

Técnicas de Inteligencia Artificial aplicadas al Modelado Termodinámico

Nilda M. Pérez Otero, Javier Izetta Riera

GIDIA / Facultad de Ingeniería / Universidad Nacional de Jujuy
Ítalo Palanca 10, +54 (388) 4221587
nilperez@gmail.com, javierizetta@gmail.com

Resumen

El modelado termodinámico presenta problemas complejos de optimización global involucrados. Por ejemplo la minimización global de la función de distancia al plano tangente (TPDF) y de la función de Gibbs (G) son tareas que requieren métodos numéricos robustos, ya que presentan atributos desfavorables tales como discontinuidad, no diferenciabilidad y multivariabilidad. Otro problema difícil de resolver es la estimación de parámetros, aún para modelos termodinámicos simples.

En la actualidad se está realizando un trabajo significativo en el uso de algoritmos estocásticos de optimización global para la resolución de este tipo de problemas. Particularmente, las metaheurísticas están demostrando ser tan efectivas como los métodos determinísticos. Sin embargo, los resultados de su aplicación en el área del modelado termodinámico estos estudios indicaron que aun existen limitaciones para resolver problemas de optimización global complejos. En esta línea de investigación, el Grupo de Investigación y Desarrollo en Informática Aplicada (GIDIA) pretende analizar la factibilidad de la aplicación de técnicas de la inteligencia artificial en el desarrollo de algoritmos de optimización global para el cálculo termodinámico.

Palabras clave: Metaheurísticas, Metaheurísticas Paralelas, Algoritmos Evolutivos, Computación evolutiva, Modelado Termodinámico

Contexto

La línea de investigación aquí presentada se encuentra inserta en el proyecto *Técnicas de Inteligencia Artificial aplicadas al Modelado Termodinámico*, ejecutado a partir del año 2014 por el Grupo de Investigación y Desarrollo en Informática Aplicada (GIDIA) de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de Jujuy.

El proyecto, acreditado y financiado por la Secretaria de Ciencia y Técnica y Estudios Regionales de la Universidad Nacional de Jujuy, se encuentra bajo el Programa de Incentivos.

Introducción

Los cálculos de equilibrio de fase cumplen un rol crucial en la simulación, diseño y optimización de procesos de separación, siendo esenciales en la de sistemas de procesos. La dificultad de estos cálculos reside en la naturaleza no convexa, multivariable y altamente no lineal de las funciones termodinámicas usadas como criterio de optimización. Estos cálculos se deben realizar de forma confiable y eficiente, para evitar incertidumbres y errores en el diseño del proceso.

Estos cálculos termodinámicos pueden formularse como un problema de optimización global donde la función objetivo puede ser, dependiendo del problema, la función termodinámica de Gibbs (G) o una función error definida por los valores experimentales de equilibrios de fase y los calculados mediante

un modelo termodinámico seleccionado [1].

Los métodos tradicionales de optimización resultan poco adecuados para resolver este tipo de problemas debido a que son propensos a graves dificultades de cálculo y pueden no converger a la solución correcta cuando las estimaciones iniciales no son las adecuadas [4]. En general, discernir entre los mínimos locales y el global suele ser difícil, en especial, si éstos son cercanos en el espacio de soluciones y con poca diferencia entre sus valores absolutos; la ubicación de este mínimo global para problemas termodinámicos es crucial, ya que sólo ese corresponde a la solución deseable y correcta [5].

A la fecha varios trabajos se han desarrollado en el área de la optimización global, y varios algoritmos se utilizaron para resolver estos problemas termodinámicos. Una revisión de estos trabajos se puede encontrar en [6].

Metaheurísticas

Las metaheurísticas son métodos de resolución que orquestan una interacción entre los procesos de mejora local y estrategias de mayor nivel para crear un proceso capaz de escapar de óptimos locales y realizar una búsqueda robusta en el espacio de soluciones. Estos métodos incluyen cualquier procedimiento que emplee estrategias para superar la trampa de la optimalidad local en espacios de soluciones complejos, especialmente aquellos procedimientos que utilizan una o más estructuras locales como un medio para definir movimientos admisibles para la transición de una solución a otra, o para construir o destruir soluciones en procesos constructivos y destructivos [7].

Si bien las metaheurísticas no son capaces de garantizar la optimalidad de las soluciones que encuentran, los procedimientos exactos o métodos de convergencia local, a menudo son incapaces de encontrar soluciones cuya cali-

dad sea similar a la obtenida por las principales metaheurísticas, en particular, en la resolución de problemas del mundo real donde se evidencia su eficiencia y eficacia para resolver problemas grandes y complejos.

Modelado termodinámico

Desde un punto de vista macroscópico, los estados de un sistema multicomponente se describen mediante sus propiedades termodinámicas: energía interna, entropía, energía de Gibbs, volumen, cantidad de materia para cada componente de la mezcla, temperatura, presión, composición y potenciales químicos μ_i . Estos últimos describen macroscópicamente los efectos de tamaños relativos y de grado de interacción molecular.

