

PREDICCIÓN DE LA TEMPERATURA SUPERIOR DE DISOLUCIÓN CRÍTICA MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Gonzalo Astray*, Jorge Morales, Juan Carlos Mejuto, Aida Vázquez-Gil

Departamento Química Física, Facultad de Ciencias de Ourense, Universidad de Vigo, 32004, Ourense, España. Correo electrónico: gastray@uvigo.es

Recibido: Octubre 2012; Aceptado: Noviembre 2012

RESUMEN

Las disoluciones poliméricas son ampliamente empleadas en reología y en la estabilización de sistemas comerciales. Estas disoluciones están fuertemente condicionadas por la temperatura del sistema y podrán encontrarse formando una única fase líquida homogénea o bien una mezcla de fases. A fin de determinar el valor de la temperatura crítica superior de disolución (UCST) se ha desarrollado un modelo basado en Redes Neuronales que es capaz de predecir con fiabilidad dicha temperatura, cometiendo un error medio en su cálculo del 4,47%.

Palabras clave: UCST, LCST, Redes Neuronales Artificiales, ANN, Polímeros

ABSTRACT

The polymer solutions are widely used in rheology and in the stabilization of commercial systems. These solutions are strongly conditioned by the system temperature and they could form a single phase or a homogeneous liquid phase mixture. To determine the upper critical solution temperature (UCST) value it has been developed a model based on Neural Networks that is able to reliably predict this temperature, making an average error in its calculation of 4.47%.

Key words: UCST, LCST, Neural Networks, ANN, Polymers

1. INTRODUCCIÓN

Las disoluciones poliméricas son mezclas líquidas de largas cadenas de polímeros y pequeñas moléculas de disolvente pudiendo ser caracterizadas por distintas técnicas, como pueden ser la viscosimetría, la cromatografía de exclusión molecular, la dispersión de luz, etc. [1]. Estas disoluciones poliméricas son ampliamente utilizadas en reología y en la estabilización de sistemas comerciales como pinturas, productos farmacéuticos, alimentarios y en la producción de petróleo [1]. Las disoluciones poliméricas están influenciadas por las condiciones termodinámicas del sistema, dependiendo de estas condiciones la disolución polimérica puede estar formando una única fase líquida homogénea, o bien, estar constituida por dos fases debidas a la disolución parcial del polímero, en estos sistemas bifásicos coexisten en el sistema una fase en disolución líquida con una fase de sólido hinchado [2].

Es conocido que los polímeros son solubles en diversos disolventes siempre en función del rango de temperaturas en las cuales se encuentra el sistema. Las disoluciones poliméricas presentan dos zonas de miscibilidad claramente marcadas, estas zonas fronterizas de miscibilidad dependen en gran medida de la masa molecular del polímero y de la presión del sistema [3]. Las temperaturas a las cuales se presentan estas zonas de miscibilidad se denominan; i) temperatura crítica superior de disolución (en inglés, *Upper Critical Solution Temperatura, UCST*), y ii) temperatura crítica

inferior de disolución (en inglés, *Lower Critical Solution Temperature*, LCST) [3]. La UCST corresponde con la temperatura mínima por encima de la cual se observa miscibilidad completa en el sistema, paralelamente a esto la LCST corresponde con la temperatura máxima por debajo de la cual se observa miscibilidad completa. Por encima de la LCST deja de existir como una sola fase [2].

Su estudio, y concretamente, el de las distintas fases tienen gran importancia en procesos industriales y de laboratorio para poder determinar con precisión las condiciones ideales de diseño y proceso [3].

En la literatura existen gran cantidad de métodos para determinar la LCST de las disoluciones poliméricas como, por ejemplo, los modelos desarrollados por *Chang et al.*, que utilizan uno basado en las relaciones de la energía interna y la energía libre de *Helmholtz* [4], *Pappa et al.* desarrollaron otro que se fundamenta en la relación que existe entre el polímero y el disolvente, todo ello bajo la teoría de *Flory–Huggins* [5] o el modelo desarrollado por *Bogdanic et al.* para el equilibrio líquido–líquido en disoluciones poliméricas [6]. En contraste con la abundante literatura existente para la determinación de la LCST nos encontramos con escasa bibliografía destinada al desarrollo de modelos para la determinación de la UCST, debido en gran medida a la escasa cantidad de datos experimentales.

