

DESENVOLVIMENTO DE METAMODELOS PARA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS SIMULADOS

Luan Gagliardi Nogueira (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Lucas Francisco dos Santos (Coorientador), Caliane Bastos Borba Costa (Orientadora). E-mail: ra115734@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Engenharia Química / Processos Industriais de Engenharia Química

Palavras-chave: Aprendizado de Máquina; Otimização; Simulação

RESUMO

Este trabalho abordou a técnica de otimização de funções caixa preta por meio de metamodelos. A otimização de funções caixa preta, por meio da utilização de metamodelos, é uma técnica muito vantajosa, em questão de tempo e custo computacional. Utilizando como estudo de caso uma simulação de uma planta de conversão de CO₂ a metanol, onde o alvo da otimização era o lucro do processo, foram coletados os dados, construído os metamodelos e comparado os resultados obtidos pela otimização. Os resultados obtidos pela otimização dos metamodelos não foram satisfatórios, por conta de haver uma grande diferença entre os resultados vindos da otimização e dos resultados reais, colhidos pela aplicação da condição ótima encontrada no simulador. Assim, propõe-se que, em trabalho futuro, técnicas sejam aplicadas que melhorem a otimização por metamodelos para o caso trabalhado.

INTRODUÇÃO

O uso de simuladores de processos químicos permite uma análise precisa de um processo químico sem a necessidade de análises experimentais, que por muitas vezes são inviáveis. Porém, em problemas de otimização, análise de sensibilidade e análise de domínio, a resolução de equações não-lineares e diferenciais nos simuladores impõe um alto custo de tempo e esforço computacional, dificultando a realização de tais tarefas. Ainda, as discontinuidades e a resposta ruidosa desses simuladores são um impedimento para a aplicação de métodos tradicionais de otimização, pelo uso de diferenças finitas para aproximação de derivadas (SANTOS et al., 2022).

Com estas considerações, para uma função caixa preta complexa, faz-se necessária a aplicação de métodos alternativos de otimização. Os avanços na área de inteligência artificial e aprendizado de máquina possibilitaram que a modelagem por modelos substitutos, ou metamodelos, seja uma alternativa poderosa nesses

problemas ao emular uma função complexa em uma fração do tempo e do esforço computacional que essa exigiria (SANTOS et al., 2022).

O método de otimização por modelos substitutos consiste na otimização de um metamodelo em substituição à função complexa. Para isso, o metamodelo é ajustado à função complexa e otimizado para se obter os valores das variáveis de decisão que resultem em um valor ótimo da função objetivo. A otimização pode ser realizada por algoritmos de otimização especializados, como algoritmos genéticos, Nelder-Mead, Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS), *Sequential Least Squares Programming optimizer* (SLSQP), algoritmos de região de confiança, enxame de partículas (PSO), entre outros (SANTOS et al., 2022).

MATERIAIS E MÉTODOS

O primeiro passo para a otimização e análise comparativa de metamodelos é a obtenção de uma base de dados robusta e confiável. Para isso, procedeu-se com a construção de uma simulação de uma planta de hidrogenação de CO₂ a metanol, produção de metanol “verde”, sendo construída conforme realizado no trabalho de Vázquez e Guillén-Gosálbez (2021). Para a obtenção da função objetivo, lucro do processo, alvo da metamodelagem e otimização, foi realizada a análise econômica da planta, considerando os custos de capital, utilidades, matérias-primas e venda de produto.

A análise dos dados, construção dos metamodelos e otimização foi feita em linguagem Python com as bibliotecas *Pandas*, *Scipy* e *Scikit-Learn*. Para a integração entre a simulação e a linguagem Python foi utilizada a biblioteca *Pysis*, que permite o controle e a coleta de dados da simulação em Aspen HYSYS via Python.

Com a simulação como base para a aquisição de dados, foi realizada a amostragem baseada na técnica *Latin Hypercube Sampling* (LHS) dos graus de liberdade do caso trabalhado. Cada amostra obtida foi simulada e a variável de interesse, lucro, calculada e coletada. Com a base de dados completa, fez-se o ajuste dos seguintes algoritmos de aprendizado de máquina supervisionados: Florestas aleatórias (FA), *GradientBoosting* (GB), *XGBoost* (XGB), *LightGBM* (LGBM) e redes neurais artificiais (RNA). Os modelos FA, GB, XGB e LGBM foram baseados em árvores de decisão e RNA foi baseado em perceptrons multicamada (MLP)

Com os modelos ajustados, seguiu-se para a otimização a partir dos metamodelos. Realizou-se uma análise comparativa da performance de cada modelo para diferentes métodos de otimização. Foram utilizados os otimizadores Nelder-Mead, BFGS, SLSQP, PSO e Evolução Diferencial (ED). Os valores ótimos, da função-objetivo e das variáveis independentes encontrados por cada otimizador e para cada modelo, foram aplicados no simulador e os resultados obtidos foram comparados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para melhor visualização da comparação entre os resultados da otimização com os resultados simulados, aplicou-se os dados obtidos em um mapa de calor. Os resultados encontrados são vistos na Figura 1.

