



CENTRO UNIVERSITÁRIO DO LESTE DE MINAS GERAIS
PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA

MOCP

LABORATÓRIO DE MODELAGEM, OTIMIZAÇÃO
E CONTROLE DE PROCESSOS

PROJETO E CONSTRUÇÃO DE PLANTA PILOTO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH E PROPOSTA DE METODOLOGIA PARA INCORPORAÇÃO DE INFORMAÇÕES AUXILIARES NA IDENTIFICAÇÃO NARX RACIONAL

Rodrigo de Cássio Corrêa Campos

Dissertação submetida à banca examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia do Centro Universitário do Leste de Minas Gerais - UnilesteMG, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Industrial.

Orientadores: Dr. Esly Ferreira da Costa Jr.
Dr. Marcelo Vieira Corrêa

Cel. Fabriciano, Junho de 2007

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.



CENTRO UNIVERSITÁRIO DO LESTE DE MINAS GERAIS
PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA

MOCP

LABORATÓRIO DE MODELAGEM, OTIMIZAÇÃO
E CONTROLE DE PROCESSOS

PROJETO E CONSTRUÇÃO DE PLANTA PILOTO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH E PROPOSTA DE METODOLOGIA PARA INCORPORAÇÃO DE INFORMAÇÕES AUXILIARES NA IDENTIFICAÇÃO NARX RACIONAL

Rodrigo de Cássio Corrêa Campos

Banca Examinadora:

Prof. Esly Ferreira da Costa Jr, Dr. - PPGE/Unileste-MG - Orientador.

Prof. Marcelo Vieira Corrêa, Dr. - PPGE/Unileste-MG - Co-Orientador.,

Prof. Luis Antônio Aguirre, Ph.D. - PPGE/UFGM.

Prof^a. Maria Laura de Azevedo Passos, Ph.D., - UFSCar.

Prof. Roselito de Albuquerque Teixeira, Dr. - PPGE/Unileste-MG

*À minha esposa Poliane Pompei e ao
meu filho Caio Pompei Campos*

Resumo

No presente trabalho todo o projeto e construção de uma planta piloto de neutralização de pH é desenvolvido, sendo realizados experimentos para validação da implementação do modelo fenomenológico de Gustafsson e Waller (1983). Baseado na planta piloto de neutralização de pH modelada, projetada e construída, o presente trabalho investiga as melhorias na estimação de parâmetros de modelos NARX (*Nonlinear AutoRegressive with eXogenous input*) racionais devido à incorporação de informação auxiliar. Deste modo, propõem-se três procedimentos para inserção de informação auxiliar (monotonicidade e limites de operação da curva estática) na identificação de modelos NARX racionais utilizando dados em uma faixa restrita de operação. Dados simulados e experimentais são utilizados para estimar e validar o modelo NARX racional. Os resultados obtidos mostram que modelos NARX racionais, identificados usando informação auxiliar têm, em geral, um comportamento global melhor que os identificados utilizando modelagem empírica.

Palavras-chave: NARX racional - Dados experimentais - Neutralização de pH - Identificação de sistemas - Informação auxiliar.

Abstract

In the present work all steps to the pH neutralization plant building-up as well as the validation experiments to implement the Gustafsson e Waller (1983). Based on an experimental pH neutralization plant, the present work investigates the improvements to estimation of rational parameters of NARX (Nonlinear Autoregressive with Exogenous Input) models due the adding of auxiliary information. Thus, three procedures to input auxiliary information into the system - monotonic and operations limits - are provided to identify a rational NARX model leaded by a restrict operation range of data. The results demonstrated a better global behavior of rational NARX models using auxiliary information than the one's identified by use of empiric modeling.

Keywords: Rational NARX - Experimental dada - pH neutralization - System identification
- Auxiliary information.

Agradecimentos

Agradeço a Deus e a nosso Senhor Jesus Cristo pelas bênçãos e amor incondicionais durante toda minha vida.

Agradeço aos Meus Pais, Sr. José Francisco de Campos e a Sra Marilena Corrêa Campos, que dentro dos mais sinceros e honestos ensinamentos me mostraram alguns segredos da vida.

Agradeço a meus irmãos, Frederico, LÍlian, Liliane e Róger pelo apoio, conselhos, amor e amizade.

Agradeço à Dona Raimunda que durante meus primeiros contatos com a matemática espantou os mitos e os medos.

Agradeço ao Prof. Idalécio Castro, que desde os tempos de Colégio Técnico foi um Grande amigo e incentivador para que eu pudesse seguir a carreira acadêmica.

Agradeço ao Colégio Pe De Man, na pessoa da Prof^a. Maria Dias, que durante o período que estive lá me deu todas condições para realizar este trabalho.

Agradeço ao Prof. Esly e ao Prof. Marcelo Vieira pelas valiosas orientações, críticas, paciência e principalmente pela amizade.

Agradeço a todos os Professores do Mestrado que foram a base para realização deste trabalho.

Agradeço ao Prof. e Amigo Ronaldo Ribeiro, pelo companheirismo, pela amizade e dicas muito importantes durante a realização deste trabalho.

Agradeço a todos colegas do Mestrado que foram companheiros e os únicos que não reclamavam minha ausência.

Agradeço ao Dr. José Edelcio Drumont pelo apoio, amizade e carinho que tem para com minha família, em especial com meu Pai.

Agradeço ao colega Ronilson Araújo do Depto de Engenharia Mecânica do Unileste-MG, que me ajudou, e muito, durante as montagem da planta de pH.

Agradeço ao Unileste-MG, em especial a Diretoria e Coordenações do Departamento de Ciências Exatas que me apoiaram e deram condições para realização deste trabalho.

Agradeço a todos os colegas do LIAC, em especial a Marcela Andrade que me ajudou no desenvolvimento das telas de supervisão e operação da planta de pH.

Agradeço à FAPEMIG pelos recursos financeiros durante todo o Mestrado.

Agradeço ao CNPq pelos recursos financeiros para construção da planta de neutralização de pH.

Enfim, espero não ter esquecido de ninguém, mas caso tenha ocorrido, sinceras desculpas e muito obrigado.

Conteúdo

Resumo	v
Abstract	vii
Lista de Figuras	xx
Lista de Tabelas	xxii
Lista de Símbolos	xxvii
Lista de Siglas e Abreviações	xxvii
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.2 Contribuições	3
1.3 Apresentação do trabalho	4
2 Modelagem de Sistemas	5

2.1	Introdução	5
2.2	Conceitos básicos	6
2.2.1	Sistema e experimento	6
2.2.2	O que é um modelo?	7
2.2.3	Modelos e simulações dinâmicas	8
2.2.4	Classificações para modelos matemáticos	9
2.3	Modelagem fenomenológica (Modelagem física)	12
2.3.1	Estrutura do problema	12
2.3.2	Descrevendo a relação entre as variáveis	14
2.3.3	A simulação do modelo	17
2.4	Modelagem empírica (Identificação de sistemas)	18
2.4.1	Testes dinâmicos e coleta de dados	18
2.4.2	Representação racional	20
2.4.3	Estimação dos parâmetros	23
2.4.4	Agrupamento de termos para modelo racional	27
2.4.5	Escolha de estrutura	27
2.4.6	Validação do modelo	28
2.5	Monotonicidade de seqüências	30
2.5.1	Seqüência	30
2.5.2	Monótona Estritamente crescente	30

2.5.3	Monótona Estritamente decrescente	30
2.5.4	Monótona crescente	30
2.5.5	Monótona decrescente	31
2.5.6	Teste de monotonicidade	31
2.5.7	Seqüências Limitadas	31
2.6	Considerações finais	32
3	Modelagem da planta de neutralização de pH	33
3.1	Introdução	33
3.2	Conceitos básico sobre o processo de pH	34
3.2.1	Neutralização	34
3.2.2	Definição para o pH	34
3.2.3	Solução tampão	35
3.3	Processo de neutralização de pH	35
3.4	Reações químicas a serem modeladas	37
3.5	Desenvolvimento do modelo	39
3.5.1	Modelo dinâmico	39
3.5.2	Modelo estático	43
3.6	Planta piloto construída	44
3.7	Considerações Finais	46

4	Procedimentos para uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros em modelos NARX racionais	49
4.1	Introdução	49
4.2	Procedimento 01	51
4.3	Procedimento 02	54
4.4	Procedimento 03	56
4.4.1	Procedimento 3.1	56
4.4.2	Procedimento 3.2	58
4.5	Considerações finais	60
5	Resultados e Discussões	63
5.1	Introdução	63
5.2	Validação do modelo fenomenológico	64
5.2.1	Experimento 01 - 23/02/2007	66
5.2.2	Experimento 03 - 07/03/2007	67
5.2.3	Experimento 05 - 13/03/2007	68
5.2.4	Ajuste da vazão da solução tampão no modelo fenomenológico	69
5.2.5	Discussões	70
5.3	Uso de informação auxiliar para estimação de parâmetros - Dados Simulados	72
5.3.1	Avaliação dos procedimentos	77
5.3.2	Discussões	81

5.4	Uso de informação auxiliar para estimação de parâmetros - Dados Reais	82
5.4.1	Avaliação dos procedimentos	89
5.4.2	Discussões	94
5.5	Considerações Finais	94
6	Conclusões	97
6.1	Sugestões para trabalhos futuros	98
	Bibliografia	105
	Apêndice	107
A	Projeto da planta piloto de neutralização de pH	107
A.1	Especificação dos componentes	108
A.1.1	Equipamentos e materiais	108
A.1.2	Ferramentas utilizadas	113
A.1.3	Projeto Elétrico	114
A.1.4	Reagentes utilizados	116
A.2	Construção da planta	119
A.2.1	Especificações estruturais	119
A.3	Calibração de instrumentos	123
A.3.1	Calibração dos transdutores	123

A.3.2	Calibração das bombas de dosagem	125
A.3.3	Calibração do medidor de pH	128
A.4	Preparo de reagentes	128
A.4.1	Preparo da solução de Hidróxido de sódio($NaOH$) 0,006 molar + Bi-carbonato de sódio ($NaHCO_3$) 0,0001 molar	128
A.4.2	Preparo da solução de Ácido nítrico (HNO_3) 0,006 molar	129
A.4.3	Preparo da solução de Bicarbonato de sódio ($NaHCO_3$) 0,06 molar	129

Lista de Figuras

2.1	Construção do modelo. Do sistema ao modelo. Adaptado de (LJUNG e TOR- KEL, 1994).	6
2.2	Representação não paramétrica. Resposta ao impulso.	10
2.3	Diagrama em bloco simplificado do sistema de neutralização de pH.	14
2.4	Representação básica de um sistema relacionado com a energia e massa que entram e saem do mesmo.	15
3.1	Lay-out do processo a ser modelado. Adaptado de (HENRIQUE et al., 2000). .	36
3.2	Curva de titulação de pH em função da vazão de base (Q_3).	44
3.3	Lay-out do processo de neutralização de pH construído.	45
3.4	Curva estática pH para entradas de ácido, base e tampão, sendo $Q_1 = 2,54 mL/s$; (a) $Q_2 = 0 mL/s$; (b) $Q_2 = 0,025 mL/s$; (c) $Q_2 = 0,05 mL/s$; (d) $Q_2 =$ $0,1 mL/s$	46
4.1	Representação gráfica das informações auxiliares propostas em cada procedi- mento. (a) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedi- mento 01 (b) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedi- mento 02 (c) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedi- mento 3.1 e 3.2.	51
4.2	(- -) Característica estática do modelo apresentado por Corrêa (2001) e (—) a característica estática do tanque de neutralização de pH. Eixo- x vazão de base e eixo- y pH.	52

5.1	(a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados medidos do experimento 01 são indicados com (–) e os dados de resposta do modelo são indicados com (– –).	66
5.2	(a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados experimentais (medidos) do experimento 03 são indicados com (–) e os dados de resposta do modelo são indicados com (– –).	67
5.3	(a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados medidos do experimento 05 são indicados com (–) e os dados de resposta do modelo são indicados com (– –).	69
5.4	Gráficos com o comparativo do modelo após alteração da vazão de tampão Q_2 (a) Modelo x Experimento 01, (b) Modelo x Experimento 03, (c) Modelo x Experimento 05. Os dados medidos no experimento são indicados com (–) e os dados de resposta do modelo são indicados com (– –).	70
5.5	Dados simulados de identificação da planta de neutralização de pH. (a) Sinal de saída - pH e (b) sinal de entrada - vazão Q_3	73
5.6	Dados simulados de validação da planta de neutralização de pH. (a) Sinal de saída - pH e (b) sinal de entrada - vazão Q_3	73
5.7	Comportamento estático da planta de neutralização de pH.	74
5.8	Respostas do modelo (5.1) e modelo fenomenológico. (a) dados de identificação e (b) dados de validação. (– –) Resposta do modelo (5.1). (–) Dados de simulados no modelo fenomenológico.	75
5.9	Gráfico comparador do comportamento estático do modelo (5.1) com o comportamento estático do sistema de pH. (– –) Resposta do modelo (5.1). (–) Curva estática do pH.	76
5.10	Dados gerados na região na qual o modelo (5.1) é estatisticamente válido. pHe_{min}^* - é o valor estático para vazão de 1,17ml/seg. pHe_{max}^* é o valor estático para a vazão de 2ml/seg	76
5.11	Resposta dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com os dados na faixa restrita de operação. (– –) Resposta do modelo na predição livre . (–) Dados de identificação.	79

5.12	Resposta dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com os dados em toda faixa de operação. (- -) Resposta do modelo na predição livre. (-) Dados de validação.	80
5.13	Resposta estática dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com a curva estática do sistema simulado. (- -) Resposta do modelo. (-) Dados estáticos do sistema simulado.	82
5.14	Entrada e saída da planta de pH em uma faixa restrita de operação. Dados de (a) entrada e (b) saída da planta de pH.	83
5.15	Histograma com a distribuição dos dados utilizados para identificação.	84
5.16	Entrada e saída da planta de pH em toda faixa de operação. Dados de (a) entrada e (b) saída da planta de pH.	84
5.17	Gráfico comparador das respostas dos modelos identificados utilizando RME na faixa restrita e em toda faixa de operação. (a) e (c) são os gráficos referentes ao modelo <i>m_{ph}39</i> . (c) e (d) são os gráficos referentes ao modelo <i>m_{ph}49</i> . (- -) Respostas dos modelos e (-) dados reais.	87
5.18	Comportamento estático dos modelo identificados usando RME. (a) modelo <i>m_{ph}39</i> . (b) modelo <i>m_{ph}49</i>	88
5.19	Dados gerados na região na qual os modelos modelos são estatisticamente válidos. (a) Região para o modelo <i>m_{ph}39</i> e (b) a região para o modelo <i>m_{ph}49</i> pHe_{min}^* - é o valor estático para vazão de 1,4 ml/seg. pHe_{max}^* é o valor estático para a vazão de 2,1 ml/seg	88
5.20	Predição livre dos modelos na região restrita de operação (dados de identificação). (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo <i>m_{ph}39</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo <i>m_{ph}49</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.	91

5.21	Predição livre dos modelos em toda faixa de operação. (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo <i>mph39</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo <i>mph49</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.	92
5.22	Resposta dos estática modelos identificados. (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo <i>mph39</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo <i>mph49</i> usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.	93
A.1	<i>Lay-out</i> funcional com os equipamentos principais da planta de neutralização de pH construída	108
A.2	Projeto elétrico da planta de neutralização de pH	115
A.3	Vista frontal da planta de neutralização de pH	119
A.4	(a) Vista superior do tampo inferior do primeiro nível (b) Vista superior do tampo inferior do segundo nível	120
A.5	(a)Vista superior do tampo inferior do terceiro nível (b) Vista superior do tampo superior do terceiro nível.	121
A.6	(a)Vista lateral da fixação da bomba no perfil (b) Vista traseira da fixação da bomba.	121
A.7	(a) Vista lateral direita, (b) Vista traseira e (c) Vista lateral esquerda da planta de neutralização de pH.	122
A.8	Foto da planta piloto de neutralização de pH construída neste trabalho.	122

Lista de Tabelas

5.1	Tabela de constantes e variáveis para operação nominal da planta piloto de pH usadas no modelo.	64
5.2	Tabela com os valores de pH dos reagentes em cada experimento.	65
5.3	Tabela com condições particulares de cada experimento.	65
5.4	Tabela resumo com os índices $RMSE$ antes e depois do ajuste da vazão Q_2 . . .	72
5.5	Restrições impostas durante a estimação dos parâmetros para cada procedimento. \bar{y} e \bar{y}^* representa o comportamento estático do pH (simulado e estimado, respectivamente). \bar{u} representa a vazão Q_3	77
5.6	Parâmetros estimados utilizando os procedimentos propostos no Capítulo 4. De θ_1 a θ_{21} são parâmetros do numerador e de θ_{22} a θ_{29} são parâmetros do denominador.	78
5.7	Comparação dos índices $RMSE$ do modelo caixa-preta com os modelos identificados usando os procedimentos do Capítulo 4. Os índices $RMSE$ estão divididos em: DI - dados de identificação, DV - Dados de validação e DE - Dados estáticos	81
5.8	Restrições impostas durante a estimação dos parâmetros para cada procedimento.	89
5.9	Parâmetros estimados utilizando os procedimentos 2 e 3 propostos no Capítulo 4. De θ_1 a θ_{20} são parâmetros do numerador e os demais são parâmetros do denominador.	90

5.10	Comparação dos índices <i>RMSE</i> dos modelos <i>mph39</i> e <i>mph49</i> utilizando estimação caixa-preta(RME), procedimento 02 e procedimento 03. Os índices <i>RMSE</i> estão divididos em: DI - dados de identificação, DV - Dados de validação e DE - Dados estáticos.* Para este índice RMSE foram retirados os dados da região de instabilidade	93
A.1	Tabela referencial de conversões tensão-corrente durante calibração	124
A.2	Tabela referencial de conversões corrente-tensão durante calibração	124
A.3	Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 01	126
A.4	Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 02	126
A.5	Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 03	127

Lista de Símbolos

$a(.)$	Função não linear qualquer usada no numerador do modelo racional.
AE	Elemento sensor de pH.
AIT	Transmissor indicador do pH.
A_r	Área da base do reator.
A_{ta}	Área da base do tanque do reagente ácido.
A_{tb}	Área da base do tanque do reagente alcalino.
A_{tc}	Área da base do tanque do coletor.
A_{tt}	Área da base do tanque do reagente tampão.
$b(.)$	Função não linear qualquer usada no denominador do modelo racional.
$c(.)$	Função não linear qualquer usada para modelar o ruído.
cv	Constante de válvula de saída do tanque reator.
d	Tempo de retardo de um sistema ou tempo morto.
$e(k)$	Ruído ou perturbações em um sistema dinâmico.
$E\{.\}$	Esperança matemática.
$F(.)$	Função não-linear qualquer.
$f(.)$	Função escalar qualquer.
h_i	Termos de sequência ou termos sucessivos.
$J_N(.)$	Índice de desempenho ou função de custo.
k	Intervalo de predição.
ℓ	Grau de não-linearidade de um mapeamento não-linear.
m_d	Máximo atraso presente nos termos.
M_a	Massa Acumulada no sistema.
M_c	Massa que consumida no sistema.
M_e	Massa que entra no sistema.
M_s	Massa que sai do sistema.
N	Comprimento do registro de dados disponíveis.
n	Ordem de um sistema dinâmico.

n_e	Atraso máximo nos termos em $e(k)$, em modelos discretos.
n_y	Atraso máximo nos termos em $y(k)$, em modelos discretos.
n_ξ	Número de termos de ruído em um modelo NARX.
n_θ	Número de termos em um modelo NARX.
\mathbb{N}	Conjunto dos números naturais
P	Matriz dos regressores de um modelo NARMAX.
$p(t)$	Regressor de um modelo NARMAX representado na configuração preditor de “um-passo-a-frente”.
\bar{p}	Ponto fixo de um sistema dinâmico.
pHe_{min}^*	Mínimo valor estático de pH na região que o modelo é válido.
pHe_{max}^*	Máximo valor estático de pH na região que o modelo é válido.
s	Variável complexa de Laplace.
T_s	Período de amostragem.
k	Tempo ou número de amostras no caso discreto.
K_{a1}, K_{a2} e K_w	Constantes de equilíbrio das reações.
$u(t)$	Sinal medido de entrada de um sistema.
Y	Vetor de saídas.
$y(k)$	Sinal de saída medido de um sistema.
\bar{y}	Ponto fixo de um modelo NARX.
Γ	Conjunto de dados de uma sequência.
Δt	Passo de integração numérica.
ΔP	Diferencial de pressão.
$\delta(.)$	Função delta de Dirac.
Θ	Vetor de parâmetros de um modelo NARX racional, após pseudo-linearização.
θ	Parâmetro nominal de um sistema dinâmico representado por um modelo NARMAX.
$\hat{\theta}$	Parâmetro de um modelo NARX, estimado pelo método dos mínimos quadrados.
$\xi(t)$	Resíduo de modelagem.
$\zeta(t)$	Resultado de $b(t)e(t)$, obtido devido a linearização dos parâmetros para o modelo NARMAX racional.
\sum_i^α	Coeficiente de um agrupamento de termos do numerador em um modelo NARMAX racional.
\sum_i^β	Coeficiente de um agrupamento de termos do denominador em um modelo NARMAX racional.
τ	Tempo de atraso na definição das coordenadas de atraso.

τ_m	Valor mínimo entre τ_y e τ_{y^2} .
τ_y	Tempo em que ocorre o primeiro mínimo da auto-correlação linear de um sinal.
τ_{y^2}	Tempo em que ocorre o primeiro mínimo da auto-correlação não-linear de um sinal.
σ_ξ^2	Variância dos resíduos.
Ψ e ψ	Matrizes auxiliares no processo de estimação de parâmetros por mínimos quadrados estendido para o modelo NARMAX racional.
$r_{y_1 y_1}(\cdot)$	Função de auto-correlação do sinal $y_1(t)$.
$r_{y_1 y_2}(\cdot)$	Função de correlação cruzada dos sinais $y_1(t)$ e $y_2(t)$.
V_r	Volume do tanque reator.
w_{a_i} e w_{a_i}	espécies invariantes de reação para o fluxo de saída.
®	Marca registrada

Siglas e Abreviações

BE	Balanço de Energia
BM	Balanço de Massa
DI	Dados de Identificação
DE	Dados Estáticos
DV	Dados de Validação
ERR	Taxa de redução do erro (<i>Error Reduction Ratio</i>)
MOCP	Grupo de pesquisa em Modelagem, Otimização e Controle de Processos
MQ	<u>M</u> ínimos <u>Q</u> uadrados
MQE	<u>M</u> ínimos <u>Q</u> uadrados <u>E</u> stendidos
NARX	Modelo não-linear auto-regressivo com entradas exógenas (<i>Nonlinear Auto Regressive model with eXogenous inputs</i>)
NARMAX	Modelo não linear auto-regressivo de média móvel e entradas exógenas (<i>Nonlinear Auto Regressive Moving Average model with eXogenous inputs</i>)
MIMO	Múltiplas Entradas e Múltiplas Saídas (<i>Multi-Input Multi-Output</i>)
MISO	Múltiplas Entradas e Uma Saída (<i>Multi-Input Single-Output</i>)
pH	Potencial Hidrogeniônico
RME	Estimador de Mínimos quadrados para modelo racional (<i>Rational Model Estimator</i>)
RMSE	Raiz quadrada do erro quadrático médio (<i>Root Mean Square Error</i>)
RNA	Redes Neural Artificiais
SISO	Uma Entrada e Uma Saída (<i>Single-Input Single-Output</i>)
SIMO	Uma Entrada e Múltiplas Saída (<i>Single-Input Multi-Output</i>)
USB	Barramento serial universal (<i>Universal Serial Bus</i>)

Capítulo 1

Introdução

O desenvolvimento da ciência e da tecnologia, tendo como alicerce o aumento da capacidade computacional, estimulou a comunidade científica a aprofundar-se nos estudos para modelagem matemática de sistemas não-lineares.

