



**REENCONTROS
NOVOS ESPAÇOS
OPORTUNIDADES**

XXXIV SIC Salão Iniciação Científica

**26 - 30
SETEMBRO
CAMPUS CENTRO**

Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Ajuste de dados cinéticos
Autor	JÚLIA OLIVEIRA DEON
Orientador	ELISA BARBOSA COUTINHO

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Bolsista: Júlia Oliveira Deon

Orientadora: Prof.^a Elisa Barbosa Coutinho

No presente trabalho foram avaliados dois métodos de ajuste de dados cinéticos de reações simples: linear e não linear, usando duas ferramentas distintas (editor de planilha eletrônica e software de computação numérica), visando o emprego do recurso mais adequado para a posterior utilização com os dados de produção de biodiesel com baixo teor de glicerol. Os métodos foram testados em quatro conjuntos de dados obtidos de livros-texto de cinética química. Inicialmente foi realizado o ajuste não linear em um software editor de planilha eletrônica (Excel), onde foram construídos gráficos para reações de 1ª ordem ($\ln C_A$ vs t) e de 2ª ordem ($1/C_A$ vs t) onde foram adicionadas linha de tendência, calculando-se a constante cinética, k , pelo coeficiente angular do ajuste, e a concentração inicial, C_{A0} , pelo coeficiente linear da reta. Após, foi realizado o ajuste não linear no mesmo software, que consiste em utilizar equações integradas para obter a concentração calculada pelo modelo cinético para cada ponto experimental e a função objetivo, soma dos erros quadráticos. O processo foi repetido em um software de computação numérica (Scilab) a fim de comparar as ferramentas. Visando automatizar o processo, foi realizado um novo ajuste não linear com Scilab utilizando funções internas que integram a equação diferencial da reação com a ordem especificada. O método não linear se provou ser mais confiável para determinação de ordem cinética, pois faz uso de procedimentos iterativos de estimação baseado nos dados experimentais e calculados. Além disso, o software Scilab apresentou uma gama maior de recursos para integração de equações, o que permite gerar de forma mais rápida testes para diferentes equações cinéticas.