



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

DISSERTAÇÃO

METAMODELAGEM KRIGING DINÂMICA APLICADA EM
TROCADORES DE CALOR

GLADSON EULER LIMA JÚNIOR

CAMPINA GRANDE – PB

2019

GLADSON EULER LIMA JÚNIOR

**METAMODELAGEM KRIGING DINÂMICA APLICADA EM TROCADORES
DE CALOR**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior (UFCG)

Orientador

Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto (UFCG)

Orientador

CAMPINA GRANDE -PB

2019

L732m Lima Júnior, Gladson Euler.
Metamodelagem kriging dinâmica aplicada em trocadores de calor / Gladson Euler Lima Júnior. – Campina Grande, 2019.
93 f.: il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2019.

"Orientação: Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior, Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto".

Referências.

1. Kriging. 2. Modelos de Correlação. 3. Comportamento Dinâmico. 4. *Wavelet*. I. Silva Júnior, Heleno Bispo da. II. Pereira Neto, Antônio Tavernard. III. Título.


CDU 004.8(043)

**METAMODELAGEM KRIGING DINÂMICA APLICADA EM TROCADORES
DE CALOR**


Gladson Euler Lima Júnior

Dissertação apresentada em 04 / 04 / 2019

Banca Examinadora:


Prof. Dr. Heleno Bispo da Silva Júnior (Orientador)


Prof. Dr. Antônio Tavernard Pereira Neto (Orientador)


Prof. Dr. Sidinei Kleber da Silva (Examinador Interno)


Prof. Dr. Tony Herbert Freire de Andrade (Examinador Externo)

Dedico este trabalho a Deus, por sua infinita bondade, e aos meus pais Gladson Euler Lima da Silva e Maria do Socorro Barboza da Silva por todo apoio ao longo dessa caminhada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, por sua infinita bondade, em conceder-me, dia após dia a possibilidade de crescer em todos os aspectos, mantendo-me firme nas atribulações e forte para superar os desafios impostos pela vida.

A meus pais, Maria do Socorro Barboza da Silva e Gladson Euler Lima da Silva, pela confiança ao longo dessa caminhada e que sempre serão meus exemplos de moral, respeito e dignidade.

A minha irmã Mylena Euler Barboza da Silva, por toda a ajuda nos momentos difíceis e por sempre acreditar no meu esforço e potencial.

A família que escolhi: Gilvan Wanderley, Esley Cavalcante, Alysson Dantas pelo companheirismo e suporte incondicional em todos os momentos, além de me proporcionarem momentos de alegria insubstituíveis.

Aos amigos Fabrícia Sales, Prof. Karoline Brito, Lucas Carneiro, Danilo Pablo, Arthur Siqueira, Neto Pereira, Gabriel Sales, Gírrad Nayef e Danyelle Fialho por toda a ajuda e suporte.

Aos professores Heleno Bispo da Silva Júnior e Antônio Tavernard Pereira Neto, por toda a orientação ao longo da construção deste trabalho

A todos que contribuíram diretamente ou indiretamente para a realização deste trabalho.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

"Demore o tempo que for para decidir o que você quer da vida, e depois que decidir não recue ante nenhum pretexto, porque o mundo tentará lhe dissuadir."

Friedrich Nietzsche

LIMA JÚNIOR, GLADSON EULER. **Metamodelagem Kriging dinâmica aplicada em trocadores de calor**. 2019. 93 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2019.

RESUMO

Devido aos recentes avanços tecnológicos no âmbito industrial com o desenvolvimento dos pilares da indústria 4.0 como *big data*, manufatura aditiva, simulação e internet das coisas (IoT), conceitos e técnicas de inteligência artificial passaram a ser amplamente difundidas. O aprendizado de máquina (ML) apresenta-se como um ramo da inteligência artificial que passou a ter seu desenvolvimento potencializado juntamente com o aumento da capacidade de armazenamento e análise de dados. O método *gaussian process regressor* (Kriging) apresenta-se como um dos métodos de ML indicados para aplicação em processos industriais devido a sua capacidade em lidar com respostas altamente não-lineares além de fornecer uma estimativa referente ao erro estatístico, modelando-o por meio de processos gaussianos. Visando contribuir com os avanços no âmbito industrial utilizando técnicas de ML, o presente trabalho tem como objetivo o estudo da modelagem Kriging, por meio de uma metodologia desenvolvida para determinar o comportamento dinâmico de variáveis de processo. Como caso de estudo, utilizou-se um trocador de calor contracorrente, simulado no *software* Aspen Plus Dynamics™ pra obtenção dos dados dinâmicos das variáveis de maior grau de acoplamento do equipamento. A construção do modelo foi realizada no *software* Python™ utilizando modelos de correlação estacionários (*radial basis function* (RBF), *rational quadratic* (RQ) e *matern*) e não estacionários (*dot product*) para avaliar qual modelo fornece a melhor previsão. Os dados para treinamento (100 casos) e validação (10 casos) dos modelos foram gerados por meio da técnica de amostragem hipercubo latino (LHS). O modelo foi validado por meio da avaliação das métricas de erro médio quadrado (MSE), variância explicada (EVS) e coeficiente de determinação (R^2), aplicadas a cada modelo de correlação. Por fim, um filtro de *wavelet* acoplado com um filtro média móvel foi proposto para suavização do comportamento predito pelos modelos. Os resultados indicam que para os dois *outputs* do modelo (temperatura de saída do fluido quente e frio), apenas a correlação *dot product* apresentou resultados significativos para ambas as temperaturas avaliadas, fornecendo comportamentos dentro dos limites de $\pm 4\%$ de desvio para a simulação de validação escolhida para avaliação. Os testes de MSE, R^2 e EVS corroboram com os resultados observados para comportamento predito das temperaturas de ambos os fluidos. Com a incorporação dos filtros foi possível confirmar a aplicabilidade dos mesmos em conjunto com modelo oriundo da correlação *dot product*.

Palavras-chave: Kriging, modelos de correlação, comportamento dinâmico, *wavelet*.

LIMA JÚNIOR, GLADSON EULER. **Dynamic kriging metamodeling applied in heat exchangers**. 2019. 93 p. Dissertation (Master degree in Chemical Engineering) - Federal University of Campina Grande, Paraíba, 2019.

ABSTRACT

Due to the recent technological advances in the industrial segment with the development of the foundations of industry 4.0, such as big data additive manufacturing, simulation and internet of things (IoT), artificial intelligence concepts and techniques became widely known. The machine learning (ML) presents itself as a branch of artificial intelligence, which had its development propelled along with the rise in storage capabilities and data analysis. The gaussian process regressor method (Kriging) is one of the ML methods recommended for industrial processes applications due to its ability to deal with highly non-linear system responses, aside from the fact that it provides estimates regarding statistical error by modeling it as gaussian processes. Aiming to contribute to the advances in the industrial sphere by using ML techniques, the present work sets as goal to study Kriging modeling by the means of a methodology developed to determine the process variables dynamic behavior. As case study, it was used a counterflow heat exchanger simulated in the Aspen Plus Dynamic™ software in order to obtain dynamic data of the highest coupled variables to the equipment. The model was built with the Python™ programming language by using both stationary correlation models (radial basis function (RBF), rational quadratic (RQ) and matern) and non-stationary (dot product) to evaluate which one provided the best prediction. The model training (one hundred cases) and validation (ten cases) data sets were generated using the latin hypercube sampling (LHS) technique. The model was validated by evaluating the mean squared error (MSE), the explained variance score (EVS) and the determination coefficient (R^2) applied to each correlation model. Ultimately, a wavelet filter coupled to a moving average filter was proposed to smoothen the behavior predicted by the models. The results indicate that for the two model *outputs* (*output* temperature of the hot and cold fluid) only the dot product correlation presented significant results, yielding behavior inside the range of $\pm 4\%$ deviation in the validation scenario selected for appraisal. The MSE, R^2 and EVS tests confirm the observed results for the predicted behavior for both fluid temperatures. The addition of filters made it possible to confirm the applicability of themselves while coupled with the resultant model from dot product correlation.

Keywords: Kriging, correlation models, dynamic behavior, wavelet.

LISTA DE FIGURAS

Figura 4-1 - Ramos da Inteligência artificial.....	22
Figura 4-2-Técnicas de aprendizado de máquina.....	23
Figura 4-3 - Processo gaussiano com kernel RBF à priori.....	29
Figura 4-4 - Processo gaussiano com kernel RBF à posteriori.....	30
Figura 4-5 – Covariância versus distância euclidiana para diferentes valores de ν	31
Figura 4-6 - Funções randômicas traçadas a partir de processos gaussianos com kernel materno.....	31
Figura 4-7 – Covariância versus distancia euclidiana para diferentes valores de α	32
Figura 4-8 - Funções randômicas traçadas a partir de processos gaussianos com kernel RQ com $\sigma_l = 1$	32
Figura 4-9 - Quadrado latino de ordem 4.....	34
Figura 4-10-Hipercubo latino de dimensão 3.....	35
Figura 5-1-Trocador de calor simulado em contracorrente no <i>software</i> Aspen Plus.....	36
Figura 5-2-Fluxograma para obtenção e armazenamento dos <i>outputs</i> da simulação.....	38
Figura 5-3 Comunicação do <i>software</i> Aspen Plus Dynamics® com o servidor OPC (Matrikon®).....	39
Figura 5-4 Tags utilizadas na comunicação com o Aspen Plus Dynamics.....	40
Figura 5-5 Comunicação entre as variáveis de <i>input</i> e suas respectivas Tags.....	41
Figura 5-6 Comunicação entre as variáveis de <i>output</i> e suas respectivas Tags.....	41
Figura 5-7 -Visualização da comunicação entre o servidor OPC e o Python.....	42
Figura 5-8 -Visualização da comunicação entre o Python e o Excel (VBA).....	42
Figura 5-9 - Procedimento de obtenção dos modelos Kriging para ajuste do tempo de amostragem.....	45
Figura 5-10 - Estruturação do Kriging dinâmico.....	45
Figura 6-1-Comportamento do fluido quente para os diferentes modelos de correlação.....	49
Figura 6-2-Comportamento do fluido frio para os diferentes modelos de correlação.....	49
Figura 6-3-Erro médio quadrado para a temperatura do fluido quente.....	50
Figura 6-4-Erro médio quadrado para a temperatura do fluido frio.....	51
Figura 6-5-Coeficiente de determinação para a temperatura do fluido quente.....	51
Figura 6-6-Coeficiente de determinação para a temperatura do fluido frio.....	52
Figura 6-7-Variância explicada para a temperatura do fluido quente.....	52
Figura 6-8-Variância explicada para a temperatura do fluido frio.....	53

Figura 6-9-Temperatura fluido quente predita para a simulação de validação 6 sem otimização	56
Figura 6-10-Temperatura do fluido quente predita para a simulação de validação 6 com uma otimização.....	57
Figura 6-11-Temperatura do fluido quente predita para a simulação de validação 6 com duas otimizações	57
Figura 6-12-Perfil de temperatura do fluido quente após aplicação dos filtros propostos para $n = 0$	58
Figura 6-13-Perfil de temperatura do fluido quente após aplicação dos filtros propostos para $n = 1$	59
Figura 6-14-Perfil de temperatura do fluido quente após aplicação dos filtros propostos para $n = 2$	59
Figura 10-1-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 01.....	66
Figura 10-2-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 01.....	66
Figura 10-3-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 02.....	67
Figura 10-4-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 02.....	67
Figura 10-5-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 03.....	68
Figura 10-6-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 03.....	68
Figura 10-7-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 04.....	69
Figura 10-8-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 04.....	69
Figura 10-9-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 05.....	70
Figura 10-10-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 05.....	70
Figura 10-11-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 06.....	71
Figura 10-12-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 06.....	71
Figura 10-13-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 07.....	72
Figura 10-14-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 07.....	72
Figura 10-15-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 08.....	73
Figura 10-16-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 08.....	73
Figura 10-17-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 09.....	74
Figura 10-18-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 09.....	74
Figura 10-19-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 10.....	75
Figura 10-20-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 10.....	75

LISTA DE TABELAS

Tabela 4-1 - Resumo de várias funções de covariância comumente usadas	33
Tabela 5-1 Parâmetros especificados no bloco do trocador de calor	36
Tabela 5-2 - <i>Inputs</i> e <i>outputs</i> escolhidos para construção do modelo Kriging.....	40
Tabela 5-3 -Limite inferior e superior de cada variável de <i>input</i>	44
Tabela 5-4 – Valores utilizados dos hiperparâmetros do modelo.	46
Tabela 5-5 - Métricas de avaliação utilizadas	47
Tabela 6-1 -Valores médios encontrados referente as métricas avaliadas para cada simulação de validação referente a temperatura do fluido quente.....	54
Tabela 6-2 -Valores médios encontrados referente as métricas avaliadas para cada simulação de validação referente a temperatura do fluido frio.....	55
Tabela 6-3 - Parâmetros utilizados para o filtro de wavelet	58

LISTA DE SÍMBOLOS DE ABREVIATURAS

$m(x)$	Função média de um processo gaussiano
\mathbb{E}	Esperança
$f(x), f(x^*)$	Processo gaussiano em um ponto à priori; Processo gaussiano em um ponto a priori
Cov	Covariância
$k(x, x^*)$	Função de covariância (ou kernel) avaliado nos pontos x e x^*
\mathcal{GP}	Processo Gaussiano: $f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x^*))$; A função f é distribuída como um processo gaussiano com função média $m(x)$ e função covariância $k(x, x^*)$
$Y(x)$	Vetor de respostas referentes a cada ponto de amostragem
$h_k(x); H$	Funções de base fixa, funções de base fixa aplicadas em todos os pontos de amostragem
β_k	Parâmetros de regressão inferido a partir dos dados
$Z(x)$	Função desvio aplicado a cada ponto da amostragem
σ^2	Variância
θ	Hiperparâmetros associados ao modelo de correlação
σ_f	Desvio padrão do sinal
σ_l	Escala de comprimento característico
K_ν	função de Bessel modificada
ν	Parâmetro adicional ν do kernel matern que controla a suavidade da função resultante
D	Distância Euclidiana
α	Fator de mistura de escala
$U_D(t)$	coeficiente global de transferência de calor após inclustação no tempo t
U_{LIMPO}	coeficiente global de transferência de calor padrão trocador de calor limpo
R_D	Resistencia térmica devido à incrustação
y_i	Resposta para o ponto i oriunda dos dados
\hat{y}_i	Resposta predita pra o ponto i
$Var\{\}$	Variância
\bar{y}	Valore médio das respostas

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	15
2	OBJETIVOS	17
2.1	Geral.....	17
2.2	Específicos	17
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	18
4	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	22
4.1	Inteligência Artificial	22
4.1.1	Machine Learning	23
4.2	Processo Gaussiano de Regressão (Kriging).....	25
4.3	Funções de covariância (Kernel).....	28
4.3.1	Funções de covariância estacionária.....	28
4.3.2	Funções de Covariância de produtos de pontos.....	33
4.4	<i>Design</i> de Experimentos.....	34
5	METODOLOGIA	36
5.1	Caso de Estudo.....	36
5.2	Aquisição de dados.....	38
5.2.1	Comunicação Aspen Dynamics®-Servidor OPC	39
5.2.2	Comunicação Python-Servidor OPC	41
5.2.3	Comunicação Python-Excel (VBA).....	42
5.2.4	Amostragem utilizando o Hipercubo Latino (LHS)	43
5.3	Construção do Meta-modelo Kriging Dinâmico.....	44
5.4	Validação do modelo.....	46
6	RESULTADOS	48
6.1	Simulações de Validação	48
6.2	Avaliação da inclusão de filtros para redução de ruído.	56
7	CONCLUSÕES	60
8	SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS	61
9	REFERÊNCIAS.....	62
10	APÊNDICE.....	66
10.1	Apêndice – A: Simulações de validação	66
10.2	Apêndice – B: Artigo Concluído.....	76

1 INTRODUÇÃO

O desenvolvimento e aplicação de técnicas de aprendizado de máquina têm se tornado cada vez mais difuso devido à sua capacidade de resolver problemas complexos nas mais diversas áreas, como engenharia e mercado financeiro. A modelagem de processos utilizando este tipo de abordagem tem sido bastante difundida devido à possibilidade de determinação de variáveis de difícil medição a partir do uso de *softsensors*^[1] (PANI et al., 2011). Além de possibilitar a criação de modelos reduzidos baseados em dados operacionais de um processo real, ou ainda, dados originados de modelos rigorosos gerados através de modelagens convencionais (fenomenológica), também chamados de modelos substitutos.

Modelos de aprendizado de máquina foram desenvolvidos utilizando principalmente redes neurais artificiais (RUTAGEMWA et al., 2018), árvore de decisão (SWETAPADMA et al., 2017), máquina de vetores de suporte (LAL e DATTA, 2018) e processo gaussiano de regressão (GPR) (RICHARDSON et al., 2017). No entanto, o GPR ou Kriging apresenta-se como um dos modelos mais relevantes devido a sua capacidade de lidar com respostas não lineares. O mesmo também é capaz de fornecer informações referentes ao erro estatístico que pode ser modelado a partir de um processo randômico com distribuição gaussiana, permitindo a estimação da resposta de um ponto não observado utilizando os pontos experimentados mais próximos (RASMUSSEN e WILLIAMS, 2006).

Neste contexto, várias contribuições utilizando o processo gaussiano de regressão foram encontradas na literatura, buscando não apenas a aplicação do modelo Kriging para estimação de parâmetros ou geração de modelos, mas também propondo modificações estruturais no método buscando otimizá-lo. Recentemente, Richardson et al. (2017) usou um GPR para prever a vida útil de baterias. Foram avaliados os comportamentos de 3 tipos de células e observou-se que o aumento do número de ciclos alimentados no treinamento, melhora significativamente a estimação das alterações não lineares no comportamento do envelhecimento da bateria.

Lataire e Chen (2016) propuseram uma abordagem inovadora no uso do processo gaussiano (GP), aplicando-o como um estimador de funções de transferência (TF) a partir de uma abordagem no domínio da frequência que conduz a uma formulação válida para sistemas contínuos e discretos. De acordo com os autores, a estimação da TF pelo processo gaussiano (GPTF) apresentou uma equivalência quando comparada ao estimador de resposta ao impulso finito (RFIR) no domínio do tempo em condições adequadas. No entanto, o GPTF apresenta alguma vantagem, uma vez que as estimativas para este estimador podem ser restritas a uma banda de frequência limitada.

[1] *Softsensors* são modelos de inferência que utilizam variáveis facilmente mensuráveis para estimar variáveis de processo que são difíceis de medir devido a limitações tecnológicas, ou altos custos de investimento (KADLEC et al., 2009).

Uma nova abordagem não paramétrica utilizando a combinação de um efeito fixo e uma regressão do processo gaussiano de efeito aleatório (ME-GP) foi usado por Luo et al. (2018). Os autores utilizaram o modelo para prever o comprimento do fluxo de massa fundida para preenchimento de diferentes moldes em processos de moldagem por injeção, obtendo um desempenho superior de ME-GP em relação ao GP puro, para um grau de significância de 95%.

Normalmente, o uso de tais técnicas está relacionado à determinação de condições estacionárias ou instantâneas de variáveis de processo. Entretanto, a aplicação de tal metodologia, sendo capaz de estimar o comportamento transitório de variáveis, principalmente no âmbito industrial, pode auxiliar na tomada de decisão para manutenção preditiva e falhas. Nesse sentido, a proposta deste trabalho é a aplicação da técnica Kriging Universal (UKG) para determinar o comportamento transiente de variáveis. A metodologia foi aplicada em um trocador de calor contracorrente, em um estudo comparativo entre diferentes funções de correlação do modelo de Kriging, buscando determinar qual função fornece a melhor predição.

A dissertação está dividida em oito capítulos sendo o primeiro deles (introdução) já apresentada.

O capítulo dois apresenta os objetivos gerais e específicos almejados no desenvolvimento deste trabalho.

O capítulo três contém a revisão bibliográfica apresentando um contexto geral sobre o surgimento do termo krigagem e apresentando um apanhado de trabalhos desenvolvidos na área de 1951 até o presente ano (2019) visando apresentar as diferentes aplicabilidades do método Kriging e como elas passaram a se diversificar nas últimas décadas.

O capítulo quatro apresenta a revisão bibliográfica onde são apresentados conceitos gerais referentes a inteligência artificial e aprendizado de máquina, além dos conceitos e equacionamentos referentes ao método de krigagem e técnicas de amostragem de dados.

No capítulo cinco faz-se a apresentação detalhada de toda a metodologia utilizada para obtenção dos modelos e como foram realizados os testes de acuraria e desempenho dos mesmos.

Os capítulos seis e sete são dedicados à análise e discussão dos resultados obtidos e apresentação das conclusões.

Por fim, apresentam-se as sugestões de trabalhos futuros, referências e anexos.

2 OBJETIVOS

2.1 Geral

Estudo da modelagem Kriging aplicada a trocadores de calor, para determinação do comportamento dinâmico das variáveis do processo.

2.2 Específicos

- Realizar a simulação de um trocador de calor contracorrente com decaimento da área de troca térmica para que o mesmo sirva de modelo rigoroso;
- Realizar a comunicação Aspen[®]-Servidor OPC-Python[®]-Excel[®] (VBA) para obtenção dos dados do processo;
- Aplicar a técnica do *Gaussian Process Regressor (Kriging)* por meio da utilização do *Software Python[®]* para geração do modelo reduzido, visando a determinação do comportamento dinâmico de variáveis do processo;
- Testar funções de covariância estacionárias e não estacionárias disponíveis na biblioteca *scikit-learn* do Python[®] para treinamento de diferentes modelos, afim de verificar qual fornece a melhor capacidade de predição;
- Avaliar a incorporação do filtro de *wavelet* combinado com um filtro média móvel para suavização do comportamento dinâmico estimado pelos modelos.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Kriging surgiu da Engenharia de Mineração no início dos anos 50 como uma estatística poderosa e comprovada técnica de avaliação de recursos naturais. O nome de Kriging foi dado por Matheron (1969) em reconhecimento do trabalho pioneiro de Krige (1951) que primeiro aplicou esta abordagem para avaliar as reservas de um depósito de ouro.

Krigagem como apresentado na geoestatística pode ser visto como o melhor estimador linear não enviesado (blue) de uma função aleatória. Em desenvolvimentos mais recentes em geoestatística, métodos de predição espacial não-linear ótima tornaram-se parte da "família Kriging" (CRESSIE, 1990).

Nos últimos 65 anos este campo apresentou um grande avanço, e significativos trabalhos foram publicados nesse período, sendo alguns deles considerados para análise.

Na década de 1990, Oliver e Webster, utilizaram o Kriging como método de interpolação para sistemas de informação geográfica, usando exemplos de estudos de caso, sendo um deles envolvendo o mapeamento e controle da salinidade do solo do Vale do Jordão de Israel e o outro no semi-árido Botsuan. A cobertura herbácea foi estimada e mapeada a partir do levantamento fotográfico aéreo e foram feitas análises da condutividade elétrica em determinadas épocas do ano, gerando, por meio do método Kriging, o mapeamento aproximado da salinidade das regiões estudadas.

Jourdan et al. (1998) realizaram um trabalho sobre a previsão da temperatura e a salinidade do mediterrâneo, onde, a partir de um conjunto de dados históricos climatológicos dos 10 anos anteriores do local, foi possível prever as duas variáveis de interesse, utilizando o método de Kriging. Os resultados indicam que a partir de um conjunto de dados homogêneo, foi possível realizar a estimação da temperatura e da salinidade com taxas de erro de 0,65% no conjunto de dados de validação.

No início do século XXI o método Kriging passou a ser aplicado de forma mais difusa, distribuindo o foco para além do campo da geoestatística. Significativos trabalhos foram realizados aplicando o Kriging para geração de modelos reduzidos visando a diminuição do esforço computacional em modelagens utilizando CDF além da utilização do método para criação de modelos de processos industriais.

Jeong et al. (2005) aplicaram o Kriging para auxiliar a modelagem fluidodinâmica de um aerofólio bidimensional, com o intuito de reduzir o tempo e esforço computacional de uma otimização, minimizando o número de variáveis da função objetivo, buscando gerar a melhor relação entre elevação e resistência ao arrasto, manipulando a altura, angulação e *design*. A

partir da construção do metamodelo por meio da técnica Kriging foi possível reduzir drasticamente o tempo computacional necessário para a avaliação da função objetivo.

Em 2006, Jeong et al. publicaram um segundo trabalho onde modelaram a câmara de combustão de um motor a diesel. Os autores utilizaram o Kriging com o mesmo objetivo do trabalho publicado em 2005, ou seja, a criação de um modelo reduzido buscando minimizar o tempo computacional na otimização de um modelo rigoroso construído em CFD. O método *k-means* foi utilizado para limitar o número de pontos de amostra adicionais, dentre esses pontos, dois formatos de câmara de combustão foram utilizados. Comparado a otimização realizada no modelo em CFD com o metamodelo Kriging, observou-se que o tempo computacional de projeto foi reduzido em 95%.

Xie et al. (2009) investigaram a abordagem da metamodelagem Kriging a fim de comprovar a precisão e eficiência do método, aplicando funções não lineares como funções de teste e aplicando o método em problemas práticos de engenharia não linear, como a formação de flangeamento de chapas metálicas, as variáveis de entrada utilizadas foram: altura, desvio e a tensão. Os resultados comprovam que a metamodelagem utilizando o método Kriging mostrou-se eficaz para problemas de engenharia não-lineares.

No ano seguinte, Yong-hai et al. (2010) realizaram um estudo sobre a temperatura no campo de acoplamento de barris baseada na modelagem Kriging. As variáveis de entrada escolhidas para o treinamento do modelo foram a velocidade da água de resfriamento, a espessura da camada de fluido e o diâmetro do barril em contato com a água de resfriamento, como saída foi escolhida a temperatura média do barril. Os resultados mostraram que o modelo Kriging para estimação da temperatura do barril possui precisão razoável, obtendo um erro máximo de 10% dentre as variáveis de análise, sendo empregado para substituir o cálculo através da análise por elementos finitos que demanda um maior esforço computacional no projeto de otimização da temperatura do campo de acoplamento.

Um trabalho recente publicado por Peng et al. (2013), na área de geoprocessamento estudou as distribuições do carbono orgânico e nitrogênio total no solo com base em geoestatística em uma pequena bacia hidrográfica em uma área montanhosa do norte da China. No trabalho foram utilizadas variáveis como tipo de uso da terra, elevação e aspecto, para determinação das concentrações no solo e construção de mapas de distribuição utilizando a abordagem Kriging. Os resultados obtidos apontam que as características geoestatísticas das concentrações de SOC e STN na bacia hidrográfica estão intimamente relacionadas com o tipo de uso da terra e estrutura topográfica espacial. Por meio da modelagem Kriging e construção

dos mapas de distribuição foi possível constatar que tanto as concentrações de carbono (SOC) como de nitrogênio (STN) na bacia de Matiyu diminuíram de sudeste para noroeste.

Velásquez et al., (2017) utilizaram as técnicas krigagem para construção de um modelo baseado em resultados experimentais, para determinação dos limites de inflamabilidade de misturas etanol-ar, e avaliar diferentes concentrações de umidade na composição do etanol. Os limites de inflamabilidade devem ser identificados para avaliar e controlar os riscos de tratamento de processos específicos, tendo em vista que o mesmo permite verificar não apenas se a mistura é inflamável ou não inflamável, mas revela a proximidade de seus limites de inflamabilidade. O modelo estabeleceu a previsão dos limites a partir dos parâmetros de pressão no balão de ensaio, a temperatura da mistura ar-etanol, e a relação do combustível com umidade presente no etanol. Desta forma, foi possível obter a condição de inflamabilidade de misturas etanol-ar com temperaturas que variam entre 20 °C e 210 °C, pressão entre 40 kPa e 101,3 kPa, concentração relacionadas a umidade do etanol a 0,5% e 8%, e porcentagens de volume de etanol entre 1% e 35%, de forma eficiente.

O trabalho desenvolvido por Wang et al. (2018), emprega o *Gaussian Process Regressor*(GPR) para otimizar a combustão em uma caldeira, com o objetivo de reduzir a emissão de NOx, onde relaciona características de emissão e parâmetros de operação. Dentre as variáveis escolhidas para geração do modelo estão: velocidade do ar primário, cinco níveis de velocidade do ar secundário, velocidade de rotação de quatro alimentadores de carvão, concentração de oxigênio na saída do forno e vazão total de carga. Foi obtido uma redução de emissão do NOx de 345 ppm para 238 ppm através da otimização dos parâmetros operacionais da caldeira.

Alves et al. (2018) aplicaram técnicas de controle de *Self-optimizing* às respostas de superfície de processos usando o método Kriging como um construtor de modelo reduzido. Foi desenvolvido um procedimento sistemático para a seleção de estruturas de controle (SOC) de processos químicos usando respostas substitutas dos mesmos. A partir do procedimento realizado juntamente com a utilização do modelo Kriging foi possível simplificar e reduzir a complexidade de avaliar estruturas de controle nesses processos. O procedimento descrito no trabalho desenvolvido está sendo automatizado em uma interface de usuário amigável, para cessar os dois problemas mais encontrados no SOC pelos engenheiros: os cálculos tediosos (resolvidos pela interface do usuário) e a extrema complexidade na avaliação de gradientes e Hessianas dos modelos utilizados, sendo este problema, resolvido pela modelagem baseada em modelos substitutos.

Liu et al. (2018), empregaram o *Gaussian Process Regress* (GPR) com o objetivo de avaliar como a utilização de diferentes porcentagens de dados omissos interferiam na estimação dos valores de variáveis de processo de produção de energia eólica. A utilização de um banco de dados completo das variáveis: velocidade e direção do vento, temperatura do ar e umidade relativa forneceram estimativas sem erro estatístico na previsão da força do vento. Variando a porcentagem de dados ausentes entre 0% e 30% foram encontradas distorções de até 22% na estimação da variável de saída.

Em 2019, Liu et al. apresentaram uma melhoria do modelo de Kriging para o planejamento do Micro Energy Grid (MEG) para satisfazer as demandas do usuário no consumo de energia elétrica, seja ela para resfriamento ou aquecimento, em diferentes dias típicos, desenvolvendo configurações otimizadas e um custo total anual mínimo. A melhoria do modelo de Krigagem, foi obtida através da combinação do mesmo com o método de amostragem por hipercubo latino (LHS), desta forma, encontrando o custo mínimo anual total e o planejamento ideal. O modelo reduziu significativamente o tempo de cálculo da função objetivo e melhorou a eficiência de busca e desempenho de cálculo da solução ótima. Comparado com o modelo Kriging com critério de amostragem única, o modelo proposto adquiriu melhores resultados de planejamento. Além disso, o método pode ser adaptado ao planejamento MEG em diferentes climas e situações de carga.

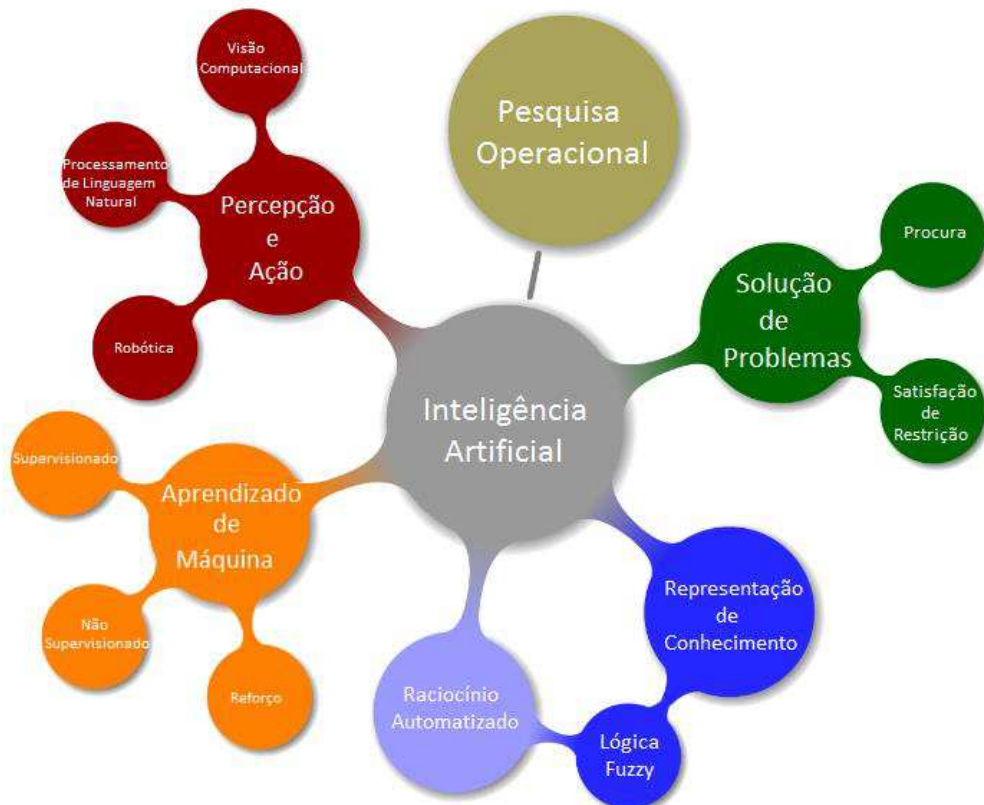
4 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

4.1 Inteligência Artificial

No século XX os avanços da tecnologia, especialmente o advento dos computadores, produziram máquinas que reduziram ou substituíram o trabalho do cérebro humano, levando ao surgimento e à rápida ascensão da inteligência artificial. A inteligência artificial (IA) pode ser definida como a capacidade de reproduzir de forma artificial através de máquinas, sistemas ou redes, características essencialmente humanas. Dentre essas características destacam-se: percepção, memória, julgamento, raciocínio, reconhecimento, aprendizado, compreensão e comunicação (LI e YI, 2017).

