

Análise de Operabilidade do Reator de Van de Vusse por meio de Autoencoder Condicional

Victor Rodrigues Botelho^{a*}, Jorge Otávio Trierweiler^a, Marcelo Farenzena^a

^aGrupo de Intensificação, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos (GIMSCOP)
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

*victor.botelho@ufrgs.br

RESUMO

A análise de operabilidade avalia se um processo pode atingir metas de desempenho sob incerteza. A reação de Van de Vusse, um sistema não linear clássico, apresenta superfícies de estado estacionário não convexas e fortes limitações operacionais. Este estudo considera um cenário multivariável, com duas variáveis controladas (concentração intermediária e seletividade), duas variáveis manipuladas (temperatura e vazão de alimentação) e uma perturbação (concentração de entrada de A). Os conjuntos *Achievable Input Space* (AIS), *Desired Output Space* (DOS), *Achievable Output Space* (AOS) e *Desired Input Space* (DIS) foram gerados com base em um modelo físico e reproduzidos por meio de um Autoencoder Condicional (CAE). O CAE atingiu 99,52% de similaridade para o DIS da concentração de B (CB) e 96,31% para o DIS de seletividade (S), preservando a estrutura de operabilidade.

Palavras-chave: Controle avançado de processos; Mapa de operabilidade; Operability; Reação de Van de Vusse.

1. Motivação

Diante da importância da análise de operabilidade na engenharia de processos, ferramentas computacionais se inserem em um campo que busca integrar, de forma sistemática, as decisões de projeto e de controle. Tradicionalmente, essas duas etapas eram tratadas separadamente, o que podia resultar em sistemas inviáveis do ponto de vista operacional. A operabilidade passou a ser definida como a capacidade de um processo atingir seus objetivos operacionais considerando restrições, variáveis manipuladas e perturbações, sendo quantificada por métricas como o Operability Index (OI). Nesse contexto, a operability surge como uma ferramenta computacional que operacionaliza esses conceitos, permitindo avaliar a alcançabilidade de regiões desejadas de operação por meio da definição de conjuntos de operabilidade em espaços de entrada e saída (Lima, 2023).

Do ponto de vista computacional e aplicado, a operability consiste em um pacote em Python que integra métodos de programação não linear e geometria computacional para facilitar a análise de operabilidade de sistemas complexos. A ferramenta oferece uma interface acessível que reduz a necessidade de implementar algoritmos avançados manualmente, permitindo avaliar rapidamente a relação entre variáveis de entrada e saída, além de quantificar o desempenho operacional de processos industriais. O software também possibilita análises diretas e inversas, auxiliando tanto no projeto quanto na operação de sistemas químicos e energéticos (Alves et al., 2024).

A reação de Van de Vusse é um modelo clássico em controle e projeto sob incerteza por sua rede paralela-consecutiva, na qual $A \rightarrow B \rightarrow C$ compete com a formação direta de D, i.e., $2A \rightarrow D$, gerando superfícies altamente não lineares com máximos de seletividade bem definidos. No contexto de projeto ótimo sob incerteza, destaca-se a caracterização explícita de regiões operacionais viáveis frente a variações paramétricas, incorporando flexibilidade e robustez ao problema. Avanços recentes em operabilidade introduzem métricas geométricas para descrever como a incerteza molda o espaço alcançável, enquanto técnicas de aprendizado de máquina, como autoencoders para redução de dimensionalidade e modelos generativos condicionais, permitem construir substitutos eficientes que capturam estruturas não lineares e distribuições de saída complexas, viabilizando aplicações em otimização e controle (Alves; Gazzaneo; Lima, 2022).

Com base nesses fundamentos, o presente trabalho estendeu para um âmbito multivariável a análise de operabilidade da reação de Van de Vusse ao incorporar a seletividade como uma variável controlada adicional e ao empregar um Autoencoder Condicional para reproduzir os conjuntos AIS, DOS, AOS e DIS com alta fidelidade. Os resultados obtidos demonstram excelente precisão, com 99,52% de similaridade para o DIS da concentração de B e 96,31% para o DIS da seletividade.

