o algoritmo de Gauss-Newton, além dessas colunas, ainda precisa criar a matriz Jacobiana (J) que é a matriz das derivadas da equação modelo em relação a cada parâmetro. Se a equação modelo tiver dois parâmetros, então, a matriz Jacobiana terá duas colunas, uma para cada parâmetro.

A análise estatística (variância e regressão) foi realizada utilizando equações da literatura (Stevenson, W. J., 1981).

O Microsoft Excel 365 não é gratuito na versão desktop, mas, existe a versão livre online e a versão para smartphone, ambos apresentam menos recursos que a versão desktop, não executam macros e nem a ferramenta suplementar solver. Mas, caso a planilha eletrônica para regressão não linear tenha sido elaborada utilizando apenas o método dos mínimos quadrados através do algoritmo de Gauss-Newton, esta pode ser utilizada sem nenhum problema em qualquer que seja a versão e não exige conhecimentos em programação. Uma vez elaborada a planilha, basta alterar os dados experimentais para se ter uma nova análise de regressão, desde que a função seja a mesma.

Software RStudio.

Para obter os parâmetros desejados por regressão não linear simples no RStudio, basicamente são necessárias três coisas:

- as linhas de código com os dados experimentais x e y representando as variáveis independentes e dependentes, respectivamente;
- a equação modelo para a qual deve ser ajustada a regressão não linear;
- a função (nonlinear least squares) `nls (formula, data, start, control)`. Essa função é a responsável por fazer a regressão não linear através dos mínimos quadrados e os principais argumentos da função `nls` são: `formula` que corresponde a equação modelo, `data` que corresponde as variáveis x e y, `start` representa os valores iniciais dos parâmetros e `control` são argumentos para controlar o processo de otimização como a tolerância do processo iterativo.

Os valores dos parâmetros e a análise estatística são obtidos após o comando `summary`. Para o cálculo de R^2 ($R^2=1-sqr/sqt$) foram calculados previamente a soma dos quadrados dos resíduos e totais cujas fórmulas são: $sqr=\sum((y-fitted(reg))^2)$ e $sqt=\sum((y-mean(y))^2)$, respectivamente.

O gráfico com os pontos experimentais e a curva de regressão foram obtidos através da função `plot` e `lines(x,predict(reg), col=10)`, respectivamente.

Software Jupyter Notebook.

Para obter os parâmetros desejados por regressão não linear simples no Jupyter Notebook, são necessárias várias coisas:

- algumas bibliotecas precisam ser importadas (`numpy`, `scipy`, `sklearn` e `matplotlib`);
- as linhas com os dados experimentais `x` e `y` representando as variáveis independentes e dependentes, respectivamente;
- a equação modelo para a qual deve ser ajustada a regressão não linear;
- a função `curve_fit` (`f`, `xdata`, `ydata`, `p0`) da biblioteca `scipy.optimize`. Os principais argumentos da função `curve_fit` são: `f` que corresponde a equação modelo, `xdata` e `ydata` correspondem as variáveis `x` e `y`, respectivamente e `p0` representa os valores iniciais dos parâmetros.

Os valores dos parâmetros são obtidos através do comando `print(popt[0])` e `print(popt[1])` e o valor do coeficiente de determinação R^2 é obtido através da função `R2_score(y, \hat{y})`, onde \hat{y} representa os valores de `y` da função modelo ajustada aos parâmetros.

Os softwares Jupyter Notebook e o RStudio são gratuitos na versão desktop. Existem vários aplicativos que podem ser executados em smartphones para realizar regressões não lineares, mas, tanto na versão desktop como para smartphones exigem a instalação de bibliotecas e conhecimentos em programação Python e R, respectivamente.

Software Origin

Para obter os parâmetros desejados por regressão não linear simples no software Origin é necessário inserir e salvar a equação modelo através da ferramenta Non-linear Curve Fit da guia Analysis. Em seguida, digitar os valores iniciais dos parâmetros, o nível de confiança, a tolerância, o número de iterações, o número de algarismos significativos e por último clicar no botão correspondente às iterações, o resultado com os valores otimizados dos parâmetros e o gráfico contendo a curva de regressão são obtidos instantaneamente. A análise estatística com os resultados também pode ser obtida na forma de uma planilha.

