

# CORRELAÇÃO BASEADA EM REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA A PREDIÇÃO DA CONDUTIVIDADE TÉRMICA E DA VISCOSIDADE DO FLUIDO REFRIGERANTE R32

João Roberto Pizzi Heck (Universidade Federal de São Paulo) E-mail: jrheck@unifesp.br

Tiago Dias Martins (Universidade Federal de São Paulo) E-mail: tdmartins@unifesp.br

**Resumo:** Parâmetros termodinâmicos são, muitas vezes, valores de difícil obtenção. Sabendo-se disso, métodos numéricos são ferramentas que se tornam valiosas. Neste trabalho, utilizou-se de redes neurais artificiais (RNAs), que têm se mostrado bastante eficientes na resolução de problemas. Foram empregados dados experimentais do fluido refrigerante R32, em fase líquida, disponíveis na literatura, para realizar o treinamento de RNAs, visando o cálculo da viscosidade ( $\mu$ ) e da condutividade térmica ( $\lambda$ ), em diferentes pressões e temperaturas (que foram as variáveis de entrada). O treinamento foi realizado tanto com RNAs com uma camada intermediária, quanto com duas. Diferentes métodos de otimização, combinação de funções de ativação e número de neurônios foram avaliados. O melhor resultado, nas etapas de treinamento, validação e teste foi obtido com uma RNA de uma camada intermediária e 35 neurônios. O erro médio percentual obtido foi de 0,001 % e 0,074 % para  $\mu$  e  $\lambda$ , respectivamente. Assim, conclui-se que as RNAs se mostram uma ferramenta muito precisa para o cálculo dessas propriedades do fluido R32, a partir de sua temperatura e pressão.

**Palavras-chave:** refrigeração, inteligência artificial, propriedades termodinâmicas.

## ARTIFICIAL NEURAL NETWORK CORRELATION FOR PREDICTION OF THERMAL CONDUCTIVITY AND VISCOSITY OF R32 REFRIGERANT

**Abstract:** Thermodynamic parameters are often values that are difficult to obtain. Knowing this, numerical methods are tools that become valuable. In this work, artificial neural networks (ANNs) were used, which have been shown to be quite efficient in solving problems. Experimental data of the refrigerant fluid R32, in liquid phase, available in the literature, were used to carry out the training of ANNs, aiming at the calculation of viscosity ( $\mu$ ) and thermal conductivity ( $\lambda$ ), at different pressures and temperatures (which were the variables input). Training was performed with both ANNs with one intermediate layer and with two. Different optimization methods, combination of activation functions and number of neurons were evaluated. The best result, in the training, validation and testing stages, was obtained with an ANN of an intermediate layer and 35 neurons. The average percentage error obtained was 0.001% and 0.074% for  $\mu$  and  $\lambda$ , respectively. Thus, it is concluded that ANNs are a very accurate tool for calculating these properties of the R32 fluid, based on its temperature and pressure.

**Keywords:** refrigeration, artificial intelligence, thermodynamic properties

### 1. Introdução

A termodinâmica é um ramo da física que busca estudar os comportamentos da energia em trânsito em forma de calor e trabalho, e como essa energia pode ser utilizada para o uso em movimento e geração de outras formas de energia (SMITH *et al.*, 2005). Para a indústria, esses conceitos são importantes, uma vez que estão ligados diretamente aos seus valores financeiros, e a sua aplicação.

A viscosidade é a resistência que um fluido encontra em fluir, sendo basicamente o atrito do fluido com ele mesmo (BERTULANI, 1999). Seu conhecimento é importante

para as mais diversas aplicações, podendo ser citada, por exemplo, engenharia mecânica, para o dimensionamento de motores e seus óleos lubrificantes.

A condutividade térmica, é a capacidade de um certo material em conduzir energia térmica. Estruturas feitas com materiais de alta condutividade térmica conduzem energia térmica de forma mais rápida e eficiente do que estruturas análogas feitas com materiais de baixa condutividade térmica. Em problemas de refrigeração industrial, o conhecimento dos valores de condutividade térmica é de grande importância, pois essa variável é utilizada nos balanços de energia pertinentes (RATNA, 2012).

