**Autoencoder baseado em LSTM para prognóstico de anomalias numa planta de absorção de CO2: Um estudo de caso prático**

Luis Felipe Guarda, Carlos Henrique Bittencourt Morais, Prof. Dr. Marcelo Ramos Martins

LabRisco - Laboratório de Análise, Avaliação e Gerenciamento de Risco

Escola Politécnica da Universidade de São Paulo – Departamento de Engenharia Naval e Oceânica

Prof. Dr. Enrique Lopez Droguett

Universidade do Chile – Departamento de Engenharia Mecânica

# ABSTRACT

Em face das mudanças climáticas e da necessidade de implantação de processos industriais menos agressivos ao meio ambiente, o tema captura e armazenamento de CO2, ou CCS, do inglês *Carbon Capture andStorage*, vem ganhando crescente importância. Absorção, desabsorção, separação por membranas e processos criogênicos compõem o rol de técnicas mais empregadas para captura de gases industriais. Particularmente na indústria de Óleo e Gás, a remoção de CO2ou absorção através de aminas tem papel de destaque em gases provenientes de queima (combustão) por ser uma solução eficiente para o tratamento de correntes gasosas diluídas e por tratar-se de uma tecnologia de atrativa relação custo/benefício. Não obstante à sua popularidade, o processo de remoção de CO2 por aminas apresenta diversos desafios técnicos, dentre os quais destaca-se o equilíbrio entre temperatura, pressão e concentração de amina de sorte a obter-se a máxima eficiência de absorção no processo. O presente trabalho apresenta uma metodologia de um autoencoder para detecção de anomalias baseado em Redes Neurais Recorrentes do tipo LSTM (*Long Short-TermMemory*), capaz de realizar a previsão doestado (anômalo ou normal) de CO2 numa planta de amina, alcançando uma precisão acima do 90% na previsão de estados anômalos futuros, empregando dados reais fornecidos por uma grande operadora do mercado nacional. Além de conseguir fazer uma previsão do estado futuro da planta, a metodologia proposta consegue dar solução à questão dos bancos de dados desequilibrados, que se apresenta como uma constante limitante na aplicação das novas técnicas de Deep Learning nas áreas de confiabilidade e manutenção, apresentando-se como uma alternativa para a aplicação destas visando ao diagnóstico e prognóstico dos estados de uma planta industrial em que a disponibilidade de dados pode ser limitada.

# INTRODUÇÃO

O estudo dos processos de captura de CO2 vem atraindo o interesse de pesquisadores no mundo todo, em função de relevante contribuição deste ao efeito estufa [1], havendo um crescente consenso sobre a urgente necessidade de desenvolvimento de métodos de controle de emissão de CO2, particularmente em plantas industriais e grande porte [2]. Devido à sua eficiência, soluções de amina são largamente empregadas na absorção de grandes volumes de CO2 resultantes dos processos industriais[2], [3].

Nesse contexto, o presente artigo apresenta um algoritmo baseado em técnicas de *Deep Learning* com vistas ao prognóstico dos níveis de absorção, definidos em termos da concentração residual de CO2 ao final do processo de tratamento de gases industriais, sendo capaz de prever duas condições de estado de concentração: normal ou anômalo. O artigo apresenta a Precisão, o *Recall* e a Especificidade do algoritmo para detectar estados anômalos utilizando diferentes tempos de previsão, variando entre 20 e 480 minutos. O estudo conta com dados reais fornecidos por uma importante empresa da indústria nacional do segmento de Óleo e Gás.

# DESCRIÇÃO

Um autoencoder é uma rede neuralde várias camadas[4], treinada por aprendizado não supervisionado, capaz de aprender a reproduzir uma certaentrada em sua camada de saída. A arquitetura de um autoencoder pode ser dividida em dois blocos: o codificador, onde os dados de entrada são compactados em uma camada oculta que descreve uma representação latente dos mesmos; e o decodificador, que irá reconstruir os dados de entrada usando a representação latente da camada oculta gerada anteriormente pelo codificador[5]. Dessa maneira, podemos representar o processo do autoencoder usando a Equação 1:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

|  |
| --- |
|  |

Onde **X** são os dados de entrada, **E** representa a fase de codificação que gera a representação de baixa dimensionalidade dos dados de entrada, **D** representa a fase do decodificador que reconstrói os dados de entrada da camada oculta e é os dados de entrada reconstruídos. Por meio do treinamento, o autoencoder aprende a minimizar a diferença entre e , e essa diferença é chamada de erro de reconstrução [6].Um erro maior de reconstrução será obtido se um ponto de dados anômalo for usado como entrada e, dessa maneira, um limite pode ser definido como o valor a partir do qual uma entrada é considerada normal ou anômala[7].