O software Origin só existe na versão desktop e dispõe de uma ferramenta específica para regressão não linear na guia analysis, basta selecionar ou inserir uma nova função e a regressão é feita imediatamente mostrando o gráfico e os parâmetros. O algoritmo utilizado para regressão não linear no Origin é o Levenberg-Marquardt, o software é rápido e não exige conhecimentos em programação. Mas, não é gratuito, não há versão online e não pode ser executado em smartphone.

Software Matlab

Ao abrir o software Matlab R2023b exibirão algumas de suas principais janelas. Os dados experimentais poderão ser importados de arquivos ou digitados tanto no command window (ideal para pequenas quantidades de dados) como no workspace que permite edição manual.

Há várias formas de realizar uma regressão não linear no Matlab, a mais simples é através da ferramenta Curve Fitter da guia APPS, para abri-la basta digitar cftool no command window e pressionar enter ou clicar no botão Curve Fitter da guia APPS, em seguida, selecionar os dados x e y.

Clicar no botão Custom Equation da caixa de ferramenta FIT TYPE e digitar a equação modelo em Custom Equation da janela Fit Options. Clicar em Advanced Options e digitar os valores dos parâmetros iniciais em Coefficient Constraints, caso as iterações não converjam estabeleça uma restrição nos valores inferior e superior dos parâmetros.

Os valores dos parâmetros ajustados e alguns dados estatísticos aparecem em Results e Table of fits, situados no lado direito e abaixo do gráfico, respectivamente.

O software Matlab não é gratuito na versão desktop. Existe a versão online gratuita com algumas limitações, as duas versões dispõem da ferramenta de ajuste de curvas (curve fitter na guia apps) que faz regressão não linear sem a necessidade de programação, basta digitar ou selecionar os dados experimentais, selecionar a opção (custom equation), digitar a equação e a regressão é feita imediatamente mostrando o gráfico e os parâmetros. Também existe a versão para smartphone usando o aplicativo Matlab mobile que dispõe da mesma ferramenta.

Os resultados das regressões não lineares (cinética e termodinâmica) para as amostras CT e ST estão apresentados nas figuras 1 a 4 e tabelas 1 a 4, respectivamente. Ao comparar esses resultados obtidos com os diferentes softwares, fica evidente que todos apresentaram alta precisão, como mostrado pelos valores de R^2 próximos a 1. No entanto, as diferenças surgem ao considerar a facilidade de uso, a acessibilidade e as capacidades adicionais de cada ferramenta.

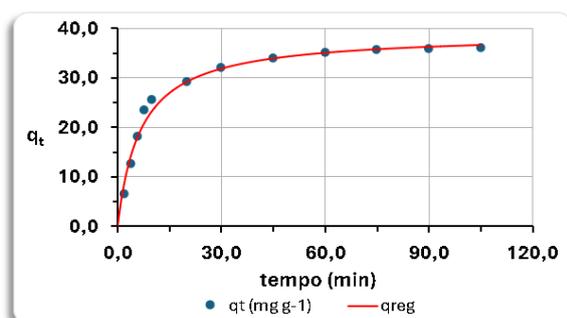


Figura 1 - Cinética de adsorção de pseudo-segunda ordem após regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema CT, pH 5,5.

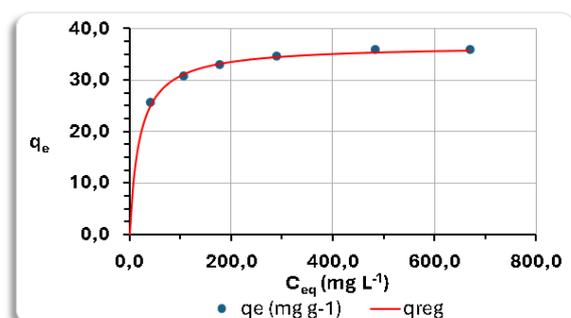


Figura 2 – Isoterma de adsorção segundo o modelo de Langmuir após regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema CT, pH 5,5.

