



## MODELAGEM COMPUTACIONAL DO PROCESSO DE ADSORÇÃO DE PROTEÍNAS COM MÉTODO DIRETO VIA PYTHON.

Luan Cerqueira de Oliveira<sup>1,2</sup> – luan.oliveira@souunit.com.br

Douglas Ferraz Corrêa<sup>3</sup> - douglas.correa@iprj.uerj.br

Gustavo Rodrigues Borges<sup>1,2</sup> – gustavo.rodrigues84@souunit.com.br

César Costapinto Santana<sup>1,2</sup> – cesarcsantana@gmail.com

Antônio José da Silva Neto<sup>3</sup> – ajsneto@iprj.uerj.br

<sup>1</sup>Universidade Tiradentes, – Aracaju, SE, Brasil.

<sup>2</sup>Instituto de Tecnologia e Pesquisa ITP – Aracaju, SE, Brasil.

<sup>3</sup>Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico – Nova Friburgo, RJ, Brasil

**Resumo.** Os processos de adsorção são vitais em diversos setores industriais, destacando-se em aplicações de separação e purificação. Uma compreensão precisa da dinâmica e cinética de adsorção é essencial para o projeto e operação eficientes de sistemas. Por muito tempo, os métodos de estudo de adsorção basearam-se fortemente em dados experimentais. No entanto, a busca crescente por eficiência e precisão acelerou o desenvolvimento de modelos preditivos confiáveis. Embora a isoterma de Langmuir esclareça a adsorção de monocamada, a previsão de curvas de ruptura, que indicam o ponto de saturação do adsorvente, permanece um desafio. Esta pesquisa visa desenvolver e validar um modelo matemático em Python para prever curvas de ruptura de adsorção. Fundamentada em dados de Lucena (1999) e Mesquita (1997), a pesquisa contrasta as curvas cinéticas e de ruptura produzidas pelo modelo com dados experimentais da literatura. A metodologia abrange calibração, validação e análise metódica das curvas. Este procedimento não só aprofunda a compreensão dos mecanismos de adsorção, mas também pode orientar a otimização de processos industriais. O modelo previu com proficiência a curva de avanço, alinhando-se aos resultados experimentais, indicando saturação da coluna. Assim, o modelo serve como uma ferramenta valiosa para antecipar o desempenho de colunas de adsorção em diversas aplicações industriais.

**Keywords:** Adsorção, Curva de ruptura, Cinética de adsorção, Isoterma de Langmuir

## 1. INTRODUÇÃO

Compreender os fenômenos associados à adsorção de proteínas é crucial em diversos setores, como no campo da biotecnologia, bioprocessamento, desenvolvimento de biomateriais, terapias medicinais e engenharia de proteínas. Entretanto, a adsorção de proteínas é um processo complexo que envolve a interação entre as moléculas de proteína e superfícies sólidas, como membranas, superfícies de biomateriais, colunas cromatográficas e outras estruturas utilizadas na biotecnologia. Portanto, entender fenômenos relacionados à adsorção, como as

proteínas são adsorvidas e liberadas em diferentes condições, é essencial para otimizar a eficiência desse processo (Singh *et al.*, 2020).

Dentre os fenômenos relacionados à adsorção, as curvas de ruptura desempenham um papel fundamental na compreensão do processo. Muito além de simples representações gráficas, essas curvas são indicadores vitais da eficiência e capacidade de adsorção em sistemas cromatográficos. Elas ilustram o instante crítico em que um adsorvente atinge sua saturação, o momento em que a substância alvo, cuidadosamente isolada, começa a se manifestar na fase eluente. Assim, as curvas de ruptura são mais do que informativas: são ferramentas essenciais para otimizar processos de separação e purificação em biotecnologia (Chisti, 1999).

No entanto, a interpretação efetiva e a utilização dessas curvas exigem uma modelagem sofisticada. É aqui que o modelo simplificado proposto por Boyer & Hsu (1992) em conjunto com a solução de Thomas (1944) ganha destaque. Este modelo oferece uma representação que, apesar de sua simplicidade aparente, fornece uma riqueza de informações sobre os processos cinéticos subjacentes à adsorção. Essa simplicidade, porém, tem seus próprios desafios. A confiabilidade e precisão de modelos como o de Thomas (1944) dependem fortemente da qualidade dos dados experimentais utilizados. Erros ou imprecisões nestes dados podem comprometer a validade das conclusões extraídas.