Recientemente, se han desarrollado modelos basados en Relaciones Cuantitativas Estructura–Propiedad (*Quantitative Structure–Property Relationship*, QSPR) que se han utilizado para determinar la UCST. Estos modelos se basan en la relación existente entre la estructura del analito, definida por las características relativas a su estructura química, variables químico–cuánticas, y alguna de las propiedades de interés del compuesto [3]. Una vez desarrollado, implementado y comprobado el modelo QSPR se podría utilizar para determinar con facilidad la misma propiedad para cualquier otro compuesto similar. Por tanto, nos permitiría abaratar recursos, económicos, materiales o personales, para obtener de una manera fiable el valor del parámetro de interés [3]. Se puede apreciar en bibliografía que existen gran cantidad de técnicas de computación que pueden ser utilizadas, ya sea para la obtención de datos [7] como para su implementación y modelización [8].

Del mismo modo que para la LCST, nos encontramos con bibliografía destinada al desarrollo de modelos para la determinación experimental de la UCST [9–10]. Además existen trabajos empleando modelos termodinámicos basadas en la ecuación de *Gibbs–Helmholtz* [11] y técnicas de muestreo *Monte–Carlo* [12]. *Clark et al* [13] siguieron otros enfoques para modelizar soluciones de polímeros y sus respectivas ecuaciones de estado [14] siguiendo la teoría de *Prigogine–Flory–Patterson* [15–17], la teoría de *Lattice Cluster* [18] y la de *Sanchez–Lacombe* [19,20]. *Pfefferkorn et al.* [21]; sin embargo, para el análisis de sus datos emplearon dos ecuaciones de estado diferentes siguiendo la teoría de *Sako–Wu–Prausnitz* [22] y la de *Flory–Orwoll–Vrij* [14].

En el presente estudio se recogen las experiencias de nuestro Grupo de Investigación en la predicción de la UCST mediante Redes Neuronales Artificiales (en inglés *Artificial Neural Networks*, ANN), experiencias que han posibilitado el desarrollo de una ANN que permite el cálculo de la UCST sin necesidad de realizar el engorroso y costoso trabajo experimental.

1.1. Redes Neuronales Artificiales. La Minería de Datos (en inglés, *Data Mining*, DM) es un conjunto de técnicas destinadas a extraer información no trivial de una gran base de datos, con el fin de identificar información relevante con la cual intentar resolver el problema planteado. El sistema de predicción que se utiliza en el presente artículo está basado en la tecnología de las Redes Neuronales Artificiales. Estas ANNs pueden ser definidas como un sistema destinado al tratamiento de la información cuya unidad de procesamiento se inspira en la neurona biológica. Por lo tanto, una Red Neuronal Artificial no es más que un entramado de neuronas con una capacidad limitadísima de procesamiento, pero que debido a su alto grado de conexión le proporcionan al sistema neuronal una elevadísima capacidad de procesamiento paralelo, por lo que las Redes Neuronales son capaces de resolver problemas que de otro modo serían muy difíciles de resolver [23].

La neurona artificial dispone de entradas de información, denotadas como x_n , y salidas de información, ya tratada, denotadas como y_j . De manera análoga a lo que acontece en el cerebro humano, las neuronas tienen entradas preferentes de información según sea el tipo de estímulo al que responden, esta preferencia se simula en las ANN mediante lo que se conoce como pesos y que podríamos denotar como w_i . En la Figura 1 se puede ver la estructura básica de una neurona artificial [24].

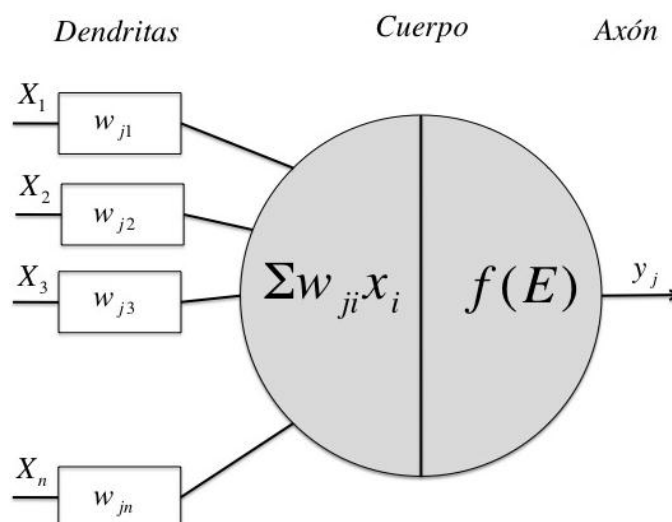


Figura 1. Estructura de una neurona artificial [24].

A la ecuación encargada de tratar cada uno de estos pesos, multiplicados por el valor de la entrada de información, se le denomina función de propagación y tiene como objetivo proporcionar

un único valor que defina de esta manera el estado interno de la neurona. En el presente estudio la función de propagación utilizada es una función de tipo sumador (Ecuación 1).

$$E(x, w) = \sum_{i=1}^N w_{ji} x_i^n \quad (1)$$

El valor obtenido de la función de propagación se trata mediante la denominada función de activación, generando un valor de salida en la neurona. En el presente estudio la función de activación utilizada es una función de tipo no lineal, la función sigmoidea (Ecuación 2).

