

## Predição de propriedades termodinâmicas de equilíbrio líquido-vapor com uso de redes neurais

### RESUMO

**Lucas Rodrigues da Silva**  
[lucsil@alunos.utfpr.edu.br](mailto:lucsil@alunos.utfpr.edu.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, Paraná, Brasil

**Profa. Dra. Elis Regina Duarte**  
[elisdu@yahoo.com.br](mailto:elisdu@yahoo.com.br)  
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, Paraná, Brasil

**OBJETIVO:** Comprovar a eficiência das redes neurais artificiais (RNA) na predição de propriedades de equilíbrio do sistema binário água-1-butanol. **MÉTODOS:** Obter dados para as faixas de composição do sistema às pressões de 380, 600 e 900 mmHg pelo método NRTL e 760 mmHg via literatura experimental. Dividir o conjunto de dados para treinamento, validação e testes, para o equilíbrio líquido-vapor isobárico. Realizar o desenvolvimento da estrutura da RNA em ambiente MATLAB® variando o número de neurônios da camada oculta até a divergência do erro quadrático médio (MSE), sendo o erro calculado entre o valor dado pela rede e o valor experimental. **RESULTADOS:** A melhor topologia que atende ao sistema em uso foi com 5 neurônios na camada oculta, verificando-se ótima correlação e pouca divergência para a temperatura e uma correlação satisfatória para a fração molar. **CONCLUSÕES:** Foi possível comprovar a eficiência das RNAs na predição de propriedades termodinâmicas para o sistema água-1-butanol, dada a proximidade dos dados calculados com os experimentais. As RNAs mostram-se eficientes quanto a predição de dados estranhos ao treinamento, mas que componham de forma intermediária esse mesmo conjunto.

**PALAVRAS-CHAVE:** Redes neurais artificiais. Propriedades termodinâmicas. Equilíbrio líquido-vapor.

## 1 INTRODUÇÃO

Para dados termodinâmicos de equilíbrio líquido-vapor (ELV) os ensaios laboratoriais por vezes requerem condições de difícil satisfação (pressão e temperatura crítica, por exemplo), além de trazer demora aos estudos científicos devido tempo empreendido em cada ensaio. Via modelagem matemática encontra-se pela frente a complexidade as equações que se aproximam de um sistema real, optando então pela simplificação, por vezes deixando de lado a precisão necessária para diversos problemas.

Estudos em diversas áreas tem mostrado o uso eficiente de redes neurais artificias, ou RNAs, para predizer situações, ações, dentre outras como dados termodinâmicos.

Neste trabalho será discutido e avaliado o uso das RNAs para a predição de dados termodinâmicos de ELV para o sistema binário 1-butanol-água. A escolha desse sistema foi mediante a disponibilidade dos dados experimentais na literatura. Se fará um estudo da melhor topologia mediante a avaliação dos erros frente aos dados esperados.

## 2 METODOLOGIA

Segundo Si-Moussa et al. (2008), para uma escolha adequada de uma RNA aplicada a problemas de engenharia, levam-se em conta os seguintes fatores: arquitetura da rede, topologia da rede (número de camadas ocultas, número de neurônios das camadas ocultas), funções de ativação e algoritmos de treinamento.

A arquitetura de rede utilizada será do tipo Feedforward. A topologia das RNAs será dada por uma camada oculta. Ainda sobre a topologia, o número de neurônios da camada oculta será objeto de avaliação deste trabalho, de modo que satisfaça o problema proposto, consistindo na variação de dois até um número máximo de neurônios onde o erro quadrático médio (MSE) comece a divergir. A função de ativação escolhida foi a sigmoideal e o algoritmo de treinamento será Algoritmo de Levenberg-Marquardt.

A aplicação da rede neural em todas as etapas, criação, divisão dos conjuntos de dados, normalização para a função de ativação, treinamento e testes será desenvolvida no MATLAB<sup>®</sup> (versão R2013b). Sendo gerada uma função respectiva para cada uma das topologias.