2. Metodologia

2.1. Estrutura de operabilidade

A análise de operabilidade empregada segue uma estrutura na qual quatro conjuntos geométricos desempenham papel central na caracterização do comportamento do processo sob. Esses conjuntos permitem separar conceitualmente as regiões de entrada disponíveis, os alvos de saída desejados, as saídas alcançáveis e as entradas que satisfazem tais alvos de forma robusta (Ferreira et al., 2025).

O primeiro conjunto é o AIS, que define o espaço realizável das variáveis manipuladas consideradas neste estudo: a vazão de alimentação F e a temperatura do reator T . Assume-se que F pode variar no intervalo de 0 a 35 h^{-1} e que T está na faixa de 90 a 110 $^{\circ}\text{C}$, de forma análoga aos limites operacionais frequentemente adotados em análises de projeto sob incerteza e flexibilidade para reatores contínuos. O AIS é, portanto, o retângulo definido por esses limites no plano F - T , a partir do qual serão determinados os subconjuntos que satisfazem os alvos de saída (Dinh; Lima, 2023).

O segundo conjunto, DOS, representa a região de operação desejada no espaço das variáveis de saída, assumindo que o processo deve fornecer concentrações e seletividades dentro de faixas especificadas. Duas saídas são consideradas: a concentração de B (CB) e a seletividade (S). Para CB, adota-se o intervalo desejado [0,5; 1,3] mol/L, consistente com regiões de maior conversão de A em B e limitações físicas do sistema, em linha com abordagens de projeto ótimo que favorecem faixas de produto intermediário. Para a seletividade S, o intervalo $[S_{\text{low}}; S_{\text{high}}]$ é definido de forma adaptativa a partir de quantis da distribuição de S no AOS físico, a fim de evitar que o conjunto DIS correspondente se torne vazio ou trivialmente completo, seguindo recomendações para análise robusta de operabilidade (Gama et al., 2024).

O terceiro conjunto, AOS, é formado pela união de todas as saídas possíveis CA, CB, S que podem ser obtidas quando o processo opera em qualquer ponto do AIS e sob qualquer realização da perturbação CAin no intervalo [4,5; 5,7], conforme o conceito de “região alcançável”. Em outras palavras, o AOS captura a região geometricamente atingível no espaço de saídas, dado o envelope admissível de entradas e incertezas, servindo como base para avaliar em que medida o DOS é de fato atingível (Alves; Lima, 2024).

Por fim, o DIS (Desired Input Set – Conjunto de Entradas Desejadas) representa o subconjunto de condições de entrada (F , T) capazes de satisfazer o DOS de forma robusta em relação à incerteza em CAin, conceito introduzido explicitamente em estudos de operabilidade em regime permanente. Para formalizar essa robustez, adota-se um critério k -de- N , segundo o qual um par (F , T) pertence ao DIS se, em pelo menos k dos N cenários de CAin considerados, as saídas do processo permanecem dentro do DOS especificado; isto é, “número de cenários de CAin que satisfazem o $\text{DOS} \geq k$ ”. A escolha de k como maioria simples estabelece um compromisso entre conservadorismo e flexibilidade operacional, consistente com a literatura sobre projeto robusto e análise de operabilidade (Dinh; Lima, 2023).

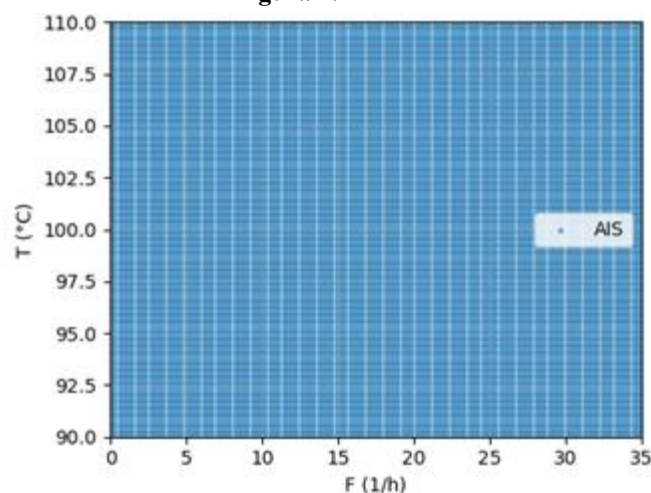
2.2. Construção dos conjuntos utilizando o modelo físico e visualização