A modelagem matemática atualmente divide-se em três grupos, sendo estes: a modelagem fenomenológica (também conhecida com caixa-branca), que é baseada nas leis físicas e químicas; a modelagem empírica (também conhecida como caixa-preta), que é baseada apenas em dados de entrada e saída do processo, e finalmente a modelagem semifísica (também conhecida como modelagem caixa-cinza), que é baseada na combinação dos dados de entrada e saída juntamente com conhecimentos físicos/químicos do processo.

A modelagem caixa-preta, bem como a modelagem caixa-cinza, permite diversas representações matemáticas, como Redes Neurais Artificiais (RNA), representação de Hammersstein e Wiener, NARX (*Nonlinear AutoRegressive with eXogenous input*) polinomiais e racionais, entre outras.

A utilização de modelos NARX racionais descreve eficientemente várias não-linearidades com reduzido número de parâmetros (BILLINGS e CHEN, 1989). Apesar de não ser uma proposta recente, a representação NARX racional ainda apresenta poucas aplicações efetivamente testadas em situações reais (CORRÊA, 1997). Entretanto, são encontrados na literatura técnicas diversas para a estimação de parâmetros de modelos racionais (BILLINGS e ZHU, 1991; VÁSQUEZ, 1999; CORRÊA, 2001; ZHU, 2003).

Dentre os três grupos de modelagem, a caixa-cinza tem ganhado atenção de alguns pesquisadores (AGUIRRE et al., 2000; PEARSON e POTTMANN, 2000; CORRÊA, 2001; NE-

POMUCENO, 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 a 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).

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 procedimentos para inserir informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos NARX racionais, identificados com dados de uma região restrita de operação. Para o presente trabalho foi escolhido o processo de neutralização de pH para projeto e construção de um processo piloto. 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, 2005; BOLING et al., 2007). Muitas vezes esta popularidade se justifica por ser um sistema simples, muito utilizado na indústria e por apresentar severas não-linearidades, tornando-o um processo exigente quanto ao controle e identificação (GUSTAFSSON et al., 1995).

1.1 Objetivos

O principal objetivo deste trabalho é propor procedimentos para o uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos NARX racionais usando dados de uma região restrita de operação. Outros objetivos, decorrentes do primeiro, consistem na implementação do modelo fenomenológico de uma planta de neutralização de pH e no projeto e construção da mesma.

Para cumprimento dos objetivos citados anteriormente, surgem outros específicos de cada um deles, listados a seguir.

- Comprovar as melhorias adquiridas no modelo NARX racional, após a inserção da informação auxiliar.
- Comparar de resultados entre o modelo fenomenológico e a planta piloto de neutralização de pH.
- Desenvolver algoritmos que permitam inserir informação auxiliar durante a estimação de parâmetros de um modelo NARX racional.

1.2 Contribuições

Apresenta-se uma plataforma para simulação de uma planta de neutralização de pH (modelo matemático), considerando três fluxos de entrada (ácido forte, base forte e tampão) e um de saída, na qual são investigadas as técnicas de inserção de informação auxiliar para a estimação de parâmetros de um modelo NARX racional. Apresenta-se também o projeto de uma planta piloto de neutralização de pH para fins de simulações reais, permitindo assim que as respostas do modelo obtido com dados simulados possam ser comparadas com as respostas do modelo obtido com dados reais.

Além de outros procedimentos para a inserção de informação auxiliar na estimação de parâmetros dos modelos NARX racionais, também pode ser citada a planta piloto de neutralização de pH como uma das principais contribuições deste trabalho. A planta piloto de neutralização de pH é um importante instrumento para o ensino e pesquisa de identificação e controle de sistemas não-lineares.

Os resultados obtidos neste trabalho são:

- obtenção de um modelo NARX racional que tenha respostas com derivada sempre positiva, quando comparada à curva estática do pH;
- comprovação das melhorias do modelo quando incorporada, a este, a informação auxiliar;
- verificação da facilidade de obter equações algébricas para incorporar informações auxiliares.

1.3 Apresentação do trabalho

Esta dissertação consiste numa breve revisão bibliográfica sobre a modelagem matemática (Capítulo 2), seguida da modelagem da planta de neutralização de pH (Capítulo 3), os procedimentos propostos para inserção de informação auxiliar na estimação de parâmetros (Capítulo 4), os resultados e discussões (Capítulo 5), as conclusões (Capítulo 6) e o projeto construtivo da planta (Apêndice A). De forma resumida, tem-se:

- **Capítulo 2: Modelagem de Sistemas.** Este capítulo aborda questões relativas à modelagem fenomenológica e empírica de sistemas. A modelagem empírica apresentada tem como abordagem principal os modelos racionais.
- **Capítulo 3: Modelagem da planta de neutralização de pH.** Este capítulo descreve os procedimentos para a modelagem de uma planta de neutralização de pH baseada em invariantes de reação.
- **Capítulo 4: Procedimentos para uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros em modelos NARX racionais.** Este capítulo apresenta os procedimentos para inserir informação na estimação de parâmetros de modelos NARX racionais, identificados a partir de uma massa de dados restrita a uma região de operação.
- **Capítulo 5: Resultados e Discussões.** Neste capítulo é feita a avaliação do modelo desenvolvido no Capítulo 3, bem como dos procedimentos propostos no Capítulo 4
- **Capítulo 6: Conclusões.** Este capítulo apresenta as conclusões da dissertação e sugestões para trabalhos futuros.
- **Apêndice A: Projeto da planta piloto de neutralização de pH.** Este apêndice apresenta o projeto estrutural e elétrico da planta piloto de neutralização de pH, além dos materiais utilizados e procedimentos de preparo de solução e calibração das bombas

Capítulo 2

Modelagem de Sistemas

2.1 Introdução

À medida que a humanidade evolui em cultura, ciência e tecnologia, maior se torna a necessidade de informações a respeito desta evolução. Estas informações podem ser comportamentais, climáticas, financeiras, operacionais, entre outras. A comunidade científica, que estuda tecnologias de informação, tem uma premissa que é, "*Mais importante que ter as informações é saber usá-las*". A modelagem matemática é uma das formas de usar estas informações para prever, analisar e controlar o comportamento de um sistema em diferentes condições. Tal premissa pode ser usada como uma das justificativas para Ljung (1999) e Aguirre (2004) classificarem a modelagem não somente como uma ciência, mas também como uma arte.

O objetivo deste capítulo é apresentar o estudo da modelagem matemática desde os conceitos básicos às etapas para construção de modelos fenomenológicos (também conhecidos como modelos caixa-branca) e os modelos empíricos (conhecidos como modelos caixa preta). Estes conceitos servirão como base para o desenvolvimento apresentado nos capítulos seguintes.

A Figura 2.1 apresenta, de forma simplificada, os dois caminhos para se chegar a um modelo de um sistema, no qual a modelagem fenomenológica tem como base as leis físicas e/ou químicas (neste caso a lei de Newton - $F = m.a$ e a lei de Ohm $V = R.I$) e a modelagem empírica os dados de entrada e saída do sistema.

Quando se usa a modelagem fenomenológica, o resultado é, em geral, um modelo apresentado na forma de equações diferenciais. Por outro lado, quando se usa a modelagem empírica, os modelos são representados por diferentes representações. Das duas modalidades, os modelos

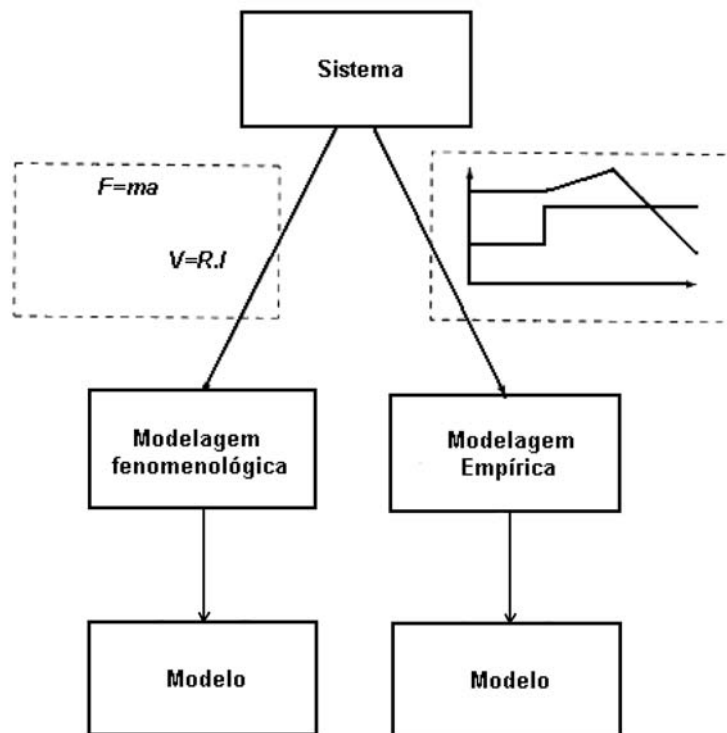


Figura 2.1: Construção do modelo. Do sistema ao modelo. Adaptado de (LJUNG e TOR KEL, 1994).

podem ser lineares ou não-lineares.

Na modelagem empírica existe maior liberdade para se escolher o tipo de representação que será usada. Neste trabalho optou-se por trabalhar com a representação NARX racional. Os motivos desta escolha são discutidos ao longo desta dissertação.

2.2 Conceitos básicos

2.2.1 Sistema e experimento

Existem várias formas de definir o conceito de sistema. Fazendo uma análise mais geral, um sistema pode ser definido como a combinação de componentes, partes, entidades ou elementos, que atuam em conjunto e realizam o mesmo objetivo (OGATA, 2000). Este conjunto de componentes pode ser físico, biológico, mecânico, financeiro, entre outros (AGUIRRE, 2004). Em outra abordagem mais simples, sistema pode ser definido como os objetos ou conjunto de objetos cujas propriedades deseja-se estudar (LJUNG e TOR KEL, 1994). A partir da determinação

do foco de estudos, um sistema pode ser dividido em sub-sistemas, nos quais a taxa de sinergia entre os mesmos garante o cumprimento do objetivo do sistema como um todo.

Durante séculos a principal atividade das ciências naturais foi fazer perguntas sobre as propriedades dos sistemas, sendo que a forma mais apropriada para responder tais questionamentos consistem na realização de experimentos (LJUNG e TORDEL, 1994).

O experimento consiste na montagem de uma estratégia concreta a partir da qual se organizam diversas ações observáveis, direta ou indiretamente, de forma a provar a veracidade ou falsidade de uma hipótese ou de forma a estabelecer uma relação de causa e efeito entre os fenômenos. Muitas vezes, realizar um experimento com sistemas pode ser caro, perigoso ou impossível, por isso a maneira de abstrair aspectos do sistema é a construção de modelos (LJUNG e TORDEL, 1994; LUYBEN, 1996).

2.2.2 O que é um modelo?

Uma das principais bases para o conhecimento científico e tecnológico é a construção de modelos. Segundo Ljung e Torkel (1994), modelo é uma ferramenta usada para a determinação de perguntas e respostas sobre um sistema sem a necessidade de realização de experimento. Da mesma forma que existem diferentes tipos de sistemas, existem diferentes tipos de modelos, a saber: modelos físicos, como protótipos e plantas pilotos, modelos mentais usados para executar tarefas do cotidiano das pessoas, modelos gráficos, que são usados para descrever o comportamento do sistema por tabelas numéricas ou curvas de desempenho, e finalmente os modelos matemáticos que, segundo Garcia (2005), são uma representação abstrata da realidade por equações.

Nesta dissertação, os modelos utilizados para representação dos sistemas são os matemáticos, que dentre as diversas formas de classificar as técnicas de modelagem, são agrupados em três grupos:

- modelos caixa-branca (fenomenológico);
- modelos caixa-preta (empírico);
- modelos caixa-cinza (semi-físico ou empírico com uso de informação auxiliar).

A estrutura do modelo caixa-branca ou fenomenológico é determinada pelas equações físicas e/ou químicas que regem o sistema (GARCIA, 2005). No modelo caixa-preta ou empírico nenhum ou muito pouco conhecimento auxiliar do sistema é necessário (AGUIRRE, 2004),

sendo a estrutura deste modelo baseada nas informações contidas nos dados de entrada e de saída coletados.

O modelo caixa-cinza se encontra entre o modelo caixa-branca e o modelo caixa-preta. Neste modelo a estrutura é baseada nos dados de entrada e saída para identificação juntamente com informações auxiliares que não estão presentes nestes dados. Independentemente do tipo do modelo matemático, o mesmo será uma aproximação do sistema real, ou seja, o modelo não incorpora todas as características de um processo real (GARCIA, 2005).

2.2.3 Modelos e simulações dinâmicas

Existem diferentes razões para que um experimento com o sistema não possa ser realizado, mas isso não impede que o modelo do mesmo seja avaliado. A avaliação do modelo também chamada de validação, pode ser feita analiticamente ou com a resolução das equações que descrevem o sistema cujo comportamento deseja-se estudar (LJUNG e TOR KEL, 1994). Segundo Garcia (2005) a simulação é usada desde o projeto até a operação de processos reais, incluindo os estudos de viabilidade econômica.

Diversos motivos justificam a construção de modelos e a simulação dos mesmos (LUYBEN, 1996; BEQUETTE, 2003; GARCIA, 2005), sendo eles:

- treinamento operacional;
- projeto do processo, equipamento e plantas;
- pré-operação e operação de plantas;
- teste de sistemas de segurança;
- sistemas de controle;
- otimização das condições operacionais;
- pesquisa.

A simulação de modelos pode ser realizada de forma a analisar o comportamento tanto estático como dinâmico do sistema. A primeira permite uma análise do comportamento do sistema em regime permanente, já a segunda permite o estudo de como certas grandezas variam no tempo e a causa destas variações. Simular um sistema é a maneira mais barata e segura de realizar "experimentos" em um sistema, entretanto os valores dos resultados de simulação dependem da qualidade do modelo (LJUNG e TOR KEL, 1994; LUYBEN, 1996).

2.2.4 Classificações para modelos matemáticos

Conforme a representação do modelo, o mesmo pode ser classificado de diversas formas. Algumas dessas classificações serão apresentadas a seguir, tendo como base as bibliografias estudadas (LJUNG e TORDEL, 1994; BEQUETTE, 2003; AGUIRRE, 2004; GARCIA, 2005).

2.2.4.1 *Modelo estático e Modelo dinâmico*

A diferença básica entre um modelo estático e um modelo dinâmico é que as variáveis do primeiro relacionam-se sem a dependência temporal, ao contrário do segundo. Fazendo uma análise matemática destes modelos, o modelo estático não apresenta um sistema de equações diferenciais em relação ao tempo. O modelo dinâmico é composto por equações diferenciais que incluem a variável tempo e, em alguns casos, apresentam equações algébricas, como é o caso de modelos RNA (Redes Neurais Artificiais).

Todo sistema real é, em última análise, dinâmico, logo o que define se o modelo real será descrito estaticamente é a não relevância de sua análise temporal (AGUIRRE, 2004).

2.2.4.2 *Modelo linear e Modelo não linear*

Um modelo é dito linear quando obedece ao princípio da superposição, ou seja, se o mesmo atende as propriedades de aditividade e homogeneidade. Por exemplo, considere um sistema excitado exclusivamente pela entrada $u_i(t)$, deste modo a equação que relaciona entrada e saída pode ser simplificada como $y_i(t) = f(u_i(t))$. Para este sistema ser linear $y_1(t) + y_2(t) = f(u_1(t)) + f(u_2(t))$ e $\alpha y_i(t) = f(\alpha u_i(t))$, para todo α (constante qualquer) e todo $u_i(t)$ (CHEN, 1998).

Um modelo não-linear não obedece ao princípio da superposição e/ou da homogeneidade. Isso significa que a resposta na saída de um sistema à soma das entradas não é a soma das respostas às entradas individuais e/ou a multiplicação da entrada por um escalar não faz com que a resposta seja multiplicada pelo mesmo escalar (NISE, 2002).

2.2.4.3 *Modelos monovariáveis e Modelos multivariáveis*

Os modelos matemáticos podem ser classificados conforme a quantidade de entradas e saídas presentes no mesmo. Quando a relação de causa e efeito ocorre somente com um par de variáveis, sendo elas, uma entrada e uma saída, o modelo é dito monovariável, por outro lado quando o modelo apresenta mais de uma entrada ou mais de uma saída o mesmo é dito multivariável. Deste modo os modelos podem ser classificados como (AGUIRRE, 2004):

- SISO (*single input, single output*) uma entrada e uma saída - monovariável;
- MISO (*multiple input, single output*) múltiplas entradas e uma saída - multivariável;
- SIMO (*single input, multiple output*) uma entrada e múltiplas saídas - multivariável;
- MIMO (*multiple input, multiple output*) múltiplas entradas e múltiplas saídas - multivariável.

2.2.4.4 Modelos paramétricos e modelos não paramétricos

Com base nas referências bibliográficas estudadas (LJUNG e TORDEL, 1994; AGUIRRE, 2004; GARCIA, 2005), os modelos paramétricos são os que utilizam estrutura e um conjunto de parâmetros, por exemplo, funções de transferência e modelos em espaço de estado. A função de transferência representada pela equação (2.1) é um exemplo típico de modelo paramétrico.

$$H(s) = \frac{1}{s^2 + 0,3s + 1} \quad (2.1)$$

Os modelos não paramétricos são modelos de convolução, ou seja, representações gráficas, como resposta ao impulso, resposta ao degrau e a resposta em frequência (AGUIRRE, 2004).

A Figura 2.2 representa um modelo não paramétrico que apresenta as mesmas informações do modelo paramétrico representado pela equação (2.1).

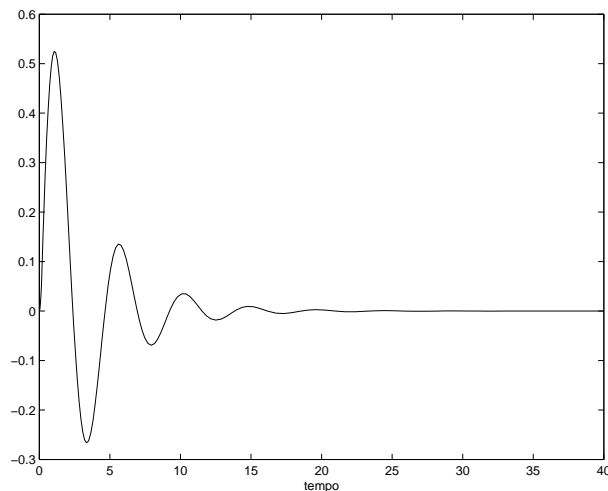


Figura 2.2: Representação não paramétrica. Resposta ao impulso.

Outra forma de representação de um modelo não-paramétricos é por meio de tabelas. No caso da equação da (2.1), a mesma poderia ser representada de forma não paramétrica a partir de uma tabela com duas colunas, sendo uma com o tempo e a outra com a variação do sinal.

2.2.4.5 Modelos invariantes no tempo e modelo variantes no tempo

Um modelo é considerado invariante no tempo quando os seus parâmetros não variam ao longo do tempo, ou seja, um deslocamento no tempo de entrada causa um deslocamento no tempo de saída, caso contrário o mesmo é considerado variante no tempo (AGUIRRE, 2004), (GARCIA, 2005).

Ressalta-se porém que a maioria dos sistemas reais são variantes no tempo, isso devido à flutuação das variáveis que afetam a sua operação, mas a consideração de invariância simplifica a modelagem do sistema (AGUIRRE, 2004).

2.2.4.6 Modelos no domínio do tempo e modelo no domínio da frequência

Os modelos no domínio do tempo são geralmente representados por equações diferenciais ou de diferença, que incorporam a resposta e a descrição de um sistema em termos de tempo, t .

Os modelos no domínio da frequência são geralmente representados por uma função de transferência¹. Estes modelos relacionam algebricamente uma representação da saída a uma representação da entrada (NISE, 2002).

Garcia (2005) exemplifica muito bem a diferença entre estes dois modelos, sendo:

- equações diferenciais e de diferença são modelos no domínio do tempo;
- diagrama de Bode, diagrama de Nyquist e a densidade espectral são modelos no domínio da frequência.

2.2.4.7 Modelos a parâmetros concentrados e modelos a parâmetros distribuídos

Nos modelo a parâmetros concentrados, considera-se que as variáveis modeladas se alteram somente em função do tempo e não do espaço, ou seja, as propriedades do sistema são homogêneas em todo o volume de controle.

Nos modelos a parâmetros distribuídos as variáveis modeladas alteram-se em função do tempo e do espaço, ou seja, as propriedades do sistema são heterogêneas em todo o volume de controle.

¹Transformada de Laplace da resposta ao impulso de um sistema

2.2.4.8 Modelos determinísticos e modelos estocásticos

Uma das principais diferenças entre um modelo determinístico e estocástico é que no primeiro não estão representadas as incertezas presentes em um sistema real. Desta forma, no modelo determinístico, a saída é calculada de forma exata tão logo se conheça o sinal de entrada e as condições iniciais, já no modelo estocástico, devido as incertezas consideradas, a saída apresenta comportamento aleatório.

2.3 Modelagem fenomenológica (Modelagem física)

As leis fundamentais da física e da química, como conservação de massa, energia e de quantidade de movimento, são as bases para construção de modelos fenomenológicos. O processo de definição das equações que descrevem o modelo exigem do especialista (responsável pelo modelo), muita prática, habilidade, engenhosidade, criatividade e inovação (LUYBEN, 1996). Os adjetivos, atribuídos por Luyben (1996) ao especialista responsável pelo modelo, justificam-se pela necessidade de suposições que impeçam o desenvolvimento de modelos muito complexos mas que se ajustem ao comportamento real do sistema. Outro fato importante, que deve ser ressaltado na modelagem, é a consistência matemática do modelo, por exemplo, garantir que o número de equações se iguale ao número de variáveis e verificar se as unidades usadas em todos os termos das equações são consistentes.