Por isso é de suma importância, prever tais comportamentos termodinâmicos, como a viscosidade ( $\mu$ ) e condutividade térmica ( $\lambda$ ) com certa precisão (GHADERI *et al.*, 2017), buscando cada vez mais modelos matemáticos com poder de generalização alto. Isso se dá, pois é importante saber como as mudanças de temperatura e pressão influenciam diretamente seu comportamento (MELO *et al.*, 2020; BRAGA *et al.*, 2021; OTTAIANO *et al.*, 2021).

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) têm se mostrado cada vez mais eficientes para a resolução deste tipo de problema, uma vez que a ideia por trás deste sistema é de fato simular uma rede neural biológica, parecida com a do ser humano. Com isso, ela é capaz de aprender com exemplos, e pode resolver problemas complexos com uma grande precisão (HAYKIN, 2005).

As RNAs já foram utilizadas amplamente para o cálculo de propriedades termodinâmicas e diversos trabalhos mostraram que equações de alta precisão podem ser obtidas (GOYAL; GARIMELLA, 2019; FARZANEH-GORD *et al.*, 2020; MELO *et al.*, 2020; YANG *et al.*, 2020; BRAGA *et al.*, 2021; OTTAIANO *et al.*, 2021; PILARZ *et al.*, 2022).

Desta forma, neste trabalho, foram empregadas RNAs para se obter uma única equação para o cálculo de  $\mu$  e da  $\lambda$  em função de temperatura e pressão do fluido refrigerante R32 (que é amplamente empregado indústria), em estado líquido.

### 1.1.Fluido Refrigerante R32

O R-32 é um hidrofluorcarboneto (HFC). Esse tipo de fluido foi desenvolvido nos anos 1980 como uma alternativa aos gases que prejudicam a camada de ozônio. O R-32 é um HFC puro, que apresenta zero empobrecimento na camada de ozônio e baixo potencial de aquecimento atmosférico. Ele pode ser utilizado em estado puro em pequenos equipamentos novos de ar condicionado e refrigeração, e também tem sido geralmente utilizado como componente em diferentes misturas HFC. O R-32 é adequado para novos equipamentos especialmente projetados para o R-32, em aplicações que normalmente usariam o R-410A, que é altamente prejudicial para a camada de ozônio (CORREA, 2020).

### 1.2.Redes Neurais Artificiais

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) surgiram, com a intenção de simular um neurônio biológico, uma vez que em sua essência ambos tem por objetivo, a capacidade de aprendizagem com exemplos.

Um neurônio biológico passou a ter seu funcionamento melhor compreendido, apenas após a década de 40, quando sua funcionalidade foi atribuída como parte elementar no

funcionamento do sistema nervoso central. Sua estrutura é composta um corpo celular, pelo axônio, pelos dendritos e sinapses. Para que ocorra uma conexão sináptica no cérebro humano, é necessário que a soma das energias, vindo de outros neurônios, somadas, seja suficiente para quebrar uma barreira limiar. Se assim foi feito, é gerado um impulso por este neurônio. Uma vez que o sistema nervoso central humano é composto por dezenas de bilhões de neurônios, o mesmo foi capaz de se tornar apto ao ato de ganhar experiências e aprender e a reagir a determinados estímulos recebidos (BRAGA *et al.*, 2007).

A estrutura genérica de um neurônio artificial pode ser vista na Figura 1, podendo-se observar a sua semelhança com um neurônio biológico. As redes neurais artificiais foram desenvolvidas na década de 40, pelo neurofisiologista Warren McCulloch, do Massachusetts Institute of Technology, e pelo matemático Walter Pitts, da Universidade de Illinois. O trabalho envolvia um modelo de resistores variáveis e amplificadores, para simular as conexões sinápticas de um neurônio biológico (BRAGA *et al.*, 2007)

