

Titularidade da Patente: UNIFAL-MG; FAPEMIG
Número da PI: BR 51 2022 000284-1
Data de Depósito: 09/02/2022
Status: Patente Depositada

PROBLEMA DE MERCADO

O programa é voltado para a modelagem da solubilidade em sistemas multicomponentes quando não há a formação de soluções sólidas. Os interessados em gerar parâmetros de modelos termodinâmicos a partir de dados experimentais, bem como os interessados em avaliar parâmetros previamente ajustados para a representação da solubilidade de sistemas podem utilizar a ferramenta. De forma mais ampla, usuários interessados em estudar a solubilidade em sistemas multicomponentes a partir de fundamentos termodinâmicos podem se beneficiar do programa.

SOLUÇÃO PROPOSTA

Ajustar parâmetros de modelos termodinâmicos, a partir de dados experimentais, para o cálculo da temperatura de solubilidade de componentes em soluções para sistemas multicomponentes, quando não há a formação de soluções sólidas; calcular as temperaturas de solubilidade para sistemas multicomponentes quando não ha formação de solução sólida a partir de valores de entrada e de parâmetros previamente ajustados.

DIFERENCIAIS

Utilização da interface de planilhas eletrônicas, apresentando as seguintes vantagens: não requerimento do uso de arquivos de entrada de dados ou saída de resultados em separado, uma vez que estas são feitas na própria aba central da planilha; não requerimento de conhecimento de programação, exigindo apenas o conhecimento em planilhas eletrônicas; facilidade de organização dos dados e resultados, especialmente em grande quantidade; facilidade de importação de dados e de exportação dos resultados para outros programas, bastando que tenham compatibilidade com o formato de tabela do Microsoft Excel; facilidade de processamento dos resultados por já estarem disponíveis em uma planilha eletrônica. Funcionalidade, apresentando as seguintes vantagens: apresentação de parâmetros intermediários dos cálculos das temperaturas de equilíbrio sólido-líquido, o que permite auditoria intermediária dos métodos de cálculo dos parâmetros e das etapas para obtenção de resultados; apresentação dos coeficientes de atividades nas abas de cada modelo quanto acionado o botão "Modo Edição", o que permite estudos adicionais de base termodinâmica para o comportamento dos sistemas; uso independente ou associado dos métodos de otimização da função objetivo GRG-não linear ou Evolutionary, este último um algoritmo genético, o que permite contornar ou compensar as limitações dos métodos quando usados de forma separada; apresentação dos cálculos dos desvios entre os dados de entrada ou saída, o que permite imediata visualização da qualidade do ajuste dos parâmetros do modelo na aba central da planilha, bem como a avaliação quanto a ajustes adicionais dos parâmetros.

POTENCIAL DE MERCADO

Universidade e empresas que tenham interesse no estudo da solubilidade em sistemas multicomponentes a partir de fundamentos termodinâmicos do equilíbrio sólido-líquido.

ESTÁGIO DE DESENVOLVIMENTO

IDEIA	PROTÓTIPO	MERCADO
LABORATÓRIO	SCALE - UP	