Cannon (1967) *apud* (GARCIA, 2005) citam três estágios para construção de modelos fenomenológicos até a simulação, sendo eles:

1. especificar o sistema, ou seja, estruturar o problema;
2. formular as equações básicas de forma a representar o sistema estático e/ou dinâmico;
3. simular o modelo fazendo os estudos de seu comportamento dinâmico.

2.3.1 Estrutura do problema

Segundo Ljung e Torkel (1994), para a estruturação do problema alguns questionamentos sobre o sistema fazem-se necessários, como: (i) Qual(is) saída(s) deseja-se modelar? (ii) Quais variáveis são importantes para descrever o comportamento do sistema? (iii) Destas variáveis quais são internas ao sistema? (iv) Quais são variantes no tempo e quais são constantes? (v) Que variáveis afetam as variáveis de interesse? (vi) Quais são as relações dinâmicas e estáticas?

Respostas a estes questionamentos demandam bastante conhecimento do sistema e em alguns casos são trabalhosas. Mas deve ser ressaltado que tais respostas são importantes para determinar quais saídas, sinais externos e variáveis internas são significativas à modelagem.

Durante a estruturação do problema, fazem-se necessárias algumas simplificações, mas que não invalidem o modelo. Em Cannon (1967) *apud* (GARCIA, 2005), citam-se, a seguir, algumas simplificações comuns à maioria dos sistemas.

- Desconsiderar variáveis que tenham pouco efeito no sistema e assumir que as vizinhanças do sistema não são afetadas pelo mesmo. Essas simplificações reduzem o número de variáveis e a complexidade das equações diferenciais que descrevem o comportamento das variáveis.
- Substituir características distribuídas por características concentradas de forma a representar o modelo com equações diferenciais ordinárias, pois as mesmas tem soluções mais fáceis do que equações diferenciais parciais.
- Considerar que os parâmetros físicos não variam com o tempo. Esta consideração induz a modelagem do sistema a equações diferenciais invariantes no tempo.
- Adotar uma abordagem determinística para o sistema, ou seja, desconsiderar incertezas e distúrbios. Os distúrbios apresentam comportamento aleatório devido ao ruído, de modo que, se forem considerados, a modelagem deve ter uma abordagem estocástica.

Segundo Ljung e Torkel (1994), após as considerações pertinentes para a simplificação do sistema, o mesmo deve ser representado por meio de diagramas em bloco, no qual são mostradas as interações entre variáveis internas, externas e as de saídas.

A Figura 2.3 apresenta o diagrama em bloco simplificado da estrutura do sistema de pH que é abordado no capítulo 3, sendo:

- Q_1 - vazão de entrada de ácido,
- Q_2 - vazão de entrada de solução tampão,
- Q_3 - vazão de entrada de base,
- pH - potencial hidrogeniônico,
- K_{a1}, K_{a2} e K_w - constantes de equilíbrio químico,

- A - área da base do reator,
- W_{ai} a W_{bi} - invariantes de reação.

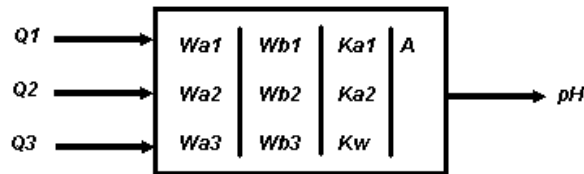


Figura 2.3: Diagrama em bloco simplificado do sistema de neutralização de pH.

O sistema de pH, representado de forma simplificada pelo diagrama da Figura 2.3, é constituído por variáveis externas (Q_1 , Q_2 e Q_3), internas (todas dentro do bloco) e a variável de saída (pH). Detalhes sobre a interação das variáveis no sistema de neutralização de pH serão discutidas no Capítulo 3.

Em alguns casos, devido à complexidade, é conveniente dividir o sistema em sub-sistemas, sendo cada um representado por um bloco separadamente interagindo com os demais.

2.3.2 Descrevendo a relação entre as variáveis

Nesta etapa, a partir do diagrama em blocos definido na Seção 2.3.1, são formuladas as equações que relacionam as variáveis que descrevem os estados do sistema. Existem diferentes tipos de relações entre essas variáveis, as quais podem ser separadas em dois grupos (LJUNG e TOR KEL, 1994), sendo elas:

- relações constitutivas;
- relações de equilíbrio ou leis de conservação

As relações constitutivas descrevem as características estáticas de algum material, componente ou bloco do sistema, por exemplo, a relação elétrica entre a corrente e a tensão.

As leis de conservação descrevem o equilíbrio de alguma quantidade física básica, como massa, energia, entre outras. Essas leis são a base para grande parte dos modelos fenomenológicos, destacando-se o balanço de massa (BM) e o balanço de energia (BE), para os quais

o princípio fundamental é que a massa e a energia se conservam em um determinado sistema (BEQUETTE, 2003).

O princípio para descrever a relação das variáveis utilizando o equacionamento do BM e BE é a partir da ilustração do diagrama em blocos do sistema mostrado na figura 2.4

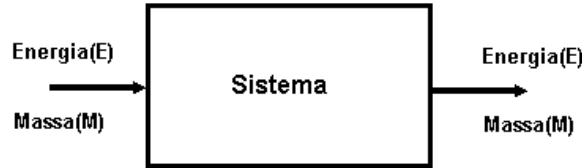


Figura 2.4: Representação básica de um sistema relacionado com a energia e massa que entram e saem do mesmo.

A Figura 2.4 representa um sistema simples com massa (M) e energia (E) evoluindo pelas fronteiras do mesmo, sendo:

$$\begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{que entra} \\ \text{no sistema} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{que sai do} \\ \text{sistema} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{acumulada} \\ \text{no sistema} \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

A partir da equação (2.2) pode-se fazer uma análise temporal da variação de massa e energia em uma base de tempo infinitesimal (Δt), chega-se a

$$\begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{que entra} \\ \text{no sistema} \\ t \rightarrow \Delta t \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{que sai do} \\ \text{sistema} \\ t \rightarrow \Delta t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{M e/ou E} \\ \text{acumulada} \\ \text{no sistema} \\ t \rightarrow \Delta t \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Analisando a equação (2.3) somente em função da massa, a mesma passa a ser formulada matematicamente como

$$M \Big|_{t+\Delta t} - M \Big|_t = \int_t^{t+\Delta t} \dot{m}_{in} dt - \int_t^{t+\Delta t} \dot{m}_{out} dt = \int_t^{t+\Delta t} (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out}) dt \quad (2.4)$$

sendo M a massa total do sistema, \dot{m}_{in} a taxa de massa que entra no sistema e \dot{m}_{out} a taxa de massa que sai.

Considerando o teorema do valor médio para a integração, tem-se

$$\int_{x_1}^{x_1+\Delta x} f(t)dt = f(c)\Delta x, \quad (2.5)$$

no qual c corresponde a um valor de t entre x_1 e $x_1 + \Delta x$. Deste modo pode-se representar a equação (2.4) como

$$\int_t^{t+\Delta t} (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out})dt = (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out})|_c \cdot \Delta t \quad (2.6)$$

substituindo a equação (2.6) na equação (2.4), encontra-se

$$M|_{t+\Delta t} - M|_t = (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out})|_c \cdot \Delta t \quad (2.7)$$

dividindo a equação (2.7) por Δt , tem-se

$$\frac{M|_{t+\Delta t} - M|_t}{\Delta t} = (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out})|_c \quad (2.8)$$

considerando o teorema do valor médio para a derivação, ou seja:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_c = \frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{\Delta x} \quad (2.9)$$

tem-se

$$\left. \frac{dM}{dt} \right|_c = \frac{M|_{t+\Delta t} - M|_t}{\Delta t} \quad (2.10)$$

substituindo a equação (2.10) na equação (2.8), chega-se a

$$\left. \frac{dM}{dt} \right|_c = (\dot{m}_{in} - \dot{m}_{out})|_c \quad (2.11)$$

sendo Δt um tempo infinitesimal a equação (2.11) pode ser representada como

$$\frac{dM}{dt} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} \quad (2.12)$$

A equação (2.12) é uma equação diferencial cuja variável de interesse, ou seja, a variável de estado é a massa (M) acumulada no sistema que depende da taxa mássica de entrada (\dot{m}_{in}) e da taxa mássica de saída (\dot{m}_{out}).

As relações constitutivas e de equilíbrio são consideradas individualmente, de forma que posteriormente as mesmas são combinadas algebricamente em um conjunto de equações que descrevem o modelo.

2.3.3 A simulação do modelo

A simulação do modelo é a última etapa para conclusão da modelagem fenomenológica. Durante a simulação estuda-se o comportamento e reações do modelo em comparação com o sistema real.

Segundo Garcia (2005), Ljung e Torkel (1994) antes de iniciar a simulação do modelo são necessários os seguintes elementos:

- as equações que descrevem o modelo;
- expressar as saídas como funções do estado das variáveis de entrada;
- equações descritivas das variáveis de entrada do sistema em função do tempo;
- valor dos parâmetros do modelo;
- condições iniciais das variáveis cujo o comportamento será estudado no modelo.

Definidos os elementos citados, a simulação do modelo pode ser realizada pela solução das equações que descrevem o comportamento das variáveis do sistema. A solução das equações pode ser analítica ou por integração numérica.

2.4 Modelagem empírica (Identificação de sistemas)

Para modelagem usando modelos empíricos (caixa-preta), existem cinco etapas principais sendo, (LJUNG, 1999; AGUIRRE, 2004):

1. testes dinâmicos e coletas de dados;
2. escolha de representação matemática a ser usada;
3. determinação da estrutura do modelo;
4. estimação dos parâmetros;
5. validação do modelo.

Estas etapas podem ser utilizadas para a modelagem de sistemas com comportamento linear, como para sistemas com comportamento não linear (NEPOMUCENO et al., 2004). Nas próximas seções descreve-se resumidamente estas etapas, tendo como base a representação racional.

2.4.1 Testes dinâmicos e coleta de dados

Nesta etapa submete-se o sistema a ser modelado empiricamente a entradas predeterminadas de forma a obter o comportamento do mesmo a partir dos dados de saída. Estes dados, por sua vez, serão utilizados posteriormente para detecção de não linearidades, detecção de estrutura e estimação dos parâmetros do modelo.

A escolha do sinal de entrada e a correta determinação dos atrasos de transporte do sistema são cruciais na modelagem de processos (Lennox et al., (2001) *apud* Aguirre (2004)). Do ponto de vista dinâmico, o sinal de entrada deve ter um espectro de frequência adequado para excitar as dinâmicas de interesse do sistema, caso contrário, não estarão disponíveis, nos dados para modelagem, as informações com as características estáticas e dinâmicas desejadas.

Quando o sistema a ser modelado apresenta características não-lineares é necessário que o sinal de entrada sofra variação, de forma aleatória, no seu espectro de frequência e amplitude. Isso de forma a excitar as características estáticas, dinâmicas e não lineares. Deste modo, durante a identificação de sistemas não lineares, não apenas o conteúdo espectral, mas também a forma de onda do sinal de entrada é relevante (AGUIRRE, 2004).

Outro aspecto importante nesta primeira etapa é a escolha correta do tempo de amostragem (T_s) dos dados de entrada e saída do sistema. Tempo de amostragem diferentes proporcionam modelos diferentes.

Os dados de entrada e de saída de um sistema devem ser amostrados em tempo tal que todas as frequências de interesse estejam bem representadas no conjunto de dados usados na modelagem. Entretanto, o tempo de amostragem muito pequeno (superamostragem) afeta o desempenho do algoritmo de seleção de estrutura e estimação de parâmetros devido ao mal condicionamento numérico. Se por um lado a superamostragem pode provocar o mal condicionamento numérico, a subamostragem pode levar a uma perda de informação dinâmica entre uma amostra e outra (BILLINGS e AGUIRRE, 1995).

Aguirre (2004) apresenta um procedimento prático para determinar o tempo de amostragem, no qual é feita a superamostragem do sinal $y(k)$ que se deseja modelar. O que deseja-se definir é a taxa de observação do sinal $y(k)$ para gerar um sinal de trabalho devidamente amostrado. Para definir a taxa de observação do sinal deve ser feita a autocorrelação linear $r_y(\tau)$ e não linear $r_{y^2}(\tau)$ do sinal de trabalho.

$$r_y(\tau) = E[(y(k) - \overline{y(k)}).(y(k - \tau) - \overline{y(k)}))] \quad (2.13)$$

$$r_{y^2}(\tau) = E[(y^2(k) - \overline{y^2(k)}).(y^2(k - \tau) - \overline{y^2(k)}))] \quad (2.14)$$

sendo $E[.]$ a esperança matemática. Considerando o $y(k)$ ergódico, substitui-se a esperança matemática pela média temporal. A partir das funções de autocorrelação descritas pelas equações (2.13) e (2.14), chega-se a seguinte constante

$$\tau_m = \min\{\tau_y, \tau_{y^2}\} \quad (2.15)$$

sendo τ_y o instante do primeiro mínimo de $r_y(\tau)$ e τ_{y^2} o primeiro mínimo de $r_{y^2}(\tau)$. Desta forma o tempo de amostragem ideal deve estar entre o seguinte intervalo

$$\frac{\tau_m}{20} \leq T_s \leq \frac{\tau_m}{10} \quad (2.16)$$

podendo em alguns casos ser estendido para

$$\frac{\tau_m}{25} \leq T_s \leq \frac{\tau_m}{5} \quad (2.17)$$

2.4.2 Representação racional

Nos últimos anos muitas representações têm sido desenvolvidas e adaptadas para identificação de sistema não-lineares. Dentre diversas representações tem-se o modelo racional que é definido como a razão de polinômios não-lineares (BILLINGS e MAO, 1997). Encontra-se na literatura argumentações vantajosas e desvantajosas referentes a modelos racionais (BILLINGS e ZHU, 1991), (ZHU e BILLINGS, 1993), (MATOS, 2005), (RATKOWSKY (1987) e PONTON (1993) *apud* (BILLINGS e MAO, 1997)), (SONTAG (1979) e BRAESS (1986) *apud* (BILLINGS e ZHU, 1992)), (CORRÊA, 1997), (ZHU, 2003).

Como vantagens citam-se:

- eficiente na representação de várias não linearidades;
- excelente propriedade de extrapolação;
- reconhecido como um excelente modelo para aproximar variados tipos de sistemas; lineares e não lineares com uma precisão arbitrária;
- possibilitam ajuste de curvas com semelhança assintótica;
- capacidade de capturar grandes saltos na resposta de problemas não lineares, esta capacidade justifica-se a medida que o polinômio do denominador se aproxima de 0.

Como desvantagens citam-se:

- não linearidade dos parâmetros e conseqüentemente complexa estimação dos mesmos;
- a identificação para projeto do controlador é muito mais difícil para o modelo racional comparado ao modelo polinomial;
- aumento do número de entradas provoca alto custo computacional;
- sensíveis ao ruído.

A representação racional NARX (do termo em inglês *nonlinear autoregressive model with exogenous variables*) é um modelo discreto no tempo que explica a saída $y(k)$ em função dos valores prévios dos sinais de saída e de entrada, ou seja (BILLINGS e CHEN, 1989)

$$y(k) = \frac{a(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u))}{b(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u))} \quad (2.18)$$

na qual $u(k)$ é a entrada e $y(k)$ a saída, ambos em função do tempo k (discreto), n_u, n_y e d são os maiores atrasos em u, y e o tempo morto respectivamente.

Dentre os estimadores não polarizados destaca-se o estimador estendido de mínimos quadrados. Neste estimador iterativo, estimativas do ruído são usadas durante a estimação de parâmetros visando eliminar a polarização da parte determinística do modelo. Desse modo o modelo passa a incorporar o ruído durante a estimação dos parâmetros, o tornando um modelo NARMAX(do inglês *nonlinear autoregressive moving average model with exogenous variable*), sendo representado da seguinte forma:

$$y(k) = \frac{a(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u), e(k-1), \dots, e(k-n_e))}{b(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u), e(k-1), \dots, e(k-n_e))} + e(k) \quad (2.19)$$

sendo $e(k)$ o ruído não observável, independente com média zero e variância finita σ_e^2 .

A equação (2.19) pode ser representada de forma simplificada como:

$$y(k) = \frac{a(k)}{b(k)} + e(k) \quad (2.20)$$

no qual o $a(k)$ é o polinômio do numerador e $b(k)$ o polinômio do denominador, deste modo

$$a(k) = \sum_{j=1}^{num} p_{nj}(k) \theta_{nj} \quad (2.21)$$

$$b(k) = \sum_{j=1}^{den} p_{dj}(k) \theta_{dj} \quad (2.22)$$

no qual θ_{nj} e θ_{dj} são os parâmetros dos regressores do numerador e denominador respectivamente. O número total de parâmetros a estimar será $num + den$. Os termos $p_{nj}(k)$ e $p_{dj}(k)$ são coeficientes das saídas $y(k-1), \dots, y(k-n_y)$, das entradas $u(k-d), \dots, u(k-n_u)$ e do ruído $e(k-1), \dots, e(k-n_e)$.

Devido a não linearidade nos parâmetros da equação (2.19), não é possível a estimação direta dos parâmetros utilizando o estimador de mínimos quadrados. A alternativa para estimar os parâmetros é fazer a pseudo-linearização dos parâmetros do modelo racional. Para realizar

a pseudo-linearização é feita a multiplicação da equação (2.19) por $b(k)$ em ambos os lados e a movimentação de todos os termos para o lado direito com exceção a $y(k)p_{d1}\theta_{d1}$, deste modo tem-se (ZHU e BILLINGS, 1991):

$$Y(k) = a(k) - y(k) \sum_{j=2}^{den} p_{dj}(k)\theta_{dj} + b(k)e(k) \quad (2.23)$$

substituindo $a(k)$ e considerando $\zeta(k) = b(k)e(k)$

$$y(k)P_{d1}\theta_{d1} = \sum_{j=1}^{num} p_{nj}(k)\theta_{nj} - \sum_{j=2}^{den} y(k)p_{dj}(k)\theta_{dj} + \zeta(k) \quad (2.24)$$

no qual,

$$Y(k) = y(k)p_{d1}|_{\theta_{d1}=1} = p_{d1}(k) \left(\frac{a(k)}{b(k)} + e(k) \right) = p_{d1}(k) \frac{a(k)}{b(k)} + p_{d1}(k)e(k) \quad (2.25)$$

e

$$\zeta(k) = \left(\sum_{j=1}^{den} p_{dj}(k)\theta_{dj} \right) e(k) = p_{d1}(k)e(k) + \left(\sum_{j=2}^{den} p_{dj}(k)\theta_{dj} \right) e(k) \quad (2.26)$$

no qual $e(k)$ é um ruído branco, que pelo fato do mesmo ser independente de $b(k)$ e ter média nula, tem-se:

$$E[\zeta(k)] = E[b(k)]E[e(k)] = 0 \quad (2.27)$$

Pode-se verificar por meio da equação (2.24) que os termos $y(k)p_{dj}(k)$ apresentam de forma implícita o termo de ruído $e(k)$, através de $y(k)$, que por sua vez está correlacionado com $\zeta(k)$. Esta correlação induz a polarização do estimador, mesmo que $e(k)$ seja um ruído branco com média zero.

Substituindo $y(k)$ e a equação (2.26) na equação (2.24), tem-se:

$$Y(k) = \sum_{j=1}^{num} p_{nj}(k)\theta_{nj} - \sum_{j=2}^{den} \frac{a(k)}{b(k)} p_{dj}(k)\theta_{dj} + p_{d1}(k)e(k) \quad (2.28)$$

que vetorialmente expressa-se

$$Y(k) = \phi(k)\theta + \zeta(k) = \hat{\phi}(k)\theta + p_{d1}(k)e(k) \quad (2.29)$$

no qual

$$\begin{aligned}
\phi(k) &= [\phi_n(k) \quad \phi_d(k)] \\
&= [p_{n1}(k) \quad \cdots \quad p_{nnum}(k) \quad -p_{d2}(k)y(k) \quad \cdots \quad -p_{dden}(k)y(k)] \\
&= \left[p_{n1}(k) \quad \cdots \quad p_{nnum}(k) \quad -p_{d2}(k) \left(\frac{a(k)}{b(k)} + e(k) \right) \quad \cdots \quad -p_{dden}(k) \left(\frac{a(k)}{b(k)} + e(k) \right) \right] \quad (2.30)
\end{aligned}$$

o vetor de parâmetros θ

$$\begin{aligned}
\theta^T &= [\theta_n \quad \theta_d] \\
&= [\theta_{n1} \quad \cdots \quad \theta_{nnum} \quad \theta_{d2} \quad \cdots \quad \theta_{dden}] \quad (2.31)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}(k) &= [\hat{\phi}_n(k) \quad \hat{\phi}_d(k)] \\
&= \left[p_{n1}(k) \quad \cdots \quad p_{nnum}(k) \quad -p_{d2}(k) \frac{a(k)}{b(k)} \quad \cdots \quad -p_{dden}(k) \frac{a(k)}{b(k)} \right] \quad (2.32)
\end{aligned}$$

Deve ser ressaltado que, devido ao fato de $\frac{a(k)}{b(k)}$ não poder ser medido, a matriz $\hat{\phi}(k)$ não é obtida diretamente. Entretanto a matriz $\phi(k)$ pode ser construída a partir dos valores medidos de $y(k)$ e $u(k)$.