Neste contexto, os métodos diretos surgem como uma alternativa promissora. Diferente de outras abordagens, os métodos diretos minimizam as etapas intermediárias e potenciais falhas na obtenção de parâmetros cinéticos, aumentando a robustez e precisão da análise. A adoção desses métodos demonstra não apenas a busca por precisão, mas também um compromisso com a inovação no campo da biotecnologia.

O papel do Python neste cenário é inestimável. A linguagem, amplamente reconhecida por sua flexibilidade e pela vasta gama de bibliotecas especializadas, se tornou um aliado inestimável para pesquisadores e profissionais da área. Devido à crescente disponibilidade de bibliotecas desenvolvidas e utilizadas por especialistas de diversas áreas, que auxiliam na abordagem direta, o Python oferece um ambiente excepcionalmente propício para a modelagem e análise em biotecnologia, especialmente no contexto das curvas de ruptura e adsorção de proteínas.

Neste trabalho, o objetivo é realizar a modelagem e comparar os resultados obtidos com os da literatura, utilizando como base a aplicação do Modelo de Thomas e a integração com os métodos de análise de Thomas. Dessa forma, busca-se elucidar e destacar a interseção entre biotecnologia e computação, ressaltando a relevância e o potencial para inovações contínuas neste campo interdisciplinar.

## 2. MODELO MATEMÁTICO UTILIZADO PARA A ADSORÇÃO DE COLUNAS EM LEITO FIXO

Esta seção descreve os modelos matemáticos utilizados na modelagem computacional com Python. Em seguida, apresenta-se uma estrutura de modelagem computacional em Python para gerar as isotermas de adsorção ajustadas pelo modelo de Langmuir e as curvas de Ruptura. Para essa modelagem, foram utilizados os métodos diretos, com o aprimoramento de Boyer & Hsu (1992), conforme a equação (1).



Onde P é a proteína em solução, D é o local de adsorção do ligante e P.D é o complexo proteína-ligante. A equação que representa a taxa de adsorção é formulada como:

$$\frac{\partial q}{\partial T} = k_{f,l}c(q_m - q) - k_{r,l}q \quad (2)$$

Na Equação (2) acima, onde  $c$  é a quantidade de proteína no meio líquido e  $q$  indica a concentração proteica no estado sólido, nota-se que  $q_m$  também simboliza a capacidade máxima de adsorção. É importante ressaltar que  $k_{f,l}$  e  $k_{r,l}$  não são as taxas intrínsecas de interação da proteína com o ligando imobilizado (Chase, 1984). Na realidade, são parâmetros agregados que também consideram as contribuições do transporte de massa. Contudo, em condições nas quais a transferência de massa é extremamente rápida comparada ao processo de adsorção, essas constantes podem ser interpretadas como valores intrínsecos. Mesmo com essa abordagem simplificada, o modelo de isoterma de Langmuir tem mostrado grande eficácia na descrição da adsorção de proteínas em resinas de troca iônica, conforme evidenciado por estudos conduzidos por (Horstmann e Chase, 1989; Draeger e Chase, 1990). No estado de equilíbrio, a relação mencionada se reduz ao modelo de isoterma de Langmuir:

$$q^* = \frac{q_m C^*}{K + C^*} \quad (3)$$

Aqui,  $K$  é a constante de dissociação aparente e o símbolo (\*) representa as condições de equilíbrio. Comumente, as interações de adsorção de proteínas ocorrem em leitos fixos. Considerando um leito fixo composto por partículas esféricas uniformes, com raio  $R$  e comprimento transversal uniforme  $L$ , podemos analisar a quantidade de soluto na fase móvel do sistema da seguinte forma:

$$\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + U_0 \frac{\partial C}{\partial z} + (1 - \varepsilon) \frac{\partial q}{\partial t} = 0 \quad (4)$$