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2)$$

A lo largo de todo el entramado neuronal las neuronas pueden desempeñar funciones de recepción de información, de transmisión de información, o bien, de dar una respuesta específica a un conjunto de estímulos. Teniendo en cuenta esto podríamos afirmar que existen tres tipos de organizaciones dentro del entramado neuronal: i) la capa de entrada, que tiene por misión la recepción de los datos de las variables de entrada de los patrones de entrenamiento, ii) las capas intermedias, también denominadas capas ocultas, destinadas a procesar los datos suministrados por la capa de entrada y iii) la capa de salida encargada de proporcionar los valores de las variables a predecir. En la Figura 2 pueden apreciarse las diferentes capas constituyentes de una Red Neuronal Artificial.

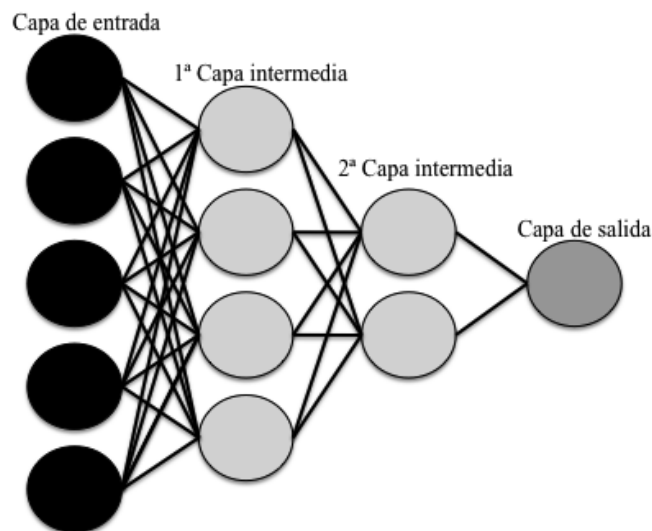


Figura 2. Arquitectura básica de una Red Neuronal Artificial [24].

El uso de las ANN se encuentra muy desarrollado en la actualidad debido a la gran ventaja que supone su uso frente a los sistemas de computación tradicional [23], dentro de estas ventajas podemos hablar de; i) su alto poder de generalización para predecir los parámetros buscados, ii) su gran tolerancia frente a fallos internos (de la ANN) y/o externo (de la base de datos), iii) su gran

eficacia en simulaciones de problemas con alto carácter no lineal y iv) su característica de ser sistemas altamente adaptables [25] y de fácil implementación en operaciones en tiempo real [26]. Sin embargo, a pesar de las grandes ventajas que presentan las Redes Neuronales Artificiales podemos decir que estas tienen una serie de inconvenientes que dificultan su implementación y que pueden ser; i) el tiempo de convergencia de predicción pueden llegar a representar días de cálculo continuado [27], ii) la susceptibilidad de entrenamiento incorrecto (sobre-entrenamiento) [27], y iii) la inexistencia de reglas claras y definidas para el desarrollo de la Red Neuronal Artificial [23,27].

Evidentemente la labor de un programador de ANN debe ser evitar estos inconvenientes, siempre desde el punto de vista de la experiencia, a fin de alcanzar un buen entrenamiento de la Red Neuronal y un alto poder de generalización de la misma.

2. SECCIÓN EXPERIMENTAL

Para llevar a cabo este estudio se han utilizado un total de 107 combinaciones de polímeros y disolventes extraídos del estudio de *Gharagheizi et al.* [3]. Utilizaremos como variables de entrada los descriptores moleculares utilizados por *Gharagheizi et al.* [3] para sus cálculos basados en QSPR y en procesos de regresión lineal múltiple (LMR). La utilización de los mismos descriptores empleados en la literatura nos permitirá comparar la eficacia exhibida por la ANN frente a los procesos basados en QSPR y LMR [3]. Estos nueve descriptores serán los utilizados en nuestro estudio.

Para una buena predicción es necesario partir de unos buenos casos experimentales y elegir de entre estos, siempre de una manera óptima, los que compondrán los casos de entrenamiento y los casos de validación del modelo a desarrollar. Como se pudo comprobar en estudios previos en nuestro laboratorio [28] la elección sugerida por *Gharagheizi et al.* [3] no permitiría obtener un óptimo entrenamiento de la ANN por lo cual en este estudio se han utilizado como datos de entrenamiento y validación grupos distintos a los utilizados por *Gharagheizi et al.* [3] pero respetando en todo momento la relación entrenamiento/validación, (86 casos de entrenamiento y 21 de validación). Así, pues, se reordenaron todos los casos disponibles según el valor de UCST, seleccionando los casos extremos para la fase de entrenamiento y cogiendo al azar 21 casos, destinados a la validación, entre todo el rango de casos estudiados.