O sistema (1)água-(2)1-butanol será avaliado em equilíbrio à pressão constante. Serão os parâmetros da camada de entrada: pressão do sistema (P) e fração molar da água na fase líquida ( $x_1$ ). Os parâmetros de saída serão: temperatura do sistema (T) e fração molar da água na fase vapor ( $y_1$ ).

### 2.1 DIVISÃO DOS CONJUNTOS DE DADOS

Os dados para os conjuntos serão calculados obtidos via modelagem matemática pelo método NRTL (veja Silveira et al. (2016, p. 4)) e experimentais via literatura (veja Stockhardt et al. (1931)). Os dados do conjunto de treinamento e validação serão os calculados e para o conjunto de testes serão os

experimentais. Para garantir que a rede realmente tenha chegado à generalização para o problema determinado, todos os conjuntos e subconjuntos deverão conter dados diferentes (HAYKIN, 2001).

Os dados calculados serão no total de 300, sendo 100 dados cada uma das três pressões diferentes: 380 mmHg, 600 mmHg e 900 mmHg. Eles serão divididos em 70% para o treinamento e 30% para a validação. Os dados experimentais serão no total de 25, sendo referentes à pressão de 760 mmHg.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Foram utilizados inicialmente dois neurônios na camada oculta, configurando a topologia 2x2x2 (dois neurônios na camada de entrada, dois na camada oculta e dois na camada de saída), variando de forma crescente, para a obtenção de melhores resultados, até oito neurônios na camada oculta com a parada determinada pelo aumento (divergência) do MSE.

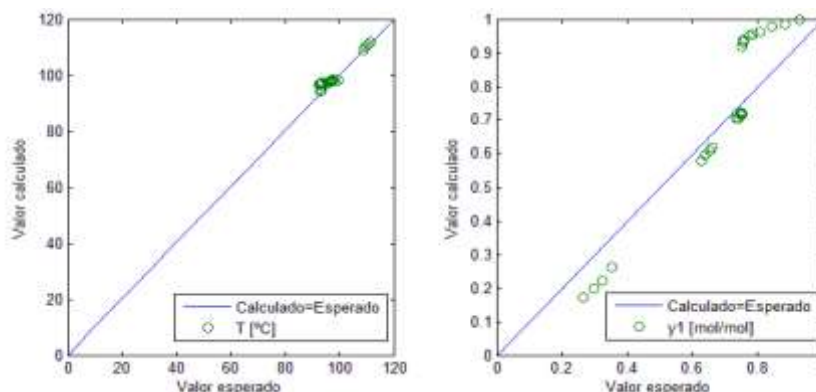
Tabela 1 – Variação dos neurônios na camada oculta e comportamento dos parâmetros MSE e R

Topologia	MSE	R
2x2x2	3,25E+00	9,54E-01
2x3x2	2,59E+00	8,77E-01
2x4x2	2,40E+00	9,13E-01
<b>2x5x2</b>	<b>2,20E+00</b>	<b>9,65E-01</b>
2x6x2	5,94E+00	9,60E-01
2x7x2	3,82E+00	9,54E-01
2x8x2	3,12E+01	9,61E-01

Fonte: Autoria própria (2017).

O parâmetro MSE diz a respeito de quão longe do valor esperado (dados experimentais do conjunto de teste) está o valor calculado pela RNA, já o R diz respeito a dispersão dos dados sendo o ideal igual a 1. Na Tabela 1, foi observado na topologia 2x5x2 o valor de MSE mais próximo a zero e também o valor de R mais próximo a 1, observando-se assim a melhor topologia de RNA para esse conjunto de dados. Acima de 5 neurônios na camada oculta há divergência no MSE, demonstrando uma possível perda de generalização já que o conjunto de testes é desconhecido pela rede que foi treinada com faixas de composição para pressões acima e abaixo da pressão do conjunto de testes.

Figura 1 – Relação entre o valor esperado e o calculado para os parâmetros de saída



Fonte: Autoria própria (2017).