A IA tem sido utilizada nas mais diversas áreas como: segurança de dados, mercado financeiro, mineração de dados, dentre outros. A Figura 4-1 apresenta os diversos ramos da inteligência artificial, dentre eles o aprendizado de máquina destaca-se pela vasta aplicação em problemas de alta complexidade.

Figura 4-1 - Ramos da Inteligência artificial



Fonte: Adaptado de KEPPNER (2018).

4.1.1 Machine Learning

Machine Learning (ML) ou aprendizado de máquina é um ramo da IA cujo objetivo é o desenvolvimento de técnicas computacionais sobre o aprendizado bem como a construção de sistemas capazes de adquirir conhecimento de forma automática (MONARD e BARANAUSKAS, 2003). As técnicas relacionadas a ML surgiram por volta do ano de 1950, mas tem ganhado espaço recentemente devido a atual capacidade de processamento e armazenamento de uma enorme quantidade de dados (*big data*) (HALL et al., 2015).

Existem dois principais tipos de aprendizado de máquina, são eles:

- **Supervisionado:** O algoritmo de aprendizado utiliza um conjunto de dados de treinamento rotulados, para os quais existe um vetor de entradas com características e atributos do sistema e um vetor de saídas conhecido, os quais possuem correlação com as entradas propostas. O objetivo deste tipo de aprendizado é basicamente reconhecer os padrões existentes entre os dados de entrada e saída e conseguir determinar corretamente as saídas para novos dados ainda não rotulados;
- **Não supervisionado:** Neste caso os dados não possuem saídas específicas ou rótulos que sejam utilizados para reconhecimento de padrões. Neste tipo de aprendizado, o objetivo é basicamente encontrar nos dados características em comum de forma a agrupa-los em conjuntos distintos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No aprendizado supervisionado, caso o rótulo ou variável de saída atribuído no treinamento seja um número real, o aprendizado é categorizado como sendo de regressão. Para os casos onde essa saída é uma categoria, como “vermelho” ou “azul” ou “doença” e “nenhuma doença” o aprendizado é dito de classificação (MONARD e BARANAUSKAS, 2003). A Figura 4-2 apresenta as principais técnicas de ML para cada tipo de aprendizado.

4.1.1.1 Técnicas de Machine Learning para classificação

Dentre as diversas técnicas descritas na literatura e presentes na Figura 4-2, destacam-se:

- *Support Vector Machine (SVM)*: É um algoritmo de aprendizado de máquina supervisionado que pode ser aplicado tanto para classificação como para regressão. No entanto, é utilizado principalmente para problemas de classificação. O método gera um espaço n -dimensional, onde n é o número de atributos presentes, e o valor de cada atributo é referente a uma determinada coordenada do espaço, assim, definindo especificamente cada um, de forma a permitir a classificação novos dados baseados nos dados anteriores (SHEN et al., 2016);
- *Nearest Neighbors*: Envolve um conjunto de treinamento de casos positivos e negativos. Uma nova amostra é classificada calculando-se a distância até o caso de treinamento mais próximo, e assim o sinal desse ponto determina a classificação da amostra. O classificador estende essa rotina, obtendo os k pontos mais próximos e atribuindo o sinal de cada amostra subsequente (LIN et al., 2015).

4.1.1.2 Técnicas de Machine Learning para regressão

Dentre os métodos de Machine Learning voltados para regressão mais utilizados na literatura, destacam-se:

- *Redes Neurais Artificiais*: Neste método os dados de treinamento são alimentados em forma de vetores, aos quais são ponderados por pesos sinápticos antes do treinamento. Posteriormente é realizando um somatório, que tem conceitualmente o objetivo de representar um neurônio biológico. Em seguida uma função de ativação (linear, tangente, hiperbólica, dentre outras) é aplicada para obtenção do vetor de saída. Os pesos podem ser otimizados de acordo com métricas conhecidas como erro relativo, erro médio quadrático dentre outros, para minimizar o desvio entre as saídas previstas durante a etapa de treinamento (ESFE et al., 2015);

- **Árvore de decisão:** Esse método divide um conjunto de dados em vários subconjuntos cada vez menores. O resultado final é uma árvore com nós de decisão e nós de folha. Um nó de decisão tem no mínimo duas ou mais ramificações, cada uma representando valores para a variável testada. O nó de folha, representa uma decisão sobre o objetivo numérico. O nó de decisão mais alto em uma árvore que corresponde ao melhor preditor chamado nó raiz. A abordagem de regressão da árvore de decisão baseia-se no pressuposto implícito de que as relações entre as características e os objetos alvo podem ser lineares ou não lineares. Portanto, ela pode ser usada tanto para lidar com relações complexas, não-lineares como proporções (XU et al., 2016);
- **Processo Gaussiano de Regressão ou *Kriging*:** Baseado no princípio da geoestatística, o *Kriging* é um método de aprendizado de máquina que possibilita representar sistemas a partir de processos gaussianos atrelados a modelos de regressão. Modelos de processos gaussianos como um tipo de método não paramétrico têm sido aplicados em vários campos devido a muitas propriedades desejáveis, como a existência de formas explícitas, a facilidade de expressar as incertezas nas previsões, a capacidade de capturar uma ampla variedade de comportamento através funções de covariância, e uma interpretação bayesiana natural. Demonstrando ser eficazes e poderosos para os problemas de regressão (WU e WANG, 2018).

4.2 Processo Gaussiano de Regressão (Kriging)

O método Kriging foi sugerido pela primeira vez na década de 1950 pelo engenheiro de minas Daniel G. Krige (KRIGE, 1951) e desenvolvido posteriormente pelo matemático Georges Matheron (MATHERON, 1969).

Por definição um processo gaussiano (\mathcal{GP}) é uma coleção de variáveis aleatórias que possui uma distribuição gaussiana conjunta (RASMUSSEN e WILLIAMS, 2006).

Um processo gaussiano pode ser completamente especificado pela sua função média ($m(x)$) e função de covariância ($k(x, x^*)$). A média e covariância de um processo real $f(x)$, pode ser definida da forma como apresentada nas Equações (1) e (2):

$$m(x) = \mathbb{E}[f(x)] \quad (1)$$

$$\text{Cov}(f(x), f(x^*)) = \mathbb{E}[(f(x) - m(x))(f(x^*) - m(x^*)))] = k(x, x^*) \quad (2)$$

Observa-se que a covariância entre os *outputs* ($f(x)$ e $f(x^*)$) é escrita como uma função dos *inputs* do processo. Desta forma, pode-se descrever o processo gaussiano como sendo,

$$f(x) \sim \mathcal{GP}(m(x), k(x, x^*)) \quad (3)$$

Comumente considera-se processos gaussianos com a função média sendo igual a zero ($m(x) = 0$), entretanto, a média do processo a posteriori não se limita a esta condição. Existem diversas razões pelas quais é necessário modelar explicitamente uma função média, incluindo interpretabilidade do modelo, possíveis limites analíticos existentes, dentre outras.

O uso de funções de base explícita é uma forma de especificar uma média diferente de zero sobre as funções. Entretanto, na prática, pode ser difícil especificar uma função média fixa, na maioria dos casos, é mais conveniente especificar funções de base fixa, como mostrado na Equação (4).

$$y(x) = \sum_{k=1}^n h_k(x)\beta_k + f(x) \quad (4)$$

Partindo da Equação (4) pode-se expandir o somatório na forma:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n h_k(x)\beta_k &= h_1(x)\beta_1 + h_2(x)\beta_2 + \dots + h_n(x)\beta_n \\ &= [h_1(x) \ h_2(x) \ \dots \ h_n(x)] \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (5)$$

Portanto,

$$\sum_{k=1}^n h_k(x)\beta_k = h(x)^T \beta_k ; \quad (6)$$

Substituindo a Equação (6) em (4) chega-se na Equação (7) expressa abaixo.

$$y(x) = h(x)^T \beta_k + f(x) \quad (7)$$

O primeiro termo ($h(x)^T$) emula uma tendência média da resposta verdadeira e pode ser visto como um modelo de regressão que se apresenta como uma combinação linear de k funções escolhidas. No modelo Kriging universal (UKG) aplicado neste trabalho, as funções de base fixa são comumente modeladas como polinômios de ordem baixa, onde β_k representam os parâmetros de regressão para a função polinomial e é determinado por meio do método Generalized Least Square (GLS) (MARTIN e SIMPSON, 2003). Essa ideia foi explorada explicitamente em 1975 por Blight e Ott (1975) que utilizaram o \mathcal{GP} para modelar os resíduos de uma regressão polinomial, ou seja, $h(x) = (1, x, x^2, \dots)$.

Aplicando tal formulação para um conjunto de pontos de amostragem $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ com $x \in \mathbb{R}^q$ onde q é o número de variáveis de entrada do processo, pode-se expressar a Equação (7) na forma geral descrita pela Equação (8) (LEE et al., 2018).

$$Y(x) = H\beta + Z(x) \quad (8)$$

Onde,

$$Y(x) = [y(x_1), y(x_2), \dots, y(x_n)]^T \quad (9)$$

$$H = \begin{bmatrix} h_1(x_1) & h_2(x_1) & \dots & h_k(x_1) \\ h_1(x_2) & h_2(x_2) & \dots & h_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(x_n) & h_2(x_n) & \dots & h_k(x_n) \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$\beta = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k]^T \quad (11)$$

O vetor $Y(x)$ contém todas as respostas referentes a cada ponto de amostragem, $x_i; i = 1, 2, 3 \dots n$. As funções desvio representadas pela Equação (12) são normalmente modeladas como um processo randômico gaussiano com média zero e variância σ^2 . O modelo de covariância ou correlação espacial ($K[k(x_i, x_j | \theta)]$) presente na Equação (13) e explicitada pela Equação (14) controla a suavidade do resultado krigagem a partir da manipulação de parâmetros livres ou hiperparâmetros θ associado ao modelo, além de ajustar a influência de pontos próximos e a diferenciabilidade da superfície, quantificando a correlação entre duas observações x_i e $x_j; i \neq j$ (MATHERON, 1969).

$$Z(x) = [z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)]^T \quad (12)$$

$$\text{Cov}(z(x_i), z(x_j)) = \mathbb{E}[(z(x_i) - m(x_i))(z(x_j) - m(x_j))] = \sigma^2 K[k(x_i, x_j | \theta)] \quad (13)$$

$$K[k(x_i, x_j | \theta)] = \begin{bmatrix} k(x_1, x_1 | \theta) & k(x_1, x_2 | \theta) & \dots & k(x_1, x_n | \theta) \\ k(x_2, x_1 | \theta) & k(x_2, x_2 | \theta) & \dots & k(x_2, x_n | \theta) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1 | \theta) & k(x_n, x_2 | \theta) & \dots & k(x_n, x_n | \theta) \end{bmatrix} \quad (14)$$

4.3 Funções de covariância (Kernel)

As funções de covariância são ferramentas cruciais em um modelo de predição fundamentado em um processo gaussiano, pois a mesma codifica as suposições referente ao processo a ser aprendido. Pode-se pressupor inicialmente que valores de entrada x que são próximos, devem possuir valores de resposta y semelhantes, logo, pontos de treinamento que estão próximos a um ponto de teste, devem servir de informativo sobre a previsão de resposta do ponto não experimentado. Do ponto de vista do processo gaussiano, é a função de correlação que define como a resposta em um ponto x_i é afetada pelas respostas em outros pontos x_j ; $i \neq j$; $i = 1, 2, 3, 4 \dots n$.

Em geral, as funções de covariância $k(x, x^*)$ são usualmente parametrizadas por um conjunto de parâmetros livres ou hiperparâmetros (θ). Frequentemente o termo $k(x, x^*)$ é escrito da forma $k(x, x^* | \theta)$ para explicitar a dependência da função kernel à θ .

Para muitas funções de covariância padrão, os parâmetros kernel são baseados no desvio padrão do sinal (σ_f) e a escala de comprimento característico (σ_l), sendo este último, responsável por definir quão distantes os valores de entrada x_i podem ser para que os valores de resposta tornem-se não correlacionados.

4.3.1 Funções de covariância estacionária

Funções de covariância estacionárias são funções da distância entre os pontos ($x - x^*$). Se função de covariância for função apenas da distância euclidiana dada por $|x - x^*|$ (distância euclidiana para pontos unidimensionais), a mesma é dita isotrópica. Além disso, funções que dependem unicamente de $|x - x^*|$ também são conhecidas como funções de base radial (*RBF*).

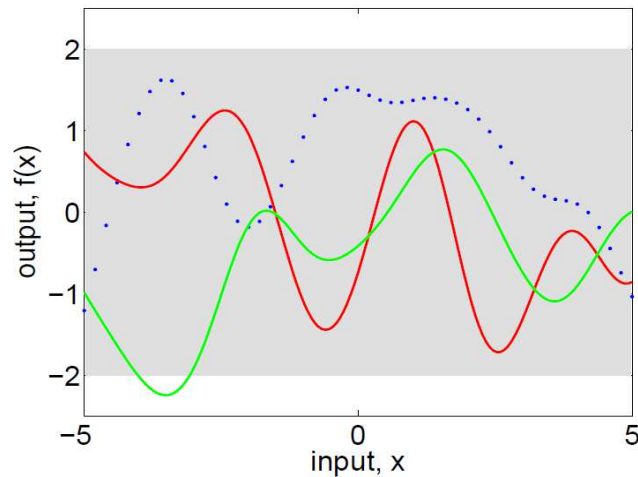
4.3.1.1 Função de covariância exponencial quadrada (RBF)

A função de covariância exponencial quadrada também conhecida como *RBF* é parametrizada por um parâmetro $\sigma_l > 0$ que representa a escala de comprimento característica que pode ser um escalar (variante isotrópica do kernel) ou um vetor com o mesmo número de dimensões da entrada (variante anisotrópica do kernel). O kernel *RBF* é descrito pela Equação (15) abaixo:

$$k(x, x^* | \theta) = \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x^*)^T (x - x^*)}{\sigma_l^2}\right) \quad (15)$$

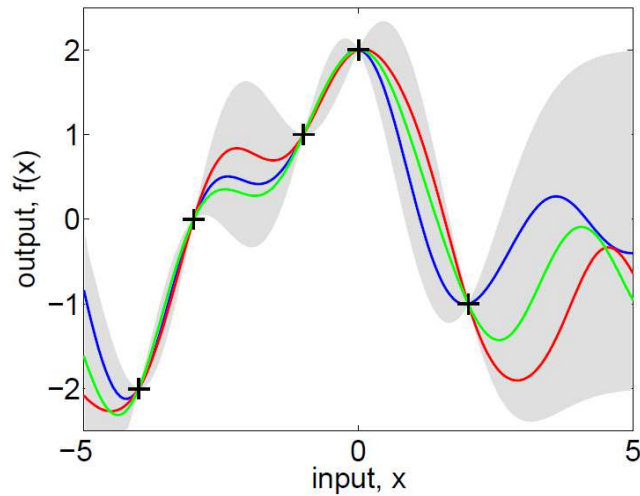
Este modelo de correlação é infinitamente diferenciável, ou seja, os processos gaussianos que possui este kernel como função de covariância tem derivadas médias quadradas de todas as ordens e, portanto, muito suaves. Devido ao fato de sua infinita diferenciabilidade, esse tipo de kernel é um dos mais utilizados na literatura. Os instantes à priori e posteriori de um \mathcal{GP} resultante a partir de um kernel *RBF* são mostrados na Figura 4-3 e Figura 4-4 respectivamente.

Figura 4-3 - Processo gaussiano com kernel RBF à priori



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

Figura 4-4 - Processo gaussiano com kernel RBF à posteriori



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

4.3.1.2 Classe materna de funções de covariância

O kernel do tipo materno é uma generalização do *RBF*, o mesmo possui um parâmetro adicional ν que controla a suavidade da função resultante. De forma análoga ao *RBF* este kernel é parametrizado através do parâmetro $\sigma_l > 0$. A formulação geral do kernel materno é dado pela Equação (16) abaixo.

$$k(x, x^* | \theta) = \frac{1}{\Gamma(\nu) 2^{\nu-1}} \left(\frac{\sqrt{2\nu} D}{\sigma_l} \right)^\nu K_\nu \left(\frac{\sqrt{2} D}{\sigma_l} \right) \quad (16)$$

Onde K_ν é uma função de Bessel modificada (ABRAMOWITZ e SEGUN, 1965) e $D = \sqrt{(x - x^*)^T (x - x^*)}$ é a distância euclidiana entre x e x^* . Quando o parâmetro $\nu \rightarrow \infty$ o kernel materno converge para o kernel *RBF*. Quando $\nu = \frac{1}{2}$ o kernel materno assume a forma descrita pela Equação (17) e se torna idêntico ao kernel exponencial absoluto.

$$k(x, x^* | \theta) = \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{D}{\sigma_l}\right) \quad (17)$$

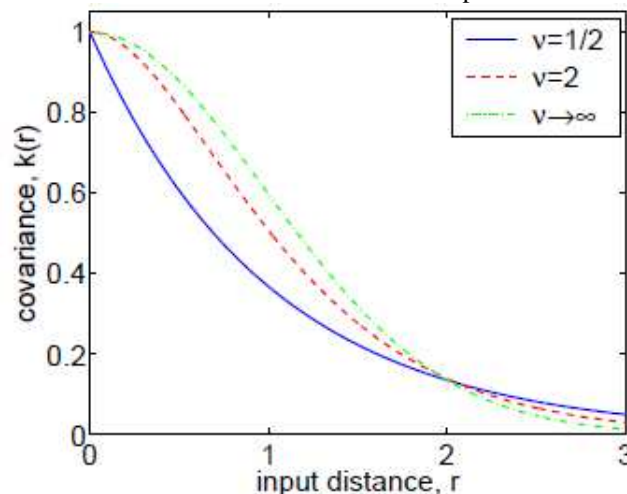
Para os casos onde $\nu = \frac{3}{2}$ e $\nu = \frac{5}{2}$ a Equação (16) assume as formas descritas pelas equações (18) e (19) respectivamente.

$$k(x, x^* | \theta) = \sigma_f^2 \left(1 + \frac{\sqrt{3}D}{\sigma_l} \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{3}D}{\sigma_l} \right) \quad (18)$$

$$k(x, x^* | \theta) = \sigma_f^2 \left(1 + \frac{\sqrt{5}D}{\sigma_l} + \frac{5D^2}{3\sigma_l^2} \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{5}D}{\sigma_l} \right) \quad (19)$$

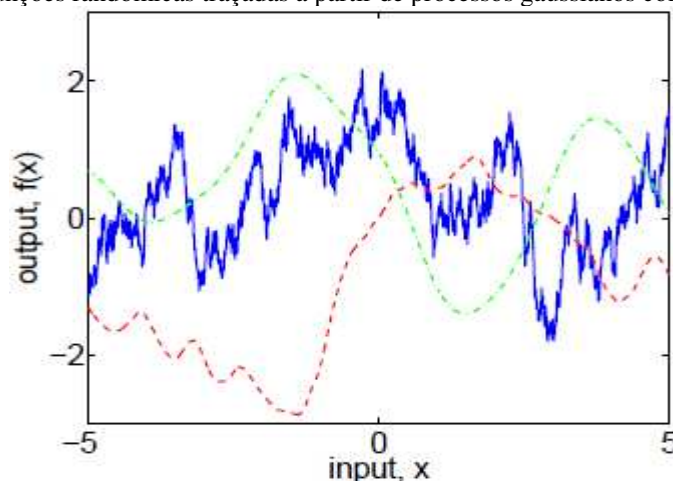
As escolhas de valores para ν como $\frac{3}{2}$ e $\frac{5}{2}$ são comuns para o kernel do tipo materno uma vez que o mesmo não é infinitamente diferenciável, mas é ao menos uma vez diferenciável para $\nu = \frac{3}{2}$ ou duas vezes diferenciáveis para $\nu = \frac{5}{2}$. A modificação na suavidade dos *outputs* a partir da modificação dos valores de ν pode ser observado na Figura 4-5 e Figura 4-6 e abaixo.

Figura 4-5 – Covariância versus distância euclidiana para diferentes valores de ν



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

Figura 4-6 - Funções randômicas traçadas a partir de processos gaussianos com kernel materno



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

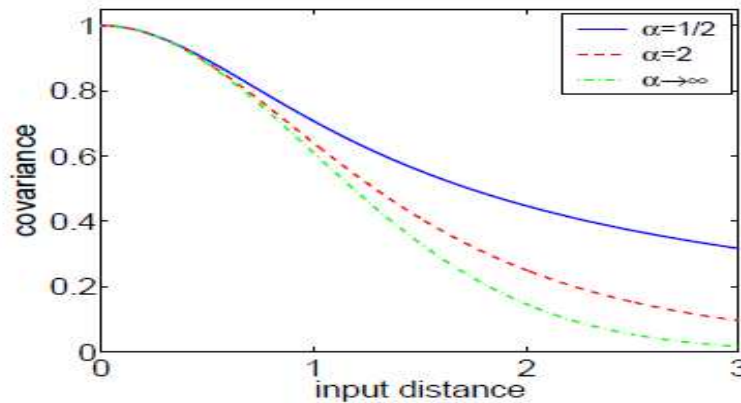
4.3.1.3 Função de covariância quadrático racional (RQ)

O kernel quadrático racional (*RQ*), pode ser visto como uma mistura de escalas de kernels do tipo *RBF* com diferentes escalas de comprimento característico. Além do parâmetro $\sigma_l > 0$ o kernel quadrático racional possui um parâmetro de mistura de escala $\alpha > 0$. Somente a variante isotrópica (σ_l escalar), é suportada. O presente kernel é descrito pela Equação (20):

$$k(x, x^* | \theta) = \sigma_f^2 \left(1 + \frac{D^2}{2\alpha\sigma_l^2} \right)^{-\alpha} \quad (20)$$

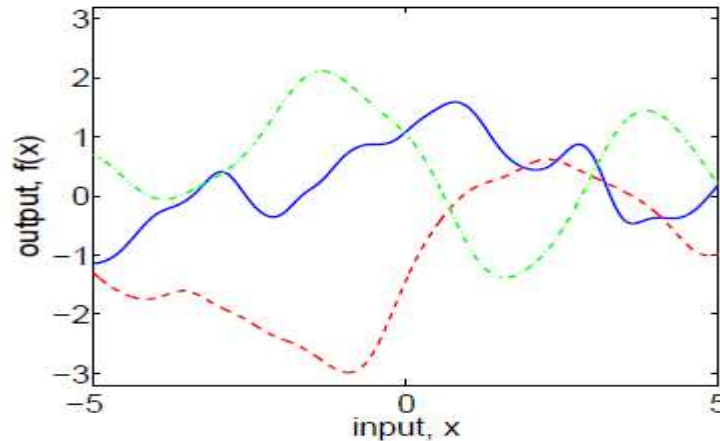
As Figura 4-7 e Figura 4-8 ilustram o comportamento da covariância bem como os *outputs* para diferentes valores de α .

Figura 4-7 – Covariância versus distancia euclidiana para diferentes valores de α



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

Figura 4-8 - Funções randômicas traçadas a partir de processos gaussianos com kernel RQ com $\sigma_l = 1$



Fonte: RASMUSSEN e WILLIANMS (2006).

4.3.2 Funções de Covariância de produtos de pontos

O kernel produto de pontos faz parte da classe de funções de covariância não estacionárias e pode ser obtido a partir de uma regressão linear. É parametrizado por um parâmetro σ_0^2 . Para $\sigma_0^2 = 0$ o kernel é chamado de linear homogêneo, caso contrário o mesmo é não homogêneo. O kernel produto de pontos pode ser expresso pela Equação (21):

$$k(x, x^* | \theta) = \sigma_0^2 + x * x^* \quad (21)$$

A Tabela 4-1 apresenta um resumo das funções de covariância mais utilizadas. Observe que as mesmas são escritas em função de x e x^* ou de $|x - x^*|$. As funções assinaladas com \times são estacionárias, as demais, não estacionárias (RASMUSSEN e WILLIAMS, 2006).

Tabela 4-1 - Resumo de várias funções de covariância comumente usadas

Função de Covariância	Expressão	Estacionária
Constante	σ_0^2	\times
Linear	$\sum_{d=1}^D \sigma_d^2 x_d x_d^*$	
Polinomial	$(\sigma_0^2 + x * x^*)^p$	
Exponencial quadrada	$\exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x^*)^T (x - x^*)}{\sigma_l^2}\right)$	\times
Materno	$\exp\left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x^*)^T (x - x^*)}{\sigma_l^2}\right)$	\times
Exponencial	$\sigma_f^2 \exp\left(-\frac{D}{\sigma_l}\right)$	\times
γ -Exponencial	$\sigma_f^2 \exp\left(-\left(\frac{D}{\sigma_l}\right)^\gamma\right)$	\times
Quadrático racional	$\sigma_f^2 \left(1 + \frac{D^2}{2\alpha\sigma_l^2}\right)^{-\alpha}$	\times

4.4 Design de Experimentos

A formulação de metamodelos é baseada no uso de dados, que podem ser obtidos experimentalmente, computacionalmente ou através de dados de plantas através de sistemas de aquisição de dados. A geração dos pontos de amostragem é um passo crucial na criação do metamodelo, uma vez que esta etapa interfere diretamente na qualidade e robustez do mesmo.

Existem diversas metodologias para a realização de uma amostragem de dados voltadas para experimentos computacionais. Dentre as várias técnicas existentes na literatura, destacam-se: Monte Carlo (DAVILA et al., 2018) Quase Monte Carlo (QMC) (KHODADADIANA et al., 2017) e Hipercubo Latino (LHS) (NAVID et al., 2018). No presente trabalho a amostragem das variáveis de entrada do modelo foi realizada aplicando a técnica LHS.

A técnica do hipercubo latino foi desenvolvida por McKay, et al. (1979) como uma extensão n-dimensional da amostragem do quadrado Latino desenvolvida por Raj (1968). Esta técnica enquadra-se na categoria *space fitting* uma vez que possui como asserção o fato de que os pontos do modelo podem ocupar qualquer ponto do espaço com a mesma probabilidade, desta forma, o LHS pode ser visto como uma técnica de estratificação do espaço amostral, selecionando aleatoriamente as amostras dentro de cada estrato.

Para o entendimento do hipercubo latino, pode-se analisar a construção de um quadrado latino, o qual pode ser gerado a partir da criação de uma matriz quadrada de ordem m com m caracteres latinos distribuídos de forma que a probabilidade de ocorrência de cada caractere seja a mesma em todo o espaço amostral. A Figura 4-9 apresenta um quadrado latino de ordem 4, onde cada número aparece apenas uma única vez em cada linha e coluna.

Figura 4-9 - Quadrado latino de ordem 4

2	1	3	4
3	2	4	1
1	4	2	3
4	3	1	2

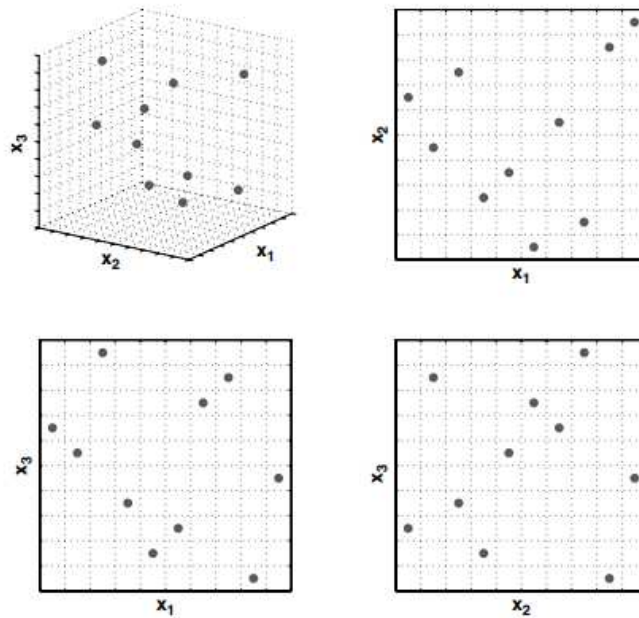
Fonte: FORRESTER et al. (2008).

A dimensão onde é realizada a amostragem está diretamente ligada com o número de variáveis envolvidas. Desta forma, o quadrado latino está restrito a uma análise de apenas duas

variáveis. Para casos onde o número de variáveis é maior que dois, expande-se o quadrado latino para um hipercubo latino de dimensão n onde n é o número de variáveis de interesse.

A construção do hipercubo pode ser feita de forma semelhante, dividindo o espaço amostral em hipercubos de tamanhos iguais, de forma que para um hipercubo com $n = 3$ por exemplo, ao sair de um espaço tridimensional para um para um bidimensional em qualquer direção do hipercubo, visualiza-se um quadrado latino, com os pontos igualmente distribuídos com probabilidade de ocorrência $1/N$, como pode ser observado na Figura 4-10 (FORRESTER et al., 2008).

Figura 4-10-Hipercubo latino de dimensão 3



Fonte: FORRESTER et al. (2008).

5 METODOLOGIA

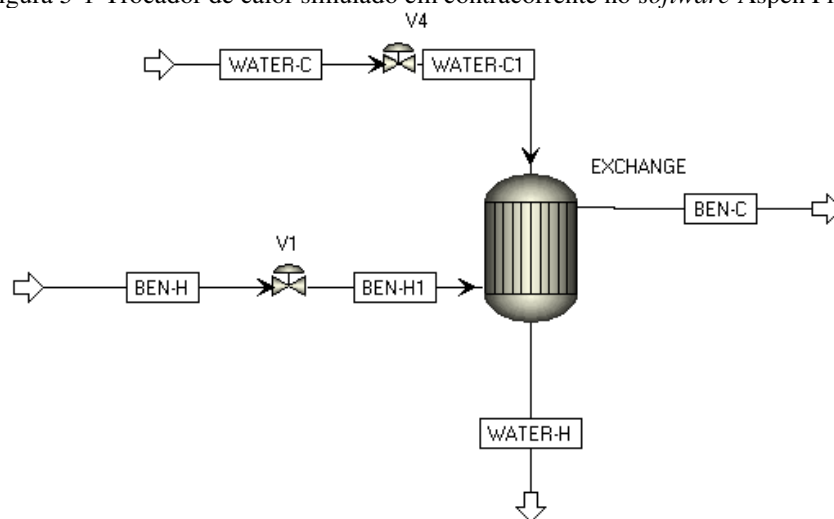
5.1 Caso de Estudo

Como estudo de caso, realizou-se a simulação de um trocador de calor contracorrente utilizando o componente benzeno(C_6H_6) na corrente de fluido quente e água (H_2O) no fluido frio, ambas as correntes na fase líquida. A simulação foi modelada no pacote AspenTech (Aspen Plus Dynamics[®]) utilizando o modelo termodinâmico NRTL-RK. Os parâmetros utilizados no trocador estão dispostos na Tabela 5-1. O *flowsheet* da simulação pode ser observado na Figura 5-1.