Una vez entrenadas las distintas Redes Neuronales se procederá a la validación de las mismas utilizando para ello los casos de validación, casos previamente reservados y que no han sido incluidos dentro de la etapa de entrenamiento de la ANN. Los casos reservados han sido 21 casos que se corresponden con un 19,63% de los datos totales que disponemos del estudio de *Gharagheizi et al.* [3].

Una vez elegidas las variables de entrada (9 variables), los casos de entrenamiento (86

patrones) y los de validación (21 patrones) se implementan distintas Redes Neuronales Artificiales variando el número de capas intermedias, los valores del grado de aprendizaje y de la cantidad de movimiento (*momentum*) y los ciclos de entrenamiento de la ANN, todo ello a fin de obtener una ANN que sea capaz de predecir de una manera óptima el valor de la UCST.

Las distintas Redes Neuronales Artificiales implementadas son del tipo Perceptrón Multicapa con aprendizaje supervisado, en donde la modificación de los pesos se realiza por un Maestro que calcula el error cometido entre la salida real esperada y la salida proporcionada por la Red Neuronal, este error se transmite hacia atrás mediante lo que se denomina Regla Delta [24,29] y permite el aprendizaje de las ANN.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Se han implementado numerosas Redes Neuronales con distintas topologías, no solo variando el número de neuronas intermedias, sino también la disposición de estas en dichas capas intermedias. A fin de evitar los problemas de memorización que puedan producirse por largos episodios de entrenamiento se han implementado Redes Neuronales Artificiales a distintos ciclos de entrenamiento, con la intención de encontrar aquella Red Neuronal que presente un mejor ajuste, tanto para la fase de entrenamiento como para la fase de validación.

3.1. Entrenamiento de la Red Neuronal. En la Tabla 1 se exponen las diez de las mejores Redes Neuronales implementadas, en ella se pueden ver los coeficientes de ajuste (R^2), la raíz del error cuadrático medio (RMSE) y el tanto por ciento de error cometido para la etapa de entrenamiento.

Para jerarquizar la mejor ANN utilizamos el valor del RMSE de entrenamiento obtenido al enfrentar los valores experimentales frente a los valores calculados por la ANN para la fase de entrenamiento. Como se puede, ver la ANN que presenta un menor RMSE para la fase de entrenamiento es la ANN entrenada durante 1.000 ciclos con una topología 9–8–1, es decir, 9 neuronas en la capa de entrada, 8 neuronas en la única capa intermedia y una sola neurona en la capa de salida, y que se corresponde con el valor de UCST.

Esta ANN presenta un buen ajuste en términos de R^2 con un valor de 0,962 y un RMSE de 16,29 K que se corresponde con un 4,14% de error medio en los 86 patrones de entrenamiento utilizados.

3.2. Validación de la Red Neuronal. Una vez implementadas las distintas ANN se procede a la validación de las mismas, es decir, a la comprobación de su buen poder de predicción. Para ello utilizamos los 21 casos previamente reservados. Al igual que en la etapa de entrenamiento jerarquizamos las ANNs según el RMSE cometido, esta vez en la fase de validación. Como se puede ver en la Tabla 2, entre las diez mejores ANN desarrolladas la que mejor ajuste presenta en

su etapa de validación es la ANN con una topología de 9–16–1, presentando un ajuste en términos de R^2 de 0,919 con un RMSE de 16,7 K lo que viene a representar un 4,14% de error medio para los datos de validación.

Tabla 1. Ajustes de las 10 mejores ANNs implementadas para la fase de entrenamiento.

<i>Ciclos</i>	<i>Red</i>	R^2	<i>RMSE</i>	<i>% Error</i>
1000	9–8–1	0,962	16,29	4,14
1000	9–16–1	0,964	17,45	4,55
1000	9–12–1	0,956	17,71	4,50
1000	9–9–1	0,965	18,39	4,76
1000	9–6–1	0,949	18,49	4,89
2000	9–8–1	0,958	18,61	4,82
1000	9–19–1	0,955	19,73	5,07
2000	9–16–1	0,963	20,02	5,55
2000	9–1–1	0,860	27,55	7,58
500	9–1–1	0,860	27,55	7,58

Tabla 2. Ajustes de las 10 mejores ANNs implementadas para la fase de validación.