2.4.3 Estimação dos parâmetros

Tendo como base a equação (2.29), Billings e Zhu (1991) utilizando o estimador de mínimos quadrados determinaram o vetor de parâmetros Θ , o que resultou em

$$\hat{\Theta} = [\Phi^T \Phi]^{-1} \Phi^T Y \quad (2.33)$$

no qual

$$\Phi^T = [\phi^T(1) \cdots \phi^T(N)] =$$

$$\begin{bmatrix} \phi_n^T(1) \cdots \phi_n^T(N) \\ \phi_d^T(1) \cdots \phi_d^T(N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{n1}(1) & \cdots & p_{n1}(N) \\ \vdots & & \vdots \\ p_{nnum}(1) & \cdots & p_{nnum}(N) \\ -p_{d2}(1) \left(\frac{a(1)}{b(1)} + e(1) \right) & \cdots & -p_{d2}(N) \left(\frac{a(N)}{b(N)} + e(N) \right) \\ \vdots & & \vdots \\ -p_{dden}(1) \left(\frac{a(1)}{b(1)} + e(1) \right) & \cdots & -p_{dden}(N) \left(\frac{a(N)}{b(N)} + e(N) \right) \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

e

$$Y^T = [Y^T(1) \cdots Y^T(N)] = \quad (2.35)$$

sendo N é o número total de amostras, Φ é a matriz de regressores e Y é o vetor com o sinal de saída. Fica claro pelas equações (2.24) e (2.29) que Φ pode conter termos do modelo do ruído. Desta forma a matriz $\Phi^T \Phi$ e a matriz $\Phi^T Y$ podem ser expressas como:

$$\begin{aligned} \Phi^T \Phi &= [\Phi^T \Phi]_{k-1} + \sigma_e^2 \Psi \\ \Phi^T Y &= [\Phi^T Y]_{k-1} + \sigma_e^2 \psi \end{aligned} \quad (2.36)$$

no qual σ^2 a variância do ruído e Ψ e ψ matrizes auxiliares para estimação dos parâmetros no modelo racional. Desta forma o estimador de parâmetros pode ser expresso como:

$$\hat{\Theta} = \left[[\Phi^T \Phi]_{k-1}^{-1} + \sigma_e^2 \Psi \right]^{-1} \left[[\Phi^T Y]_{k-1} + \sigma_e^2 \psi \right]. \quad (2.37)$$

Por meio da equação (2.37) verifica-se que $[\Phi^T \Phi]^{-1} \Phi^T$ está correlacionado com o ruído, ou seja, existe polarização do estimador. Um estimador racional não polarizado pode ser desenvolvido removendo os termos $\sigma_e^2 \Psi$ e $\sigma_e^2 \psi$ da equação (2.37), resultando em (BILLINGS e ZHU, 1991):

$$\hat{\Theta} = \left[[\Phi^T \Phi]^{-1} - \sigma_e^2 \Psi \right]^{-1} \left[[\Phi^T Y] - \sigma_e^2 \psi \right]. \quad (2.38)$$

Em Corrêa (1997) foi desenvolvido um algoritmo para estimar os parâmetros do modelo racional, a partir do estimador de mínimos quadrados estendido (MQE) e uma modificação do algoritmo proposto por Billings e Zhu (1991). O estimador MQE é um processo iterativo, no qual os parâmetros dos termos de processo (entrada e saída) juntamente com os termos de ruído

são estimados de forma a reduzir, a níveis aceitáveis, a polarização. Neste algoritmo assume-se que o modelo racional pode ser aproximado por:

$$y(k) = \frac{a(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u))}{b(y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-d), \dots, u(k-n_u))} + c(e(k-1), \dots, e(k-n_e)) + e(k) \quad (2.39)$$

sendo $c(e(k-1), \dots, e(k-n_e))$ o polinômio para modelar o ruído. Segundo Aguirre (2004) a consideração básica sobre a equação (2.39) é que o erro de regressão pode ser representado por um modelo média móvel (MA), possivelmente não linear. O algoritmo está dividido em 5 passos, sendo eles:

1. Construa a matriz de regressores e estime o vetor de regressores usando o algoritmo de mínimos quadrados.

$$\hat{\Theta} = [\Phi^T \Phi]^{-1} \Phi^T Y \quad (2.40)$$

a matriz de regressores é formada com base nos vetores de regressão do numerador e do denominador, ou seja,

$$\Phi^T = \begin{bmatrix} \phi_n^T(1) \cdots \phi_n^T(N) \\ \phi_d^T(1) \cdots \phi_d^T(N) \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

2. Calcule a sequência de resíduos e estime a variância $\hat{\sigma}_\xi^2$ do mesmo

$$\xi(k) = y(k) - \frac{a(\dots, \hat{\Theta}(i-1))}{b(\dots, \hat{\Theta}(i-1))} \quad (2.42)$$

$$\hat{\sigma}_\xi^2(i) = \frac{1}{N - m_d} \sum_{k=m_d+1}^N \left(y(k) - \frac{a(\dots, \hat{\Theta}(i-1))}{b(\dots, \hat{\Theta}(i-1))} \right)^2 \quad (2.43)$$

no qual i é o número de iterações, N o número de amostras e m_d é o máximo atraso presente nos termos, ou seja,

$$m_d = \max(n_y, n_u, n_e) \quad (2.44)$$

3. Usando a sequência de resíduos calculada no passo 2, atualize as matrizes $\Phi^T \Phi$ e o vetor $\Phi^T Y$ utilizando (2.45). Sendo esta a segunda iteração, ou seja, $i = 2$, a matriz (2.45) deve

ser construída. Atualize também a matriz Ψ (2.46) e o vetor ψ (2.47)

$$\Phi^T = \begin{bmatrix} \phi_n^T(1) \cdots \phi_n^T(N) \\ \phi_d^T(1) \cdots \phi_d^T(N) \\ \phi_e^T(1) \cdots \phi_e^T(N) \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

$$\Psi = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & \sum_{k=1}^N p_{d2}^2(k) & \cdots & \sum_{k=1}^N p_{d2}(k)p_{den}(k) \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & \sum_{k=1}^N p_{den}(k)p_{d2}(k) & \cdots & \sum_{k=1}^N p_{den}^2(k) \end{bmatrix} \quad (2.46)$$

$$\psi = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \sum_{k=1}^N p_{d2}(k)p_{d1}(k) \\ \sum_{k=1}^N p_{den}(k)p_{d1}(k) \end{bmatrix} \quad (2.47)$$

4. Estime os novos parâmetros usando

$$\hat{\Theta} = \left[[\Phi^T \Phi]^{-1} - \sigma_e^2 \Psi \right]^{-1} \left[[\Phi^T Y] - \sigma_e^2 \psi \right]. \quad (2.48)$$

5. Volte ao passo 2 e repita o algoritmo até os parâmetros estimados e $\hat{\sigma}_\xi^2$ convergir em um valor constante.

2.4.4 Agrupamento de termos para modelo racional

Escrevendo a parte determinística do modelo NARMAX da equação (2.19), que é NARX, pode ser expressa como

$$y(k) = \frac{\sum_{m=0}^{\ell^\alpha} \sum_{p=0}^m \sum_{n_1^\alpha, \dots, n_m^\alpha}^{n_y^\alpha, n_u^\alpha} \alpha_{p,m-p}(n_1^\alpha, \dots, n_m^\alpha) \prod_{i=1}^p y(k - n_i^\alpha) \prod_{i=p+1}^m u(k - n_i^\alpha)}{\sum_{m=0}^{\ell^\beta} \sum_{p=0}^m \sum_{n_1^\beta, \dots, n_m^\beta}^{n_y^\beta, n_u^\beta} \beta_{p,m-p}(n_1^\beta, \dots, n_m^\beta) \prod_{i=1}^p y(k - n_i^\beta) \prod_{i=p+1}^m u(k - n_i^\beta)} \quad (2.49)$$

no qual ℓ^α é o grau de não-linearidade do numerador e ℓ^β é o grau de não-linearidade do denominador. A partir de equação (2.49), Mendes (1995) *apud* Corrêa (1997), define-se os conceitos de agrupamento de termos em modelos racionais, conforme se segue:

1. Agrupamento de termos do numerador

Os coeficientes de agrupamento do numerador $\Omega_{y^{p_u m-p}}^\alpha$ são representados pelas constantes $\sum_{n_1^\alpha, \dots, n_m^\alpha}^{n_y^\alpha, n_u^\alpha} \alpha_{p,m-p}(n_1^\alpha, \dots, n_m^\alpha)$ da equação (2.49). Estas constantes apresentam termos na forma $y(k-i)^p u(k-j)^{m-p}$ para $m = 0, \dots, \ell^\alpha$ e $p = 0, \dots, m$. Os coeficientes são chamados de *coeficientes de agrupamento do numerador* e são representados por $\sum_{y^{p_u m-p}}^\alpha$.

2. Agrupamento de termos do denominador

Os coeficientes de agrupamento do denominador $\Omega_{y^{p_u m-p}}^\beta$ são representados pelas constantes $\sum_{n_1^\beta, \dots, n_m^\beta}^{n_y^\beta, n_u^\beta} \beta_{p,m-p}(n_1^\beta, \dots, n_m^\beta)$ da equação (2.49). Estas constantes apresentam termos na forma $y(k-i)^p u(k-j)^{m-p}$ para $m = 0, \dots, \ell^\beta$ e $p = 0, \dots, m$. Os coeficientes são chamados de *coeficientes de agrupamento do denominador* e são representados por $\sum_{y^{p_u m-p}}^\beta$.

2.4.5 Escolha de estrutura

Neste trabalho parte do pressuposto que o problema de escolha da estrutura esteja resolvido. De qualquer forma o procedimento utilizado, quando se fez necessário determinar a estrutura, foi o da taxa de redução do erro (ERR - "error reduction ratio") proposto por Billings et al. (1989), adaptado por Mendes (1995) *apud* Corrêa (1997) para modelos racionais e alterado por Corrêa (1997) de forma a inserir os termos de ruído.

O algoritmo ERR consiste em associar cada termo candidato a um índice que corresponde à contribuição deste à explicação da variância dos dados de saída. Este algoritmo ordena os termos candidatos em uma lista decrescente conforme sua importância na identificação do sistema.

O número de termos candidatos possíveis em um modelo é definido pelo grau de não linearidade (ℓ) e os atrasos máximos de n_y e n_u , ou seja, o aumento do grau de não linearidade (ℓ) e dos atrasos máximos provoca um aumento significativo no número de termos candidatos.

2.4.6 Validação do modelo

Após ter sido obtido um modelo é necessário verificar se o mesmo é válido, ou seja, se incorpora características do sistema original. Tal afirmativa torna-se subjetiva uma vez que a validade de um modelo está relacionada com seus objetivos. Sabe-se que nenhum modelo representa um sistema em todos seus aspectos, deste modo os seus objetivos são definidos pelas características que se deseja incorporar no mesmo (AGUIRRE, 2004). Consequentemente, a validação depende da aplicação pretendida ao modelo e das informações disponíveis sobre o sistema original. É importante ressaltar que, a ausência de termos importantes ao modelo pode provocar a polarização dos parâmetros (AGUIRRE, 2004).

Neste trabalho os modelos são validados segundo os seguintes critérios:

1. Erro quadrático médio ($RMSE$ - do inglês *root mean squared error*)
2. Análise dos resíduos

O índice $RMSE$ que mede o erro da predição livre do modelo com relação a média dos dados reais é dado pela equação (AGUIRRE, 2004):

$$RMSE = \frac{\sqrt{\sum_{k=1}^N (y(k) - \hat{y}(k))^2}}{\sqrt{\sum_{k=1}^N (y(k) - \bar{y})^2}} \quad (2.50)$$

no qual $\hat{y}(k)$ é a predição livre do modelo e \bar{y} é o valor médio do sinal medido. Índices $RMSE$ maiores que 1 significa que a resposta do modelo é pior que a média temporal dos dados. Neste trabalho serão considerados bons modelos aqueles que apresentam índice $RMSE$ menor que 1. Ressalta-se porém que quanto menor o índice $RMSE$ melhor o modelo.

O critério de análise de resíduos consiste em efetuar testes de correlação linear e não-linear

nos resíduos para verificar se os mesmos são aleatórios ou não. O primeiro passo para este critério e determinar o vetor de resíduos, no qual tem-se:

$$\xi = \mathbf{Y} - P\hat{\theta} \quad (2.51)$$

sendo ξ o vetor de resíduos, \mathbf{Y} o vetor com o sinal de saída, P a matriz de regressores e $\hat{\theta}$ o vetor de parâmetros estimado. Após definido o vetor de resíduos ξ , um conjunto de funções de correlação (r) são usadas para validação de modelos não lineares (BILLINGS e VOON (1986) *apud* AGUIRRE (2004)), sendo elas:

$$r_{\xi\xi}(\tau) = E\{\xi(k)\xi(k-\tau)\} = \delta(0), \quad (2.52)$$

$$r_{\xi u}(\tau) = E\{\xi(k)u(k-\tau)\} = 0, \quad \forall \tau, \quad (2.53)$$

$$r_{u^2\xi}(\tau) = E\{(u^2(k-\tau) - \overline{u^2(k)})\xi(k)\} = 0, \quad \forall \tau, \quad (2.54)$$

$$r_{u^2\xi^2}(\tau) = E\{(u^2(k-\tau) - \overline{u^2(k)})\xi^2(k)\} = 0, \quad \forall \tau, \quad (2.55)$$

$$r_{\xi(\xi u)}(\tau) = E\{(\xi(k)\xi(k-1-\tau)u(k-1-\tau))\} = 0, \quad \tau \geq 0, \quad (2.56)$$

$$r_{\xi^2\xi^2}(\tau) = E\{(\xi^2(k) - \overline{\xi^2(k)})(\xi^2(k-\tau) - \overline{\xi^2(k)})\} = \delta(0). \quad (2.57)$$

no qual $\delta(0)$ é o impulso unitário e a barra indica o valor médio. Para que os parâmetros do modelo sejam não polarizados, as funções de correlação (equações 2.52 a 2.57) devem ser satisfeitas.

É definido um intervalo de confiança de 95%, no qual as funções de correlação devem se manter para serem consideradas nulas. O intervalo de confiança de 95% é baseado no comprimento do registro de dados utilizado.

2.5 Monotonicidade de seqüências

Os procedimentos que são propostos neste trabalho (Capítulo 4) também usam como informação auxiliar a monotonicidade da seqüência estática. Nesta seção são abordados, de forma geral, a definição de seqüência e a sua classificação quanto à monotonicidade.

2.5.1 Seqüência

Seja um conjunto de dados Γ , a seqüência dos elementos dos mesmos é uma função H que mapeia o conjunto \mathbf{N} em Γ ($H: \mathbf{N} \rightarrow \Gamma$). Em uma seqüência, cada termo tem uma ordem (1° , 2° , 3° , ...) , deste modo a seqüência h apresenta seus termos em ordem crescente de índices (h_1, h_2, h_3, \dots) que são chamados de termos da seqüência ou termos sucessivos. Uma seqüência pode ser classificada como monótona crescente, decrescente, estritamente crescente e estritamente decrescente.

2.5.2 Monótona Estritamente crescente

Uma seqüência (h_n) é monótona estritamente crescente quando $\forall n \in \mathbf{N}, h_n < h_{n+1}$, 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.

2.5.3 Monótona Estritamente decrescente

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

2.5.4 Monótona crescente

Uma seqüência (h_n) é monótona crescente quando $\forall n \in \mathbf{N}, h_n \leq h_{n+1}$, isto é, quando cada termo não cresce em relação ao anterior. Nesse caso cada termo é maior ou igual aos anteriores e menor ou igual aos seguintes.

2.5.5 Monótona decrescente

Uma seqüência (h_n) é monótona decrescente quando $\forall n \in \mathbf{N}, h_{n+1} \leq h_n$, isto é, quando cada termo não decresce em relação ao anterior. Nesse caso cada termo é menor ou igual aos anteriores e maior ou igual aos seguintes.

2.5.6 Teste de monotonicidade

O teste de monotonicidade de seqüências pode ser realizado pela diferença entre os termos sucessivos, ou pela razão de dois termos sucessivos.

2.5.6.1 1º Método - diferença entre termos sucessivos

Uma seqüência é classificada monótona

- estritamente crescente se $h_{n+1} - h_n > 0. \forall_n$
- estritamente decrescente se $h_{n+1} - h_n < 0. \forall_n$
- crescente se $h_{n+1} - h_n \geq 0. \forall_n$
- decrescente se $h_{n+1} - h_n \leq 0. \forall_n$

2.5.6.2 2º Método - razão entre dois termos sucessivos (válido para h sempre positivo)

Uma seqüência é classifica monótona

- estritamente crescente se $\frac{h_{n+1}}{h_n} > 1. \forall_n$
- estritamente decrescente se $\frac{h_{n+1}}{h_n} < 1. \forall_n$
- crescente se $\frac{h_{n+1}}{h_n} \geq 1. \forall_n$
- decrescente se $\frac{h_{n+1}}{h_n} \leq 1. \forall_n$

2.5.7 Seqüências Limitadas

Uma seqüência de números reais é limitada quando o conjunto de seus termos são limitados, ou seja, quando o conjunto de termos está contido entre uma cota superior e inferior

2.6 Considerações finais

Neste capítulo foi apresentada de forma generalizada a modelagem matemática, abordando as definições de sistemas, experimentos, modelo, simulação e a classificação dos diversos tipos de modelos. Abordam-se também as formas de obtenção dos modelos, em especial a modelagem fenomenológica e a modelagem empírica. Como, no presente trabalho, são utilizadas as duas modelagens tratadas neste capítulo, fez-se necessária a apresentação de todas as etapas para obtenção de modelos fenomenológicos e empíricos separadamente.

Um ponto de destaque neste capítulo é que a identificação empírica foi descrita utilizando como referência os modelos racionais. Estes modelos são a base para os procedimentos propostos no capítulo 4.

A determinação do tipo de modelagem a ser utilizada fica a critério do especialista responsável pelo modelo, mas deve ser ressaltado que a modelagem empírica só pode ser aplicada em processos existentes, ao contrário da modelagem fenomenológica que pode ser aplicada tanto em processos existentes quanto em processos em desenvolvimento/estudos (GARCIA, 2005).

Outro ponto importante que foi abordado neste capítulo e que também será utilizado no Capítulo 4 é a descrição da monotonicidade e limites das seqüências.

Capítulo 3

Modelagem da planta de neutralização de pH

3.1 Introdução

O processo de neutralização de pH tem sido, por muito tempo, uma referência de problema não linear nos controles de processos químicos. Não somente devido à sua importância em diversos processos químicos e/ou biológicos industriais, mas também devido à complexa e difícil não linearidade que pode variar sensivelmente sob pequenas mudanças nas condições do processo (YANG et al., 2001; YOO et al., 2004).

Um modelo de planta não linear, validado corretamente, permite simulações que geram resultados que seriam difíceis de se conseguir em um processo real, permitindo assim novos estudos como técnicas de identificação e controle para esses processos.

Encontram-se na literatura duas abordagens diferentes para modelagem fenomenológica da dinâmica do pH. A primeira é baseada na modelagem físico-química clássica que foi apresentada inicialmente por McAvoy et al. (1972); a segunda é a formulação físico-química de invariantes de reação que foi apresentada inicialmente por Gustafsson e Waller (1983). Ambas abordagens têm como base separar a reação química (equilíbrio) da dinâmica de invariantes de reação. Apesar dos modelos resultantes serem idênticos, a formulação do problema é diferente. Nesta dissertação, o modelo fenomenológico desenvolvido é baseado na aproximação físico-química de invariantes de reação.

O presente capítulo faz uma análise detalhada das equações diferenciais e algébricas que

descrevem os modelos dinâmico e estático de uma planta de neutralização de pH, que foram apresentados por Hall e Seborg (1989), *apud* (JOHANSEN, 1996).

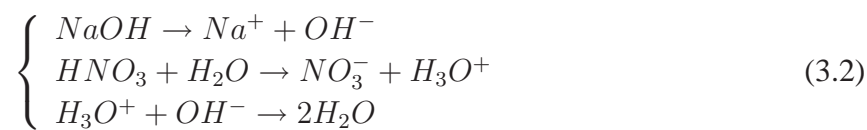
3.2 Conceitos básico sobre o processo de pH

3.2.1 Neutralização

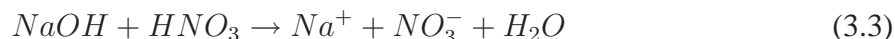
A interação dos íons H_3O^+ (íon de hidrogênio H^+) providos da ionização de uma solução ácida, com os íons de hidroxila (OH^-) provenientes da dissociação iônica de uma solução básica produzem água (H_2O), o que caracteriza a chamada neutralização da solução (YLÉN, 2001).



Pode-se considerar como exemplo de neutralização a mistura do ácido nítrico e o hidróxido de sódio, conforme equações (3.2)



A reação total da solução ácida com a solução básica pode ser apresentada da seguinte forma:



O resultado da mistura de hidróxido de sódio e ácido nítrico em quantidade iguais forma uma solução neutra com sal e água.

3.2.2 Definição para o pH

As concentrações *hidrogeniônica* $[H^+]$ e *hidroxiliônica* $[OH^-]$ são, em uma solução, correlacionadas, ou seja, o aumento de uma acarreta a diminuição da outra e vice-versa. Em uma solução ácida há mais íons de H^+ do que íons de OH^- e o inverso para soluções alcalinas. Em uma solução neutra, as concentrações dos íons de H^+ e OH^- são iguais. A classificação dos líquidos quanto à acidez, à alcalinidade e à neutralidade são:

$$\{H^+\} > \{OH^-\} \Rightarrow \text{ácido}$$

$$\{H^+\} = \{OH^-\} \Rightarrow \text{neutro}$$

$$\{H^+\} < \{OH^-\} \Rightarrow \text{alcalino}$$

Para medição do nível de acidez de uma solução usa-se a escala do pH (potencial hidrogeniônico), que, por razões de convenção, tem sua variação entre 0 a 14. O pH é definido como:

$$pH = -\log_{10}\{H^+\} \quad (3.4)$$

Segundo (YLÉN, 2001), a 25°C a neutralidade de uma solução é dada por (conforme citado anteriormente, usualmente o pH varia de 0 a 14, mas valores mais elevados e mais baixos são possíveis):

$$pH < 7 \Rightarrow \text{ácido}$$

$$pH = 7 \Rightarrow \text{neutro}$$

$$pH > 7 \Rightarrow \text{alcalino}$$

3.2.3 Solução tampão

Em muitas situações práticas, o valor do pH deve ser mantido perto de um valor ótimo (YLÉN, 2001). Isso ocorre principalmente em processos bioquímicos, que devem ser insensíveis às pequenas adições de ácidos ou de bases. A solução aplicada nestes processos é chamada de solução tampão. Uma solução tampão é caracterizada por sofrer pequena variação de pH quando a ela são adicionados íons de H^+ ou OH^- , isso devido ao fato da mesma conter ácido e base conjugados. A solução tampão pode ser considerada como um reservatório dos íons que são liberados quando necessitados na reação (YLÉN, 2001), ou seja, caso seja adicionado um ácido a solução tampão reage de forma a neutralizar o íons H^+ , contrariamente, se for adicionado uma base a reação neutraliza os íons OH^- .