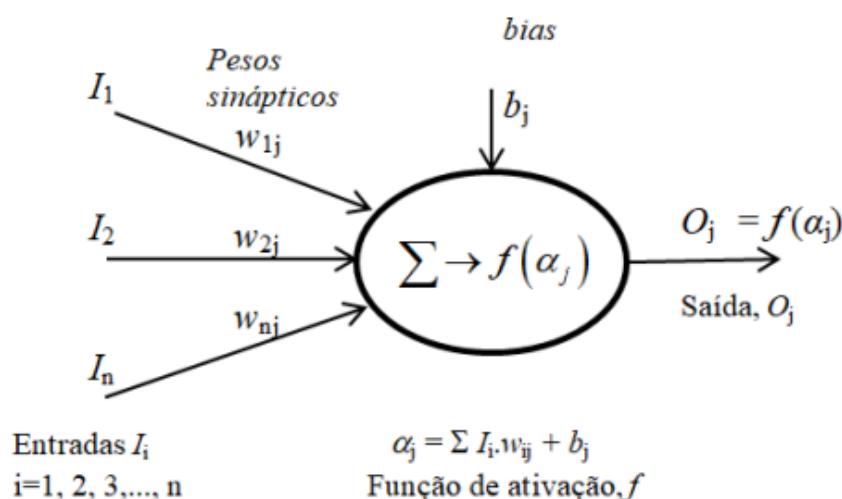


Figura 1 – Modelo esquemático de um neurônio artificial. Fonte: Martins (2018)

Como o neurônio artificial surgiu com o objetivo principal de simular a maneira com a qual o neurônio biológico funciona, sua forma de operação também deve ser similar. Assim, a informação,  $I_i$ , advinda do neurônio anterior, chega ao neurônio  $j$  através das sinapses. Essas ligações são caracterizadas por valores numéricos, os pesos sinápticos,  $w_{ij}$ , que ponderam a importância das entradas e são determinados na etapa de aprendizado da RNA (Figura 1). Cada neurônio também é diferenciado a partir de outro parâmetro, chamado *bias*, ampliando a forma com que as soluções são feitas, e garantindo também uma maior forma de generalização, adequando a estrutura neuronal ao problema em questão (BRAGA *et al.*, 2007).

## 2. Métodos

Inicialmente, foi necessário coletar os dados para realizar o ajuste. Para isso, se utilizou o banco de dados do National Institute of Standards and Technology (NIST – Lemmon *et al.*, 1998), disponível online. Para a obtenção das RNAs, coletaram-se dados do fluido refrigerante R32, para as isotermas de 150 K, 183 K, 210 K, 218 K, 253 K, 288 K, 324 K, 347,74 K. Posteriormente foi realizada uma etapa de simulação, e para isso

utilizou-se as temperaturas de 210 K, 230 K, 260 K e 330 K. As faixas de pressão utilizadas consideravam apenas os valores para os quais o fluido refrigerante se manteve em fase líquida, começando na menor pressão possível (a pressão de saturação para a respectiva temperatura), e chegando a 70 MPa, variando de 1 MPa. Na Tabela 1 é apresentada a faixa de pressão considerada para cada temperatura, bem como a respectiva faixa de valores de viscosidade e condutividade térmica.

Tabela1 – Faixas de valores das variáveis de entrada e saída consideradas para a obtenção das RNAs.

Temperatura(K)	Pressão(MPa)	Viscosidade(uPa.s)	Condutividade(W/(m.K))
150	0,01 – 43,01	867,1 - 1075,6	0,23765 - 0,24627
183	0,21751 - 69,218	472,59 - 646,33	0,2176 - 0,24012
218	0,08451 - 69,085	288,44 - 404,57	0,19026 - 0,22297
253	0,40347 - 69,403	188,97 - 281,93	0,16147 - 0,20385
288	1,2754 - 69,275	127,59 - 209,95	0,13365 - 0,18497
324	3,2033 - 69,203	82,242 - 163,15	0,10639 - 0,1674
347,74	5,3706 - 69,371	50,349 - 141,2	0,091174 - 0,15721

Após coletados os dados de viscosidade e condutividade térmica, foram inseridos os mesmos no software para o treinamento das RNAs. As variáveis de entrada foram a pressão (MPa) e a temperatura (K). As variáveis de saída foram a condutividade térmica (W/(m.K)) e a viscosidade (uPa.s). Todas as simulações foram realizadas utilizando-se o software Matlab©.

Então, diversas configurações de RNAs foram treinadas. A etapa de obtenção consistiu nas etapas de treino, teste e validação, em que os dados coletados foram divididos aleatoriamente na proporção de 70 %, 15 %, e 15 %, respectivamente. Foram testadas RNAs com uma e duas camadas intermediárias.

Por não se ter uma metodologia concreta sobre o número exato de neurônios que se deve ter nas camadas, o número de neurônios da camada intermediária (ou camada oculta), foi variado entre 5 e 40. Esse número foi utilizado tanto para o algoritmo de uma camada oculta, quanto para o de duas.