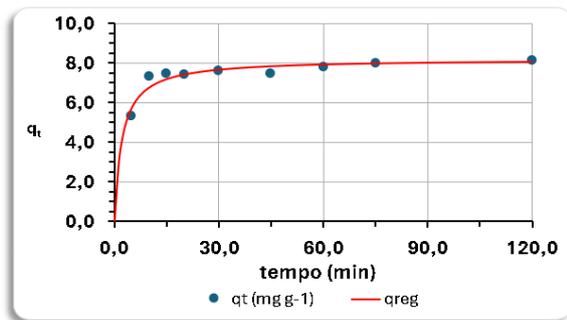


Figura 3 - Cinética de adsorção de pseudo-segunda ordem após regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema ST, pH 8,0.

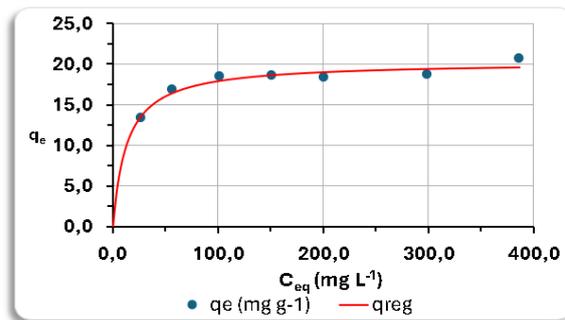


Figura 4 - Isotherma de adsorção segundo o modelo de Langmuir após regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema ST, pH 8,0.

Tabela 1 – Parâmetros cinéticos e análise estatística obtidos por regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema CT, pH 5,5.

Parâmetros	Excel	R	Python	Origin	Matlab
		(R Studio)	(Jupyter Notebook)		
q_{eq}	3,900E+01	3,900E+01	3,900E+01	3,900E+01	3,900E+01
k_2	3,826E-03	3,826E-03	3,826E-03	3,826E-03	3,800E-03
R^2	9,802E-01	9,802E-01	9,802E-01	9,802E-01	9,802E-01
SQR	2,195E+01	2,195E+01	2,195E+01	2,195E+01	2,195E+01
SQT	1,108E+03	1,108E+03	1,108E+03	—	—
QMR	2,195E+00	2,195E+00	2,195E+00	2,195E+00	—
SE	1,482E+00	1,482E+00	1,482E+00	—	1,482E+00
$SE(q_e)$	8,885E-01	8,885E-01	8,885E-01	8,885E-01	—
$SE(k_2)$	4,393E-04	4,393E-04	4,393E-04	4,393E-04	—
Stat t(q_e)	4,389E+01	4,389E+01	4,389E+01	—	—
Stat t(k_2)	8,710E+00	8,710E+00	8,710E+00	—	—
Valor-p(q_e)	9,059E-13	9,060E-13	9,059E-13	—	—
Valor-p(k_2)	5,549E-06	5,550E-06	5,549E-06	—	—

Tabela 2 – Parâmetros da isoterma de adsorção e análise estatística obtidos por regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema CT, pH 5,5.

Parâmetros	Excel	R	Python	Origin	Matlab
		(R Studio)	(Jupyter Notebook)		
q_m	3,674E+01	3,674E+01	3,674E+01	3,674E+01	3,674E+01
K_L	5,189E-02	5,189E-02	5,189E-02	5,189E-02	5,190E-02
R^2	9,942E-01	9,942E-01	9,942E-01	9,942E-01	9,942E-01
SQR	4,517E-01	4,517E-01	4,517E-01	4,517E-01	4,517E-01
SQT	7,847E+01	7,847E+01	7,847E+01	—	—
QMR	1,129E-01	1,129E-01	1,129E-01	1,129E-01	—
SE	3,361E-01	3,361E-01	3,361E-01	—	3,361E-01
$SE(q_m)$	2,333E-01	2,333E-01	2,333E-01	2,333E-01	—
$SE(K_L)$	2,598E-03	2,598E-03	2,598E-03	2,598E-03	—
Stat t(q_m)	1,575E+02	1,575E+02	1,575E+02	—	—
Stat t(K_L)	1,997E+01	1,997E+01	1,997E+01	—	—
Valor-p(q_m)	9,756E-09	9,756E-09	9,756E-09	—	—
Valor-p(K_L)	3,708E-05	3,708E-05	3,708E-05	—	—