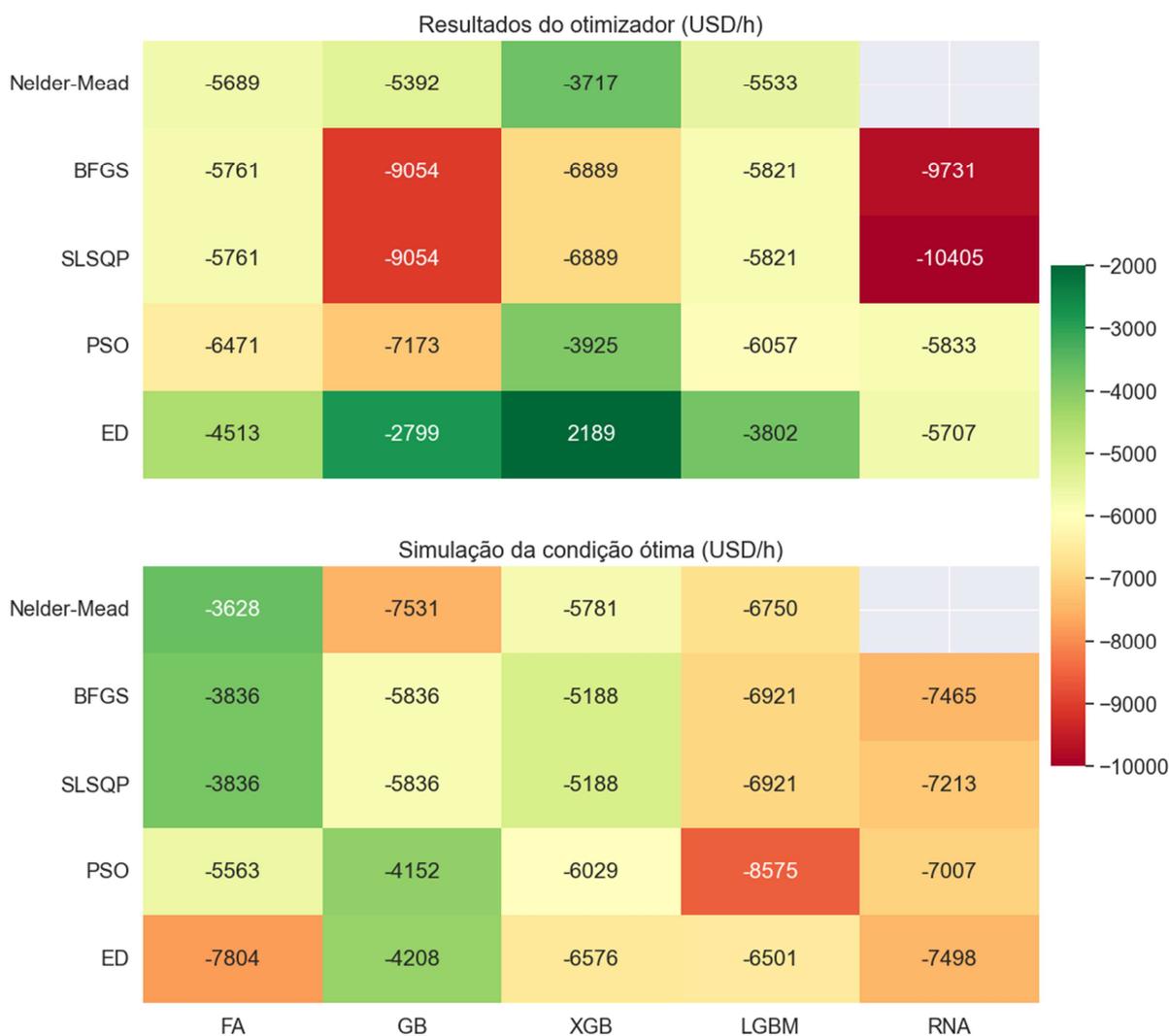


Figura 1 – Resultados da otimização e da simulação da condição ótima encontrada pelos diferentes otimizadores e metamodelos.

Por tratar-se de um processo em desenvolvimento, é condizente com a literatura o lucro do processo de produção de metanol “verde” ser negativo. Como se observa na Figura 1, os lucros ótimos obtidos pela otimização dos metamodelos não foram convergentes entre si e apresentaram disparidades quando comparados com o resultado simulado da condição ótima. Com isso, é possível inferir que os modelos trabalhados têm uma baixa qualidade de predição, pelo menos em região próxima da condição ótima.

O baixo poder preditivo dos modelos pode ter causa vinda da baixa qualidade dos dados obtidos. Por conta das constantes instabilidades de cálculo da simulação, baixa densidade de dados na região de lucro ótimo e grande quantidade de *outliers* na região de baixo lucro, os modelos não conseguiram ser devidamente ajustados aos dados e o seu poder preditivo nas regiões de lucro ótimo ficou prejudicada.

CONCLUSÕES

Os resultados encontrados pela otimização dos metamodelos não foram satisfatórios, por conta de existir uma alta disparidade entre os valores encontrados pela otimização dos metamodelos e os simulados. Sendo a simulação assumida como o valor real na comparação, não se pode afirmar que se encontrou resultado ótimo satisfatório. Com isso, conclui-se que, mesmo não alcançando um resultado satisfatório, a otimização por metamodelos é uma técnica promissora na otimização de funções caixa-preta. Contudo, é necessário melhorar a qualidade do conjunto de dados para ajuste dos modelos, por meio da remoção de ruído e outliers, aumento de amostragem e técnicas avançadas de tratamento de dados. Os autores abordarão, em trabalho de conclusão de curso, novas aplicações e técnicas para a melhoria da otimização por metamodelos.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Fundação Araucária pelo financiamento que possibilitou a realização deste projeto e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, processo 307958/2021-3.

REFERÊNCIAS

SANTOS, L. F. *et al.* Framework for embedding black-box simulation into mathematical programming via kriging surrogate model applied to natural gas liquefaction process optimization. **Applied Energy**. v. 310, n. 118537, 2022. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0306261922000241>. Acesso em: 15 ago. 2023.

VÁZQUEZ, D.; GUILLÉN-GOSÁLBEZ, G. Process design within planetary boundaries: Application to CO₂ based methanol production. **Chemical Engineering Science**. v. 246, n. 116891, 2021. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250921004565>. Acesso em: 14 ago. 2023.