

COMPARAÇÃO DA EFICIÊNCIA DA INTEGRAÇÃO ASPEN HYSYS® E PYTHON OU MATLAB PARA OTIMIZAÇÃO META-HEURÍSTICA BASEADA EM POPULAÇÃO

João Vitor Tavares Leite (ITI), Kevin Mitsuhiro Omori (Coorientador), Caliane Bastos Borba Costa (Orientador). E-mail: cbbcota@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Maringá, PR.

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

Palavras-chave: Conexão; Programação; Simulação;

RESUMO

A utilização de simuladores de processos como o Aspen HYSYS® em conjunto de linguagens de programação como Python ou MATLAB é uma prática comum no campo da simulação e otimização de processos. Nesse sentido, no presente trabalho uma avaliação comparativa é realizada entre as possibilidades de integração Python-HYSYS® e MATLAB-HYSYS®, sobretudo com relação à sua aplicação para otimizações meta-heurísticas, em especial a Otimização por Enxame de Partículas. Para isso, foi utilizado um estudo de caso de otimização econômica de uma planta integrada de produção de biodiesel e hidrogênio pela reforma a vapor do glicerol. Determinou-se que a utilização do MATLAB garante um tempo de otimização 36% menor, ainda que ambas as otimizações apresentassem precisões adequadas.

INTRODUÇÃO

Com o desenvolvimento tecnológico e industrial, a modelagem e simulação de processos torna-se cada vez mais essencial. A modelagem pode ser definida como uma representação matemática de um determinado processo, enquanto a simulação pode ser entendida como a solução de um modelo para um determinado conjunto de parâmetros preestabelecidos. Em conjunto, a modelagem e simulação permitem uma avaliação do comportamento de um sistema, isentando a necessidade de testes reais, em plantas industriais por exemplo, fator que poupa tempo, dinheiro e recursos humanos se comparado com o teste físico. Computacionalmente, simuladores de processos comerciais como o Aspen HYSYS®, fornecem modelos pré-programados de diversos equipamentos industriais, bem como bases de dados de componentes e pacotes termodinâmicos, que facilitam o processo de modelagem e simulação. Adicionalmente, a conexão de simuladores com interfaces de programação, como o Python e o MATLAB, popular em trabalhos recentes de controle e otimização de processos, permite aplicações como a construção de otimizadores e/ou sistemas de controle, programados na linguagem de programação

selecionada, e que interagem com o simulador, obtendo dele quais seriam as respostas aos estímulos do sistema de controle/otimização (BARTOLOME; GERVEN, 2022). Nesse sentido, Bartolome e Gerven (2022) analisaram a eficiência na comunicação entre o simulador Aspen HYSYS® e quatro diferentes interfaces: Microsoft Excel (VBA), MATLAB®, Python e Unity. Os autores reportam que as ferramentas possuem similaridade em seus comportamentos com relação ao tempo de resposta, logo, argumentam que esta não é uma variável importante para a decisão da interface de programação a ser utilizada se comparada a outros fatores como precisão. Apesar disso, no ramo de otimizações meta-heurísticas, sobretudo naquelas baseadas em população, sendo um conjunto de possíveis soluções avaliadas múltiplas vezes, pequenas diferenças no tempo de resposta das ferramentas podem ser significativas, dadas as inúmeras iterações.

Dessa forma, o presente trabalho abordou a comparação da eficiência de conexão entre MATLAB e Aspen HYSYS® e entre Python e Aspen HYSYS® no contexto de otimização meta-heurísticas de múltiplas iterações.

MATERIAIS E MÉTODOS

Para comparar a eficiência das duas possibilidades de integração de interfaces MATLAB-HYSYS® e Python-HYSYS®, utilizou-se como caso de estudo o problema de otimização abordado por Omori *et al.* (2025). Neste trabalho, os autores abordam a possibilidade de integrar à indústria de biodiesel o processo de reforma a vapor do glicerol para produção de hidrogênio, e utilizam da otimização por enxame de partículas (*particle swarm optimization*, PSO) para otimizar o valor presente líquido (VPL) da planta, a partir de ajustes nas condições operacionais (pressão e temperatura) dos *flashes* de purificação de biodiesel e glicerol.