Desconsiderando a dispersão axial e tendo  $U_0$  como a velocidade superficial, conforme sugerido por Arnold *et al.*, (1985), podemos aprofundar nossa análise. A abordagem analítica para as equações (2) e (5) foi inicialmente proposta por Thomas (1944), ao analisar a face frontal de uma coluna de troca iônica. Para facilitar a análise, é conveniente adaptar as equações mencionadas às seguintes variáveis adimensionais:

$$x = \frac{c}{c_0} \quad (5)$$

$$y = \frac{q(K + C_0)}{q_m C_0} \quad (6)$$

$$n = \frac{k_{f,l}(1 - \varepsilon)q_m^*L}{U_0} \quad (7)$$

$$r = 1 + \frac{c_0}{k} \quad (8)$$

$$T = \frac{K + c_0}{(1 - \varepsilon)q_m} \left( \frac{U_0 t}{L} - \varepsilon \right) = \frac{K + c_0}{(1 - \varepsilon)q_m} \left( \frac{v - \varepsilon V}{V} \right) \quad (9)$$

As variáveis ‘ $x$ ’ e ‘ $y$ ’ representam, respectivamente, solutos e concentrações de adsorvato em termos adimensionais. O termo ‘ $n$ ’ refere-se ao número adimensional de unidades de

transferência específicas para o mecanismo de adsorção em questão. Por sua vez, 'r' é definido como o coeficiente de separação, enquanto 'T' simboliza o rendimento, interpretado como o volume adimensional do efluente. Com base nesses parâmetros, podemos reescrever as Equações (2) e (5) como:

$$\frac{\partial y}{\partial nT} = x(1 - y) + \frac{1}{r} (x - 1)y \quad (10)$$

$$\frac{\partial x}{\partial n} + \frac{\partial y}{\partial nT} = 0 \quad (11)$$

A solução para essas equações, no contexto da análise frontal, é dada por:

$$x(t, L) = \frac{J\left(\frac{n}{r}, nt\right)}{J\left(\frac{n}{r}, nt\right) + \left[1 - J\left(n, \frac{nt}{r}\right)\right] \exp\left[\left(1 - \frac{1}{r}\right)(n - nT)\right]} \quad (12)$$

onde a expressão 'J' é definida pela Equação (6).

$$J(a, b) = 1 - e^{-b} \int_0^a e^{-\lambda} I_0(2\sqrt{b\lambda}) d\lambda \quad (13)$$

A equação 13 detalha a curva de progressão e pode ser harmonizada com a curva experimental para deduzir a constante de dissociação dinâmica K e a constante de velocidade do concentrado direcionado  $k_{f,i}$ . A localização da curva está associada a K, enquanto  $k_{f,i}$  determina sua forma. Chase (1984), discutiu a influência de certos parâmetros na curva de progressão. Utilizou-se um procedimento computacional para projetar a curva de avanço a partir da equação (13). Uma vez obtido  $k_{f,i}$ , a constante de velocidade intrínseca direta  $k_{f,l}$  pode ser inferida a partir da seguinte relação:

$$\frac{1}{k_{f,l}} \approx \frac{1}{k_{f,i}} + \frac{q_m(r+1)R^2}{30} \left(\frac{1}{d} + \frac{5}{k_f R}\right) \quad (14)$$

Na seção subsequente, será abordado em detalhe o modelo matemático, para elucidar as bases teóricas e as técnicas computacionais empregadas para derivar a curva cinética, bem como determinar a constante  $K_1$ . A importância dessa análise reside na compreensão dos mecanismos de adsorção e na modelagem matemática utilizada em estudos similares.

## 2.1 MODELO MATEMÁTICO PARA OBTENÇÃO DA CURVA CINÉTICA E CONSTANTE $K_1$

Nessa seção será mostrado o modelo matemático utilizado para modelar a curva cinética e encontrar o valor da constante  $K_1$ . Os dados experimentais foram extraídos de Mesquita *et al.*, 1997. Os dados da curva cinética foram extraídos de Mesquita *et al.*, (1997), para uma concentração inicial de 0,203mg/mL. Este modelo é fundamentado na teoria clássica de cinética de Langmuir (1918) e Thomas (1944), que formula como um soluto interage com um sítio de adsorção, estabelecendo assim uma aceleração para a velocidade dessa reação, conforme equação 15 abaixo:

$$\frac{d\bar{q}}{dT} = k_1 C(q_m - \bar{q}) - k_2 \bar{q} \quad (15)$$

No equilíbrio, a derivada se aproxima zero e equação (4) reduz ao modelo de isoterma de Langmuir dada pela equação (3) com  $K = K_1/K_2$ . equação (16) pode ser reescrita como:

$$\frac{d\bar{q}}{dT} = k_1 \left[ C(q_m - \bar{q}) - \frac{\bar{q}}{b} \right] \quad (16)$$