Tabela 5-1 Parâmetros especificados no bloco do trocador de calor

Especificações		Queda de Pressão	
<i>Model Fidelity</i>	<i>Shortcut</i>	<i>Side</i>	<i>Cold Side</i>
<i>Shortcut flow</i>	<i>Countercurrent</i>	<i>Cold side</i>	<i>Outlet</i>
<i>Direction</i>		<i>pressure options</i>	<i>(-0,1 bar)</i>
<i>Calculation mode</i>	<i>Design</i>		
<i>Exchanger specification</i>	<i>Hot stream outlet temperature (50°C)</i>		
<i>Thermodynamic Model</i>	<i>NRTL</i>		

Figura 5-1-Trocador de calor simulado em contracorrente no *software* Aspen Plus



Um processo de incrustação foi simulado a partir da inclusão da Equação (22) no modelo, onde U é o coeficiente global de transferência de calor, U_D é o coeficiente global de

transferência de calor após a ocorrência da incrustação, e R_D é a resistência térmica devido à incrustação. Existem várias maneiras de modelar a resistência térmica (SANAYE e NIROOMAND, 2007) neste trabalho foi utilizado um modelo no qual a resistência varia linearmente como mostrado na Equação (24).

A constante C foi determinada considerando um ano de operação no trocador de calor (8000h), tempo este considerado como necessário para reduzir U para 20% do valor inicial (0,85) (Equação(23)) calculado pelo *software* para o mistura benzeno-água.

$$\frac{1}{U_D(t)} = \frac{1}{U_{LIMPO}} + R_D(t) \quad (22)$$

$$\frac{1}{U_D(t)} = \frac{1}{0,85} + R_D(t) \quad (23)$$

$$R_D(t) = Ct \quad (24)$$

Substituindo a Equação (24) na Equação (23),

$$\frac{1}{U_D(t)} = \frac{1}{0,85} + Ct \quad (25)$$

Sendo $U_D(8000h) = 0,17$ tem-se:

$$\frac{1}{0,17} = \frac{1}{0,85} + C8000 \quad (26)$$

Portanto:

$$C = 5,8823 \cdot 10^{-4} \quad (27)$$

Substituindo o valor obtido para C na Equação (25) e rearranjando obtêm-se:

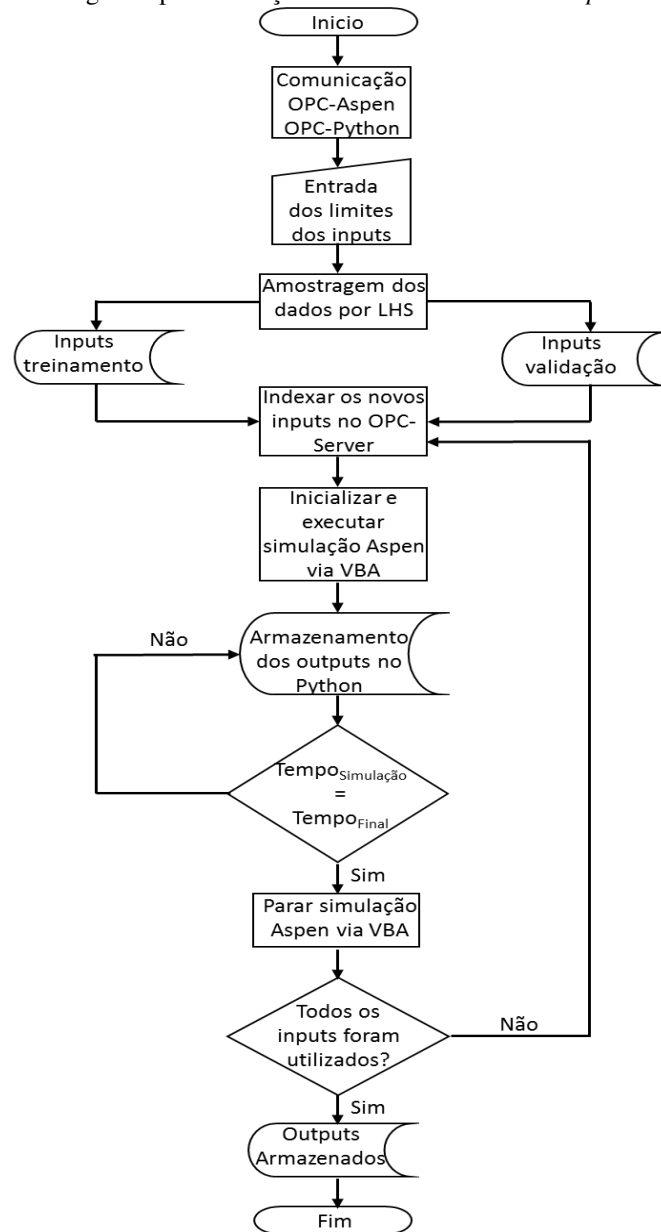
$$U_D(t) = \left(\frac{1}{0,85} + 5,8823 \cdot 10^{-4}t \right)^{-1} \quad (28)$$

A Equação (28) apresenta a formulação obtida, a qual foi incorporada para substituir o valor fixo de U (0,85) e descrever como U_D diminui com o tempo.

5.2 Aquisição de dados

O processo de aquisição e armazenamento de dados foi feito automaticamente através da criação de uma estrutura de comunicação entre o Python™, o Aspen™, o Excel® (VBA) e o Matrikon® (OPC Server). Os Tópicos 4.2.1 a 4.2.4 descrevem como foram realizados todos os procedimentos de comunicação necessários para coleta e armazenamento dos *outputs* da simulação, obtidos para cada caso gerado a partir da técnica de amostragem por *LHS* descrita no Tópico 3.4 do presente trabalho. O procedimento executado pela estrutura criada é descrito através do fluxograma na Figura 5-2.

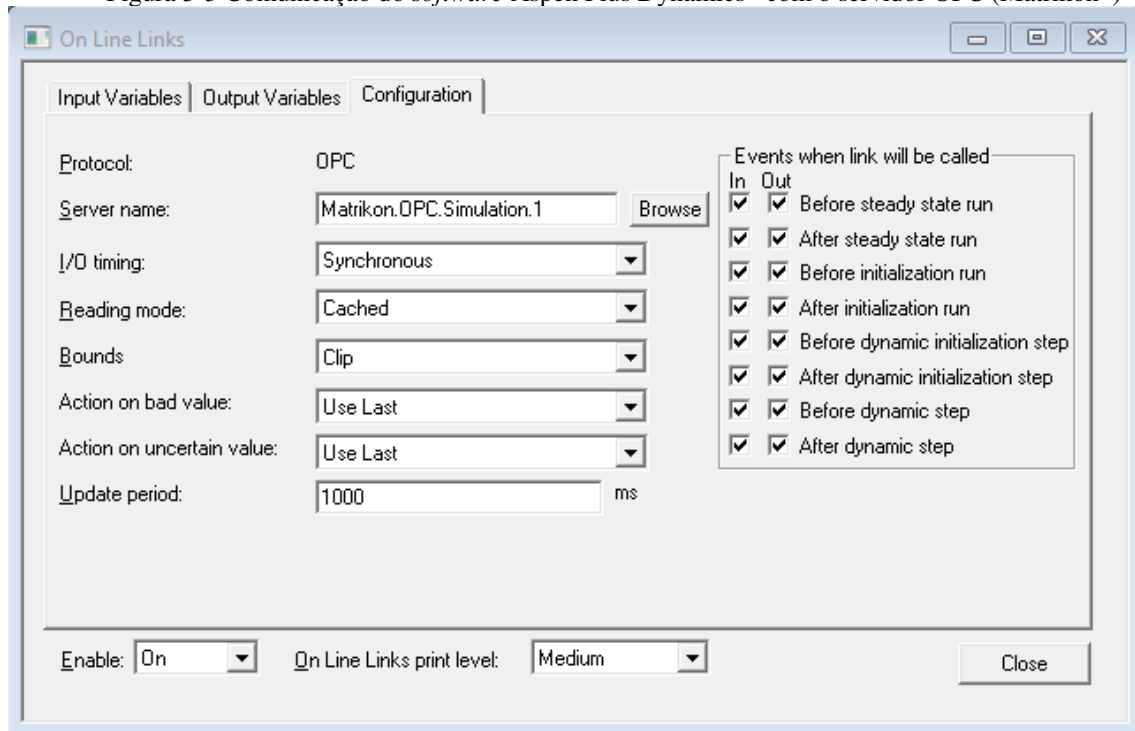
Figura 5-2-Fluxograma para obtenção e armazenamento dos *outputs* da simulação



5.2.1 Comunicação Aspen Dynamics®-Servidor OPC

Inicialmente realizou-se a comunicação da simulação com o *software* Matrikon através da ferramenta *On Line Links* do Aspen Plus Dynamics®. Com a comunicação estabelecida (Figura 5-3), é possível disponibilizar variáveis de interesse da simulação de forma dinâmica para outros *softwares*, além de permitir que outros *softwares* possam alterar variáveis dentro da simulação.

Figura 5-3 Comunicação do *software* Aspen Plus Dynamics® com o servidor OPC (Matrikon®)



Posteriormente, definiu-se quais as variáveis seriam utilizadas como *inputs* e *outputs* na construção do modelo Kriging, uma vez que essas variáveis serão disponibilizadas através do servidor OPC para posterior coleta e armazenamento. Utilizou-se inicialmente como *inputs* do modelo apenas as temperaturas de entrada das correntes dos fluidos quente (benzeno) e frio (água) e como *outputs*, as temperaturas de saída dos mesmos.

A partir de testes realizados na simulação dinâmica do trocador de calor, constatou-se uma forte dependência dos *outputs* escolhidos com as pressões de entrada das correntes de benzeno e água. Desta forma, essas pressões foram adicionadas como *inputs* do modelo.

Sabendo que, almeja-se obter o comportamento dinâmico das variáveis de saída, o tempo apresenta-se como *output* fundamental a ser coletado e armazenado. Embora não precise ser adicionado ao modelo Kriging, o tempo faz-se necessário para determinação de qual instante

de tempo refere-se cada ponto coletado durante as simulações. A Tabela 5-2 apresenta todos os *inputs* e *outputs* escolhidos para coleta e armazenamento.

Tabela 5-2 - *Inputs* e *outputs* escolhidos para construção do modelo Kriging

<i>Inputs</i>	<i>Outputs</i>
T _{HOT_IN}	T _{HOT_OUT}
T _{COLD_IN}	T _{COLD_OUT}
P _{HOT_IN}	
P _{COLD_IN}	

Após a definição dos *inputs* e *outputs*, realizou-se a construção das *tags* de cada variável, como pode ser observado na Figura 5-4. Posteriormente, as *tags* foram associadas as respectivas variáveis dentro do Aspen Plus Dynamics® por meio das abas *inputs* e *outputs* presentes no *On Line Links*. As comunicações entre as *tags* e as respectivas variáveis de interesse podem ser constatadas por meio da Figura 5-5 e Figura 5-6.

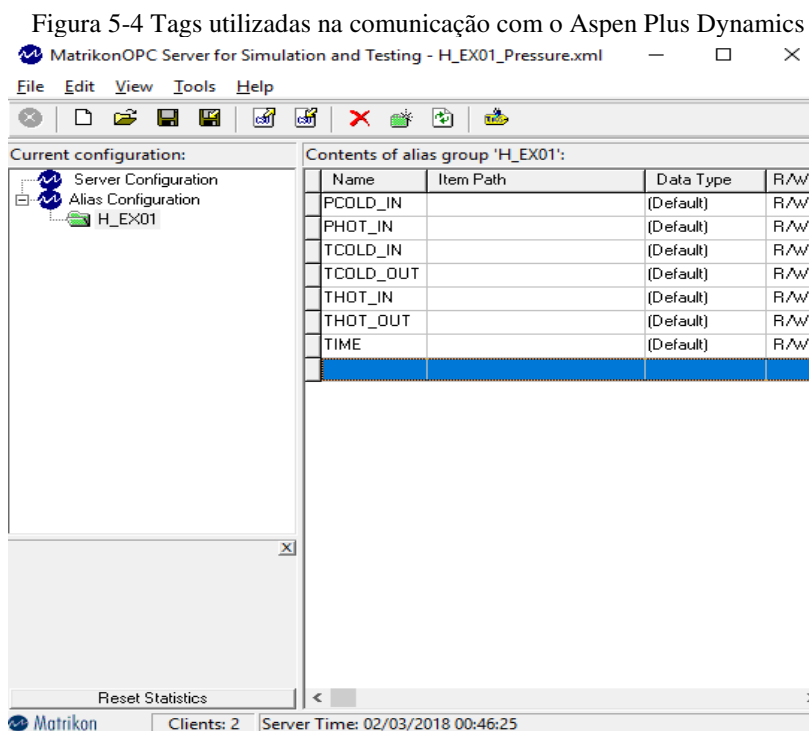
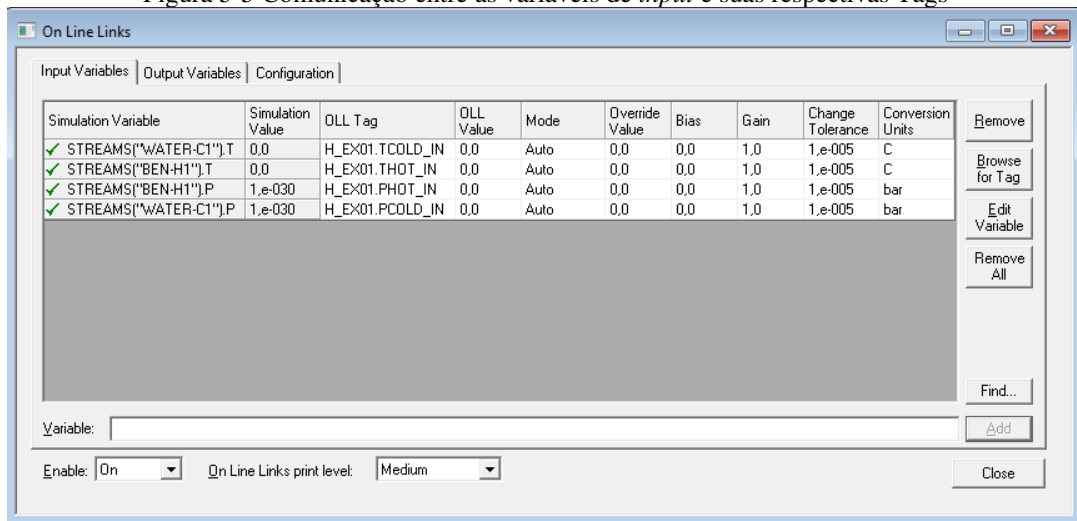
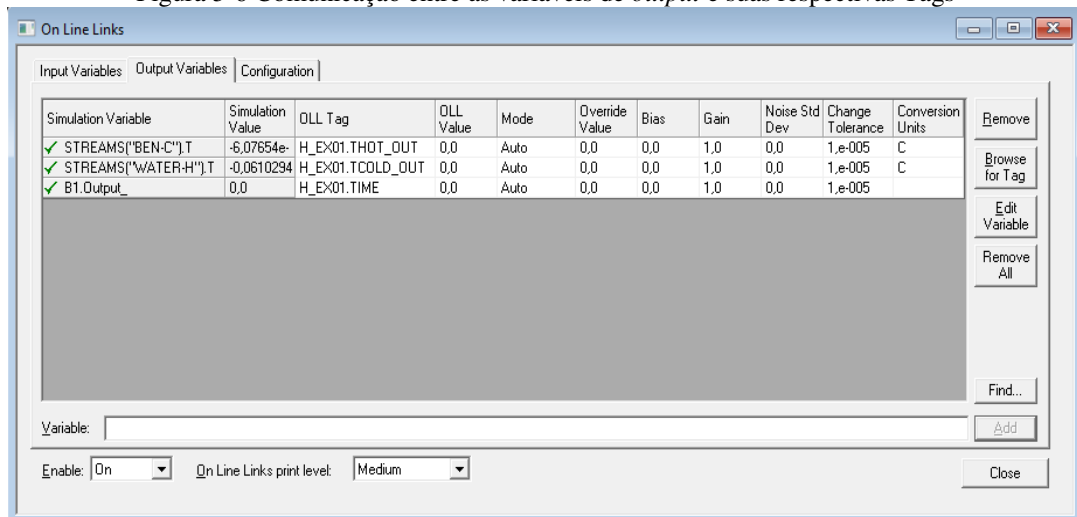


Figura 5-5 Comunicação entre as variáveis de *input* e suas respectivas TagsFigura 5-6 Comunicação entre as variáveis de *output* e suas respectivas Tags

5.2.2 Comunicação Python-Servidor OPC

Uma vez realizada a comunicação Aspen Plus Dynamics® – Matrikon, utilizou-se as bibliotecas *Pyro* e *OpenOPC* do software Python 2.7.14 para estabelecer uma comunicação com o servidor OPC. Desta forma, foi permitido ao Python coletar dinamicamente informações das *tags* do Matrikon associadas aos *outputs* da simulação, além de viabilizar a alteração dos valores das *tags* relacionadas aos *inputs* da simulação. A comunicação Python-Servidor OPC pode ser observada na Figura 5-7 através da resposta “True”.

Figura 5-7 -Visualização da comunicação entre o servidor OPC e o Python
Conectando o OPC Server(Matrikon) ao Python

```
In [6]: import Pyro #Permite que aplicativos sejam criados em que objetos possam conversar
#uns com os outros através da rede, com um esforço de programação mínimo.

import OpenOPC #Permite a comunicação utilizando o protocolo de comunicação OPC.

opc = OpenOPC.open_client ('150.165.92.213') #Criação da variável para
#conversar com os servidores OPC disponíveis.

opc.servers() #Visualização dos servidores OPC disponíveis

Out[6]: [u'AspenTech.OTS_OPCTServer.30', u'Matrikon.OPC.Simulation.1']

In [10]: opc.connect('Matrikon.OPC.Simulation.1') #Conectando com o servidor OPC Matrikon

Out[10]: True
```

5.2.3 Comunicação Python-Excel (VBA)

Utilizou-se uma rotina de programação em Excel (VBA) para intermediar os procedimentos de inicializar, rodar e parar a simulação no Aspen Plus Dynamics®. O código VBA utilizado possui *Macros* que permitem realizar as funções descritas anteriormente, sendo necessário apenas, informar o local onde está salvo a simulação dinâmica. Desta forma, após a indicação do local da simulação, utilizou-se a biblioteca *xlwings* do Python, para acessar as *Macros* do código VBA, possibilitando a atuação indireta do Python nos comandos fundamentais da simulação dinâmica. A comunicação estabelecida pode ser observada na Figura 5-8 através da associação das variáveis inicializar, rodar e parar às *Macros* do VBA.

Figura 5-8 -Visualização da comunicação entre o Python e o Excel (VBA)
Comunicação Python - Excel(VBA)

```
In [11]: import xlwings as xw #Lib para comunicação com o Excel

wb = xw.Book('VBA_ASPEN.xlsx')#Carregando o Arquivo Excel

inicializar = wb.macro('Plan2_Botao2_Clique')#Associando a variável "inicializar" à macro responsável por inicializar a simulação
rodar = wb.macro('Botao2_Clique') #Associando a variável "rodar" à macro responsável por rodar a simulação
pausar = wb.macro('Botao3_Clique') #Associando a variável "pausar" à macro responsável por pausar a simulação

print(inicializar)
print(rodar)
print(pausar)

<xlwings.main.Macro object at 0x000000000D78FA90>
<xlwings.main.Macro object at 0x000000000D78F2B0>
<xlwings.main.Macro object at 0x000000000D78F828>
```

5.2.4 Amostragem utilizando o Hipercubo Latino (LHS)

Uma vez realizada todas as comunicações descritas nos Tópicos 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3 deste trabalho, utilizou-se a técnica de amostragem *LHS* explanada no Tópico 3.4 para gerar os casos que serão avaliados na simulação.

A estratégia mais comum para construção dos bancos de dados de treinamento e validação é a realização de uma única amostragem utilizando o *LHS* e a partir do conjunto de casos dados gerados, uma porcentagem de casos são retirados aleatoriamente, compondo um novo conjunto de dados que será usado para validação do modelo e os pontos remanescentes são usados para treinamento. Em geral retira-se uma pequena quantidade de casos, entre 10% e 20% do conjunto total.

Uma estratégia alternativa é a geração de dois hipercubos, sendo o primeiro criado para obtenção dos dados de treinamento e o segundo criado para os dados de validação. Sabendo que a técnica de amostragem do *LHS* busca uma distribuição uniforme dos pontos em todo o espaço amostral, optou-se pela utilização estratégia alternativa, uma vez que, retirando-se pontos aleatoriamente do conjunto de dados total (primeira estratégia), existe a possibilidade da ocorrência de uma distribuição não uniforme dos pontos dentro dos novos conjuntos de dados gerados e no conjunto de treinamento remanescente.

Utilizou-se, portanto, o *LHS* presente na biblioteca de *design* de experimentos (*pyDOE*) do Python para gerar um vetor contendo 100 casos para treinamento do modelo. Em seguida, realizou-se uma segunda amostragem para construção do vetor de *inputs* de validação contendo 10 pontos. O número de casos de treinamento e validação foram escolhidos arbitrariamente, entretanto, levando em consideração o esforço computacional para coleta dos dados de forma dinâmica e o fato de que é necessário um número maior de pontos para construção do modelo, visando uma maior representatividade do mesmo.

Como descrito anteriormente, o *LHS* gera pontos entre zero e um, desta forma utilizou-se as Equações (29) e (30) para corrigir os pontos gerados para cada variável de *input* baseado no limite inferior e superior de cada uma descritos na Tabela 5-3.

$$FATOR = LIMITE_{Superior} - LIMITE_{Inferior} \quad (29)$$

$$Input_{ajustado} = FATOR(input_{LHS}) + LIMITE_{Inferior} \quad (30)$$

Tabela 5-3 -Limite inferior e superior de cada variável de *input*

<i>Inputs</i>	Nominal	Limite Inferior	Limite Superior
T _{HOT_IN} (°C)	60	50	70
T _{COLD_IN} (°C)	27,5	25	30
P _{HOT_IN} (bar)	2,5	2	3
P _{COLD_IN} (bar)	2,5	2	3

5.3 Construção do Meta-modelo Kriging Dinâmico

Uma vez coletados, o comportamento transiente de cada *output* para cada caso do *LHS* foi armazenado em duas matrizes, uma para cada saída. A matriz pode ser representada de forma geral pela Equação (31):

$$OUTPUT = \begin{pmatrix} C_{1T1} & C_{1T2} & C_{1T3} & \cdots & C_{1TF} \\ C_{2T1} & C_{2T2} & C_{2T3} & \cdots & C_{2TF} \\ C_{3T1} & C_{3T2} & C_{3T3} & \cdots & C_{3TF} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ C_{nT1} & C_{nT2} & C_{nT3} & \cdots & C_{nTF} \end{pmatrix} \quad (31)$$

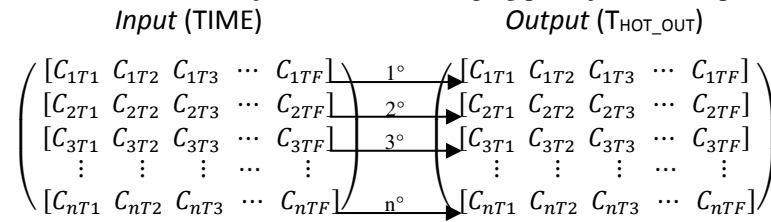
Cada linha representa o *output* obtido para cada caso gerado pelo *LHS* e cada coluna representa um instante de tempo da simulação. Desta forma o índice C_{3T2} por exemplo, representa o comportamento de uma variável de *output* gerado a partir do terceiro caso do *LHS* no segundo instante de tempo da simulação coletado pelo Python através do servidor OPC.

Após a análise da matriz referente ao *output* “Tempo” verificou-se que para cada caso avaliado, os instantes de tempo coletados pelo Python apresentavam resultados diferentes. Este fato é consequência de dois fatores principais: o *delay* entre a comunicação Python-Servidor OPC e o fato do Matrikon coletar os dados de acordo com uma taxa (itens/segundo), desta forma se houver variação na taxa de coleta do servidor, ocorre também mudança nos instantes de tempo coletados, uma vez que o mesmo também é uma *tag* adicionada no *software*.

Para obtenção dos valores de todos os *outputs* avaliados, com o mesmo tempo de amostragem, optou-se pela realização de uma Krigagem simples utilizando o kernel estacionário Quadrático racional(RQ) representado pela Equação (20), utilizando para treinamento o tempo como *input* e como *output* os próprios *outputs* das simulações.

Buscando melhorar a predição do Kriging, realizou-se a geração de um Kriging para cada caso de estudo avaliado. A Figura 5-9 apresenta como foi feita a geração dos modelos Kriging baseada nas matrizes explanadas anteriormente.

Figura 5-9 - Procedimento de obtenção dos modelos Kriging para ajuste do tempo de amostragem.

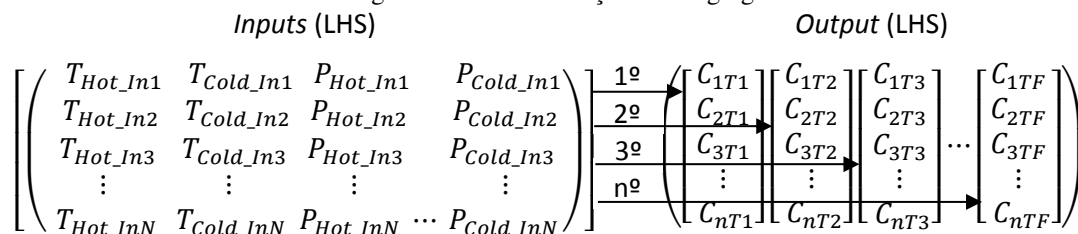


O mesmo procedimento foi realizado para $T_{\text{COLD_OUT}}$, desta forma, uma vez que foram feitos 110 casos dentre treinamento e validação e que foram avaliadas duas variáveis de saída da simulação, foram gerados, portanto, 220 modelos Kriging.

Em seguida criou-se um vetor de tempo igualmente espaçado com 500 elementos de zero até o tempo final de simulação (10.000h) utilizando o comando *linspace* do Python[®]. Posteriormente, utilizou-se esse vetor como *input* dos modelos Kriging gerados para que os mesmos realizassem a predição dos valores para cada caso de cada *output*. Desta forma, obteve-se os valores dos *outputs* das simulações para cada caso de estudo com o mesmo tempo de amostragem.

Após a obtenção das novas matrizes de *outputs* com o mesmo tempo de amostragem, seguiu-se para etapa de construção do Kriging dinâmico. A elaboração do metamodelo dinâmico consiste essencialmente na criação de um modelo de Krigagem para cada instante de tempo de cada saída avaliada. Para isso, utilizou-se como entrada todos os casos gerados pelo *LHS* e como saída a informação referente a temperatura de todos os casos em um instante de tempo específico. A Figura 5-10 apresenta como foi feita a construção de cada Kriging para o *output* $T_{\text{HOT_OUT}}$, em seguida o procedimento foi replicado para o *output* $T_{\text{COLD_OUT}}$.

Figura 5-10 - Estruturação do Kriging dinâmico



A metodologia descrita foi realizada testando os quatro modelos de correlação previamente descritos pelas Equações (15),(18),(20) e (21). Seguindo a metodologia descrita e considerando que cada simulação contém 500 instantes de tempo, foram obtidos 4000 modelos de Krigagem.

Os valores referentes aos hiperparâmetros dos modelos de correlação podem ser otimizados através do método BFGS, buscando melhorar a resposta do modelo, entretanto foram usados os valores padrões de cada hiperparâmetro apresentados na Tabela 5-4.

Tabela 5-4 – Valores utilizados dos hiperparâmetros do modelo.

Modelos	σ_l	α	σ_0
Função de base radial	1	-	-
Materno ($\nu = 1.5$)	1	-	-
Quadrático Racional	1	1	-
Produto de pontos	-	-	1

Foram criadas quatro matrizes de dimensão 2x500 para armazenar os modelos, cada matriz é referente a um modelo de covariância avaliado, cada linha refere-se a um *output* e cada coluna a um instante de tempo. Tomando como exemplo, a matriz “RBF_Model” criada para armazenar os modelos Kriging gerados utilizando a correlação *RBF*, pode ser visualizada de acordo com a matriz descrita pela Equação (32).

$$Modelo_{RBF} = \begin{pmatrix} T_{out_{Hot}T_1} & T_{out_{Hot}T_2} & T_{out_{Hot}T_3} & \cdots & T_{out_{Hot}T_1} \\ T_{out_{Cold}T_1} & T_{out_{Cold}T_2} & T_{out_{Cold}T_3} & \cdots & T_{out_{Cold}T_1} \end{pmatrix} \quad (32)$$

5.4 Validação do modelo

Após a obtenção das quatro matrizes, os modelos foram validados utilizando o segundo conjunto de dados criado a partir do *LHS*. Este procedimento é feito de tal forma que, a mesma entrada de validação passe por todas as linhas e colunas das quatro matrizes geradas. Assim, obtêm-se como resposta o comportamento dinâmico para as temperaturas de saída de fluido quente e frio avaliadas para os quatro tipos de modelo de correlação. O melhor modelo foi escolhido a partir da análise do comportamento transiente dos modelos de predição construídos, juntamente com a avaliação das métricas de acurácia descritas pelas Equações (33), (34) e (35).

Tabela 5-5 - Métricas de avaliação utilizadas

Testes	Equações
Erro médio quadrado (<i>MSE</i>)	$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{Samples}} \sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (33)$
Variância Explicada (<i>EVS</i>)	$EVS(y, \hat{y}) = 1 - \frac{Var\{y - \hat{y}\}}{Var\{y\}} \quad (34)$
Coeficiente de Determinação (R^2)	$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \bar{y})^2}; \quad (35)$ <p>Onde $\bar{y} = \frac{1}{n_{Samples}} \sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} y_i$</p>

6 RESULTADOS

6.1 Simulações de Validação

As Figura 6-1 e Figura 6-2 apresentam o comportamento das temperaturas do fluido quente e do fluido frio obtidas através da aplicação de um dos *inputs* de validação (simulação cinco) na Equação (32) usando o procedimento descrito no Tópico 4.4. Foram simuladas 10.000 horas de operação do trocador de calor para capturar todo o comportamento transiente do processo, bem como o tempo em que U é reduzido para 20% do valor inicial (8000 horas).

A escolha da simulação de validação utilizada para avaliação dos resultados foi feita de forma a corroborar com os resultados gerais obtidos nas Tabela 6-1 e Tabela 6-2. Os gráficos referentes as demais simulações de validação encontram-se no APÊNDICE A do presente trabalho.

Devido à inserção da Equação (28) observa-se que ao longo do tempo há uma diminuição na troca térmica entre os fluidos. Este comportamento é evidenciado pelo aumento da temperatura do fluido quente e redução da temperatura do fluido frio. Limites atribuídos ao erro relativo de $\pm 4\%$ foram inseridos em relação ao comportamento esperado (linha azul).

Analisando a Figura 6-1 relacionada à estimação do comportamento da temperatura do fluido quente, observa-se que os modelos construídos a partir das correlações *RBF*, *Matern* e *RQ* diferem do comportamento esperado durante todo o tempo de simulação avaliado. O modelo gerado por meio da correlação *DP* apresenta o comportamento dentro do limite estabelecido para a maior parte do tempo de simulação. De forma análoga, para a temperatura do fluido frio (Figura 6-2) apenas a correlação *DP* forneceu uma estimativa dentro do limite de $\pm 4\%$.

Uma melhor estimativa dos modelos gerados por meio da correlação dot product pode estar relacionada com o fato da mesma não ser estacionária, ou seja, não levar em consideração a distância entre os pontos e sim o produto dos mesmos.

Além disso, conforme explicado no Tópico 3.2, as funções de correlação determinam, entre outros pontos, a suavidade da resposta do modelo, manipulando os hiperparâmetros (θ). Mesmo utilizando os valores padrões descritos na Tabela 5-4 observa-se que as respostas referentes aos kernels estacionários foram mais estáveis, enquanto o comportamento do kernel não estacionário do *DP* apresentou certo grau de ruído.

