



T1028

PROJETO: PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS E DE TRANSPORTE ATRAVÉS DA REDE NEURAL

Rodrigo Carvalho Mori (Bolsista PIBIQ/CNPq) e Prof. Dr. Roger Josef Zemp (Orientador), Faculdade de Engenharia Química - FEQ, UNICAMP

O projeto visa estudar a utilização de redes neurais artificiais para a previsão de propriedades termodinâmicas e de transporte, utilizando o conceito de contribuição de grupos com os grupos UNIFAC. Como primeira etapa, montou-se uma base de dados com 155 substâncias, com suas propriedades críticas, seus respectivos fatores de compressibilidade e fator acêntrico, viscosidade e condutividade térmica. A seguir, elaborou-se um programa para treinamento e teste utilizando os procedimentos de rede neural do MatLab. Numa etapa posterior, treinou-se a rede, sendo os dados de entrada os grupos UNIFAC de cada substância e a temperatura para as propriedades de transporte, e os dados de saída da rede eram as propriedades. Para a previsão das propriedades, utilizaram-se substâncias que não foram treinadas pela rede, entrava-se na rede com os dados de entrada e a rede fornecia os dados de saída, ou seja, as propriedades. A rede neural mostrou-se eficiente para a previsão das propriedades. Em geral, as propriedades previstas possuíam erros inferiores a 5%, sendo que as moléculas que possuíam todos os seus grupos bem treinados apresentavam erros inferiores a 1%.

Predição - Propriedades - Rede neural