



MODELO SURROGATE DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO INDUSTRIAL OBTIDO A PARTIR DE TÉCNICAS ESTATÍSTICAS E MACHINE LEARNING.

Marcos Sousa Leite¹, Antônio Carlos Brandão de Araújo²

RESUMO

O presente artigo relata o desenvolvimento de modelos surrogate, também conhecidos como metamodelos, de uma coluna de destilação industrial, a qual busca a separação de uma mistura de hidrocarbonetos para produção de correntes de processo de leves e pesados. A simulação base deste sistema foi realizada no software comercial Aspen Plus. Após realizar a simulação, selecionou-se as variáveis mais importantes do ponto de vista econômico e mais sensíveis ao controle, posteriormente montou-se um planejamento experimental usando o Latin Hypercube Sampling no software Matlab visando a geração de pontos que foram utilizados posteriormente na construção da análise de sensibilidade realizada no software Aspen Plus. Com a geração de 400 casos para as 37 variáveis controladas na análise de sensibilidade foi possível prosseguir para a etapa seguinte de construção dos metamodelos utilizando a toolbox *Statistics and Machine Learning* do Matlab, onde foram empregados modelos de regressão linear e regressão por processos gaussianos. Por fim realizou-se uma análise estatística onde foi avaliado dois indicadores estatísticos, o RMSE (Root Mean Square Error), também chamado de erro quadrático médio e o coeficiente de determinação R^2 , buscando-se obter o melhor metamodelo entre os construídos e com isso observou-se que houve ótimos indicadores de regressão nos modelos gaussianos, tornando-se evidente que eles são os mais aptos a substituírem o modelo rigoroso da coluna de destilação industrial.

Palavras-chaves: Regressão linear; Machine Learning; Destilação.

¹Graduando em Engenharia Química, UAEQ - Unidade acadêmica de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, E-mail: marrcosleytte23@gmail.com

²Doutor, Professor Orientador, UAEQ - Unidade acadêmica de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, E-mail: brandão@eq.ufcg.edu.br



SURROGATE MODEL OF AN INDUSTRIAL DISTILLATION COLUMN OBTAINED FROM STATISTICAL TECHNIQUES AND MACHINE LEARNING.

ABSTRACT

This article reports the development of surrogate models, also known as metamodels, of an industrial distillation column, which seeks to separate a mixture of hydrocarbons for the production of light and heavy process streams. The base simulation of this system was carried out in the commercial software Aspen Plus. After performing the simulation, the most important variables from an economic point of view and more sensitive to the control were selected, later an experimental planning was set up using the Latin Hypercube Sampling in Matlab software, aiming at the generation of points that were later used in the construction of the sensitivity analysis performed in Aspen Plus software. With the generation of 400 cases for the 37 variables controlled in the sensitivity analysis, it was possible to proceed to the next stage of constructing the metamodels using Matlab's Statistics and Machine Learning toolbox, where linear regression models and regression by Gaussian processes were used. Finally, a statistical analysis was performed where two statistical indicators were evaluated, the RMSE (Root Mean Square Error), also called the mean square error and the coefficient of determination R^2 , seeking to obtain the best metamodel among the constructed ones and with that it was observed that there were excellent regression indicators in the Gaussian models, making it evident that they are the most apt to replace the rigorous model of the industrial distillation column.

Keywords: Linear regression; Machine Learning; Distillation.