

Laboratório de Modelagem, Análise e Controle de Sistemas Não-Lineares

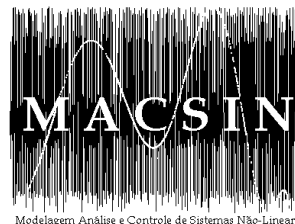
Departamento de Engenharia Eletrônica

Universidade Federal de Minas Gerais

Av. Antônio Carlos 6627, 31270-901 Belo Horizonte, MG Brasil

Fone: +55 3499-4866 - Fax: +55 3499-4850

emmendes@cpdeee.ufmg.br



Uso de informação *a priori* para identificação de um processo de Neutralização de pH em Malha Fechada

Cristian Bonfim de Souza Lima

Dissertação submetida à banca examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Minas Gerais, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Elétrica.

**Orientadores: PhD. Eduardo M. A. M. Mendes
Dr. Marcelo Vieira Corrêa**

Belo Horizonte, março de 2009

Dedicatória

*Aos meus pais, pelo amor e carinho e
aos meus irmãos e irmãs, pela fraterna amizade*

Agradecimentos

A Deus e a nosso senhor Jesus Cristo, pelas bênçãos e amor concebidos ao longo de minha vida;

Aos meus Pais, Sr. Eduardo de Souza Lima e Sra. Virginia Mater de Souza Bonfim, pelo Amor, Carinho, incentivo e orientação em meus primeiros anos de vida;

Aos meus irmãos, Lara, Eduardo, Alan e Anna Lisa pelo amor e fraterna amizade;

Às minhas Tias Sra. Sebastiana e Sra. Eva, pelo incentivo constante desde os meus primeiros contatos escolares;

Ao Professor Eduardo M. A. M. Mendes, por acreditar em mim, por suas valiosas orientações e pela amizade firmada ao longo do Mestrado;

Ao Professor Marcelo V. Corrêa, que desde os tempos de iniciação científica, incentivou-me na carreira acadêmica. Agradeço também por suas valiosas orientações para com esse trabalho e pela amizade;

Ao Professor Márcio F. Santos Barroso, pela predisposição em discutir aspectos relativos a esse trabalho, onde foram de grande valia;

Aos professores de Mestrado da UFMG que foram a base na realização desse trabalho;

Aos colegas e amigos do grupo MACSIN que de forma direta ou indireta, contribuíram na elaboração deste trabalho;

Ao Rodrigo C. C. Campos, pelas orientações quanto ao funcionamento da planta real de neutralização de pH bem como por fornecer-me o algoritmo caixa branca do referido processo;

Ao Professor Luiz Carlos Figueiredo e ao aluno Marcos Tolentino, do UnilesteMG, pelas orientações quanto ao funcionamento do Software de supervisão LabView da planta de pH;

À CAPES e à FAPEMIG pelo apoio financeiro ao longo do Mestrado;

Ao Centro Universitário do Leste de Minas Gerais - UnilesteMG pelo suporte na simulação da planta real de neutralização de pH;

Enfim, espero não ter me esquecido de ninguém, mas caso tenha ocorrido, serei sempre grato por tudo e por todos.

Epígrafe

“Buscai primeiro o reino de Deus e a sua justiça, e todas estas coisas vos serão acrescentadas”

Mateus 6,33

Sumário

Resumo	13
Abstract	15
Lista de Figuras	20
Lista de Tabelas	21
Lista de Símbolos	23
Lista de Abreviações	25
1 Introdução	27
1.1 Motivação	30
1.2 Delimitação	30
1.3 Objetivos	30
1.4 Contribuições	31
1.5 Apresentação do Trabalho	32
2 Modelagem Matemática	33
2.1 Introdução	33
2.2 Identificação de Sistemas	34

2.2.1	Experimentação do Sistema	34
2.2.2	Detecção de Não-Linearidade	36
2.2.3	Determinação da representação	36
2.2.4	Estimação de Parâmetros	40
2.2.5	Validação do Modelo	43
2.2.6	Raíz do erro médio quadrático <i>RMSE</i>	44
2.3	Agrupamentos de Termos e Coeficientes de Agrupamentos .	44
2.3.1	Agrupamento de termos espúrios em modelos poli- nomiais	46
2.4	Função Estática	46
2.5	Ganho Estático	47
2.6	Identificação em Malha Fechada	48
2.6.1	Método direto	49
2.6.2	Método indireto	50
2.6.3	Métodos entrada-saída conjunta	51
2.7	Otimização Bi-objetivo	52
2.7.1	Determinação das soluções eficientes	53
2.7.2	Geração do Conjunto Pareto-Ótimo	54
2.7.3	Escolha dos funcionais	54
2.7.4	Decisor de correlação	55
2.8	Considerações finais	57
3	Conceitos básicos sobre o processo de pH	59
3.1	Introdução	59
3.2	Neutralização	59
3.3	Definição para o pH	60
3.4	Solução tampão	61
3.5	Processo de neutralização de pH	61

	11
3.6 Considerações finais	63
4 Procedimento Metodológico	65
4.1 Introdução	65
4.2 Caracterização do problema	65
4.3 Procedimento	66
4.4 Dados para Modelagem	66
4.5 Considerações finais	69
5 Resultados e discussões	71
5.1 Introdução	71
5.2 Identificação em Malha Fechada dos Modelos NARX poli- nomiais	72
5.2.1 Modelo para dados simulados	72
5.2.2 Modelo para dados Reais	79
5.3 Identificação em Malha Fechada dos Modelos NARX poli- nomiais com Termos Cruzados	86
5.3.1 Modelo para dados simulados	86
5.3.2 Modelo para dados Reais	93
5.4 Considerações finais	99
6 Conclusões	101
6.1 Trabalhos futuros	103
Bibliografia	110

Resumo

Uma abordagem envolvendo novas técnicas para modelagem de sistemas não-lineares em malha fechada é proposta. Essa por sua vez, consiste em inserir no processo de estimação de parâmetros dos modelos NARX (Nonlinear Auto Regressive with eXogenous inputs) polinomiais, informações *a priori*, por exemplo, de um processo de neutralização de pH modelado. A motivação para a metodologia proposta reside no fato da impossibilidade de realizar testes em malha aberta em sistemas reais e industriais. Um desses sistemas é o processo de neutralização de pH em malha fechada, o qual é utilizado para validar essa abordagem. Os resultados indicam melhora no desempenho do modelo identificado, quando a informação da curva estática do processo de pH é utilizada.

Abstract

A procedure that uses new techniques to model closed-loop nonlinear dynamical system is proposed. It consists of introducing a priori information in the estimation of the parameters of NARX (Nonlinear AutoRegressive models with eXogeneous inputs) models. The PH neutralization process is used as an example. The reason for proposing the methodology is the difficulty of performing open-loop tests in real systems. The results of the proposed methodology show that the performance of the identified model is improved when the static curve of PH process is used as indicated in this work.

Lista de Figuras

2.1	Sistema em Malha Fechada.	48
3.1	Esquema do processo a ser identificado. Adaptado de (Henrique et al., 2000)	62
4.1	Sistema em Malha Fechada.	67
4.2	Dados de Entrada e Saída originais do modelo fenomenológico em Malha Fechada.	68
4.3	Dados de Entrada e Saída originais da planta de neutralização de pH em Malha Fechada.	69
5.1	Validação do Modelo 5.1 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado.	73
5.2	Curva estática característica do modelo 5.1 cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado.	74
5.3	Validação do Modelo 5.1 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado.	77
5.4	Curva estática característica do modelo 5.1 cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado.	78

5.5	Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.1. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados, e, em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo.	79
5.6	Validação do Modelo 5.4 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados reais. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado. . . .	80
5.7	Curva estática característica do modelo 5.4 cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados reais.	81
5.8	Validação do Modelo NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado.	83
5.9	Curva estática característica do modelo 5.4 cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo, sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados reais	84
5.10	Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.4. Em ponto-ponto tem-se a derivada da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados, e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados reais. . . .	85
5.11	Ajuste da curva teórica de titulação do sistema de pH pelo método de ERR. Agrupamentos de termos cruzados foram necessários para um bom ajuste da não-linearidade estática do referido sistema.	87
5.12	Validação do Modelo 5.7 NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo e em traço-ponto a simulação livre do modelo validado.	88

- 5.13 Curva estática característica do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados simulados. 89
- 5.14 Validação do Modelo NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados simulados. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado. 90
- 5.15 Curva estática característica do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados simulados. 91
- 5.16 Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados simulados. 92
- 5.17 Validação do Modelo 5.10 NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto a simulação livre do modelo validado. 94
- 5.18 Curva estática característica do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados Reais. 95

- 5.19 Validação do Modelo NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado. 96
- 5.20 Curva estática característica do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados Reais. 97
- 5.21 Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados Reais. 99

Lista de Tabelas

5.1	<i>Parâmetros do modelo 5.1 NARX polinomial, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Simulados do Modelo Fenomenológico.</i>	76
5.2	<i>Índices de erros do modelo 5.1: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas</i>	78
5.3	<i>Parâmetros do modelo 5.4 NARX polinomial estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Reais.</i>	82
5.4	<i>Índices de erros do modelo 5.4: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.</i>	85
5.5	<i>Parâmetros do modelo 5.7 NARX polinomial com Termos Cruzados, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Simulados.</i>	90
5.6	<i>Índices de erros para o modelo 5.7 com termos cruzados. Dados Simulados: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.</i>	92
5.7	<i>Parâmetros do modelo 5.10 NARX polinomial com Termos Cruzados, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Reais.</i>	96
5.8	<i>Índices de erros para o modelo 5.10 com termos cruzados. Dados Reais: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.</i>	98

Lista de Símbolos

ϕ_{yy}	Função de autocorrelação linear;
$\phi_{y^2y^2}$	Função de autocorrelação não-linear;
$E[.]$	Operador de esperança matemática;
τ_m	Atraso da função de autocorrelação;
T_s	Tempo de amostragem;
F^ℓ	Função genérica com grau de não-linearidade ℓ ;
$y(k-i)$	Regressor de saída;
$u(k-j)$	Regressor de entrada;
$e(k)$	Incerteza Matemática;
n_y	Máximo atraso do regressor de saída;
n_u	Máximo atraso do regressor de entrada;
n_e	Máximo atraso do regressor de ruído;
d	Atraso puro de tempo;
k	Tempo discreto;
θ_i	Parâmetros do modelo NARX polinomial;
θ	Vetor de parâmetros;
$\xi(k)$	Erro de modelagem;
J	Função custo genérica;
$\Omega_{y^p u^{m-p}}$	Agrupamento de termos;
$\Sigma_{y^p u^{m-p}}$	Coeficiente de agrupamento de termos;
Ψ	Matriz de regressores;
$\hat{}$	Valor estimado;
Ψ^*	Matriz de regressores estendida;
θ^*	Vetor de parâmetros estendido;
$\mathbf{S}$	Mapeamento linear;
$-$	Indica valores estáticos.

Lista de Abreviações

ERR	Taxa de redução de erro;
MIMO	Múltiplas entradas e múltiplas saídas (<i>Multiple-Input and Multiple-Output</i>);
MISO	Múltiplas entradas e uma saída (<i>Multiple-Input and Single-Output</i>);
SIMO	Uma entrada e múltiplas saídas (<i>Single-Input and Multiple-Output</i>);
SISO	Uma entrada e uma saída (<i>Single-Input and single-Output</i>);
MQ	Mínimos quadrados convencionais;
MQE	Mínimos quadrados estendidos;
NARMAX	Modelos não-lineares auto-regressivos com media móvel e entrada exógena (<i>nonlinear autoregressive moving average model with exogenous input</i>);
NARX	Modelos não-lineares auto-regressivos com entradas exógenas (<i>nonlinear autoregressive model with exogenous input</i>);
NPC	Controle preditivo não-linear;
PRBS	Sinal binário pseudo-aleatório;
PI	Controlador Proporcional Integral;
pH	Potencial Hidrogeniônico;
RMSE	Raíz do erro médio quadrático.

Introdução

Um dos grandes desafios na história da Ciência tem sido obter modelos análogos aos processos e fenômenos observados no universo. Por sistemas análogos, entende-se um sistema capaz de reproduzir algumas características do fenômeno observado, assim como uma maquete reproduz as escalas, proporções, cores, dentre outros aspectos. Quando o análogo é um sistema matemático, ele constitui um modelo matemático do fenômeno observado (Ljung e Torkel, 1994).

Com a crescente disponibilidade de computadores, o uso de modelos matemáticos tem aumentado em praticamente todas as áreas do conhecimento humano. Diante desta disponibilidade, o homem vem procurando representar matematicamente as características de sistemas e fenômenos observados, tornando possível seu entendimento e também a resolução de problemas relacionados ao sistema modelado (Aguirre, 2004).

Um outro aspecto relativamente importante, envolvendo a modelagem matemática é que a mesma pode se realizar em três maneiras: modelagem caixa branca, caixa cinza e caixa preta.

Na modelagem caixa branca, foram agrupados os procedimentos em que a estrutura do modelo é totalmente conhecida, geralmente determinada pelas equações físicas ou químicas que regem o comportamento estático e dinâmico do sistema (Garcia, 1997). Neste caso, os parâmetros, em geral, possuem algum significado físico e são determinados também a partir de conhecimentos *a priori* do sistema. Dessa forma, o processo de modelagem não utiliza dados de entrada e saída medidos no sistema.

Na modelagem caixa preta, nenhuma informação *a priori* do sistema é conhecida ou utilizada. Os parâmetros do modelo geralmente não possuem nenhum significado físico, e o processo de modelagem se baseia única e exclusivamente em dados de entrada e saída medidos no sistema

(Corrêa, 2001).

Entre os extremos modelagem caixa branca e modelagem caixa preta, situa-se a identificação caixa cinza, que utiliza informações *a priori* do sistema, em conjunto com dados de entrada e saída medidos no sistema. Em (Jorgensen e Hangos, 1995) a identificação caixa-cinza é definida como *a ciência de construção de modelos que incorporam conhecimento a priori do sistema, com um certo grau de incerteza na seleção de estrutura da representação*.

Dentre os três grupos de modelagem, a caixa-cinza tem ganhado atenção nos últimos anos (Aguirre et al., 2000); (Pearson e Pottmann, 2000); (Corrêa, 2001); (Nepomuceno, 2002). A atenção por este tipo de modelagem justifica-se pelo fato do uso de informação auxiliar juntamente com dados empíricos tornar o problema de identificação melhor condicionado. Mais além, se a informação auxiliar for correta, o modelo obtido, em geral, será melhor e mais robusto mesmo quando o conjunto de dados for deficiente ou incompleto (Johansen, 1996). Segundo (Corrêa, 2001), um aspecto importante no processo de identificação de sistemas diz respeito à quantidade de informação auxiliar utilizada durante a obtenção do modelo e observa-se que a utilização de informação auxiliar na estimação de parâmetros possibilita a obtenção de modelos com características mais globais.

Modelos empíricos e semi-físicos necessitam que testes sejam realizados nos processos para obtenção de dados de identificação, mas a obtenção destes dados esta sujeita às condições operacionais do sistema. Como exemplo pode-se citar os sistemas industriais nos quais, na sua grande maioria, não é possível interromper a produção para realizar testes para coleta de dados. Quando os testes podem ser realizados no processo real, os mesmos, ficam limitados a uma pequena variação de amplitude e frequência do sinal de excitação, ou seja, os modelos identificados com a massa de dados coletada fica limitado a uma faixa de operação (Aguirre et al., 2000).

Nesse trabalho, um processo de neutralização de pH em escala de laboratório similar a um processo industrial real, foi escolhido. Segundo (Corrêa et al., 2006) o processo de neutralização de pH apresenta grande dificuldade em sua modelagem e controle. Acredita-se que sua forte não-linearidade, e a falta de informação intrínseca em seus dados dinâmicos, devido a restrita faixa de operação, levam a essa dificuldade. Vários autores, dentre eles (Corrêa et al., 2006) tentaram, sem sucesso, aproximar em malha aberta, via modelo polinomial, as características de tal processo

pelos métodos tradicionais de identificação de sistemas. No entanto, com a evolução das técnicas caixa-cinza, novas abordagens têm sido criadas, (Barroso et al., 2006b) (Barroso et al., 2006a) (Barroso e Nepomuceno, 2006), de maneira a compensar a falta de informação nos dados dinâmicos, por meio da incorporação de conhecimento auxiliar nas etapas de identificação.

A curva de titulação do processo de pH é usada como informação auxiliar na identificação dos modelos NARX (*Não-linear Auto Regressivo com Entradas Exógenas*) polinomiais. No primeiro estágio, os modelos são identificados com base no critério de ERR (do inglês *error reduction ratio*) (Billings e Voon, 1984), ou seja, os parâmetros dos modelos são estimados via mínimos quadrados ordinários. No segundo estágio, os parâmetros dos modelos são novamente estimados, porém pelo método de otimização bi-objetivo (Barroso, 2006).

Essa nova abordagem conduz a modelos que incorporam as características do processo de neutralização de pH, dentre elas a característica monotônica estritamente crescente¹, que não estavam presentes nos dados dinâmicos para modelagem.

Uma característica importante na grande maioria dos processos é que os mesmos apresentam um comportamento estático monotônico com limites mínimos e máximos. Fazendo uma análise em termos da derivada em cada ponto da curva estática da maioria dos processos, observa-se que a mesma é menor ou igual a zero, ou então maior ou igual a zero. A principal motivação para este trabalho é a definição de um procedimento para inserir informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos NARX polinomiais identificados com dados de uma região restrita de operação. Como mencionado, para o presente trabalho foi escolhido o processo de neutralização de pH que será por sua vez identificado em malha fechada. Este processo tem se destacado nos últimos anos como um dos sistemas mais populares para avaliação de técnicas de identificação e controle (Henrique et al., 2000); (Lee e Park, 2000); (Yang et al., 2001); (Syafiie et al., 2004); (Gómez et al., 2004); (Mwembeshi et al., 2004); (Yoo et al., 2004); (Syafiie e Martinez, 2004); (Boling et al., 2006). Muitas vezes esta popularidade se justifica por ser um sistema simples, muito utilizado na indústria e por apresentar severas não linearidades, o tornando um

¹Uma sequência (h_n) é monótona estritamente crescente quando $\forall n \in N, h_n < h_{n+1}$, isto é, quando cada termo cresce em relação ao anterior. Nesse caso cada termo é maior que todos os anteriores e menor que todos os seguintes.

processo exigente (Gustafsson et al., 1995).

1.1 Motivação

Com o avanço computacional que possibilitou implementações rápidas de algoritmos de estimação e identificação de sistemas, tem havido nas últimas décadas um crescente interesse por representações não-lineares para caracterizar sistemas e fenômenos reais observados. Na medida em que as representações lineares em algumas aplicações não conseguem representar certas características, a identificação de sistemas não-lineares tornou possível analisar e reproduzir certos fenômenos e comportamentos dinâmicos mais complexos (Aguirre, 1996). Um dos problemas ainda não resolvidos é como identificar modelos não-lineares em malha fechada. Em sistemas industriais, por exemplo, nem sempre é possível realizar testes em malha aberta. Isso faz com que maior atenção seja dada ao processo de identificação de sistemas em malha fechada. Assim sendo, procurar-se-á estudar e analisar, neste trabalho, a influência da seleção de estrutura e da estimação de parâmetros de modelos não-lineares em malha fechada. As idéias serão testadas em uma planta real, a qual consiste em um processo de neutralização de pH.

1.2 Delimitação

Propor um procedimento metodológico envolvendo novas técnicas de modelagem, que possa ser aplicado na identificação de sistemas não-lineares em malha fechada, cuja característica estática está disponível como informação auxiliar.

1.3 Objetivos

Em geral, o objetivo a ser alcançado consiste em testar uma abordagem para modelagem de sistemas não-lineares em uma planta de neutralização de pH em malha fechada. Essa nova abordagem se aplica a sistemas cuja curva estática do processo está disponível como informação auxiliar.

Um ponto relativamente importante na identificação de sistemas diz respeito ao comportamento do modelo em estado estacionário, ou seja, o comportamento da curva estática do modelo. Pois, segundo (Ylén, 2001), a curva estática dos modelos é uma ferramenta básica para controle de qualidade de produtos, e um bom indicativo do estado do processo.

Por outro lado, recomenda-se que o modelo consiga prever o ganho do sistema, ou seja, ele deve aproximar bem a curva estática do mesmo, sendo que quanto mais precisa for esta aproximação, melhor será o desempenho do controlador baseado no modelo (Okuda, 2000). Aproximar bem as características estáticas dos sistemas é uma qualidade importante do modelo, ao lado da capacidade do modelo representar o comportamento dinâmico do sistema.

Em suma, os principais objetivos deste trabalho são:

- identificar modelos NARX polinomiais a partir de dados de um processo em *malha fechada*, que sejam globalmente válidos, frente ao comportamento estacionário (curva estática) do processo de neutralização de pH, quando este comportamento for conhecido *a priori*;
- verificar o desempenho do método de otimização bi-objetivo, na reestimação de parâmetros dos modelos;
- verificar a influência dos agrupamentos de termos cruzados nas estruturas dos modelos identificados.