Figura 6-1-Comportamento do fluido quente para os diferentes modelos de correlação

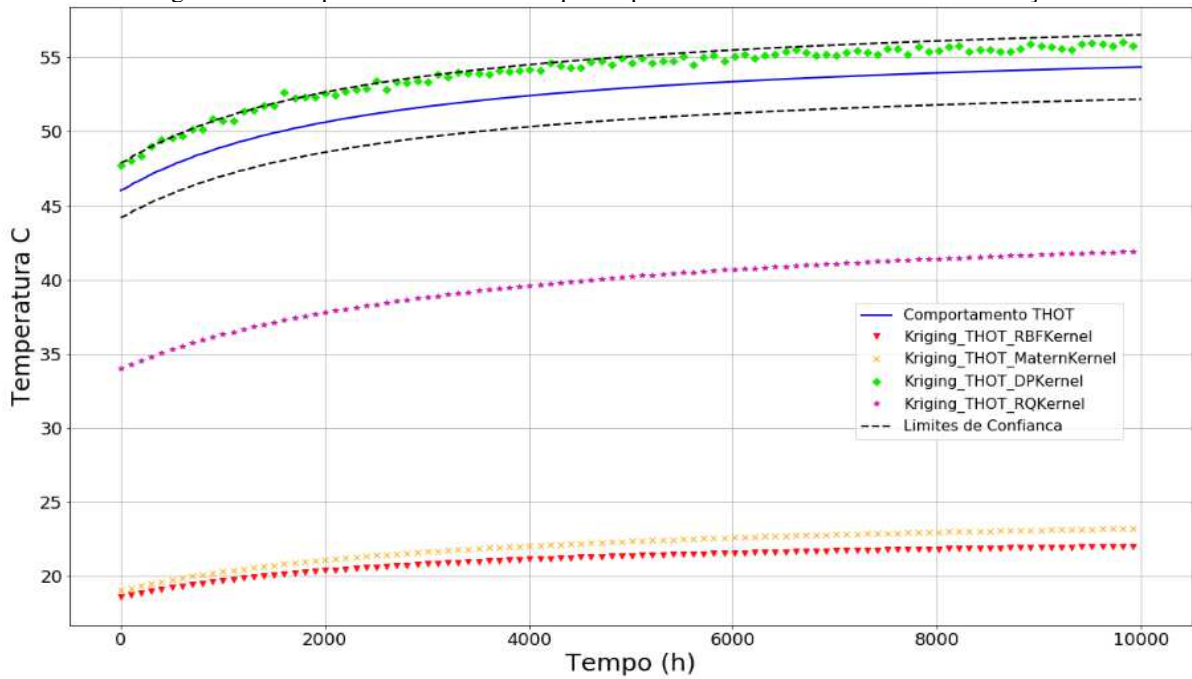
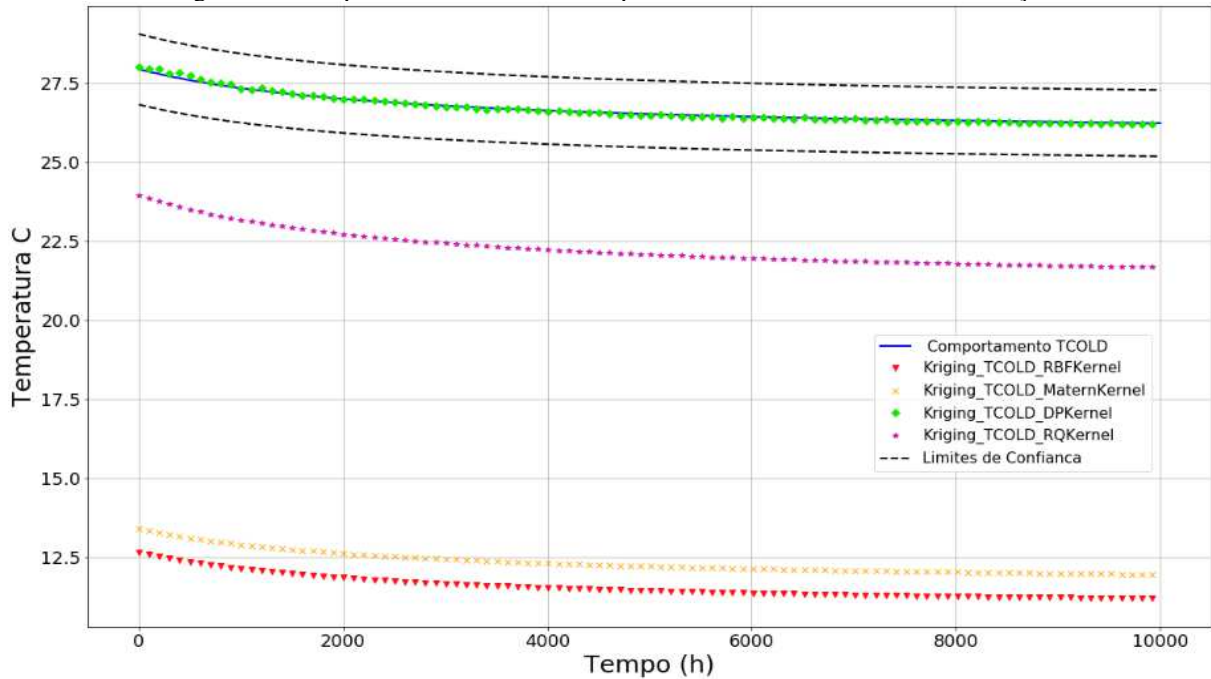
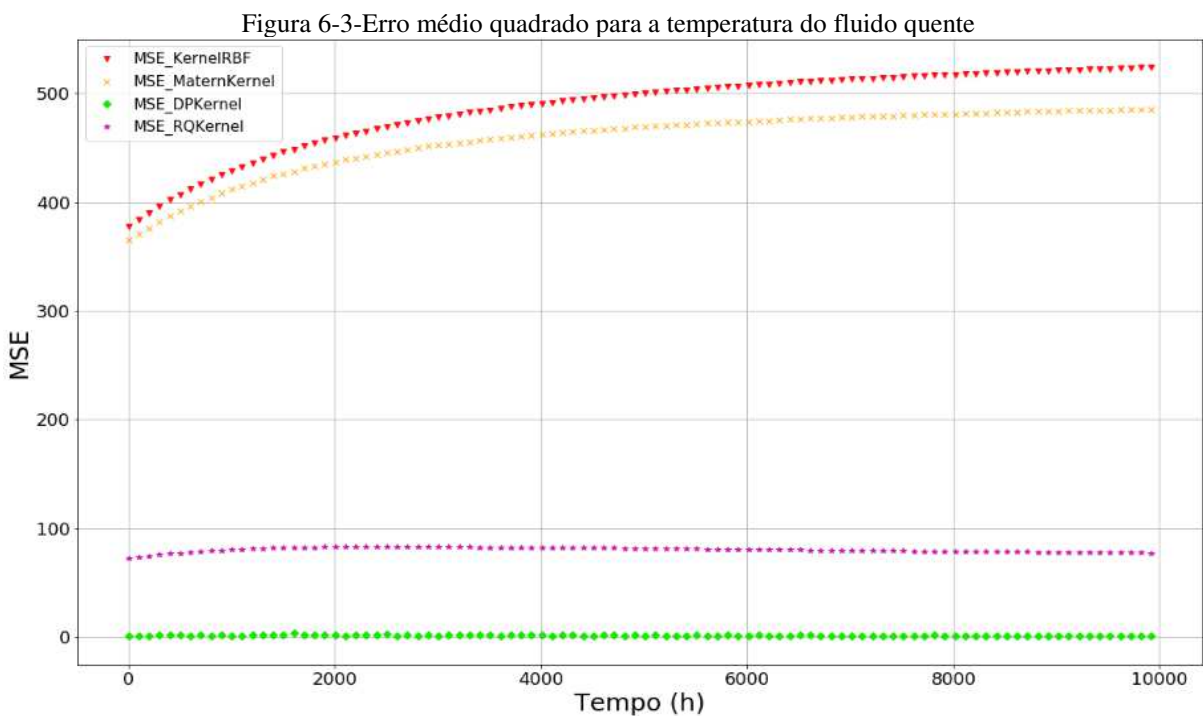


Figura 6-2-Comportamento do fluido frio para os diferentes modelos de correlação



As Figuras 6-3 a 6-8 apresentam o comportamento dos testes de erro quadrado médio (MSE), coeficiente de determinação (R2) e variância explicada (EVS) aplicados aos modelos criados através das correlações avaliadas. Uma vez que um modelo de Kriging tenha sido construído para cada instante de tempo, os testes são realizados em cada ponto da simulação. Desta forma, uma resposta dinâmica foi obtida de cada teste, que permite avaliar a precisão da

predição ao longo do tempo. As Figura 6-3 e Figura 6-4 mostram o comportamento dinâmico do MSE para a temperatura de saída de fluido quente e frio respectivamente. O teste indica valores altos para as correlações *RBF*, *RQ* e *Matern* (acima de 50) e valores abaixo de 3 para a correlação *DP*, em relação ao fluido quente. Para o fluido frio, a correlação de *DP* foi a única que forneceu valores baixos de *MSE* (abaixo de 1), os demais apresentaram valores acima de 9. Desta forma, por meio da avaliação da Equação (33) e a análise da Figura 6-1 e Figura 6-2 observa-se que a correlação da *DP* apresentou valores preditos próximos aos valores reais em ambos os fluidos avaliados.



O R^2 dinâmico fornece uma indicação de quão bem as futuras amostras serão previstas pelo modelo. O valor de R^2 varia de 0 a 1, desta forma, valores próximos a 1 indicam uma maior robustez no modelo. Avaliando as Figura 6-5 e Figura 6-6 juntamente com a Equação 35, observa-se que, para o fluido quente, o valor de R^2 para os kernels *Matern* e *RBF* estão abaixo de 0,35 durante toda simulação, indicando que, os valores previstos pelo modelo aumentam o segundo termo $\left(\frac{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \bar{y}_i)^2} \right)$ da Equação 35, distanciando o R^2 de 1 em ambos os modelos.

O modelo construído com kernel *RQ* apresenta R^2 com valores acima de 0,85 aproximando-se de 0,9 após as 8000h, entretanto, apenas kernel *DP* fornece valores de R^2 acima

de 0,999. O comportamento descrito para o kernel RQ pode ser observado na ligeira diminuição do MSE após as 8000h de simulação. Em relação ao fluido frio, os valores de R^2 corroboram com as afirmações descritas para o *MSE*, indicando que apenas o *DP* fornece valores satisfatórios, com R^2 acima de 0,999 em todos os pontos previstos ao longo da simulação das 10.000h.

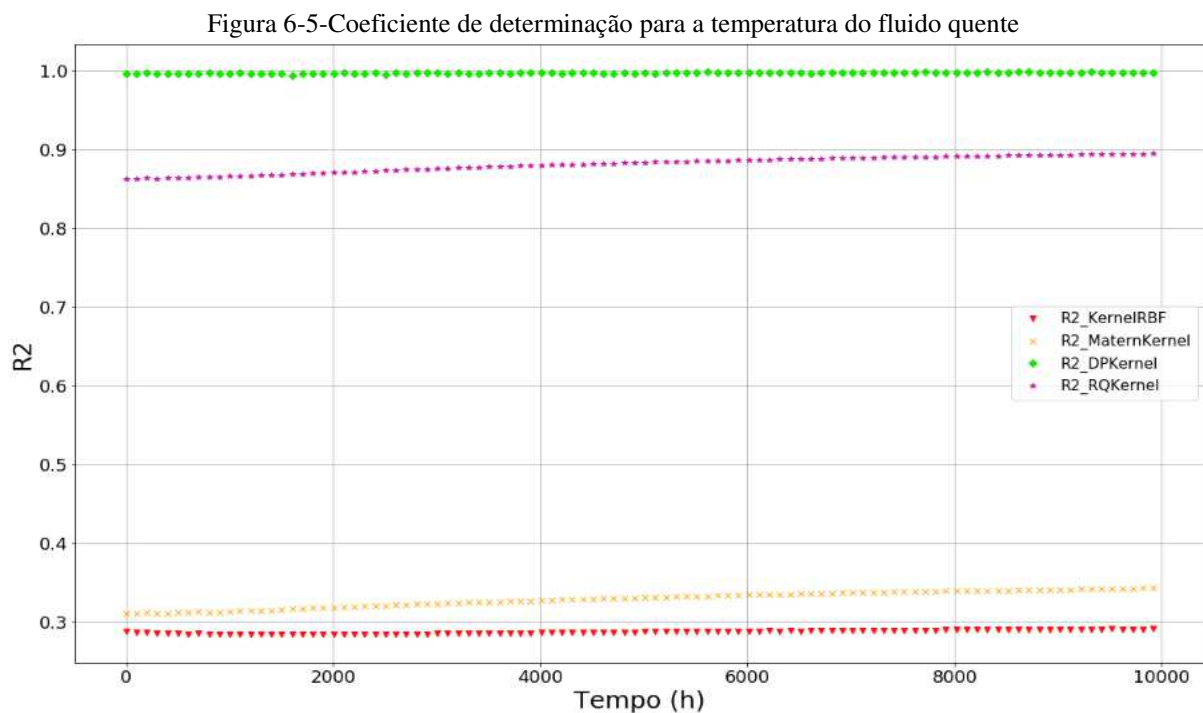
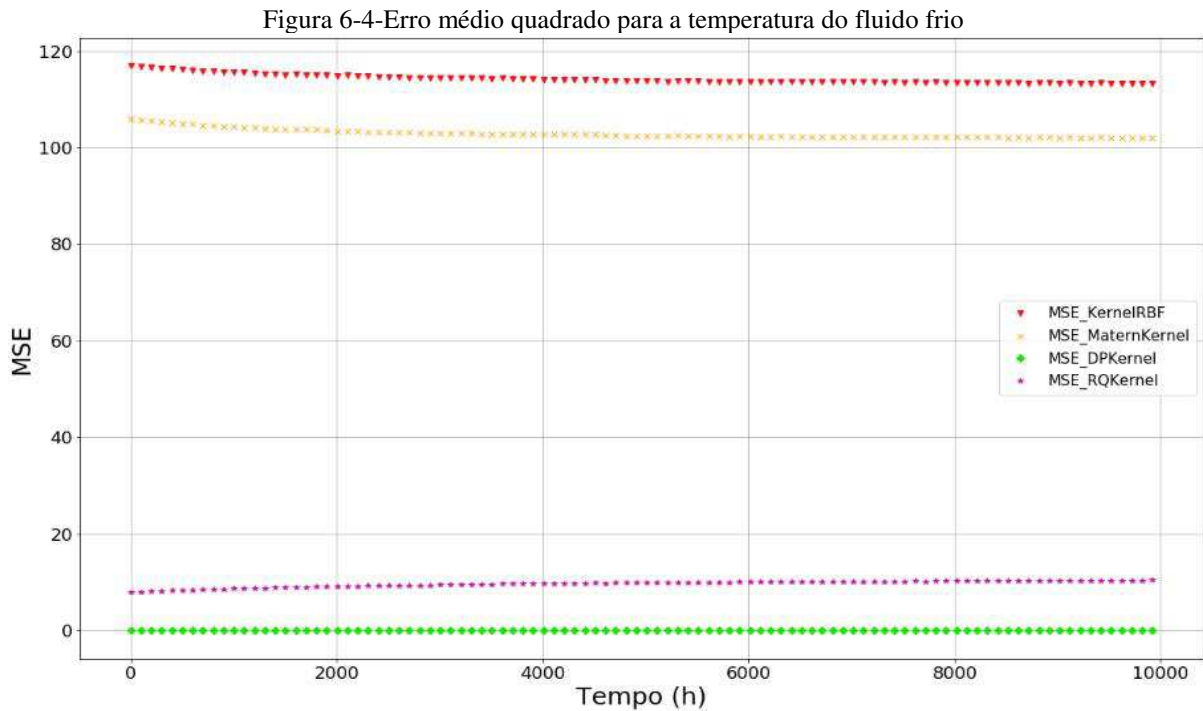
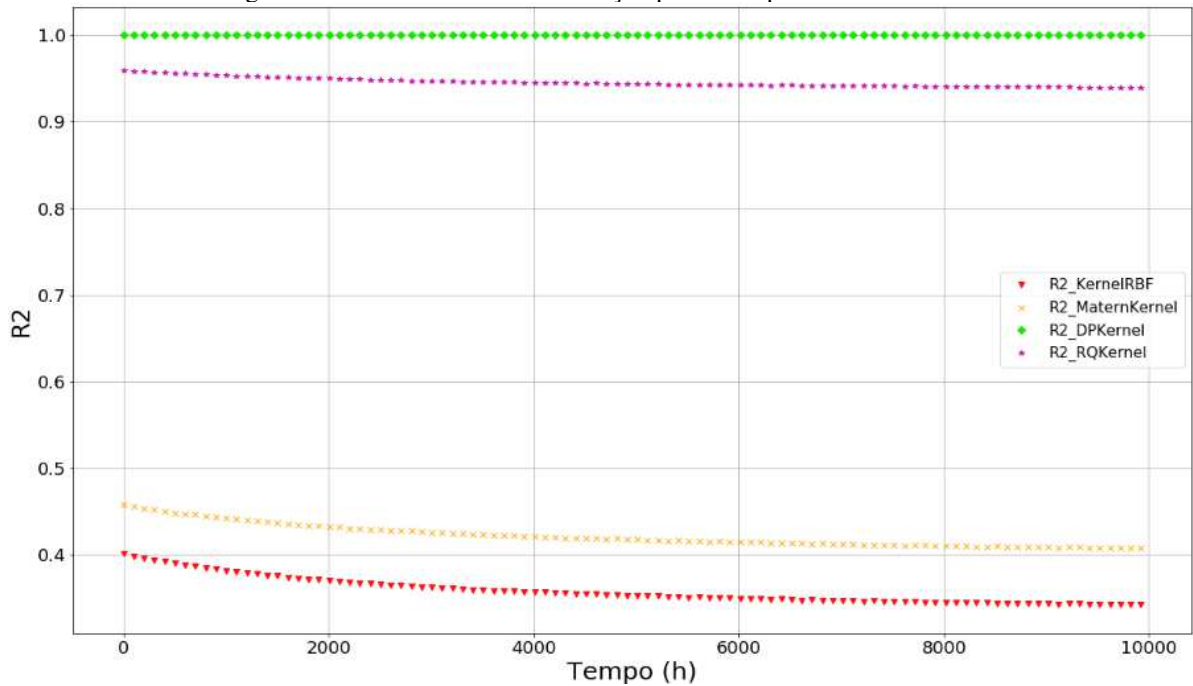
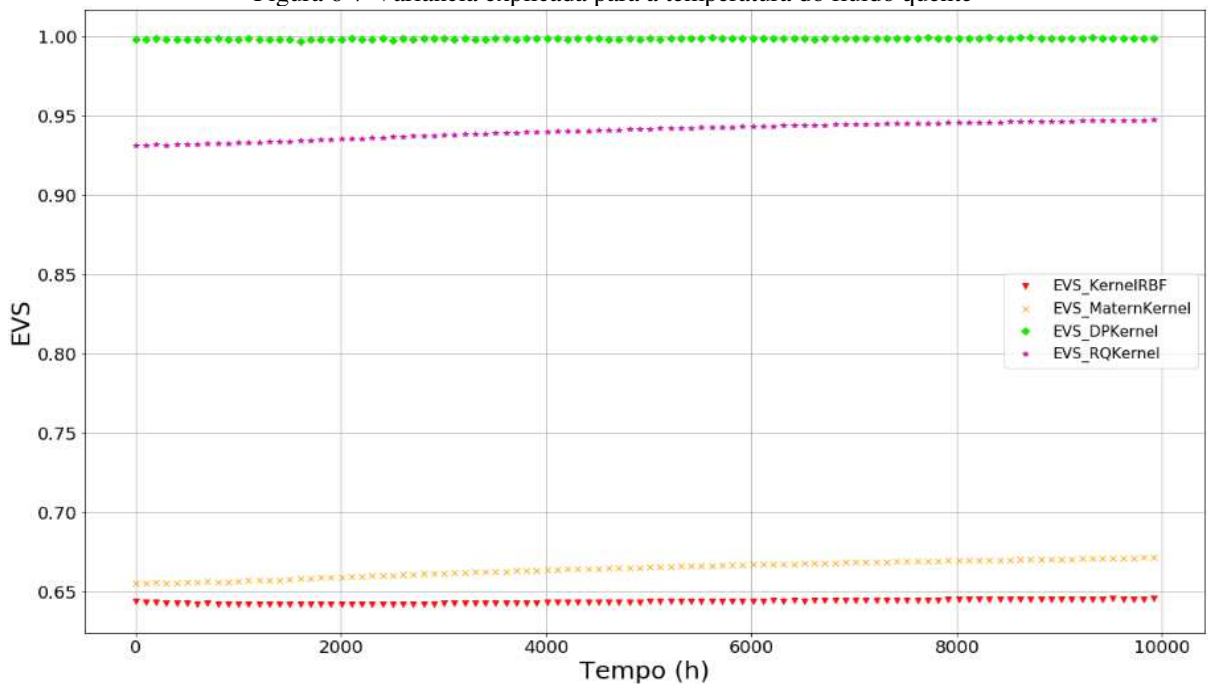


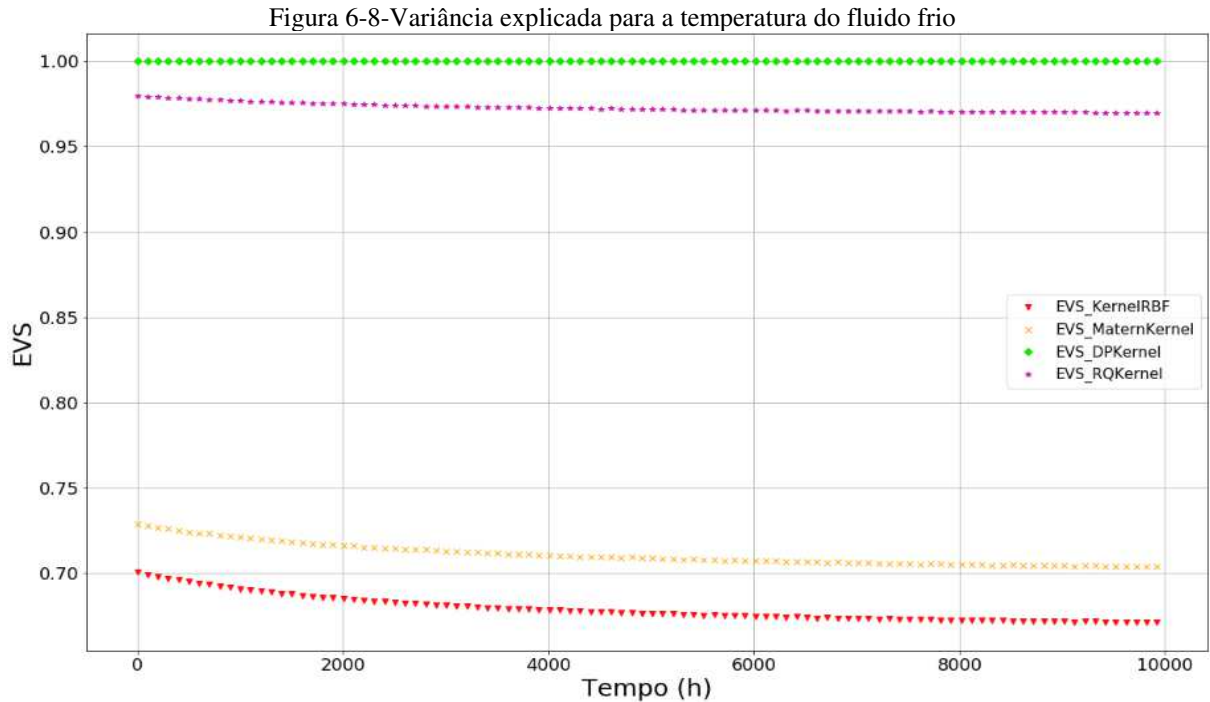
Figura 6-6-Coeficiente de determinação para a temperatura do fluido frio



O teste de variância explicada (*EVS*) descrita pela Equação 34 indica quão bem o modelo consegue explicar variações nos dados e possui a mesma métrica de avaliação do R^2 com modelos mais robustos para valores próximos a 1. O comportamento dinâmico para o fluido quente e frio descritos respectivamente nas Figura 6-7 e Figura 6-8 seguem o mesmo comportamento das Figura 6-5 e Figura 6-6 onde o kernel DP fornece o melhor comportamento para ambos os fluidos avaliados.

Figura 6-7-Variância explicada para a temperatura do fluido quente





As Tabela 6-1 e Tabela 6-2 apresentam a média dos valores de MSE , R^2 e EVS para os 500 instantes de tempo avaliados para cada simulação de cada modelo de correlação. Através da análise das tabelas, observa-se que a correlação DP apresentou resultados superiores às demais correlações em cinco das dez simulações de validação referente ao fluido quente e em sete referente ao fluido frio. Estes resultados corroboram com a avaliação dos resultados descritos previamente para a quinta simulação de validação.

Por meio das Figura 6-1 e Figura 6-2 apresentadas anteriormente observa-se que após o modelo de correlação *dot product*, o modelo que mais se aproxima do comportamento é o *rational quadratic*. Comportamentos similares podem ser observados nas simulações de validação um, dois e três (anexo). Entretanto, a simulação de validação oito, apresenta um comportamento no qual em ambos os fluidos, o modelo RQ fornece uma predição superior aos demais modelos. O mesmo pode ser observado na simulação nove para o fluido frio, enquanto para o fluido quente, nenhum dos modelos avaliados forneceu um comportamento aceitável frente ao esperado.

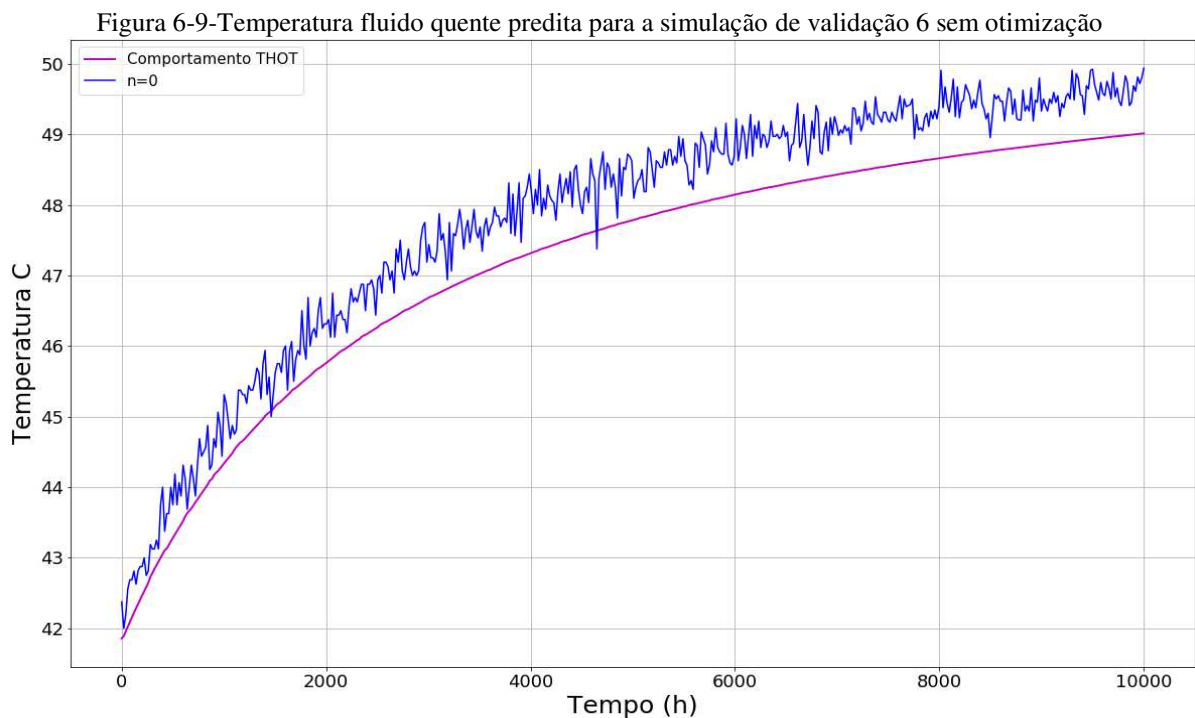
Tabela 6-2 -Valores médios encontrados referente as métricas avaliadas para cada simulação de validação referente a temperatura do fluido frio

Validação	Temperatura do fluido frio											
	MSE				R ²				EVS			
	RBF	MATERN	RQ	DP	RBF	MATERN	RQ	DP	RBF	MATERN	RQ	DP
01	146,70	124,59	18,71	0,00	0,14	0,27	0,89	0,99	0,57	0,63	0,94	0,99
02	6,03	22,43	2,11	0,01	0,96	0,86	0,98	0,99	0,98	0,93	0,99	0,99
03	8,99	22,15	1,97	0,06	0,96	0,90	0,99	0,99	0,98	0,95	0,99	0,99
04	1,30	0,09	0,05	0,06	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
05	114,17	102,83	9,69	0,00	0,35	0,42	0,94	0,99	0,67	0,71	0,97	0,99
06	12,69	0,09	2,43	0,08	0,93	0,99	0,98	0,99	0,96	0,99	0,99	0,99
07	6,04	9,09	0,41	0,10	0,96	0,95	0,99	0,99	0,98	0,97	0,99	0,99
08	0,58	6,04	0,04	0,09	0,99	0,97	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,99
09	9,63	16,97	0,20	0,34	0,95	0,91	0,99	0,99	0,97	0,95	0,99	0,99
10	4,96	0,39	0,30	0,04	0,97	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,99	0,99

6.2 Avaliação da inclusão de filtros para redução de ruído.

A partir das Figura 6-1 e Figura 6-2 avaliadas anteriormente, observa-se que o para a simulação de validação avaliada, o comportamento estimado por meio da correção *DP* possui um comportamento pouco ruidoso. Entretanto o modelo em questão pode fornecer estimativas para o comportamento transiente com elevado grau de ruído a depender dos *inputs* utilizados e do número de otimizações realizadas para ajustar os hiperparâmetros do modelo descritos na Tabela 5-4.

Vale ressaltar que neste trabalho, não foram realizadas otimizações para obtenção dos modelos descritos na metodologia, entretanto, tendo em vista que o código desenvolvido está apto a utilizar este recurso, foi realizada uma análise pontual. As Figura 6-9, Figura 6-10 e Figura 6-11 apresentam a simulação de validação 6 utilizando apenas a correlação *DP* variando o número de vezes(*n*) em que a otimização dos hiperparâmetros foi utilizada.



Observa-se que o nível de ruído em alguns pontos é diretamente proporcional ao número de otimizações. Como existe um modelo Kriging para cada instante de tempo, a otimização é realizada *n* vezes em cada ponto, sabendo que sucessivas otimizações podem conduzir a mínimos locais diferentes dos hiperparâmetros em cada ponto, as estimativas dos pontos podem se desviar positivamente ou negativamente do valor esperado, culminando na geração de ruído.