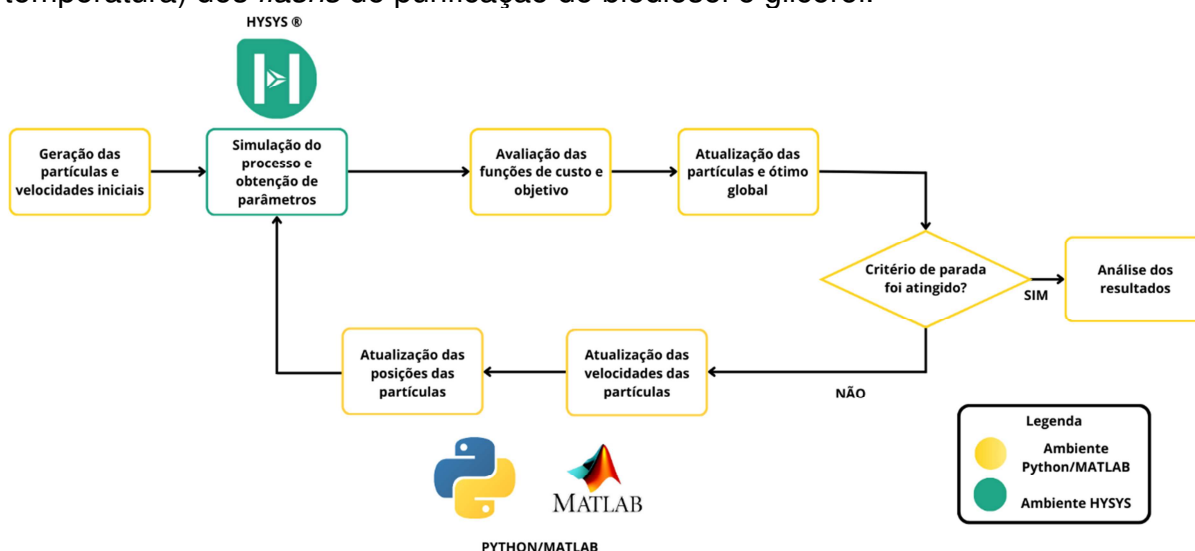


Figura 1 - Esquema do processo de otimização.

A Figura 1 apresenta um esquema do processo de otimização integrando o simulador e as interfaces de programação utilizadas para a otimização. Em todos os casos, para o PSO, considerou-se uma população de 20 partículas ao longo de 100 iterações. O computador utilizado para as simulações possui Intel® Core™ i5-13ªGen (2.40 GHz) e 16,0 GB RAM.

No estudo base, três projetos são otimizados: a planta de produção de biodiesel exclusivamente (BIOD); a planta de biodiesel integrada com a reforma do glicerol e com purificação do hidrogênio por absorção por aminas (MEAD); e a planta integrada com purificação pela adsorção por oscilação de pressão (PSAD). No presente estudo, apenas o projeto MEAD foi considerado, uma vez que este seria o mais complexo dentre os três modelos, que leva em conta uma modelagem rigorosa para o processo de purificação do hidrogênio por absorção por aminas. Este projeto, portanto, foi otimizado através de ambas as interfaces, MATLAB-HYSYS® e Python-HYSYS®, para comparação dos resultados.

São consideradas duas configurações para o algoritmo de otimização, quais sejam, com a fechamento e reabertura da simulação ou não a cada iteração. A primeira configuração permite o reinício da simulação com as mesmas condições iniciais, enquanto manter a simulação aberta continuamente faz com que o HYSYS® opere progressivamente com os resultados obtidos a cada iteração do PSO, sendo utilizados como estimativas iniciais da próxima iteração.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os valores de tempo observados para a realização das otimizações indicam que o MATLAB oferece uma conexão mais rápida com o simulador, como mostra a Tabela 1. O tempo de otimização é maior quando considerada a reabertura da simulação a cada iteração. Isto se deve ao fato de que, com a simulação sempre aberta, em função da convergência do PSO ao passar das iterações, as estimativas iniciais (iteração da partícula anterior) sempre são valores próximos daqueles avaliados para as partículas seguintes, reduzindo assim o tempo necessário para convergência da simulação. Ainda, mantendo-se a simulação sempre aberta, poupa-se o tempo do carregamento da simulação em cada iteração. No MATLAB, com a abertura e fechamento, cada iteração demanda em média 231,06 s (11,55 s para cada partícula), enquanto no Python a demanda é de 315,48 s (15,77 s em cada partícula).

Tabela 1 –Tempos otimização para cada interface.

Configuração	Tempo de otimização (s)		Diferença (%)
	Python	MATLAB	
Apenas abrindo a simulação	4673	4167	12,14
Abrindo e fechando a simulação	31548	23106	36,54

Os valores das variáveis de decisão bem como função objetivo (VPL) encontrados ao final da otimização para cada configuração e para cada interface, MATLAB e Python, são mostrados na Tabela 2. Pouca diferença foi encontrada nos resultados obtidos, e a pequena variabilidade encontrada poderia ser justificada pelo carácter probabilístico do PSO.

Tabela 2 – Resultados das otimizações para cada configuração.

Configuração	Apenas abrindo a simulação		Abrindo e fechando a simulação	
	Python	MATLAB	Python	MATLAB
Variável de decisão				
P_{bio} (bar)	0,61850	0,62249	0,62269	0,60069
P_{gly} (bar)	0,99305	0,99878	1,00000	0,99299
T_{bio} (°C)	269,726	269,999	270,000	269,838
T_{gly} (°C)	105,158	105,009	105,001	105,269
Função objetivo				
VPL (10^6 USD)	23,788	22,600	22,943	22,461

CONCLUSÕES

Verificou-se, com os resultados das otimizações, que a interface MATLAB-HYSYS® oferece uma melhor estrutura de conexão para o modelo empregado, já que o tempo de otimização foi o menor para as duas configurações utilizadas, com e sem a reabertura da simulação. Apesar disso, a integração Python-HYSYS® não apresentou diferença significativa nos valores de variáveis de decisão e função objetivo, o que indica uma precisão similar àquela oferecida pelo MATLAB.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Origem Energia e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (processos 131624/2023-7 e 307705/2025-0). Ainda, o presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

REFERÊNCIAS

BARTOLOME, P. S.; GERVEN, T. V. A comparative study on Aspen Hysys interconnection methodologies. **Computers and Chemical Engineering**, v. 162, p. 107785, 2022. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0098135422001260>. Acesso em: 27 agosto 2025.

OMORI, K. M.; CAVALCANTI, C. J. DA S.; RAVAGNANI, M. A. DA S. S.; PAVÃO, L. V.; COSTA, C. B. B. Economic analysis and optimization of an integrated biodiesel and hydrogen production plant. **Energy Conversion and Management**, 332, 2025. Disponível em:
<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S019689042500278X>. Acesso em: 24 agosto 2025.