A etapa inicial consistiu na construção dos conjuntos AIS, DOS, AOS e DIS utilizando exclusivamente o modelo físico em regime permanente, em conformidade com procedimentos clássicos de análise de operabilidade. Para esse fim, foi definida uma discretização uniforme das variáveis de entrada, com 121 pontos para F e 121 pontos para T , cobrindo completamente os intervalos estabelecidos para o AIS, e 31 cenários de CAin igualmente espaçados entre 4,5 e 5,7 mol/L, o que é típico em estudos de sensibilidade paramétrica para reatores não lineares (Rojas et al., 2008).

O Conjunto de Entradas Disponíveis (AIS) define o envelope operacional realizável das variáveis manipuladas e constitui o elemento fundamental da estrutura de operabilidade. No presente estudo, o AIS corresponde ao domínio retangular completo formado pelas faixas admissíveis da vazão de alimentação F (0 a 35 h^{-1}) e da temperatura do reator T (90 a 110 $^{\circ}\text{C}$), representando todas as combinações fisicamente possíveis de

condições operacionais para o CSTR de Van de Vusse. Essa malha discretizada completa serve como ponto de partida para a determinação do Conjunto de Saídas Alcançáveis (AOS) e, posteriormente, do Conjunto de Entradas Desejadas (DIS) sob incerteza, seguindo procedimentos padrão de operabilidade aplicados a sistemas de reatores não lineares (Rojas et al., 2009). A Figura 1 ilustra o AIS como uma região uniformemente preenchida no plano $F \times T$, a partir da qual todos os cálculos subsequentes de operabilidade são realizados.

Figura 1. AIS – $F \times T$.



Para cada tripla (F , T , CA_{in}), se obteve os valores de CA , CB e S , apenas soluções fisicamente admissíveis, ou seja, aquelas com CA dentro do intervalo de 0 até CA_{in} e seletividade finita, que foram mantidas no conjunto de dados, seguindo a prática padrão na modelagem de reatores CSTR. A partir dessas soluções, o AOS foi construído como a união de todas as saídas possíveis, e suas projeções nos planos CA , CB e CA , S são apresentadas nas Figuras 2 e 3, respectivamente, revelando regiões altamente não convexas e sensíveis às variáveis operacionais (Rojas et al., 2009).

Figura 2. AOS – $CA \times CB$ (modelo físico).

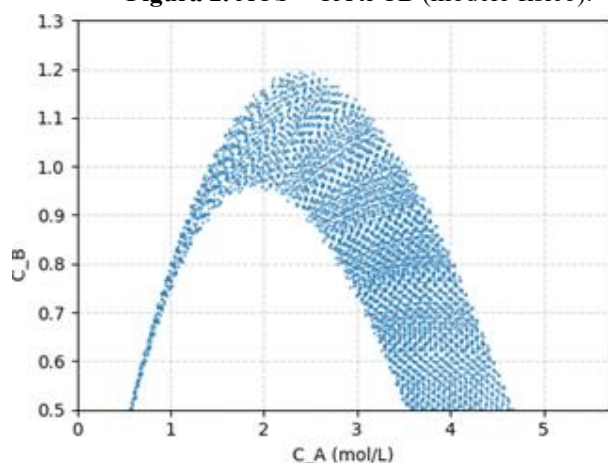
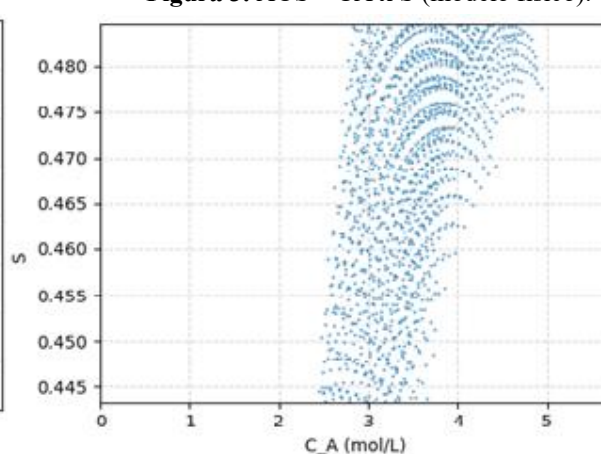