3.3 Processo de neutralização de pH

O sistema a ser modelado é um processo contínuo de neutralização de pH (ver Figura 3.1). O reator contínuo é considerado como sendo perfeitamente agitado e apresenta três fluxos de entrada, sendo um ácido forte HNO_3 (Q_1), um reagente tampão $NaHCO_3$ (Q_2) e uma base forte $NaOH$ (Q_3). Na saída (Q_4) tem-se o ponto de medição de pH (pH_m). O nível do líquido no tanque reator (h_m) pode variar segundo as vazões de entrada, uma vez que a vazão de saída

depende apenas do nível atual do mesmo. A alimentação dos reagentes (Q_1 , Q_2 e Q_3) é feita por bombas de dosagem com velocidade variável e existe a presença de um agitador dentro do reator para acelerar a reação da mistura. Para modelagem do processo, algumas considerações iniciais foram feitas, sendo elas:

- não existem distúrbios;
- mistura perfeita;
- densidade constante;
- reações rápidas;
- completa solubilidade dos íons envolvidos;
- não existem outras substâncias entrando ou restos no tanque, exceto aquelas provenientes de Q_1 , Q_2 e Q_3 ;

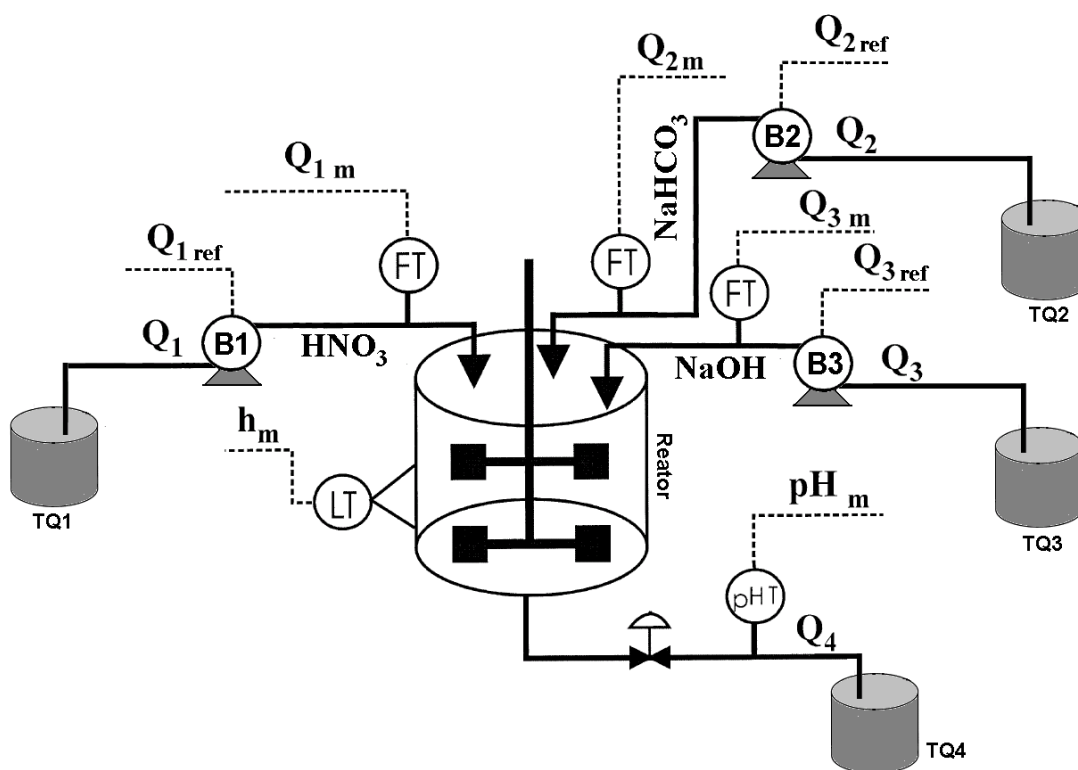
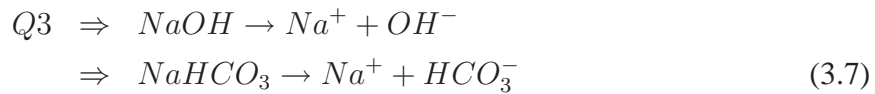
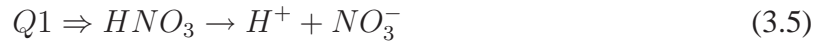


Figura 3.1: Lay-out do processo a ser modelado. Adaptado de (HENRIQUE et al., 2000).

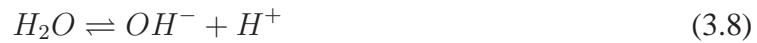
Além do reator do processo de neutralização de pH, a Figura (3.1) apresenta os três tanques de armazenagem dos reagentes ($TQ1$, $TQ2$ e $TQ3$) e um tanque responsável pela coleta ($TQ4$) de todo fluxo $Q4$. O sinal de referência de vazão para as bombas $B1$, $B2$ e $B3$, são respectivamente, Q_{1ref} , Q_{2ref} e Q_{3ref} . Os sinais de vazão medidos em todas as bombas são Q_{1m} , Q_{2m} e Q_{3m} . Tanto o processo de neutralização no reator, bem como, as alturas de todos os tanques são modeladas neste trabalho.

3.4 Reações químicas a serem modeladas

Fazendo uma análise da ionização dos fluxos de entrada no processo 3.1, chega-se às seguintes relações estequiométricas:



Como o objetivo é obter um modelo que forneça o potencial hidrogeniônico (pH) da solução, as únicas reações de interesse são as relacionadas aos íons de hidrogênio. Deste modo, têm-se:



Outro motivo para estas reações (equações 3.8, 3.9, 3.10) serem as únicas modeladas, é porque HNO_3 é um ácido forte e $NaOH$ é uma base forte, ou seja, estes componentes apresentam, respectivamente, alto grau de ionização e dissociação.

Segundo as aproximações de Gustaffson e Waller (1983), um sistema de pH pode ser modelado como um tanque de mistura de íons totais de ácidos e bases, onde estes íons estão em equilíbrio, porém estes íons estão expressos em invariantes de reação, logo:

$$W_a = [H^+] - [OH^-] - [HCO_3^-] - 2[CO_3^{2-}] \quad (3.11)$$

$$W_b = [H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] \quad (3.12)$$

sendo,

W_a e W_b espécies invariantes de reação para o fluxo de saída. W_a representa a diferença entre as concentrações molares dos átomos de Nitrogênio e Sódio e W_b corresponde a concentração molar de átomos de carbono.

Os invariantes de reação W_a e W_b não são afetados pelo progresso da reação. Além disto, se as reações são rápidas o suficiente para manter o sistema em equilíbrio, as relações de equilíbrio podem ser usadas para determinar a concentração dos íons de hidrogênio como função dos invariantes de reação. As relações de equilíbrio, são:

$$K_{a1} = \frac{[HCO_3^-] [H^+]}{[H_2CO_3]} \quad (3.13)$$

$$K_{a2} = \frac{[CO_3^{2-}] [H^+]}{[HCO_3^-]} \quad (3.14)$$

$$K_c = \frac{[H^+] [OH^-]}{[H_2O]} \quad (3.15)$$

sendo K_c a relação de equilíbrio da reação apresentada pela equação (3.8), K_{a1} a relação de equilíbrio da reação apresentada pela equação (3.9) e K_{a2} a relação de equilíbrio da reação apresentada pela equação (3.10). A água sofre um processo de auto-ionização em escala menor, por isso a concentração de moléculas de água permanece constante, logo $K_c[H_2O]$ pode ser representado por:

$$K_w = [H^+] [OH^-] \quad (3.16)$$

sendo K_w o produto iônico da água.

Fazendo a combinação das equações de (3.11) a (3.16), pode-se ter a relação algébrica entre W_a , W_b e $[H^+]$, logo:

$$W_a = [H^+] - \frac{K_w}{[H^+]} - W_b \frac{K_{a1}/[H^+] + 2(K_{a1}K_{a2}/[H^+]^2)}{1 + K_{a1}/[H^+] + (K_{a1}K_{a2}/[H^+]^2)} \quad (3.17)$$

Desenvolvendo algebricamente a 3.17 de forma a deixá-la em função de $[H^+]$ e conside-

rando $[H^+] = X$, tem-se

$$\begin{aligned} X^4 &+ (K_{a1} - W_a)X^3 + (K_{a1}K_{a2} - K_{a1}W_a - K_w - K_{a1}W_b)X^2 \\ &- (K_{a1}K_w + K_{a1}K_{a2}W_a + 2K_{a1}K_{a2}W_b)X - K_{a1}K_{a2}K_w = 0 \end{aligned} \quad (3.18)$$

O pH será determinado por:

$$pH = -\log_{10} [X] \quad (3.19)$$

A concentração de $[H^+]$ é a raiz positiva e real do polinômio da equação (3.18).

3.5 Desenvolvimento do modelo

As variáveis do processo que se deseja modelar em função das vazões de entrada são:

- W_a e W_b - espécies invariantes de reação para o fluxo de saída;
- h_r - nível do tanque reator;
- h_a - nível do tanque de reagente ácido;
- h_b - nível do tanque de reagente base;
- h_t - nível do tanque do reagente tampão;
- h_c - nível do tanque coletor;

3.5.1 Modelo dinâmico

Na modelagem dinâmica, o comportamento do pH e o dos fenômenos relacionados são considerados como funções do tempo, pois eles mudam de forma autônoma embora as mudanças na entrada do sistema já tenham ocorrido. O ponto de partida para modelagem deste sistema é a lei de conservação de massa, ou seja:

$$M_a = \sum M_e + \sum M_g - \sum M_s - \sum M_c \quad (3.20)$$

onde M_a é a massa acumulada no sistema, M_e a massa que entra no sistema, M_g a massa gerada no sistema, M_s a massa que sai do sistema e M_c a massa consumida no sistema.

considerando $M_g = M_c = 0$, logo:

$$M_a = \sum M_e - \sum M_s \quad (3.21)$$

Considerando inicialmente o balanço global do reator e lembrando que o mesmo apresenta três entradas e uma de saída:

$$M_a = \sum M_{e1} + \sum M_{e2} + \sum M_{e3} - \sum M_s \quad (3.22)$$

Como deseja-se o comportamento dinâmico do sistema, o balanço apresentado na equação (3.22) é substituído pelo balanço diferencial em função das taxas mássicas, considera-se que $m = V \cdot \rho$, logo

$$\frac{d(V \cdot \rho)}{dt} = Q_1 \cdot \rho + Q_2 \cdot \rho + Q_3 \cdot \rho - Q_4 \cdot \rho \quad (3.23)$$

sendo a densidade(ρ) constante, $d\rho/dt = 0$, logo

$$\frac{dV}{dt} \cdot \rho = Q_1 \cdot \rho + Q_2 \cdot \rho + Q_3 \cdot \rho - Q_4 \cdot \rho \quad (3.24)$$

simplificando a equação 3.24 e substituindo $V = A_r \cdot h_r$, tem-se

$$\frac{d(A_r \cdot h_r)}{dt} = Q_1 + Q_2 + Q_3 - Q_4 \quad (3.25)$$

Aplicando novamente a regra da cadeia e sabendo que a área transversal do reator (A_r) é constante,

$$A_r \cdot \frac{dh_r}{dt} = Q_1 + Q_2 + Q_3 - Q_4 \quad (3.26)$$

De forma a detalhar Q_4 (vazão volumétrica medida pela válvula de saída do tanque) presente na equação (3.24), é utilizada a equação de Bernoulli que relaciona a vazão em um determinado trecho de um sistema hidráulico com a raiz quadrada da diferença de pressão entre as extremidades de tal trecho. Ou seja,

$$Q = cv\sqrt{\Delta P} \quad (3.27)$$

sendo cv é o coeficiente de vazão da válvula e ΔP é a diferença de pressão entre as extremidades

do sistema hidráulico considerado. Considerando-se apenas a pressão estática e sendo o reator aberto para a atmosfera, Q_4 pode ser representada como:

$$Q = c\sqrt{h_r - h_{r0}} \quad (3.28)$$

no qual c é a constante da válvula de saída ($cv\sqrt{\rho g}$) e $(h_r - h_{r0})$ a diferença de nível na saída do tanque. Substituindo a equação (3.28) na equação (3.26), chega-se a

$$\frac{dh_r}{dt} = \frac{Q_1 + Q_2 + Q_3 - c\sqrt{h_r - h_{r0}}}{A_r} \quad (3.29)$$

A equação (3.29) descreve a dinâmica do nível da solução dentro do tanque reator quando não se tem o controle de nível do mesmo. Quando ocorrer o controle de nível, a vazão Q_4 será igual ao somatório das vazões Q_1 , Q_2 e Q_3 , ou seja, não existirá variação de nível no tanque reator, tornando a equação (3.29) desnecessária.

Seguindo o mesmo raciocínio utilizado para dedução do modelo que descreve o nível no tanque reator, pode-se utilizar da equação (3.22) para determinar o balanço de W_a no sistema. Como trata-se de concentração, sabe-se que, neste caso, a massa é a multiplicação do volume (V) por W_a (mol/cm^3)¹, portanto

$$\frac{d(W_a \cdot V)}{dt} = Q_1 \cdot W_{a1} + Q_2 \cdot W_{a2} + Q_3 \cdot W_{a3} - Q_4 \cdot W_a \quad (3.30)$$

Aplicando a regra da cadeia² na equação (3.30), tem-se

$$\frac{dW_a}{dt} \cdot V + \frac{dV}{dt} \cdot W_a = Q_1 \cdot W_{a1} + Q_2 \cdot W_{a2} + Q_3 \cdot W_{a3} - Q_4 \cdot W_a \quad (3.31)$$

pela equação (3.24), sabe-se o valor de dV/dt , logo a equação (3.31) fica

$$\frac{dW_a}{dt} \cdot V + (Q_1 + Q_2 + Q_3 - Q_4) \cdot W_a = Q_1 \cdot W_{a1} + Q_2 \cdot W_{a2} + Q_3 \cdot W_{a3} - Q_4 \cdot W_a \quad (3.32)$$

¹ mol - unidade de medida química que corresponde ao número de Avogrado, ou seja, aproximadamente $6,02 \times 10^{23}$ unidades

²Regra da cadeia - onde a derivada é dada pela diferença dos valores na ordenada dividida pela diferença dos valores na abscissa e onde essa diferença é infinitamente pequena (dy/dx).

resolvendo a equação (3.32), tem-se

$$\frac{dW_a}{dt} \cdot V = Q_1 \cdot (W_{a1} - W_a) + Q_2 \cdot (W_{a2} - W_a) + Q_3 \cdot (W_{a3} - W_a) \quad (3.33)$$

sabe-se que o volume dentro do tanque reator é $A_r \cdot h_r$, deste modo

$$\frac{dW_a}{dt} = \frac{Q_1 \cdot (W_{a1} - W_a) + Q_2 \cdot (W_{a2} - W_a) + Q_3 \cdot (W_{a3} - W_a)}{A_r \cdot h_r} \quad (3.34)$$

A equação (3.34) descreve a dinâmica de W_a dentro do tanque reator quando não se tem o controle de nível do mesmo. De maneira análoga determina-se a equação para a variação temporal de W_b :

$$\frac{dW_b}{dt} = \frac{Q_1 \cdot (W_{b1} - W_b) + Q_2 \cdot (W_{b2} - W_b) + Q_3 \cdot (W_{b3} - W_b)}{A_r \cdot h_r} \quad (3.35)$$

As equações (3.29), (3.34) e (3.35) descrevem a dinâmica dentro do tanque reator no processo de neutralização de pH estudado.

Os tanques reagentes TQ1, TQ2 e TQ3 não apresentam abastecimento contínuo, ou seja, a equação que governa o balanço de massa dos mesmos não leva em consideração o fluxo de entrada, logo a equação (3.21) pode ser representada pela equação (3.36).

$$M_a = - \sum M_s \quad (3.36)$$

Fazendo o desenvolvimento individual do balanço de massa de cada tanque, chega-se

$$A_{ta} \cdot \frac{dh_{ta}}{dt} = -Q_1 \quad (3.37)$$

$$A_{tt} \cdot \frac{dh_{tt}}{dt} = -Q_2 \quad (3.38)$$

$$A_{tb} \cdot \frac{dh_{tb}}{dt} = -Q_3 \quad (3.39)$$

As equações de (3.37) a (3.39) descrevem a dinâmica dos níveis dos tanques de reagentes, sendo (3.37) para o tanque de ácido, (3.38) para o tanque de solução tampão e (3.39) para o tanque de base. Ao contrário dos tanques de reagentes, o tanque coletor não tem sua saída modelada, uma vez que a mesma não é considerada contínua. A única modelagem de interesse

neste tanque é o seu nível em função do fluxo de entrada, que é proveniente do tanque reator, logo a equação 3.21 será representada como

$$M_a = \sum M_e \quad (3.40)$$

Desenvolvendo o balanço de massa apresentado na equação (3.40), chega-se a

$$A_{tc} \cdot \frac{dh_{tc}}{dt} = Q_4 \quad (3.41)$$

que representa a dinâmica do nível de produto dentro do tanque coletor. Lembra-se que a função do tanque coletor é reunir todo o produto proveniente do reator durante cada experimento.

3.5.2 Modelo estático

Segundo Aguirre (2004) modelos estáticos relacionam variáveis sem quantificar sua dependência temporal, ou seja, modelos estáticos são válidos quando o sistema alcançou o equilíbrio. Enquanto modelos dinâmicos são descritos por equações diferenciais (em alguns casos também podem incluir equações algébricas), os modelos estáticos são descritos por equações algébricas (podem haver derivadas em relação a outras variáveis independentes que não o tempo). Em um processo de neutralização de pH, o modelo estático descreve a curva de titulação (Figura 3.2), que segundo Ylén (2001), é uma ferramenta básica para controle de qualidade de produtos e um bom indicador para o estado do processo. Para determinar o estado estacionário do sistema, a equação (3.34) passa a ser representada por:

$$\frac{dW_a}{dt} = \frac{Q_1 \cdot (W_{a1} - W_a) + Q_2 \cdot (W_{a2} - W_a) + Q_3 \cdot (W_{a3} - W_a)}{A_r \cdot h_r} = 0 \quad (3.42)$$

desenvolvendo a equação 3.42, chega-se a

$$W_a = \frac{(Q_1 \cdot W_{a1}) + (Q_2 \cdot W_{a2}) + (Q_3 \cdot W_{a3})}{(Q_1 + Q_2 + Q_3)} \quad (3.43)$$

Desenvolvendo a equação 3.35, conforme as mesmas considerações para 3.34, chega-se a:

$$W_b = \frac{(Q_1 \cdot W_{b1}) + (Q_2 \cdot W_{b2}) + (Q_3 \cdot W_{b3})}{(Q_1 + Q_2 + Q_3)} \quad (3.44)$$

As equações (3.43) e (3.44) descrevem qual o comportamento estático das espécies invariantes

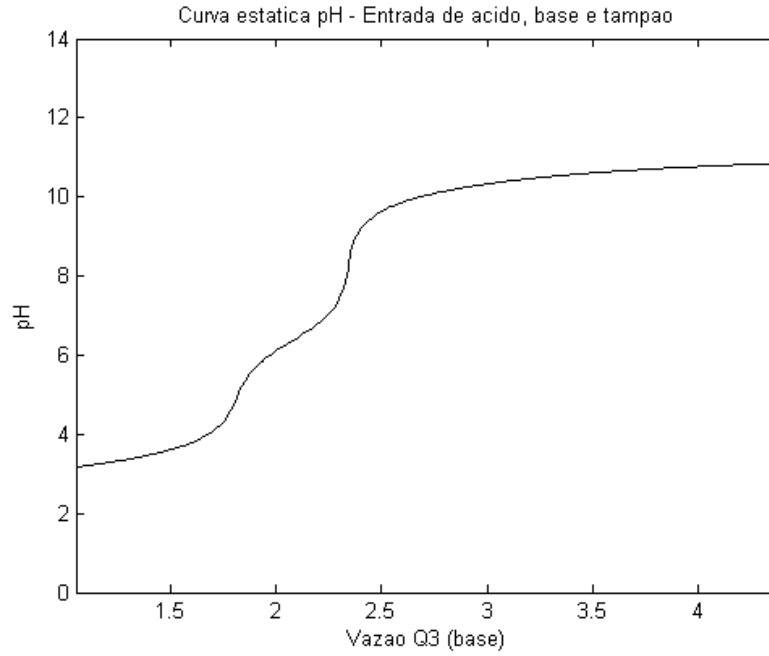


Figura 3.2: Curva de titulação de pH em função da vazão de base (Q_3).

de reação, respectivamente, no reator do sistema de neutralização de pH. De posse das concentrações W_a e W_b , calcula-se a concentração hidrogeniônica, a partir equação (3.18), e o pH com a equação (3.19).

3.6 Planta piloto construída

A planta piloto construída foi baseada no *lay-out* apresentado na Figura (3.1), mas com algumas alterações devido a dimensões físicas e custos. As alterações que se fizeram necessárias (ver Figura 3.3), são (i) o nível da solução no tanque reator mantido constante ($Q_4 = Q_1 + Q_2 + Q_3$), (ii) a escolha do agitador magnético e (iii) a medição do pH feita dentro do tanque reator. Para a medição de pH é utilizado o conjunto, sonda de medição (AE) e transmissor (AIT).

Conforme as alterações citadas anteriormente, houve modificações no modelo dinâmico da planta, ou seja, as equações (3.34) e (3.35), que são em função do nível no tanque reator, passam a ser representadas por:

$$\frac{dW_a}{dt} = \frac{Q_1 \cdot (W_{a1} - W_a) + Q_2 \cdot (W_{a2} - W_a) + Q_3 \cdot (W_{a3} - W_a)}{V_r} \quad (3.45)$$

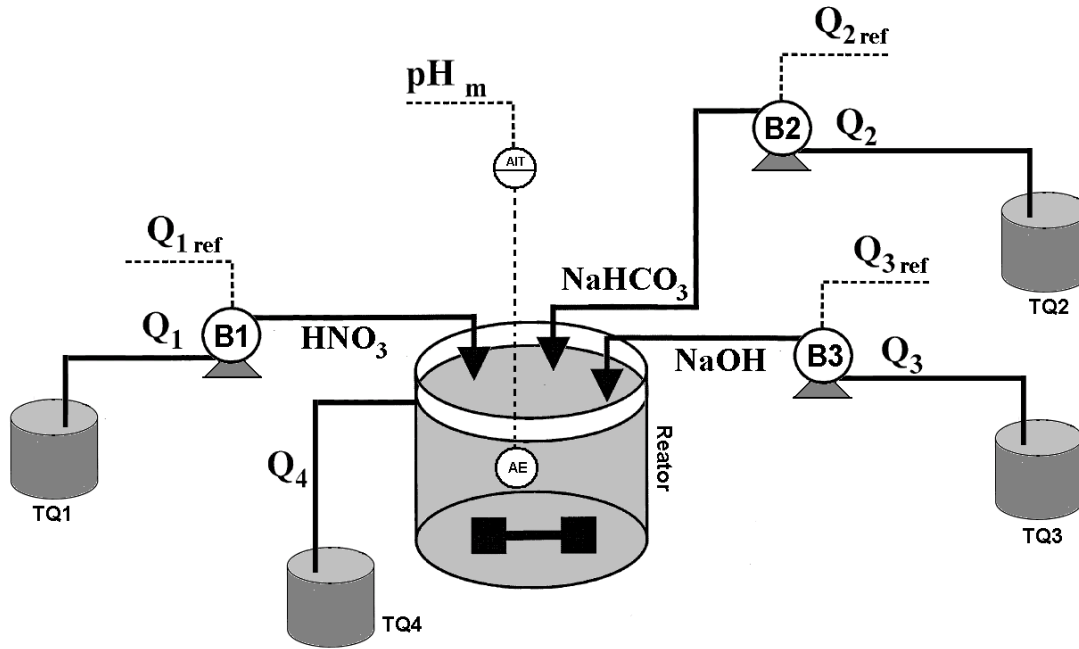


Figura 3.3: Lay-out do processo de neutralização de pH construído.

$$\frac{dW_b}{dt} = \frac{Q_1 \cdot (W_{b1} - W_b) + Q_2 \cdot (W_{b2} - W_b) + Q_3 \cdot (W_{b3} - W_b)}{V_r} \quad (3.46)$$

com V_r representando o volume constante do reator. Sendo assim, o modelo dinâmico da planta de pH construída passa a ser representado pelas equações (3.18), (3.19), (3.37), (3.38), (3.39), (3.41), (3.45) e (3.46).

