

Sessão 4

Estatística

021

MODELAGEM MATEMÁTICA NA POLIMERIZAÇÃO DE OLEFINAS. *Angela Maria Wilges, Rubén Panta Pazos (orient.)* (UNISC).

Neste trabalho foram estudados modelos matemáticos para a reação química envolvendo equações algébricas e sistemas de equações diferenciais. Os resultados preliminares da análise de regressão sobre os parâmetros envolvendo o rendimento M em relação a outras variáveis preditoras. Na polimerização de eteno, a análise multilinear em relação ao rendimento M se escreve como na fórmula(1.1) onde a_0 representa o termo independente e a_i são os coeficientes da variável x_i . Para um modelo não linear simples de tipo polinomial, uma opção é uma representação quadrática, como na fórmula(1.2)

$$(1.1) M = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i x_i, (1.2) M = a_0 + \sum_{i=1}^n b_{ij} x_i x_j.$$

Do ponto de vista experimental a determinação dos coeficientes b_{ij} não é uma tarefa simples, e deve-se ajustar montando coeficientes mediante a análise da correlação de um número baixo de variáveis. As primeiras tentativas resultam o rendimento da reação de polimerização, mas o efeito da temperatura é amenizado (pelo fato que a solubilidade do monômero no meio diluente diminui quando aumenta a temperatura), e o rendimento pode ser representado na forma simplificada

$$M = k_0 \left(1 + a_1 \left(\frac{Al}{M} \right) + a_2 \left(\frac{Al}{M} \right)^2 + a_3 \left(\frac{Al}{M} \right)^3 + a_4 \left(\frac{Al}{M} \right)^4 \right) \cdot M \cdot P$$

Neste trabalho determinam-se os parâmetros da análise de regressão para um modelo quadrático com uma e duas variáveis preditoras mediante um sistema de computação algébrica e também com uma planilha eletrônica.