Tabela 3 – Parâmetros cinéticos e análise estatística obtidos por regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema ST, pH 8,0.

Parâmetros	Excel	R	Python	Origin	Matlab
		(R Studio)	(Jupyter Notebook)		
q_{eq}	8,209E+00	8,209E+00	8,209E+00	8,209E+00	8,209E+00
k_2	5,748E-02	5,748E-02	5,748E-02	5,748E-02	5,750E-02
R^2	8,572E-01	8,572E-01	8,572E-01	8,572E-01	8,573E-01
SQR	7,857E-01	7,857E-01	7,857E-01	7,857E-01	7,857E-01
SQT	5,504E+00	5,504E+00	5,504E+00	—	—
QMR	1,122E-01	1,122E-01	1,122E-01	1,122E-01	—
SE	3,350E-01	3,350E-01	3,350E-01	—	3,350E-01
$SE(q_e)$	1,847E-01	1,847E-01	1,847E-01	1,847E-01	—
$SE(k_2)$	1,261E-02	1,261E-02	1,261E-02	1,261E-02	—
Stat t(q_e)	4,445E+01	4,445E+01	4,445E+01	—	—
Stat t(k_2)	4,558E+00	4,558E+00	4,558E+00	—	—
Valor-p(q_e)	7,618E-10	7,618E-10	7,618E-10	—	—
Valor-p(k_2)	2,610E-03	2,611E-03	2,610E-03	—	—

Tabela 4 – Parâmetros da isoterma de adsorção e análise estatística obtidos por regressão não linear a partir dos dados experimentais para o sistema ST, pH 8,0.

Parâmetros	Excel	R	Python	Origin	Matlab
		(R Studio)	(Jupyter Notebook)		
q_m	2,031E+01	2,031E+01	2,031E+01	2,031E+01	2,031E+01
K_L	7,611E-02	7,611E-02	7,611E-02	7,611E-02	7,610E-02
R^2	9,155E-01	9,155E-01	9,155E-01	9,155E-01	9,155E-01
SQR	2,587E+00	2,587E+00	2,587E+00	2,587E+00	2,587E+00
SQT	3,060E+01	3,060E+01	3,060E+01	—	—
QMR	5,174E-01	5,174E-01	5,174E-01	5,174E-01	—
SE	7,193E-01	7,193E-01	7,193E-01	—	7,193E-01
$SE(q_m)$	4,842E-01	4,842E-01	4,842E-01	4,842E-01	—
$SE(K_L)$	1,386E-02	1,386E-02	1,386E-02	1,386E-02	—
Stat t(q_m)	4,194E+01	4,194E+01	4,194E+01	—	—
Stat t(K_L)	5,490E+00	5,490E+00	5,490E+00	—	—
Valor-p(q_m)	1,453E-07	1,453E-07	1,453E-07	—	—
Valor-p(K_L)	2,737E-03	2,737E-03	2,737E-03	—	—

Conclusões

A análise comparativa dos softwares Excel 365, RStudio, Jupyter Notebook, Origin e Matlab para a realização de regressões não lineares em processos de adsorção demonstrou que todos foram capazes de ajustar os modelos matemáticos aos dados experimentais com alta precisão, evidenciada pelos valores de R^2 próximos a 1. No entanto, a facilidade de uso e a acessibilidade desses softwares variam significativamente. O Excel, com suas ferramentas intuitivas e sem necessidade de programação, mostrou-se particularmente útil para usuários sem conhecimento avançado em programação. Por outro lado, RStudio, Jupyter Notebook e Matlab, embora mais complexos, oferecem maior flexibilidade e um conjunto mais robusto de ferramentas para análises estatísticas avançadas.