Figura 6-10-Temperatura do fluido quente predita para a simulação de validação 6 com uma otimização

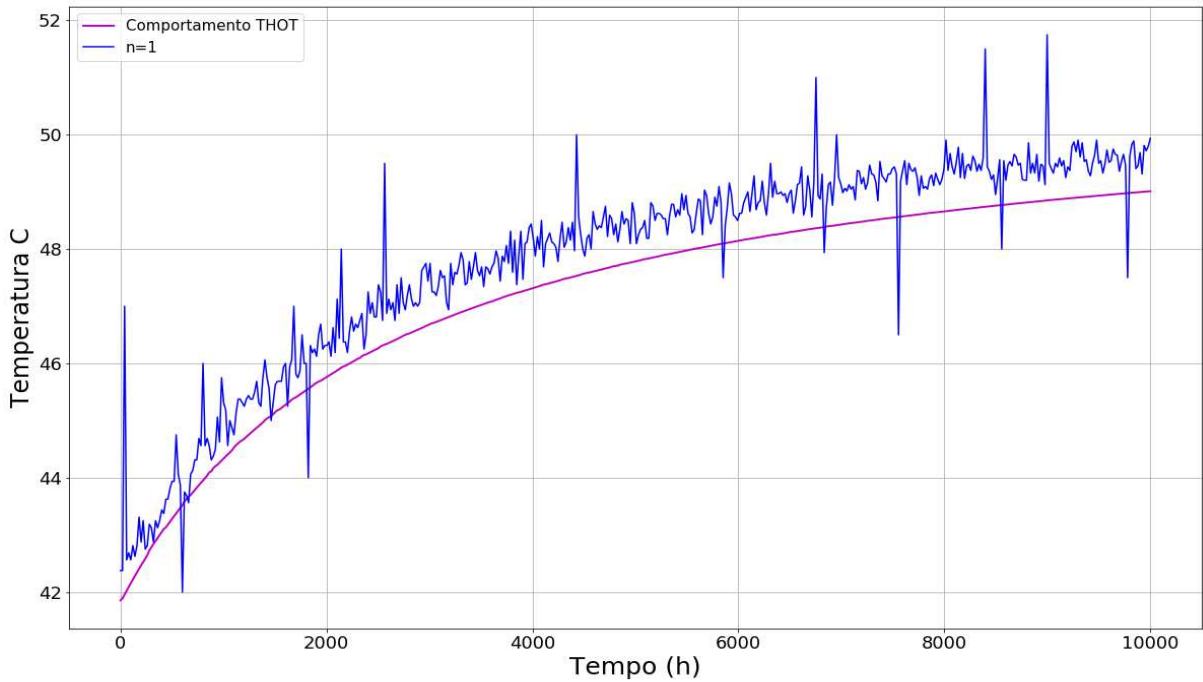
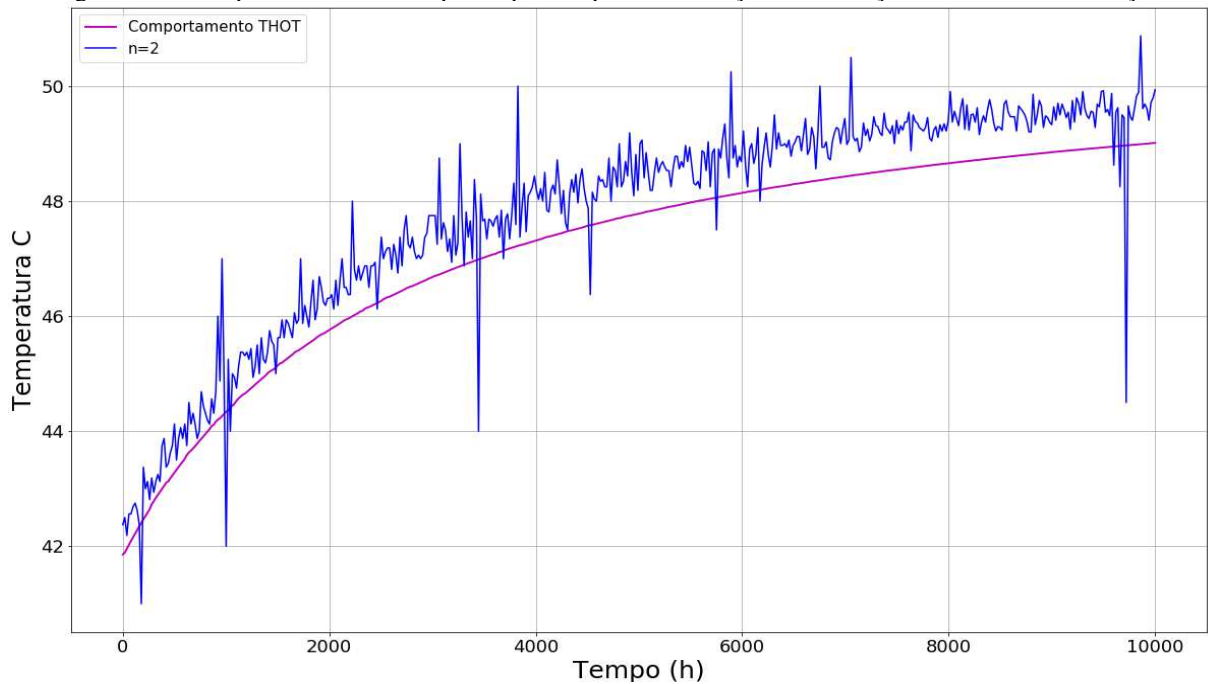


Figura 6-11-Temperatura do fluido quente predita para a simulação de validação 6 com duas otimizações



Desta forma, aplicou-se o filtro de *wavelet*, combinado com um filtro média móvel com janela $k = 10$, buscando minimizar o grau de ruído das medições. Os parâmetros utilizados para o filtro de *wavelet* estão descritos na Tabela 6-3.

Tabela 6-3 - Parâmetros utilizados para o filtro de wavelet

Parâmetros	Tipo escolhido
Tipo de filtro	<i>Wavelet</i>
Família	<i>Symlets8</i>
Método de filtragem	<i>UniversalThreshold</i>
Regras de Limite	<i>Soft</i>

Por meio da análise das Figura 6-12, Figura 6-13 e Figura 6-14 observa-se que a utilização dos filtros promoveu um suavização do comportamento da resposta predita, apresentando uma estimativa mais coerente quanto ao comportamento do modelo.

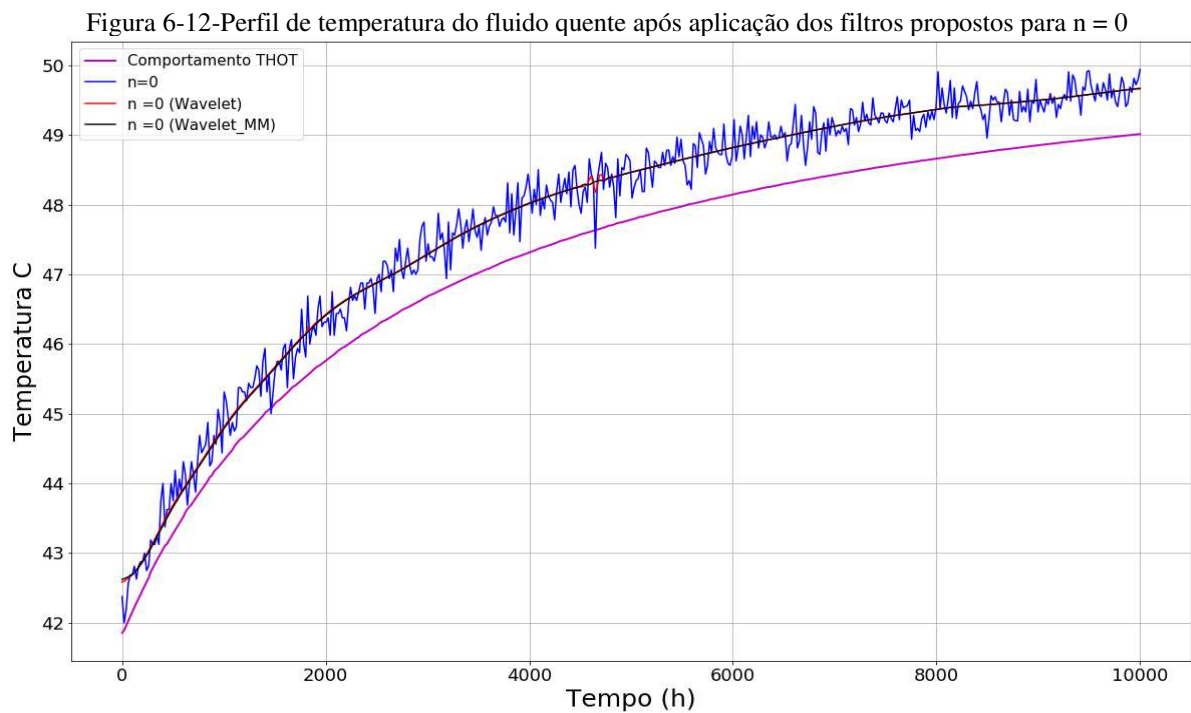
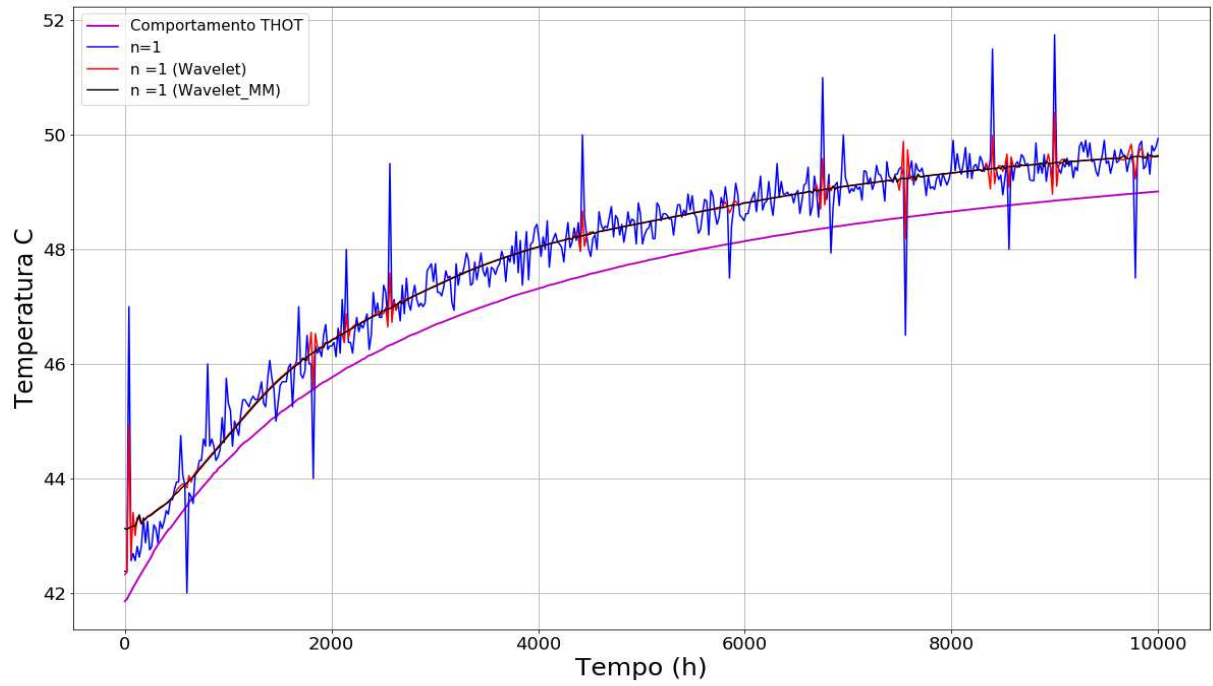
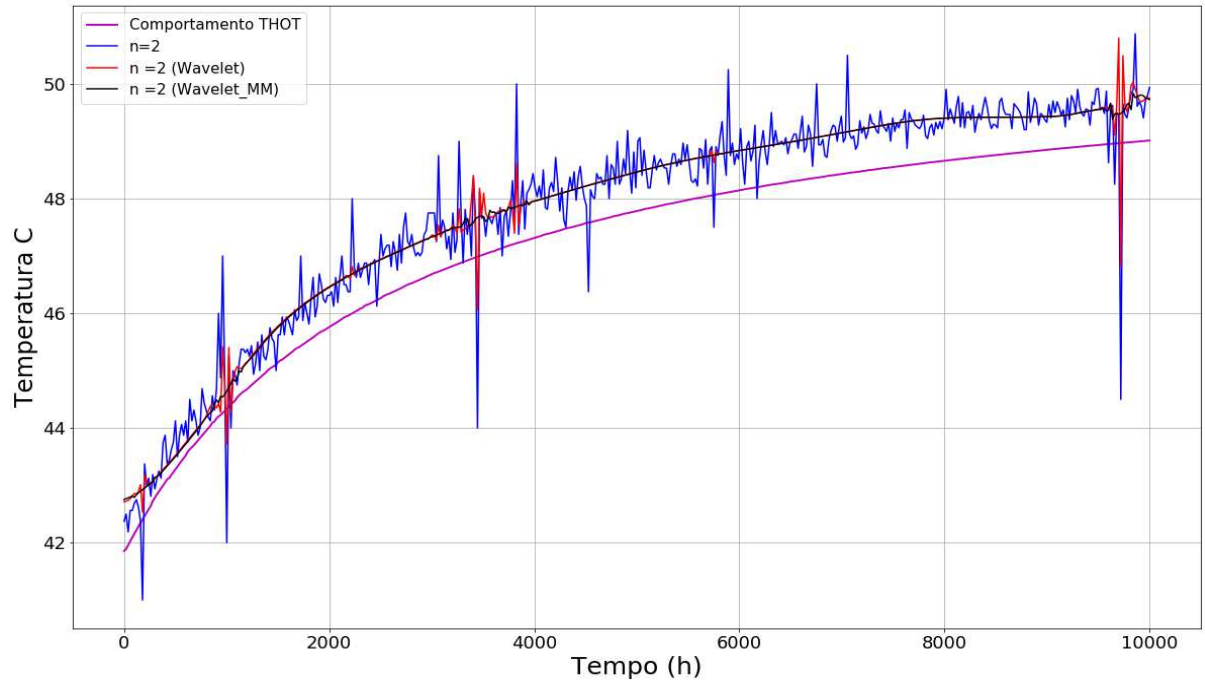


Figura 6-13-Perfil de temperatura do fluido quente após aplicação dos filtros propostos para $n = 1$ Figura 6-14-Perfil de temperatura do fluido quente após aplicação dos filtros propostos para $n = 2$ 

7 CONCLUSÕES

Neste trabalho, a aplicação do UKG foi sugerida para prever o comportamento transiente de variáveis de processo, avaliando modelos de correlação estacionários (*radial basis function(RBF)*, *rational quadratic(RQ)* e *matern*) e não-estacionários (*dot product*). A metodologia proposta foi validada a partir da simulação de um trocador de calor em contracorrente. Foram utilizados 100 dados de treinamento e 10 dados de validação gerados pela técnica de amostragem hipercubo latino (LHS).

Os comportamentos dinâmicos dos *outputs* descritos na Tabela 5-2 foram avaliados em relação à resposta pelos modelos gerados. Por meio da avaliação do perfil de temperatura dos fluidos quente e frio obtido a partir de cada modelo de correlação juntamente com as métricas avaliadas descritas na Tabela 5-5, observou-se que a utilização da função de correlação *dot product* culminou na obtenção de um modelo Kriging que apresentou uma melhor previsão da resposta verdadeira em comparação aos kernels estacionários. Este comportamento pode estar ligado ao fato da correlação *dot product* não estar correlacionado com a distância euclidiana entre os pontos e sim com a multiplicação dos mesmos.

Foram encontrados casos de validação no qual o kernel RQ foi superior ao DP indicando que, ainda que o DP tenha sido escolhido de forma geral para representar o trocador de calor, existem casos específicos onde o mesmo não é representativo. Uma provável causa está relacionada com a taxa de amostragem dos dados nesta região.

A inclusão do filtro de *wavelet* combinado com um filtro média móvel com janela $k = 10$ aplicada a resposta oriunda do modelo Kriging utilizando a correlação *dot product* apresenta-se como uma estratégia aceitável para suavização do comportamento predito. Tal afirmação advém da avaliação da filtragem realizada na simulação de validação 6 para diferentes números de otimizações dos hiperparâmetros. Por meio da avaliação das Figuras 6-12, -13 e 6-14, a utilização combinada dos filtros permite a obtenção de um perfil de temperatura mais suave e representativo em relação do comportamento esperado.

Diante dos resultados obtidos e dos estudos comparativos realizados conclui-se que metodologia apresentada é uma nova abordagem que amplia os cenários de aplicação prática, pois permite a previsão do comportamento transiente, permitindo a avaliação da eficiência dos equipamentos e o planejamento de manutenção preditiva e paradas programadas para diferentes condições operacionais.

8 SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Este trabalho apresenta uma contribuição para diversificação da aplicação do método Kriging por meio de uma nova metodologia proposta para estimação do comportamento transiente de variáveis. Como sugestão para aplicações adicionais dessa metodologia, os seguintes temas podem ser considerados:

- Aplicação da metodologia proposta utilizando redes neurais artificiais para geração do modelo reduzido, utilizando diferentes métodos de ajuste dos pesos sinápticos.
- Incorporação da técnica de algoritmos genéticos para ajuste dos hiperparâmetros dos modelos de correlação visando otimizar os valores dos mesmos.

9 REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M. SEGUN, i. a. Handbook of Mathematical Functions. Dover, New York. p.84-85; 1965.
- ALVES, V. M. C.; LIMA, F. S.; SILVA, S. K.; ARAUJO, A. C. B., Metamodel-Based Numerical Techniques for Self-Optimizing Control, Industrial e Engineering Chemistry Research, v. 57, n. 49, pp 16817-16840; 2018.
- BLIGHT, B. J. N.; OTT, L.; A Bayesian approach to model inadequacy for polynomial regression. Biometrika, v. 62; n.1; p. 79–88; 1975.
- CRESSIE, N.; The Origins of Kriging; Mathematical Geology, v. 22, n. 3, p. 239-252; 1990.
- DAVILA, H.; MARTÍNEZ-OVALLE, S.A.; CASTRO, H.F.; VEGA-CARRILLO, H.R.; Optimization by Monte Carlo method of photon fluence from the X-ray beam spectrum in a bimodal tomographic system; Applied Radiation and Isotopes; v. 35; n. 4; 2018.
- ESFE, M. H., AFRAND, M.; YAN, W. M.; AKBARI, M.; Applicability of artificial neural network and nonlinear regression to predict thermal conductivity modeling of Al₂O₃–water nanofluids using experimental data; International Communications in Heat and Mass Transfer; v. 66; p. 246-249, 2015.
- FORRESTER, A.; KEANE, A.; SOBESTER, A.; Engineering *design* via surrogate modelling. Chichester: Wiley, 1 ed; 2008.
- HALL, P.; PHAN, W.; WHITSON, K.; The evolution of Analytics: Opportunities and Challenges for Machine Learning in Business. 1 ed. O’Reilly, 2016.
- JEONG, S.; MINEMURA, Y.; OBAYASHI, S.; Optimization of combustion chamber for diesel engine using Kriging model; Journal of fluid Science and Technology; v. 1; n. 3; p.138-146; 2006.
- JEONG. S.; MURAYAMA M.; YAMAMOTO, K.; Efficient optimization *design* method using Kriging model; Journal of aircraft; v. 45; n. 2; 2005.
- JOURDAN, D.; BALOPOULOS, E.; GARCIA-FERNANDEZ, M.-J.; MAILLARD, C.; Objective analysis of temperature and salinity historical data set over the Mediterranean Basin.; IEEE Oceanic Engineering Society; Conference Proceedings, 1998.
- KADLEC, P.; GABRYS, B.; STRANDT, S.; Data-driven soft sensors in the process industry, Computers and Chemical Engineering, v. 33, n. 4; p. 795-814, 2009.
- KEPPNER, K.; Artificial Intelligence In Supply Chain Planning – Why a Hybrid AI Concept is the Better Choice, Disponível em: <https://www.allthingssupplychain.com/artificial-intelligence-in-supply-chain-planning-why-a-hybrid-ai-concept-is-the-better-choice>; 2018.

KHODADADIANA, A.; TAGHIZADEHA, L.; HEITZINGERA, C.; Optimal multilevel randomized quasi-Monte-Carlo method for the stochastic drift–diffusion-Poisson system; *Computer Methods In Applied Mechanist and Engineering*; v. 329; p. 480-497; 2018.

KRIGE, D. G.; A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand, *J. Chem. Metall. Min. Soc. S. Afr.*; v. 52, n.6; p. 119–139, 1951.

LAL, A.; DATTA, B.; Development and Implementation of Support Vector Machine Regression Surrogate Models for Predicting Groundwater Pumping-Induced Saltwater Intrusion into Coastal Aquifers; *Water Resources Management*; v. 32; n. 7; p. 2405–2419; 2018.

LATAIRE, J; CHEN, T.; Transfer function and transient estimation by Gaussian process regression in the frequency domain; *Automatica*, v. 72; p. 217-229; 2016.

LEE, H; LEE, D. J., KWON, H.; Development of an optimized trend Kriging model using regression analysis and selection process for optimal subset of basis functions; *Aerospace Science and Technology*, v. 77; p. 273-285; 2018.

LI, D.; YI, D.; *Artificial intelligence with uncertainty*. CRC press, 2017.

LIN, W.; SHIH-WEN, K.; CHIH-FONG; T; CANN: An intrusion detection system based on combining cluster centers and nearest neighbors; *Knowledge-based systems*, v. 78; p. 13-21, 2015.

LIU, D.; WU, J.; LIN, K.; WU, M.; Planning of Multi Energy-Type Micro Energy Grid Based on Improved Kriging Model, School of Electrical Engineering, Beijing Jiaotong University, China, 2019.

LIU, T.; WEI, H.; ZHANG, K. Wind Power Prediction With Missing Data Using Gaussian Process Regression And Multiple Imputation. *Applied Soft Computing*; v. 87; p. 905-916; 2018.

LUO, L.; YAO, Y.; GAO, F.; ZHA, C.; Mixed-effects Gaussian process modeling approach with application in injection molding processes; *Journal of Process Control*; v. 62; p .37-43 2018.

MARTIN, J.D., SIMPSON, T.W., A study on the use of Kriging models to approximate deterministic computer models, in: *ASME 2003 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*; v. 2; p. 567–576, Chicago, Illinois, USA, 2–6 September, 2003.

MATHERON, G., Le krigeage universel, in: *Les Cahiers du Centre de morphologie mathématique de Fontainebleau, Fascicule1*, École nationale supérieure des mines de Paris; v.1; p. 83; France, 1969.

MCKAY, M. D.; BECKMAN; R. J.; CONOVER, W. J; A Comparison of Three Methods for Selecting Values of *Input* Variables in the Analysis of *Output* from a Computer Code. *Technometrics*, v.1, n. 2, p. 239-245, 1979.

MONARD, M.C.; BARANAUSKAS, J.A.; Conceitos sobre aprendizado de máquina; Sistemas inteligentes-Fundamentos e aplicações; 1 ed; p. 89-114; 2003.

NAVID, A; KHALILARYA, S; ABBASI, M.; Diesel engine optimization with multi-objective performance characteristics by non-evolutionary Nelder-Mead algorithm: Sobol sequence and Latin hypercube sampling methods comparison in DoE process; Fuel; v.228; p. 349-367; 2018.

OLIVER, M. A.; WEBSTER, R.; Kriging: a method of interpolation for geographical information systems; International Journal of Geographical Information System, v. 4; n. 3; p. 313-332; 1990.

PANI A. K.; VADLAMUDI V.; BHARGAVI R J, MOHANTA H. K; Neural Network Soft Sensor Application in Cement Industry: Prediction of Clinker Quality Parameters; International Conference on Process Automation; Control and Computing; p. 1-6; 2011.

PENG, G.; BIND, W.; GENG, G.; GUANFGCAN, Z.; Spatial distribution of soil organic carbon and total nitrogen based on GIS and geostatistics in a small watershed in a hilly area of northern China; PloS one; v. 8; n. 12; 2013.

RAJ, D. Sampling Theory. New York: McGraw-Hill. Regression for Approximation of Complex Engineering Analyses, Journal of Mechanical *Design*, v. 127, n. 6, p. 1077-1087, 1968.

RASMUSSEN, C.E., WILLIANMS, C.K.I, Gaussian Process for Machine Learning, the MIT Press, 2006. ISBN 02621853x. © 2006; Massachusetts Institute Technology.

RICHARDSON, R.R; OSBORNE, M.A; HOWEY, D.A; Gaussian process regression for forecasting battery state of health; Journal of Power Sources; v. 357; p. 209-219; 2017.

RUTAGEMWA H.; GHASEMI A.; LIUZ S.; Dynamic Spectrum Assignment for Land Mobile Radio with Deep Recurrent Neural Networks; IEEE International Conference on Communications Workshops; p. 1-6; 2018.

SANAYE, S.; NIROOMAND, B.; Simulation of Heat Exchanger Network (HEN) and Planning the Optimum Cleaning Schedule; Energy Conversion and Management; v. 48; p. 1450-1461, 2007.

SHEN, L.; CHEN, H.; YU, Z.; KANG, W.; Evolving support vector machines using fruit fly optimization for medical data classification; Knowledge-Based Systems, v. 96; n. C; p. 61-75; 2016.

SWETAPADMA A.; YADAV A.; A Novel Decision Tree Regression-Based Fault Distance Estimation Scheme for Transmission Lines; IEEE Transactions on Power Delivery v. 32, n. 1, p. 234-245; 2017.

VELÁSQUEZ, E. I. G.; CORONADO, C. J. R.; CARTAGENA, J. G. Q.; JR, J. A. C.; MENDIBURU, A. Z.; ANDRADE, J. C.; CORTEZ, E. V. ; SANTOS, J. C., Prediction of flammability limits for ethanol-air blends by the Kriging regression model and response surfaces, Fuel, v. 220, p. 410-424, 2017.

WANG, C; LIU, Y.; ZHENG, S.; JIANG, A.; Optimizing combustion of coal fired boilers for reducing NOx emission using Gaussian Process, v. 153; p. 149-158; 2018.

WU, R.; WANG, B.; Gaussian process regression method for forecasting of mortality rates; Neurocomputing; v.316; p.-232-239; 2018.

XIE, Y.; XU; X.; MA, Y.; Optimization of sheet flanging forming based on Kriging metamodel; International Conference on Artificial Intelligence and Computational Intelligence, p. 282-286; 2009.

XU, M.; WATANACHATURAPORN, P; VARSHNEY, P. K.; ARORA, M. K.; Decision tree regression for soft classification of remote sensing data; Remote Sensing of Environment; v. 97; n. 3; p. 322-336; 2005.

YONG-HAI; WU; QIN-MAN, F.; FENG, W.; The temperature approximate analysis on the heat-fluid-solid coupling field of barrel based on Kriging model; Third International Conference on Information and Computing; p. 207-21; 2010.