---

#### 4 CONCLUSÃO

Foi possível comprovar a eficiência das RNAs na predição de dados do equilíbrio líquido-vapor (ELV), embora não tenha sido alcançado a idealidade dos parâmetros de avaliação do erro, pois, tanto a temperatura ( $T$ ) como a fração molar ( $y_1$ ), conforme observado na Figura 1, demonstraram grande correlação com os dados experimentais em especial a temperatura do sistema. Certa dispersão nos dados da fração molar devem-se a natureza decimal dos dados, além de que resultados melhores seriam alcançados caso todos os dados de treinamento fossem de natureza experimental.

Conforme abordado por Ribeiro (2005), RNAs são eficientes na predição de dados do ELV quando se busca prever uma faixa de composição intermediária das utilizadas para o treinamento da rede.

## Prediction of thermodynamic properties of liquid-vapor equilibrium using neural networks

### ABSTRACT

**OBJECTIVE:** Verify the efficiency of artificial neural networks (ANNs) in the prediction of equilibrium properties of the water-1-butanol binary system. **METHODS:** Obtain data for composition ranges of the system at pressures of 380, 600 and 900 mmHg by the NRTL method and 760 mmHg via experimental literature. Divide the data set for training, validation and testing, into the isobaric liquid-vapor equilibrium. Perform the development of ANN structure in MATLAB® environment by varying the number of neurons in the hidden layer until divergence of the mean square error (MSE), the error being calculated between the value given by the network and the experimental value. **RESULTS:** The best topology that attends to the system in use was with 5 neurons in the hidden layer, being verified an optimum correlation and little divergence for the temperature and a satisfactory correlation for the molar fraction. **CONCLUSIONS:** It was possible prove the efficiency of RNAs in the prediction of thermodynamic properties for the water-1-butanol system, given then proximity of the data calculated with experimental ones. ANNs are efficient in predicting extraneous data to training but that in an intermediate way composing the same set.

**KEYWORDS:** Artificial neural networks. Thermodynamic properties. Vapor-liquid equilibrium.

---

## AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pela sabedoria de vida, ao auxílio financeiro prestado pela Fundação Araucária para a condução deste trabalho, a UTFPR pelo apoio institucional e a minha orientadora Profa. Dra. Elis Regina Duarte pela instrução no conhecimento e conselhos.

## REFERÊNCIAS

HAYKIN, S. **Redes Neurais: Princípios e Prática**. 2ª edição. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001. 900 p. ISBN 978-85-7307-718-6.

SILVEIRA, C. L.; SALAU, N. P. G. Modeling a batch distillation column for butanol/ethanol/water separation. **XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química**, p. 6, 2016.

SI-MOUSSA, C. et al. Prediction of High-Pressure Vapor Liquid Equilibrium of Six Binary Systems, Carbon Dioxide with Six Esters, Using an Artificial Neural Network Model. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 25, n. 1, p. 183–199, mar 2008. ISSN 0104-6632. Disponível em: <[http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci\\_arttext&pid=S0104-66322008000100019&lng=en&nrm=iso&tlng=en](http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0104-66322008000100019&lng=en&nrm=iso&tlng=en)>.

STOCKHARDT J.S.; HULL C.M.: Vapor-Liquid Equilibria and Boiling-Point Composition Relations for Systems n-Butanol-Water and Isobutanol-Water. **Ind.Eng.Chem. Ind. Ed.** 23 (1931) 1438-1440

RIBEIRO, V. S. **Predição de Equilíbrio Líquido-Vapor de Sistemas Multicomponentes Através de Redes Neurais**. 126 p. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, 2005.

**Recebido:** 31 ago. 2017.

**Aprovado:** 02 out. 2017.

**Como citar:**

SILVA, L. R. et al. Predição de propriedades termodinâmicas do equilíbrio líquido-vapor com uso de redes neurais. In: SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DA UTFPR, 22., 2017, Londrina. **Anais eletrônicos...** Londrina: UTFPR, 2017. Disponível em: <<https://eventos.utfpr.edu.br/sicite/sicite2017/index>>. Acesso em: XXX.

**Correspondência:**

Lucas Rodrigues da Silva  
Rua Coronel Dulcídio, 1901, Centro, Ponta Grossa, Paraná, Brasil.

**Direito autoral:**

Este resumo expandido está licenciado sob os termos da Licença Creative Commons-Atribuição-Não Comercial 4.0 Internacional.

