

## WICC 2014 XVI Workshop de Investigadores en Ciencias de la Computación

---

### Técnicas de Inteligencia Artificial aplicadas al Modelado Termodinámico

Nilda M. Pérez Otero, Guillermo Leguizamón, Adrián Bonilla-Petriciolet, Javier Izetta Riera, Abigail R. N. Verazay, Alejandro Vargas

GIDIA / Facultad de Ingeniería / Universidad Nacional de Jujuy  
Ítalo Palanca 10, +54 (388) 4221587

nilperez@gmail.com, legui@unsl.edu.ar, petriciolet@hotmail.com, javierizetta@gmail.com,  
abigailrn@gmail.com, alev98@yahoo.com

#### Resumen

Los problemas de optimización global involucrados en el cálculo y modelado termodinámico son complejos. La minimización global de TPDF (función de distancia al plano tangente) y G (función de Gibbs) son tareas que requieren métodos numéricos robustos, ya que presentan atributos desfavorables (discontinuidad, no diferenciabilidad y multivariabilidad).

También los problemas de estimación de parámetros son difíciles de resolver, incluso para modelos termodinámicos simples. La naturaleza desafiante de los problemas de optimización global para cálculos y modelado termodinámico, destacó la necesidad de nuevas técnicas numéricas confiables.

En diversos campos, las metaheurísticas demostraron ser tan efectivas como los métodos determinísticos, incluso en cálculos termodinámicos. Los resultados de estos estudios indicaron que dichos métodos estocásticos aun presentan 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, Aprendizaje Automatizado, Machine Learning, 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 presente año 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

El modelado del equilibrio de fases para sistemas multicomponentes es esencial en el diseño, operación, optimización y control de los procesos de separación. Los nuevos procesos industriales manejan mezclas complejas, condiciones severas de operación, e incluso, incorporan operaciones unitarias multifuncionales. Por tanto, el comportamiento de fase de sis-

temas multicomponentes tiene un impacto significativo en el diseño de este tipo de procesos incluyendo los costos de equipamiento y energía [1]. Los cálculos de equilibrio de fases, son especialmente importantes en las industrias química, petrolera, petroquímica, farmacéutica y otras industrias donde las unidades de separación son la base del rendimiento del proceso. Por tanto, 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 [2][3][4].

El principal desafío de resolver problemas de optimización global en el modelado termodinámico es que la función objetivo generalmente no es convexa y es altamente no lineal con varias variables de decisión. Por tanto, las funciones objetivo implicadas en el modelado termodinámico pueden tener varios mínimos locales incluyendo soluciones triviales y no físicas, especialmente en los casos de sistemas multicomponente y multifase. Por ello, 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 [1][5]. 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 co-

rresponde a la solución deseable y correcta [1][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 han llegado a incluir 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 calidad 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.

La aplicación de metaheurísticas comprende un gran número de áreas y campos disciplinarios, siendo algunos de ellos:

- Diseño de ingeniería, optimización de topologías y la optimización estructural en electrónica y VLSI, aerodinámica, dinámica de fluidos, telecomunicaciones y robótica.
- Machine learning y minería de datos en bioinformática y biología computacional, y finanzas.
- Modelado de sistemas, simulación e identificación en química, física y

biología; control, señal, y procesamiento de imágenes.

- Planificación de problemas de enrutamiento, problemas de planificación, programación y producción de robots, logística y transporte, gestión de la cadena de suministro, y otros.

### Modelado termodinámico

Un sistema material se describe como un agregado de moléculas del mismo tipo químico o de varios tipos (multicomponente). El estado de este sistema se describe, desde un punto de vista microscópico, por los tamaños moleculares y por los modos en que estas moléculas interactúan entre sí.

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  $\mu_i$ . Estos últimos describen macroscópicamente los efectos de tamaños relativos y de grado de interacción molecular.

Dependiendo de la condición del sistema, descrita por sus propiedades termodinámicas, este sistema 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. Según las condiciones en que ocurre el proceso, algunas propiedades termo-

dinámicas tienden a un máximo (entropía) o a un mínimo (energía interna, energía de Gibbs), dentro de restricciones impuestas por las fronteras que definen el sistema. Si el proceso transcurre a temperatura y presión constantes, la disminución de función de Gibbs es un indicador de la dirección espontánea del proceso y su mínimo corresponde a una distribución de componentes que configura un sistema en equilibrio estable.

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. Éste utiliza relaciones entre las propiedades que caracterizan el estado del sistema. Un modelo permite efectuar predicciones de comportamientos de fase.

Entre las funciones de uso frecuente en el modelado termodinámico están las Ecuaciones de Estado (EoS, Equation of State), una formulación matemática de las propiedades termodinámicas de un fluido o mezcla de fluidos que facilita la resolución de problemas de equilibrio de fases. Su formulación puede contener parámetros ajustables experimentalmente.

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 Modelado Termodinámico

Como ya se indicó, los problemas de optimización global involucrados en el cálculo y modelado termodinámico son muy desafiantes. Por ejemplo, la minimización global de TPDF y G 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 [9].

También, los problemas de estimación de parámetros pueden ser difíciles de resolver incluso para modelos termodinámicos simples [10][11][12]. 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 desafiante 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 basadas en metaheurísticas, tan potentes y efectivas como los métodos deterministas [13]. 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 incluye dos enfoques. El primero de ellos pretende analizar técnicas de metaheurísticas y aplicarlas en el desarrollo de algoritmos robustos para la resolución de problemas de optimización global involucrados en el cálculo termodinámico. En el segundo enfoque se pretende aplicar técnicas de aprendizaje automatizado 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, basándose en el principio de aprender mientras se optimiza.

## Resultados y Objetivos

El proyecto, que se realizará durante el bienio 2014-2015 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 para la optimización global de la función energía de Gibbs 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.

Para el año 2014 se prevé obtener los siguientes resultados:

- Identificación de sistemas termodinámicos para usar como benchmarks.
- Selección de indicadores de desempeño para localizar el óptimo global y eficiencia
- Análisis de las técnicas para optimización continua.
- Ponderación de las técnicas de optimización en función de los indicadores elegidos.

## 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] Wakeham, W. A. & Stateva, R. P. (2004). Numerical solution of the isothermal, isobaric phase equilibrium problem. *ChemInform*, 35(29).
- [2] Hua, J. Z.; Brennecke, J. F. & Stadtherr, M. A. (1996). Reliable phase stability analysis for cubic equation of state models.
- [3] Michelsen, M. L. (1982). The isothermal flash problem. part i. stability. *Fluid Phase Equilibria*, 9(1):1 – 19.
- [4] Srinivas, M. & Rangaiah, G. (2006). Implementation and evaluation of random tunneling algorithm for chemical engineering applications. *Computers and Chemical Engineering*, 30(9):1400 – 1415.
- [5] 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.
- [6] Floudas, C. (1999). *Deterministic Global Optimization: Theory, Methods and Applications. Nonconvex Optimization and Its Applications*. Springer.
- [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] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.