Figura 3. AOS – $CA \times S$ (modelo físico).



As regiões de saída desejadas (DOS) foram então definidas com base em critérios de desempenho e considerações de seletividade. Para CB , o conjunto DOS é ilustrado na Figura 4, na qual pontos laranja

uniformemente distribuídos no plano (CA, CB) representam a faixa de operação desejada para a concentração de B, consistente com metas de conversão intermediária discutidas na literatura (Gama et al., 2024).

Figura 4. DOS – CA x CB.

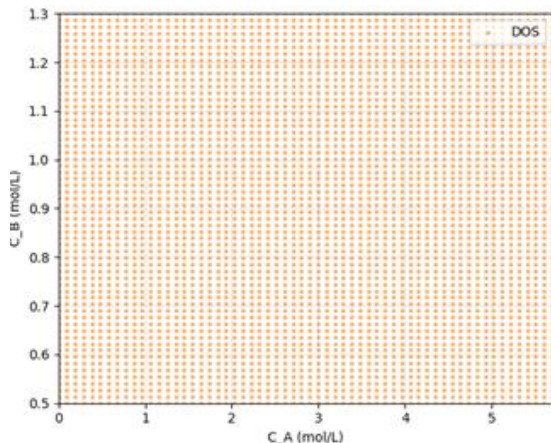
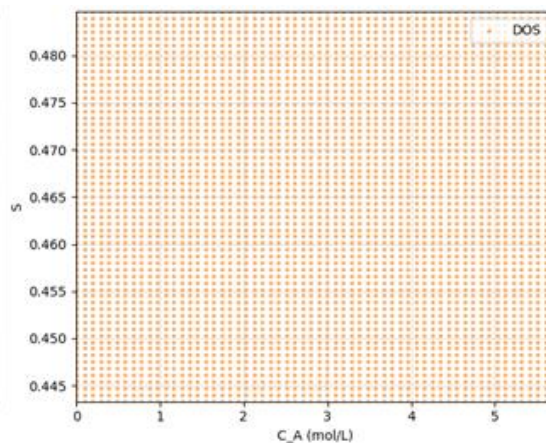


Figura 5. DOS – CA x S.



Para a seletividade S, o conjunto DOS é apresentado na Figura 5, que mostra um retângulo preenchido no plano (CA, S), definido a partir de quantis da distribuição de S dentro do AOS físico, em conformidade com abordagens de calibração estatística utilizadas para evitar conjuntos DIS degenerados (Rojas et al., 2008).

3. Resultados

3.1. Modelo substituto: autoencoder condicional

Para reduzir o custo computacional da avaliação do modelo físico mantendo a estrutura geométrica dos conjuntos de operabilidade, foi desenvolvido um modelo substituto baseado em autoencoder condicional, alinhado a abordagens recentes em sistemas de engenharia. O encoder recebe como entrada o vetor normalizado (F, T, CAin, CA, CB, S) e o projeta em um espaço latente de baixa dimensão, enquanto o decoder reconstrói as saídas estimadas ($\hat{C}_A$, $\hat{C}_B$, $\hat{S}$) a partir do vetor latente z combinado com as variáveis de condicionamento (F, T, CAin), caracterizando a transformação $(z, F, T, CAin) \rightarrow (\hat{C}_A, \hat{C}_B, \hat{S})$. Essa arquitetura permite capturar simultaneamente a compressão das saídas e sua dependência explícita das condições operacionais e perturbações na alimentação, em linha com modelos generativos condicionais (Sohn et al., 2015), sendo treinada por meio de uma função de perda definida na Equação (1):

