E279

IMPLEMENTAÇÃO DE UM SOFTWARE MÉTODO SPLINE MODIFICADO (MSM)

Lucas de O. S. da Fonseca (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. José Roberto Nunhez (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

Hoje em dia as técnicas experimentais proporcionam resultados muito precisos e modelos robustos de obtenção de parâmetros se fazem necessários para que os modelos de ajuste reflitam a boa qualidade de dados experimentais. Quando o modelo que rege determinado fenômeno é conhecido, o método da máxima verossimilhança e variações do mesmo (método da estimativa do erro das variáveis, método dos mínimos quadrados, etc.) são utilizados para a obtenção dos parâmetros do modelo. Na falta de um modelo, funções tipo polinômio e splines são utilizados para o ajuste dos dados. O método spline tem se mostrado sempre superior aos polinômios no ajuste de dados experimentais. O L-CFD (Laboratório de Fluidodinâmica Computacional) já desenvolveu alguns modelos spline, sendo que o power spline (Fluid Phase Equilibria, 220 (2004), pp 171-180), disponível no site (www.feq.unicamp.br/~nunhez) engloba todas as melhorias já implementadas ao método spline modificado. A realização deste trabalho consiste em adicionar ao Método Power Spline a capacidade de trabalhar com funções físicas para situações que vão além de curvas estritamente côncavas, ou convexas, como curvas de azeótropos. Pretende-se também incluir o calculo do desvio padrão dos parâmetros (ou das variáveis ajustadas). Método Spline - Fluido - Azeotrópico