Fazendo a integração das equações 17 e 18, é reproduzida a seguinte análise da solução matemática (Chu, 2010):

$$\frac{dc}{dT} = \frac{3k_f m}{R_p V} (C - c|r = R_p) = -\frac{m}{V} \frac{d\bar{q}}{dT} \quad (17)$$

$$\frac{c}{c_0} = 1 - \frac{\left(\frac{m}{V}\right)(\alpha - \beta)}{c_0} \left\{ 1 - \frac{\exp\left[-\left(\frac{2\beta m}{V}\right)k_1 t\right]}{1 - \left[\frac{\alpha - \beta}{(\alpha - \beta)/(\alpha + \beta)}\right] \exp\left[-\left(\frac{2\beta}{V}\right)k_1 t\right]} \right\} \quad (18)$$

$$\alpha = \frac{1}{2} \left( c_0 \frac{V}{m} + q_m + \frac{1V}{bm} \right) \quad (19)$$

$$\beta = \sqrt{\alpha^2 - c_0 q_m \frac{V}{m}} \quad (20)$$

## 2.2 COLETA DE DADOS DA LITERATURA NA ADSORÇÃO DE PROTEÍNAS EM LEITO FIXO

Para o desenvolvimento deste estudo, realizou-se uma análise comparativa entre os dados experimentais obtidos por Mesquita *et al.* (1997) para gerar a curva cinética e os dados retirados de De Lucena *et al.* (1999) para testar a modelagem das curvas de Langmuir e de ruptura. Essa comparação é essencial para validar a qualidade e a confiabilidade dos dados gerados durante as investigações. Os dados da literatura utilizados neste estudo provêm de duas fontes principais:

- O trabalho de De Lucena *et al.* (1999) relata o uso de dados experimentais para gerar isotermas de adsorção ajustadas pelo modelo de Langmuir e para a obtenção de uma curva de ruptura. A curva de ruptura apresentada no trabalho de De Lucena *et al.* (1999) serve como referência para testar o modelo matemático e a modelagem computacional utilizando Python.
- O estudo de Mesquita *et al.* (1997) explora não apenas os dados experimentais, mas também as modelagens teóricas envolvidas no processo de adsorção. Mesquita *et al.* (1997) analisaram e apresentaram em sua dissertação diversas curvas cinéticas, focando no mecanismo de adsorção e descrevendo-o matematicamente. Suas observações e modelos são extremamente úteis para compreender as dinâmicas de adsorção em detalhes. Foram utilizados dados experimentais da curva cinética retirados do trabalho de Mesquita *et al.* (1997).

Para comparar as curvas de ruptura, os dados obtidos neste trabalho foram confrontados com os dados de De Lucena *et al.* (1999) e Mesquita *et al.* (1997). Essa comparação permite

uma análise visual direta das semelhanças e diferenças entre os conjuntos de dados, facilitando a identificação de tendências e discrepâncias. Da mesma forma, a comparação da curva cinética obtida em nosso estudo com aquelas apresentadas por Mesquita *et al.* (1997) fornece insights valiosos. Isso valida nossos dados experimentais e proporciona uma compreensão mais profunda dos mecanismos de adsorção envolvidos.

A meticulosa comparação é essencial para garantir o rigor científico deste estudo. Ao confrontar os dados com os de estudos anteriores, busca-se corroborar as descobertas e garantir resultados confiáveis.

### 3. RESULTADOS

A primeira etapa envolveu a transcrição dos dados de De Lucena (1999) para uma estrutura adaptável à linguagem de programação Python.

Em seguida, implementou-se o modelo matemático de Langmuir no ambiente Python. O objetivo era recriar as curvas de isotermas e de ruptura, permitindo uma comparação direta e objetiva entre o comportamento previsto pela isoterma de Langmuir e os dados experimentais de De Lucena (1999).

#### 3.1 MODELAGEM DA CINÉTICA DE ADSORÇÃO

Nesta parte, serão apresentados os resultados obtidos para a constante  $K_1$  e o gráfico da curva cinética, para comparação com os dados da literatura estudados. Utilizamos um conjunto de dados experimentais para ajustar o modelo, conforme proposto por Langmuir (1918) e Thomas (1944).