Para o treinamento das RNAs, as opções escolhidas dentre os algoritmos de otimização disponíveis foram: gradiente conjugado *backpropagation* (SCG), Levenberg-Marquadt (LM), Powell-Beale (CGB), e Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana (BR). Avaliou-se, também, diversas combinações de funções de ativação visando-se determinar o melhor modelo. Optou-se por utilizar as funções de ativação sigmoideal (logsig), linear positiva (poslin), tangente hiperbólica (tansig) e linear (purelin) em todas as camadas. Os treinamentos foram realizados de modo a fazer uma combinação entre essas funções nas camadas intermediárias e de saída.

Para o treinamento das RNAs, a função objetivo ( $F_{obj}$ ) minimizada foi média dos erros quadráticos, como pode ser visto na Equação (1):

$$F_{obj} = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n (h_{j,i,exp} - h_{j,i,rede})^2 \quad (1)$$

no qual,  $n$  é o número de pontos experimentais,  $h_{j,i,exp}$  é o valor real,  $h_{j,i,rede}$  é o valor fornecido a RNA. O somatório em  $i$  corresponde ao número de variáveis de saída, que neste caso eram duas. Após a etapa de obtenção das RNAs,

selecionou-se um modelo que apresentasse os menores erros percentuais e maiores coeficientes de correlação de Pearson ( $\rho$ ). Uma vez determinada a melhor estrutura, para fazer a checagem de sua interpolação, algumas isothermas foram escolhida dentro das faixas utilizadas para o treino. A pressão então, foi variada da pressão de saturação até a pressão máxima utilizada para o treino, com incrementos de 0,01 MPa. A Tabela 2 mostra os valores de T e P selecionados, bem como a faixa de valores para as variáveis de saída.

Tabela 2 – Faixas de valores das variáveis de entrada e saída consideradas para a simulação das RNAs.

Temperatura (K)	Pressão (MPa)	Viscosidade (uPa.s)	Condutividade (W/(m.K))
210	0,054345- 69,054	320,29 - 445,08	0,19675 - 0,22719
230	0,15346 - 69,153	248,3349 - 354,06	0,18039 - 0,21647
260	0,52158 - 69,522	174,5 - 264,71	0,15578 - 0,20005
330	3,6687 - 69,669	75,175 - 157,46	0,1018 - 0,16499

### 3. Resultados e Discussão

Após a RNA terminar seu treinamento, validação e teste, o algoritmo é analisado, e são usados alguns critérios de avaliação, para saber qual foi o melhor algoritmo treinado dentre todas as configurações utilizadas. No total foram treinadas mais de 2600 estruturas de RNAs diferentes. Nas Tabelas 3 e 4 são apresentados os resultados obtidos com os treinamentos realizados, que serão discutidos para a escolha da melhor RNA. As estruturas estão apresentadas em ordem crescente de erro médio. Para isso, será levado em consideração:  $F_{obj}$  e o  $\rho$  no treinamento, validação e teste.

Tabela 3 – 15 melhores Redes Neurais treinadas com algoritmo de uma camada, usando a média dos erros das etapas do treino como parâmetro.

Estrutura	Algoritmo de Otimização	Função de ativação da camada oculta	$F_{obj}$ Treinamento	$F_{obj}$ Validação	$F_{obj}$ Teste	Erro médio (%)
2-35-2	BR	Tansig-Purelin	1,377E-02	2,270E-05	5,040E-06	4,091E-02
2-20-2	LM	Tansig-Purelin	1,641E-02	6,837E-05	1,765E-05	6,169E-02
2-25-2	BR	Tansig-Purelin	1,404E-02	2,089E-04	8,573E-06	7,061E-02
2-20-2	BR	Tansig-Purelin	1,324E-02	1,778E-05	2,787E-05	9,452E-01
2-30-2	BR	Tansig-Purelin	3,167E-05	3,033E-03	1,439E-05	9,651E-01
2-30-2	LM	Tansig-Purelin	5,213E-03	1,896E-05	3,110E-06	1,010E-01
2-35-2	LM	Tansig-Purelin	5,191E-05	8,051E-06	8,806E-02	1,067E-01
2-25-2	LM	Tansig-Purelin	2,564E-05	7,512E-06	1,168E-05	1,539E-01
2-15-2	BR	Tansig-Purelin	1,444E-02	1,661E-05	1,400E-05	1,923E-01
2-10-2	BR	Tansig-Purelin	3,595E-05	8,222E-05	1,391E-01	2,426E-01
2-15-2	LM	Tansig-Tansig	8,355E-03	4,201E-01	5,927E-03	4,465E-01
2-15-2	LM	Tansig-Purelin	6,265E-03	6,773E-05	2,277E-04	6,091E-01
2-35-2	BR	Tansig-Tansig	1,380E-02	1,227E-02	9,247E-04	6,377E-01
2-15-2	BR	Tansig-Tansig	3,780E-02	3,160E-03	2,613E-02	6,377E-01
2-15-2	BR	Tansig-Purelin	3,996E-05	2,912E-05	2,498E-05	7,271E-01