As Redes Neuras do tipo *LongShort TermMemory (LSTM)* são uma versão melhorada das *Redes Neurais Recorrentes (RNN)*[8], que ainda que constituam um algoritmo desenvolvido para trabalhar especialmente com sequências de dados, apresentam um problema de gradiente de fuga*(vanishinggradient)* [9],fazendo com que a rede não “lembre” os dados iniciais de uma sequência de dados. Por sua vez, a estrutura das redes LSTM evita este efeito[10]*.*

O conjunto de dados analisado contém 4.765 pontos de dados de 10 variáveis de *status* de uma planta de amina, a saber: temperatura, vazão, pressão e concentração de CO2 no produto entre outras. O conjunto de dados foi agrupado em quatro períodos, com*timesteps*de 20 minutos. Essa divisão é necessária para que sejam processados o treinamento e a validação do algoritmo. Ressalta-se que apenas 27,3% do conjunto de dados apresenta concentração de CO2 acima do limite para condição anômala de 2500 ppm, conforme mostrado naTabela 1.

Tabela 1 -Distribuição da base de dados por período de tempo.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Período** | **Numero de**  ***timesteps*** | ***Timesteps* com**  **CO2> 2500 ppm** | ***Timesteps* com**  **CO2< 2500 ppm** |
| 1 | 1471 | 1217 | 254 |
| 2 | 967 | 115 | 852 |
| 3 | 1191 | 0 | 1191 |
| 4 | 1136 | 0 | 1136 |

## Metodologia

Para o desenvolvimento do algoritmo, apenas cinco das dez variáveis foram utilizadas, tendo sido as outras cinco variáveis descartadas na fase exploratória dos dados. No presente estudo, empregou-se uma janela abrangendo três instantes de medição (instante anterior, atual e posterior), totalizando 60 minutos. Dessa forma, as cinco variáveis acima mencionadas se encontram organizadas em janelas de tempo de tamanho 3, totalizando15 pontos de dados. Essa janela é usada para prever o estado futuro. Para avaliar a evolução do desempenho do modelo ao longo do tempo, ele é treinado separadamente para prever o estado de CO2 da planta após 20 minutos a 480 minutos, em intervalos de 20 minutos (ou seja, 20, 40, 60, ... 480 minutos).A rede obtida após o *grid search* consiste em uma entrada de 5 variáveis, seguida por 4 camadas LSTM com 9, 7, 4 e 2 neurônios respetivamente. Essas camadas conformam o codificador da rede. Posteriormente tem lugar o decodificador da rede com 4 camadas com o mesmo número de neurônios que o codificador mas em ordem inverso, ou seja, 2, 4, 7 e 9 neurônios. A Figura 2 apresenta a arquitetura do autoencoder baseado em LSTM.

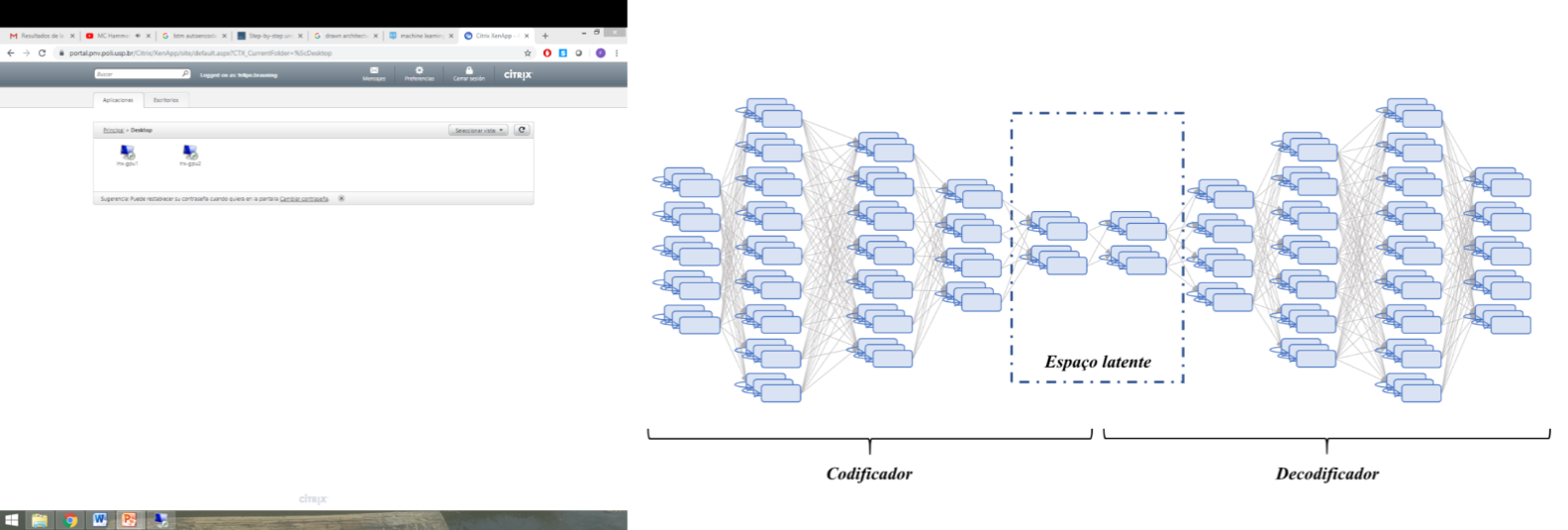
****

Figura 2 - Arquitetura do autoencoder proposto.