1.4 Contribuições

Como mencionado no item 1.1, a identificação de sistemas em malha fechada, ainda é algo em aberto na literatura. Dentro desse contexto, este trabalho busca oferecer como contribuição, a aplicação de uma nova abordagem para modelar um processo em malha fechada de neutralização de pH, o qual apresenta como informação auxiliar, uma curva de titulação teórica. Novas técnicas (Barroso et al., 2006b); (Barroso, 2001); (Barroso e Nepomuceno, 2006) de estimação e identificação de sistemas, compõem essa abordagem de forma a compensar a falta de informação nos dados para identificação. No trabalho de (Lima et al., 2008) são aplicadas essas técnicas na identificação de um processo de neutralização de pH em malha fechada, sendo que bons resultados são obtidos. Essas novas técnicas

conduzem a modelos com melhores resultados, quando comparados aos procedimentos abordados por (Corrêa et al., 2006) e (Kalafatis et al., 1995) e aplicados ao processo de neutralização de pH.

1.5 Apresentação do Trabalho

Uma abordagem envolvendo novas técnicas de estimação e identificação de sistemas é proposta. Essa por sua vez é aplicada a um processo de neutralização de pH em malha fechada, o qual é similar a um processo industrial. Assim sendo, no Capítulo 2 é apresentada uma breve revisão bibliográfica, a qual será útil à compreensão do trabalho. Por outro lado, os conceitos químicos relativos ao processo de neutralização de pH, são detalhados no Capítulo 3. No Capítulo 4 é apresentado o procedimento metodológico aplicado a sistemas em malha fechada, cuja curva estática está disponível como informação auxiliar. Os resultados são por sua vez apresentados no Capítulo 5 de forma detalhada onde em cada modelo é analisado o desempenho do método proposto. E por fim, no Capítulo 6 apresenta-se a conclusão e uma breve discussão acerca dos resultados obtidos.

Modelagem Matemática

2.1 Introdução

A tentativa de explicar ou de reproduzir comportamentos de sistemas físicos observados é algo que há muito desperta o interesse de pesquisadores (Ljung e Torkel, 1994) . Neste sentido, pode-se dizer que a identificação de sistemas ou modelagem matemática é a área do conhecimento que estuda maneiras e formas de desenvolver e implementar modelos matemáticos de sistemas reais.

Com o advento tecnológico, tornou-se grande o interesse principalmente em setores industriais, na busca por representar seus mais diversos comportamentos dinâmicos por modelos matemáticos (Aguirre, 2004). Essa necessidade é devida à impossibilidade de realizar testes em tais processos em funcionamento, o que possivelmente pode ocasionar em transtornos em seu fluxo produtivo. Os modelos matemáticos, quando bem aproximados da dinâmica de um determinado processo identificado, trazem consigo grande parte das informações necessárias à sua análise, bem como permitem descobrir valores ótimos de sintonia de um controlador usado para controlar o processo modelado.

Nesse capítulo, será apresentado uma revisão bibliográfica envolvendo as ferramentas de identificação caixa-cinza aplicadas em sistemas não-lineares, bem como os conceitos básicos relacionados aos modelos a serem identificados.

2.2 Identificação de Sistemas

A modelagem empírica, mais conhecida como identificação de sistemas, possibilita que o homem represente matematicamente a dinâmica de um determinado processo. Neste contexto, o problema da identificação de sistemas, pode ser abordado da seguinte forma (Ljung e Torkel, 1994):

- *obtenção de dados do experimento que se deseja modelar;*
- *aplicação de testes aos dados obtidos para detecção de não-linearidade;*
- *escolha da estrutura que será utilizada para representar o sistema;*
- *estimação dos parâmetros do modelo;*
- *validação do modelo obtido.*

Essas etapas são comuns, tanto em identificação de sistemas lineares, quanto em identificação de sistemas não-lineares. A seguir será feito um breve comentário a respeito das etapas da identificação clássica de sistemas.

2.2.1 Experimentação do Sistema

Segundo (Söderström e Stoica, 1989), o processo de experimentação consiste basicamente na determinação do sinal de entrada, taxa de amostragem dos sinais medidos, na coleta de dados para estimação de parâmetros e no ajuste do modelo. Nesta primeira etapa deve-se considerar o sistema a ser estudado e submetê-lo a entradas pré-determinadas, observando as saídas correspondentes (ou as variáveis de estado observáveis) (Barroso, 2006). É desejável sempre que possível injetar sinais externos que possuam um espectro de frequência capaz de excitar, persistentemente, toda a dinâmica do sistema (Lima, 2006). O sinal PRBS,¹ por exemplo, possui essa característica. Já a taxa de amostragem é também um dos pontos principais no processo de experimentação do sistema, pois os dados originados da saída do processo, devido à excitação em sua entrada, serão classificados em três formas distintas: subamostrados, bem amostrados e sobreamostrados. Quando subamostrados, os dados não contém informação dinâmica suficiente do processo a ser identificado, pois é bem provável que a taxa de

¹Sinal Binário Pseudo-Aleatório, do Inglês *Pseudo-Random Binary Signal*.

amostragem escolhida é inferior à necessária. Quando bem amostrados, os dados trazem consigo informações dinâmicas suficientes ao processo de identificação. Por fim, os sobreamostrados não oferecem informação além daquela necessária à modelagem do sistema, apresentado certo grau de redundância. Dados assim amostrados ainda são bem vindos ao processo de identificação de sistemas, pois podem ser novamente amostrados por decimação. Coelho et al. (2002) cita que esta etapa é a mais importante, pois os resultados posteriores dependerão da qualidade, e da quantidade de informação contida nos dados coletados.

Um procedimento muito utilizado para a escolha do melhor tempo de amostragem dos dados de identificação é a análise da autocorrelação, sendo que o cálculo da correlação pode ser linear (2.1), ou não-linear (2.2) (Aguirre e Billings, 1995a):

$$\phi_{y'y'}(\tau) = E[(y(k) - \bar{y}(k))(y(k - \tau) - \bar{y}(k))], \quad (2.1)$$

$$\phi_{y^2'y^2'}(\tau) = E[(y^2(k) - \bar{y}^2(k))(y^2(k - \tau) - \bar{y}^2(k))], \quad (2.2)$$

sendo que $\bar{y}(k)$ e $\bar{y}^2(k)$ representam valores médios e o apóstrofe (') nos subscritos das funções acima indica que a média foi extraída dos sinais. Com base nas funções de correlação descritas acima, chega-se a seguinte constante:

$$\tau_m = \min\{\tau_{y'}, \tau_{y^2'}\}, \quad (2.3)$$

em que $\tau_{y'}$ é o primeiro instante do primeiro mínimo de $\phi_{y'y'}(\tau)$ e $\tau_{y^2'}$ é o instante do primeiro mínimo de $\phi_{y^2'y^2'}(\tau)$.

De acordo com (Aguirre, 2004) é necessário que o período de amostragem do sinal respeite a seguinte relação:

$$\frac{\tau_m}{25} \leq \tau_s \leq \frac{\tau_m}{5} \quad (2.4)$$

Portanto, se o sinal com amostragem τ estiver dentro da faixa estabele-

cida, dada pela equação (2.4), o sinal poderá ser utilizado. Se o sinal estiver violando o limite superior de (2.4), faz-se necessário decimar os sinais até que estes se encontrem dentro da faixa. Caso o sinal viole a restrição inferior, será necessário repetir o teste usando uma taxa de amostragem maior na aquisição dos dados (Barroso, 2006).

2.2.2 Detecção de Não-Linearidade

Segundo (Coelho et al., 2002), a detecção de não-linearidade no sistema pode ser realizada por testes não paramétricos, utilizando apenas os sinais coletados. Esses testes verificam dentro de um intervalo de confiança pré-determinado, se o sistema possui algumas características dos sistemas lineares. Caso essas características não sejam detectadas, então faz-se necessária a utilização de modelos não-lineares para aproximação de suas características (Campos, 2005). Uma das formas de detectar não-linearidades nos dados de identificação é fazendo uso da relação dada pela equação (2.5), que será válida se o sistema for linear (Billings e Voon, 1983); (Billings e Voon, 1986):

$$\phi_{y^2 y'^2}(\tau) = E[(y^2(k) - \bar{y}^2(k))(y^2(k - \tau) - \bar{y}^2(k))] = 0 \quad \forall \tau, \quad (2.5)$$

Um intervalo delimita a região de confiança dentro da qual a função de correlação pode ser considerada nula. Os limites deste intervalo em 95% são dados por: $\pm 1,96 / \sqrt{N}$, sendo N o comprimento do registro de dados disponível (Barroso, 2006).

2.2.3 Determinação da representação

Um dos aspectos mais importantes na escolha da estrutura de um modelo NARX polinomial por exemplo, consiste na determinação de sua ordem. Pois se a ordem usada for muito menor do que a ordem efetiva do sistema real, o modelo não possuirá complexidade estrutural necessária para reproduzir a dinâmica do sistema. Por outro lado, se a ordem do modelo for muito elevada, a estimação de parâmetros será provavelmente mal condicionada (Aguirre, 2004).

O modelo escolhido dever ser suficientemente rico para poder representar as não-linearidades, mas ao mesmo tempo simples o suficiente (Barroso,

2006). Neste trabalho, optou-se por usar a representação NARX polinomial.

Os modelos NARX polinomiais vem sendo, nas últimas três décadas muito utilizados para representar uma grande classe de não-linearidades dinâmicas. A base teórica para essa representação polinomial foi proposta e estruturada em meados da década de oitenta por (Leontaritis e Billings, 1985a), sendo várias suas vantagens. Dentre elas pode-se destacar:

- *linearidade nos parâmetros;*
- *facilidade de combinar a seleção de estrutura com estimação de parâmetros;*
- *facilidade de simulação;*
- *possibilidade de obter modelos estáticos.*

A estrutura NARX polinomial é representada pela equação (2.6), (Leontaritis e Billings, 1985a); (Leontaritis e Billings, 1985b) e (Billings e Chen, 1989).

$$y(k) = F^\ell[y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-\tau_d), \dots, \dots u(k-n_u)] + e(k), \quad (2.6)$$

onde F^ℓ é uma função polinomial com grau de não linearidade ℓ , $y(k)$ e $u(k)$, representam saída e entrada do sistema que possuem seus atrasos representados por n_y e n_u respectivamente. $e(k)$ representa as incertezas ou fenômenos que não podem ser bem representados por F^ℓ . d representa o tempo morto de retardo so sistema.

Dentre as características dos modelos NARX polinomiais destaca-se a possibilidade de se obter bons modelos para sistemas não-lineares, con-tanto que em tais sistemas não haja uma variação muito brusca do sinal de interesse no tempo, que comumente não pode ser bem representado usando modelos polinomiais (Fernandes, 2006). Outra vantagem é a facilidade de se obter informações analíticas sobre a dinâmica e as características estatísticas do modelo (Corrêa, 2001).

ERR

O ERR é um critério baseado num algoritmo ortogonal que eficientemente combina seleção de estrutura e estimação de parâmetros. Foi originalmente desenvolvido por (Korenberg, 1985), estendido para a identificação de sistemas de uma única-entrada e única-saída para sistemas estocásticos (Korenberg et al., 1988) e posteriormente aplicado a sistema com múltiplas entradas e múltipla saídas (Billings et al., 1989).

O ERR pode ser aplicado a problemas que podem ser escritos na forma matricial

$$\mathbf{Y} = \mathbf{P}\hat{\Theta} + \xi, \quad (2.7)$$

sendo $\mathbf{P}$ a matriz de regressores, $\hat{\Theta}$ o vetor que contém os parâmetros a serem estimados e ξ o vetor de resíduos. O objetivo é obter um vetor de parâmetros Θ , estimando de forma que a norma Euclidiana $\|\mathbf{Y} - \mathbf{P}\hat{\Theta}\|_2$ seja minimizada. O ERR associará um índice a cada coluna da matriz $\mathbf{P}$, correspondente à contribuição desta na explicação da variância dos dados de saída $\mathbf{Y}$.

O método de Mínimos Quadrados Ortogonal (OLS - *Orthogonal Least Squares*) parte de vetores de base $\mathbf{p}_i$ e encontra um vetor solução, que satisfaz a condição de $\mathbf{P}\Theta$ projetar os valores de y no espaço dado pelos vetores base. O método OLS (Billings et al., 1989) envolvendo a transformação do conjunto de vetores $\mathbf{p}_i$ em conjunto de vetores de base ortogonais, realizando cálculo para determinar a condição individual de cada vetor. Sendo M o número de regressores na matriz $\mathbf{P}$, essa é decomposta como

$$\mathbf{P} = \mathbf{W}\mathbf{A}, \quad (2.8)$$

sendo $\mathbf{A}$ uma matriz triangular superior $M \times M$ com 1's na diagonal,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \dots & \alpha_{1M} \\ 0 & 1 & \alpha_{23} & \dots & \alpha_{2M} \\ 0 & 0 & 1 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

e $\mathbf{W}$ é uma matriz $N \times M$ com colunas $\mathbf{w}_i$ ortogonais sobre os dados. Então

$$\mathbf{W}^T \mathbf{W} = \mathbf{D}, \quad (2.10)$$

e $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{M \times M}$ é diagonal com elementos d_i :

$$\mathbf{d}_i = \mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_i = \sum_{t=1}^N \mathbf{w}_i(t) \mathbf{w}_i(t), \quad 1 \leq i \leq M. \quad (2.11)$$

O espaço representado pelo conjunto de vetores de base ortogonais $\mathbf{w}_i$ é o mesmo espaço representado pelo conjunto $\mathbf{p}_i$, podendo-se rescrever a Equação (2.7) como:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{W} \mathbf{g} + \mathbf{\Xi}. \quad (2.12)$$

A solução OLS de $\hat{\mathbf{g}}$ é dada por:

$$\hat{\mathbf{g}}_i = \frac{\mathbf{w}_i^T \mathbf{Y}}{\mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_i}, \quad 1 \leq i \leq M. \quad (2.13)$$

Os valores de $\hat{\mathbf{g}}$ e $\hat{\Theta}$ satisfazem o sistema triangular

$$\mathbf{A} \hat{\Theta} = \hat{\mathbf{g}}. \quad (2.14)$$

Esta última equação é usada para obter os parâmetros estimados $\hat{\Theta}$ a

partir de $\hat{\mathbf{g}}$. Os métodos Gram-Schmidt e Gram-Schmidt Modificado podem ser usados para obter (2.8) e então, resolver pelos mínimos quadrados, estimando $\hat{\Theta}$ (Golub e Van Loan, 1989).

O valor quadrático médio da saída pode ser expresso por:

$$\frac{1}{N} \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^M \mathbf{g}_i^2 \mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_i + \frac{1}{N} \mathbf{\Xi}^T \mathbf{\Xi} \quad (2.15)$$

Nota-se que $\mathbf{g}_i^2 \mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_i / N$ é a parte do valor quadrático médio da saída explicando pelo i -ésimo regressor, e que $\mathbf{\Xi}^T \mathbf{\Xi} / N$ é a parcela do valor quadrático médio da saída $y(t)$ não explicada. A taxa de redução de erro (*error reduction ratio - ERR*), devida à inclusão de $\mathbf{w}_i$ no modelo é definida como:

$$[\text{ERR}] = \frac{\mathbf{g}_i^2 \mathbf{w}_i^T \mathbf{w}_i}{\mathbf{Y}^T \mathbf{Y}}, \quad 1 \leq i \leq M. \quad (2.16)$$

A razão acima oferece um meio simples e efetivo de verificar a importância de cada regressor na explicação da variância da saída.

2.2.4 Estimação de Parâmetros

Após determinar qual tipo de representação e qual sua estrutura, o próximo passo na identificação de sistemas compreende em estimar os parâmetros do modelo de modo a minimizar a diferença entre a saída medida e a predição (Coelho et al., 2002). Neste trabalho, será usado o modelo com representação NARX polinomial, o qual é linear nos parâmetros, conforme discutido acima.

Uma questão relativamente importante a ser discutida, é a polarização do estimador utilizado. A seguir, será discutida a questão da polarização de estimadores e os métodos baseados em mínimos quadrados para estimação dos parâmetros dos modelos NARMAX polinomiais.

Polarização

A estimação dos parâmetros de um modelo linear nos parâmetros do tipo:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{P}\Theta + \mathbf{e}, \quad (2.17)$$

pode ser obtida por

$$\hat{\Theta} = \mathbf{A}\mathbf{Y}, \quad (2.18)$$

sendo $\mathbf{P}$ a matriz dos regressores, e $\mathbf{A}$ uma matriz onde seus elementos dependem dos regressores. Os parâmetros estimados não estarão polarizados se

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{Y}] - \Theta &= \mathbf{0} \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{A}(\mathbf{P}\Theta + \mathbf{e}) - \Theta], \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{P} - \mathbf{I}]\Theta + \mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{e}], \\ &= (\mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{P}] - \mathbf{I})\Theta + \mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{e}], \end{aligned} \quad (2.19)$$

sendo Θ determinístico. Da equação (2.19) verifica-se que a polarização será nula se

- $\mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{P}] = \mathbf{I}$;
- *os elementos de $\mathbf{A}$ não forem correlacionados com o ruído;*
- *o ruído possui média nula.*

A condição $\mathbf{E}[\mathbf{A}\mathbf{P}] = \mathbf{I}$ é satisfeita através da escolha adequada da matriz $\mathbf{A}$. Neste caso pode ser demonstrado que o estimador de mínimos quadrados atende a primeira condição. As duas últimas são satisfeitas pelo estimador estendido de mínimos quadrados (*EMQ*), descrito na próxima seção. Portanto, não haverá polarização dos modelos polinomiais se o sinal $\mathbf{e}$ for não-correlacionado com a entrada u e com a saída y .

Estimador de Mínimos Quadrados

O estimador de mínimos quadrados é um estimador do tipo $\hat{\Theta} = \mathbf{A}\mathbf{Y}$, sendo

$$\mathbf{A} = [\mathbf{P}^T \mathbf{P}]^{-1} \mathbf{P}^T, \quad (2.20)$$

sendo $\mathbf{P}$, a matriz de regressores. No caso do modelo NARMAX polinomial, pode-se constatar que o estimador de mínimos quadrados é não polarizado se o ruído for branco e possuir média nula. Neste caso, aplicando as propriedades dos estimadores não-polarizados, descritos anteriormente, tem-se que:

- $E[AP]=I$;
- $E[Ae]=0$, pois o ruído é branco, e na matriz de regressores P aparecem apenas termos $e(k-1)$;
- O ruído possui média nula, por hipótese.

Em casos reais onde nem sempre há um número limitado de amostras, pode-se garantir que o ruído seja branco. O ruído pode possuir um certo grau de auto-regressividade o que por sua vez ocasionará em do estimador de mínimos quadrados, caso sejam incluídos regressores de saída no modelo.

Este problema de polarização pode ser contornado pelo estimador de mínimos quadrados estendidos (EMQ), acrescentando uma matriz de regressores a parte, relacionada ao sinal de ruído.

$$\mathbf{P}^* = [\mathbf{P} \ \mathbf{P}_e], \quad (2.21)$$

onde $\mathbf{P}$ e a matriz de regressores que possui os termos de processo, e $\mathbf{P}_e$ a matriz que contém os termos de ruído. Esse procedimento garante que o estimador seja não-polarizado, e a estimativa não-polarizada de $\hat{\Theta}$ será dada por um processo iterativo, sendo

$$\hat{\Theta}_i^* = [\mathbf{P}_i^{*T} \mathbf{P}_i^*]^{-1} \mathbf{P}_i^{*T} \mathbf{y}, \quad (2.22)$$

Segundo (Corrêa, 2001) no caso da representação racional, a função que na prática modela a parte determinística do ruído, não é conhecida. Neste

caso, modelos lineares de ruído com n_e entre 10 a 20 são suficientes para redução da polarização dos estimadores.

Como o ruído é por sua vez uma grandeza que não oferece condições de medição, a construção da matriz $\mathbf{P}_e$ é feita com valores estimados do ruído, dada por

$$\xi(k)_i = \mathbf{y} - \mathbf{P}_{i-1}^* \hat{\mathbf{\Theta}}_{i-1}^*, \quad (2.23)$$

sendo i o número da iteração do algoritmo *EMQ*, sendo que no primeiro passo, $i = 1$, utiliza-se o estimador de mínimos quadrados. Normalmente quatro ($i = 4$) iterações são suficientes para se eliminar a polarização do estimador.

Mais detalhes a respeito de estimadores não polarizados podem ser encontrados em (Aguirre, 2004).

2.2.5 Validação do Modelo

A validação de modelos é um passo importante na identificação de sistemas, pois permite verificar com base em testes aplicados ao modelo, se o mesmo é capaz de representar o sistema original. A validação de modelos pode ser realizada em duas formas distintas, validação dinâmica ou estatística.

Na validação dinâmica, verifica-se o modelo apresenta características dinâmicas semelhantes à do sistema identificado. Porém este tipo de validação deve ser implementada de acordo com o sistema em questão. Em sistemas SISO por exemplo, a validação deve ser realizada com uma massa de dados diferente da usada na identificação (Aguirre et al., 2007)

Por outro lado, a validação estatística consiste em realizar testes com base em funções de correlação. Essas funções podem ser aplicadas aos resíduos para verificação de correlação linear ou não-linear. Se os resíduos possuírem alguma correlação, o modelo será considerado polarizado, uma vez que existem evidências de dinâmica não modelada contidas nos resíduos (Barroso, 2006). Outros testes são as correlações cruzadas, lineares e não-lineares, entre os resíduos e os dados de entrada e saída do sistema (Billings e Voon, 1983); (Billings e Voon, 1986).