Observa-se pela Tabela 3, que o aumento de neurônios na camada oculta, nem sempre leva a uma diminuição no valor da  $F_{obj}$ . Isso é comum na obtenção de RNAs e é uma consequência da aleatoriedade desse processo.

A Tabela 4 apresenta as 15 melhores RNAs com duas camadas ocultas. Uma vez que a sua complexidade na hora de se executar as etapas é maior, já que possui uma camada oculta a mais, o tempo para seu treinamento também aumentou, cerca de duas vezes

mais que o de uma camada apenas. Vale ressaltar também, que as melhores 15 estruturas, apresentam como algoritmo de otimização em todos os casos, o LM, e como ativação na camada de saída, a função purelin.

Observando-se as tabelas 3 e 4, podemos observar como foi o comportamento das  $F_{obj}$ , durante as 3 etapas de construção da rede, e no caso das RNAs de duas camadas, o comportamento aleatório da  $F_{obj}$  em função do tamanho da RNA se repete.

É de suma importância ressaltar que por não ser o fator decisivo, nota-se que não há uma ordem crescente ou decrescente nas colunas da tabela. O motivo de não se escolher esse resultado como fator decisivo, está no sobreajuste da rede (BRAGA *et al.*, 2007). Uma vez que ela escolhe um bom resultado, acaba ficando presa em um mínimo global, com isso, ela acaba ficando “viciada” nesse mínimo, e como sua configuração não permite uma ‘piora’ em seu treino, ela acaba por não progredir mais.

Tabela 4 – 15 melhores Redes Neurais treinadas com algoritmo de uma camada, usando o erro médio das etapas como parâmetro. Todos os treinamentos realizados com algoritmo LM.

Estrutura	Função de ativação das camadas ocultas	$F_{obj}$ Treinamento	$F_{obj}$ Validação	$F_{obj}$ Teste	Erro médio (%)
2-30-20-2	Logsig-Tansig	6,230E-05	3,128E-05	3,589E-04	6,033E-02
2-30-15-2	Logsig-Logsig	1,442E-02	9,070E-06	1,523E-06	6,136E-02
2-5-15-2	Tansig-Tansig	7,775E-03	2,235E-05	4,637E-06	6,292E-02
3-30-15-2	Logsig-Tansig	1,773E-04	2,939E-02	9,935E-06	7,766E-02
2-20-20-2	Tansig-Tansig	1,296E-02	3,425E-05	2,118E-05	8,041E-02
2-5-20-2	Tansig-Logsig	7,675E-03	2,019E-05	1,403E-06	8,761E-02
2-25-10-2	Logsig-Logsig	1,045E-04	4,731E-05	1,223E-05	8,905E-02
2-25-20-2	Tansig-Tansig	7,906E-05	3,648E-04	3,167E-05	9,040E-02
2-10-20-2	Logsig-Tansig	2,137E-05	2,275E-02	5,106E-06	9,203E-02
2-25-20-2	Tansig-Logsig	6,385E-03	5,672E-05	1,914E-06	9,205E-02
2-30-20-2	Tansig-Logsig	6,420E-05	1,991E-02	4,907E-06	9,497E-02
2-15-20-2	Tansig-Logsig	1,161E-02	2,683E-05	1,695E-06	9,568E-02
2-25-15-2	Tansig-Logsig	9,414E-05	3,024E-05	3,819E-06	9,919E-02
2-20-20-2	Logsig-Logsig	3,467E-05	2,143E-02	6,552E-05	1,010E-01
2-15-15-2	Logsig-Logsig	1,280E-04	9,915E-06	2,091E-06	1,011E-01

Outra observação importante está na diferença do melhor algoritmo achado para uma camada e o de duas camadas, uma vez que o de duas camadas se mostrou superior em minimizar tal função, obtendo valores muito menores que o de uma camada.