<i>Ciclos</i>	<i>Red</i>	R^2	<i>RMSE</i>	<i>% Error</i>
1000	9–16–1	0,919	16,70	4,14
1000	9–8–1	0,912	17,27	4,69
1000	9–12–1	0,898	18,08	4,65
1000	9–9–1	0,912	18,23	4,70
2000	9–16–1	0,923	20,83	5,56
1000	9–6–1	0,884	21,17	5,65
1000	9–19–1	0,876	21,25	5,58
2000	9–8–1	0,888	22,80	5,71
2000	9–1–1	0,872	22,86	6,67
500	9–1–1	0,872	22,86	6,67

3.3. Elección de la Red Neuronal. Una vez identificadas las mejores ANN tanto para la fase de entrenamiento como para la fase de validación se procede a seleccionar, al leal saber y entender del autor, la mejor ANN dentro de todo el conjunto de ANNs implementadas. Como se puede apreciar en las Tablas 1 y 2, la ANN con topología 9–8–1 presenta el RMSE más bajo tanto en la fase de entrenamiento (16,29 K) como en términos globales (16,49 K). Sin embargo, la ANN con topología 9–16–1 presenta un mejor ajuste en la etapa de validación en términos de RMSE (16,7 K), mejorando en medio grado la predicción de la siguiente mejor ANN. Como lo que se pretende con la implementación es dotar al sistema predictivo de la capacidad de predicción de la UCST para casos no vistos con anterioridad se decide que la mejor ANN, y la que se debería de utilizar para predecir la UCST, sin necesidad de recurrir a experimentación, es la ANN con una topología 9–16–1.

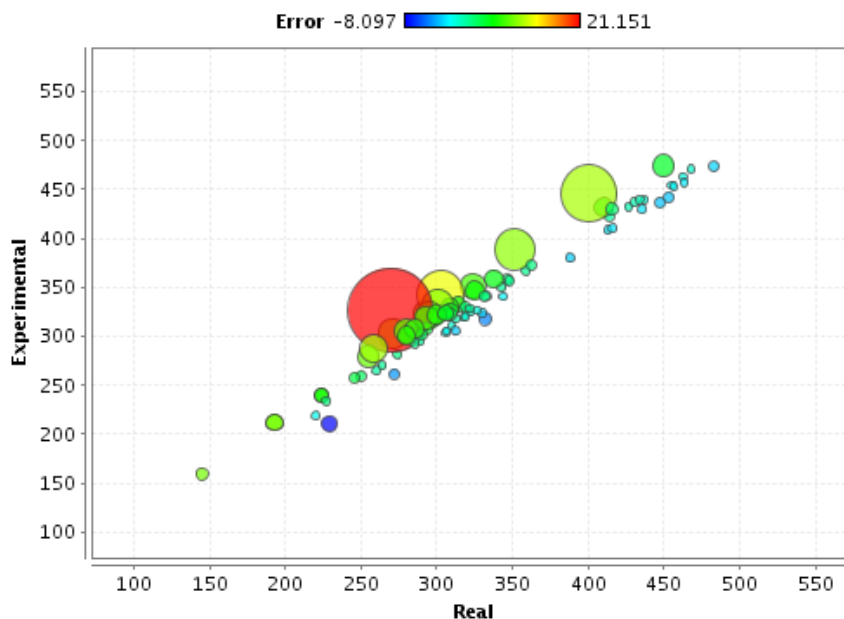


Figura 3. Gráfica de ajuste para la ANN con topología 9–16–1 para los datos estudiados durante la fase de entrenamiento. El tamaño de los puntos indica el error cometido por la ANN, a mayor tamaño de punto mayor error y a menor tamaño menor error cometido. El color indica el porcentaje de error cometido para cada punto en particular.