# RESULTADOS OBTIDOS

Todas as métricas apresentadas neste capítulo foram obtidas usando as fórmulas apresentadasno capítulo IIIda referência[12], utilizando os estados anômalos como verdadeiros positivos e os estados normais como verdadeiros negativos.AsFigura 3 a Figura 5 apresentam, respectivamente, a Precisão, o *Recall* e a Especificidade do algoritmo desenvolvido para a detecção de anomalias, apresentando os valores de detecção utilizando diferentes tempos futuros de previsão, variando entre 20 e 480 minutos, como foi mencionado na secção 2.3.

Figura 3- Precisão na detecção de anomalias para diferentes tempos de previsão.

Figura 4- *Recall* na detecção de anomalias para diferentes tempos de previsão.

Figura 5 - Especificidade na detecção de anomalias para diferentes tempos de previsão.

A apresenta a Precisão, o *Recall* e a Especificidade do algoritmo para os tempos de previsão em 20, 60, 120, 240 e 480 minutos.

Tabela 2 - Métricas de desempenho do algoritmo para tempos de previsão de 20 e 480 minutos.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **Tempo de previsão [min]** | **Precisão [%]** | **Recall [%]** | **Especificidade [%]** |
| 20 | 90,81 | 90,82 | 88,96 |
| 60 | 89,15 | 89,18 | 87,00 |
| 120 | 88,34 | 88,35 | 86,03 |
| 240 | 86,78 | 86,83 | 84,15 |
| 480 | 83,61 | 83,68 | 80,33 |

# DISCUSSÃO

O*Recall* representa a capacidade do algoritmo para classificar os estados anômalos corretamente, enquanto que a especificidade é a capacidade do algoritmo de classificar corretamente os estados normais, e finalmente a precisão é o porcentagem de acerto do algoritmo quando ele classificar um estado como anômalo [12]. Na Tabela 2 é possível observar que o *Recall* é a métrica que apresenta os melhores resultados para cada um dos tempos de previsão expostos. Nesse sentido, o algoritmo possui um maior grau de acerto para classificar estados anômalos.A Precisão apresenta resultados quase iguais que o *Recall* e a Especificidade tem valores só ligeiramente inferiores. Esses resultadospermitem concluir que o algoritmo desenvolvido tem um comportamento equilibrado na previsão de estados anômalos e normais.

# CONCLUSÕES

O presente trabalho apresentou o emprego de algoritmos de inteligência artificial do tipo autoenconders baseados em redes LSTM como instrumental para realização de prognósticos operacionais de plantas de amina para captura de CO2. Os resultados obtidos são extremamente promissores e sua robustez indica a viabilidade técnica e operacional da aplicação do conceito proposto em escala industrial.

# REFERÊNCIAS

[1] S. Liu, H. Ling, H. Gao, P. Tontiwachwuthikul, and Z. Liang, “Separation and Purification Technology Kinetics and new Brønsted correlations study of CO 2 absorption into primary and secondary alkanolamine with and without steric-hindrance,” *Sep. Purif. Technol.*, vol. 233, no. April 2019, p. 115998, 2020.

[2] S. Liu, H. Gao, X. Luo, and Z. Liang, “Kinetics and new mechanism study of CO2 absorption into water and tertiary amine solutions by stopped-Flow technique,” *AIChE J.*, vol. 65, no. 2, pp. 652–661, 2019.

[3] E. F. da Silva and H. F. Svendsen, “The chemistry of CO2 absorption in amine solutions studied by computational chemistry,” *Greenh. Gas Control Technol.*, pp. 1891–1895, Jan. 2005.

[4] Y. Lecun, Y. Bengio, and G. Hinton, “Deep learning,” *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436–444, 2015.

[5] C. Zhou and R. C. Paffenroth, “Anomaly detection with robust deep autoencoders,” in *Proceedings of the ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 2017, vol. Part F1296, pp. 665–674.

[6] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, “Deep Learning,” *MIT Press*, p. 1, 2016.

[7] G. Jiang, P. Xie, H. He, and J. Yan, “Wind Turbine Fault Detection Using a Denoising Autoencoder with Temporal Information,” *IEEE/ASME Trans. Mechatronics*, vol. 23, no. 1, pp. 89–100, 2018.

[8] A. Sherstinsky, “Fundamentals of Recurrent Neural Network (RNN) and Long Short-Term Memory (LSTM) Network,” pp. 1–39, 2018.

[9] R. Pascanu, T. Mikolov, and Y. Bengio, “On the difficulty of training recurrent neural networks,” *30th Int. Conf. Mach. Learn. ICML 2013*, no. PART 3, pp. 2347–2355, 2013.

[10] S. Hochreiter and J. Schmidhuber, “Long Short-Term Memory,” *Neural Comput.*, vol. 9, no. 8, pp. 1735–1780, 1997.

[11] S. G. K. Patro and K. K. sahu, “Normalization: A Preprocessing Stage,” *Iarjset*, no. April, pp. 20–22, 2015.

[12] M. Sokolova and G. Lapalme, “A systematic analysis of performance measures for classification tasks,” *Inf. Process. Manag.*, vol. 45, no. 4, pp. 427–437, 2009.