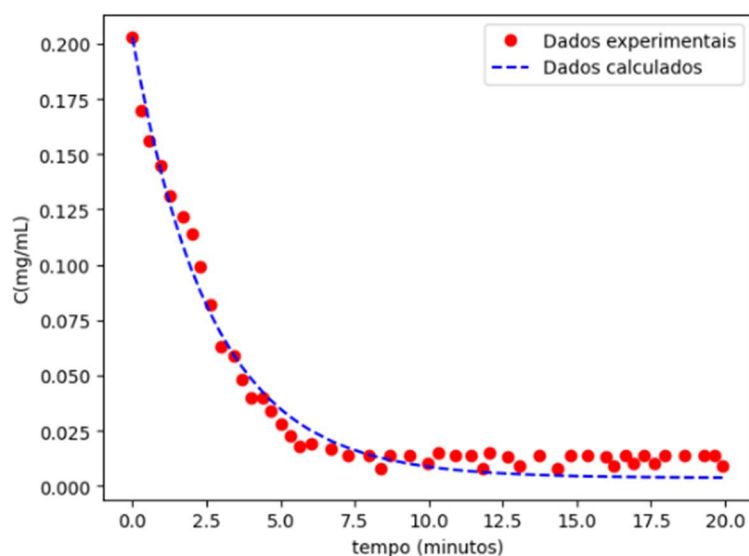


Figura 1 – Curva cinética obtida utilizando a modelagem matemática do Python.

#### 3.2 ISOTERMA DE ADSORÇÃO AJUSTADA PELO MODELO DE LANGMUIR

A Figura 2 mostra o resultado da modelagem computacional no Python. Pelos gráficos, é evidente que o modelo de Langmuir se ajusta de maneira satisfatória aos valores obtidos nos dados experimentais de Lucena (1999). Isso reforça a utilidade deste modelo para descrever o processo de adsorção em estudo.

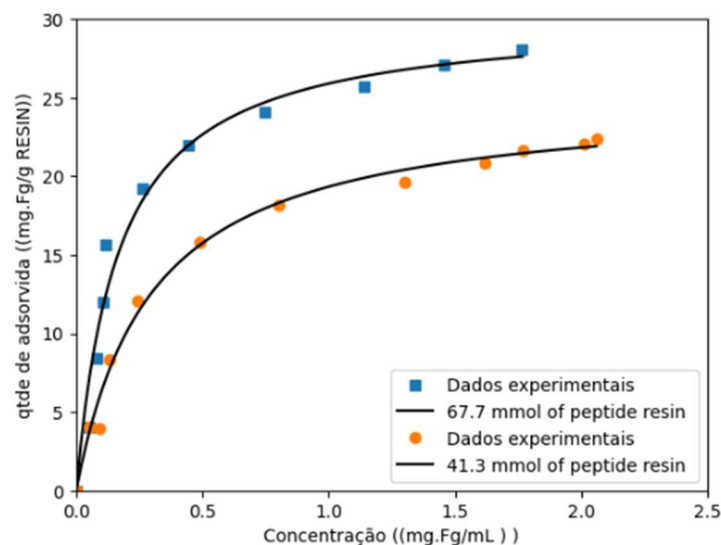


Figura 2 – Isotherma de adsorção ajustada pelo modelo de Langmuir obtida a partir da modelagem utilizando Python.

Os valores obtidos para a capacidade máxima do adsorvente utilizando a modelagem no Python foram de 25,05 mg.Fg/g.res e 30,25 mg.Fg/g.res. Já os valores registrados no estudo de De Lucena (1999) foram de 25,1 mg.Fg/g.res e 30,3 mg.Fg/g.res, demonstrando uma excelente concordância do modelo matemático aplicado no Python.

É relevante ressaltar que as curvas ajustadas, geradas pelo modelo matemático no Python, são consistentes com as curvas de ruptura apresentadas por De Lucena (1999). Essa consistência reafirma a robustez do modelo de Langmuir na descrição da adsorção deste sistema.