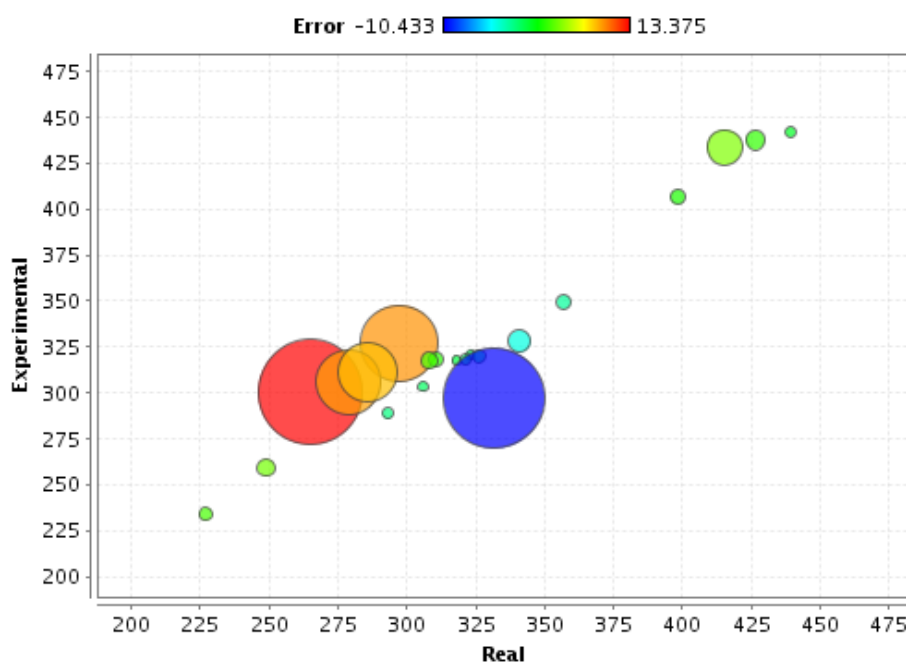


Figura 4. Gráfica de ajuste para la ANN con topología 9–16–1 para los datos estudiados durante la fase de validación. El tamaño de los puntos indica el error cometido por la ANN, a mayor tamaño de punto mayor error y a menor tamaño menor error cometido. El color indica el porcentaje de error cometido para cada punto en particular.

Como se puede observar en las Figuras 3 y 4 podemos afirmar que, en términos generales, los datos usados en la fase de entrenamiento de la Red Neuronal (86 casos) presentan un buen ajuste y una dispersión pequeña con excepción de uno de los casos de entrenamiento que presenta un error

próximo al 21%. Así mismo se pueden apreciar los buenos ajustes para la etapa de validación de la ANN destacando el caso extremo en el cual se comete un error del 13% para la predicción de la UCST.

En la Figura 5 se representa la topología correspondiente a la ANN elegida.

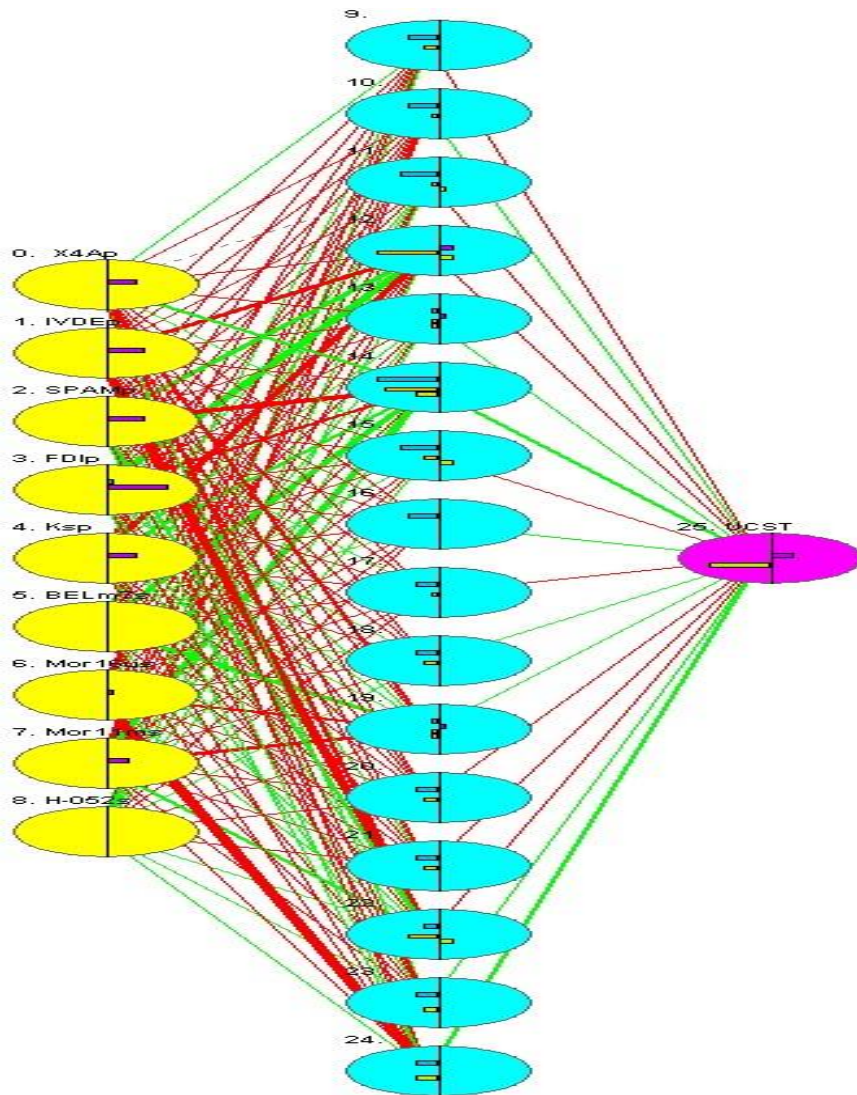


Figura 5. Imagen de la ANN elegida (9-16-1) para la predicción de la UCST.