$$L = MSE(CA, \hat{C}_A) + MSE(CB, \hat{C}_B) + MSE(S, \hat{S}) \quad (1)$$

Figura 6. AOS – CA x CB (autoencoder).

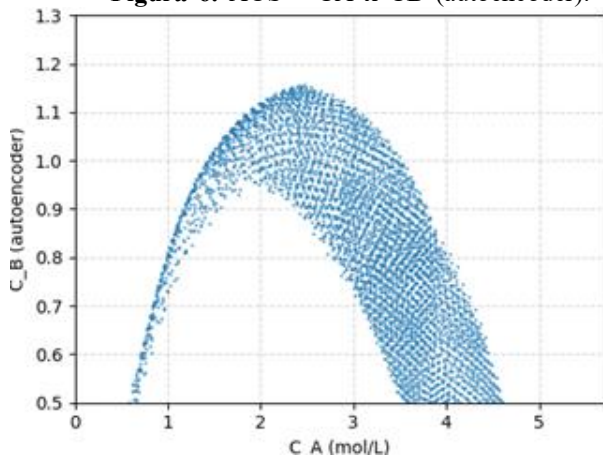
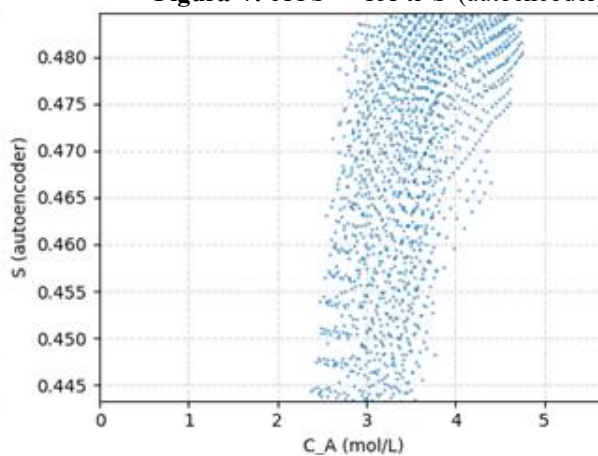


Figura 7. AOS – CA x S (autoencoder).



Os conjuntos DIS calculados a partir do autoencoder são apresentados nas Figuras 8 (para CB) e 9 (para S), os quais reproduzem a construção realizada com o modelo físico e permitem avaliar em que medida o modelo substituto preserva os limites de operabilidade robusta no plano F–T (Rojas et al., 2009).

Figura 8. DIS – CB (autoencoder).

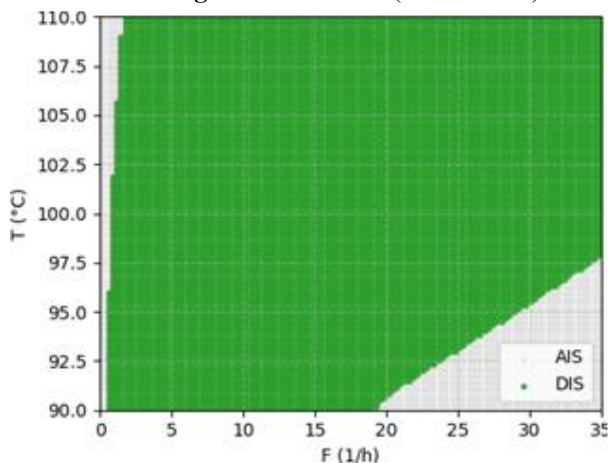
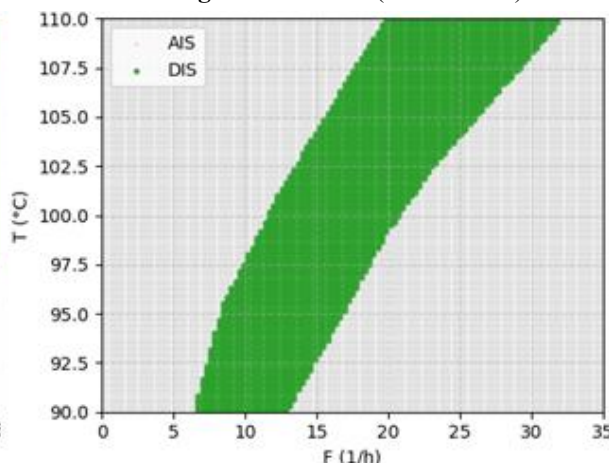