### 3.3 MODELAGEM PARA AS CURVAS DE RUPTURA

Nesta seção, são apresentados os resultados da simulação computacional da curva de ruptura para o processo de adsorção, definido por parâmetros experimentais específicos. A simulação foi realizada durante um tempo total de 500 min e com um comprimento de coluna de 5 cm. As constantes utilizadas na simulação são:  $U_0 = 0,075$  cm/min,  $C = 2$  mg/cm<sup>3</sup>,  $q_m = 25,1$  mg/cm<sup>3</sup>,  $K = 0,140$  mg/cm<sup>3</sup>,  $K_1 = 0,281$  e  $K_{fl1} = 0,125$  L/min.

A Figura 3 ilustra a curva de ruptura gerada por essa simulação. Esta curva evidencia a relação entre a concentração na saída da coluna (normalizada pela concentração inicial,  $C/Co$ ) e o tempo de operação. Conforme ilustrado na Figura 3, a curva de ruptura começa na origem (0,0), indicando que, inicialmente, não há soluto na saída da coluna. Com o passar do tempo, a concentração na saída da coluna aumenta até atingir o ponto em que a capacidade de adsorção da coluna está saturada, o que é evidenciado quando  $C/Co$  atinge 1.

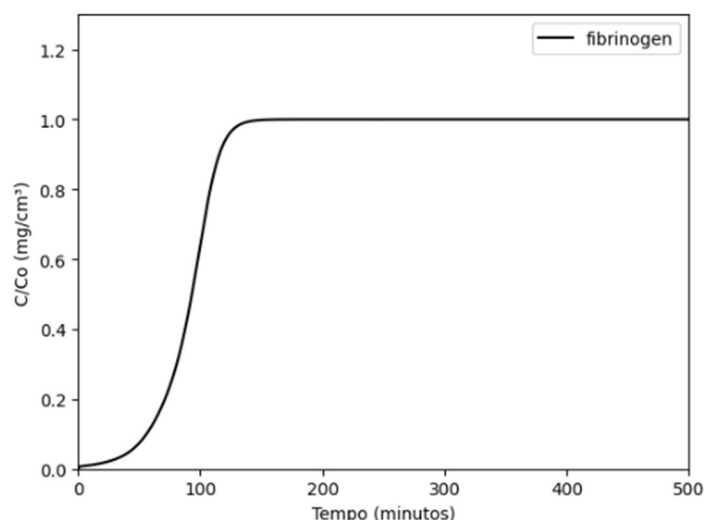


Figura 3 – Curva de Ruptura obtida pela modelagem utilizando Python.

A concordância entre o modelo em Python e os dados experimentais evidencia um excelente resultado para o modelo utilizado no Python na geração das curvas de ruptura. É crucial destacar que a simulação prevê o tempo necessário para que a coluna de adsorção atinja a saturação, fornecendo informações essenciais sobre a eficiência do processo de adsorção e o tempo operacional ideal.

A análise dos resultados mostra que a curva de ruptura apresenta uma ascensão gradual, o que é característico de um processo de adsorção eficaz. Tal comportamento está em consonância com as expectativas teóricas para o modelo empregado e indica que o sistema de adsorção opera eficientemente, com a resina adsorvente aproveitando quase toda sua capacidade de adsorção.

Os resultados são cruciais para compreender o desempenho da coluna de adsorção sob as condições experimentais estabelecidas e fornecem insights valiosos para o projeto e otimização de processos de adsorção em escala real.

#### 4. CONCLUSÃO

É possível inferir, a partir dos resultados apresentados neste estudo, que o modelo proposto é capaz de representar de maneira satisfatória os dados experimentais. Essa afirmação é reforçada pela comparação entre os valores calculados e observados. Adicionalmente, o valor otimizado da constante  $K_1$ , que foi de 0,0876 mL/mg.min, demonstra um excelente ajuste, como pode ser verificado nos gráficos que comparam o modelo ao experimento. Os valores da quantidade máxima adsorvida na fase sólida foram de 25,05 mg.Fg/g de resina e 30,21 mg.Fg/g de resina, aproximando-se de maneira notável dos valores experimentais de 25,1 mg.Fg/g de resina e 30,3 mg.Fg/g de resina, conforme reportado por De Lucena *et al.* (1999).