En la Tabla 3 se muestran los valores de los pesos para cada una de las conexiones entre las distintas neuronas de la ANN 9-16-1. Así mismo se muestran los valores bias de las 16 neuronas intermedias y de la neurona de la capa de salida.

Tabla 3. Pesos y bias de la ANN elegida (9–16–1) para la predicción de la UCST.

<i>X4Ap</i>	<i>IVDEp</i>	<i>SPAMp</i>	<i>FDIp</i>	<i>Ksp</i>	<i>BELm7s</i>	<i>Mor16us</i>	<i>Mor11ms</i>	<i>H-052s</i>		<i>bias</i>		<i>Variable</i>	<i>Importancia</i>		
0,04	-0,06	-0,12	-0,20	-1,24	0,25	-0,29	-0,98	0,80		-1,11		SPAMp	16,43		
-0,26	-0,55	-0,50	-0,56	-0,11	-0,52	-0,25	-0,31	-0,20		-0,81		Mor11ms	15,39		
-0,01	-0,88	-0,69	-1,19	0,22	0,47	-0,54	-0,64	1,13		-0,48		IVDEp	14,23		
-0,45	-2,61	2,86	3,61	-2,78	-0,92	-0,67	-0,88	1,35		-3,32		FDIp	13,44		
-0,37	-0,06	-0,53	-0,01	0,26	-0,73	0,87	-0,47	0,23		-0,62		BELm7s	12,63		
1,79	-1,28	-3,34	-2,29	2,10	2,82	-0,85	2,55	0,97		-3,24		Mor16us	12,07		
0,26	-0,18	-1,33	-0,29	-1,14	0,02	-0,85	-0,96	1,52		-0,94		H-052s	11,17		
-0,17	-0,91	-0,75	-0,30	-0,38	0,12	-0,12	-0,47	-0,07		-0,27		X4Ap	11,03		
-0,75	-0,23	0,18	-0,47	-0,03	-0,60	-0,15	-0,78	-0,48		-0,47					
-0,60	-0,55	-0,75	0,11	-0,01	0,29	-0,27	-0,57	0,27		-0,87					
-2,06	-0,37	1,40	1,51	0,15	2,77	-1,90	-2,49	-0,37		-0,75					
-0,48	-0,25	-0,04	-0,12	-0,25	-0,40	-0,40	-0,48	-0,44		-0,95					
-0,56	-0,80	0,34	-0,20	-0,48	-0,90	-0,07	-0,17	-0,03		-1,16					
-2,07	-3,70	2,04	1,35	-1,16	0,03	0,19	2,36	1,42		-1,69					
0,54	-0,52	-0,94	-0,58	0,04	-1,52	-0,12	-0,71	0,61		0,13					
-0,62	-1,28	0,63	0,64	-0,16	-0,27	-4,52	-0,55	1,28		-0,37					
										-0,28					
-0,47	0,21	-0,89	-1,23	0,94	2,01	-1,37	0,48	-0,37	0,49	0,84	-0,38	-0,10	-1,33	1,42	1,86

Los pesos de las conexiones que unen cada una de las neuronas de la ANN con las neuronas inmediatamente posteriores nos sirven para calcular la importancia que tiene cada una de las entradas de la ANN, esto es, nos posibilitan saber cuales son las variables más influyentes a la hora de predecir la UCST, siempre en función de la topología implementada. Esta importancia se calcula mediante el sumatorio de los pesos de las conexiones de las neuronas de la capa de entrada (variables utilizadas para la predicción de la UCST) con las neuronas de la capa intermedia con lo cual se obtiene la importancia de las nueve variables utilizadas para la ANN seleccionada, esta importancia se muestra en la Tabla 3.

4. CONCLUSIONES

La Red Neuronal implementada (9–16–1) se ha manifestado como un sistema de predicción que ofrece unos resultados muy satisfactorios para la determinación de la UCST. Esta ANN fue entrenada durante un periodo de 1.000 ciclos de entrenamiento, presentando para esta etapa un coeficiente de ajuste R^2 de 0,964, un RMSE de 17,45 K y un error medio del 4,55%, así mismo, para la fase de validación la ANN se presenta un R^2 de 0,919, con un RMSE de 16,70 K y un error medio del 4,14%. En términos globales la ANN 9–16–1 presenta ajuste R^2 de 0,958, con un RMSE de 17,31 K y un error medio del 4,47%.

Si comparamos nuestra ANN con el modelo predictivo desarrollado por *Gharagheizi et al.* [3] para la predicción de la UCST podemos afirmar que gracias a la elección adecuada de los casos de entrenamiento y validación hemos conseguido mejorar el modelo de *Gharagheizi et al.* [3] en un 22,6% en la fase de entrenamiento y un 29,6% para la fase de validación. Con todo ello podemos recomendar el modelo neuronal 9–16–1 para su utilización en la predicción de la UCST frente a otro tipo de modelos como pueden ser modelos basados en regresiones lineales.