10 APÊNDICE

10.1 Apêndice – A: Simulações de validação

Figura 10-1-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 01

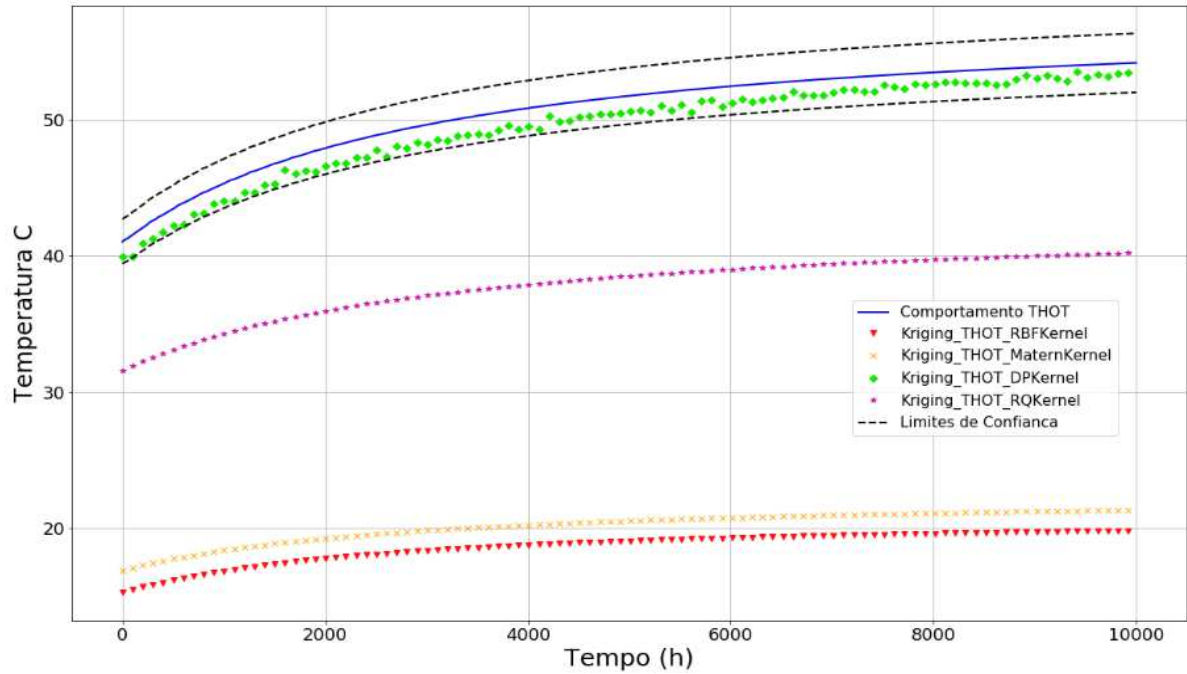


Figura 10-2-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 01

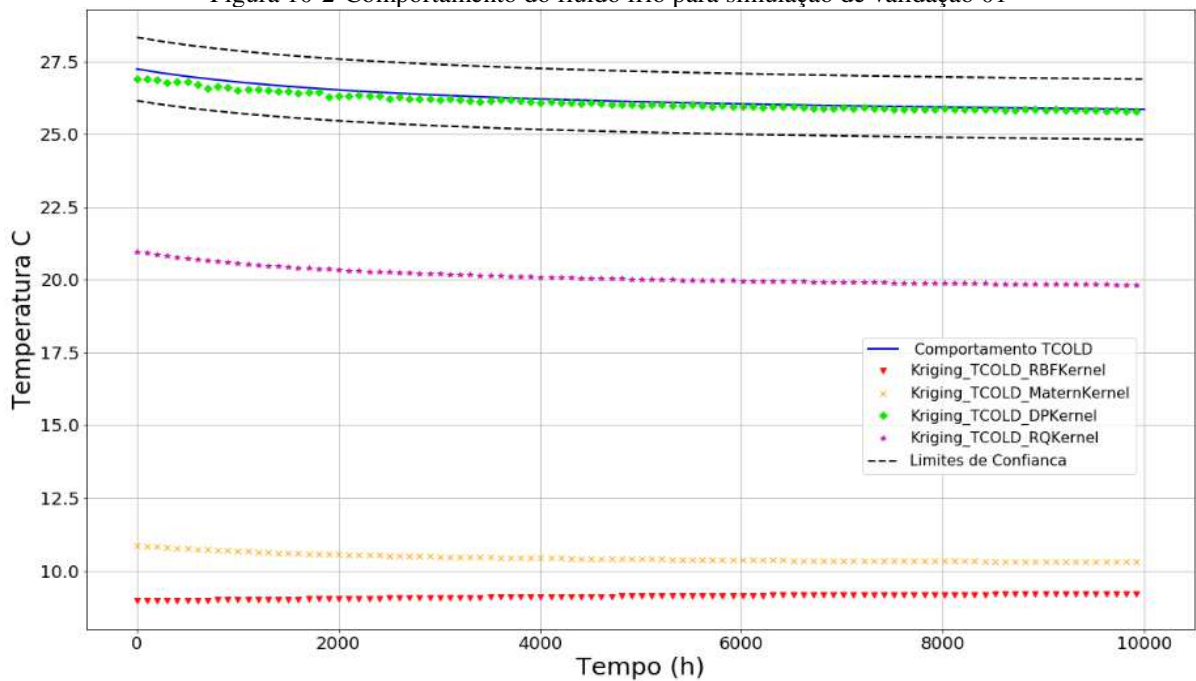


Figura 10-3-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 02

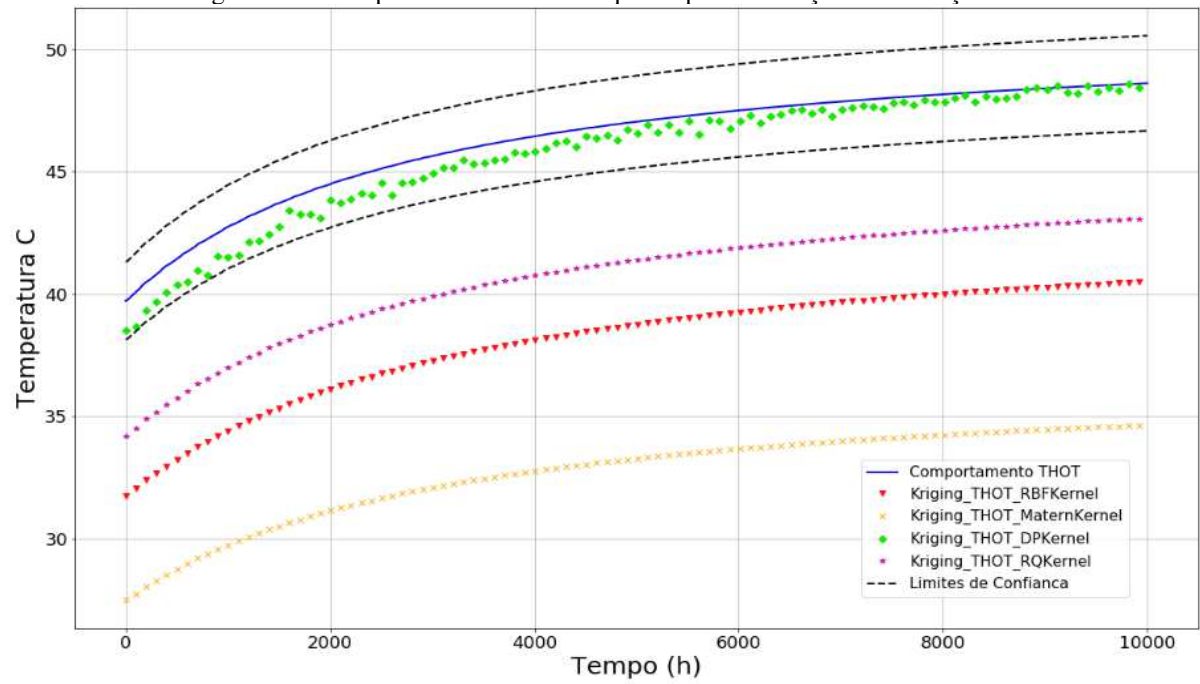


Figura 10-4-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 02

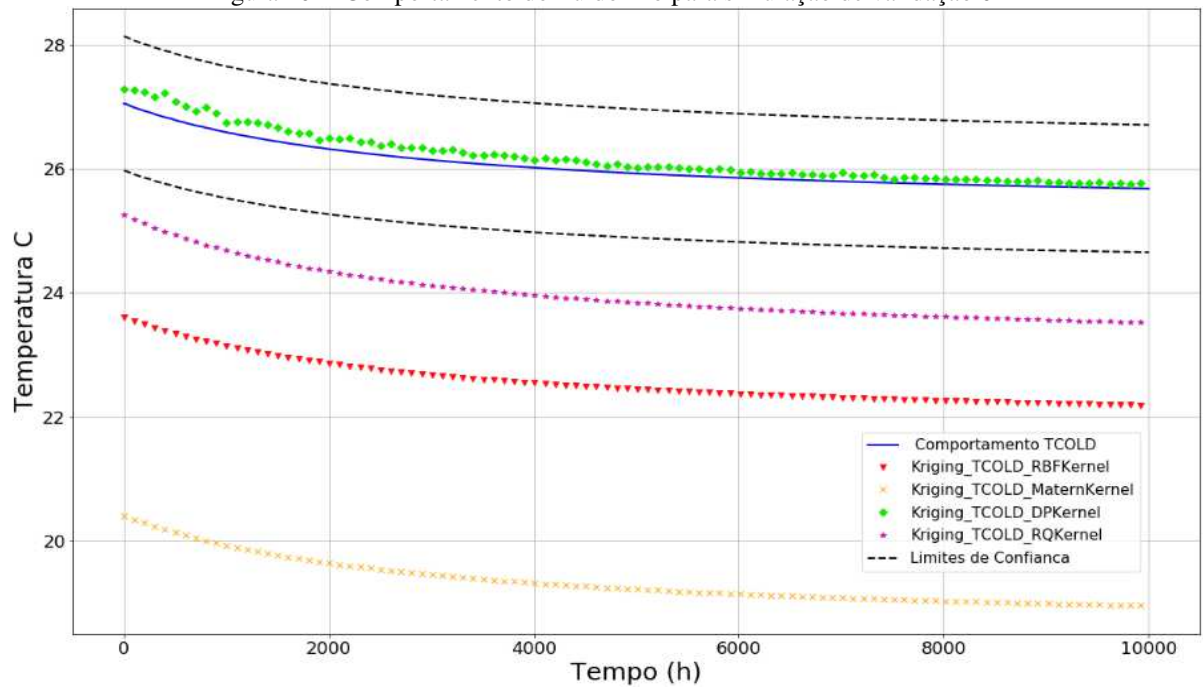


Figura 10-5-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 03

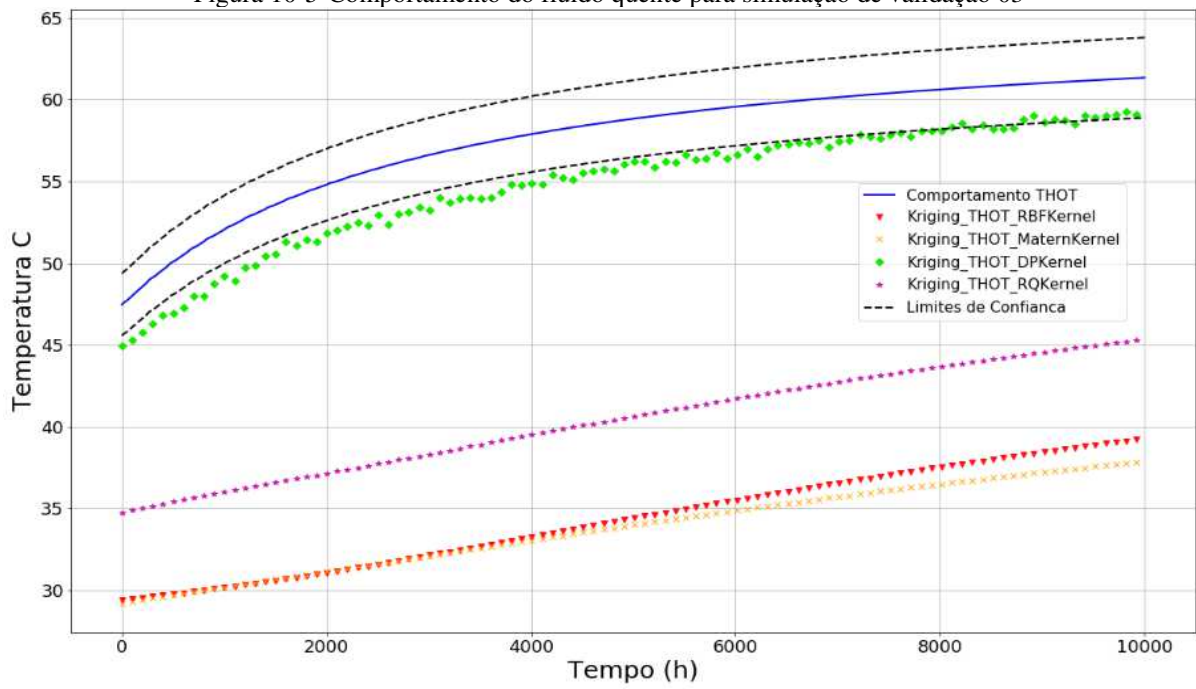


Figura 10-6-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 03

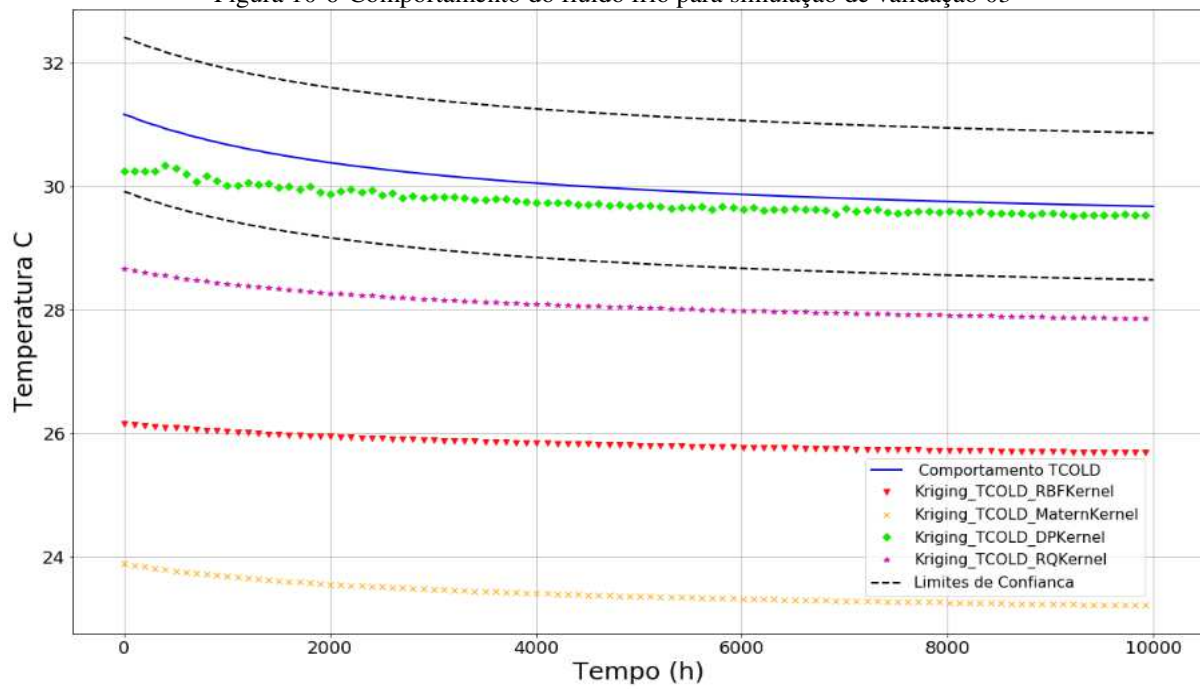


Figura 10-7-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 04

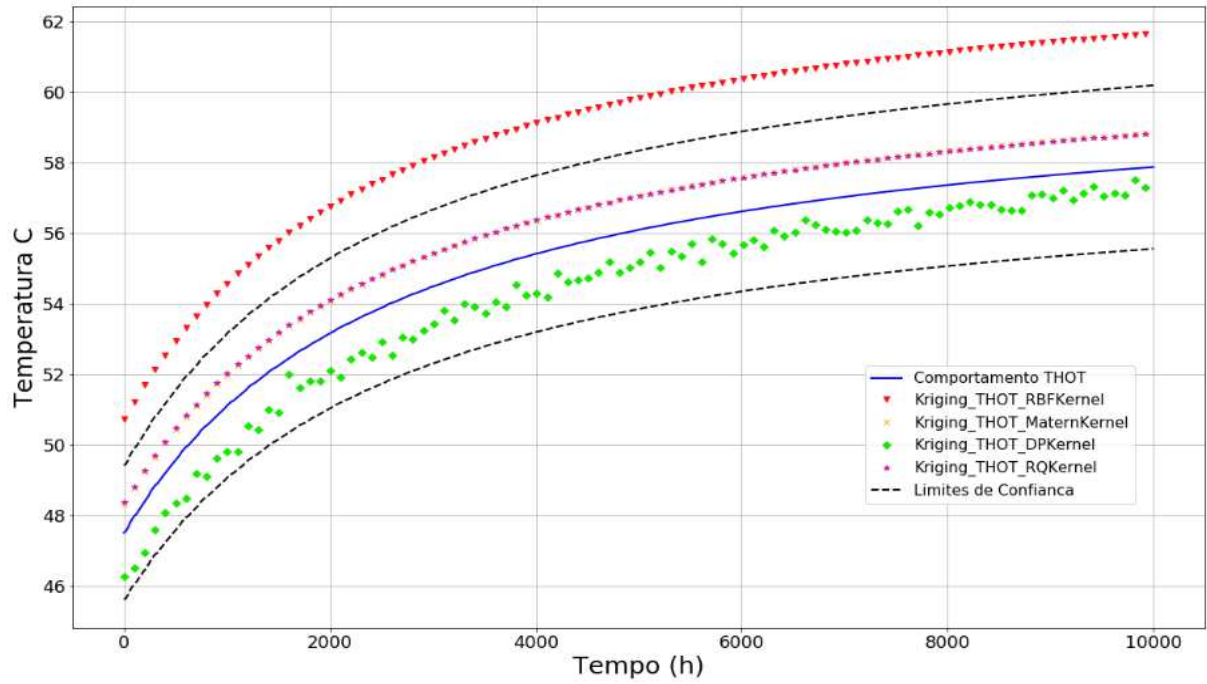


Figura 10-8-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 04

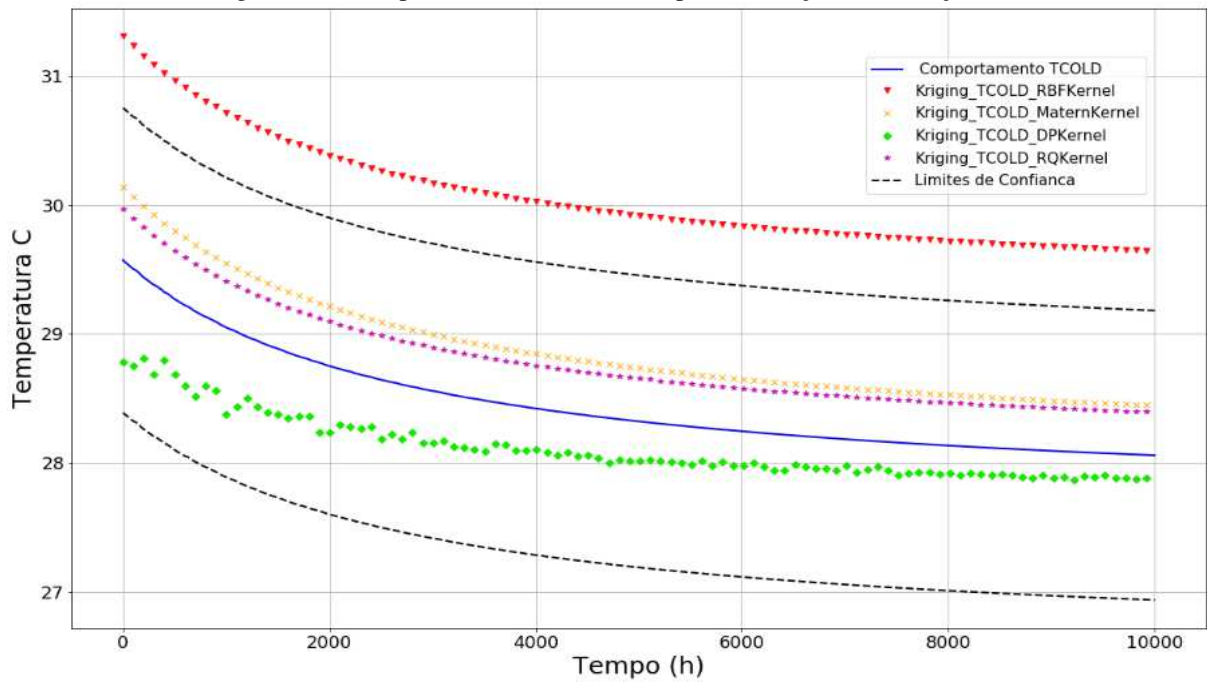


Figura 10-9-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 05

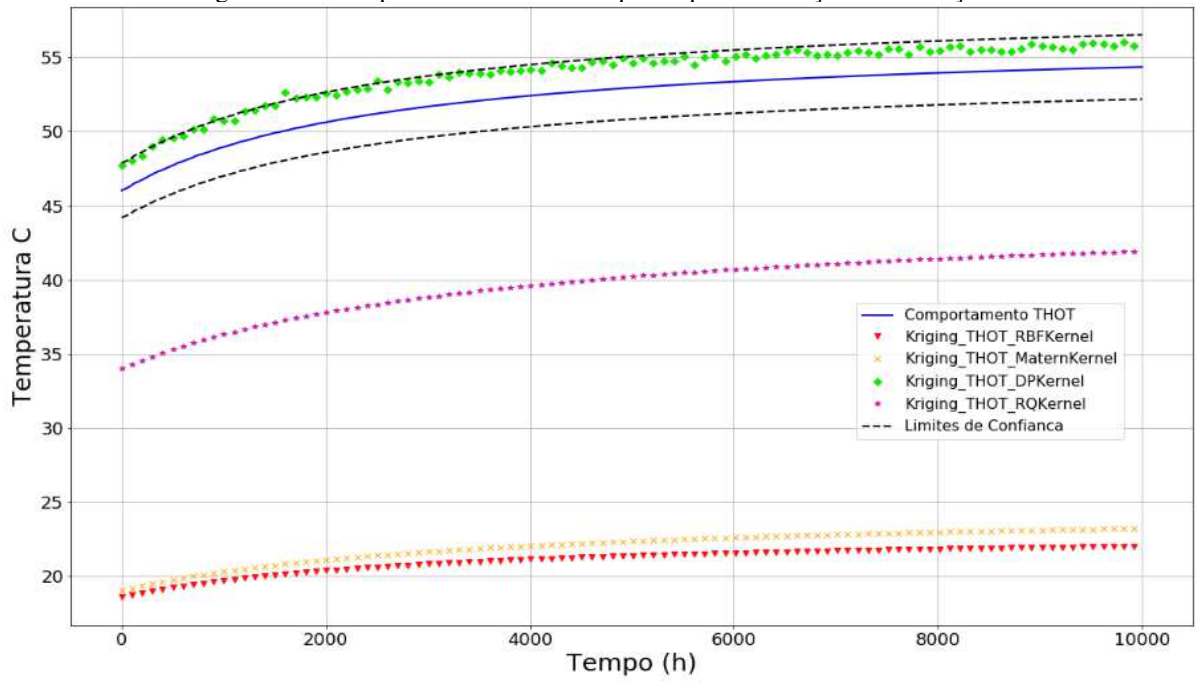


Figura 10-10-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 05

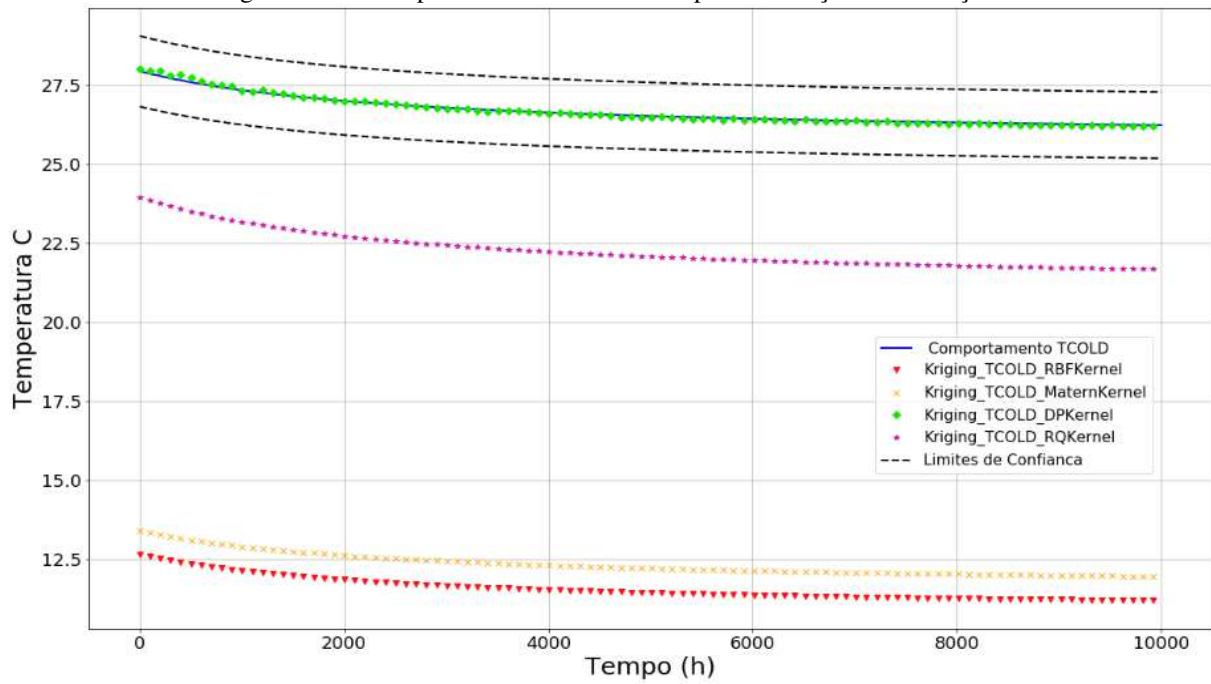


Figura 10-11-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 06

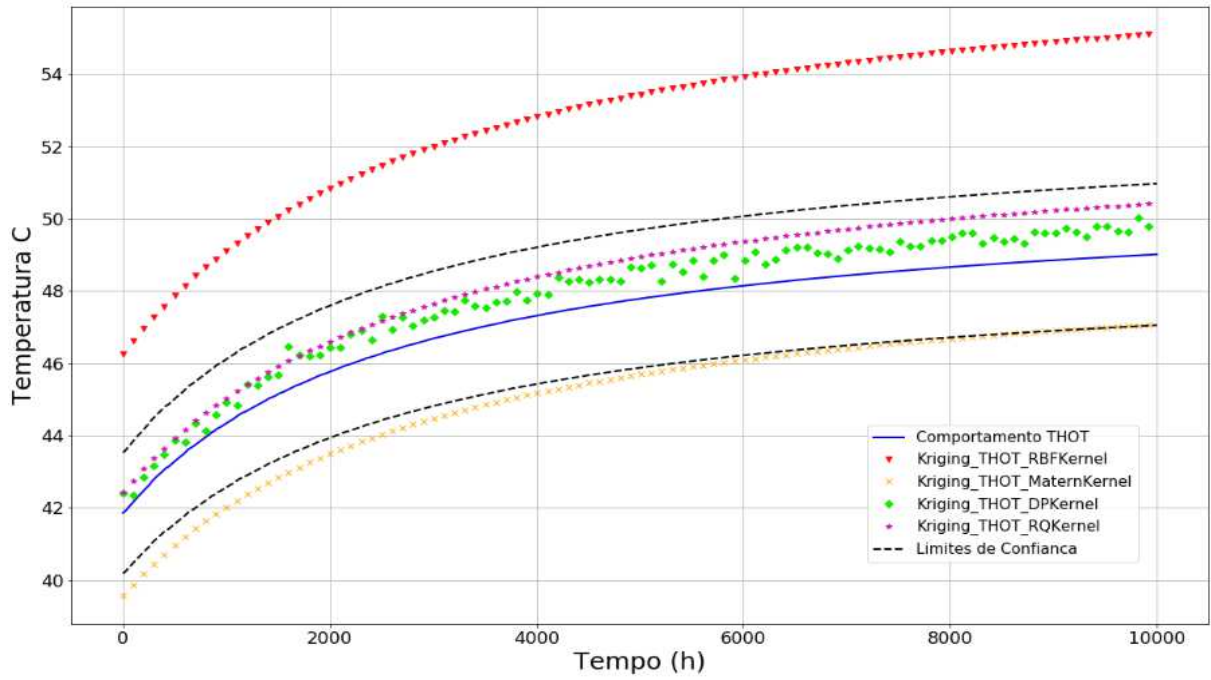


Figura 10-12-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 06

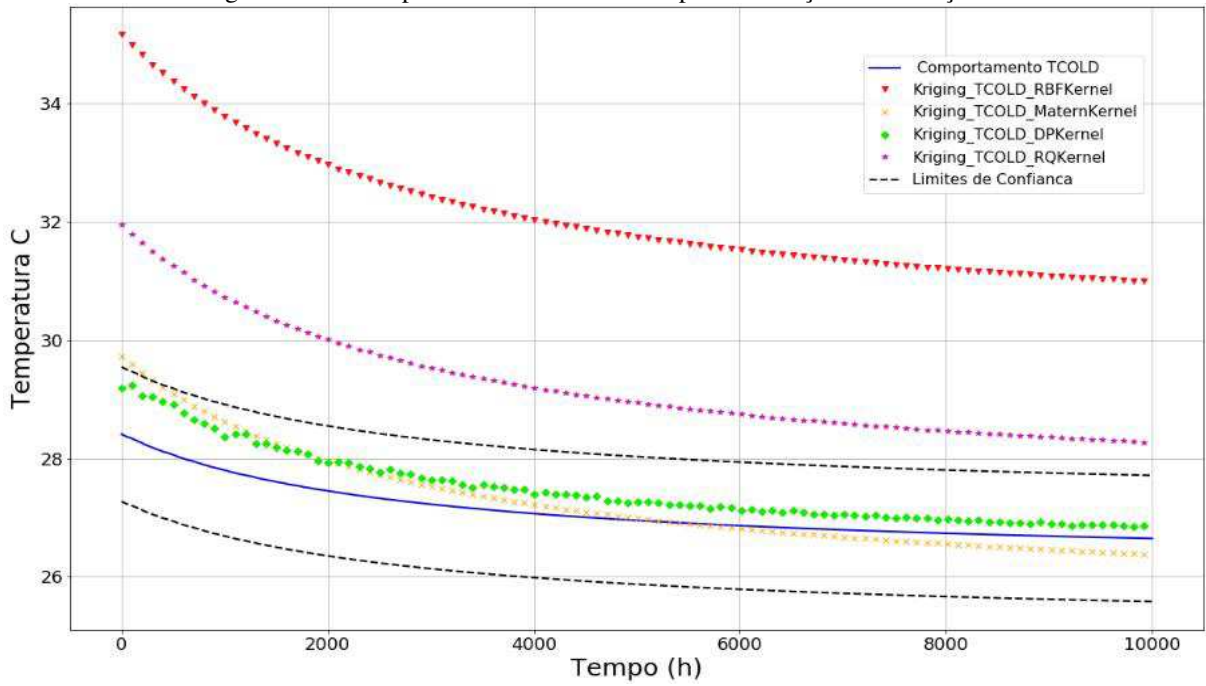


Figura 10-13-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 07

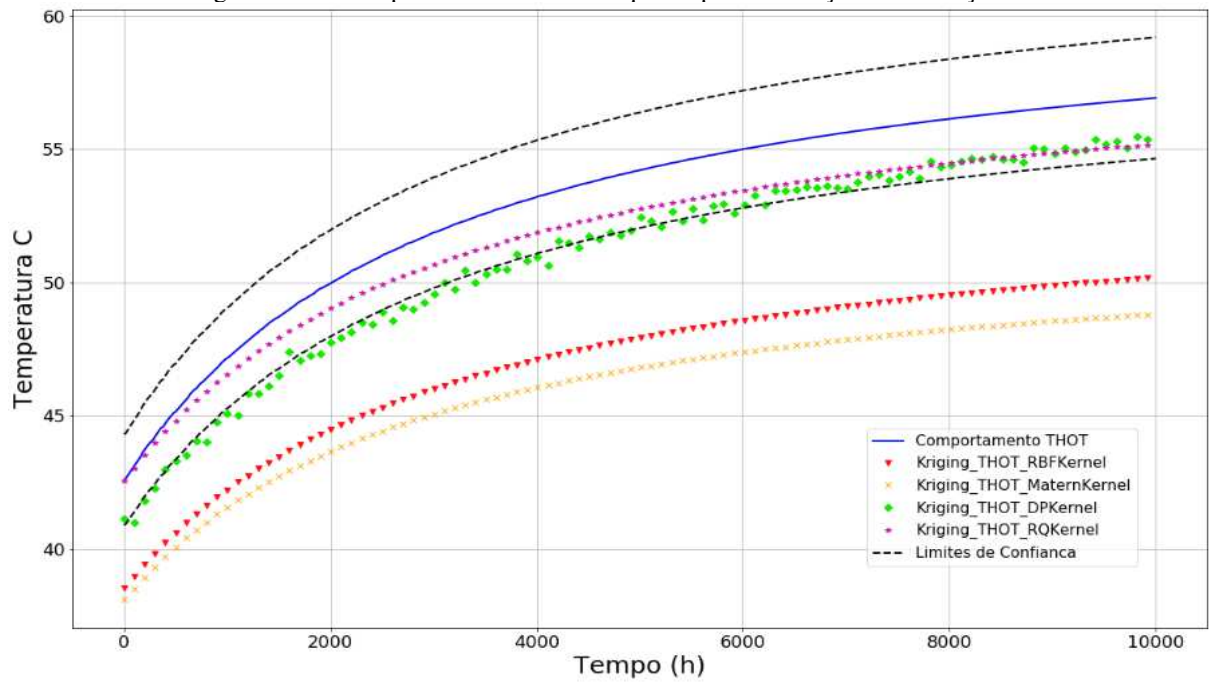


Figura 10-14-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 07

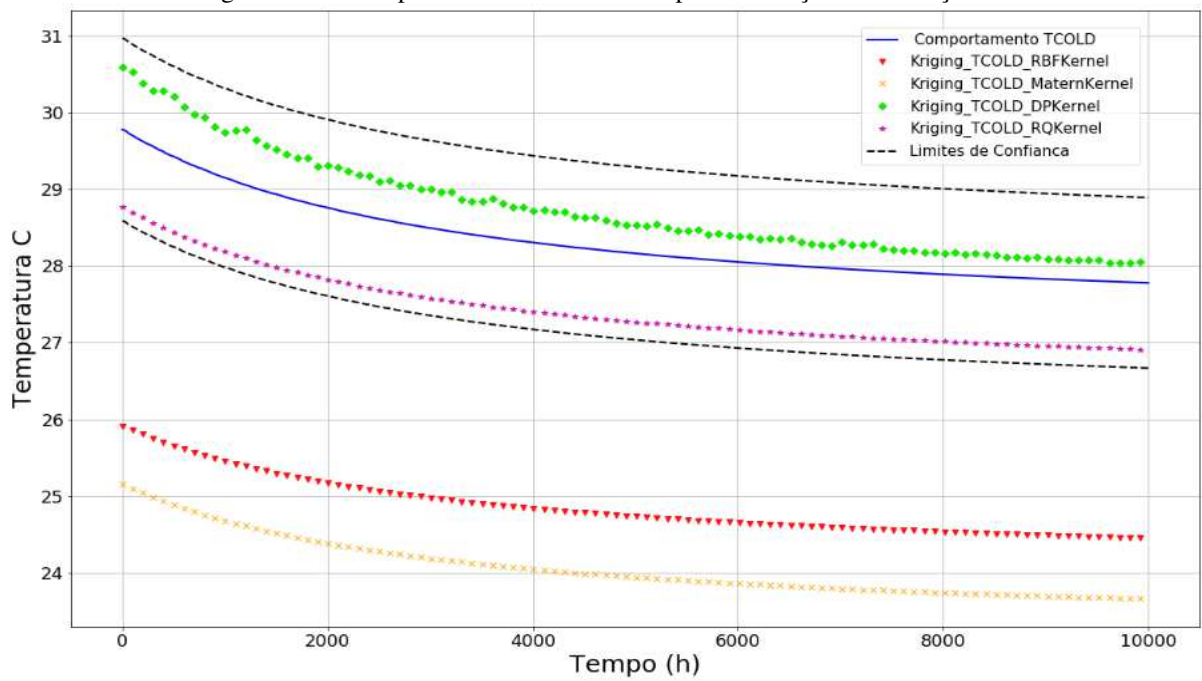


Figura 10-15-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 08

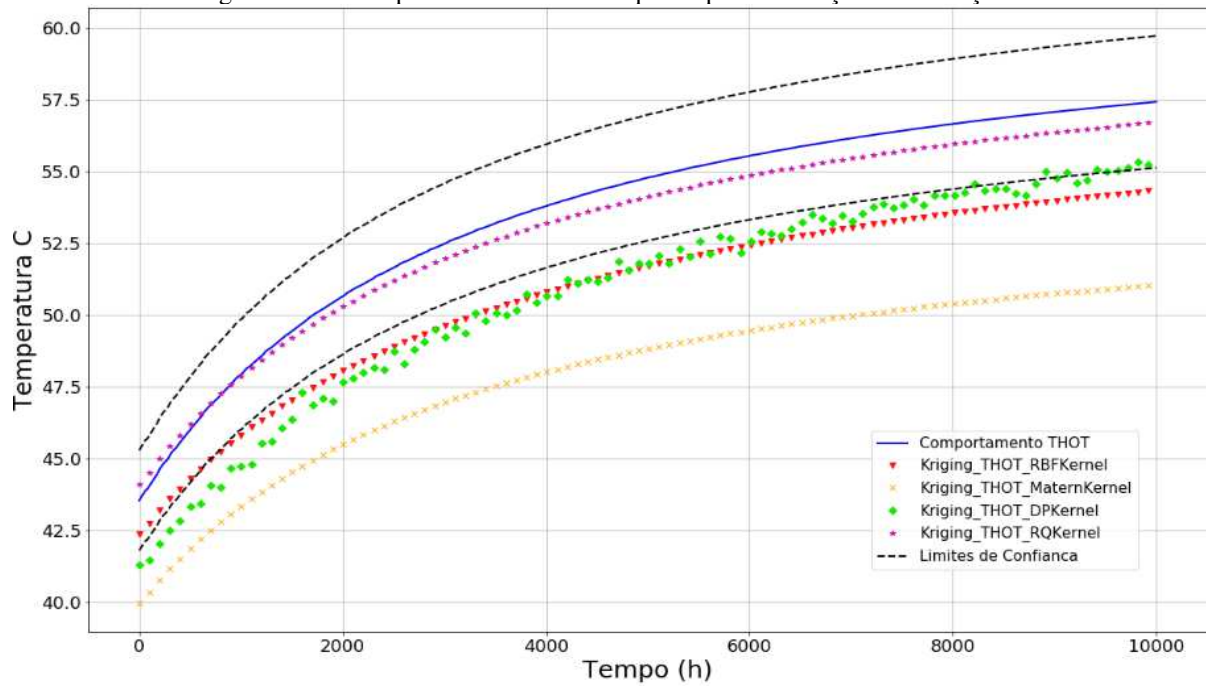


Figura 10-16-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 08

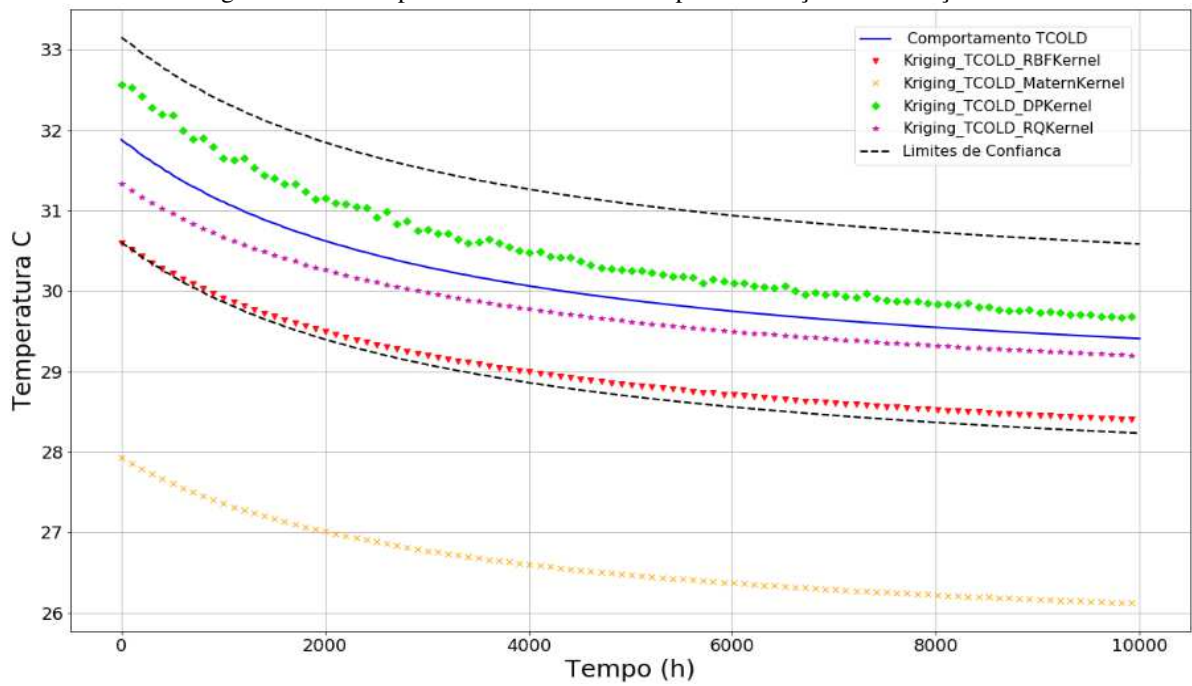


Figura 10-17-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 09

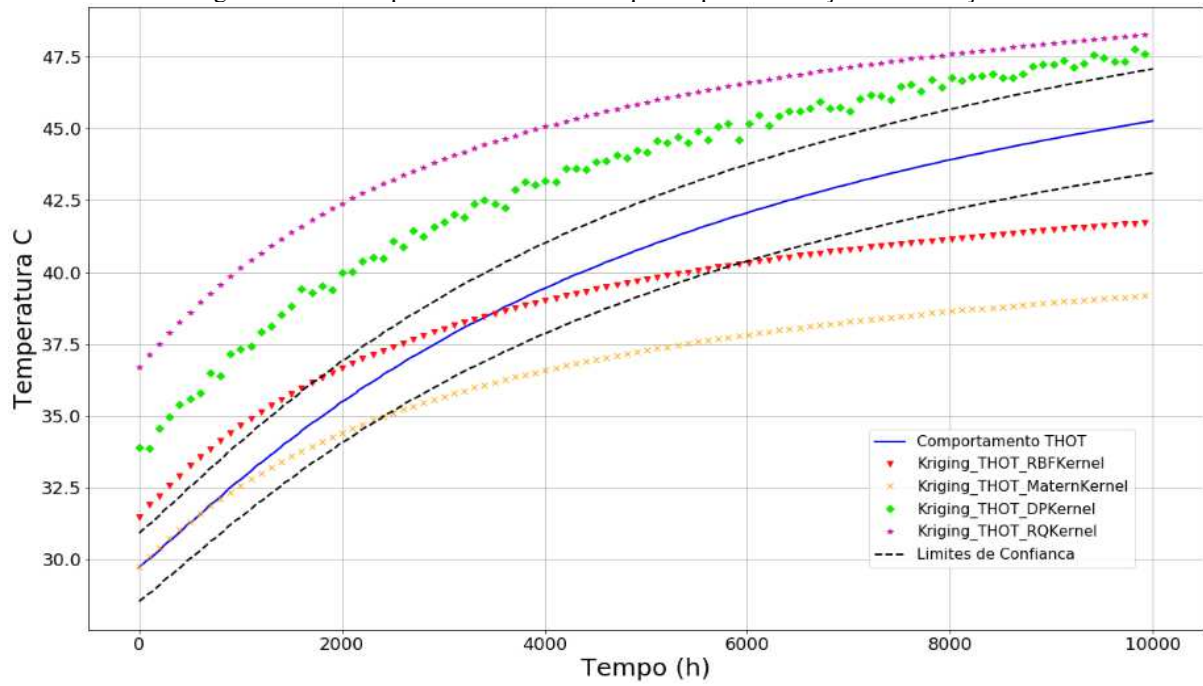


Figura 10-18-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 09

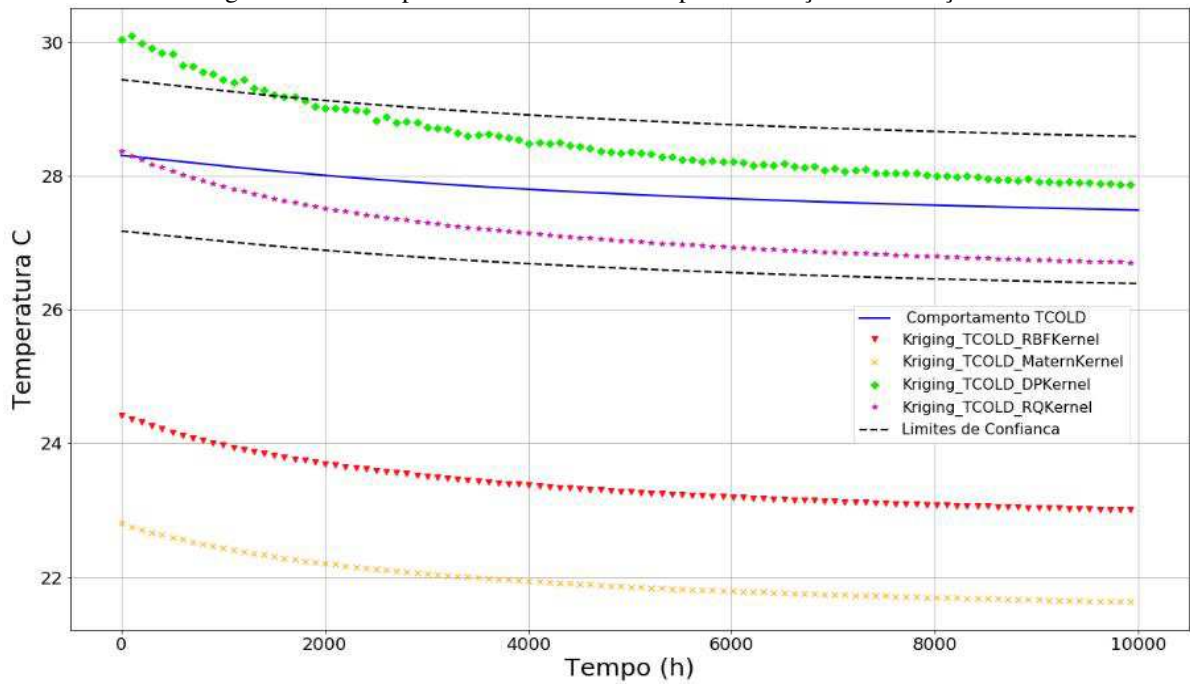


Figura 10-19-Comportamento do fluido quente para simulação de validação 10

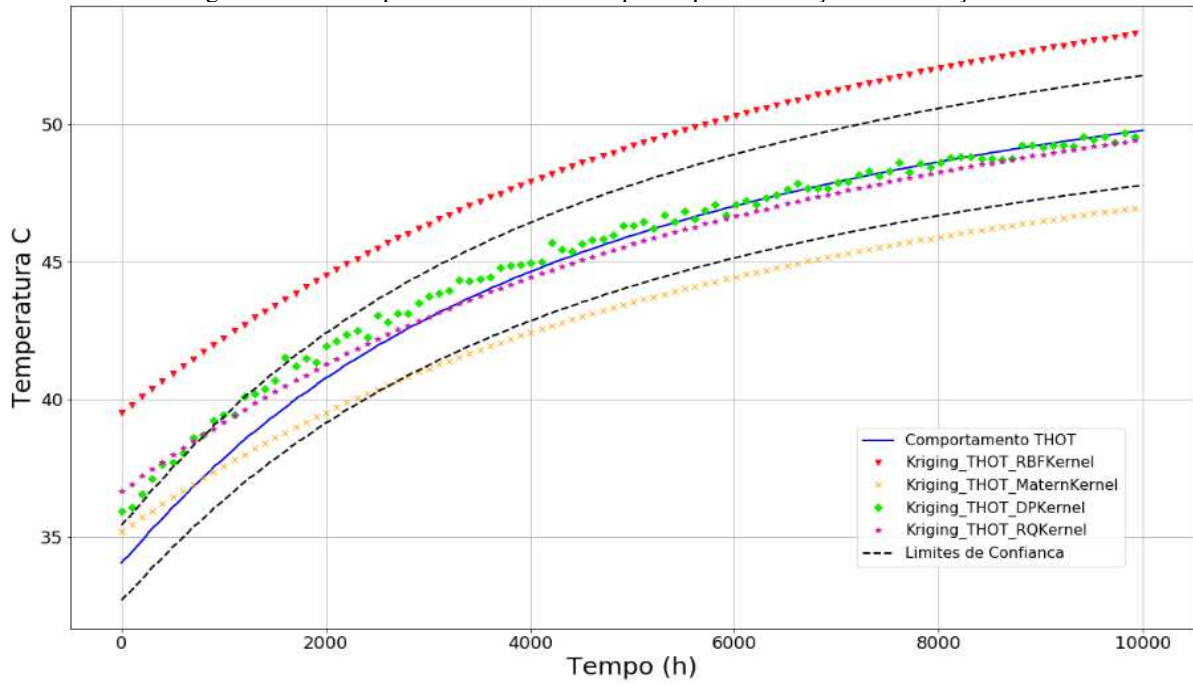
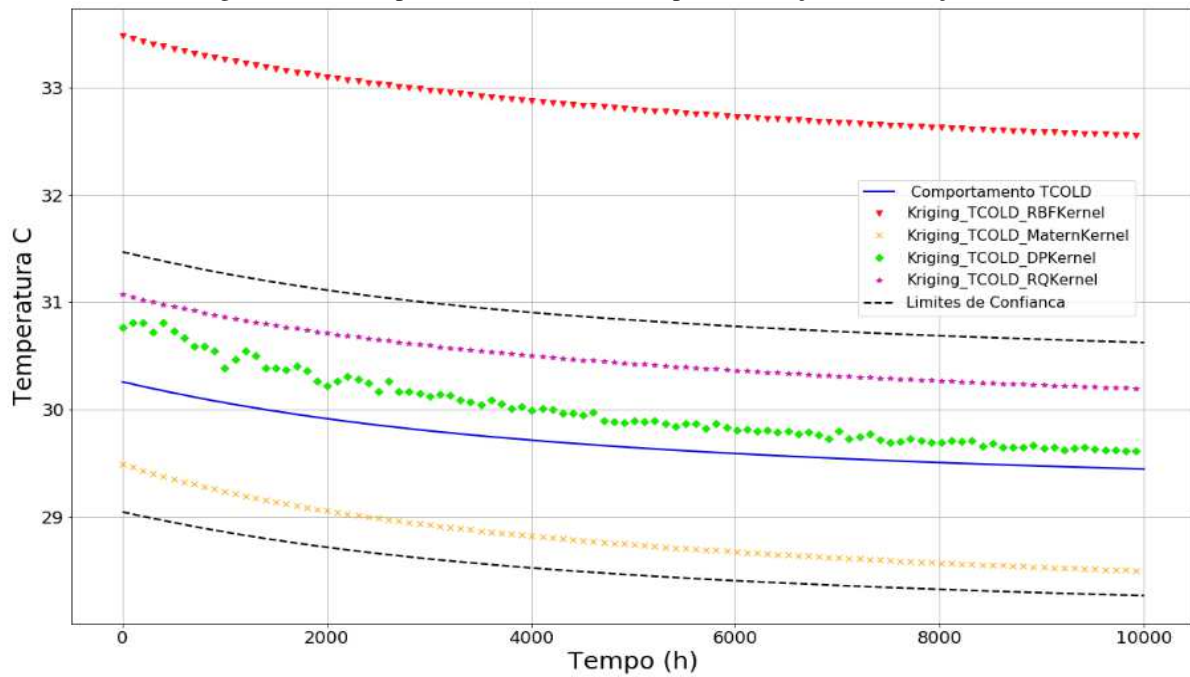


Figura 10-20-Comportamento do fluido frio para simulação de validação 10



10.2 Apêndice – B: Artigo Concluído

DYNAMIC KRIGING METAMODELING APPLIED IN HEAT EXCHANGERS

1.INTRODUCTION

The development and application of machine learning techniques have become increasingly widespread. It is due to its ability to solve complex problems in the most diverse areas such as engineering, and financial markets. The modeling of processes using this type of approach has been quite scattered due to the possibility of determining variables of difficult measurement from the use of soft sensors [1]. In addition to enabling the creation of reduced models based on operational data of a real process, or even, data originated of rigorous models generated through conventional modeling, also called surrogate models.

Machine learning models are been developed based on artificial neural networks [2], decision tree [3], support vector machine [4] and Kriging [5]. In this context, the Gaussian Process Regressor (Kriging) presents as one of the most important models due its ability to handle non-linear responses. It is also capable to provide information about the statistical error that can be modeled from a Gaussian-distributed random process, allowing the estimation of the response of an unobserved point using the closest experienced points [6].

Several contributions using the Gaussian Process Regressor have been found in the literature, seeking not only the application of the Kriging model for parameter estimation or generation of models, but also proposing structural modifications in the method seeking to optimize it. In this scenario, recently, Richardson [5] used a GPR to predict battery life. The behaviors of 3 cell types were evaluated and it was observed that the increase in the number of cycles inserted in the training, significantly improves the estimation of the non-linear alterations in the behavior of the aging of the battery.

Lataire et al [7] proposed an innovative approach in Gaussian Process use, applying it as a transfer function (TF) estimator from a frequency domain approach that leads to a valid formulation for continuous and discrete systems. In accordance to the authors, the estimation of the TF using the Gaussian process (GPTF) presented an equivalence when compared to the finite impulse response estimator (RFIR) in the time domain under adequate conditions. However the GPTF presents some advantage since the estimates for this estimator can be restricted to a limited frequency band.

A new non-parametric approach using the combination of a fixed effect and a regression of gaussian process of random effect (ME-GP) was used by Luo et al [8]. The authors used the

model to predict the length of the melt flow for filling different molds in injection molding processes, obtaining a superior performance of ME-GP in relation to the pure GP, for a degree of significance of 95%.

Usually, the use of such techniques is related to the determination of stationary or instantaneous conditions of process variables. However, the application of such a methodology being able to estimate the transient behavior of variables, mainly in the industrial scope, can aid in decision making for predictive maintenance and failures. In this sense, seeking to contribute with the existing literature, the proposal of this work is the application of the Universal Kriging technique (UKG) to determine the transient behavior of variables. The methodology was applied to a countercurrent heat exchanger, in a comparative study between different functions of correlation of the Kriging model seeking to determine which function provides the best prediction.

2. CASE OF STUDY

As a case study, a countercurrent heat exchanger (Figure 1) has been simulated using the benzene component (C_6H_6) in the hot fluid stream and water (H_2O) in the cold, both streams in liquid phase. The simulation has been modelled on the AspenTech Package (Aspen Plus Dynamics) and the parameters used are presented in Table 1.

Table 1-Heat exchanger parameters

Specifications		Drop pressure	
Model Fidelity	Shortcut	Side	Cold Side
Shortcut flow Direction	Countercurrent	Cold side pressure options	Outlet pressure (-0,1 bar)
Calculation mode	<i>Design</i>		
Exchanger specification	Hot stream outlet temperature (50°C)		
Thermodynamic Model	NRTL		

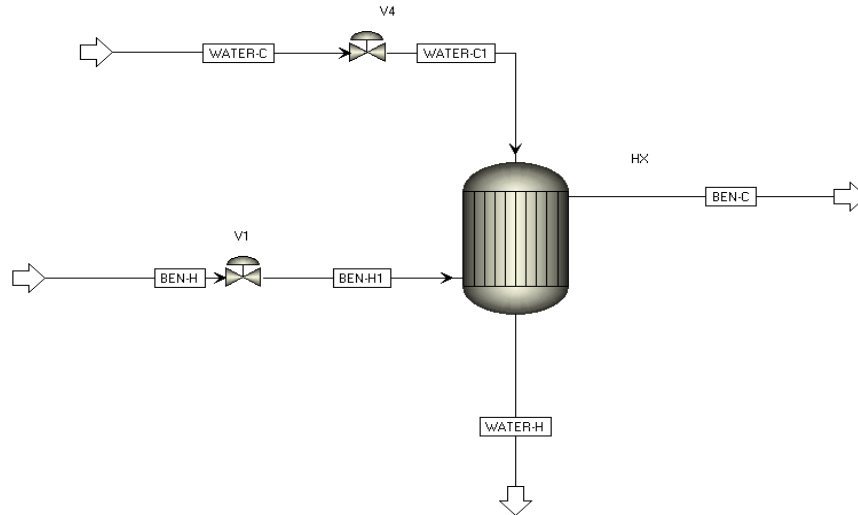


Figure 1- Simulated countercurrent heat exchanger in Aspen Plus software

An incrustation process was simulated from the inclusion of Eq. 1 in the model, where U is the global coefficient of thermal exchange, U_D is the global coefficient of thermal exchange after the occurrence of the incrustation, and R_D is the thermal resistance due to fouling. There are several ways to model thermal resistance [9], in this work was used a model in which the resistance varies linearly as shown in Eq. 2.

The constant C has been determined considering a year of operation in the heat exchanger (8000h), this was the time considered how required to reduced U to be 20% of the initial value (0.85). Eq. 3 presents the formulation obtained, which has been incorporated to be used to describe how U_D decreases with time.

$$\frac{1}{U_D(t)} = \frac{1}{U} + R_D(t) \quad (1)$$

$$R_D(t) = Ct \quad (2)$$

$$U_D(t) = \left(\frac{1}{0,85} + 5,8823 \cdot 10^{-4}t \right)^{-1} \quad (3)$$

3. KRIGING MODEL

The Kriging method was first suggested in the 1950s by mining engineer Daniel G. Krige [10] and developed later by mathematician Georges Matheron [11]. The Kriging model is based on the representation of a process as being the sum of a fixed base function and a deviation function, as can be observed in Eq. 4.

$$y(x) = h(x)^T \beta_k + z(x) \quad (4)$$

Where,

$$h(x)^T = [h_1(x) \dots h_k(x)] \quad (5)$$

$$\beta_k = \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_k \end{bmatrix} \quad (6)$$

The first term of Eq. 5 emulates a mean trend of the true response and can be seen as a regression model that presents itself as a linear combination of k chosen functions. In the Universal Kriging model (UKG), applied in this work, the fixed base functions are commonly modeled as low-order polynomials. β_k represent the regression parameters for the polynomial function and is determined by the Generalized Least Square (GLS) method [12].

Eq. 7 is obtained from the previously described formulation applied a set of sampling points $x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ with $x \in \mathbb{R}^q$ where q is the number of process *input* variables [13].