2.2.6 Raíz do erro médio quadrático *RMSE*

Para quantificar o desempenho na *predição livre* dos modelos NARX polinomiais, calcula-se o índice *RMSE* (do inglês *root mean square error*), o qual retorna o índice da qualidade de aproximação entre dois vetores. A expressão para o cálculo do índice *RMSE* é dada pela Equação (2.24).

$$RMSE = \frac{\sqrt{\sum_{k=1}^N [y(k) - \hat{y}(k)]^2}}{\sqrt{\sum_{k=1}^N [y(k) - \bar{y}]^2}}, \quad (2.24)$$

sendo que $\hat{y}(k)$ é o sinal de predição obtido via *simulação livre*, e $\bar{y}$ é o valor médio do sinal medido $y(k)$, sendo que a média é calculada na janela de identificação.

O índice *RMSE* também se aplica em alguns casos, a validação estática dos modelos NARX polinomiais.

2.3 Agrupamentos de Termos e Coeficientes de Agrupamentos

O modelo NARX polinomial (2.6), definido na Seção 2.2.3, pode ser escrito como:

$$y(k) = \sum_{m=0}^{\ell} \sum_{p=0}^m \sum_{n_{\ell}, n_m}^{n_y, n_u} c_{p, m-p} \prod_{i=1}^p y(k - n_i) \prod_{i=p+1}^m u(k - n_i), \quad (2.25)$$

sendo

$$\sum_{n_1, n_m}^{n_y, n_u} \equiv \sum_{n_{\ell}=1}^{n_y} \dots \sum_{n_m}^{n_y} \quad (2.26)$$

Os monômios² da equação (2.25) são agrupados de acordo com sua ordem $m(0 \leq m \leq \ell)$, sendo ℓ o grau de não-linearidade do modelo. Cada

²Cada um dos termos de um polinômio.

termo de ordem m contém fatores multiplicativos em $y(k-i)$, e $(m-p)$ fatores multiplicativos em $u(k-j)$. Os parâmetros destes termos são representados por $c_{p,m-p}(n_\ell, \dots, n_m)$, nos quais $(n_\ell, \dots, n_m)$ indica os atrasos de cada fator constituinte do monômio considerado. O primeiro somatório da equação (2.25) refere-se aos monômios da equação (2.6), separando-os de acordo com sua ordem. Já o segundo somatório refere-se ao número de fatores em $y(k-1)$ no termo considerado. Dentro do conjunto de termos de ordem m , um termo qualquer pode por sua vez ser acessado através do ajuste do valor de p adequado. Por fim, o último somatório permite que seja feita a distinção entre os termos da equação (2.6), por meio do ajuste dos atrasos de cada um dos fatores constituintes dos termos (Barroso, 2006).

Analisando o modelo em estado estacionário para entradas constantes, tem-se

$$\begin{aligned} y(k-1) &= y(k-2) = \dots = y(k-n_y), \\ u(k-1) &= u(k-2) = \dots = u(k-n_u). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Aplicando (2.27) na equação (2.25), obtém-se

$$y(k) = \sum_{n_\ell, n_m}^{n_y, n_u} c_{p,m-p}(n_\ell, \dots, n_m) \sum_{m=0}^{\ell} \sum_{p=0}^m y(k-1)^p u(k-1)^{m-p}, \quad (2.28)$$

O conjunto de termos da forma $y(k-i)^p u(k-j)^{m-p}$ é denominado *agrupamento de termos*, os quais serão representados por $\Omega_{y^p u^{m-p}}$. A constante

$$\sum_{n_\ell, n_m}^{n_y, n_u} c_{p,m-p}(n_\ell, \dots, n_m) \quad (2.29)$$

é o coeficiente do agrupamento de termo $y(k-1)^p u(k-1)^{m-p}$, e será representado por $\Omega_{y^p u^{m-p}}$. Todos os termos pertencem a um dado agrupamento de termo, e explicam o mesmo tipo de não-linearidade no modelo.

2.3.1 Agrupamento de termos espúrios em modelos polinomiais

Os modelos NARX polinomiais são bastantes sensíveis a sobreparametrização de sua estrutura (Mendes e Billings, 1998); (Aguirre e Billings, 1995a). Neste caso, um modelo que contenha termos que não estejam dentro dos agrupamentos efetivos, pode apresentar regimes dinâmicos espúrios, ou seja, regimes dinâmicos que não são exibidos pelo sistema real (Barroso, 2006).

A importância de um agrupamento de termo pode ser quantificada pelos seus coeficientes (Aguirre e Billings, 1995b). Os agrupamentos de termos, que possuem coeficientes nulos são agrupamentos que não contribuem em nada para explicar a dinâmica do sistema. Ou seja, se o coeficiente de algum agrupamento tiver o seu valor muito menor que dos agrupamentos efetivos, esse provavelmente pode ser descartado. Os agrupamentos não efetivos apresentam variação de sinal dos seus coeficientes em relação ao número de termos incluídos no modelo, ou sua amplitude é insignificante comparada a outros agrupamentos (Barroso, 2006). Nem sempre os resultados desta análise são favoráveis para se destacar um agrupamento de termos. O modelo polinomial identificado a partir dos agrupamentos de termos efetivos, tem melhor chance de reproduzir as dinâmicas dos sistemas que se deseja estudar.

2.4 Função Estática

Segundo (Barroso et al., 2006b) o comportamento em estado estacionário de um sistema assintoticamente estável pode ser obtido fixando-se o valor da entrada $\bar{u}$ e medindo a saída $\bar{y}$ após um regime transitório. Para um sistema geral $\bar{u}$ e $\bar{y}$ são relacionados como $\bar{y} = f(\bar{y}, \bar{u})$, onde $f(\cdot)$ é a função estática do sistema. Para um modelo polinomial NARX, por ser linear nos parâmetros, tem-se a seguinte expressão:

$$\bar{y}_i = f(\bar{y}_i, \bar{u}_i) = \mathbf{e}_i^T \mathbf{S} \boldsymbol{\theta}, \quad (2.30)$$

em que

$$\mathbf{e}_i^T = \begin{bmatrix} 1 & \bar{y}_i \dots \bar{y}_i^\ell \bar{u}_i \dots \bar{u}_i^\ell & F_{yu} \end{bmatrix}, \quad (2.31)$$

e

$$\mathbf{S}\theta = \begin{bmatrix} \Sigma_0 \Sigma_y \dots \Sigma_{y^\ell} \Sigma_u \dots \Sigma_{u^\ell} & F_\Sigma \end{bmatrix}^T, \quad (2.32)$$

sendo que F_{yu} pode ser entendido como monômio não-linear no modelo que envolve $y(k)$, $u(k)$ e ℓ é o maior grau de não linearidade do modelo. F_Σ são chamados coeficientes de agrupamentos de termos que correspondem aos agrupamentos de termos F_{yu} e $\mathbf{S}$ é uma matriz constante de zeros e uns que mapeia o vetor de parâmetros para os coeficientes de agrupamentos de termos. Logo, dado um modelo NARX polinomial com vetor de parâmetros $\hat{\theta}$, a função estática pode ser escrita em sua forma matricial como:

$$\hat{\mathbf{y}} = \mathbf{E}\mathbf{S}\hat{\theta}, \quad (2.33)$$

sendo que

$$\mathbf{E}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{e}_1 \dots \mathbf{e}_{n_{sf}} \end{bmatrix}. \quad (2.34)$$

2.5 Ganho Estático

Segundo (Aguirre, 2004), a expressão geral para ganho estático de modelos polinomiais não-lineares pode ser escrita utilizando-se os conceitos de agrupamentos de termos e seus coeficientes, como dado na seguinte equação.

$$K_s = \frac{\bar{y}}{\bar{u}} = \frac{\Sigma_0/\bar{u} + \Sigma_u + \sum_{m=2}^{\ell} \Sigma_{u^m} \bar{u}^{m-1}}{1 - \Sigma_y - \sum_{m=1}^{\ell-1} \sum_{p=1}^{\ell-m} \Sigma_{y^p u^m} \bar{y}^{p-1} \bar{u}^m - \sum_{p=2}^{\ell} \Sigma_{y^p} \bar{y}^{p-1}} \quad (2.35)$$

Para sistemas com ganho variável, a característica estática $f(\cdot)$ não será

uma constante. Isso caracteriza um sistema não-linear. Deve ser notado que essa análise é análoga à análise de pontos fixos para o caso de sistemas autônomos. Neste caso, $\bar{y}$ pode ser considerado um ponto fixo do sistema não autônomo excitado por $\bar{u}$. Isto é, a análise de um modelo polinomial NARX em regime permanente, excitado por um sinal constante, equivale a fazer $\bar{u} = u(k - i)$ e $\bar{y} = y(k - i)$, $\forall i$ (Aguirre, 2004).

2.6 Identificação em Malha Fechada

O problema da identificação de sistemas em malha fechada é de grande interesse prático principalmente quando se trata de sistemas industriais. Do ponto de vista teórico é possível mostrar que o processo pode tornar não identificável em malha fechada (Söderström e Stoica, 1989). Por outro lado, em (Lennox et al., 2001) diz-se que na prática esse problema é bem menos freqüente.

Assim sendo, uma breve descrição sobre técnicas de identificação em malha fechada será apresentada nessa seção. O esquema de realimentação que será abordado nesse trabalho é apresentado pela Figura 2.1.

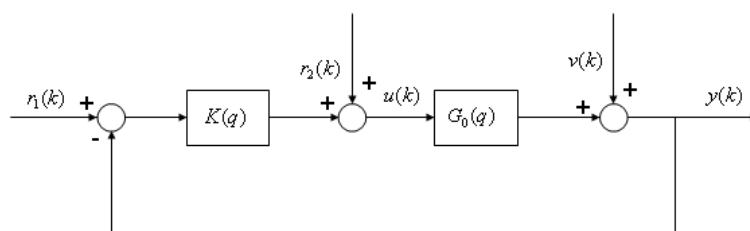


Figura 2.1: Sistema em Malha Fechada.

Considerando que o sistema em malha fechada é *LTI* e, aplicando-se o princípio da superposição ao sistema da Figura 2.1, no qual $G_0(q)$ encontra-se conectado ao controlador $K(q)$ ³, chega-se às seguintes equações:

³O argumento q será omitido convenientemente, para facilitar a notação.

$$\begin{bmatrix} y(k) \\ u(k) \end{bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} \frac{G_0 K}{1+G_0 K} & \frac{G_0}{1+G_0 K} \\ \frac{K}{1+G_0 K} & \frac{1}{1+G_0 K} \end{bmatrix}}^{T(G_0, K)} \begin{bmatrix} r_1(k) \\ r_2(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{1+G_0 K} \\ \frac{-K}{1+G_0 K} \end{bmatrix} v(k), \quad (2.36)$$

sendo

$$y(k) = G_0 u(k) + v(k). \quad (2.37)$$

Além disso, $r_1(k)$ e $r_2(k)$ podem ser entendidos como sinais de *set point* ou de distúrbios na saída $y(k)$ e no sinal de controle $u(k)$. É importante destacar que $r_1(k)$ e $r_2(k)$ não possuem correlação com $v(k)$.

Neste caso, três métodos utilizados na identificação em malha fechada são apresentados: método direto, método indireto e método denominado Entrada-Saída conjunta (*Joint Input-Output*).

2.6.1 Método direto

Segundo (Fernandes, 2006) a identificação direta em malha fechada tem como objetivo obter um modelo do sistema real utilizando medições de $u(k)$ e $y(k)$ coletadas do sistema em malha fechada como apresentado na Figura (2.1). O procedimento consiste em aplicar uma seqüência N de sinais $r_1(k)$ ou $r_2(k)$ e coletar as seqüências correspondentes de dados $Z^N = y(1), u(1), y(2), u(2), \dots, y(N), u(N)$. Em seguida segue-se os mesmos passos da identificação em malha aberta. As estimativas resultantes são um modelo da planta $\hat{G}$ e um modelo do ruído $\hat{H}$.

Segundo (Forssell e Ljung, 1999) a identificação direta pode ser vista como uma aproximação natural para sistemas em malha fechada. As principais razões para isso são:

- *esse método trabalha independente da complexidade do controlador (não-linearidades, variância dos parâmetros com o tempo, etc.) e não requer conhecimento sobre o mecanismo de realimentação;*
- *pode-se aplicar facilmente os algoritmos de predição de erro para obter boas estimativas;*

- consistência⁴ e ótima precisão⁵ serão obtidas se o sistema real estiver contido na estrutura do modelo (isso inclui as propriedades do ruído), ou seja $\mathcal{S} \in \mathcal{M}$.

Segundo (Ljung, 1999), o problema com aproximação direta é a necessidade de bons modelos de ruído, devido ao fato do sinal $u(k)$ ser correlacionado com o ruído da saída. Ljung (1999) também cita que é possível obter estimativas consistentes de G_0 empregando-se modelos de erro na saída (e outras estruturas com modelos de ruído parametrizados independente de $G(q, \theta)$). Nesse caso a precisão dessas estimativas será boa se o modelo do ruído for suficientemente flexível para tornar o resíduo branco.

Outra solução para esse problema, (Ljung, 1999); (Landau, 2001) e (Van den Hof e Schrama, 1995), é proceder a identificação de modelos de ordem elevada, utilizando a aproximação direta, com pequena polarização, e então reduzir este modelo para uma estrutura de baixa ordem aplicando técnicas de redução de ordem de modelos.

2.6.2 Método indireto

A aproximação indireta proposta por (Söderström e Stoica, 1989) emprega os sinais $r_i(k)$, sendo $i = 1, 2$ para identificar uma das quatro funções de transferência da matriz $T(G_0, H)$. A vantagem desse método reside no fato de $r_i(k)$ e $v(k)$ serem não-correlacionados. Essa condição faz com que o problema de estimar uma função de $T(G_0, K)$ possua as mesmas características de um problema de identificação em malha aberta, ou seja, possibilita a utilização de métodos usados somente para problemas em malha aberta. Exemplos de tais métodos são: variáveis instrumentais, análise espectral, entre outros.

No método indireto o modelo para G_0 pode ser determinado invertendo-se a estimativa de uma das quatro funções de transferência da matriz $T(G_0, K)$, apresentadas a seguir:

$$T_{11} = \frac{G_0 K}{1 + G_0 K}; \quad T_{12} = \frac{G_0}{1 + G_0 K}; \quad T_{21} = \frac{K}{1 + G_0 K}; \quad T_{22} = \frac{1}{1 + G_0 K}. \quad (2.38)$$

Utilizando um controlador K conhecido e a estimativa de T_{11} como exemplo, a solução natural para $\hat{G}$ pode ser expressa através da seguinte

⁴Uma estimativa consistente implica $G(q, \hat{\theta}_N) \rightarrow G_0(q)$ com probabilidade 1, quando $N \rightarrow \infty$ Ljung (1999).

⁵Mínima variância implica ótima precisão.

equação:

$$\hat{G} = \frac{\hat{T}_{11}}{K(1 - \hat{T}_{11})} \quad (2.39)$$

Um problema evidente com a parametrização, equação (2.39) é que ela resulta em uma estimativa de ordem elevada, pois, tipicamente, a ordem de $\hat{G}$ será a ordem do controlador K somada a ordem de $\hat{T}_{11}$.

Sendo assim, não existe consenso sobre a questão de como realizar a parametrização do modelo estimado pelo método indireto de uma forma ótima (Ljung, 1999). Uma idéia muito interessante que vem sendo utilizada como alternativa à parametrização apresentada na equação (2.39), é a utilização da denominada parametrização *Dual-Youla* (Vidyasagar, 1985). Essa técnica, apresenta como principal característica, a possibilidade de obter uma estimativa $\hat{G}$ com garantia de que a mesma seja estabilizada por K . Outros tipos de parametrização, como por exemplo, a parametrização *taylor-made*, que traduzindo significa feita *sob medida*, podem ser encontradas em (Van den Hof e Schrama, 1995).

Uma dificuldade associada à aproximação indireta é a necessidade de conhecer completamente o controlador K , para que seja possível determinar o modelo $\hat{G}$. Em alguns casos, o controlador poderá apresentar características não-lineares, tal como função *anti-windup*, ou outras discrepâncias em relação ao modelo esperado para o controlador.

2.6.3 Métodos entrada-saída conjunta

Na terceira aproximação em malha fechada, trabalha-se com a identificação das funções de transferência de $r(k)$ para $y(k)$ e de $r(k)$ para $u(k)$, e utiliza-se tais estimativas para calcular G_0 . O procedimento pode ser entendido melhor, reescrevendo-se a equação (2.36) da seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} y(k) \\ u(k) \end{bmatrix} = \overbrace{\begin{bmatrix} G_0 K S_0 & G_0 S_0 \\ K S_0 & S_0 \end{bmatrix}}^{T(G_0, K)} \begin{bmatrix} r_1(k) \\ r_2(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} S_0 \\ -K S_0 \end{bmatrix} H_0 e(k), \quad (2.40)$$

sendo que $S_0 = T_{22} = 1/(1 + G_0 K)$ é denominada função de sensibilidade do sistema. Considerando que apenas r_2 será utilizado na estimação do

modelo da planta G_0 , pode-se expandir a equação (2.40) da seguinte forma:

$$y(k) = G_0 S_0 r_2(k) + S_0 H_0 e(k) = T_{12} r_2(k) + T_{22} H_0 e(k), \quad (2.41)$$

$$u(k) = S_0 r_2(k) - K S_0 H_0 e(k) = T_{22} r_2(k) - T_{21} H_0 e(k). \quad (2.42)$$

Observando a equação (2.41), percebe-se que é possível obter uma estimativa da função T_{12} resolvendo um problema de identificação em malha aberta, pois $r_2(k)$ não está correlacionado com $e(k)$. Da mesma forma, a partir da equação (2.42) pode-se obter uma estimativa consistente de T_{22} . Sendo assim, os métodos entrada-saída conjunta procedem à obtenção de uma estimativa para T_{12} utilizando $r_2(k)$ e $y(k)$, e outra para T_{22} empregando $r_2(k)$ e $u(k)$. A estimativa para G_0 pode ser calculada da seguinte forma

$$\hat{G} = \frac{\hat{T}_{12}}{\hat{T}_{22}} = \frac{\hat{T}_{12}}{\hat{S}}. \quad (2.43)$$

Como na aproximação indireta, a estimativa do sistema em malha aberta, utilizando as funções de transferência em malha fechada, pode causar problemas relativos à ordem do modelo identificado. Percebe-se na equação (2.43) que a ordem de $\hat{G}$ será a soma da ordem de $\hat{T}_{12}$ mais a ordem do numerador de $\hat{S}$. Em (Van den Hof e Schrama, 1995) e (Söderström et al., 1991), são propostas mais técnicas para trabalhar com essas dificuldades envolvendo parametrizações.

2.7 Otimização Bi-objetivo

Se em um problema de otimização qualquer estiverem disponíveis mais de um objetivo que se deseja alcançar, haverá, de forma geral, dois tipos de solução. Primeiro, haverá soluções que, sob todos os objetivos simultaneamente considerados, serão suplantadas por outras soluções. Em segundo, haverá soluções que, comparadas com outras soluções, serão melhores em algum ou alguns objetivos, mas piores em outro ou outros objetivos.

No segundo caso, as soluções são denominadas *soluções eficientes* ou *soluções pareto-ótimas*, sendo a determinação desse conjunto, uma das principais etapas do método. A princípio não existe uma solução única que

simultaneamente minimize todas as diferentes funções-objetivo. No entanto, de alguma forma, deve-se escolher uma única solução. O conjunto Pareto-Ótimo é constituído de soluções candidatas a se tornarem essa solução única (Barroso et al., 2006b); (Takahashi et al., 2000).

2.7.1 Determinação das soluções eficientes

Considere o vetor de funções-objetivo:

$$\mathbf{J}(\theta) = \begin{bmatrix} J_1(\hat{\theta}) \\ J_2(\hat{\theta}) \\ \vdots \\ J_m(\hat{\theta}) \end{bmatrix}^T. \quad (2.44)$$

De forma geral, não existe função única que minimize simultaneamente as m funções-objetivo. Isso faz com que um certo número de soluções possa ser encontrado, caracterizando o conjunto Pareto-ótimo (Shankong e Haimes, 1983):

$$\hat{\theta}^* \in \hat{\Theta}^* \iff \{ \nexists \hat{\theta} : \mathbf{J}(\hat{\theta}) \leq \mathbf{J}(\hat{\theta}^*) \text{ e } \mathbf{J}(\hat{\theta}) \neq \mathbf{J}(\hat{\theta}^*) \}, \quad (2.45)$$

sendo $\hat{\theta}^*$ é o conjunto de parâmetros estimados que pertence ao conjunto Pareto ótimo e $\hat{\Theta}^*$ é espaço de parâmetros. As relações de comparação entre os vetores são definidas como:

$$\begin{aligned} \mathbf{x} \leq \mathbf{z} &\iff x_i \leq z_i, \forall i \in 1, \dots, n \\ \mathbf{x} \neq \mathbf{z} &\iff \exists i \in 1, \dots, n | x_i \neq z_i, \end{aligned} \quad (2.46)$$

sendo que x_i e z_i são componentes dos vetores $\mathbf{x}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^n$. Neste caso a solução será eficiente se e somente se não existir uma outra solução que melhore um dos objetivos sem a degradação de pelo menos outro objetivo. Em outras palavras, as soluções pertencentes ao Pareto-ótimo são aquelas entre as quais não existe ordenação (Takahashi et al., 2000); (Barroso et al., 2006b).