Ressalta-se que o aproveitamento da RNA de 2 camadas, foi semelhante ao de uma camada, porém, ressaltar-se à complexidade de seu treinamento, tanto na ocupação de processamento durante o treino, tanto no aumento do tempo para se realizar tal fato. Após a análise de dados feitos através das Tabelas 3 e 4, escolheu-se a estrutura com menor erro médio, sendo essa a de uma camada.

Para essa RNA, o erro médio percentual foi de 0,001 % e 0,074 % para a viscosidade e a condutividade térmica, respectivamente na etapa de teste, o que confirma a alta precisão do modelo obtido. Além disso, os valores de  $\rho$  foram iguais a 0,999. Para avaliar a distribuição dos erros, um histograma foi construído e é apresentado na Figura 2, onde se pode notar que boa parte dos erros se encontram muito próximos de zero.

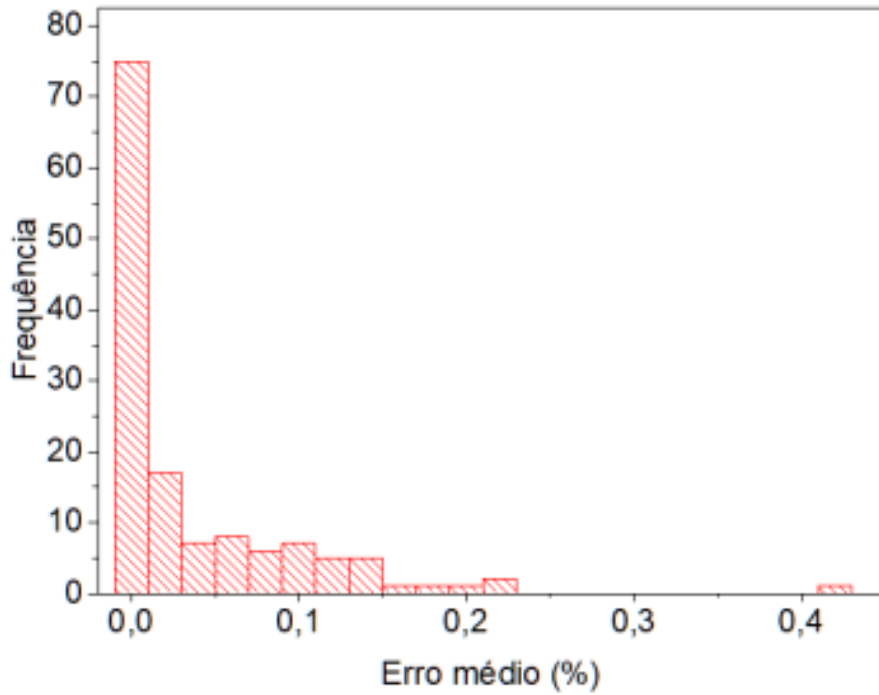


Figura 2 – Distribuição do erro médio percentual para as variáveis de saída.

Considerando a estrutura 2-35-2-tansig-purelin, foram construídos gráficos para as condições simuladas, e que não eram conhecidas pela RNA. Os resultados são apresentados nas Figuras 3 e 4. Pode-se notar, nessa Figura, que a RNA foi capaz de simular as condições de T e P com bastante precisão, corroborando com os bons resultados apresentados nas etapas de obtenção.