Esses resultados indicam que a escolha do software deve considerar não apenas a precisão dos ajustes, mas também a familiaridade do usuário com a interface e a linguagem de programação do software. A disponibilidade de planilhas eletrônicas acessíveis que permitem realizar regressões não lineares e análises estatísticas amplia significativamente o acesso a essas ferramentas, especialmente para profissionais e pesquisadores que não possuem habilidades avançadas em programação.

Agradecimentos

Ao Programa de Pós-graduação em Química do IFMA e ao Grupo de Pesquisa GEIC (Grupo de Estudo de Catálise e Inorgânica do Maranhão) pelo apoio.

Referências

- Bates, D. M.; Watts, D. G. *Nonlinear regression analysis and its applications*. John Wiley & Sons, 1988.
- Chiacchio, E. J. *Regressão não-linear: desenvolvimento de um sistema computacional e aplicações*, Dissertação de mestrado, USP – Piracicaba – SP, 1993.
- Deschenes, L. A.; Bout, D. A. V., Origin 6.0: Scientific Data Analysis and Graphing Software Origin Lab Corporation, **J. Am. Chem. Soc.**, Vol. 122, No. 39, p. 9567, 2000, <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja004761d>
- Edwards, P. M. Origin 7.0: Scientific Graphing and Data Analysis Software, **J. Chem. Inf. Comput. Sci.** 42, 5, 1270–1271, 2002. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ci0255432>
- Esteves, E. Apresentação do R com um exemplo de análise de regressão não-linear. Instituto Superior de Engenharia da Universidade do Algarve, Faro – PT. 2011. disponível em: <https://sapientia.ualg.pt/bitstreams/e2adba82-4f5c-4048-a21c-6a13a228b5c9/download>, acesso em: 30/06/2024.
- Hair, J. F. et al, *Partial least squares structural equation modeling (pls-sem) using R: a workbook*, Springer, 2021. p.31-47, ISBN 978-3-030-80519-7, disponível em: <https://doi.org/10.1007/978-3-030-80519-7>, acesso em: 21/06/2024.
- Mattos, T. B. *Modelos não lineares e suas aplicações*, Monografia, UFJF, Juiz de Fora, 2013.
- May, R. A.; Stevenson, K. J., Software Review of Origin 8, **J. Am. Chem. Soc.** 131, 2, 872, 2009. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ja809638x>
- Mazucheli, J.; Achar, J. A. Algumas considerações em regressão não linear, **Acta Scientiarum**, v. 24, n. 6, p. 1761-1770, Maringá, 2002.
- Microsoft. *Auxílio e aprendizado do Excel*. Disponível em: <https://support.microsoft.com/pt-br/excel>, acesso em: 11/06/2024.
- Origin. Disponível em: <https://www.originlab.com/>, acesso em 11/06/2024.
- Posit. Disponível em: <https://posit.co/>, acesso em: 11/06/2024.
- Samuel, J. R.; Binyomin, A. teaching fundamental skills in microsoft excel to first-year students in quantitative analysis, **J. Chem. Educ.** 92, 1840–1845, 2015, disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jchemed.5b00122>, acesso em: 21/06/2024.
- Silva, E. M., et al. Método de Newton e Gauss-Newton na estimação dos parâmetros de modelo de regressão não linear. **Sigmas** v.8, n.2, p. 728-734, Alfenas. 2019, ISSN: 2317-0840.
- Silva, F. A; et al. Adsorção de azul de metileno utilizando carvão ativado preparado a partir da casca do tamboril (*enterolobium contortisiliquum*) **Quim. Nova**, Vol. 47, No. 3, 1-9, 2024.
- Stevenson, W. J. *Estatística aplicada à administração*, Harper & Row do Brasil, São Paulo – SP, 1981.