2.7.2 Geração do Conjunto Pareto-Ótimo

Uma estratégia para se obter um conjunto de soluções eficientes ou Pareto-ótimas, é a utilização do chamado problema ponderado P_w (Shankong e Haimes, 1983) sendo sua formulação:

$$\hat{\theta}^* = \arg \min_{\hat{\theta} \in \mathbf{D}} \sum_{i=1}^n \mathbf{w}_i \mathbf{J}_i \quad (2.47)$$

sendo que os pesos $w \in W$ pode ser definido por

$$W = \left\{ \mathbf{w} \mid \mathbf{w} \in \mathbb{R}^n, w_j \geq 0 \text{ e } \sum_{i=1}^n w_j = 1 \right\}. \quad (2.48)$$

$\mathbf{D}$ define o espaço factível em relação ao espaço de parâmetros, e $\mathbf{J}_i$ é o i -ésimo objetivo e/ou restrições. Esse método é capaz de encontrar todo o conjunto de soluções Pareto-ótimas desde que os funcionais sejam convexos (Shankong e Haimes, 1983).

Em (Nepomuceno, 2002), o autor apresenta uma solução analítica para o problema (2.47), desde que os objetivos possam ser escritos como soma de erros quadráticos. A expressão para o caso bi-objetivo é apresentada a seguir:

$$\hat{\theta}^* = \left[w_1 G_1^T G_1 + w_2 G_2^T G_2 \right]^{-1} \left[w_1 G_1^T \mathbf{v}_1 + w_2 G_2^T \mathbf{v}_2 \right], \quad (2.49)$$

2.7.3 Escolha dos funcionais

Segundo (Barroso et al., 2006b), os funcionais são funções mono-objetivo, que representam cada um dos objetivos de um problema multi-objetivo. Essa formulação possibilita definir o que se deseja dos modelos identificados.

Neste trabalho, deseja-se que os modelos sejam capazes de explicar características dinâmicas e em estado estacionário do sistema real. Embora características dinâmicas e estáticas sejam intrínsecas dos sistemas, nem sempre é possível obter modelos que sejam capazes de, simultaneamente, explicar essas características (Barroso, 2001); (Pearson e Pottmann, 2000); (Bohlin, 1994).

Neste caso, pode-se escrever matematicamente os funcionais (funções objetivo) da seguinte forma:

$$J_{MQ}(\theta) = \|\mathbf{y} - \Psi\hat{\theta}\|_2^2, \quad (2.50)$$

sendo $J_{MQ}(\theta)$ a função que representa o objetivo de minimizar os resíduos de identificação. Por outro lado, a função objetivo que representa a minimização do erro ao se ajustar a curva estática pode ser descrita matematicamente como:

$$J_{ES}(\theta) = \|\bar{\mathbf{y}} - ES\hat{\theta}\|_2^2, \quad (2.51)$$

sendo que $ES\hat{\theta}$ representa a estrutura estática do modelo polinomial NARX e $\bar{\mathbf{y}}$ representa dados de saída em estado estacionário.

A solução (2.49) para o caso dos funcionais (2.50) e (2.51) é dada por:

$$\hat{\theta}^* = \left[w_1 \Psi^T \Psi + w_2 (\mathbf{ES})^T (\mathbf{ES}) \right]^{-1} \left[w_1 \Psi^T \mathbf{y} + w_2 G_2^T (\mathbf{ES})^T \bar{\mathbf{y}} \right]. \quad (2.52)$$

Logo, após obter o conjunto de modelos candidatos pode-se, então, submetê-los a um decisor para a escolha de um único modelo.

2.7.4 Decisor de correlação

Neste trabalho, será utilizado um decisor baseado na correlação entre a simulação livre do modelo e o erro cometido entre a simulação do modelo e os dados reais do sistema. Mais detalhes podem ser encontrados em (Barroso, 2006).

Seja a simulação livre do modelo definida como:

$$\hat{\mathbf{y}}(k) = \hat{\Psi}(k-1)\hat{\theta} \quad (2.53)$$

sendo que $\hat{\Psi}(k-1)$ é a matriz de regressores da simulação livre para o modelo.

Logo o erro de simulação livre para o mesmo modelo será:

$$\eta(k) = y(k) - \hat{y}(k). \quad (2.54)$$

Defini-se então a seguinte função:

$$J(\hat{\theta}) = \sum_{k=1}^N \eta(k) \hat{y}(k), \quad (2.55)$$

sendo N o número de amostras para a série temporal utilizada.

Considera-se um conjunto $\hat{\Theta}^*$ de modelos candidatos, cujas estruturas são iguais e os parâmetros diferentes. Para cada modelo candidato $\hat{\theta}$ no conjunto $\hat{\Theta}^*$, será utilizado o coeficiente de correlação como função utilidade (*critério de decisão*), que por sua vez é definida como (Magalhães e Lima, 2004).

$$J_{corr}(\hat{\theta}) = \frac{\sum_{k=1}^N (\eta(k) - \bar{\eta})(\hat{y}(k) - \bar{\hat{y}})}{\sqrt{[(\sum_{k=1}^N \eta(k) - \bar{\eta})^2][(\sum_{k=1}^N (\hat{y}(k) - \bar{\hat{y}}))^2]}}, \quad (2.56)$$

sendo N o número de amostras para cada série temporal disponível. O símbolo $(\bar{})$ denota valor médio, $\eta(k)$ é o erro de simulação e $\hat{y}(k)$ é a simulação do modelo, no instante k . Logo o decisor pode então ser escrito como:

$$DC(\theta^*) = \min_{\hat{\theta} \in \hat{\Theta}^*} J_{corr}(\hat{\theta}). \quad (2.57)$$

Supondo que exista um modelo com um vetor de parâmetros θ^* que corresponda exatamente ao sistema, tem-se (Barroso, 2006):

$$J_{corr}(\theta^*) < J_{corr}(\hat{\theta}) \quad \forall \quad \hat{\theta} \neq \theta^*. \quad (2.58)$$

2.8 Considerações finais

Os conceitos necessários ao processo de identificação de sistemas não-lineares, bem como os métodos de identificação em malha fechada e otimização bi-objetivo, foram apresentados. Os agrupamentos e os coeficientes de agrupamento de termos são de extrema importância na determinação dos modelos, pois um modelo que contenha termos que não estejam dentro dos agrupamentos de termos efetivos podem apresentar regimes dinâmicos espúrios, em outras palavras, regimes que não sejam exibidos pelo sistema real.

Como neste trabalho é tratado o caso da identificação a partir de dados de malha fechada de um sistema de neutralização de pH, e cujo mesmo possui apenas uma saída estacionária, os agrupamentos de termos Ω_{y^p} com $p > 1$, serão excluídos dos termos candidatos a pertencerem a estrutura do modelo.

Os parâmetros do modelo NARX selecionado serão estimados via mínimos quadrados ordinários e otimização bi-objetivo. Ambos os métodos utilizam como informação auxiliar a curva de titulação do pH, pois espera-se que o modelo, quando em estado estacionário, reproduza da melhor forma possível a característica monotônica estritamente crescente da curva estática do processo.

Conceitos básicos sobre o processo de pH

3.1 Introdução

O processo de neutralização de pH, tem sido por muito tempo, uma referência para problemas não lineares no controle de processos químicos, devido a grande dificuldade apresentada em sua identificação e controle (Corrêa et al., 2006); (Hong et al., 1996); (Kalafatis et al., 1995). Essa dificuldade está relacionada a não-linearidade forte, vislumbrada na curva de titulação do pH. Tal curva apresenta auto ganho próximo da região neutra do pH, e baixo ganho distante deste ponto. Essa não-linearidade também pode sofrer alterações, devido a pequenas mudanças nas condições do processo. Assim sendo, o objetivo desse capítulo consiste em apresentar os conceitos básicos, relacionados ao processo de neutralização do pH.

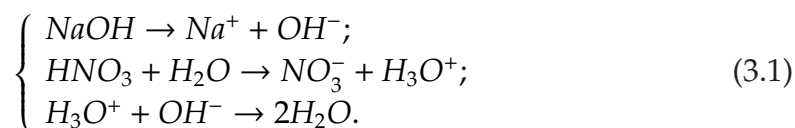
3.2 Neutralização

Segundo (Ylén, 2001), a interação ocorrida entre os íons de H_3O^+ (íons de hidrogênio H^+) oriundos da ionização¹ de uma solução ácida, juntamente aos íons de hidroxila (OH^-) originados da dissociação iônica de uma solução básica, produzem água (H_2O). Essa reação química, caracteriza a neutralização da solução.

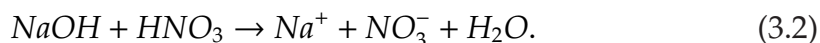
Pode-se considerar por exemplo, a neutralização da mistura de ácido nítrico e hidróxido de sódio, conforme relação estequiométrica dada pela

¹Processo de produzir íons mediante a perda ou o ganho, por molécula ou átomo, de um ou mais elétrons.

equação (3.1).



A reação total da solução ácida com a solução básica pode ser apresentada como na equação (3.2):



Neste caso, a mistura de hidróxido de sódio e ácido nítrico em quantidades iguais formam portanto, uma solução neutra com água e sal. Esse fato caracteriza a neutralização do pH.

3.3 Definição para o pH

Em um processo de pH, as concentrações *hidrogeniônica* $[H^+]$ e *hidroxiliônicas* $[OH^-]$ são, em uma solução, não correlacionadas, sendo que o aumento de uma das soluções propicia a diminuição da outra e vice-versa. Em uma solução ácida existem mais íons de H^+ que íons de OH^- , sendo para soluções alcalinas o inverso (Ylén, 2001). As concentrações de íons de H^+ e OH^- em uma solução neutra, são iguais. Neste sentido, a classificação das soluções quanto a seu nível de acidez, alcalinidade e neutralidade são:

$$\begin{aligned} \{H^+\} > \{OH^-\} &\Rightarrow \text{ácido} \\ \{H^+\} &= \{OH^-\} \Rightarrow \text{neutro} \\ \{H^+\} < \{OH^-\} &\Rightarrow \text{alcalino} \end{aligned}$$

Para realizar medição do nível de acidez de uma determinada solução, usa-se a escala do pH (potencial hidrogeniônico). A escala do pH varia na faixa de 0 a 14, não descartando a possibilidade em que o pH possa assumir valores acima ou abaixo desta faixa. O pH é então definido como:

$$pH = -\log_{10} \{H^+\} \quad (3.3)$$

Ylén (2001) afirma que a 25°C a neutralidade de uma solução é dada por:

$$\begin{aligned} pH < 7 &\Rightarrow \text{ácido} \\ pH = 7 &\Rightarrow \text{neutro} \\ pH > 7 &\Rightarrow \text{alcalino} \end{aligned}$$

3.4 Solução tampão

Em um determinado processo de neutralização de pH é necessário que o valor do pH tangencie seu valor ótimo, ou seja, se mantenha o mais próximo possível de 7 (Ylén, 2001). Isso geralmente ocorre em processos bioquímicos nos quais a solução deve ser insensível às pequenas adições de bases ou ácidos. Devido a esta necessidade, aplica-se a solução tampão ao processo de neutralização. Essa solução é caracterizada por sofrer pequenas variações de pH quando são inseridos na mistura, íons de H^+ ou OH^- . Isso é possível devido à solução conter ácido e base conjugados. Segundo (Ylén, 2001), a solução tampão pode ser considerada como um reservatório dos íons que são liberados quando necessitados na reação. Ao adicionar um ácido à mistura, a solução tampão reage de forma a neutralizar os íons H^+ . Caso venha a ser adicionado uma base, a reação será para neutralizar os íons OH^- .

3.5 Processo de neutralização de pH

O sistema a ser identificado neste trabalho é um processo contínuo de neutralização de pH, implementado fisicamente por (Campos, 2007), como apresentado na Figura 3.1. O reator contínuo, é considerado como sendo perfeitamente agitado onde se tem três fluxos de entrada, dentre eles, um ácido forte HNO_3 (Q_1), um reagente tampão $NaHCO_3$ (Q_2) e por último uma base forte $NaOH$ (Q_3) (Campos, 2007). A medição do pH (pH_m) é realizada na saída (Q_4). O nível no tanque reator (h_m) pode variar segundo as vazões de entrada, onde a vazão de saída depende exclusivamente do nível atual do mesmo. Por outro lado, a alimentação dos reagentes (Q_1 , Q_2 e Q_3) é feita por bombas dosadoras com velocidade variável, sendo que existe a presença de um agitador dentro do reator para acelerar a reação

da mistura. Porém, para modelar o processo de neutralização, algumas considerações foram feitas por (Campos, 2007), sendo elas:

- Não existem distúrbios;
- Mistura perfeita;
- Densidade constante;
- Reações rápidas;
- Completa solubilidade dos íons envolvidos;
- Não existe outra substância na entrada ou restos no tanque, exceto aquelas provenientes de Q_1 , Q_2 e Q_3 .

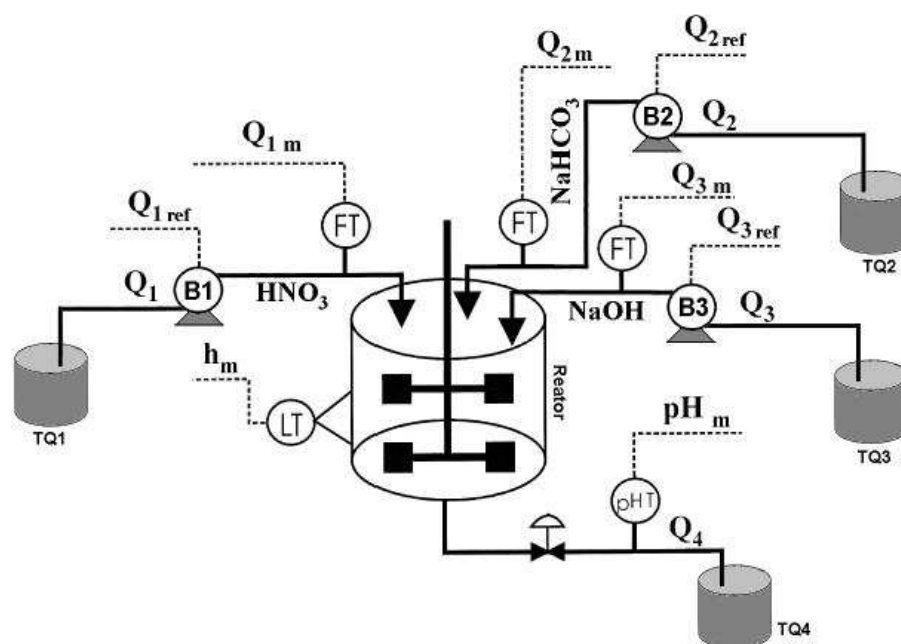


Figura 3.1: Esquema do processo a ser identificado. Adaptado de (Henrique et al., 2000)

Campos (2007) deixa claro que, além do reator do processo de neutralização de pH, na Figura 3.1 são apresentados os três tanques de armazenamento dos reagentes TQ_1 , TQ_2 e TQ_3 e um tanque responsável pela coleta

TQ_4 de todo fluxo Q_4 . O sinal de referência de vazão para as bombas B_1 , B_2 e B_3 , são respectivamente: Q_{1ref} , Q_{2ref} e Q_{3ref} . Os sinais de vazão, medidos em todas as bombas são: Q_{1m} , Q_{2m} e Q_{3m} .

Detalhes a respeito da modelagem caixa branca do processo de neutralização de pH são encontrados em (Campos, 2007). Pois nesse trabalho, o autor realizou a construção da planta piloto para efeito de simulação física. Em paralelo, (Campos, 2007) realizou a modelagem caixa branca obtendo as equações que regem a física do processo. Ambos apresentam resultados similares quando simulados.

3.6 Considerações finais

O processo de neutralização de pH, vem sendo estudado nas últimas décadas por diversos autores (Corrêa et al., 2006); (Hong et al., 1996); (Kalafatis et al., 1995) dentre outros, com objetivos tanto na área de identificação, quanto em controle. Em respeito a identificação de sistemas, busca-se modelos que sejam capazes de reproduzir a dinâmica e o comportamento em estado estacionário do processo. Pois espera-se que os modelos uma vez identificados, sejam capazes de reproduzir a forte não-linearidade e o comportamento monotônico estritamente crescente do processo, em uma faixa diferente da dos dados de identificação.

Atualmente novas técnicas, envolvendo otimização, são agregadas à identificação caixa-cinza, trazendo benefícios em relação a outros métodos os quais estimam parâmetros via mínimos quadrados. Isso possibilita que informações auxiliares como, por exemplo, a curva de titulação do pH, sejam usadas na estimação de parâmetros, afim de que o modelo com novos parâmetros reproduza da melhor forma possível a característica monotônica estritamente crescente do pH.

No próximo capítulo, serão apresentados os resultados obtidos pelo procedimento proposto, quando aplicado ao processo de neutralização de pH.

Procedimento Metodológico

4.1 Introdução

A identificação de sistemas em *Malha Fechada* é algo que a muito desperta interesse de pesquisadores na área. Esse fato, se deve a impossibilidade de se realizar testes em malha aberta em sistemas reais e industriais em muitos casos, por exemplo. Isso faz com que maior atenção seja dada à identificação de sistemas em malha fechada.

Por essa razão, novas técnicas para identificação de sistemas (Barroso et al., 2006b); (Barroso e Nepomuceno, 2006); (Barroso, 2006) em malha aberta serão testadas na identificação em malha fechada. Um processo de neutralização de pH será identificado e ao mesmo tempo usado para testar essas novas técnicas. Assim pretende-se verificar, se as novas técnicas de identificação conduzem a modelos, que incorporam as características do sistema modelado em malha fechada.

4.2 Caracterização do problema

O problema proposto consiste em identificar em malha fechada, modelos NARX polinomiais que sejam capazes de incorporar as características de um processo de neutralização de pH. Para isso, novas técnicas de identificação são usadas, desde que a curva estática do processo modelado seja conhecida. Dessa forma o procedimento proposto conduz a modelos que incorporam as características do processo não-linear considerado.

4.3 Procedimento

Nesta seção, é proposta uma metodologia para identificação de sistemas não-lineares em malha fechada. Essa metodologia se baseia nas técnicas tradicionais de identificação de sistemas e em técnicas de otimização bi-objetivo, como apresentadas nas seções anteriores. O principal objetivo dessa metodologia é incorporar no processo de estimação de parâmetros de um modelo NARX polinomial, a característica monotônica estritamente crescente do processo de neutralização de pH. Portanto, a metodologia proposta consiste nas seguintes etapas:

- Aplicar o método direto, descrito na seção 2.6.1, ao processo de neutralização de pH em malha fechada a fim de obter dados de entrada u e saída y para identificação;
- Usando a taxa de redução de erro ERR (do inglês *error reduction ratio*), selecionar os termos mais significativos para compor a estrutura do modelo NARX polinomial. Termos com y^P para $P > 1$ devem ser excluídos dos agrupamentos de termos candidatos, devido ao processo oferecer apenas uma saída estacionária para cada entrada. Os parâmetros do modelo são estimados usando o método tradicional de mínimos quadrados ordinários;
- A partir da estrutura selecionada no tópico anterior, escrever a função $\bar{y} = f(\bar{u})$ ou $\bar{y} = f(\bar{u}\bar{y})$, a partir da Equação (2.30);
- Selecionar o conjunto de valores de entrada $\bar{u} = [\bar{u}_0, \bar{u}_1, \dots, \bar{u}_n]$ que serão usados para verificar o comportamento monotônico estritamente crescente do modelo. Em outras palavras, verificar a curva estática do modelo;
- Estimar novamente todos os parâmetros do modelo a partir do método de otimização bi-objetivo descrito na Seção 2.7;
- Validar o modelo.

4.4 Dados para Modelagem

Os dados do processo de neutralização de pH, a serem aplicados no procedimento proposto são originais de um modelo fenomenológico e de

uma planta¹ em escala de laboratório. Campos (2007) realizou a modelagem caixa branca e a construção da planta de neutralização de pH em malha aberta, pois seu trabalho demandava apenas dados de malha aberta. Como nesse trabalho é tratado o caso de identificação a partir de dados de malha fechada, ambos os processos modelados por (Campos, 2007), sofreram alterações. O modelo fenomenológico e a planta que antes operavam em malha aberta, passaram a operar em malha fechada. A Figura 4.1 ilustra um típico processo em malha fechada representando a planta e o modelo fenomenológico em malha fechada.

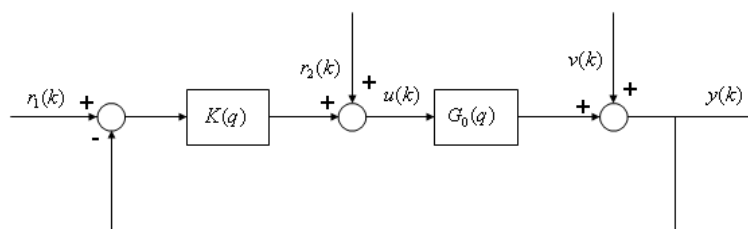


Figura 4.1: Sistema em Malha Fechada.