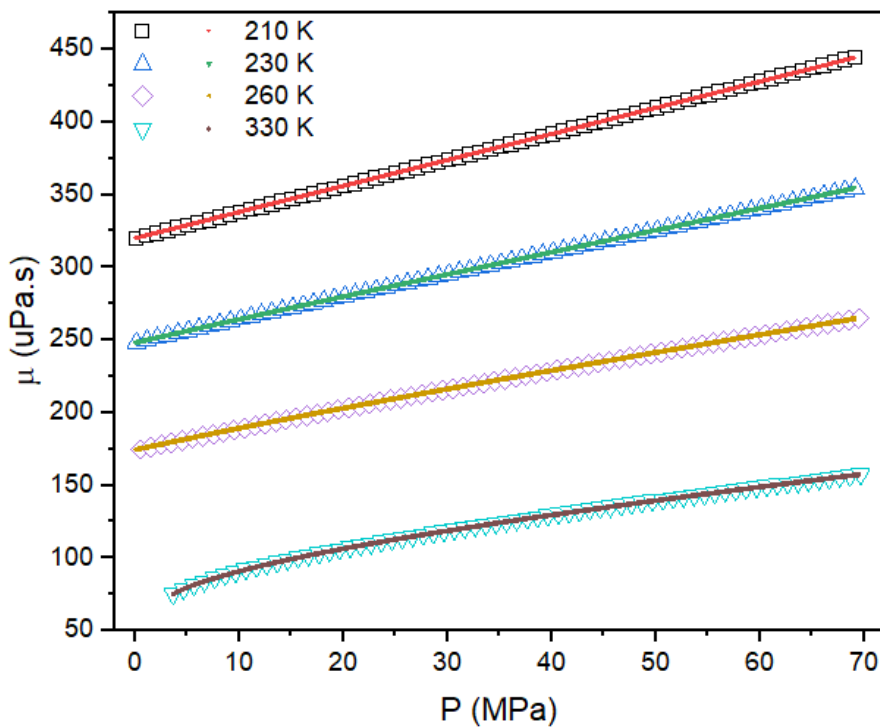


Figura 3 – Gráfico de Viscosidade x Pressão para as temperaturas simuladas pela RNA 2-35-2.

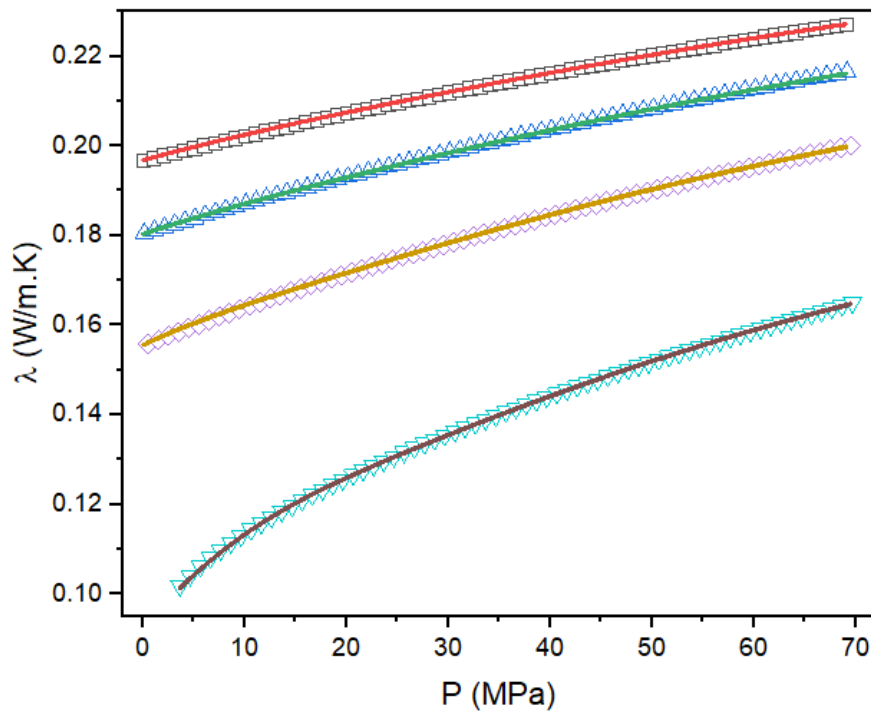


Figura 4 – Gráfico de Condutividade Térmica x Pressão, para as temperaturas simuladas pela RNA 2-35-2.

#### 4. Conclusão

Pode-se observar que a partir dos estudos feitos sobre o fluido R32, na fase líquida, utilizando Redes Neurais Artificiais como método para generalização, do poder de generalização das RNAs para prever efeitos termodinâmicos da condutividade térmica e da viscosidade nas faixas de temperaturas com a variação de pressão, resultados muito satisfatórios. A rede neural provou seu valor, uma vez que tais parâmetros são de difícil obtenção, principalmente por meio de equações já existentes. Os erros obtidos foram baixíssimos, e a estrutura treinada, considerando outras estruturas maiores, superou muito o esperado, tendo em vista sua menor complexidade. O algoritmo também mostrou seu poder de interpolação de dados, com altas capacidades, uma vez que os gráficos gerados são feitos a partir dos dados experimentais, e também dos dados obtidos a partir da interpolação da RNA.