Dependiendo de la condición del sistema, éste podrá ser homogéneo (cuando no es posible determinar en él zonas diferenciadas, separadas por límites o fronteras con propiedades diferentes) o heterogéneo (opuesto al anterior, donde se llama fase a cada zona y el sistema se denomina multifásico). Mientras las condiciones se mantengan, el sistema se encuentra en equilibrio, pudiendo ser estable, es decir, sin tendencia al cambio en el tiempo de observación. Si dichas condiciones se modifican, el estado de un sistema puede cambiar, determinando un proceso durante el cual los valores de las propiedades termodinámicas se modifican.

El conocimiento de los equilibrios y estabilidad de fases (comportamiento de fase) es de fundamental importancia para predecir la evolución de sistemas materiales y sus composiciones en varias operaciones de la industria química y de procesos. Una de las maneras de conocer el comportamiento de fase es por medio del modelado termodinámico utilizando relaciones entre las propiedades que caracterizan el estado del sistema y permitiendo efectuar predicciones de comportamientos de fase.

El desarrollo de métodos eficientes y robustos para el cálculo del equilibrio de fase siempre ha sido un desafío, y aún lo es. La dificultad consiste en que la forma de la función objetivo, altamente no lineal y no convexa, ocasiona que no exista una garantía para localizar el mínimo global. La complejidad del problema crece, cerca de puntos críticos y límites de fases [8] y con el número de componentes y fases posibles.

Metaheurísticas aplicadas al Modelo Termodinámico

Ya se comentó que los problemas de optimización global involucrados en el cálculo y modelado termodinámico son muy desafiantes. Por ejemplo, la minimización global de TPDF y función de Gibbs son tareas difíciles y requieren métodos numéricos robustos ya que presentan atributos desfavorables tales como discontinuidad y no diferenciabilidad (por ejemplo, al usar EoS cúbicas o modelos asimétricos para modelar propiedades termodinámicas). En consecuencia, las funciones objetivo pueden tener varios mínimos locales incluyendo soluciones triviales y no físicas [6]. También, los problemas de estimación de parámetros pueden ser difíciles de resolver incluso para modelos termodinámicos simples [9][10][11]. En la estimación de parámetros de ecuaciones de estado para el modelado termodinámico surgen dificultades como la convergencia a un mínimo local, una función objetivo plana en la vecindad del mínimo global, funciones del modelo mal escaladas y términos no diferenciables en las ecuaciones termodinámicas.

Resumiendo, la demostrada naturaleza de los problemas de optimización global para los cálculos y el modelado termodinámico, destacan la necesidad de técnicas numéricas confiables para superar estas dificultades.

Entre las técnicas utilizadas, se encuentran las técnicas de optimización basa-

das en metaheurísticas, tan potentes y efectivas como los métodos deterministas [12] Estas herramientas también se utilizaron para el ajuste de parámetros de EoS empleando diferentes tipos de funciones objetivo. No obstante, estudios recientes, indican que los métodos estocásticos existentes aun presentan ciertas limitaciones, siendo necesario el desarrollo de metaheurísticas alternativas.

Líneas de Investigación, Desarrollo e Innovación

Esta línea de investigación contempla dos enfoques, en el primero de ellos se pretende analizar diferentes técnicas de metaheurísticas y aplicarlas en el desarrollo de algoritmos robustos para la resolución de problemas de optimización global involucrados en el cálculo termodinámico y en el enfoque se pretende aplicar técnicas de inteligencia artificial para la resolución de problemas de optimización en el cálculo termodinámico, debido a que estas técnicas son ampliamente aplicadas a la resolución de problemas de optimización.

Resultados y Objetivos

El proyecto, que se comenzó en enero de 2014 y finaliza en diciembre de 2015 tiene como objetivo general el desarrollo de algoritmos que implementen nuevas metaheurísticas, una combinación de las metaheurísticas ya existentes u otras técnicas de la inteligencia artificial para resolver problemas de modelado termodinámico.

Entre los objetivos específicos se encuentran:

- Establecer la aplicabilidad de las metaheurísticas disponibles en problemas de equilibrio y estabilidad de fases.
- Establecer conclusiones en cuanto desempeño y eficiencia de las técnicas de optimización tradicionales.

- Proponer y desarrollar algoritmos para la resolución del conjunto de problemas planteados.
- Determinar desempeño numérico y eficiencia de los nuevos algoritmos.

En el año 2014 se obtuvieron los siguientes resultados:

- Se presentó la modificación de AEvol, un algoritmo evolutivo con un operador de mutación sencillo aplicado a la resolución de sistemas termodinámicos que fue presentado en [13]. La modificación consistió en agregar un operador de cruce BLX- α y tres criterios de selección de padres [14].
- Se analizó el desempeño de AEvol modificado con seis funciones *benchmark* [15]. Los resultados obtenidos demuestran que se logró un buen desempeño del algoritmo al implementar el operador de cruce [16].
- Se comparó el desempeño de AEvol modificado en la resolución de problemas de equilibrio de fase para tres sistemas termodinámicos, ya evaluados con la versión original del algoritmo. Los resultados obtenidos demuestran que al implementar el operador de cruce mejoraron los resultados [17].