O objetivo desta planta piloto é variar o pH do processo, manipulando a vazão de entrada Q_3 e mantendo constantes as vazões volumétricas Q_1 e Q_2 . A vazão Q_2 é da solução chamada de tampão e tem como característica tornar uma solução insensível a pequenas adições de ácido ou base (YLÉN, 2001). Conforme a vazão da solução tampão (Q_2) ou a concentração da mesma, a curva estática do processo de neutralização de pH é alterada (ver Figura 3.4).

Para gerar os gráficos da Figura (3.4), foi utilizado o modelo estático deduzido na seção (3.5.2) manteve-se constante a vazão de ácido Q_1 em 2,54mL/s e a vazão de base Q_3 foi variada de 1,05mL/s a 4,38mL/s. As Figuras 3.4(a), (b), (c) e (d) são as curvas estáticas do tanque de neutralização de pH para diferentes vazões de solução tampão, sendo elas, 0 mL/s, 0,025 mL/s, 0,05 mL/s e 0,1 mL/s, respectivamente.

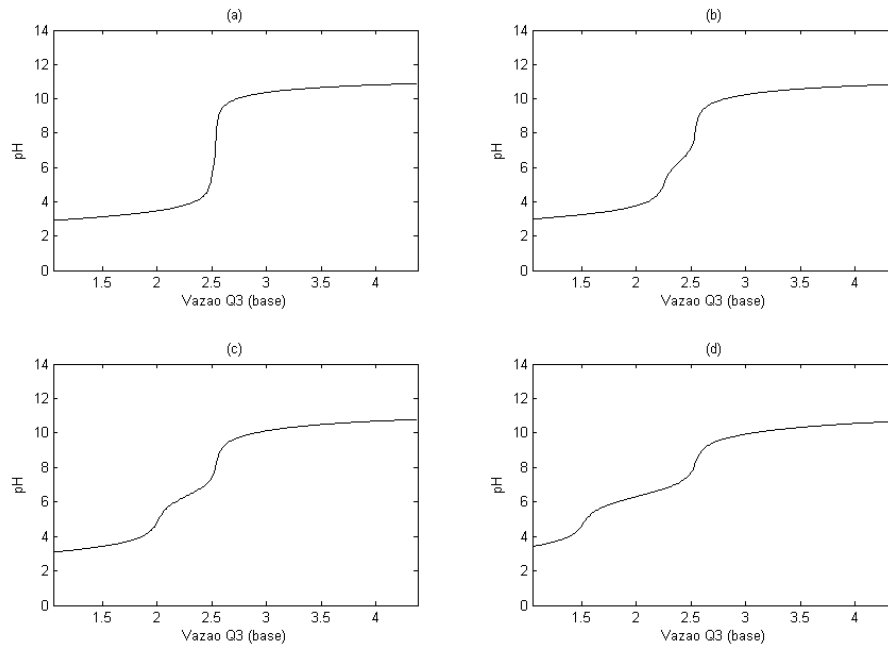


Figura 3.4: Curva estática pH para entradas de ácido, base e tampão, sendo $Q_1 = 2,54 \text{ mL/s}$; (a) $Q_2 = 0 \text{ mL/s}$; (b) $Q_2 = 0,025 \text{ mL/s}$; (c) $Q_2 = 0,05 \text{ mL/s}$; (d) $Q_2 = 0,1 \text{ mL/s}$.

A planta piloto construída (atualmente instalada no laboratório de Modelagem Otimização e Controle de Processos - MOCP, do Centro Universitário do Leste de Minas Gerais - UnilesteMG, Brasil), com fomento do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, apresenta resumidamente as seguintes particularidades: (1) três bombas peristálticas para dosagem de reagentes com sinal de controle de 4 a 20mA; (2) um agitador magnético; (3) um medidor de pH com precisão de 0,01pH e transmissor de 4 a 20mA; (4) duas placas de aquisição de dados USB; (5) um micro-computador; (6) um tanque para reagente ácido(60L); um tanque para solução base(60L); um tanque para solução tampão(60L); um reator(2,1L) e um tanque coletor (140L). Mais detalhes sobre a construção, croqui estrutural, especificação detalhada dos materiais, métodos de calibração e preparação de soluções podem ser vistos com detalhes no Apêndice A.

3.7 Considerações Finais

Neste capítulo deduzem-se as deduções das equações que descrevem o modelo de um processo de neutralização de pH específico, considerando que os íons estão em equilíbrio químico

e expressos como invariantes de reação.

Uma das principais vantagens neste modelo é que o mesmo permite uma análise detalhada do comportamento dinâmico e das características do sistema de pH com base nos fluxos de entrada.

O processo de neutralização de pH tem suas características facilmente alteradas conforme a relação dos fluxos de ácido, base e tampão, bem como a concentração dos mesmos. A validação do modelo apresentado neste capítulo será feita em seções posteriores.

São apresentados também, neste capítulo, de forma resumida, o *lay-out* da planta piloto de neutralização de pH e as principais partes da mesma. Detalhes construtivos da planta podem ser vistos no Apêndice (A).

Capítulo 4

Procedimentos para uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros em modelos NARX racionais

4.1 Introdução

O uso de diversos tipos de informação auxiliar na identificação de modelos não lineares é um desafio reconhecido nos últimos anos (NEPOMUCENO et al., 2004). Também conhecida como identificação semi-física, ou caixa-cinza, ou com uso de conhecimento a priori, a identificação usando informação auxiliar ganhou atenção de alguns autores (PEARSON e POTT-MANN, 2000; NEPOMUCENO, 2002; CORRÊA e AGUIRRE, 2004), uma vez que seu uso permite a obtenção de modelos mais robustos (JOHANSEN, 1996) e aumenta a faixa sobre a qual os modelos são dinamicamente válidos (AGUIRRE et al., 2000).

A informação auxiliar pode ser usada em todas as etapas de identificação do modelo, sendo elas: a escolha da representação, a determinação da estrutura, a estimação de parâmetros e a validação (CORRÊA, 2001). O seu uso durante a determinação da estrutura tem como objetivo restringir o espaço de busca na seleção de estrutura, já durante a estimação de parâmetros, pode-se citar como exemplo, o objetivo de garantir que o modelo obtido a partir de dados dinâmicos aproxime a característica estática do sistema.

Até o presente, poucos trabalhos são encontrados na literatura, nos quais se propõem procedimentos para uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos não-lineares

em geral e, ainda mais, de modelos NARX racionais. Matos (2005) justifica a pouca aplicação dos modelos racionais devido ao seu alto custo computacional para a estimação de parâmetros.

Em Corrêa (2001), pode ser visto o procedimento para a inserção de informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos NARX racionais, tendo como informação auxiliar o comportamento estático do sistema. Tal procedimento respalda-se no fato das informações do estado estacionário estarem disponíveis ou serem de fácil determinação para a maioria dos sistemas (AGUIRRE, 2004; POTTMANN e PEARSON, 1998). Entretanto, em alguns processos, as informações sobre o estado estacionário podem não estar disponíveis ou ter alto custo e baixo nível de segurança para serem obtidas (LJUNG e TORDEL, 1994).

No trabalho apresentado por Lindskog (1996) é citado que a monotonicidade crescente e/ou decrescente está presente em muitos processos reais. Apesar de serem conceitos simples, a monotonicidade e os limites de extrapolação (mínimo e máximo) devem ser assegurados na resposta do modelo.

Outro trabalho que usa monotonicidade como informação auxiliar foi apresentado por Thompson e Kramer (1994) *apud* (AGUIRRE, 2004), esta informação permitiu o uso de menos dados de treinamento da rede neural, mesmo que os mesmos estivessem contaminados com ruído.

Com base no procedimento proposto por Corrêa (2001) e nas informações citadas por Lindskog (1996), desenvolvem-se, neste capítulo, três procedimentos para a inserção de informação auxiliar na estimação dos parâmetros dos modelos NARX racionais identificados com dados em uma faixa restrita de operação. O primeiro procedimento é uma adaptação do proposto em Corrêa (2001), sendo os demais desenvolvidos neste trabalho.

A Figura 4.1 exemplifica, de forma gráfica, as informações auxiliares utilizadas em cada procedimento. Como exemplo, considera-se o processo de pH apresentado no Capítulo 03. Ressalta-se apenas que o procedimento proposto pode ser estendido para outros sistemas. O procedimento 01 (ver Figura 4.1(a)) propõe estimar os parâmetros do modelo racional tendo como informação auxiliar a curva estática do processo, os valores mínimos (MIN) e máximos (MAX), juntamente com a monotonicidade crescente ($dpH/dQ_3 \geq 0$). O procedimento 02 (ver Figura 4.1(b)) propõe estimar os parâmetros do modelo racional tendo como informação auxiliar os valores mínimos (MIN) e máximos (MAX) e a monotonicidade crescente ($dpH/dQ_3 \geq 0$), sendo os dados da curva estática desconhecida. O procedimento 3.1 e 3.2 (ver Figura 4.1(c)) propõe estimar os parâmetros do modelo racional tendo como informação auxiliar os valores mínimos (MIN) e máximos (MAX), a monotonicidade crescente ($dpH/dQ_3 \geq 0$) e os dados estáticos gerados (curva entre pHe_{min}^* e pHe_{max}^*) pelo modelo identificado e válido

em uma faixa restrita de operação.

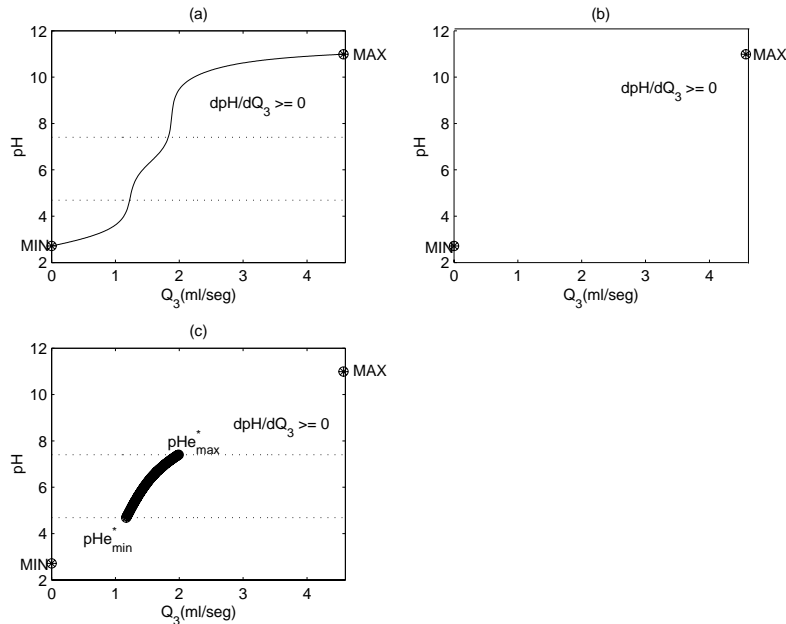


Figura 4.1: Representação gráfica das informações auxiliares propostas em cada procedimento. (a) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedimento 01 (b) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedimento 02 (c) Representação gráfica das informações auxiliares para o procedimento 3.1 e 3.2.

Os procedimentos aqui propostos são para sistemas SISO, com um único estado estacionário e considera-se que o problema de seleção de estrutura esteja resolvido.

4.2 Procedimento 01

Conforme já citado anteriormente, realizar testes de forma a obter dados em estado estacionário, ou mesmo possuir informações de condições operacionais em regime permanente, é mais fácil do que possuir dados dinâmicos que excursionam o sistema em toda faixa de operação (JOHANSEN, 1996), (AGUIRRE et al., 2000). O procedimento desenvolvido nesta seção é baseado no apresentado por Corrêa (2001) no qual as restrições agem sobre os coeficientes de agrupamento (ver seção 2.4.4) que, por definição, são o somatório dos parâmetros do modelo (BILLINGS e AGUIRRE, 1995).

A principal contribuição do procedimento apresentado nesta seção, com relação à do Corrêa (2001) é que propõe-se a inserção da monotonicidade do comportamento estático do sistema,

bem como os limites de extrapolação máximos e mínimos do mesmo. Esse procedimento pode ser justificado pelo resultado apresentado no trabalho acima citado (ver Figura 4.2). Apesar do procedimento ter aproximado bem a característica estática do sistema, a curva estática apresenta pontos com derivada negativa, resultado sem correspondência no sistema real. Ou seja, no caso da planta de pH, significa que, no modelo, a adição de base no reator torna a saída mais ácida. Naturalmente isto não ocorre no processo real.

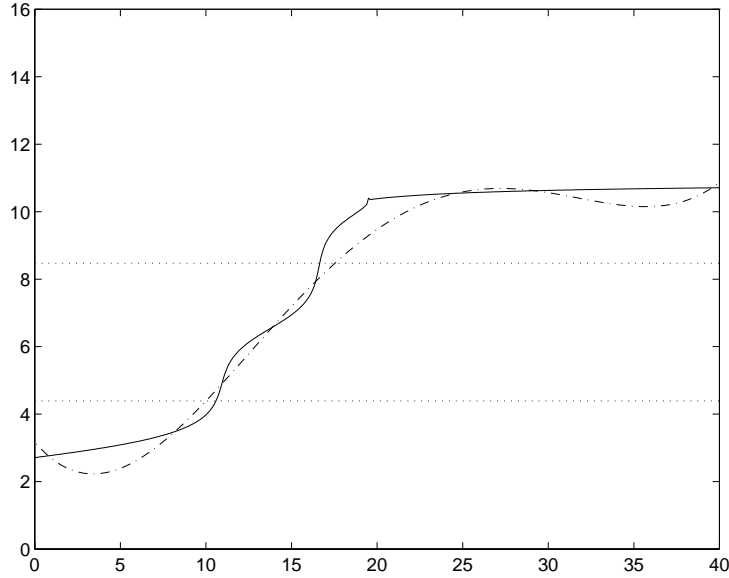


Figura 4.2: (- -) Característica estática do modelo apresentado por Corrêa (2001) e (—) a característica estática do tanque de neutralização de pH. Eixo- x vazão de base e eixo- y pH.

A metodologia adotada para o desenvolvimento desse procedimento é sintetizada por etapas, apresentadas a seguir:

1. Conhecendo os dados dinâmicos de uma região, utilize algum procedimento para escolha de estrutura racional e selecione os regressores mais significativos.

$$y(k) = \frac{a(k-1)}{b(k-1)} + e(k). \quad (4.1)$$

2. A partir da estrutura selecionada, escreva a função que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$. Por definição o modelo racional apresenta termos cruzados, logo a função estática pode ser escrita:

$$\bar{y} = \frac{a_0 + a_1\bar{u} + a_2\bar{u}^2 + \dots + a_l\bar{u}^l}{b_0 + b_1\bar{u} + b_2\bar{u}^2 + \dots + b_l\bar{u}^{l-1}} \quad (4.2)$$

sendo $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ constantes que podem ser expressas como função dos coeficientes de agrupamento.

3. Estime os coeficiente $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ da equação 4.2, a partir dos dados estáticos usando algum métodos de otimização.
4. Escreva as equações que relacionam os coeficientes de agrupamento de termos em função dos coeficientes da equação 4.2, usando:

$$\bar{y} = \frac{\sum_0^\alpha + \sum_u^\alpha \bar{u} + \sum_{m=2}^l \sum_{u^m}^\alpha \bar{u}^m}{\sum_0^\beta - \sum_y^\alpha + \sum_u^\beta \bar{u} + \sum_{m=2}^l \sum_{u^m}^\beta \bar{u}^m} \quad (4.3)$$

As equações que relacionam os coeficientes de agrupamentos são:

$$\begin{aligned} \sum_0^\alpha &= a_0 \\ \sum_u^\alpha \bar{u} &= a_1 \\ \sum_{u^2}^\alpha \bar{u}^2 &= a_2 \\ &\vdots \\ \sum_0^\beta - \sum_y^\alpha &= b_0 \\ \sum_u^\beta \bar{u} &= b_1 \\ \sum_{u^2}^\beta \bar{u}^2 &= b_2 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.4)$$

5. Escreva os pontos de limite superior e inferior de extrapolação da seqüência estática.

$$\begin{aligned} \bar{y}^* &\geq \min(\bar{y}) \\ \bar{y}^* &\leq \max(\bar{y}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

sendo \bar{y}^* o valor estático estimado pelo modelo e $\bar{y}_n (n = 1, \dots, N)$ a massa de dados em estado estacionário do processo.

6. Faça um teste de monotonicidade da seqüência estática, sendo:

$$\bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n > 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial u} > 0 \Rightarrow \text{estritamente crescente}$$

$$\begin{aligned}\bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n < 0 &\Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} < 0 \Rightarrow \text{estritamente decrescente} \\ \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \geq 0 &\Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \Rightarrow \text{crescente} \\ \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \leq 0 &\Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \leq 0 \Rightarrow \text{decrescente}\end{aligned}$$

7. Tome as características da sequência estática citadas nos itens 5 e 6, em conjunto com as restrições do item 4, como restrições e estime os parâmetros do modelo cuja estrutura foi selecionada no item 2, utilizando as equações e inequações de restrição. Para isso deve ser usado método de otimização com restrições de igualdade e desigualdade.

$$\begin{aligned}\text{minimizar} \quad & \|\mathbf{y} - \frac{\Psi_N \hat{\Theta}_N}{\Psi_D \hat{\Theta}_D}\|^2 \\ \text{sujeito a} \quad & \bar{y}^* \geq \min(\bar{y}) \\ & \bar{y}^* \leq \max(\bar{y}) \\ & \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \\ & \sum_0^\alpha = a_0 \\ & \sum_u^\alpha \bar{u} = a_1 \\ & \sum_{u^2}^\alpha \bar{u}^2 = a_2 \\ & \vdots \\ & \sum_0^\beta - \sum_y^\alpha = b_0 \\ & \sum_u^\beta \bar{u} = b_1 \\ & \sum_{u^2}^\beta \bar{u}^2 = b_2 \\ & \vdots\end{aligned}$$

8. Valide o modelo estatisticamente

Os resultados desse procedimento são apresentados no capítulo 5, bem como discussões a respeito do ganho do mesmo com relação ao proposto por Corrêa (2001).

4.3 Procedimento 02

Nesta seção desenvolve-se o procedimento para uso de informação auxiliar na estimação de parâmetros em modelos NARX racionais, nos quais estão disponíveis dados de entrada e saída dinâmicos de uma região restrita e não são conhecidos dados do comportamento estático em toda a faixa de operação.

Mesmo não tendo informação do comportamento estático, a monotonicidade e os limites máximos e mínimos de extrapolação devem ser assegurados pelo modelo (LINDSKOG, 1996)

e é com base nesta informação que o presente procedimento é desenvolvido, conforme apresentado a seguir.

1. Com os dados dinâmicos de uma região disponíveis, utilize algum procedimento de escolha da estrutura racional e selecione os regressores mais significativos.

$$y(k) = \frac{a(k-1)}{b(k-1)} + e(k) \quad (4.6)$$

2. A partir da estrutura selecionada, escreva a função que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$. Por definição o modelo racional apresenta termos cruzados, logo a função estática pode ser escrita:

$$\bar{y} = \frac{a_0 + a_1\bar{u} + a_2\bar{u}^2 + \dots + a_l\bar{u}^l}{b_0 + b_1\bar{u} + b_2\bar{u}^2 + \dots + b_l\bar{u}^{l-1}} \quad (4.7)$$

sendo $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ constantes que podem ser expressas como função dos coeficientes de agrupamento.

3. Escreva os pontos de limite superior e inferior de extrapolação da seqüência estática.

$$\begin{aligned} \bar{y}^* &\geq \min(\bar{y}) \\ \bar{y}^* &\leq \max(\bar{y}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

4. Faça um teste de monotonicidade da seqüência estática, sendo:

$$\begin{aligned} \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n &> 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} > 0 \Rightarrow \text{estritamente crescente} \\ \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n &< 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} < 0 \Rightarrow \text{estritamente decrescente} \\ \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n &\geq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \Rightarrow \text{crescente} \\ \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n &\leq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \leq 0 \Rightarrow \text{decrescente} \end{aligned}$$

5. Tome as características da seqüência estática citadas nos itens 3 e 4 como restrição e Estime os parâmetros cuja a estrutura foi selecionada no item 1.

$$\begin{aligned} \text{minimizar} \quad & \|\mathbf{y} - \frac{\Psi_N \hat{\Theta}_N}{\Psi_D \hat{\Theta}_D}\|^2 \\ \text{sujeito a} \quad & \bar{y}^* \geq \min(\bar{y}) \\ & \bar{y}^* \leq \max(\bar{y}) \\ & \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

6. Valide o modelo estatisticamente.

Vale ressaltar que um ponto muito importante neste procedimento é a proposta de melhorar a resposta global de um modelo, identificado com dados de uma região restrita de operação, a partir de informações intrínsecas em grande parte dos sistemas, ou seja, monotonicidade da curva estática e limites máximos e mínimos de operação. Resultados da aplicação deste procedimento são apresentados no capítulo 5.

4.4 Procedimento 03

O procedimento apresentado nesta seção é uma outra abordagem para o procedimento 02. Neste procedimento o problema que se pretende resolver é a identificação de modelos dinâmicos mais globais a partir de dados dinâmicos restritos a uma faixa de operação e sem o conhecimento da características estáticas em toda a faixa de operação.

Além das informações auxiliares utilizadas no procedimento 02 (monotonicidade e limite de extrapolação máximo e mínimo), são também usados os dados estáticos gerados pelo modelo na região na qual o mesmo é estatisticamente válido.

Existem duas abordagens distintas que podem ser utilizadas no procedimento desenvolvido, deste modo o procedimento 3 foi dividido em Procedimento 3.1 e Procedimento 3.2.

4.4.1 Procedimento 3.1

1. Conhecendo os dados dinâmicos de uma região, utilize algum procedimento de escolha de estrutura racional e selecione os regressores mais significativos.

$$y(k) = \frac{a(k-1)}{b(k-1)} + e(k) \quad (4.10)$$

2. Valide estatisticamente o modelo para esta região
3. A partir do modelo estatisticamente válido, escreva a função que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$. Por definição o modelo racional apresenta termos cruzados logo a função estática pode ser escrita:

$$\bar{y} = \frac{a_0 + a_1\bar{u} + a_2\bar{u}^2 + \dots + a_l\bar{u}^l}{b_0 + b_1\bar{u} + b_2\bar{u}^2 + \dots + b_l\bar{u}^{l-1}} \quad (4.11)$$

sendo $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ constantes que podem ser expressas como função dos coeficientes de agrupamento.

4. A partir da função escrita no item 3, gere dados estáticos na região na qual o modelo é estatisticamente válido. Aqui presume-se que o modelo é estável e que é assintoticamente estável.

$$\bar{y} = f(\bar{u}) \text{ para } \min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i)$$

sendo u_i o sinal de entrada usado na identificação.