#### Referências

BERTULANI, C. *Viscosidade, turbulência e tensão superficial*. Disponível em: [www.if.ufrj.br/~bertu/fis2/hidrodinamica/viscosidade.html](http://www.if.ufrj.br/~bertu/fis2/hidrodinamica/viscosidade.html). Acesso em: 10/10/2022, 1999.

BRAGA, A.P.; CARVALHO, A.P.L. & LUDERMIR, T.B. *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*. 2ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2007.

BRAGA, M.B.; MARTINS, T.D.; LOUZI, V.C.A.; GIANNELLA, R.L.; FUJITA, V.K. & ROCHA, S.C.S. *Spouted bed drying of milk-blackberry mixture: Material thermal properties and process energy aspects*. Journal of Food Process Engineering, Vol. 44, n. 5, p. e13678, 2021.



CORREA, Y. *Gás Refrigerante R-32: Ar-Condicionado e Aquecimento Global*. Disponível em: [www.webarcondicionado.com.br/gas-refrigerante-r-32-ar-condicionado-e-aquecimento-global](http://www.webarcondicionado.com.br/gas-refrigerante-r-32-ar-condicionado-e-aquecimento-global). Acesso em: 16/12/2022, 2020.

FARZANEH-GORD, M.; MOHSENI-GHARYEHSABA, B.; ARABKOOHSAR, A.; AHMADI, M.H. & SHEREMET, M.A. *Precise prediction of biogas thermodynamic properties by using ANN algorithm*. *Renewable Energy*, Vol. 147, p. 179-191, 2020.

GHADERI, F.; GHADERI, A.H.; GHADERI, N. & NAJAFI, B. *Prediction of the Thermal Conductivity of Refrigerants by Computational Methods and Artificial Neural Network*. *Frontiers in Chemistry*, Vol. 5, n. 99, 2017.

GOYAL, A. & GARIMELLA, S. *Computing thermodynamic properties of ammonia–water mixtures using artificial neural networks*. *International Journal of Refrigeration*, Vol. 100, p. 315-325, 2019.

HAYKIN, S. *Neural Networks – A Comprehensive Foundation*. Delhi: Prentice Hall, 2005.

LEMMON, E.W.; MCLINDEN, M.O. & FIEND, D.G. *Thermophysical Properties of Fluid Systems in NIST Chemistry Web Book*. In: P. J. Linstrom e W. G. Mallard. NIST Standard Reference Database, v. 69 , 1998.

MARTINS, T.D. *Predição da recorrência de tromboembolismo venoso via redes neurais artificiais*. Universidade Estadual de Campinas, Campinas/SP, 2018.

MELO, E.B.; OLIVEIRA, E.T. & MARTINS, T.D. *A neural network correlation for molar density and specific heat of water: Predictions at pressures up to 100 MPa*. *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 506, p. 112411, 2020.

OTTAIANO, G.Y.; DA CRUZ, I.N.S.; DA CRUZ, H.S. & MARTINS, T.D. *Estimation of vaporization properties of pure substances using artificial neural networks*. *Chemical Engineering Science*, Vol. 231, p. 116324, 2021.

PILARZ, J.; POLISHUK, I. & CHORAŻEWSKI, M. *Prediction of sound velocity for selected ionic liquids using a multilayer feed-forward neural network*. *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 347, p. 118376, 2022.

RATNA, D. 3 - *Thermal properties of thermosets*. In: Q. Guo. *Thermosets*, v. 2012.

SMITH, J.M.; VAN NESS, H.C. & ABBOTT, M.M. *Introduction to chemical engineering thermodynamics*. McGraw-Hill, 2005.

YANG, J.; KNAPE, M.J.; BURKERT, O.; MAZZINI, V.; JUNG, A.; CRAIG, V.S.J.; MIRANDA-QUINTANA, R.A.; BLUHMKI, E. & SMIAŁEK, J. *Artificial neural networks for the prediction of solvation energies based on experimental and computational data*. *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 22, n. 42, p. 24359-24364, 2020.