Figura 9. DIS – S (autoencoder).



A partir dos conjuntos AOS e DOS físicos, o DIS foi calculado aplicando-se o critério k-de-N a cada ponto do AIS, o que resulta em mapas de regiões robustas no plano F–T. Em ambos os casos, as regiões em verde no plano F–T correspondem a condições que satisfazem o DOS em pelo menos metade dos cenários de CA_{in}, enquanto os pontos em cinza representam o AIS completo, reproduzindo o tipo de fronteira inclinada e suavemente curva frequentemente observada em estudos de operabilidade de reatores não lineares (Gazzaneo et al., 2020).

Além disso, também se observa que as regiões em verde obtidas via CAE praticamente se sobrepõem às regiões correspondentes calculadas a partir do modelo físico (Figuras 10 e 11), sugerindo que o modelo substituto captura adequadamente a geometria das regiões de operação robusta (Ferreira et al., 2025).

Figura 10. DIS – CB (modelo físico).

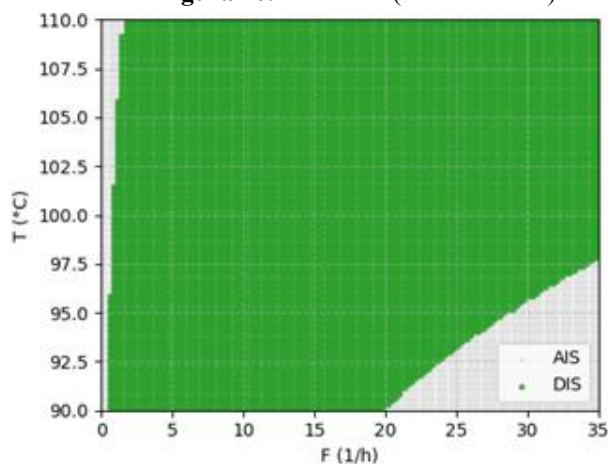
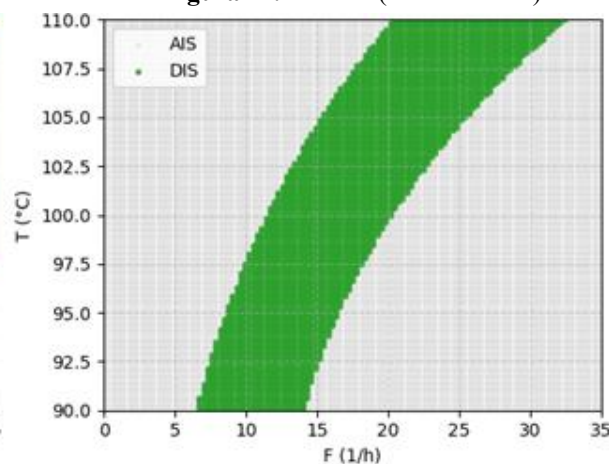


Figura 11. DIS – S (modelo físico).