Dois blocos em cascata se fazem presentes na composição da Figura 4.1. O primeiro $K(q)$ é o controlador *PI* implementado junto a um desaturador integral. Já o segundo bloco $G_0(q)$ é definido como processo, ou seja, a planta.

A planta e o modelo fenomenológico foram simulados em malha fechada e os dados armazenados. No esquema mostrado na Figura 4.1, $u(k)$ foi definido como sinal de entrada ao passo que $y(k)$, foi definido como sinal de saída. $r_1(k)$ foi definido como sinal de excitação, sendo um sinal similar ao sinal *PRBS*, porém com degraus em patamares diferentes. Esse sinal simulou a vazão de base, substância conhecida como Hidróxido de Sódio ($NaOH$). Além disso, outras duas substâncias foram usadas na simulação da planta, sendo a vazão de cada uma delas, mantida constante. Essas substâncias são conhecidas como ácido nítrico (HNO_3) e bicarbonato de sódio ($NaHCO_3$), como apresentadas no Capítulo anterior.

Para o caso da planta real de neutralização de pH, acredita-se que exista ruído nos dados extraídos da simulação. Isso em função dos diversos

¹A planta localiza-se atualmente no Laboratório de Identificação, Análise e Controle de Sistemas Não-lineares *Liac – nl* do Centro Universitário do Leste de Minas Gerais - UnilesteMG - [http : //professores.unilestemg.br/ correa/Grupo_pq.html](http://professores.unilestemg.br/correa/Grupo_pq.html).

componentes eletrônicos da planta. Nesse caso acredita-se que $v(k)$, esteja presente nos dados reais do processo de pH.

Na Figura 4.2 são mostrados os dados de entrada $u(k)$ e saída $y(k)$ do modelo fenomenológico. Na Figura 4.3, também são mostrados os dados de entrada $u(k)$ e saída $y(k)$, porém esses são originais da planta de neutralização de pH, simulada em malha fechada. Em ambos os casos o tempo de amostragem foi de 3s.

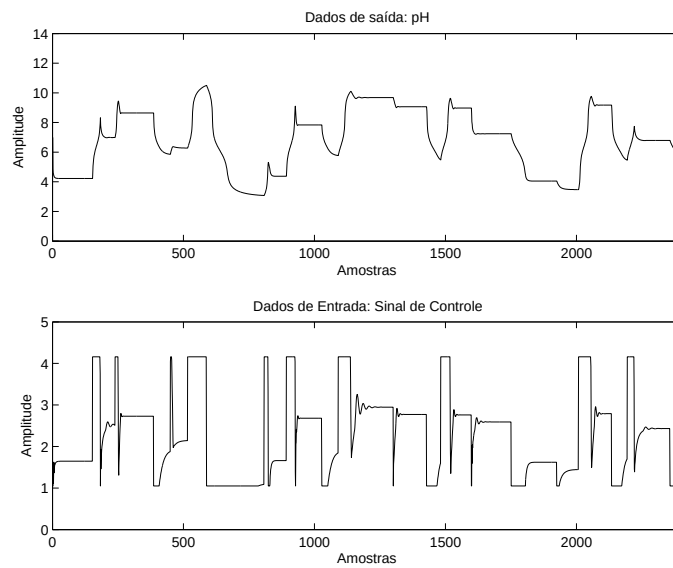


Figura 4.2: Dados de Entrada e Saída originais do modelo fenomenológico em Malha Fechada.

O sinal de controle $u(k)$, definido como sinal de entrada, é mostrado no painel inferior das Figuras 4.2 e 4.3, e a variação do potencial hidrogeniônico (pH), definido como sinal de saída, é mostrado no painel superior. A primeira metade dos dados da Figura 4.2, destinou-se à identificação, sendo a segunda metade, à validação dos modelos. Já na Figura 4.3, a segunda metade dos dados, destinou-se à identificação, sendo a primeira metade, à validação dos modelos. O fato de se ter usado a segunda metade dos dados da Figura 4.3 para identificação, justifica-se por sua faixa de operação, pois observa-se que esses dados abrangem maior faixa de variação do pH.

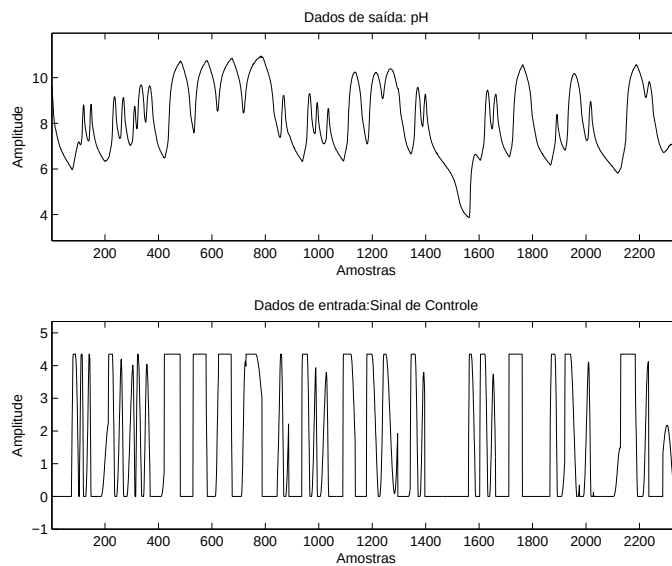


Figura 4.3: Dados de Entrada e Saída originais da planta de neutralização de pH em Malha Fechada.

4.5 Considerações finais

Nesse Capítulo, foi apresentada uma abordagem para identificação de sistemas, usando novas técnicas de modelagem. Sabe-se, que em alguns processos industriais por exemplo, nem sempre é possível realizar testes em malha aberta. Isso faz com que a identificação de sistemas em malha fechada seja aplicada. Mas nesse caso, nem sempre os dados para modelagem trazem consigo todas as informações necessárias do processo a ser modelado. A otimização bi-objetivo possibilita compensar essa falta de informação, inserindo no processo de estimação de parâmetros, as informações auxiliares do sistema. Mas para que essa se aplique, é necessário que o processo modelado ofereça como informação auxiliar, seu comportamento em estado estacionário. Em outras palavras, é necessário que a curva estática do processo modelado seja conhecida.

Resultados e discussões

5.1 Introdução

O uso de informação auxiliar na modelagem matemática, tem desempenhado importante papel na identificação de sistemas não-lineares. Geralmente, essas informações possibilitam representar por meio de estruturas mais simples, as não-linearidades intrínsecas em um determinado processo não-linear. Mas para isso, existe um custo a se pagar. Os algoritmos de identificação tornam-se mais complexos.

A otimização bi-objetivo tornou possível a aplicação dessas novas técnicas, ao processo de modelagem ao possibilitar a inserção de informações auxiliares do processo modelado, na escolha dos parâmetros do modelo. No caso do processo de pH, por exemplo, essas novas técnicas têm como principal objetivo, inserir no processo de estimação de parâmetros do modelo escolhido, o comportamento monotônico estritamente crescente de sua curva de titulação. Em outras palavras, espera-se que os modelos NARX polinomiais sejam capazes de reproduzir de forma global, todos os pontos da curva de titulação do pH.

Duas estruturas NARX polinomiais são usadas na modelagem do processo de pH pelo método proposto. Em primeiro estágio, os modelos são identificados com apenas termos de entrada e saída, ou seja, termos em u e y . Em segundo estágio, os modelos são identificados com termos cruzados uy , além dos termos de entrada e saída. Em ambos os casos para y^P com $P = 1$, pois deseja-se verificar se a estrutura usada, influencia a reprodução das características do referido processo.

5.2 Identificação em Malha Fechada dos Modelos NARX polinomiais

Os resultados apresentados e discutidos nessa Seção, são originais da identificação do sistema de neutralização de pH em malha fechada. Primeiramente, o procedimento proposto no Capítulo 4 foi usado para identificar modelos usando dados simulados do sistema de pH, ou seja, dados gerados por um modelo fenomenológico em malha fechada. Posteriormente, tal procedimento foi usado para identificar modelos usando dados reais da planta de pH. Em ambos os casos, modelos com regressores de entrada e saída foram identificados, pois o objetivo da presente seção, é apresentar os modelos que explicam as características do sistema de pH.

5.2.1 Modelo para dados simulados

O modelo NARX polinomial identificado para os dados simulados, é apresentado nessa seção. Sua estrutura é apresentada pela Equação (5.1) sendo composta por 21 (Vinte um) termos de processo, sendo 20 (Vinte) termos de entrada $u(k-1)$ e 1 (Um) termo de saída $y(k-1)$. Os parâmetros do modelo, equação (5.1), são mostrados na Tabela 5.1.

$$\begin{aligned}
 y(k) = & \theta_1 y(k-1) + \theta_2 u(k-1) + \theta_3 u(k-2) + \theta_4 u(k-2)^5 + \\
 & \theta_5 u(k-2)u(k-1) + \theta_6 u(k-2)^2 u(k-1) + \theta_7 u(k-2)^2 + \\
 & \theta_8 u(k-1)^2 + \theta_9 u(k-2)u(k-1)^4 + \theta_{10} u(k-2)^2 u(k-1)^2 + \\
 & \theta_{11} u(k-1)^4 + \theta_{12} y(k-2) + \theta_{13} u(k-2)^2 u(k-1)^3 + \\
 & \theta_{14} u(k-2)^3 u(k-1)^2 + \theta_{15} u(k-2)^3 u(k-1) + \theta_{16} u(k-1)^5 + \\
 & \theta_{17} + \theta_{18} u(k-2)u(k-1)^3 + \theta_{19} u(k-2)^4 u(k-1) + \\
 & \theta_{20} u(k-2)^3 + \theta_{21} u(k-2)u(k-1)^2.
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

Observa-se que o modelo (5.1) apresenta grau de não-linearidade $\ell = 5$. Para especificar tal não-linearidade, um polinômio foi usado para ajustar-se à característica não-linear do sistema. Esse teste foi realizado em ambiente MATLAB¹ usando duas funções e a curva de titulação do pH. Uma

¹Matrix Laboratory MathWorks.

função conhecida como *polyfit*² e outra conhecida como *polyval*³. Essas funções permitem obter um polinômio que melhor se ajuste a uma determinada curva. Para o presente caso, um polinômio de grau 5 (cinco), foi suficiente para se ajustar à curva de titulação do sistema. Logo o grau de não-linearidade do modelo (5.1) foi especificado igual a 5 (cinco). O modelo (5.1) com 21 (Vinte e um) termos foi o que apresentou menor índice de validação dinâmica *RMSE*, quando comparado aos demais modelos obtidos para os dados simulados. Esse índice obtido e apresentado na Tabela 5.2, possibilitou escolher o modelo (5.1) para representar a dinâmica do sistema.

A validação do modelo (5.1) com parâmetros estimados por mínimos quadrados, é mostrada pela Figura 5.1.

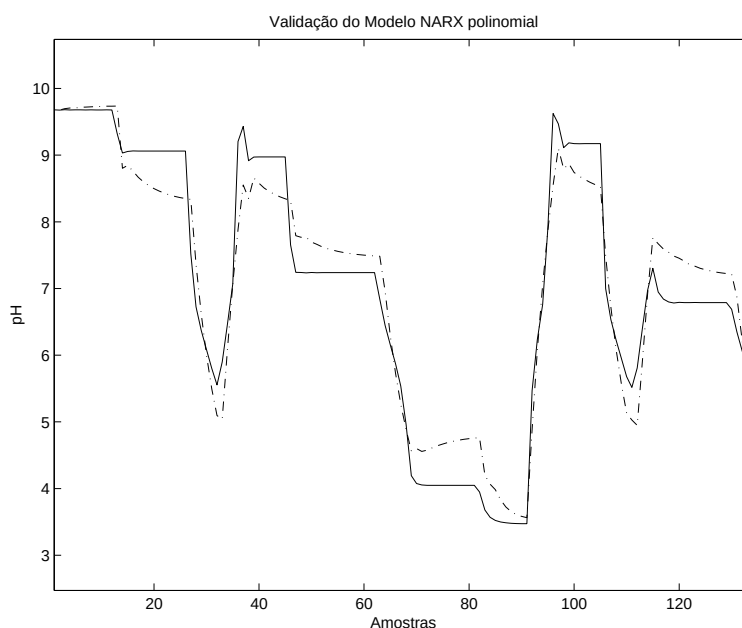


Figura 5.1: Validação do Modelo 5.1 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado.

² $P = \text{POLYFIT}(X, Y, N)$. Encontra os coeficientes de um polinômio $P(x)$ de grau N que se aproxima de um vetor Y da melhor forma, pelo método de mínimos quadrados.

³ $Y = \text{POLYVAL}(P, X)$. Retorna o valor de um polinômio evoluído em X . P é um vetor de tamanho $N+1$ onde os elementos são os coeficientes de um polinômio em série descendente de potência.

O próximo passo consiste em representar o modelo (5.1) na forma estática $\bar{y} = f(\bar{u})$, a qual é dada pela Equação (5.2). A representação estática do modelo, possibilita observar se a não-linearidade estática do sistema foi incorporada pelo modelo. A Figura 5.2 mostra a não-linearidade estática do modelo 5.1 sobrepondo a curva de titulação do pH.

$$\bar{y} = -3,2334\bar{u}^5 + 38,7608\bar{u}^4 - 176,7629\bar{u}^3 + 382,8643\bar{u}^2 - 389,4045\bar{u} + 151,4571 \quad (5.2)$$

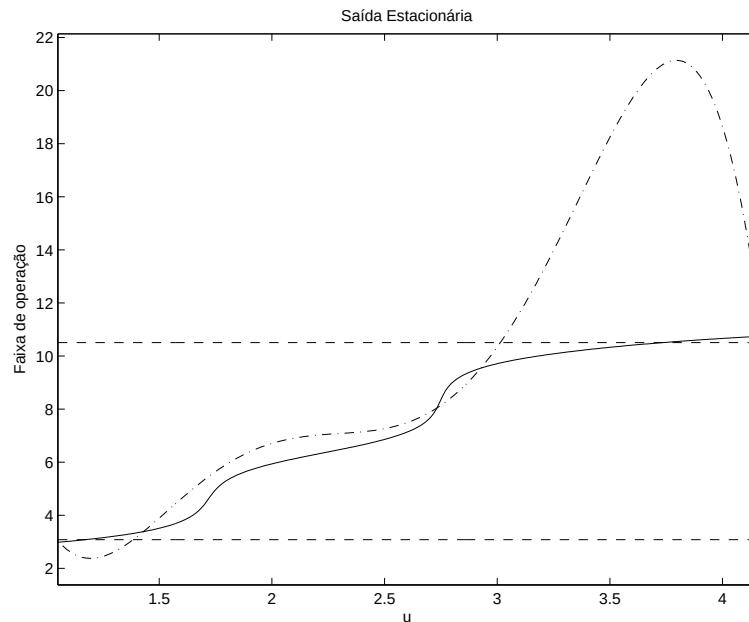


Figura 5.2: Curva estática característica do modelo 5.1 cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado.

A correspondente estática do modelo (5.1) é apresentada na Figura 5.2. Observa-se que o modelo (5.1) em estado estacionário se aproximou da curva de titulação do pH, apenas localmente, ou seja, próximo da região neutra, $pH = 7$. Globalmente, observa-se na Figura 5.2, que o modelo (5.1) não foi capaz de incorporar as características da não-linearidade do

sistema. Na Tabela 5.2 é apresentado o índice de correlação entre as curvas da Figura 5.2.

Com relação a característica monotônica estritamente crescente da não-linearidade do sistema, observa-se que não foi incorporada pelo modelo (5.1), pois sua curva estática apresenta pontos com derivada negativa, como mostrado na Figura 5.5.

O próximo passo consiste em reestimar os parâmetros do modelo (5.1) pelo método de otimização bi-objetivo. Esse processo possibilita inserir no processo de estimação de parâmetros, informações auxiliares do sistema modelado, de forma a compensar a falta de informação nos dados para identificação. A Tabela 5.1 apresenta em sua segunda coluna, os parâmetros do modelo (5.1) estimados pelo bi-objetivo.

Tabela 5.1: *Parâmetros do modelo 5.1 NARX polinomial, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Simulados do Modelo Fenomenológico.*

Parâmetros	MQ	BIOBJ
θ_1	0,8398	0,9187
θ_2	-8,4047	-11,3357
θ_3	-58,0069	-4,2993
θ_4	0,1320	-0,0410
θ_5	29,7387	11,8118
θ_6	-28,0451	-6,6556
θ_7	40,3289	-0,5889
θ_8	-4,7714	2,7479
θ_9	0,1908	0,0003
θ_{10}	0,5466	1,0121
θ_{11}	0,5229	-0,1576
θ_{12}	-0,0103	-0,0602
θ_{13}	0,1478	0,1465
θ_{14}	-0,2256	-0,2783
θ_{15}	7,9206	0,8987
θ_{16}	-0,0756	0,0333
θ_{17}	25,8305	6,8810
θ_{18}	-2,3796	-0,5994
θ_{19}	-0,7209	0,0503
θ_{20}	-8,9070	0,9791
θ_{21}	6,8058	-0,1133

A validação dinâmica do modelo (5.1) com parâmetros estimados pelo bi-objetivo é mostrada na Figura 5.3. Observa-se que a dinâmica do modelo (5.1) com parâmetros estimados via bi-objetivo, não difere significativamente em relação ao modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados. O índice *RMSE* calculado entre as dinâmicas da Figura 5.3 e mostrados na Tabela 5.2, confirma essa conclusão.

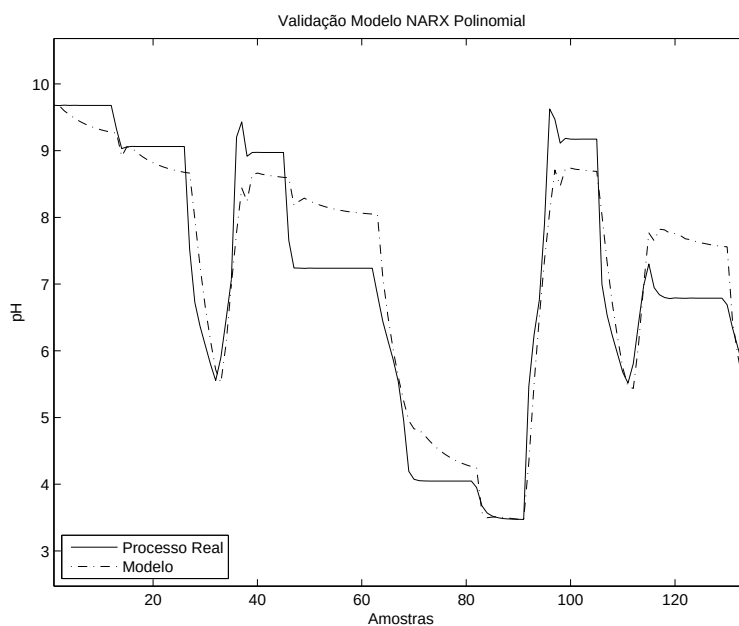


Figura 5.3: Validação do Modelo 5.1 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado.

Por outro lado, a Equação (5.3) apresenta o modelo NARX polinomial em estado estacionário, acrescida de informação auxiliar do processo. A Figura 5.4 mostra o comportamento estático da Equação (5.3) sobrepondo a curva de titulação do pH.

$$\bar{y} = -0,6287\bar{u}^5 + 8,1571\bar{u}^4 - 40,9326\bar{u}^3 + 98,8407\bar{u}^2 - 0,1582\bar{u} + 0,0696 \quad (5.3)$$

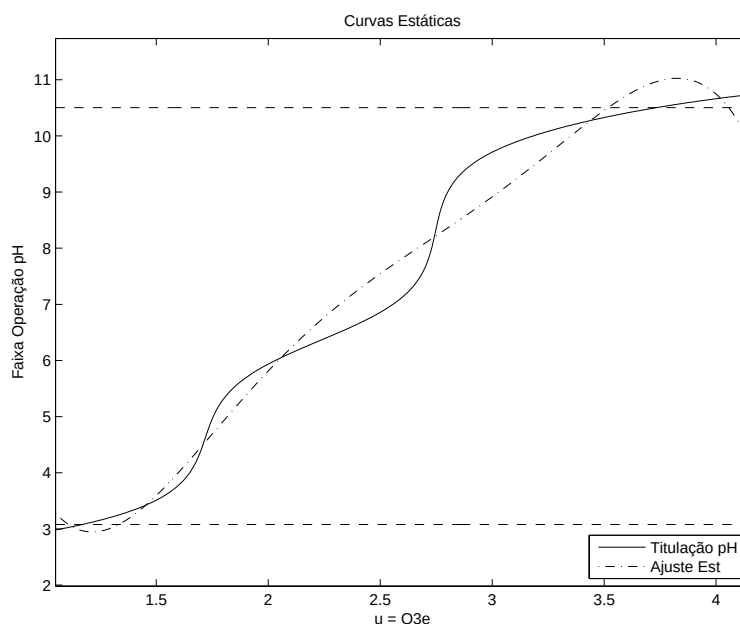


Figura 5.4: Curva estática característica do modelo 5.1 cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado.