5. Escreva os pontos de limitação superior e inferior de extrapolação do sistema a ser identificado.

$$\begin{aligned} \bar{y}^* &\geq \min(\bar{y}) \\ \bar{y}^* &\leq \max(\bar{y}) \end{aligned} \quad (4.12)$$

6. Com base no conhecimento da característica monotônica da sequência estática, determine se o mesmo é

$$\begin{aligned} \text{estritamente crescente} &\Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n > 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} > 0 \\ \text{estritamente decrescente} &\Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n < 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} < 0 \\ \text{crescente} &\Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \geq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \\ \text{decrescente} &\Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \leq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \leq 0 \end{aligned}$$

7. Tome as características da sequência estática citadas nos itens 4, 5 e 6 como restrições e Estime os parâmetros cuja estrutura foi selecionada no item 1.

$$\begin{aligned} \text{minimizar} & \quad \|\mathbf{y} - \frac{\Psi_N \hat{\Theta}_N}{\Psi_D \hat{\Theta}_D}\|^2 \\ \text{sujeito a} & \quad \bar{y}^* \geq \min(\bar{y}) \\ & \quad \bar{y}^* \leq \max(\bar{y}) \\ & \quad \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \\ & \quad \bar{y} = f(\bar{u}) \text{ para,} \\ & \quad \min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i) \end{aligned} \quad (4.13)$$

8. Valide o modelo.

4.4.2 Procedimento 3.2

A principal diferença do procedimento 3.1 com relação ao procedimento 3.2 é que o primeiro tem como principal objetivo minimizar o erro na região onde o modelo é estatisticamente válido, obedecendo às restrições de monotonicidade e extrapolação máxima e mínima. No segundo procedimento, além das restrições usadas no procedimento 3.1, usam-se restrições que agem sobre os coeficientes de agrupamento. Seguindo a mesma metodologia adotada para os procedimentos anteriores, tem-se:

1. Conhecendo os dados dinâmicos de uma região restrita de operação, utilize algum procedimento de escolha de estrutura racional e selecione os regressores mais significativos.

$$y(k) = \frac{a(k-1)}{b(k-1)} + e(k) \quad (4.14)$$

2. Valide estatisticamente o modelo para esta região
3. A partir do modelo estatisticamente válido, escreva a função que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$. Por definição o modelo racional apresenta termos cruzados logo a função estática pode ser escrita:

$$\bar{y} = \frac{a_0 + a_1\bar{u} + a_2\bar{u}^2 + \dots + a_l\bar{u}^l}{b_0 + b_1\bar{u} + b_2\bar{u}^2 + \dots + b_l\bar{u}^{l-1}} \quad (4.15)$$

sendo $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ constantes que podem ser expressas como função dos coeficientes de agrupamento.

4. A partir da função escrita no item 3 gere dados estáticos na região na qual o modelo é estatisticamente válido. Aqui presume-se que o modelo é estável e que é assintoticamente estável.

$$\bar{y} = f(\bar{u}) \text{ para } \min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i)$$

sendo u_i o sinal de entrada usado na identificação.

5. Escreva os pontos de limitação superior e inferior de extrapolação do sistema a ser identificado.

$$\begin{aligned} \bar{y}^* &\geq \min(\bar{y}) \\ \bar{y}^* &\leq \max(\bar{y}) \end{aligned} \quad (4.16)$$

6. Com base no conhecimento da característica monotônica da sequência estática, determine se o mesmo é

$$\text{estritamente crescente} \Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n > 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial u} > 0$$

$$\text{estritamente decrescente} \Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n < 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial u} < 0$$

$$\text{crescente} \Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \geq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial u} \geq 0$$

$$\text{decrescente} \Rightarrow \bar{y}_{n+1} - \bar{y}_n \leq 0 \Rightarrow \frac{\partial \bar{y}}{\partial u} \leq 0$$

7. Estime os coeficiente $a_{0,1,2,\dots,l}$ e $b_{0,1,2,\dots,l-1}$ da equação 4.15, a partir dos dados estáticos obtidos no item 4 e as restrições dos itens 5 e 6.
8. Escreva as equações que relacionam os coeficientes de agrupamento de termos em função dos coeficientes da equação 4.15, usando:

$$\bar{y} = \frac{\sum_0^\alpha + \sum_u^\alpha \bar{u} + \sum_{m=2}^l \sum_{u^m}^\alpha \bar{u}^m}{\sum_0^\beta - \sum_y^\alpha + \sum_u^\beta \bar{u} + \sum_{m=2}^l \sum_{u^m}^\beta \bar{u}^m} \quad (4.17)$$

As equações que relacionam os coeficientes de agrupamentos são:

$$\begin{aligned} \sum_0^\alpha &= a_0 \\ \sum_u^\alpha \bar{u} &= a_1 \\ \sum_{u^2}^\alpha \bar{u}^2 &= a_2 \\ &\vdots \\ \sum_0^\beta - \sum_y^\alpha &= b_0 \\ \sum_u^\beta \bar{u} &= b_1 \\ \sum_{u^2}^\beta \bar{u}^2 &= b_2 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (4.18)$$

9. Tome as características da sequência estática citadas nos itens 5 e 6, em conjunto com as restrições citadas no item 8 e estime os parâmetros do modelo cuja estrutura foi selecionada no item 1, utilizando equações e inequações de restrição. Para isso, deve-se usar um

método de otimização com restrições de igualdade e desigualdade.

$$\begin{aligned}
 &\text{minimizar} && \|\mathbf{y} - \frac{\Psi_N \hat{\Theta}_N}{\Psi_D \hat{\Theta}_D}\|^2 \\
 &\text{sujeito a} && \bar{y}^* \geq \min(\bar{y}) \\
 & && \bar{y}^* \leq \max(\bar{y}) \\
 & && \frac{\partial \bar{y}}{\partial \bar{u}} \geq 0 \\
 & && \bar{y} = f(\bar{u}) \text{ para,} \\
 & && \min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i) \\
 & && \sum_0^\alpha = a_0 \\
 & && \sum_u^\alpha \bar{u} = a_1 \\
 & && \sum_{u^2}^\alpha \bar{u}^2 = a_2 \\
 & && \vdots \\
 & && \sum_0^\beta - \sum_y^\alpha = b_0 \\
 & && \sum_u^\beta \bar{u} = b_1 \\
 & && \sum_{u^2}^\beta \bar{u}^2 = b_2 \\
 & && \vdots
 \end{aligned}$$

10. Valide o modelo.

Um fator importante a ser destacado nos procedimentos 3.1 e 3.2 é que, além das informações intrínsecas nos sistemas, utilizadas no procedimento 02, estes dois procedimentos se propõem a utilizar informações intrínsecas do modelo identificado em uma faixa restrita de operação. Resultados da aplicação desses procedimentos são apresentados no Capítulo 5.

4.5 Considerações finais

No presente capítulo apresentam-se três procedimentos para a inserção de informação auxiliar na estimação dos parâmetros em modelos NARX racionais. O primeiro procedimento desenvolvido é utilizado para estimar os parâmetros de modelos NARX racionais quando dados dinâmicos em uma faixa restrita de operação estão disponíveis e os dados estáticos do processo são conhecidos.

O segundo e o terceiro procedimento foram desenvolvidos para problemas nos quais se deseja estimar os parâmetros de modelos NARX racionais, mas só estão disponíveis dados dinâmicos em uma faixa restrita de operação, ou seja, não se tem dados estáticos do sistema. A principal diferença entre o segundo e o terceiro procedimento é que, no terceiro, usam-se os da-

dos estáticos gerados pelo modelo identificado na faixa restrita de operação, ou seja, considera-se que sendo o modelo dinâmico válido em uma faixa de operação o mesmo também será válido estaticamente, após agrupamento de termos, nessa região.

Uma característica comum aos três procedimentos apresentados é a facilidade de inserção de informação auxiliar na estimação dos parâmetros dos modelos NARX racionais. A aplicação dos procedimentos propostos neste capítulo é apresentada e comentada no Capítulo 5.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

5.1 Introdução

O uso de informação auxiliar em procedimentos de modelagem empírica tem desempenhado um importante papel na melhoria da qualidade dos modelos. Em geral, modelos obtidos com uso de informações auxiliares têm maior capacidade de extrapolação e possuem estruturas mais simples. Porém, na maioria dos casos, o custo a pagar está relacionado com o aumento da complexidade dos algoritmos de estimação de parâmetros.

No Capítulo 3 foram apresentados a modelagem fenomenológica e o projeto da planta de neutralização de pH. Na Seção 5.2 deste capítulo apresenta-se uma comparação entre o modelo fenomenológico e o funcionamento real da planta de neutralização de pH. Desta forma, o modelo desenvolvido no Capítulo 3 é validado com a operação real da planta.

Outro resultado apresentado neste capítulo diz respeito à aplicação dos procedimentos apresentados no Capítulo 4. Para verificar o desempenho dos procedimentos propostos são usados dados obtidos a partir da simulação do modelo fenomenológico e dados reais coletados na planta piloto de pH. Os três procedimentos apresentados são avaliados e comparados entre si e com procedimentos encontrados previamente na literatura.

Também é apresentado neste capítulo o uso dos procedimentos 02 e 03 em dados coletados no processo piloto. Os dados com informações sobre a característica estática do processo não foram coletados, o que inviabiliza o uso do procedimento 01. Vale ressaltar que os procedimentos 02 e 03 não necessitam de dados do comportamento estático do sistema.

5.2 Validação do modelo fenomenológico

O principal objetivo desta seção é avaliar a capacidade do modelo, desenvolvido no Capítulo 3, de representar a planta piloto construída de neutralização de pH.

Foram realizados 5 experimentos para coletar dados que possam ser usados na validação do modelo. Em cada experimento, a planta foi excitada alterando a vazão de base (Q_3) e mantendo constantes a vazão da solução tampão (Q_2) e da solução ácida (Q_1). Para variação da vazão Q_3 , foi usado um sinal com características aleatórias entre um patamar mínimo (Q_{3min}) e um patamar máximo (Q_{3max}). O tempo de permanência em cada patamar também tem características aleatórias, variando entre um tempo de permanência mínimo (T_{min}) e um tempo de permanência máximo (T_{max}). As demais condições nominais das variáveis e parâmetros de operação do sistema são mostradas na Tabela (5.1).

Detalhes sobre calibração das bombas e sensores, bem como o procedimento de preparo das soluções podem ser vistos no Apêndice (A).

Tabela 5.1: Tabela de constantes e variáveis para operação nominal da planta piloto de pH usadas no modelo.

Símbolo	Variável	Valor nominal
V_r	Volume do tanque reator	870 cm^3
Q_1	Vazão de ácido	$2,71 \text{ mL/s}$
Q_2	Vazão de tampão	$0,053 \text{ mL/s}$
Q_3	Vazão de base	$2,61 \text{ mL/s}$
W_{a1}	W_a em $Q_1 \rightarrow [HNO_3]_1$	$0,006 \text{ molar}$
W_{a2}	W_a em $Q_2 \rightarrow -[NaHCO_3]_2$	$-0,06 \text{ molar}$
W_{a3}	W_a em $Q_3 \rightarrow -[NaHCO_3]_3 - [NaOH]_3$	$-0,0061 \text{ molar}$
W_{b1}	W_b em Q_1	0
W_{b2}	W_b em $Q_2 \rightarrow [NaHCO_3]_2$	$0,06 \text{ molar}$
W_{b1}	W_b em $Q_3 \rightarrow [NaHCO_3]_3$	$0,0001 \text{ molar}$
A_{ta}	Área da base do tanque de reagente ácido	1320 cm^2
A_{tt}	Área da base do tanque de reagente tampão	1320 cm^2
A_{tb}	Área base do tanque de reagente base	1320 cm^2
A_{tc}	Área da base do tanque de coletor (rejeito)	$1963,5 \text{ cm}^2$
K_{a1}	Constante de ionização do ácido = $[HCO_3^-][H^+]/[H_2CO_3]$	$10^{-6,35}$
K_{a2}	Constante de ionização do ácido = $[CO_3^{2-}][H^+]/[HCO_3^-]$	$10^{-10,33}$
K_w	Constante de ionização da água = $[H^+][OH^-]$	10^{-14}

A Tabela 5.1 apresenta o valor nominal ideal das constantes e variáveis de forma a manter a planta piloto construída (seção 3.6) operando com o pH igual a 7,01. Antes de realizar cada experimento foi feita a medição da condição inicial do pH de cada reagente após o preparo, sendo esta informação representada pela Tabela 5.2. Para todos os experimentos, o pH da água antes do preparo da solução foi de 6,98.

Tabela 5.2: Tabela com os valores de pH dos reagentes em cada experimento.

	Experimentos			
Reagente	1 e 2	3	4	5
HNO_3	2,21	2,21	2,21	2,20
$NaOH$	12,25	12,12	12,47	12,03
$NaHCO_3$	9,02	9,01	9,41	9,01

Em todos os experimentos a planta piloto operou em condição inicial conforme os parâmetros da Tabela 5.1, com exceção das vazões de ácido (Q_1) e a de base (Q_3), as quais são apresentadas pela Tabela 5.3. As vazões Q_{10} e Q_{30} são as entradas iniciais de ácido e base, respectivamente, para manter o pH próximo de 7, ou seja, condição inicial de operação em cada experimento antes de iniciar a variação da vazão Q_3 .

Tabela 5.3: Tabela com condições particulares de cada experimento.

Experimento	Q_{10} (mL/s)	Q_{30} (mL/s)	Q_{3min} (mL/s)	Q_{3max} (mL/s)	Tempo Operação
01	2	1,9	0,6	3,16	152 min
02			0,9	2,6	115 min
03	2,74	2,64	1,05	4,16	180 min
04					150 min
05					180 min

Outros pontos comuns entre os 5 experimentos são, o tempo de amostragem (T_s) que foi de 3 segundos, o tempo mínimo (T_{min}) e o tempo máximo (T_{max}) em cada patamar, sendo 60 segundo e 120 segundos, respectivamente.

Dos 5 experimentos realizados, são apresentados somente os resultados dos experimentos 01, 03 e 05. Os demais experimentos apresentaram resultados semelhantes, por isso não são mostrados.

A análise matemática da resposta do modelo e da planta piloto é feita utilizando o índice do erro quadrático médio (equação (2.50)).

Apesar das seções seguintes se proporem a avaliar o desempenho do modelo com relação à planta piloto, algumas modificações na planta foram necessárias para garantir algumas premissas consideradas durante o desenvolvimento do modelo no Capítulo 03. Estas modificações são discutidas nas seções que se seguem.

5.2.1 Experimento 01 - 23/02/2007

Inicialmente manteve-se a planta piloto operando conforme os parâmetros da Tabela 5.1 e as vazões Q_1 e Q_3 conforme a Tabela 5.3. O mesmo sinal aplicado na entrada do processo real (Figura 5.1a) foi aplicado no modelo matemático da planta e obteve-se a resposta apresentada pela Figura 5.1b.

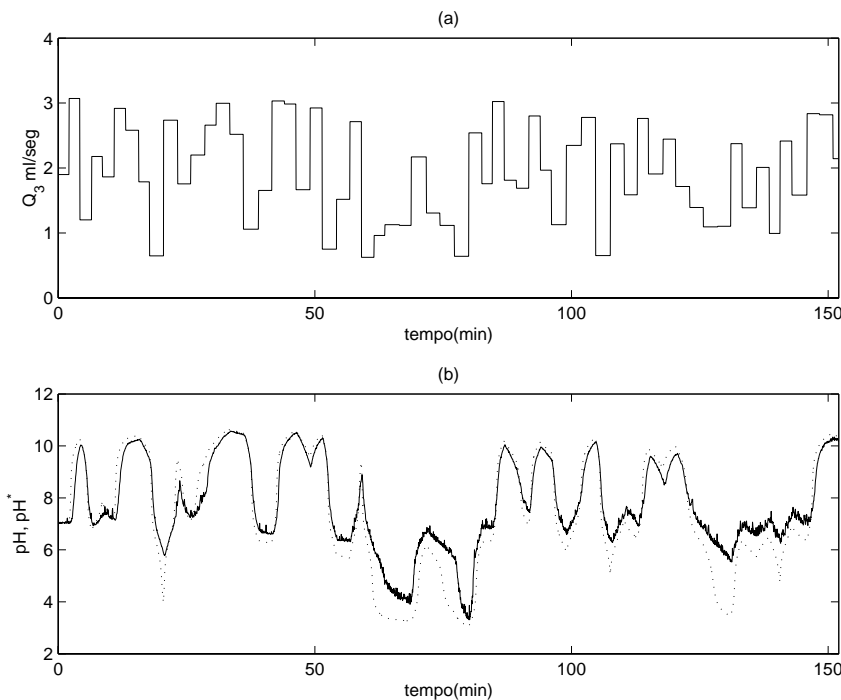


Figura 5.1: (a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados medidos do experimento 01 são indicados com (—) e os dados de resposta do modelo são indicados com (- -).

A análise matemática (vide índice $RMSE_{antes}$ na Tabela 5.4) e a análise gráfica (Figura 5.1b) das respostas do modelo e da planta piloto permitem concluir que o modelo desenvolvido aproxima razoavelmente do comportamento dinâmico da planta piloto. Entretanto, percebe-se

que o comportamento dinâmico do modelo, na região ácida, apresenta características diferentes com relação ao processo real, dentre elas citam-se o maior ganho e tempo de resposta menor do modelo. A hipótese inicialmente criada para explicar esta diferença entre os comportamentos simulado e real baseia-se no fato da bomba, responsável pela vazão de Q_3 , trabalhar também na sua região não-linear (Tabela A.5). Para investigar esta hipótese é apresentado na próxima seção o experimento 03.

5.2.2 Experimento 03 - 07/03/2007

Com base na hipótese levantada no experimento 01, foi feita a alteração do *range* da vazão da bomba Q_3 (Tabela 5.1) para que a mesma trabalhasse somente na sua região linear. Outra alteração feita foi no tempo de amostragem da sonda de pH para retirar a alta frequência dos dados. Realizaram-se então mais dois experimentos (03 e 04), sendo apresentado na Figura 5.2b a comparação entre a resposta do modelo e os dados do experimento 03.

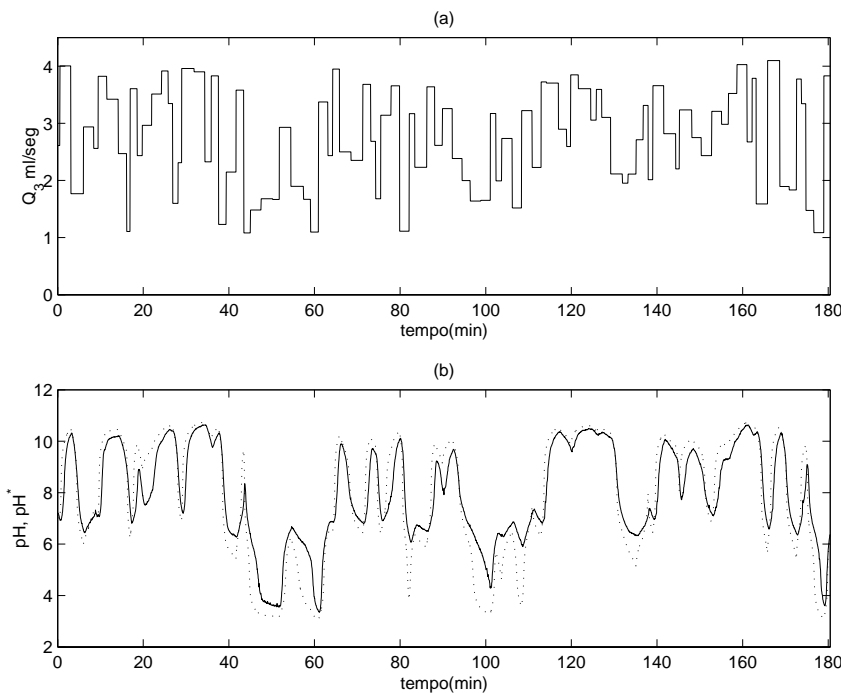


Figura 5.2: (a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados experimentais (medidos) do experimento 03 são indicados com (—) e os dados de resposta do modelo são indicados com (- -).

Neste experimento 03, a resposta simulada pelo modelo também aproximou-se razoavel-

mente da resposta dinâmica da planta (ver índice $RMSE_{antes}$ na Tabela 5.4). Mesmo alterando o *range* da vazão de Q_3 , observa-se na Figura (5.2b) uma situação semelhante àquela obtida no experimento 01, no que diz respeito à diferença de ganho entre os comportamentos simulados e experimentais na região ácida. Com base nos resultados deste experimento, outras hipóteses foram levantadas, sendo elas:

1. ponto de dosagem dos reagentes não é o ideal para a reação completa dos mesmos dentro do reator.
2. a quantidade da mistura dentro do reator não é suficiente para as reações ocorrerem.
3. as propriedades da água usada para preparo dos reagentes influenciam o processo.

Com exceção da hipótese 3, as demais foram investigadas com a realização do experimento 05.

5.2.3 Experimento 05 - 13/03/2007

De forma a investigar as hipóteses 1 e 2 levantadas no experimento 03, fizeram-se três alterações no processo com relação aos experimentos anteriores, sendo elas:

- alteração do ponto de dosagem dos reagentes dentro do tanque reator. As mangueiras de dosagem foram posicionadas o mais próximo possível da barra magnética para agitação do fluido;
- a barra magnética responsável pela agitação foi altera para um tamanho maior;
- a velocidade de agitação do fluido foi aumentada.

Após as alterações citadas, os demais procedimentos foram seguidos conforme os experimentos anteriores, ou seja, manteve-se o pH próximo de 7 e posteriormente iniciou a variação da vazão Q_3 . A Figura 5.3 apresenta a entrada utilizada para excitar a planta piloto durante o experimento e a comparação entre as respostas da planta e o modelo.