Os resultados evidenciam que o modelo matemático proposto neste trabalho consegue descrever com precisão as curvas de ruptura experimentais. Nota-se que a adequação do modelo, utilizando um conjunto de dados experimentais e um algoritmo de otimização, produziu parâmetros cinéticos que refletem as características intrínsecas do sistema de adsorção em análise. Dessa forma, este estudo oferece uma contribuição relevante para a compreensão e modelagem de curvas de ruptura em processos de adsorção.

A eficácia do modelo matemático desenvolvido, em conjunto com o otimizador empregado, estabelece um novo padrão para a análise e otimização de processos de adsorção.



Este avanço tem potencial para influenciar de forma positiva tanto pesquisas acadêmicas quanto aplicações industriais.

## AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, por meio do Programa de Excelência Acadêmica (PROEX), a Universidade Tiradentes, ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), à Fundação de Amparo à Pesquisa de São Paulo (FAPESP) e à Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ)

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Arnold, F. H., Blanch, H. W., & Wilke, C. R. (1985). Analysis of Affinity Separations I: Predicting the Performance of Affinity Adsorbers. In *TAe Chemical Engineering Journal* (Vol. 30).
- Boyer, P. M., & Hsu, J. T. (1992). Effects of ligand concentration on protein adsorption in dye-ligand adsorbents. *Chemical Engineering Science*, 47(1). [https://doi.org/10.1016/0009-2509\(92\)80218-2](https://doi.org/10.1016/0009-2509(92)80218-2)
- Chase, H. A. (1984). PREDICTION OF THE PERFORMANCE OF PREPARATIVE AFFINITY CHROMATOGRAPHY. In *Journal of Chromatography* (Vol. 291).
- Chisti, Y. (1999). Bioseparation and Bioprocessing: A Handbook. *Biotechnology Advances*, 17(7). [https://doi.org/10.1016/s0734-9750\(99\)00012-9](https://doi.org/10.1016/s0734-9750(99)00012-9)
- Chu, K. H. (2010). Fixed bed sorption: Setting the record straight on the Bohart-Adams and Thomas models. *Journal of Hazardous Materials*, 177(1–3). <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2010.01.019>
- De Lucena, S. L., Carbonell, R. G., & Santana, C. C. (1999). Peptide affinity chromatography process for adsorption of fibrinogen. In *Powder Technology* (Vol. 101).
- Langmuir, I. (1918). The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum. *Journal of the American Chemical Society*, 40(9). <https://doi.org/10.1021/ja02242a004>
- Mesquita, J., Orientador, C., & Santana, C. C. (1997). UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA ADSORÇÃO DE INSULINA EM RESINA TROCADORA DE ÍON UTILIZANDO LEITOS FIXOS E FLUIDIZADOS.
- Singh, S., Chandra Srivastava, V., Goyal, A., & Deo Mall, I. (2020). Breakthrough modeling of furfural sorption behavior in a bagasse fly ash packed bed. *Environmental Engineering Research*, 25(1). <https://doi.org/10.4491/eer.2018.407>
- Thomas, H. C. (1944). Heterogeneous Ion Exchange in a Flowing System. *Journal of the American Chemical Society*, 66(10). <https://doi.org/10.1021/ja01238a017>

**Abstract.** Adsorption processes are vital in numerous industrial sectors, standing out in separation and purification applications. A precise understanding of adsorption dynamics and kinetics is essential for the efficient design and operation of systems. For a long time, adsorption study methods heavily leaned on experimental data. However, the escalating pursuit of efficiency and accuracy has accelerated the development of trustworthy predictive models. While the Langmuir isotherm sheds light on monolayer adsorption, predicting breakthrough curves, which indicate the adsorbent's saturation point, remains a challenge. This research aims to develop and validate a mathematical model in Python to predict adsorption breakthrough curves. Grounded on data from Lucena (1999) and Mesquita (1997), the work contrasts the kinetic and breakthrough curves produced by the model with experimental data from the literature. The methodology encompasses calibration, validation, and meticulous curve analysis. This procedure not only deepens the comprehension of adsorption mechanisms but can also steer the optimization of industrial processes. The model proficiently forecasted the breakthrough curve, aligning with experimental findings, signifying column saturation. Thus, the model serves as a valuable tool for anticipating the performance of adsorption columns across various industrial applications.

**Keywords:** Adsorption, Breakthrough Curves, Adsorption Kinetics, Langmuir Isotherm