Tabela 5.2: Índices de erros do modelo 5.1: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas

MODELO	Dinâmico	Estático
MQ	0,2537	0,9021
BIOBJ	0,3198	0,9877

Observa-se na Figura 5.4 que o modelo (5.1) com novos parâmetros, tende ao comportamento global da curva de titulação do pH, porém sem muita similaridade. Localmente, verifica-se que o referido modelo apresenta melhor resultado com parâmetros estimados via mínimos quadrados, como mostrado na Figura 5.2. Isso não quer dizer que o procedimento proposto não se mostrou eficiente, pois se observa na Figura 5.4 menos pontos

com derivadas negativas. Em outras palavras, o procedimento proposto agregou maior parcela monotônica crescente da curva de titulação do pH, ao modelo. Na Figura 5.5 são mostradas as derivadas da curva de titulação do pH e curvas do modelo.

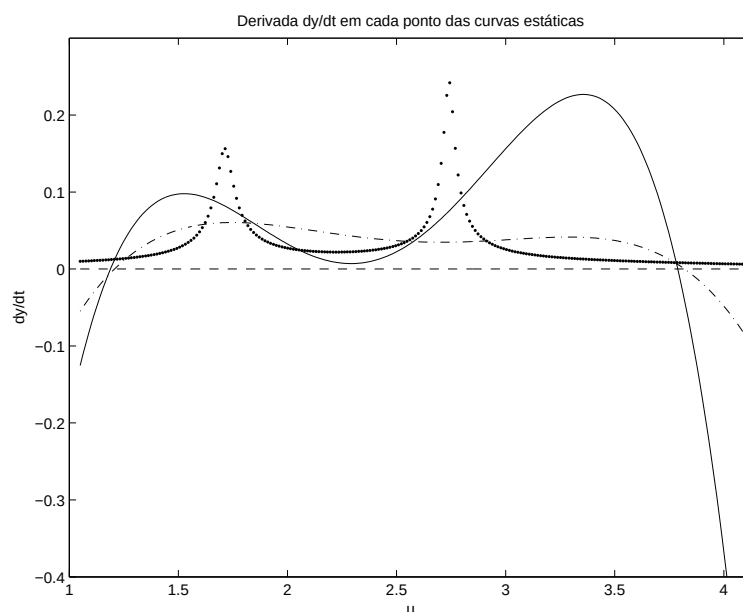


Figura 5.5: Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.1. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados, e, em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo.

Nota-se na Figura 5.5, que há menos pontos com derivada negativa com o uso do procedimento bi-objetivo.

5.2.2 Modelo para dados Reais

Nessa seção, o procedimento proposto é aplicado aos dados de entrada e saída da planta de neutralização de pH, como mostrado no Capítulo 3. As mesmas especificações estabelecidas na escolha da estrutura do modelo 5.1 serão aqui adotadas. Apenas a taxa de decimação difere da aplicada aos dados da Seção 5.2.1. Por outro lado, por meio do critério de *ERR* foram selecionados 22 termos de processo para representar a dinâmica nesses

dados. Com base no índice *RMSE* de validação dinâmica, o modelo (5.4) apresenta melhor resultado. A Tabela 5.4 apresenta esse índice.

A Figura 5.6 apresenta o modelo NARX polinomial validado para os dados da planta. Seus respectivos parâmetros estimados, via mínimos quadrados, são mostrados na primeira coluna da Tabela 5.3.

$$\begin{aligned}
 y(k) = & \theta_1 y(k-1) + \theta_2 u(k-1) + \theta_3 + \theta_4 u(k-2)u(k-1)^4 + \\
 & \theta_5 u(k-1)^2 + \theta_6 u(k-2)u(k-1) + \theta_7 u(k-2)u(k-1)^2 + \\
 & \theta_8 u(k-2) + \theta_9 u(k-1)^3 + \theta_{10} u(k-1)^4 + \theta_{11} u(k-1)^5 + \\
 & \theta_{12} u(k-2)^4 u(k-1) + \theta_{13} u(k-2)^3 u(k-1) + \theta_{14} u(k-2)^5 + \\
 & \theta_{15} u(k-2)^4 + \theta_{16} u(k-2)^2 u(k-1) + \theta_{17} u(k-2)^3 + \\
 & \theta_{18} u(k-2)^2 + \theta_{19} y(k-2) + \theta_{20} u(k-2)^3 u(k-1)^2 + \\
 & \theta_{21} u(k-2)^2 u(k-1)^2 + \theta_{22} u(k-2)^2 u(k-1)^3.
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

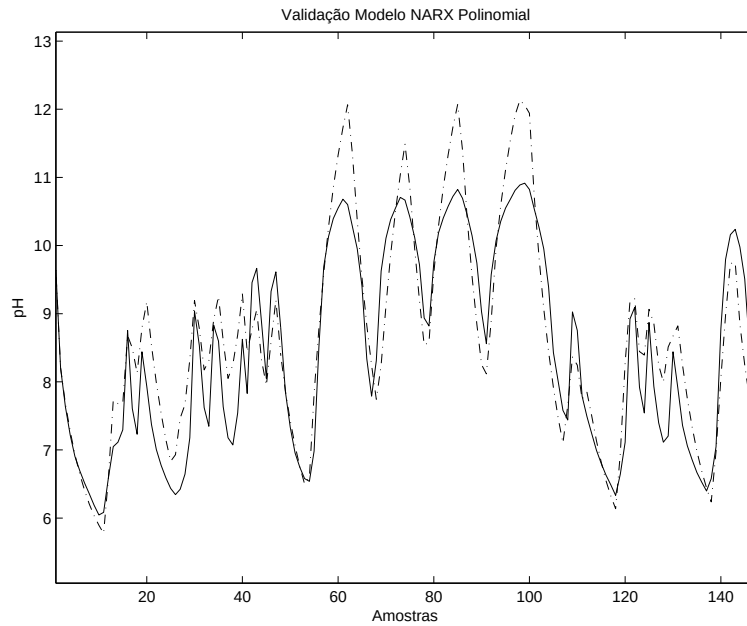


Figura 5.6: Validação do Modelo 5.4 NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados reais. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo e em traço-ponto, a simulação livre do modelo validado.

Seguindo o procedimento proposto, representa-se o modelo (5.4) na forma estática conforme mostrado abaixo.

$$\bar{y} = 0,1974\bar{u}^5 - 2,4229\bar{u}^4 + 10,5660\bar{u}^3 - 19,0201\bar{u}^2 + 13,5679\bar{u} + 5,1520 \quad (5.5)$$

Um ponto importante que deve ser levado em consideração é que a curva estática do processo real de pH em malha fechada não é conhecida. Mas, para que o procedimento proposto se aplique, considera-se a curva teórica como sendo similar à curva real do referido processo. Mas nesse caso, não se pode garantir que bons resultados sejam obtidos pelo modelo, usando o método proposto.

A Figura 5.7 apresenta a curva estática do modelo (5.4) comparada a curva teórica do sistema de neutralização de pH.

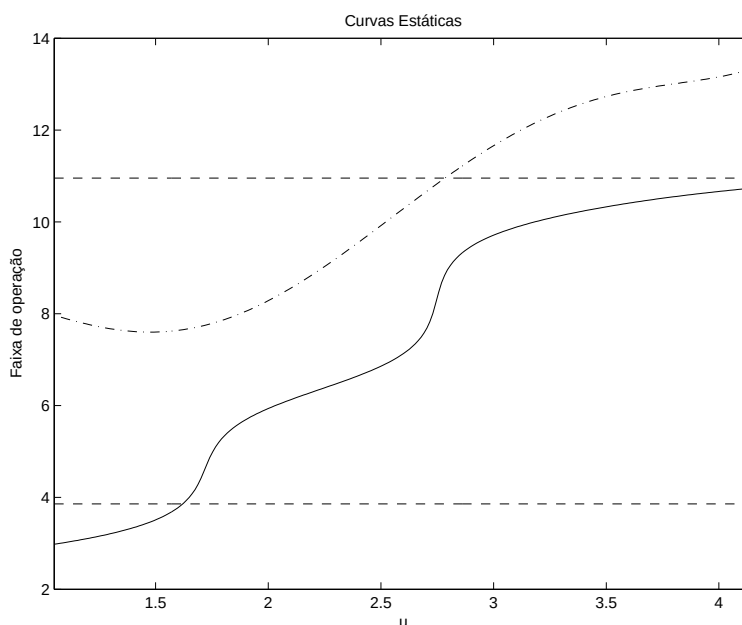


Figura 5.7: Curva estática característica do modelo 5.4 cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados reais.

Observa-se na Figura 5.7 que o modelo (5.4), em estado estacionário, não apresenta similaridade com a curva de titulação do pH. Esse fato possibilita levantar como hipótese uma curva estática para o processo real diferente da curva teórica do processo de pH.

Como a curva teórica do processo de pH será considerada como informação auxiliar, aplica-se o procedimento proposto ao modelo 5.4. Dessa maneira, novos parâmetros com informação *a priori* do processo são estimados para modelo 5.4. A Tabela 5.3 os apresenta em sua segunda coluna.

Tabela 5.3: *Parâmetros do modelo 5.4 NARX polinomial estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Reais.*

Parâmetros	MQ	BIOBJ
θ_1	0,8925	0,8388
θ_2	1,4049	0,8429
θ_3	0,7825	1,3881
θ_4	0,0013	0,0035
θ_5	-1,1229	-0,6389
θ_6	-0,3010	-1,6322
θ_7	0,1609	0,5129
θ_8	0,6558	0,1458
θ_9	0,5499	0,4522
θ_{10}	-0,1346	-0,1327
θ_{11}	0,0122	0,0125
θ_{12}	-0,0275	-0,0406
θ_{13}	0,1550	0,1674
θ_{14}	0,0318	0,0405
θ_{15}	-0,3116	-0,3604
θ_{16}	-0,1657	0,3631
θ_{17}	1,0596	1,0097
θ_{18}	-1,4649	-0,9196
θ_{19}	-0,0444	-0,0610
θ_{20}	0,0171	0,0442
θ_{21}	-0,0767	-0,2940
θ_{22}	-0,0048	-0,0044

O índice *RMSE* obtido na validação dinâmica do modelo (5.4) com

novos parâmetros é mostrado na Tabela 5.4 ao passo que a Figura 5.8 apresenta a validação do modelo com novos parâmetros.

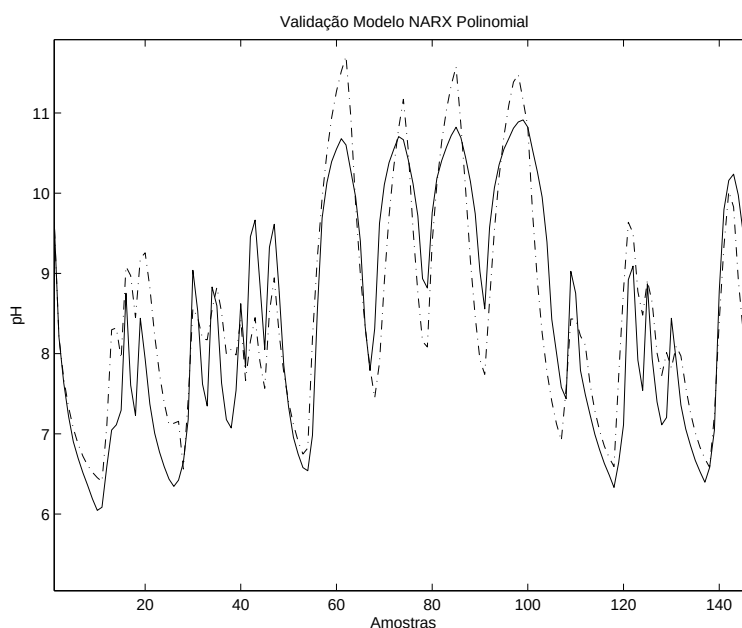


Figura 5.8: Validação do Modelo NARX polinomial, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado.

A Equação (5.6) apresenta a função estática do modelo (5.4) com parâmetros estimados pelo bi-objetivo. Já na Figura 5.9 é mostrado a curva estática frente à curva de titulação do pH.

$$\bar{y} = 0,2510\bar{u}^5 - 2,7893\bar{u}^4 + 10,5230\bar{u}^3 - 14,3610\bar{u}^2 + 4,4499\bar{u} + 6,2479 \quad (5.6)$$

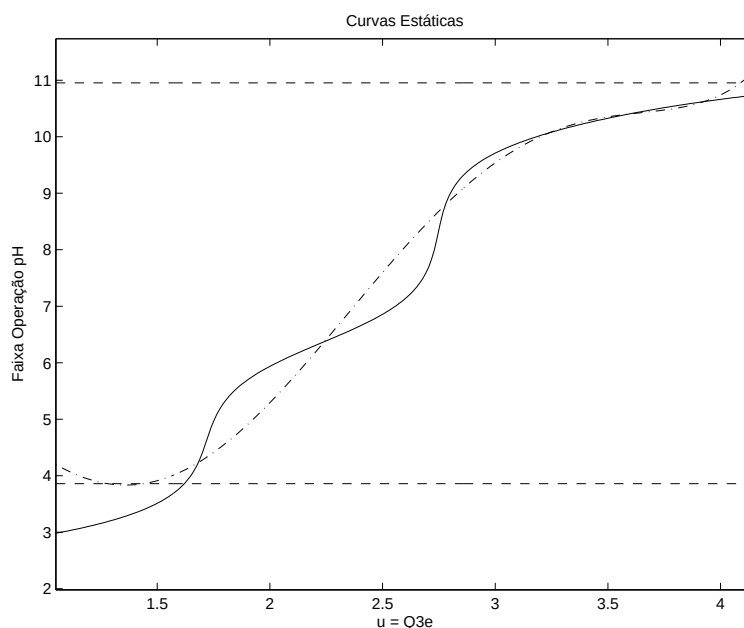


Figura 5.9: Curva estática característica do modelo 5.4 cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo, sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados reais

Localmente, observa-se que o modelo (5.4) com parâmetros estimados pelo bi-objetivo apresenta bom resultado quando comparado com a Figura 5.7. Analisando a Figura 5.9 de forma global, observa-se que bons resultados não são apresentados. Pois como mostrado na Figura 5.9 a Equação (5.6) tende a reproduzir a titulação do pH apenas dentro da faixa de operação. Nesse caso observa-se que apenas o comportamento monotônico estritamente crescente do processo foi incorporado pelos parâmetros do modelo (5.4). O índice de correlação existente entre as curvas da Figura 5.9 é mostrado na Tabela 5.4.

Com relação à validação dinâmica do modelo (5.4) com novos parâmetros, verifica-se pelo índice *RMSE* mostrado na Tabela 5.4, que bom resultado não foi constatado. Por outro lado, observa-se que a curva estática do processo Figura 5.9 não é similar à curva teórica. Logo esse fato possibilita constatar que o processo real não foi submetido à mesma condição de operação do processo simulado. Pois no processo simulado

considera-se água destilada ao passo que no processo real esta não foi usada.

A característica monotônica estritamente crescente do modelo (5.4), é mostrada na Figura 5.10. Observa-se que, boa parte de tal característica é incorporada pelas curvas estáticas. Nota-se que as derivadas mostradas na Figura 5.10 são positivas em praticamente todos os pontos.

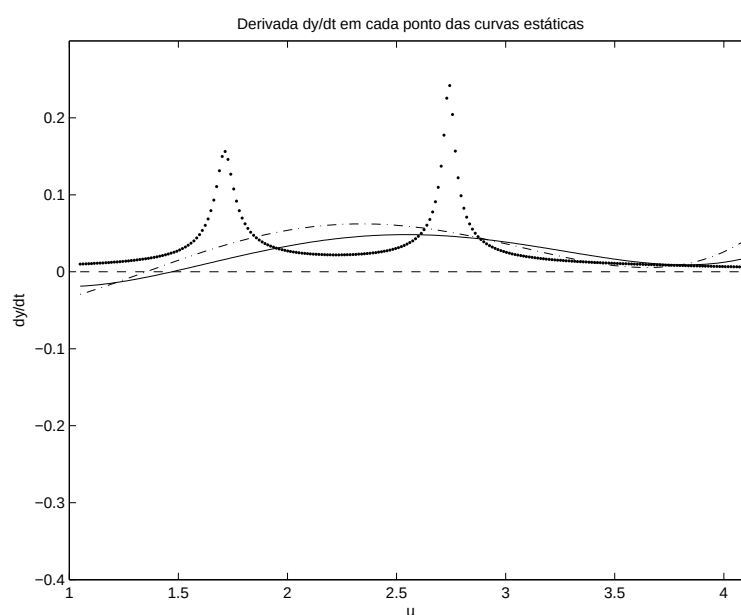


Figura 5.10: Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.4. Em ponto-ponto tem-se a derivada da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados, e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados reais.

Tabela 5.4: Índices de erros do modelo 5.4: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.

MODELO	Dinâmico	Estático
MQ	0,4462	0,9739
BIOBJ	0,4834	0,9859

5.3 Identificação em Malha Fechada dos Modelos NARX polinomiais com Termos Cruzados

Nessa seção serão apresentados os modelos com termos cruzados, identificados para o sistema de pH em malha fechada. A motivação para incluir nos modelos esses termos, foi o bom ajuste que os mesmos apresentaram para a não-linearidade do sistema de pH, usando o critério de *ERR*. A Figura 5.11 apresenta a curva de titulação do pH frente ao seu ajuste usando além dos termos de entrada e saída, os agrupamentos de termos cruzados. Para o presente caso, o grau de não-linearidade $\ell = 4$ foi o suficiente para se obter um bom ajuste. Logo os modelos identificados e apresentados nas seções posteriores, possuem grau de não-linearidade $\ell = 4$.

Outros pontos que justificam a presença dos termos cruzados nos modelos, são os seguintes. *i)* o processo de neutralização de pH possui constante de tempo variável o que justifica o uso dos termos cruzados nos modelos NARX polinomiais; *ii)* os termos cruzados influenciam no ganho do modelo, pois se constata na curva de titulação do pH alto ganho próximo do pH neutro; *iii)* acredita-se que esses agrupamentos tenham influência na dinâmica e no número de termos do modelo. Nesse caso, o procedimento proposto é aplicado aos modelos NARX polinomiais obtidos com base nas considerações mencionadas.

5.3.1 Modelo para dados simulados

O modelo NARX polinomial com termos cruzados $\Omega_{y^p u^m}$ com $p = 1$ e $m \geq 1$ foi identificado para os dados simulados, sendo representado pela Equação (5.7). Dentre os modelos identificados, o modelo (5.7) incorporou melhor as características do modelo caixa branca, apresentando menor índice de validação, como mostrado na Tabela 5.6. Seus parâmetros estimados via mínimos quadrados ordinários são mostrados na Tabela 5.5. Já sua validação dinâmica é observado na Figura 5.12.

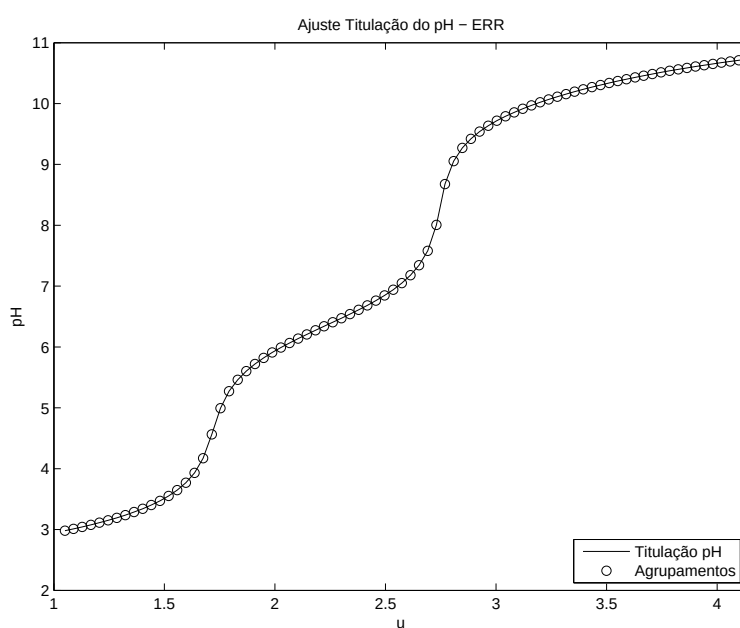


Figura 5.11: Ajuste da curva teórica de titulação do sistema de pH pelo método de ERR. Agrupamentos de termos cruzados foram necessários para um bom ajuste da não-linearidade estática do referido sistema.

$$\begin{aligned}
y(k) = & \theta_1 y(k-1) + \theta_2 u(k-1) + \theta_3 u(k-2) + \theta_4 u(k-2)^4 + \\
& \theta_5 u(k-2)u(k-1) + \theta_6 u(k-2)u(k-1)^2 y(k-2) + \\
& \theta_7 u(k-2)^3 y(k-2) + \theta_8 u(k-2)^2 u(k-1) y(k-2) + \theta_9 u(k-1)^2. \quad (5.7)
\end{aligned}$$

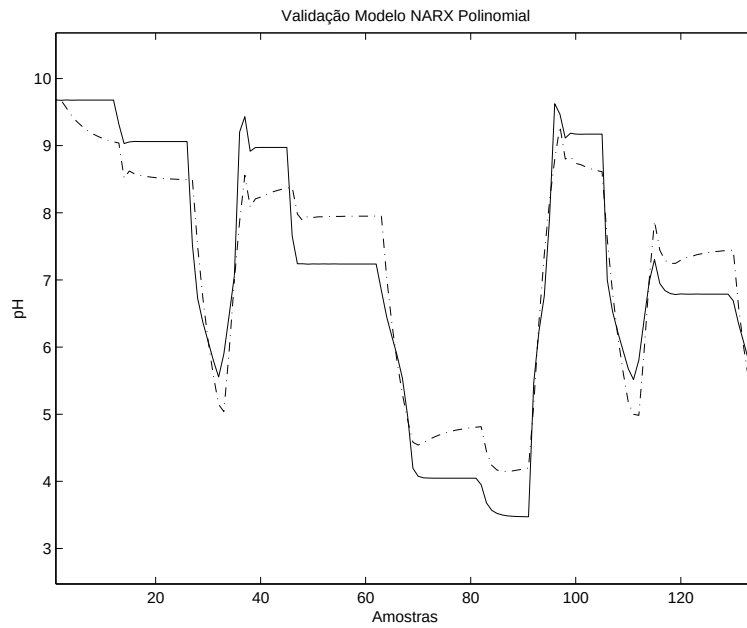


Figura 5.12: Validação do Modelo 5.7 NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados simulados. Em traço contínuo, tem-se a dinâmica do processo e em traço-ponto a simulação livre do modelo validado.

