

I CONGRESSO NACIONAL DE INOVAÇÃO E POPULARIZAÇÃO DA CIÊNCIA

AÇÕES DURANTE A COVID-19

Organizadores

**Janaína de Paula e Silva
Juliana Alves dos Santos Oliveira
Karen Monique Nunes
Ludmila Duarte Boaventura
Otavio Morato de Andrade
Patrícia de Cássia Gomes Pimentel
Rita de Cássia de Oliveira Sebastião
Thales do Valle Moreira
Wladmir Teodoro da Silva**

Ficha Catalográfica

C749a Congresso Nacional de Inovação e Popularização da Ciência – CNIPC (1. : 2020 : Belo Horizonte, MG)

Anais do I CNIPC – Resumo [recurso eletrônico] : ações durante a Covid-19 / I Congresso Nacional de Inovação e Popularização da Ciência, evento online [realizado em] 07, 08 e 09 de outubro de 2020; Organizadores, Janaína de Paula e Silva ... [et al.]. – Belo Horizonte: UFMG/ICEx, 2020.

1 recurso online [320 p.] : pdf.

Evento para divulgação de extensão universitária vinculada ao Programa 1000 Futuros Cientistas do Departamento de Química da Universidade Federal de Minas Gerais.

Inclui bibliografias.

ISBN: 978-65-89362-00-5.

1. Ciência - Congressos. 2. Ciência - Experiências. 3. Ciência - Aspectos sociais. 4. Ciência - Estudo e ensino. 5. Ensino a distância - Congressos. 6. Ciência e tecnologia. I. Universidade Federal de Minas Gerais - Departamento de Química. II. Programa 1000 Futuros Cientistas da Universidade Federal de Minas Gerais (Belo Horizonte, MG). III. Silva, Janaína de Paula e, Org. III. Título.

CDU: 5:371.3(063)

Elaborada por Sérgio Ferreira da Silva – CRB6-2719.

DESAFIOS E PERSPECTIVAS EM ESTUDOS DE CINÉTICA QUÍMICA DESENVOLVIDOS DURANTE A COVID-19

Natália Regina de Souza Araujo^{1*}, Rita de Cássia de Oliveira Sebastião¹

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais – UFMG,
, Belo Horizonte, Brasil
(*nataliarsaraujo@ufmg.br)

Resumo: O grupo de pesquisa "Problemas Inversos e Cinética Química" trabalha com química teórica e desenvolvimento de programas computacionais para tratar dados experimentais de Análise Térmica. A pandemia da Covid-19 fez com que o grupo focasse no desenvolvimento de programas de rede neural artificial para estudo da cinética de decomposição e combustão. Um novo programa utilizando rede neural de Hopfield foi desenvolvido para tratar dados de materiais complexos e foi testado para futuras aplicações tecnológicas.

Palavras-chave: Cinética Química, Análise Térmica, Redes Neurais Artificiais.

INTRODUÇÃO

Estudos na área de cinética objetivam a determinação do tripleto cinético, constituído pelo mecanismo, energia de ativação e fator de frequência das reações. Estudos cinéticos podem ser realizados utilizando-se dados de variação de concentração ao longo do tempo e também, para reações na fase sólida, dados de análise térmica. Em uma análise termogravimétrica, obtêm-se curvas de variação de massa de um material submetido a um programa de aquecimento, em que a variação de massa é determinada ao longo do tempo (Vyazovkin et al. 2011).

O comportamento das curvas experimentais pode ser explicado microscopicamente pelo tripleto cinético, o que configura um problema inverso, pois a partir de dados experimentais macroscópicos, determinam-se parâmetros físico-químicos microscópicos. Por se tratar de dados experimentais, é inevitável a presença de ruídos que fazem com que o problema inverso seja mal colocado, isto é, a solução do problema pode não ser única, não ser contínua ou até mesmo não existir.

Para resolver questões dessa natureza, o Grupo de Pesquisa: "Problemas Inversos e Cinética Química" desenvolve programas computacionais com redes neurais artificiais (RNAs), que são mais robustos a ruídos e problemas mal condicionados, fornecendo maior riqueza de informações físico-químicas, se comparadas a outros métodos. Por exemplo, na metodologia desenvolvida pelo grupo, a rede neural determina a combinação de mecanismos que explicam de forma mais precisa uma curva experimental de decomposição de sólidos (Ferreira et al. 2018).

Parte do trabalho consiste em garantir que a RNA esteja funcionando corretamente. Para isso, no início do processo de elaboração do programa computacional, dados simulados devem ser usados para validação do programa, certificando que os valores retornados e soluções obtidas são coerentes e preservam as condições iniciais.

MATERIAL E MÉTODOS

Combustíveis sólidos podem ser avaliados e classificados comercialmente de acordo com a cinética de perda de massa devido à liberação de voláteis do material quando submetido a um aquecimento. Este processo pode ser descrito matematicamente pela equação integral de Fredholm.

$$g(T) = \int_a^b K(T, E) f(E) dE \quad (1)$$

Em que $g(T)$ são os dados experimentais de variação percentual de massa em função da temperatura, $K(T, E)$ é o *kernel*, que depende da temperatura e energia de ativação, $f(E)$ é a função distribuição de energia de ativação das infinitas reações que envolvem o mecanismo de decomposição deste material complexo.