Agradecimientos. Gonzalo Astray agradece al Ministerio de Educación su contrato FPU, P.P. 0000–421S–14006, que le permitió el soporte económico necesario para esta investigación. Jorge Morales agradece a la Universidad de Vigo su contrato pre–doctoral, 0022–122I 641.03 que le permitió el soporte económico necesario para esta investigación.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Katime I, Katime O, Katime D “*Los materiales inteligentes de este Milenio: los hidrogeles polímeros*”. Editorial de la Universidad del País Vasco, Bilbao 2004. ISBN 84–8373–637–3; Fernández IJ “*Polímeros en solución y aplicaciones de los polímeros en la industria petrolera*”, Departamento de Manejo Integrado de Producción, Venezuela, 2003, p. 1–14.
- [2] Katime I, Cesteros LC “*Química Física Macromolecular. II. Disoluciones y Estado Sólido*”, Editorial de la Universidad del País Vasco, Bilbao 2002
- [3] Gharagheiz F, Sattari M, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**, 9054 (2009)
- [4] Chang BH, Bae CY, *Polymer*, **39**, 6449 (1998)
- [5] Pappa GD, Voutsas EC, Tassios DP, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **40**, 4654 (2001)

- [6] Bogdanic G, Vidal JA, *Fluid Phase Equilib.*, **173**, 241 (2000)
- [7] Batista MLS, Tomé LIN, Neves CMSS, Rocha EM, Gomes JRB, Coutinho JAP, *J. Phys. Chem. B* **116**, 5985 (2012)
- [8] Oh J, Rey AD, *Comput. Theor. Polym. S.*, **11**, 205 (2001)
- [9] Koizumi S, *Soft Matter*, **7**, 3984 (2011)
- [10] Ueki T, Nakamura Y, Yamaguchi A, Niitsuma K, Lodge TP, Watanabe M, *Macromolecules*, **44**, 6908 (2011)
- [11] Gonsior N, Ritter H, *Macromol. Chem. Phys.*, **213**, 382 (2012)
- [12] Oh SY, Bae YC, *Polymer*, **53**, 3772 (2012)
- [13] Clark EA, Lipson JEG, *Polymer*, **53**, 536 (2012)
- [14] Flory PJ, Orwoll R, Vrij A, *J. Am. Chem. Soc.*, **86**, 3507 (1964)
- [15] Flory PJ, *J. Am. Chem. Soc.*, **87**, 1833 (1965)
- [16] Prigogine I “*The Molecular Theory of Solutions*”. Amsterdam (Nederland): North–Holland Publishing Co, 1957
- [17] Patterson D, *J. Polym. Sci. Part C*, **16**, 3379 (1968)
- [18] Freed KF, Dudowicz J, *Macromolecules*, **29**, 625 (1996)
- [19] Lacombe RH, Sanchez IC, *J. Phys. Chem.*, **80**, 2568 (1976)
- [20] Sanchez IC, Lacombe RH, *Macromolecules*, **11**, 1145 (1978)
- [21] Pfefferkorn D, Browarzik D, Steininger H, Weber M, Gibon C, Kammer HW, Kressler J, *European Polym. J.*, **48**, 200 (2012)
- [22] Sako T, Wu AH, Prausnitz JM, *J. Appl. Polym. Sci.*, **38**, 1839 (1989)
- [23] Zubizarreta A “*Aplicaciones de las técnicas de redes neuronales para el desarrollo de un sistema de diagnóstico on–line en el proceso de electroerosion por hilo*”. Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Bilbao, 2006
- [24] Astray G “*Caracterización de polímeros mediante redes neuronales artificiales*”, Tesis Doctoral. Ourense. Universidad de Vigo, 2011
- [25] Drezga I, *IEEE Trans. Power Sys.*, **14**, 844 (1992)
- [26] White BA, Elmasry MI, *IEEE Trans. Neural Networks*, **3**, 73 (1992)
- [27] Basogain X “*Redes neuronales artificiales y sus aplicaciones*”, Proyecto Fin de Carrera. Escuela Superior de Ingeniería de Bilbao, 2008
- [28] Vazquez–Gil A “*Predicción de la Temperatura Superior de Disolución Crítica mediante Redes Neuronales Artificiales*”, Proyecto Fin de Carrera. Ourense. Universidad de Vigo, 2012
- [29] Corchado JM, Díaz F, Borrajo L, Fernández F “*Redes neuronales artificiales, un enfoque práctico*”. Universidad de Vigo, Servicio de Publicaciones, D.L. 2000