Como esperado, o modelo NARX polinomial com termos cruzados incorpora a característica dinâmica dos dados simulados com menos termos de processo em relação ao modelo (5.1). Logo esse fato justifica a presença dos termos cruzados nos modelos.

O próximo passo consiste em representar o modelo (5.7) na forma $\bar{y} = f(\bar{u}\bar{y})$. A Equação (5.8) mostra tal representação. A Figura 5.13 apresenta a curva estática original da Equação (5.8) e a curva de titulação do pH.

$$\bar{y} = \frac{-0,0017\bar{u}^4 + 0,0545\bar{u}^2 + 0,4325\bar{u}}{0,17 + 0,0004296\bar{u}^3}. \quad (5.8)$$

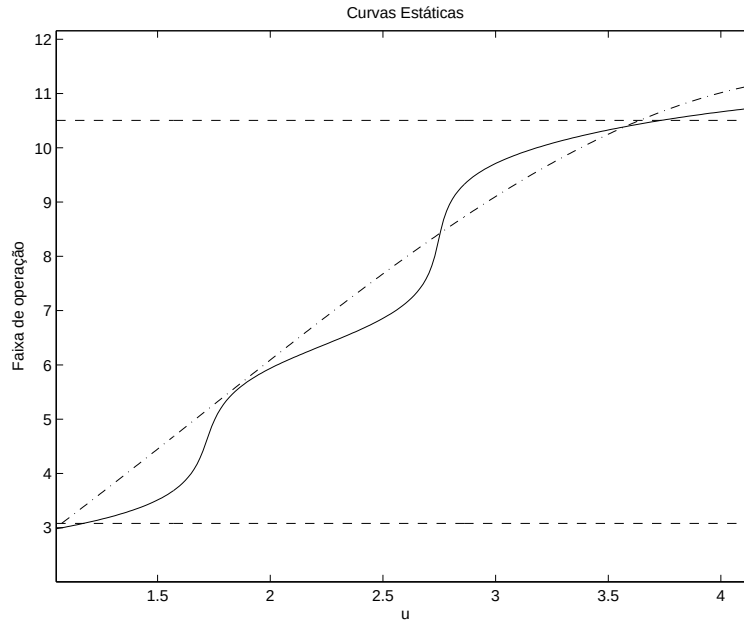


Figura 5.13: Curva estática característica do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados simulados.

Observa-se na Figura 5.13 que a característica monotônica estritamente crescente da curva de titulação do pH, é incorporada pelo modelo (5.7), porém sem muita similaridade com a curva do processo. Pois o modelo (5.7) com parâmetros estimados via mínimos quadrados não foi capaz de reproduzir a curva de titulação do pH dentro da faixa de operação.

O próximo passo consiste em estimar os novos parâmetros do modelo (5.7) pelo método bi-objetivo. A Tabela 5.5 apresenta esses parâmetros em sua segunda coluna. Assim como nos casos anteriores, o índice de validação dinâmica *RMSE* para o modelo com novos parâmetros é calculado e apresentado na Tabela 5.6. Sua validação dinâmica é apresentada na

Figura 5.14.

Tabela 5.5: *Parâmetros do modelo 5.7 NARX polinomial com Termos Cruzados, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Simulados.*

Parâmetros	MQ	BIOBJ
θ_1	0,829994	0,867541
θ_2	0,722422	-0,161180
θ_3	-0,289900	0,362072
θ_4	-0,001663	-0,003607
θ_5	0,191091	0,011189
θ_6	0,005916	-0,000787
θ_7	0,004207	0,000011
θ_8	-0,010553	0,000621
θ_9	-0,136640	0,103701

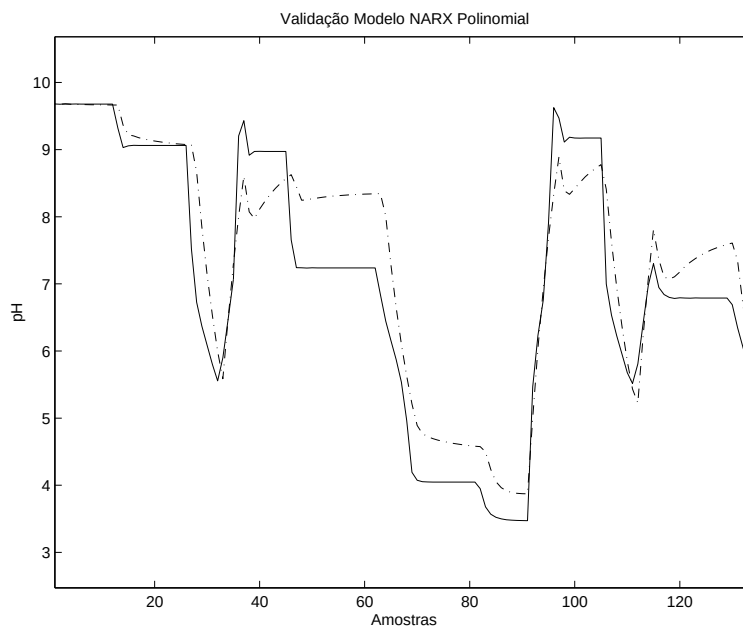


Figura 5.14: Validação do Modelo NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados simulados. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado.

A Equação (5.9) apresenta a característica estática do modelo (5.7) acrescidos de informação *a priori* do processo. A Figura 5.15 apresenta a curva estática original da Equação (5.9) junto à titulação do pH.

$$\bar{y} = \frac{-0,0036\bar{u}^4 + 0,1148\bar{u}^2 + 0,2008\bar{u}}{0,1324 + 0,0001537\bar{u}^3}. \quad (5.9)$$

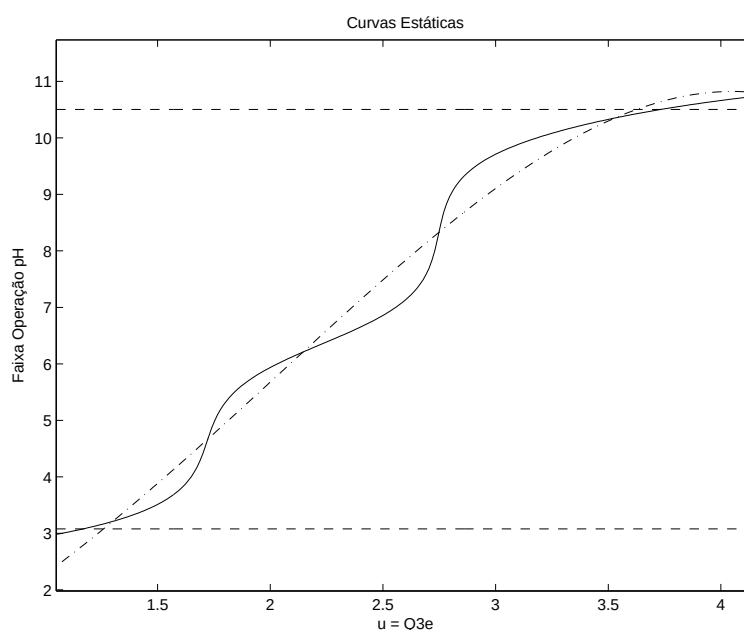


Figura 5.15: Curva estática característica do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo, sendo que em traço contínuo tem-se a curva de titulação do pH, e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados simulados.

Observa-se na Figura 5.15 que a curva estática acrescida de informação *a priori* do processo, não evolui significativamente se comparada a Figura 5.13.

A Tabela 5.6 apresenta como índice de desempenho estático, a correlação entre as características estáticas da Figura 5.15. Apenas o comporta-

mento monotônico estritamente crescente da titulação do pH é incorporada pelo modelo (5.7). Na Figura 5.16 é possível observar essa discussão.

Tabela 5.6: Índices de erros para o modelo 5.7 com termos cruzados. Dados Simulados: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.

MODELO	Dinâmico	Estático
MQ	0,3040	0,9888
BIOBJ	0,3714	0,9912

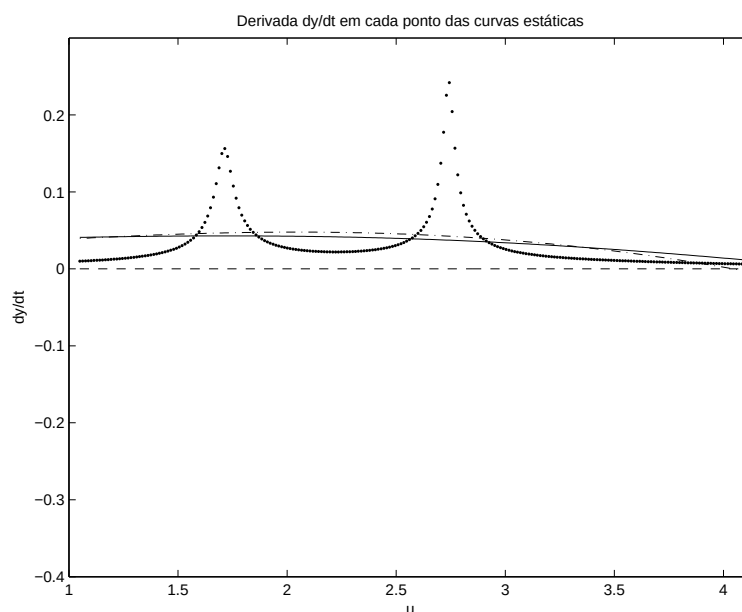


Figura 5.16: Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.7 com agrupamento de termos cruzados. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados simulados.

5.3.2 Modelo para dados Reais

Na Seção 5.3.1, foi mostrado que os termos cruzados são necessários na estrutura do modelo NARX polinomial quando o objetivo são estruturas mais simples e com menos termos de processo. Nessa Seção, deseja-se verificar se os termos cruzados oferecem algum tipo de contribuição para incorporar as características da planta real de neutralização de pH. Para isso, novos modelos NARX polinomiais foram identificados. Dentre eles, escolheu-se o modelo (5.10) por apresentar menor índice *RMSE* no processo de identificação. Seus parâmetros estimados via mínimos quadrados, são mostrados na Tabela 5.7 e sua validação dinâmica é mostrada na Figura 5.17.

$$\begin{aligned}
 y(k) = & \theta_1 y(k-1) + \theta_2 u(k-1) + \theta_3 u(k-1)y(k-2) + \\
 & \theta_4 y(k-2) + \theta_5 + \theta_6 u(k-2)y(k-1) + \\
 & \theta_7 u(k-2)u(k-1)^2 + \theta_8 u(k-2)^2 u(k-1)^2 y(k-2).
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

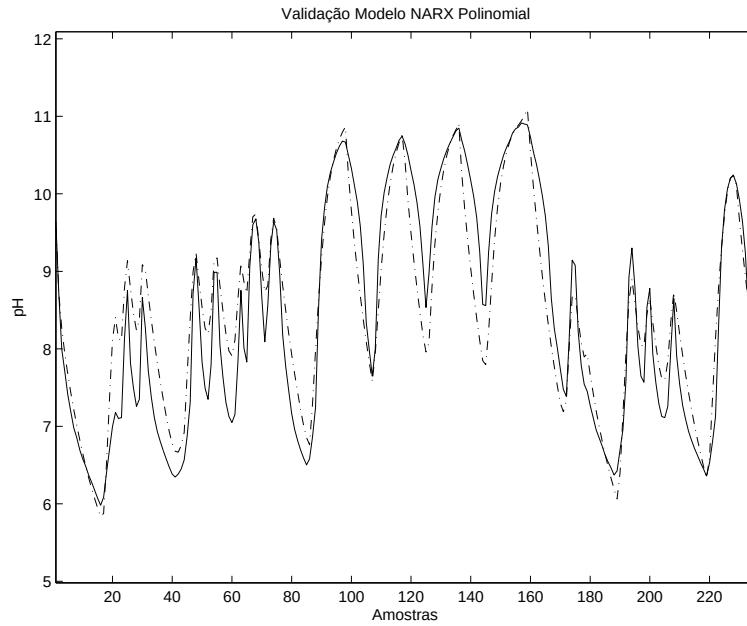


Figura 5.17: Validação do Modelo 5.10 NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via mínimos quadrados a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo, e em traço-ponto a simulação livre do modelo validado.

Visualmente, observa-se na Figura 5.17 que o modelo (5.10) com termos cruzados, incorporou com boa similaridade a característica dinâmica do sistema de pH. Outra forma de verificar o desempenho da validação dinâmica do modelo (5.10) é pelo índice *RMSE* o qual é mostrado na Tabela 5.8.

O próximo passo, consiste em verificar se o modelo (5.10) representado em sua forma estática $\bar{y} = f(\bar{u}, \bar{y})$, incorpora a não-linearidade estática do sistema de pH. A Equação (5.11) apresenta a equação estática do modelo (5.10).

$$\bar{y} = \frac{0,0164\bar{u}^3 - 0,0111\bar{u} + 0,2259}{0,0515 - 0,0123\bar{u} + 0,0003908\bar{u}^4}. \quad (5.11)$$

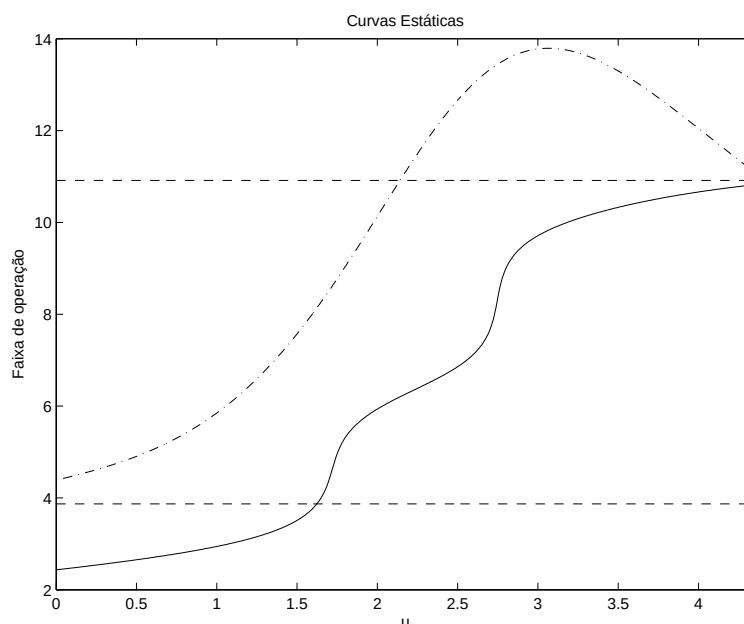


Figura 5.18: Curva estática característica do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via mínimos quadrados sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados Reais.

Como a curva estática real da planta de pH não foi conhecida, não se pode afirmar a similaridade da curva do modelo identificado com a curva teórica do processo. Na Figura 5.18 observa-se uma curva estática original do modelo, diferente da curva teórica do sistema de pH. Nesse caso, verifica-se se o modelo (5.11) após estimados seus novos parâmetros pelo método bi-objetivo, incorpora a característica estática não-linear do sistema.

A Figura 5.19 apresenta a validação dinâmica do modelo (5.10) com parâmetros estimados pelo método bi-objetivo.

Tabela 5.7: Parâmetros do modelo 5.10 NARX polinomial com Termos Cruzados, estimados via Mínimos Quadrados Ordinários e Bi-objetivo: Dados Reais.

Parâmetros	MQ	BIOBJ
θ_1	1,2108	1,0440
θ_2	-0,0111	-0,0332
θ_3	0,0188	0,0111
θ_4	-0,2623	-0,0910
θ_5	0,2259	0,1449
θ_6	-0,0064	-0,0076
θ_7	0,0164	0,0219
θ_8	-0,0004	-0,0004

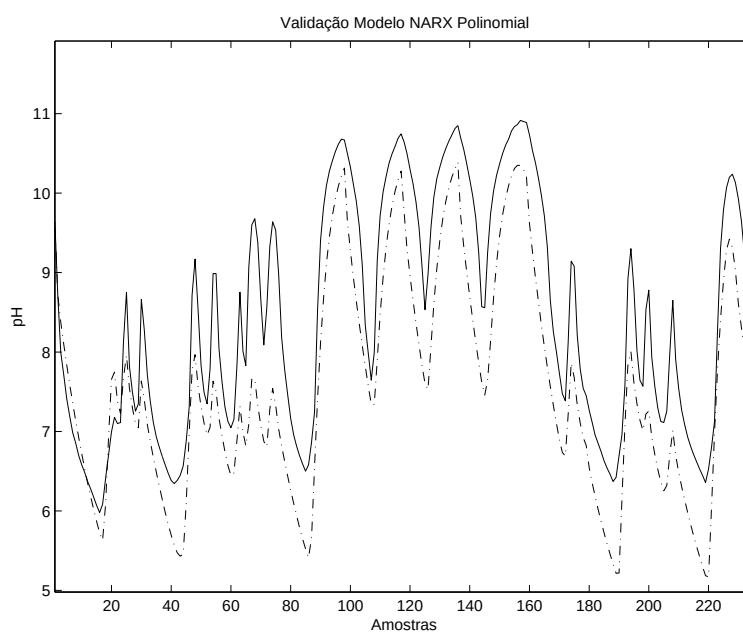


Figura 5.19: Validação do Modelo NARX polinomial com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram obtidos via bi-objetivo e a partir de dados reais. Em traço contínuo tem-se a dinâmica do processo e em traço ponto a simulação livre do modelo validado.

Para o presente caso, observa-se que o modelo (5.10) com parâmetros estimados via bi-objetivo, apresentou índice de validação dinâmica maior

em relação ao referido modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados. Tal índice é mostrado na Tabela 5.8. Em outras palavras, a otimização bi-objetivo não se mostrou eficiente para incorporar na estimação de parâmetros, a dinâmica do sistema de pH.

O próximo passo consiste em verificar se a Equação estática (5.12) do modelo (5.10), incorpora a não-linearidade estática do sistema. A Figura 5.19 apresenta a curva estática do modelo (5.10) com parâmetros estimados pelo método bi-objetivo.

$$\bar{y} = \frac{0,0219\bar{u}^3 - 0,0332\bar{u} + 0,1449}{0,0470 - 0,0036\bar{u} + 0,0003842\bar{u}^4}. \quad (5.12)$$

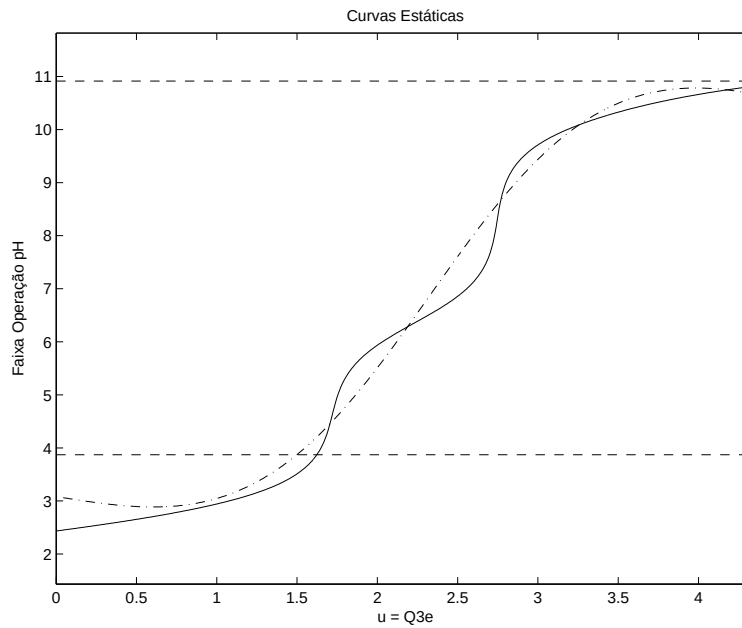


Figura 5.20: Curva estática característica do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados, cujos parâmetros foram estimados via Bi-objetivo sendo que em traço contínuo, tem-se a curva de titulação do pH e em traço-ponto, a curva do modelo. Utiliza-se traço-traço, para representar a faixa de operação na qual o modelo foi identificado a partir dos dados Reais.