$$Y(x) = H\beta + Z(x) \quad (7)$$

where,

$$Y(x) = [y(x_1), y(x_2), \dots, y(x_n)]^T \quad (8)$$

$$H = \begin{bmatrix} h_1(x_1) & h_2(x_1) & \dots & h_k(x_1) \\ h_1(x_2) & h_2(x_2) & \dots & h_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(x_n) & h_2(x_n) & \dots & h_k(x_n) \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$\beta = [\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_k]^T \quad (10)$$

The vector $Y(x)$ contains all the response values concerning each sampling point x_i ; $i = 1, 2, 3 \dots n$. The deviation functions represented by Eq. 11 are usually modeled as a Gaussian random process with mean zero and variance σ^2 . In the covariance, or spatial correlation model, the term ($K[k(x_i, x_j | \theta)]$) present in Eq. 12, and explained by Eq. 13, controls the smoothness of the Kriging result from the manipulation of free parameters, or hyperparameters θ , associated with the model. In addition, it is able to adjust the influence of near points and the surface differentiability, quantifying the correlation between two observations x_i e x_j ; $i \neq j$ [11].

$$Z(x) = [z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)]^T \quad (11)$$

$$\begin{aligned} Cov(z(x_i), z(x_j)) &= \mathbb{E}[(z(x_i) - m(x_i))(z(x_j) - m(x_j))] \\ &= \sigma^2 K[k(x_i, x_j | \theta)] \end{aligned} \quad (12)$$

$$K[k(x_i, x_j | \theta)] = \begin{bmatrix} k(x_1, x_1 | \theta) & k(x_1, x_2 | \theta) & \dots & k(x_1, x_n | \theta) \\ k(x_2, x_1 | \theta) & k(x_2, x_2 | \theta) & \dots & k(x_2, x_n | \theta) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ k(x_n, x_1 | \theta) & k(x_n, x_2 | \theta) & \dots & k(x_n, x_n | \theta) \end{bmatrix} \quad (13)$$

In this work three stationary correlation models were used, that is, functions of the distance $x_i - x_j$ and a non-stationary model (Dot Product), presented in Table 2. The Eq. 14

describes the general formulation for the Matern Kernel [6], and using $\nu = \frac{3}{2}$ is obtained the Eq. 15 used in this work.

Table 2-Correlation Models

Correlation Models	Equations
Matérn Kernel (General Formulation)	$k(x, x^* \theta) = \frac{1}{\Gamma(\nu) 2^{\nu-1}} \left(\frac{\sqrt{2\nu} D}{\sigma_l} \right)^\nu K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu} D}{\sigma_l} \right) \quad (14)$
Matérn Kernel ($\nu = \frac{3}{2}$)	$k(x, x^* \theta) = \left(1 + \frac{\sqrt{3} D}{\sigma_l} \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{3} D}{\sigma_l} \right) \quad (15)$
Radial Basis Function (RBF),	$k(x, x^* \theta) = \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{(x - x^*)^T (x - x^*)}{\sigma_l^2} \right) \quad (16)$
Rational Quadratic (RQ)	$k(x, x^* \theta) = \left(1 + \frac{D^2}{2\alpha\sigma_l^2} \right)^{-\alpha} \quad (17)$
Dot Product (DP)	$k(x, x^* \theta) = \sigma_0^2 + x * x^* \quad (18)$

4 DESIGN OF EXPERIMENTS

The formulation of metamodels is based on the use of data that can be obtained experimentally, computationally or through plant data through data acquisition systems. The generation of the sampling points is a crucial step in the creation of the metamodel since this step interferes directly in the quality and robustness of the same. In this paper the sampling of the variables of entry of the model was realized applying the technique of Hypercubo Latino. The Latin hypercube technique was developed by McKay [14] as an n-dimensional extension of the Latin square sampling developed by Raj [15].

The construction of the hypercube can be made in a similar way to the Latin square, dividing the sample space into hypercubes of equal sizes [16]. For a hypercube with dimension $n = 3$ for example, leaving a three-dimensional space for one-to-two-dimensional in any direction of the hypercube. A Latin square is visualized, with points equally distributed with probability of occurrence $1 / N$, as shown in Figure 2.

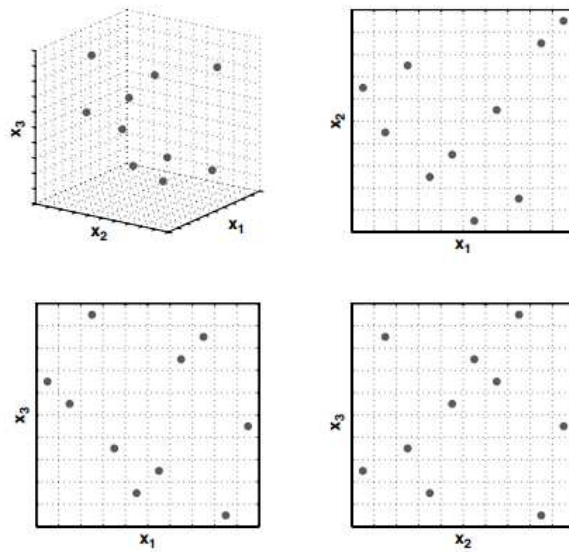


Figure 2-Latin three-dimensional hypercube with sampling points

5. METHODOLOGY

5.1. SELECTION INPUTS AND SAMPLING OF DATA.

The selection of *input* variables is an important step in the construction of the model, since the choice of variables with a low degree of attention may be different. In this way, one of the *input* and *output* variables of the model was made based on the highest standards in reducing the heat rate. The generation of case studies through the LHS was given initially by choosing the lower and upper limits of each model *input*. The set of training points was generated from the construction of an LHS using the upper and lower limits of each variable. To obtain the validation data, another LHS of the same dimension was generated with 10% of the number of training data.

5.2 COMMUNICATION STRUCTURE

The process of acquiring and storing of data was done automatically by creating a communication structure between Python™, Aspen™, Excel® (VBA) and Matrikon® (OPC Server). The communication was developed to enable the collection of data throughout the all simulation time. The procedure performed by the created structure is described through the flowchart in Figure 3.

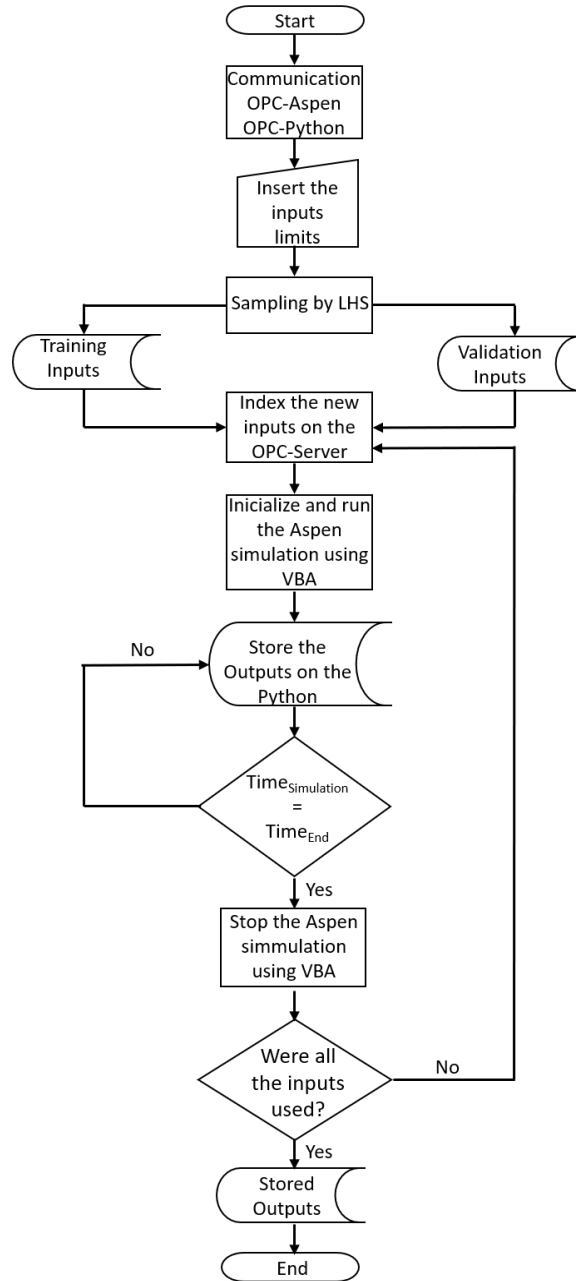


Figure 3 - Flowchart for obtaining and storing simulation *outputs*

5.3 CONSTRUCTION OF DYNAMIC KRIGING METAMODEL

Once collected, the transient behavior for each *output* of each LHS case is stored in two matrices, one for each *output*. The matrix can be represented by Eq. 19:

$$OUTPUT = \begin{pmatrix} C_{1T1} & C_{1T2} & C_{1T3} & \cdots & C_{1TF} \\ C_{2T1} & C_{2T2} & C_{2T3} & \cdots & C_{2TF} \\ C_{3T1} & C_{3T2} & C_{3T3} & \cdots & C_{3TF} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ C_{nT1} & C_{nT2} & C_{nT3} & \cdots & C_{nTF} \end{pmatrix} \quad (19)$$

Each line represents the *output* obtained for each case generated by the LHS and each column represents a time instant of the simulation. In this way the C_{3T2} index describe the

behavior of an *output* variable generated from the third case of the LHS at the second instant of time of the simulation.

The elaboration of the dynamic metamodel consists essentially in the creation of a Kriging model for each time instant of each evaluated *output*. For this, was used as *input* all the cases generated by the LHS and how *output* the information regarding the temperature of all case at a specific time instant. Figure 4 shows how the construction of each Kriging was made.

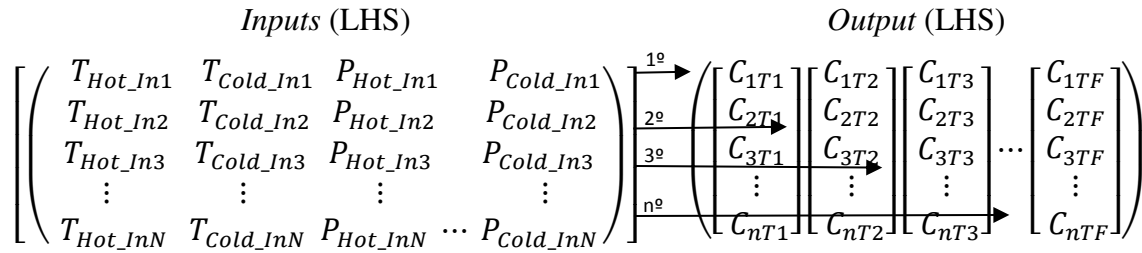


Figure 4 - Structuring dynamic Kriging

The methodology described has been performed by testing the four correlation models previously described by Eqs. 15, 16, 17 and 18. Following the methodology described and considering that each simulation contains 500 instants of time, were obtained 4000 Kriging models.

Four 2x500 dimension matrices were created to store the Kriging models. Each created matrix refers to a covariance model evaluated, each line to an *output* and each column to an instant of time. Taking as an example, the RBF_Model matrix created to store the generated Kriging models using the RB correlation, it can be visualized according to the matrix described by Eq. 20.

$$Modelo_{RBF} = \begin{pmatrix} Tout_{Hot_{T1}} & Tout_{Hot_{T2}} & Tout_{Hot_{T3}} & \cdots & Tout_{Hot_{T1}} \\ Tout_{Cold_{T1}} & Tout_{Cold_{T2}} & Tout_{Cold_{T3}} & \cdots & Tout_{Cold_{T1}} \end{pmatrix} \quad (20)$$

5.4. VALIDATION OF THE MODEL

After obtaining the four matrices, the models were validated using the second set of data created from the LHS. This procedure is done in such a way that, the same validation *input* goes through all the rows and columns of all four generated arrays. Thus, the dynamic behavior for the hot and cold fluid outlet temperatures evaluated for the four types of correlation model is obtained as a response. The best model is chosen from the analysis of the transient behavior of the constructed prediction models, together with the evaluation of the applied accuracy metrics described in Table 3.

Table 3 - Model accuracy tests performed

Tests	Equations
Mean square error (<i>MSE</i>)	$MSE(y, \hat{y}) = \frac{1}{n_{Samples}} \sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (22)$
Explained variance score (<i>EVS</i>)	$EVS(y, \hat{y}) = 1 - \frac{Var\{y - \hat{y}\}}{Var\{y\}} \quad (23)$
Coefficient of determination (R^2)	$R^2(y, \hat{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} (y_i - \bar{y})^2}; \quad (24)$ <p style="text-align: center;">where $\bar{y} = \frac{1}{n_{Samples}} \sum_{i=0}^{n_{Samples}-1} y_i$</p>

6. RESULTS

Table 3 presents the *inputs* and *outputs* chosen for the dynamic Kriging model development. The *inputs* have been selected in such a way that it is possible to evaluate the reduction of the thermal exchange area in the heat exchanger.