Para el año 2015 se prevé:

- Continuar la investigación sobre la robustez del algoritmo propuesto en la resolución de problemas de equilibrio de fase para sistemas más complejos.
- Probar otros operadores de cruce que permitan mejorar la búsqueda global y así poder obtener mejores desempeños del algoritmo.
- Profundizar en la investigación para determinar cómo influye en la performance del algoritmo las modificaciones en sus parámetros.

Formación de Recursos Humanos

El equipo de trabajo está integrado por docentes-investigadores y alumnos de las Universidades Nacionales de Jujuy y de San Luis y del Instituto Tecnológico de Aguascalientes (México): 2 Doctores (1 en Ciencias de la Computación y 1 en Química), 5 Ingenieros en Informática y 3 alumnos. Se prevé la finalización de 1 tesis de doctorado realización de 2 tesis de maestría y una tesina de grado.

Referencias

- [1] Hua, J. Z.; Brennecke, J. F. & Stadtherr, M. A. (1996). Reliable phase stability analysis for cubic equation of state models.
- [2] Michelsen, M. L. (1982). The isothermal flash problem. part I. stability. *Fluid Phase Equilibria*, 9(1):1 – 19.
- [3] Srinivas, M. & Rangaiah, G. (2006). Implementation and evaluation of random tunneling algorithm for chemical engineering applications. *Computers and Chemical Engineering*, 30(9):1400 – 1415.
- [4] Teh, Y. & Rangaiah, G. (2002). A study of equation-solving and gibbs free energy minimization methods for phase equilibrium calculations. *Chemical Engineering Research and Design*, 80(7):745 – 759.
- [5] Floudas, C. (1999). *Deterministic Global Optimization: Theory, Methods and Applications. Nonconvex Optimization and Its Applications*. Springer.
- [6] Zhang, H.; Bonilla-Petriciolet, A. & Rangaiah, G. P. (2011). A review on global optimization methods for phase equilibrium modeling and calculations. *The Open Thermodynamics Journal*, 5(1):71 – 92.
- [7] Glover, F. W. & Kochenberger, G. A., editores (2003). *Handbook of Metaheuristics*, volume 114 of International Series in Operations Research & Management Science. Springer.
- [8] Nichita, D. V.; Gomez, S. & Luna, E. (2002). Multiphase equilibria calculation by direct minimization of Gibbs

free energy with a global optimization method. *Computers and Chemical Engineering*, 26(12):1703 – 1724.

[9] Gau, C.; Yang Gau, C. & Stadtherr, M. A. (2000). Reliable nonlinear parameter estimation using interval analysis: Error-in-variable approach. *Comput. Chem. Eng.*, 24:631–638.

[10] Bollas, G. M.; Barton, P. I. & Mitsos, A. (2009). Bilevel optimization formulation for parameter estimation in vapor-liquid(-liquid) phase equilibrium problems. *Chemical Engineering Science*, 64(8):1768 – 1783.

[11] Bonilla-Petriciolet, A.; Rangaiah, G. P. & Segovia-Hernández, J. G. (2010). Evaluation of stochastic global optimization methods for modeling vapor-liquid equilibrium data. *Fluid Phase Equilibria*, 287(2):111 – 125.

[12] Rangaiah, G. P. (2001). Evaluation of genetic algorithms and simulated annealing for phase equilibrium and stability problems. *Fluid Phase Equilibria*, 187/188(0):83 – 109.

[13] Pérez Otero, N., & Zacur, J. L. (2012). Algoritmo evolutivo con un operador genético sencillo aplicado al cómputo de equilibrio de fases en sistemas termodinámicos. In XVIII Congreso Argentino de Ciencias de la Computación.

[14] Hidalgo, L. M, Verazay, A. R. N. Verazay, Battezzati, V. y N. Pérez Otero. (2014). Propuesta de un algoritmo evolutivo aplicado a la optimización de sistemas termodinámicos. In II Congreso Argentino de Ingeniería.

[15] Tang, K., Yao, X., Suganthan, P. N., MacNish, C., Chen, Y. P., Chen, C. M., & Yang, Z. (2007). Benchmark functions for the CEC'2008 special session and competition on large scale global optimization. *Nature Inspired Computation and Applications Laboratory, USTC. Applicat. Lab., Univ. Sci. Technol. China, Hefei, China, Tech. rep.*

[16] Izetta Riera, C. J., & Pérez Otero, N. (2014). Propuesta de un algoritmo

evolutivo aplicado a problemas de optimización. In XX Congreso Argentino de Ciencias de la Computación (Buenos Aires, 2014).

[17] Ontiveros, J. D., Quispe G. L. y N. M. Pérez Otero. (2014). Algoritmo evolutivo simple para cálculos de equilibrio de fases. In III Congreso Argentino de la Interacción-Persona Computadora, Telecomunicaciones.