Verifica-se que bons resultados são obtidos pela Equação (5.12) frente a curva de titulação do pH. Como mostrado na Figura 5.20, o modelo (5.10) acrescido de informação auxiliar, maximizou significativamente, a correlação entre as não-linearidades estáticas da Figura 5.20. A Tabela 5.8 apresenta os índices de desempenho estático do modelo (5.17).

Além do desempenho estático do modelo (5.17) com novos parâmetros, a característica monotônica estritamente crescente, também foi incorporada ao modelo (5.17). Essa análise é observada pelas derivadas das curvas presentes Figura na 5.20 e mostradas na Figura 5.21.

Tabela 5.8: Índices de erros para o modelo 5.10 com termos cruzados. Dados Reais: O erro dinâmico foi obtido com base na raiz do erro médio quadrático e o estático pela função que retorna o coeficiente de correlação entre as características estáticas.

MODELO	Dinâmico	Estático
MQ	0,3733	0,9181
BIOBJ	0,6828	0,9953

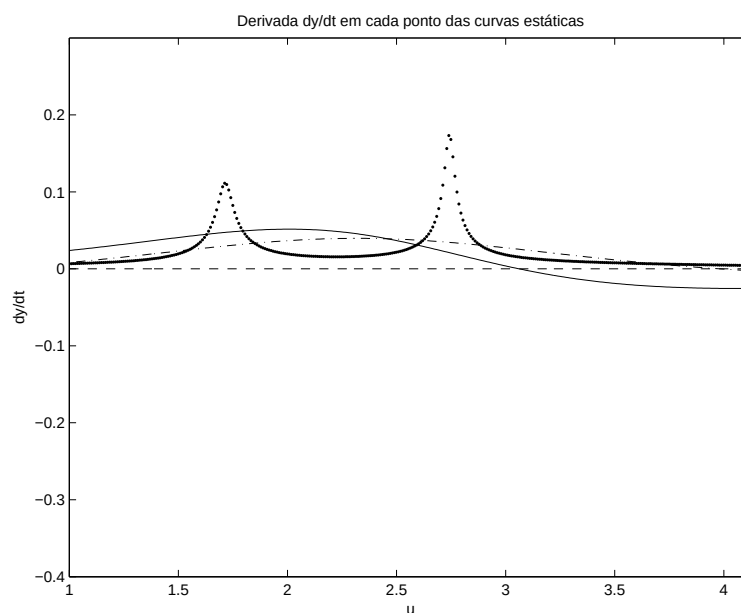


Figura 5.21: Derivada dy/dt em todos os pontos das curvas estáticas do modelo 5.10 com agrupamento de termos cruzados. Em ponto-ponto, tem-se a derivadas da curva de titulação do pH, em traço contínuo, da curva estática do modelo com parâmetros estimados via mínimos quadrados e em traço-ponto, da curva estática do modelo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo a partir dos dados Reais.

Observa-se na Figura 5.21 que apenas a Equação (5.11) apresenta pontos com derivada negativa. Esse fato não é verificado na Equação (5.12), pois o bi-objetivo além de incorporar a característica monotônica estritamente crescente do pH ao modelo (5.10), melhorou o desempenho estático do referido modelo. Observa-se que nenhum ponto com derivada negativa é verificado pela Equação (5.12).

5.4 Considerações finais

O procedimento proposto possibilitou incorporar aos modelos as características da curva teórica de titulação do processo de neutralização de pH. Dados simulados e reais do referido processo foram usados afim de constatar a aplicação de tal procedimento. Para isso, modelos NARX polinomiais com e sem termos cruzados foram identificados, em função das

características do processo de pH. Em todos os casos, observa-se que bons resultados são obtidos. No caso do modelo (5.10) com termos cruzados, bons resultados são obtidos com pequeno número de termos, em relação aos demais modelos. Isso justifica a importância dos termos cruzados no modelo para incorporar as características dinâmicas do processo de pH. No caso do modelo (5.1) sem termos cruzados, bons resultados também são obtidos com base no procedimento proposto. As características dinâmicas e estáticas do processo de pH foram incorporadas pelo modelo (5.1), com maior número de termos. No modelo (5.4), também sem termos cruzados, bons resultados são obtidos, porém somente após estimados os parâmetros pelo procedimento bi-objetivo. Por outro lado, o modelo (5.7), mesmo com parâmetros estimados pelo bi-objetivo, não apresenta bons resultados. Pois o modelo (5.7) não apresenta um bom ajuste estático dentro da faixa de operação, ou seja, localmente.

Nesse caso, os termos cruzados devem ser usados em modelos NARX polinomiais, quando se tem a necessidade de uma estrutura mais simples, para incorporar as características do processo de pH. Pois como mostrado nas Equações estáticas da Seção 5.3, esses termos quando agrupados, apresentam coeficientes com valores bem reduzidos e bem próximos de zero como mostrado nas Equações (5.8), (5.9), (5.11) e (5.12). Porém mesmo com essa condição, tais agrupamentos são necessários para representar a característica estática do sistema. Isso não é observado na dinâmica do processo, pois nos modelos dinâmicos, esses termos cruzados não estão agrupados. Isso faz com que cada um contribua de forma individual para a dinâmica do processo.

Conclusões

Um procedimento metodológico aplicado a sistemas não-lineares em malha fechada, cuja a curva estática está disponível como informação auxiliar, foi testado. Esse procedimento consistiu em identificar modelos em malha fechada e em incorporar as características da curva estática do sistema modelado, no processo de estimação de parâmetros dos modelos NARX polinomiais. Para validar o método proposto, um sistema de neutralização de pH foi utilizado por ser de difícil modelagem.

O procedimento proposto foi aplicado a quatro casos distintos, envolvendo o processo de neutralização de pH. No primeiro caso, o modelo (5.1) NARX polinomial, sem termos cruzados, foi identificado para os dados simulados, ou seja, dados de malha fechada do modelo caixa branca. Dinamicamente, o modelo (5.1) apresentou bom resultado, porém com elevado número de termos de processo. Em estado estacionário, observou-se que o modelo (5.1) apresenta bom resultado, porém localmente. Isso quer dizer que o modelo (5.1) em estado estacionário, reproduziu a curva de titulação do pH apenas dentro da faixa de operação do processo. Por outro lado, o modelo (5.1), com parâmetros estimados pelo método bi-objetivo, apresentou melhor resultado estático ao tentar reproduzir globalmente a curva de titulação do pH, porém sem boa exatidão.

No segundo caso, um modelo NARX polinomial foi identificado para os dados reais do processo de pH, sendo representado pela Equação (5.4). Observou-se que, dinamicamente, o modelo (5.4) apresentou bom resultado. Por outro lado, observa-se visualmente na Figura 5.7 e também pelo índice de correlação Tabela 5.4, que a curva estática do modelo (5.4) não apresentou bom resultado frente à curva teórica do pH. Em estado estacionário, o modelo (5.4) apresentou localmente melhor resultado com parâmetros estimados pelo método bi-objetivo. A validação dinâmica do

modelo (5.4) com novos parâmetros não apresentou melhor índice de desempenho.

No terceiro caso, o modelo (5.7) NARX polinomial também foi identificado para os dados simulados, porém com agrupamento de termos cruzados. Nesse caso, apenas bom resultado dinâmico foi obtido pelo modelo (5.7), com parâmetros estimados pelo procedimento proposto. Apesar de bom resultado dinâmico ser obtido pelo modelo, com número reduzido de termos de processo, o modelo não foi capaz de incorporar as características da curva de titulação do pH, com boa exatidão.

E por fim, o quarto caso, onde o modelo (5.10) foi identificado com agrupamento de termos cruzados para os dados reais do processo de pH. Nesse caso, observa-se que o modelo (5.10) reproduz com boa exatidão a dinâmica do processo, com parâmetros estimados via mínimos quadrados. Esse fato não é confirmado em sua curva estática, pois os parâmetros estimados via mínimos quadrados não incorporam ao modelo (5.10) as características da curva teórica do pH. A utilização do método bi-objetivo melhorou significativamente a resposta do modelo (5.10). Os parâmetros estimados do modelo (5.10) pelo bi-objetivo incorporaram ao mesmo as características da curva de titulação do pH, ao reproduzir praticamente todos os pontos da curva de titulação do pH. Em outras palavras, o modelo (5.10) com novos parâmetros foi válido quase que globalmente frente à curva de titulação do pH.

De forma geral, constatou-se que apenas com as ferramentas tradicionais de identificação de sistemas não foi possível obter bons resultados, mesmo para os dados simulados onde a curva estática é conhecida. A otimização bi-objetivo possibilitou preencher essa lacuna ao produzir melhores resultados pelos modelos, após estimados seus parâmetros pelo método bi-objetivo.

Observou-se também que os termos cruzados, em alguns casos, são usados quando o objetivo é obter estruturas mais simples, como no caso apresentado na Seção 5.3. A ausência desses termos no modelo parece levar a estruturas com maior número de termos, como nos casos apresentados nas Seções 5.2.1 e 5.2.2.

6.1 Trabalhos futuros

Nesse trabalho foi apresentado um procedimento para identificação de sistemas em malha fechada, com uso de informação *a priori*. Para testar o procedimento proposto, usou-se um processo de neutralização de pH. Verificou-se que, bons resultados foram obtidos pelos modelos, quando a curva estática do processo é conhecida. No caso do processo real de neutralização de pH a curva estática não foi conhecida. Nesse caso, considerou-se a curva teórica do processo, para que o procedimento proposto fosse aplicado ao caso real. Dessa maneira tem-se como objetivos futuros os seguintes itens:

- Modelar o processo de neutralização de pH em malha fechada, usando representação NARX racional;
- Testar o procedimento proposto em outros processos similares;
- Impor no método de otimização bi-objetivo, restrições relacionadas às derivadas negativas;
- Pesquisar sobre quais agrupamentos de termos são realmente necessários para compor a estrutura NARX polinomial para representar o processo de pH;
- Realizar o processo reverso, ou seja, a partir de um modelo com característica estática globalmente válida frente a curva estática do processo, obter sua correspondente dinâmica.

Referências Bibliográficas

- Aguirre, L. (1996). A tutorial introduction to nonlinear dynamics and chaos part ii: Modeling and control. *SBA Controle e Automação*, 7(1):50–66.
- Aguirre, L. (2004). *Introdução à Identificação de Sistemas: Técnicas Lineares e Não-lineares Aplicadas a Sistemas Reais*. Revista Ampliada UFMG, Belo Horizonte, 2 edition.
- Aguirre, L. e Billings, S. A. (1995a). Dynamical effects of over parametrization in nonlinear models. *Physica D*, 80:26–40.
- Aguirre, L. e Billings, S. A. (1995b). Improved structure selection for nonlinear models based on term clustering. *International Journal of Control*, 63:569–587.
- Aguirre, L., Donoso-Garcia, P. F., e Santos-Filho, R. (2000). Use of a priori information in the identification of global nonlinear models - a case study using a buck converter. *IEEE Trans. Circuits Syst.I*, 47(7):1081–1089.
- Aguirre, L. A., Silva, A. P. A., Campos, M. F. M., e Amaral, W. C. (2007). *Enciclopédia de Automática: Controle e Automação*, volume 3. São Paulo: Blucher, 1 edition.
- Barroso, M. (2001). *Métodos de Otimização Mono-objetivo Aplicados à identificação de Sistemas Não-lineares*. Dissertação de Mestrado, UFMG, Belo Horizonte. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica.
- Barroso, M. (2006). *Métodos de Otimização Mono-Objetivo Aplicados à Identificação Caixa-Cinza de Sistemas Não-Lineares*. Tese de Doutorado, UFMG, Belo Horizonte.

- Barroso, M. e Nepomuceno, E. (2006). Multi-objective identification of a buck dc-dc converter. *Congresso Brasileiro de Automática*.
- Barroso, M., Takahashi, R., e Aguirre, L. (2006a). Multi-objective parameter estimation via minimal correlation criterion. *Journal of Process Control*, 17(4):321 – 332.
- Barroso, M. F. S., Takahashi, R. H. C., e Aguirre, L. A. (2006b). Identificação bi-objetivo de um sistema de bombeamento mais turbina hidráulica. *SBA Controle e Automação*, (1).
- Billings, S. e Chen, S. (1989). Representation of nonlinear systems: the narmax model. *International Journal of Control*, 49(3):1013–1032.
- Billings, S. e Voon, W. (1983). Structure detection and model validity tests in the identification of nonlinear systems. *IEE Proceedings, Part D*, 130(4).
- Billings, S. e Voon, W. (1984). Least squares parameter estimation algorithms for non-linear systems. *International Journal of Systems Science*, 15(6):601–615.
- Billings, S. e Voon, W. (1986). Correlation based model validity tests for nonlinear models. *International Journal of Control*, 44(1):235–244.
- Billings, S. A., Chen, S., e Korenberg, M. J. (1989). Identification of mimo nonlinear systems using a forward-regression orthogonal estimation. *Int. J. Control*, 49(6):2157–2189. Louisville.
- Bohlin, T. (1994). A case study of grey-box identification. *Automática*, 10(2):307 – 318.
- Boling, M. J., Seborg, D. E., e Hespanha, P. J. (2006). Multi-model control of a simulated ph neutralization process. *Elsevier Science*.
- Campos, R. (2005). *Aplicação de Técnicas de Identificação Usando Representações Narmax Polinomial e Redes Neurais Artificiais: Um Estudo de Caso com Dados Reais*, volume 1 of 1. UnilesteMG, Coronel Fabriciano. Monografia de conclusão de curso.
- Campos, R. (2007). *Projeto e Construção de Planta Piloto de Neutralização de pH e Proposta de Metodologia para Incorporação de Informações Auxiliares na*

- Identificação NARX Racional*. Dissertação de Mestrado, UnilesteMG, Cel Fabriciano.
- Coelho, M., Aguirre, L., e Corrêa, M. (2002). Metododologia para representação dos modelos narx polinomias na forma de hammerstein e wiener. *BMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional*, 3(1).
- Corrêa, M. (2001). *Identificação Caixa Cinza de Sistemas Não-lineares utilizando representação NARMAX Racionais e Polinomiais*. Tese de Doutorado, UFMG, Belo Horizonte.
- Corrêa, M., Freitas, F., e Junior, E. (2006). Using auxiliary information to improve the performance of narmax polynomial models in the identification of ph neutralization process. *Enpromer. 2 Mercosur Congress on Chemical Engineering / 4 Mercosur Congress on Process Systems Engineering*. Costa Verde - RJ - Brasil.
- Fernandes, F. (2006). *Identificação por Predição de Erro e Síntese de Controladores Robustos*. Dissertação de Mestrado, UFMG, Belo Horizonte.
- Forssell, U. e Ljung, L. (1999). Closed-loop identification revisited. *Automatica*, (35):1215 – 1241.
- Garcia, C. (1997). *Modelagem e simulação de processos industriais e de sistemas eletromecânicos*. São Paulo, editora usp edition.
- Gómez, J. C., Jutan, A., e Baeyens, E. (2004). Wiener model identification and predictive control of a ph neutralisation process. *IEE Proc. - Control Theory Appl*, 151(3):329–338.
- Golub, G. e Van Loan, C. (1989). *Matrix Computations*. Johns Hopkins. London.
- Gustafsson, T. K., Skrifvars, B. O., Sandstrom, K. V., e Waller, K. V. (1995). Modeling of ph for control. *Ind. Eng. Chemical Res*, 34(3):820–827.
- Henrique, H., Lima, E., e Seborg, D. (2000). Model structure determination in neural network models. *Chemical Engineering Science*, 55:5457 – 5469.
- Hong, T., Morris, A., Karim, M., Zhang, J., e Luo, W. (1996). Nonlinear control of a wastewater ph neutralisation process using adaptive narx models. *IEEE*, página 911 916.

- Johansen, T. A. (1996). Identification of non-linear sustms using empirical data and prior knowledge - an optimization approach. *Automática*, 32(3):337–356.
- Jorgensen, S. B. e Hangos, K. M. (1995). Grey box modelling for control: Qualitative models as a unifying framework. *Int. J. of Adaptative Control and Signal Processing*, 9(6):547–562.
- Kalafatis, A., Arifin, N., L.Wang, e Cluett, W. (1995). A new approach to the identification of ph processes based on the wiener model. *Chemical Engineering Science*, 50(23):3693 – 3701.
- Korenberg, M. (1985). Orthogonal identification of nonlinear difference equation models. *Mid. West Symposium on Circuits and Systems*. Louisville.
- Korenberg, M., Billings, S. A., e McIlloy, P. (1988). Orthogonal parameter algorithm for non-linear estochastic systems. *Int. J. Control*, 48(1):193–210. Louisville.
- Landau, I. (2001). Identification in closed loop: a powerfull design tool(better design models, simpler controllers). *Control Engineering Practice*, 9:51 – 65.
- Lee, J. e Park, H. (2000). Nonlinear ph control using a three parameter model. *ICASE: The Institute of Control, Automation and Systems Engineers*, 02(02):130–136. Korea.
- Lennox, B., Montague, G. A., Frith, A. M., Gent, C., e Bevan, V. (2001). Industrial aplication of neural network: an inverstigation. *Journal of Process Control*, 11:497 – 507.
- Leontaritis, J. e Billings, S. (1985a). Input-output parametric models for non-linear systems part i: deterministic non-linear systems. *International Journal of Control*, 41(2):303 – 328.
- Leontaritis, J. e Billings, S. (1985b). Input-output parametric models for non-linear systems part ii: stochastic non-linear systems. *International Journal of Control*, 41(2):329–344.

- Lima, C. (2006). *Efeito da Seleção de Estrutura do Modelo NARX Polinomial para Representação de Sistemas Dinâmicos do Tipo Hammerstein e Wiener*, volume 1 of 1. UnilesteMG, Coronel Fabriciano. Monografia de conclusão de curso.
- Lima, C. B. S., Barroso, M. F. S., Campos, R. J., Mendes, E. M. A. M., e Corrêa, M. V. (2008). Utilização de informação a priori e algoritmo bi-objetivo para identificação de um processo e neutralização de ph em malha fechada. *XVII Congresso Brasileiro de Automática*, 01(01). Setembro 2008.
- Ljung, L. (1999). *System Identification: Theory for the User*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 2 edition edition.
- Ljung, L. e Torkel, G. (1994). *Modeling of dynamic system*, volume 1 of 1. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersay, 1 edition.
- Magalhães, M. e Lima, A. (2004). *Noções de Probabilidade e Estatística*. Edusp.
- Mendes, E. e Billings, S. (1998). On overparametrization of nonlinear discrete systems. *International Journal of bifurcation and chaos*, 8(3):535–556.
- Mwembeshi, M. M., Kent, C. A., e Salhi, S. (2004). Flexible on-line modeling and control of ph in waste neutralization reactors. *Chemical Eng. Technology*, 27(2):130–138.
- Nepomuceno, E. (2002). *Identificação Multi-objetivo de Sistemas Não-lineares*. Dissertação de Mestrado, UFMG, Belo Horizonte. Brasil.
- Okuda, G. (2000). *Identificação de sistemas dinâmicos não lineares para propósito de controle*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia.
- Pearson, R. e Pottmann, M. (2000). Gray-box identification of block-oriented non-linear models. *Journal of Process Control*, 10:301 – 315.
- Söderström, T., Ljung, L., e Gustavson, I. (1991). An indirect production error method for system identification. *Automatica*, 27:183 – 188.
- Söderström, T. e Stoica, P. (1989). System identification series in systems and control engineering. *Prentice Hall International*.

- Shankong, V. e Haimes, Y. Y. (1983). Multiobjective decision making: Theory and methodology. *North-Holland (Elsevier), New York*.
- Syafiie, S. e Martinez, E. (2004). Macro-actions in model-free intelligent control with application to ph control. *44th IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference*.
- Syafiie, S., Tadeu, F., e Martinez, E. (2004). Learning control applied to ph plant. In *7th International Symposium on Dynamics and Control of Process System (DYCOPS)*. Boston - USA.
- Takahashi, R. H., Camilo, F. J., Zampiere, D. E., e Peres, P. L. D. (2000). Multiobjective weighting selection for optimization-based control desing. *ASME Lornal of Dynamic Systems, Measurement and Control*, 03(122):567–570.
- Van den Hof, P. M. J. e Schrama, R. J. P. (1995). Identification for control - closed loop issues. *Automatica*, 31:1751 – 1770.
- Vidyasagar, M. (1985). *Control system synthesis: A factorization approach*. Technical report, MIT Press, Cambrige, Mass.
- Yang, D. R., Lee, T. C., Soon, K., e Yoon, T. W. (2001). Indirect adaptative backtepping control of a ph neutralization process based on recursive prediction error method for combined state and parameter estimation. *Ind. Eng. Chemical*, 40:4102–4110.
- Ylén, J. P. (2001). *Measuring, modelling and controlling the pH value and the dynamic chemical state*. Tese de Doutorado, University of Technology, Control Engineering Laboratory, Helsinki.
- Yoo, A., Lee, T. C., e Yang, R. D. (2004). Experimental simultaneous state and parameter identification of a ph neutralization process based on an extended kalman filter. *Korean Journal Chemical Eng*, 21(4):753–760.