Table 4- *Outputs* chosen for construction of the Kriging model

<i>Inputs</i>	<i>Outputs</i>
T _{HOT_IN}	T _{HOT_OUT}
T _{COLD_IN}	T _{COLD_OUT}
P _{HOT_IN}	
P _{COLD_IN}	

The Table 4 presents the nominal conditions and limits used to the Latin hypercube technique. The values referring to the hyperparameters of the models can be optimized through the BFGS method, seeking to improve the response of the model, however the standard values of each hyperparameter presented in Table 5 were used.

In this paper, 100 training points were generated by an LHS of dimension $n = 4$ with limits described in Table 4. A second sampling using a Latin hypercube of the same dimension was performed to obtain the 10 points (10%) of validation.

Table 5- Lower and upper limit of each *input* variable

<i>Inputs</i>	Nominal	Lower limit	Upper limit
T _{HOT_IN} (°C)	60	50	70
T _{COLD_IN} (°C)	27,5	25	30
P _{HOT_IN} (bar)	2,5	2	3
P _{COLD_IN} (bar)	2,5	2	3

Table 6- Values of the hyperparameters used

	σ_l	α	σ_0
Radial Basis			
Function	1	-	-
Matern	1	-	-
Rational Quadratic	1	1	-
Dot Product	-	-	1

Figure 5a and 5b show the behavior of hot fluid and cold fluid temperatures obtained by applying one of the validation *inputs* in equation 20 using the procedure described (topic 5.4). 10.000 hours of operation were simulated to capture all the transient behavior of the process, as well as the time at which U is reduced to 20% of the initial value (8000 hours).

Due to the insertion of Eq. 3, it is observed that over time there is a decrease in the thermal exchange between the fluids. This behavior is evidenced by the increase of the hot fluid temperature and reduction of the cold fluid temperature. Limits assigned to the relative error of $\pm 4\%$ were inserted in relation to the expected behavior. Analyzing the Figure 5.a related to the estimation of hot fluid temperature behavior, it is observed that the models constructed from the RBF, Matern and RQ correlations differ from the behavior expected during the simulation. Using the correlation of DP, a model was obtained that shows the behavior within the limit established for most of the evaluated time. Similarly, only the DP correlation provided an estimate within $\pm 4\%$ for the cold fluid temperature (Figure 5.b).

A better estimate of the models generated through the dot product correlation may be related to the fact that it is not stationary, that is, it does not take into account the distance between the points but the product thereof.

In addition, as explained in topic 3, correlation functions determine, among other points, the smoothness of the model response by manipulating the hyperparameters (θ). Even using

standard values described in Table 5, it is observed that the responses to the stationary kernels were smooth, while the behavior of the DP non-stationary kernel presented a certain degree of noise.

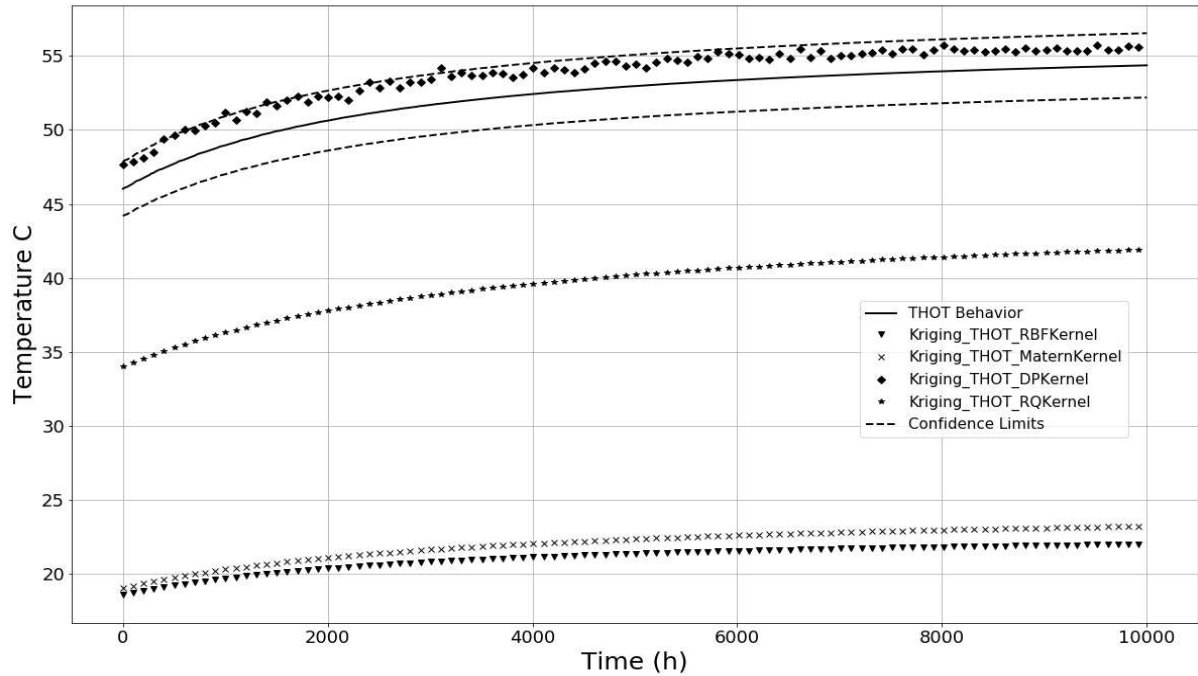


Figure 5.a – Kriging models performance for hot fluid temperature

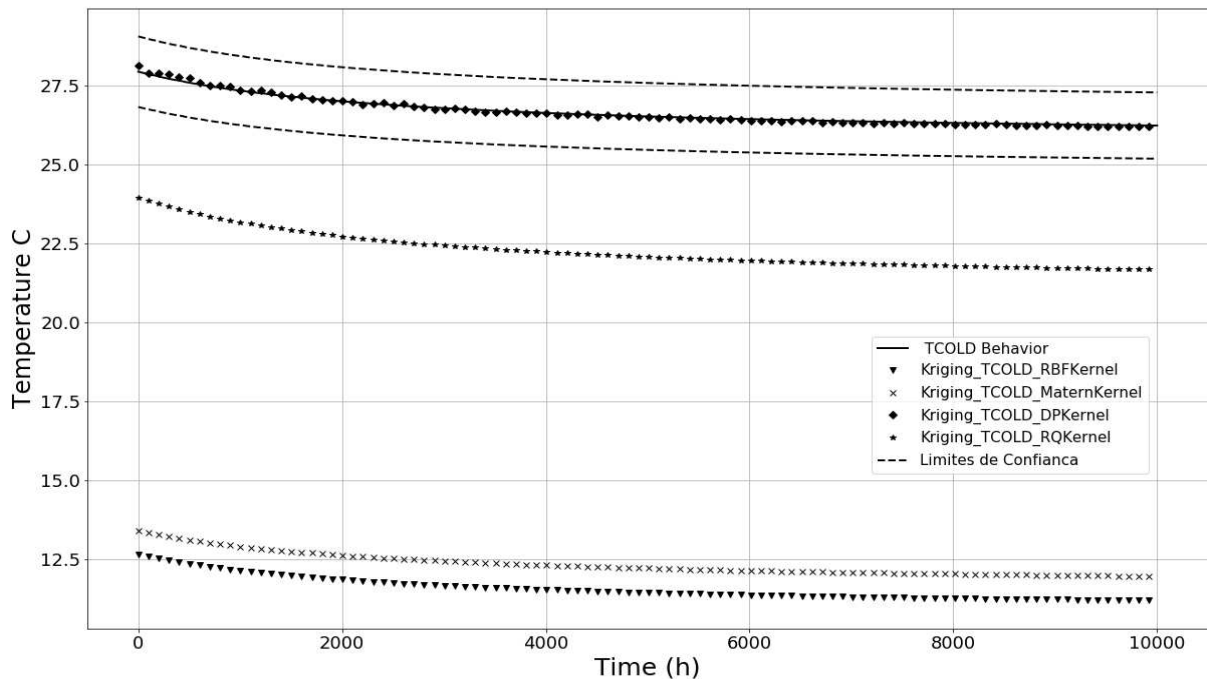


Figure 5.b – Kriging models performance for cold fluid temperature

Figures 6 to 8 present the behavior of the mean square error (MSE), coefficient of determination (R^2) and explained variance score (EVS) tests applied to the models created through the evaluated correlations. Once a Kriging model has been constructed for each instant of time, the tests are performed at each point of the simulation. In this way, a dynamic response was obtained from each test, which allows to evaluate the accuracy of the prediction over time.

Figure 6, a and b, shows the dynamic behavior of the *MSE* for the hot and cold fluid outlet temperature. The test indicates high values for the *RBF*, *RQ* e *Matern* (above 50) correlations and values below 3 for the *DP* correlation with respect to the hot fluid. For the cold fluid the *DP* correlation was the only one that provided low values of *MSE* (below 1), indicating, by means of the evaluation of Eq. 22, that values predicted values are close to the real values in both the evaluated fluids, as can be seen in Figures 5a and 5b.

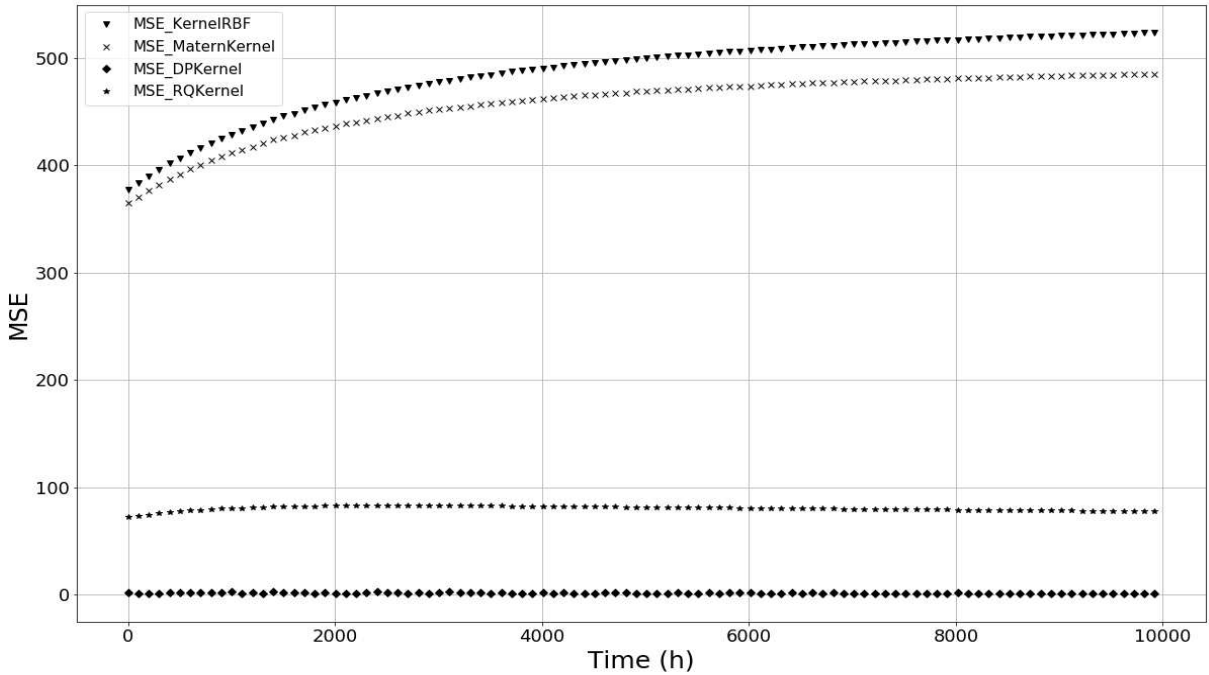


Figure 6.a - Medium Square Error for hot fluid temperature

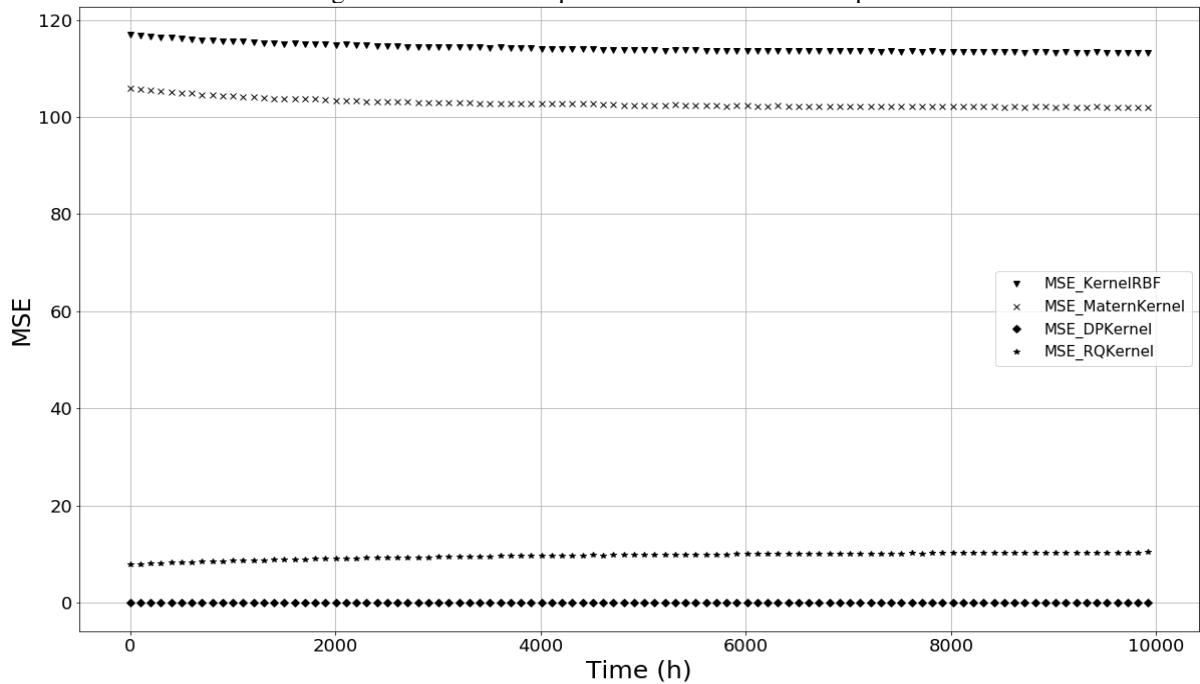


Figure 6.b - Medium Square Error for cold fluid temperature

Dynamic R^2 provides an indication of how well future samples will be predicted by the model. The value of R^2 ranges from 0 to 1, in this way, values close to 1 indicate a higher robustness in the model. Evaluating Figures 7a and 7b together with Eq. 24, it is observed that for the hot fluid, the value of R^2 for the kernels *Matern* e *RBF* are below 0.35 during all simulation, indicating that the predicted values of the model increase the second term of Eq. 24, distancing R^2 from 1 in both models.

The model built with *RQ* kernel presents R^2 with values above 0.85 approaching 0.9 after 8000h, however, only the *DP* kernel provides R^2 values above 0.999 throughout the all simulation time. The behavior described for the *RQ* kernel can be observed in the slight decrease of the *MSE* after the 8000h simulation. Regarding the cold fluid, the values of R^2 corroborate with the statements described for the *MSE*, indicating that only the *DP* provides satisfactory values, with R^2 above 0.999 at all points predicted over the 10000h simulation.

The *EVS* test described by Eq. 23 indicates how well the model can explain variations in the data and has the same evaluation metric of R^2 with more robust models for values closer to 1. The dynamic behavior for hot and cold fluid presented in the figures 8.a and 8.b respectively follow the same behavior as Figures 7a and 7b, where the *DP* kernel is highlighted in both evaluated fluids.

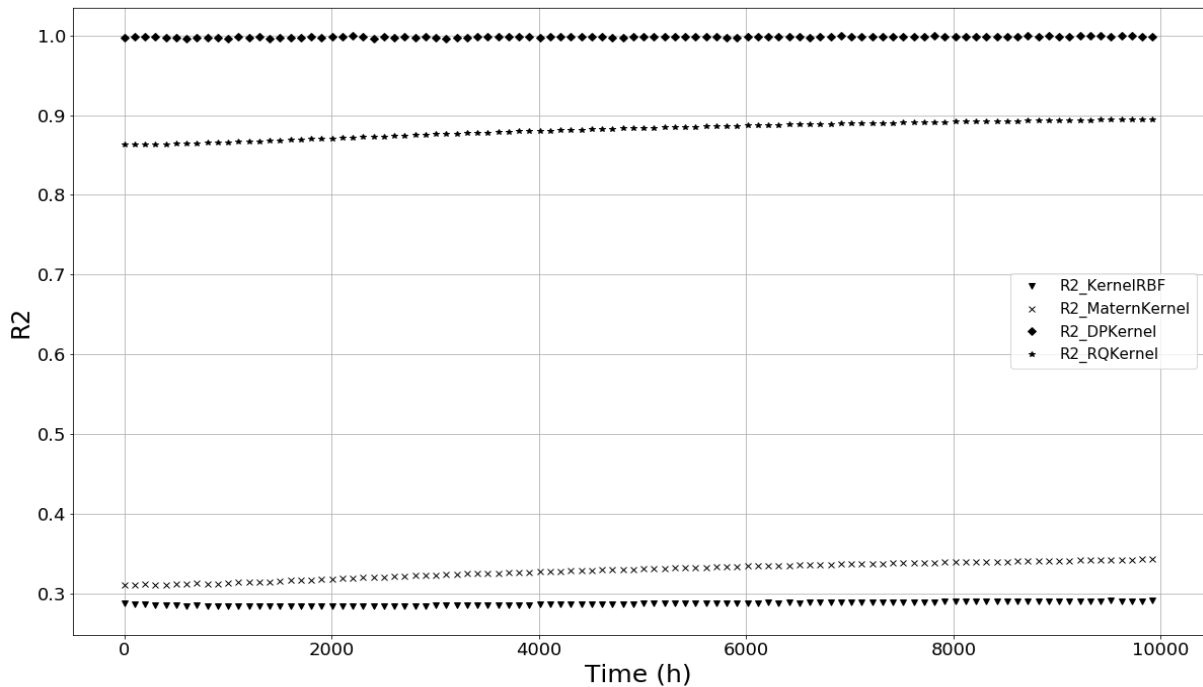


Figure 7.a - Correlation Coefficient for hot fluid temperature

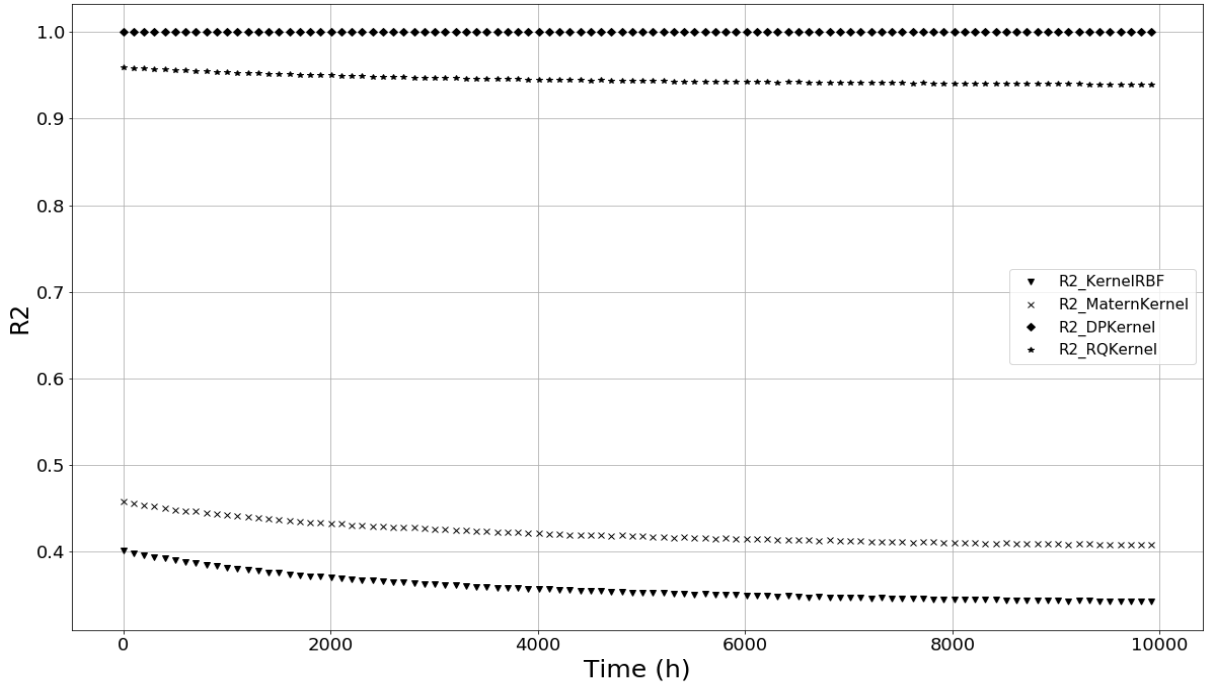


Figure 7b- Correlation Coefficient for cold fluid temperature

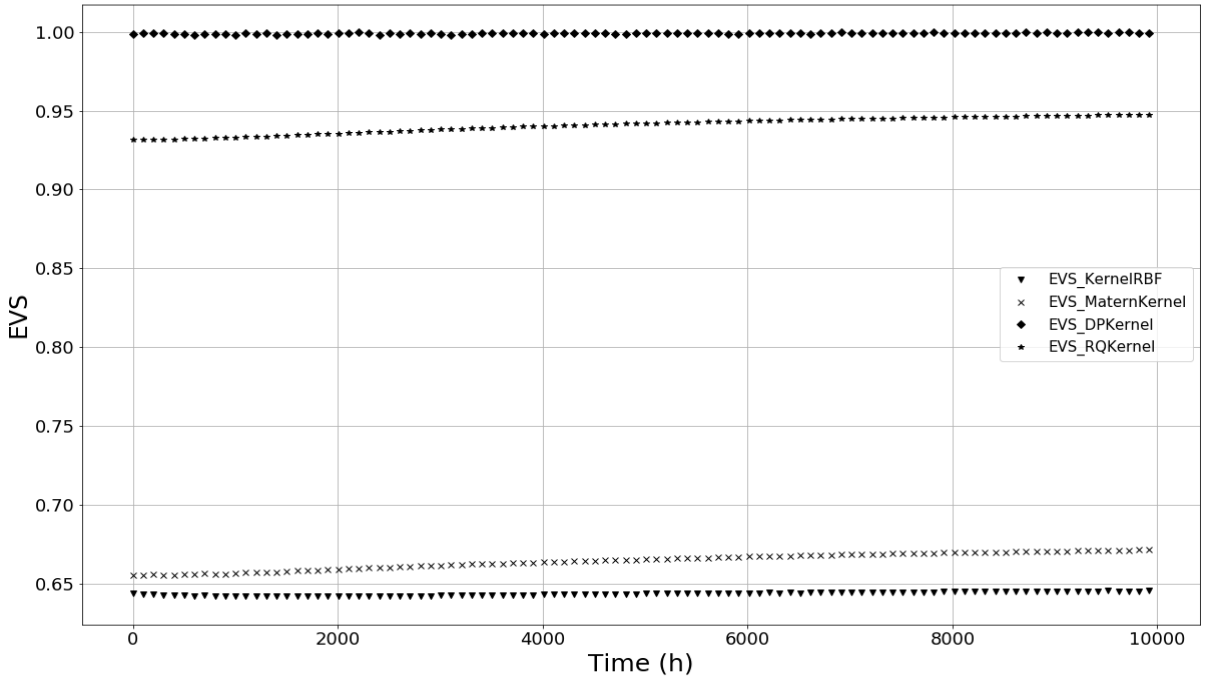


Figure 8.a - Variance Explained for hot fluid temperature

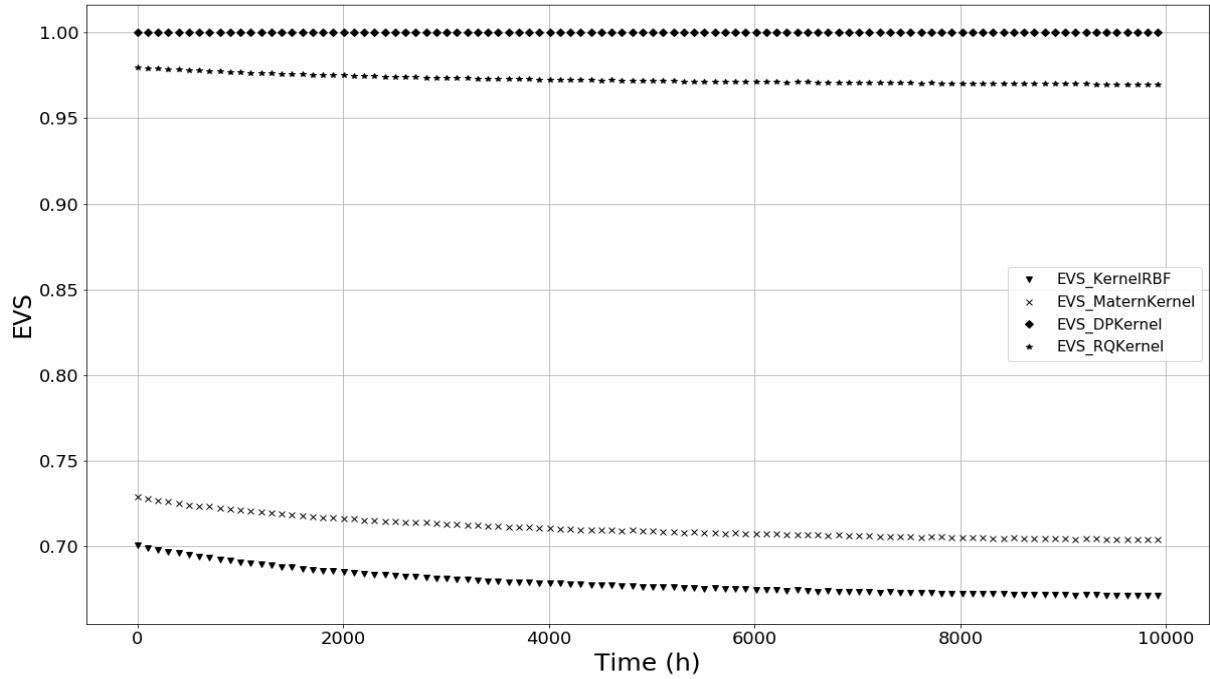


Figure 8.b - Variance Explained for cold fluid temperature

Tables 7 and 8 present the mean values of MSE , R^2 and EVS for the 500 instants of time evaluated for each simulation correlation model. Through the analysis of the tables, it is observed that the DP correlation presented higher results than the other correlations in five of the ten validation simulations referring to the hot fluid and in seven referring to the cold fluid. These results corroborate with the evaluation of the previously described results for the validation simulation used.

Table 8- Average values for *MSE*, *R*² and *EVS* tests for cold fluid temperature

Cold fluid temperature												
Validação	MSE				R ²				EVS			
	RBF	MATERN	RQ	DP	RBF	MATERN	RQ	DP	RBF	MATERN	RQ	DP
01	146,70	124,59	18,71	0,00	0,14	0,27	0,89	0,99	0,57	0,63	0,94	0,99
02	6,03	22,43	2,11	0,01	0,96	0,86	0,98	0,99	0,98	0,93	0,99	0,99
03	8,99	22,15	1,97	0,06	0,96	0,90	0,99	0,99	0,98	0,95	0,99	0,99
04	1,30	0,09	0,05	0,06	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99
05	114,17	102,83	9,69	0,00	0,35	0,42	0,94	0,99	0,67	0,71	0,97	0,99
06	12,69	0,09	2,43	0,08	0,93	0,99	0,98	0,99	0,96	0,99	0,99	0,99
07	6,04	9,09	0,41	0,10	0,96	0,95	0,99	0,99	0,98	0,97	0,99	0,99
08	0,58	6,04	0,04	0,09	0,99	0,97	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,99
09	9,63	16,97	0,20	0,34	0,95	0,91	0,99	0,99	0,97	0,95	0,99	0,99
10	4,96	0,39	0,30	0,04	0,97	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,99	0,99

7. CONCLUSIONS

In this paper, the UKG application was suggested to predict the transient behavior of process variables by evaluating stationary and non-stationary correlation models. The proposed methodology was validated from the simulation of a countercurrent heat exchanger. We used 100 training data and 10 validation data generated by the Latin hypercube sampling (*LHS*) technique.

The dynamic behaviors of the *outputs* described in Table 4- were evaluated in relation to the response obtained for the functions of radial basis function (RBF), rational quadratic (RQ), Matern and dot product described in Table 2. By evaluating of the hot and cold fluid temperature profile obtained from each correlation model together with the metrics evaluated described in Table 3, it is observed that the use of the dot product correlation function culminated in obtaining a Kriging model that presented a better prediction of the true response in comparison to the stationary kernels. This behavior may be related to the fact that the dot product correlation is not correlated with the euclidean distance between the points and with the multiplication thereof.

The methodology presented is a new approach that expands the scenarios of practical application, since it allows the prediction of the transient behavior, allowing the evaluation of the efficiency of the equipment and the planning of predictive maintenance and scheduled shutdowns for different operating conditions.

8. REFERENCES

1. PANI A. K.; VADLAMUDI V.; BHARGAVI R J, MOHANTA H. K; Neural Network Soft Sensor Application in Cement Industry: Prediction of Clinker Quality Parameters; International Conference on Process Automation; Control and Computing; p. 1-6; 2011.
2. RUTAGEMWA H.; GHASEMI A.; LIUZ S.; Dynamic Spectrum Assignment for Land Mobile Radio with Deep Recurrent Neural Networks; IEEE International Conference on Communications Workshops; p. 1-6; 2018;
3. SWETAPADMA A.; YADAV A.; A Novel Decision Tree Regression-Based Fault Distance Estimation Scheme for Transmission Lines; IEEE Transactions on Power Delivery v. 32, n. 1, p. 234-245; 2017.
4. LAL, A.; DATTA, B.; Development and Implementation of Support Vector Machine Regression Surrogate Models for Predicting Groundwater Pumping-Induced Saltwater Intrusion into Coastal Aquifers; Water Resources Management; v. 32; n. 7; p. 2405–2419; 2018.

5. RICHARDSON, R.R; OSBORNE, M.A; HOWEY, D.A; Gaussian process regression for forecasting battery state of health; *Journal of Power Sources*; v. 357; p. 209-219; 2017.
6. RASMUSSEN, C.E., WILLIAMS, C.K.I, *Gaussian Process for Machine Learning*, the MIT Press, 2006. ISBN 02621853x. © 2006; Massachusetts Institute Technology.
7. LATAIRE, J; CHEN, T.; Transfer function and transient estimation by Gaussian process regression in the frequency domain; *Automatica*, v. 72; p. 217-229; 2016.
8. LUO, L.; YAO, Y.; GAO, F.; ZHA, C.; Mixed-effects Gaussian process modeling approach with application in injection molding processes; *Journal of Process Control*; v. 62; p. 37-43 2018.
9. SANAYE, S.; NIROOMAND, B.; Simulation of Heat Exchanger Network (HEN) and Planning the Optimum Cleaning Schedule; *Energy Conversion and Management*; v. 48; p. 1450-1461, 2007.
10. KRIGE, D. G.; A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand, *J. Chem. Metall. Min. Soc. S. Afr.*; v. 52, n.6; p. 119–139, 1951.
11. MATHERON, G., Le krigeage universel, in: *Les Cahiers du Centre de morphologie mathématique de Fontainebleau, Fascicule 1*, École nationale supérieure des mines de Paris; v.1; p. 83; France, 1969.
12. MARTIN, J.D., SIMPSON, T.W., A study on the use of Kriging models to approximate deterministic computer models, in: *ASME 2003 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*; v. 2; p. 567–576, Chicago, Illinois, USA, 2–6 September, 2003.
13. LEE, H; LEE, D. J., KWON, H.; Development of an optimized trend Kriging model using regression analysis and selection process for optimal subset of basis functions; *Aerospace Science and Technology*, v. 77; p. 273-285; 2018.
14. MCKAY, M. D.; BECKMAN; R. J.; CONOVER, W. J; A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. *Technometrics*, v.1, n. 2, p. 239-245, 1979.
15. RAJ, D. *Sampling Theory*. New York: McGraw-Hill. Regression for Approximation of Complex Engineering Analyses, *Journal of Mechanical Design*, v. 127, n. 6, p. 1077-1087, 1968.
16. FORRESTER, A.; KEANE, A.; SOBESTER, A.; *Engineering design via surrogate modelling*. Chichester: Wiley, 1 ed; 2008.