



XXXV SALÃO de INICIAÇÃO CIENTÍFICA

6 a 10 de novembro

Evento	Salão UFRGS 2023: SIC - XXXV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2023
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Ajuste de dados cinéticos de reações químicas
Autor	ISABELLA VARASCHIN BONELLA
Orientador	ELISA BARBOSA COUTINHO

A cinética química estuda a velocidade na qual os reagentes são convertidos em produtos durante as reações químicas. Para isso, os parâmetros cinéticos que regem uma reação como a constante de velocidade k e a ordem de reação n são determinados por meio da análise de dados experimentais e do ajuste de modelos cinéticos. A cinética de uma reação química pode ser acompanhada a partir de diversas propriedades das espécies reacionais que variam conforme a reação avança. Foram estudados exemplos com distintas grandezas experimentais medidas: concentração do reagente A, pressão parcial de A, pressão total do meio reacional e condutividade da solução. Além disso, foi desenvolvida uma equação para obter os fatores de velocidade conhecendo a variação de propriedade reacional genérica, chamada de λ , em função do tempo. Outras expressões mais simples, capazes de descrever o comportamento da reação, também foram obtidas. No *Scilab*, *software* de computação numérica, as equações cinéticas construídas foram aplicadas na resolução do balanço molar de um reator em batelada, em sua forma diferencial. O código programado também utiliza de funções existentes no aplicativo, como “*ode*”, para solução de equações diferenciais, e “*fminsearch*”, usada para minimizar a função objetivo de ajuste de dados para a obtenção dos valores dos parâmetros, a partir de uma estimativa inicial. A soma das distâncias entre os valores experimentais da propriedade medida ao longo do tempo de reação e o valor calculado pelo modelo cinético define a função objetivo. Assim, com o *Scilab* se obtém a solução dessas equações pelo método de integração numérica, permitindo a obtenção dos parâmetros cinéticos mais precisos e possibilitando a resolução de casos mais complexos, junto com a construção de gráficos que permitem a visualização e a comparação entre os dados experimentais e os calculados pelo modelo.