4. Conclusão

Este trabalho apresentou uma análise de operabilidade para a reação de Van de Vusse em um CSTR isotérmico, considerando duas variáveis controladas (concentração do intermediário B e seletividade S), duas variáveis manipuladas (F e T) e uma perturbação associada à concentração de alimentação CA_{in}, seguindo a estrutura de operabilidade em regime permanente. Com base em um modelo físico, foram construídos os conjuntos AIS, DOS, AOS e DIS, revelando superfícies de saída não convexas e regiões de operação robusta sob incerteza na alimentação, em concordância com resultados clássicos para reatores seletivos (Goodfellow et al., 2016).

Em seguida, foi desenvolvido um Autoencoder Condicional para reconstruir as variáveis de saída (CA, CB, S) a partir das condições operacionais e das perturbações, em linha com tendências recentes que utilizam redes

neurais profundas como modelos substitutos na engenharia de processos. A análise demonstrou que foi possível trabalhar em um cenário multivariável e com alta fidelidade, pois o CAE reproduziu os conjuntos de operabilidade com 99,52% de similaridade para o DIS de CB e 96,31% para o DIS de S quando comparados às regiões correspondentes geradas diretamente a partir do modelo físico (Makrygiorgos et al., 2020).

Esses resultados indicam que modelos neurais condicionais podem ser integrados de forma consistente ao arcabouço de operabilidade, oferecendo uma alternativa computacionalmente eficiente para a avaliação de regiões viáveis e robustas em processos químicos não lineares, contribuindo para o projeto e a operação de reatores seletivos sob incerteza.

Referências

- ALVES, V. *et al.* Opyrability: a Python package for process operability analysis. **Journal of Open Source Software**, v. 9, n. 94, 2024.
- ALVES, V.; GAZZANELO, V.; LIMA, F. V. A machine learning-based process operability framework using Gaussian processes. **Computers & Chemical Engineering**, 2022
- ALVES, V.; LIMA, F. V. On the selection of control structures using process operability analysis. **Control Engineering Practice**, v. 153, p. 106117, 2024.
- DINH, S.; LIMA, F. V. Dynamic operability analysis for process design and control of modular natural gas utilization systems. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 62, p. 2052–2066, 2023.
- FERREIRA, U. G.; NEIRO, S. M. S.; OLIVEIRA-LOPES, L. C.; COSTA, T. V.; BISPO, H.; LIMA, F. V. Operability for process flowsheet analysis. **Digital Chemical Engineering**, v. 15, p. 100229, 2025.
- GAMA, V.; DANTAS, B.; SANYAL, O.; LIMA, F. V. Process operability analysis of membrane-based direct air capture for low-purity CO₂ production. **ACS Engineering Au**, v. 4, p. 394–404, 2024.
- GAZZANELO, V.; CARRASCO, J. C.; VINSON, D. R.; LIMA, F. V. Process operability algorithms: past, present, and future developments. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 59, n. 6, p. 2457–2470, 2020.
- GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. *Deep learning*. Cambridge, MA: MIT Press, 2016.
- LIMA, F. V. *Operability of software and processes*. West Virginia University, 2023.
- MAKRYGIORGOS, G.; TSAY, C.; BALDEA, M. Learning convex inner approximations of nonconvex feasible regions using neural networks. **Computers & Chemical Engineering**, v. 136, p. 106519, 2020.
- ROJAS, R.; RICARDEZ-SANDOVAL, L.; BUDMAN, H.; DOUGLAS, P. L. Operability-based approach for the design of dynamic systems. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 86, n. 12, p. 1429–1440, 2008.
- ROJAS, R.; RICARDEZ-SANDOVAL, L.; BUDMAN, H.; DOUGLAS, P. L. Steady-state analysis of the operability of chemical processes under uncertainty. **Chemical Engineering Science**, v. 64, n. 2, p. 448–460, 2009.
- SOHN, K.; LEE, H.; YAN, X. Learning structured output with deep conditional generative models. In: *ADVANCES IN NEURAL INFORMATION PROCESSING SYSTEMS (NeurIPS)*, 28., 2015. Anais [...]. 2015.