

DIEGO SARMENTO DUNCAN LIMA

**ESTUDO CINÉTICO DAS REAÇÕES FOTOQUÍMICAS DO ACETALDEÍDO PARA A
FORMAÇÃO DO OZÔNIO TROPOSFÉRICO UTILIZANDO REDES NEURAIAS
ARTIFICIAIS**

Monografia apresentada ao Departamento de
Química da Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências para a conclusão do
Curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Prof.Emilio Borges

**VIÇOSA – MINAS GERAIS
2021**

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais por sempre terem me incentivado a estudar e por me apoiarem em todas as minhas decisões.

Agradeço aos amigos de Viçosa e do estado do Rio de Janeiro pela alegria e apoio que me proporcionaram durante todos esses anos.

Agradeço aos meus queridos professores do Departamento de Química que me motivaram a aprender cada vez mais e por sua dedicação em ensinar.

Um agradecimento especial aos meus orientadores durante esse tempo de graduação e que muito me ensinaram sobre ciência, Renata Pereira Lopes, Jean Castro da Cruz e Emilio Borges.

Agradeço à UFV e a Viçosa pelo acolhimento desde a minha chegada até a minha despedida.

Por último, mas não menos importante, agradeço aos membros da banca avaliadora, Daniele Menezes e Edilton de Souza Barcellos, pela disponibilidade e dedicação em lapidar esse trabalho.

“Estamos no início de uma extinção em massa e tudo o que vocês falam gira em torno de dinheiro e um conto de fadas de crescimento econômico eterno. Como ousam?”
Greta Thunberg

RESUMO

LIMA, Diego Sarmiento Duncan, Projeto do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, novembro de 2021. **Estudo cinético das reações fotoquímicas do acetaldeído para a formação do ozônio troposférico utilizando redes neurais artificiais.** Orientador: Prof. Emílio Borges.

A alta concentração de ozônio na troposfera é um grave problema ambiental. Seu elevado poder oxidante causa danos a plantas e à saúde humana. Tendo em vista que sua produção está relacionada com a emissão de gases poluentes na atmosfera, destacando-se os óxidos de nitrogênio (NO_x) e os compostos orgânicos voláteis (COVs), este trabalho teve como objetivo promover um estudo cinético das reações fotoquímicas de formação da molécula de ozônio a partir de um importante poluente atmosférico, o acetaldeído. Nesta perspectiva, determinou-se de forma teórica a constante de velocidade de cada etapa da reação de formação de ozônio troposférico por meio de um método numérico fundamentado na Rede Neural Artificial do tipo Hopfield, modelando matematicamente o sistema como um problema inverso mal-colocado. Apesar dos mecanismos de formação de ozônio envolvendo o acetaldeído já serem bem fundamentados na literatura, suas constantes de velocidade são difíceis de serem determinadas experimentalmente. Desta maneira, desenvolveu-se no presente trabalho uma abordagem alternativa que a partir de dados experimentais para apenas uma das etapas foi possível estabelecer todas as outras constantes de maneira numericamente robusta. Além disso, foram calculadas as energias livres de Gibbs de ativação para cada etapa do mecanismo.

Palavras-chave: poluição, ozônio, COV, reações fotoquímicas, estudo cinético, rede neural artificial.

ABSTRACT

LIMA, Diego Sarmiento Duncan, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Universidade Federal de Viçosa, november, 2021. **Kinetic study of photochemical reactions of acetaldehyde for the formation of tropospheric ozone using artificial neural networks.** Advisor: Prof. Emilio Borges.

The high concentration of troposphere ozone is a serious environmental problem. Its high oxidant power causes damages to vegetation and human health. In view of the ozone production is connected to the emission of polluting gases, mainly nitrogen oxides (NO_x) and the volatile organic compounds (VOCs), this work had the objective to make a kinetic study about the photochemistry reactions and the formation of ozone molecule from an important polluting gas, the acetaldehyde. In this way, the rate coefficients of each step of formation tropospheric ozone has been determined by a numerical method based on Hopfield Artificial Neural Network, mathematically modeling the system in an inverse problem perspective way. Despite the ozone formation mechanisms, that include the acetaldehyde, are already well based in literature, their rate coefficients are hard to be determined. Thus, an alternative approach has been developed in this study from the experimental data of only one step was possible to establish all the others coefficients in a numerically robust way. Furthermore, the activation Gibbs free energies has been calculated for each step of the mechanism.

Keywords: Pollution, ozone, VOC, photochemical reactions, kinetic study, artificial neural network.