A determinação de $f(E)$ para um conjunto de dados experimentais de um material traz informações como a categoria de compostos voláteis que são liberados pela amostra e sua pureza. Este estudo cinético é importante para caracterizar um material como combustível sólido e definir para qual aplicação industrial ele pode ser utilizado.

Este trabalho irá focar no programa desenvolvido para descrever cineticamente materiais complexos,

especificamente combustíveis sólidos. Dados simulados com e sem ruído foram tratados utilizando a RNA e o método tradicional de Levenberg-Marquadt (LM)(Araujo et al. 2020).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

As metodologias RNA e LM foram utilizadas para determinar a função distribuição de energia de ativação, $f(E)$, que melhor descreve os dados simulados $g(T)$. A Figura 1 apresenta o erro residual das duas metodologias com dado com ruídos de 0 a 10%. Observa-se que a RNA apresentou um menor erro em todos os testes, mostrando sua robustez frente a ruídos. Já a Figura 2 mostra que o método LM além de apresentar maior erro, teve perda de informação química.

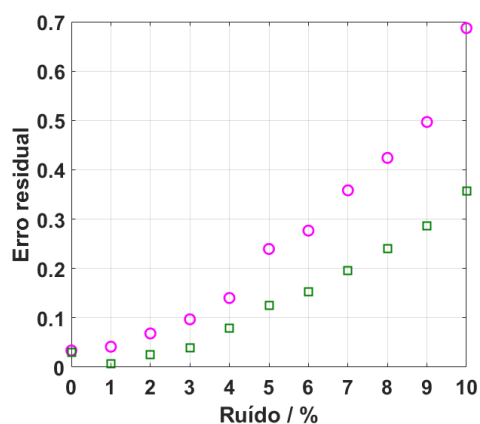


Figura 1. Erro residual de ajuste das metodologias LM (○rosa) e RNA (□verde) para dados simulados com ruído de 0 a 10%.

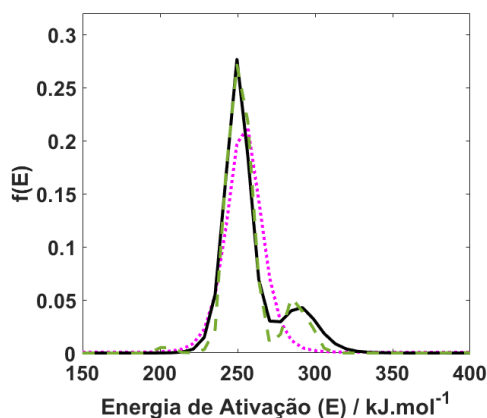


Figura 2. Função distribuição utilizada para gerar os dados simulados (linha preta) e recuperadas por LM (pontilhado rosa) e RNA (tracejado verde) com ruído adicionado de 5%.

Cada pico em $f(E)$ representa uma categoria de voláteis que é liberado durante a decomposição e pode ser lido como o número de eventos neste processo. A partir de valores de ruído de 5%, o método LM não apresenta mais o segundo pico,

fornecendo a informação errada de etapas na cinética do material simulado.

CONCLUSÃO

Depois que a rede é adaptada para o problema de cinética de combustíveis, esta pode ser utilizada para qualquer material com essas características. Verificou-se que a rede apresentou menores erros, comparada ao método LM e conseguiu recuperar toda a informação química mesmo com a adição de ruído.

Para estudar a cinética de materiais, o grupo trabalha com dados experimentais de Análise Térmica, que são obtidos principalmente em parceria com o laboratório de Análise Térmica do Departamento de Química da UFMG. Durante a pandemia da Covid-19 o grupo focou seu trabalho em projetos como o desenvolvimento e aprimoramento de programas computacionais para estudo cinético de reações em materiais complexos, em computadores pessoais com o *software* MATLAB™ (R2010a). Este programa é licenciado e disponibilizado gratuitamente para fins acadêmicos pelo Laboratório de Computação Científica (LCC) para a comunidade da UFMG.

Com a abertura gradual do Laboratório de Análise térmica no Departamento de Química da UFMG, novos materiais de interesse científico, tecnológico e/ou comercial, como fármacos, combustíveis sólidos, polímeros, dentre outros, podem ser analisados com o uso da metodologia robusta que foi desenvolvida no presente projeto.

AGRADECIMENTOS

Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior Brasil (CAPES)-Código 001.

BIBLIOGRAFIA

- Araujo, Bárbara et al. 2020. "Hopfield Neural Network-Based Algorithm Applied to Differential Scanning Calorimetry Data for Kinetic Studies in Polymorphic Conversion." *Journal of the Brazilian Chemical Society*. http://jbcs.sbq.org.br/audiencia_pdf.asp?aid2=7872&nomeArquivo=2019-0642AR.pdf.
- Ferreira, Bárbara D. L. et al. 2018. "Kinetic Thermal Decomposition Studies of Thalidomide under Non-Isothermal and Isothermal Conditions." *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 134(1): 773–82. <http://link.springer.com/10.1007/s10973-018-7568-1>.
- Vyazovkin, Sergey et al. 2011. "ICTAC Kinetics Committee Recommendations for Performing Kinetic Computations on Thermal Analysis Data." *Thermochimica Acta* 520(1–2): 1–19. <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S040603111002152>.