Com base nas respostas obtidas (Figura 5.3b) juntamente com os índices $RMSE$ (ver índice $RMSE_{antes}$ na Tabela 5.4), pode ser observado que as alterações feitas no processo tornaram as condições da planta mais próximas do modelo simulado. Isso pode ser constatado pela aproximação do comportamento do modelo e da planta na região ácida. Entretanto, ainda

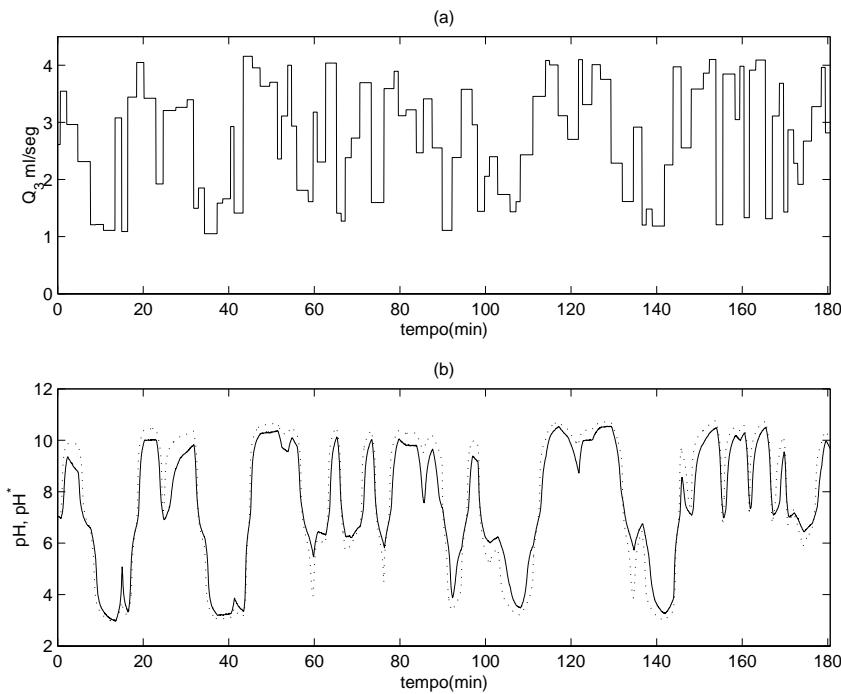


Figura 5.3: (a) Sinal de entrada e (b) sinal de pH medido e simulado. Os dados medidos do experimento 05 são indicados com (—) e os dados de resposta do modelo são indicados com (- -).

há uma diferença de ganho entre os comportamentos simulados e experimentais. Essa diferença é associada, neste trabalho, à hipótese 3 do item 5.2.2., ou seja, as propriedades da água de torneira utilizada no preparo das soluções ácida e básica pode ter alterado o comportamento do sistema. Considerando-se que a água pode possuir íons com efeito tampão, decidiu-se tentar reproduzir esse efeito modificando no modelo matemático a vazão da solução tampão.

5.2.4 Ajuste da vazão da solução tampão no modelo fenomenológico

Nesta seção investigou-se se um ajuste na vazão de tampão melhoraria os resultados obtidos pelo modelo fenomenológico.

O ajuste da vazão de tampão para cada experimento foi realizada de forma a reduzir o erro quadrático médio (índice *RMSE*). A Tabela (5.4) apresenta os índices *RMSE* do modelo com relação a planta para cada experimento, antes e depois da alteração da vazão de Q_2 . Pode ser observado, a partir do índice *RMSE* de cada experimento juntamente com o comportamento dinâmico do modelo com relação a planta (Figura 5.4), que a resposta do modelo melhorou significativamente em relação à resposta experimental.

Para cada experimento foi necessário um ajuste diferente de vazão Q_2 (ver tabela 5.4). Detalhes sobre esta diferença são descritos posteriormente na seção de discussões.

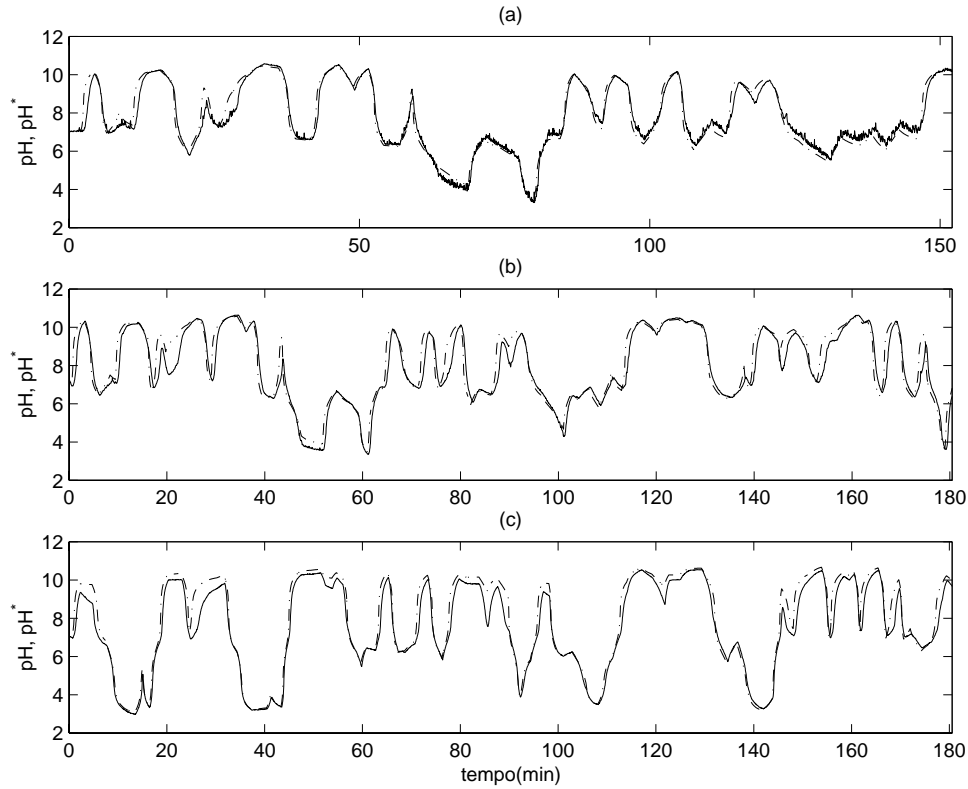


Figura 5.4: Gráficos com o comparativo do modelo após alteração da vazão de tampão Q_2 (a) Modelo x Experimento 01, (b) Modelo x Experimento 03, (c) Modelo x Experimento 05. Os dados medidos no experimento são indicados com (—) e os dados de resposta do modelo são indicados com (- -).

5.2.5 Discussões

Antes de iniciar as discussões, devem ser ressaltadas algumas diferenças entre os experimentos apresentados nas seções anteriores. Devido às respostas dos experimentos 1 e 2, antes do ajuste da vazão de Q_2 no modelo matemático, apresentarem índices $RMSE$ de 0,4926 e 0,8466, respectivamente, levantou-se como hipótese, o fato da vazão da bomba Q_3 operar na sua região não linear (ver Tabela A.5) interferir no processo. Desse modo, a faixa de variação da vazão da bomba de base foi alterada para os demais experimentos. Outra diferença, que deve ser ressaltada, é entre o experimento 5 e os demais experimentos. O baixo ganho da planta piloto na região ácida, pode ser constatado com base nos experimentos 1, 2, 3 e 4 (antes do

ajuste de Q_2), desse modo levantaram-se as seguintes hipóteses:

1. Ponto de dosagem dos reagentes não é o ideal para a reação completa dos mesmos dentro do reator.
2. A mistura dentro do reator não é suficiente para ocorrerem as reações.
3. As propriedades da água usada para preparo dos reagentes estão influenciando no processo.

Com base nas hipóteses 1 e 2, antes da realização do experimento 5, fez-se a alteração dos pontos de dosagem dos reagentes dentro do tanque reator juntamente com a troca da barra magnética responsável pela agitação do fluido. A resposta do experimento 5 (Figura (5.3b)) mostra que houve uma melhora do ganho da planta na região ácida.

A hipótese sobre as propriedades da água não foi investigada diretamente neste trabalho, mas evidencia-se como um fator relevante na comparação da resposta do modelo e da planta piloto. Ressalta-se que, no modelo desenvolvido, consideram-se os reagentes preparados com água destilada, ao contrário da planta piloto na qual os reagentes foram preparados com água de torneira. Segundo Macedo (2004) a alcalinidade é normalmente encontrada nas águas sob a forma de carbonato ou bicarbonato. Os três tipos de alcalinidade possíveis de serem encontrados em água natural são, alcalinidade a hidróxido (OH^-), a carbonato (CO_3^{2-}) e a bicarbonato (HCO_3^-). Com base nesta característica da água natural e no comportamento do pH na planta piloto, pode-se suspeitar que a água utilizada no preparo dos reagentes tem efeito tampão, ou seja, está influenciando nos resultados diretamente. Outro indício desta influência da água no processo é a alteração do pH dos reagentes do experimento 3 e 4 (ver Tabela (5.2)), lembrando que os reagentes usados no experimento 4 são os restantes do experimento 3.

Para todos os experimentos o modelo teve que sofrer um ajuste de parâmetro para melhorar sua resposta comparada aos dados reais, ou seja, foi necessário alterar a vazão da solução tampão para que o índice $RMSE$ fosse reduzido. A Tabela (5.4) apresenta de forma resumida os índices $RMSE$ antes e após o ajuste da vazão da solução.

Pode ser observado pela Tabela (5.4) que os experimentos que apresentam as mesmas condições operacionais, como é o caso dos experimentos 1 e 2 e dos experimentos 3 e 4, o ajuste da vazão da solução tampão (Q_2) foi próxima.

Fazendo uma análise global da resposta do modelo comparada com os experimentos pode-se considerar que, mesmo sofrendo alteração de parâmetro, o modelo correspondeu as expectativas, principalmente pelo fato das condições (água usada no preparo dos reagentes) de realização

Tabela 5.4: Tabela resumo com os índices $RMSE$ antes e depois do ajuste da vazão Q_2 .

	Experimento				
	1	2	3	4	5
$RMSE_{antes}$	0,4926	0,8466	0,5323	0,4973	0,3550
$RMSE_{depois}$	0,2416	0,3115	0,3525	0,1948	0,2728
$Q_{2ajustado}$	0,0800	0,0840	0,0930	0,0950	0,0761

dos experimentos não serem as mesmas consideradas no modelo. Além disto, a alteração utilizada foi no sentido de aumentar a quantidade de tampão no sistema, o que é coerente com a informação da literatura de que a água utilizada (torneira) apresenta efeito tampão.

Com base nos resultados obtidos nas seções anteriores, o modelo desenvolvido no Capítulo 03 é válido, pois representou de forma satisfatória (considerando índices $RMSE$) a planta de neutralização de pH.

5.3 Uso de informação auxiliar para estimação de parâmetros - Dados Simulados

Nesta seção, os procedimentos apresentados no Capítulo 4 são usados para inserir informação auxiliar na estimação de parâmetros de um modelo NARX racional. Os dados usados para estimação dos parâmetros são os dados simulados no modelo fenomenológico desenvolvido no Capítulo 3. O sinal de entrada para o modelo fenomenológico consiste nos dados usados por Johansen (1996) e adaptados para faixa de vazão da planta piloto de neutralização de pH desenvolvida neste trabalho, isso de forma a comparar os resultados desse trabalho com os obtidos por Corrêa (2001). Os desempenhos dos modelos, obtidos usando os procedimentos propostos são comparados com o do modelo obtido na estimação dos parâmetros usando estimador de mínimos quadrados para modelo racional.

Vale ressaltar que o objetivo dos procedimentos propostos é a identificação de modelos mais globais a partir de dados dinâmicos restritos a uma faixa de operação. Deste modo foram gerados dados de identificação em uma região restrita de operação (Figura 5.5), dados de validação em toda faixa de operação (Figura 5.6) e dados do comportamento estático (Figura 5.7). A Figura 5.5 apresenta a saída da planta de neutralização, no qual o pH está restrito a $4,36 \leq pH \leq 8,22$ e o sinal de vazão de Q_3 variando entre $1,17 \text{ ml/seg} \leq Q_3 \leq 2 \text{ ml/seg}$.

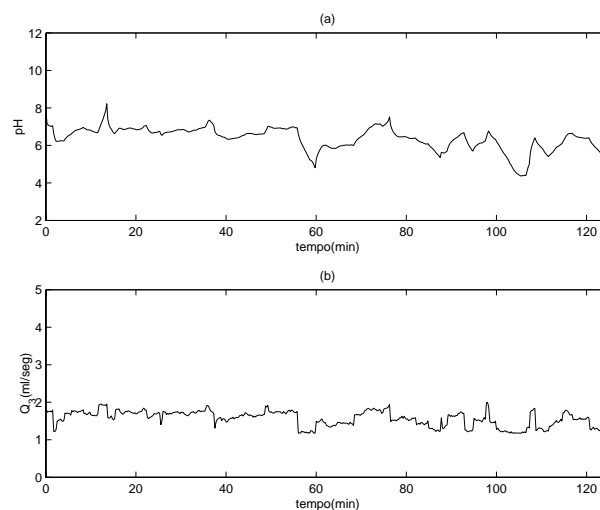


Figura 5.5: Dados simulados de identificação da planta de neutralização de pH. (a) Sinal de saída - pH e (b) sinal de entrada - vazão Q_3 .

Figura (5.6) apresenta a saída da planta de neutralização, no qual o pH está restrito a $3,29 \leq pH \leq 10,92$ e o sinal de vazão de Q_3 variando entre $0,17 \text{ ml/seg} \leq Q_3 \leq 4,62 \text{ ml/seg}$.

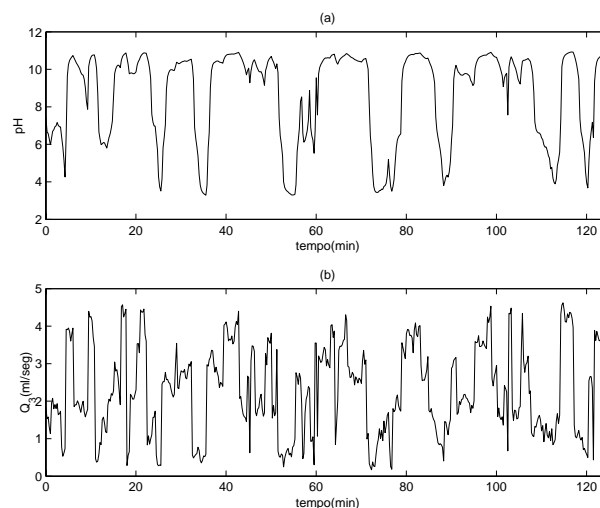


Figura 5.6: Dados simulados de validação da planta de neutralização de pH. (a) Sinal de saída - pH e (b) sinal de entrada - vazão Q_3 .

Pode-se observar o comportamento não-linear do processo de neutralização de pH pela curva estática (Figura 5.7), na qual fica evidente a variação do ganho do processo de acordo com o ponto de operação.

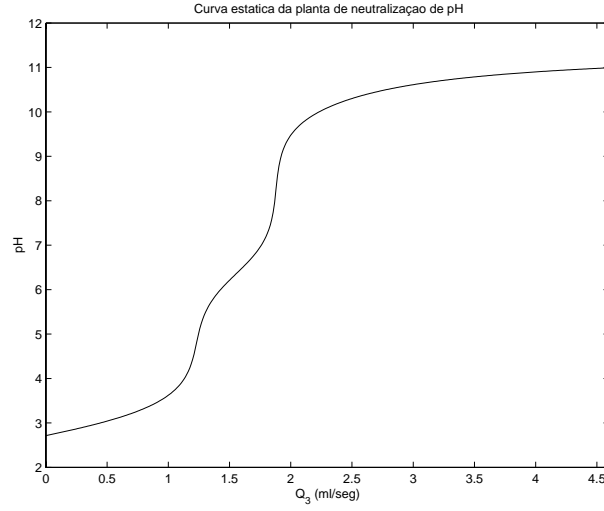


Figura 5.7: Comportamento estático da planta de neutralização de pH.

Antes de iniciar a avaliação dos procedimentos propostos, é apresentado o melhor modelo obtido utilizando o estimador de mínimos quadrados para modelo racional (RME) sem o uso de informação auxiliar. Conforme citado no Capítulo 4, os procedimentos propostos neste trabalho partem do pressuposto que o problema de seleção de estrutura esteja resolvido, deste modo, detalhes da seleção de estrutura não serão abordados. Chega-se então no seguinte modelo

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

no qual

$$\begin{aligned}
 den = & \theta_{22} + \theta_{23} \times u(k-1) + \theta_{24} \times u(k-1)u(k-1) + \theta_{25} \times u(k-3) \\
 & + \theta_{26} \times u(k-1)u(k-2) + \theta_{27} \times u(k-2)u(k-2) \\
 & + \theta_{28} \times u(k-1)u(k-3) + \theta_{29} \times u(k-2)u(k-3)
 \end{aligned}$$

O modelo (5.1) é constituído por 29 termos de processo, sendo 21 termos no numerador e 8 termos no denominador. O grau de não linearidade do numerador (ℓ_α) igual a 3 e do denominador (ℓ_β) igual a 2. Devido à saída do sistema estudado (planta de neutralização de pH) apresentar apenas um estado estacionário, o maior expoente para os termos da saída do processo y é igual a 1. Assim, como demonstrado pela equação (2.49), o modelo tem apenas uma saída em estado estacionário. Os termos cruzados, tanto do numerador quanto do denominador, foram excluídos para evitar o aparecimento de mais de uma curva estática. Os parâmetros deste modelo podem ser vistos na coluna RME da Tabela 5.6.

A Figura 5.8 apresenta a predição livre do modelo (5.1) para os dados de identificação (Figura 5.8a) e de validação (Figura 5.8b), no qual tem-se, respectivamente o índice $RMSE$ de 0,2102 e 1,4304.

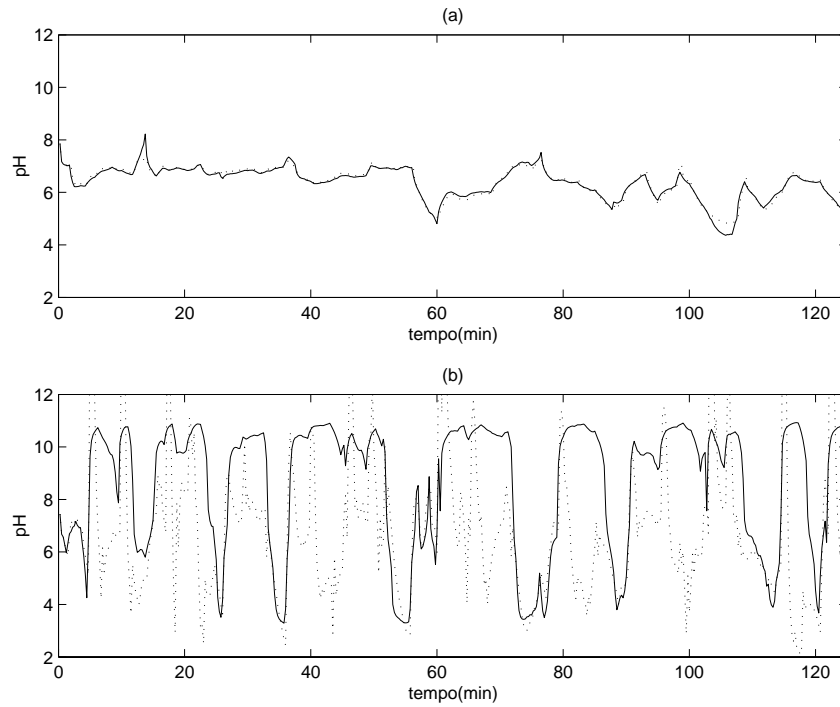


Figura 5.8: Respostas do modelo (5.1) e modelo fenomenológico. (a) dados de identificação e (b) dados de validação. (- -) Resposta do modelo (5.1). (—) Dados de simulados no modelo fenomenológico.

A partir do modelo (5.1), chega-se à expressão que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$, ou seja:

$$\bar{y} = \frac{-4,5356 + 1,7762.\bar{u} + 20,3476.\bar{u}^2 - 4,3313.\bar{u}^3}{2,2041 + 0,7288.\bar{u} + 0,6348.\bar{u}^2} \quad (5.2)$$

A equação (5.2) determina matematicamente o comportamento estático do modelo (5.1), que pode ser visto em comparação com o comportamento estático do processo na Figura 5.9. O índice $RMSE$ do comportamento estático do modelo é igual a 1,4355.

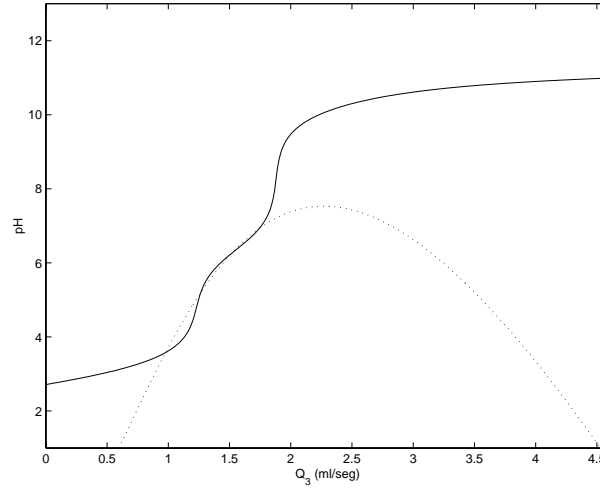


Figura 5.9: Gráfico comparador do comportamento estático do modelo (5.1) com o comportamento estático do sistema de pH. (- -) Resposta do modelo (5.1). (—) Curva estática do pH.

Sendo o modelo dinâmico válido, também pode-se considerar o modelo estático válido (equação (5.2)). A curva estática na região na qual o modelo é estatisticamente válido é apresentado pela Figura (5.10). Os dados da curva estática, na região na qual o modelo é válido, são usados como informação auxiliar para o procedimento 03, conforme descrito no Capítulo 4.

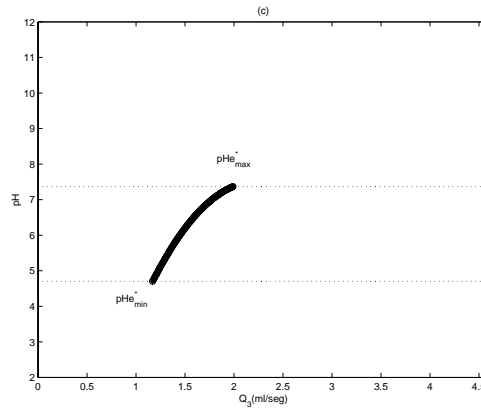


Figura 5.10: Dados gerados na região na qual o modelo (5.1) é estatisticamente válido. $pH_{e_{min}}^*$ - é o valor estático para vazão de 1,17ml/seg. $pH_{e_{max}}^*$ é o valor estático para a vazão de 2ml/seg

Para as próximas sub-seções apresentam-se os resultados obtidos com o uso de cada procedimento proposto em conjunto com a discussão de cada um deles.

5.3.1 Avaliação dos procedimentos

Nesta seção são aplicados os procedimentos propostos Capítulo 4 com o objetivo de verificar a melhoria no comportamento global do modelo (5.1). As informações auxiliares utilizadas em cada procedimento podem ser vistas na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Restrições impostas durante a estimação dos parâmetros para cada procedimento. \bar{y} e \bar{y}^* representa o comportamento estático do pH (simulado e estimado, respectivamente). \bar{u} representa a vazão Q_3 .

	Informações auxiliares		
Proced.	Info 01	Info 02	Info 03
1	$\bar{y}^* = \bar{y}$	$\partial \bar{y} / \partial \bar{u} \geq 0$	$2 \leq \bar{y}^* \leq 12$
2a	$\partial \bar{y} / \partial \bar{u} \geq 0$	$\bar{y}_{min}^* = 2$	$\bar{y}_{max}^* = 12$
2b	$\partial \bar{y} / \partial \bar{u} \geq 0$	$\bar{y}_{min}^* = 2,7$	$\bar{y}_{max}^* = 11$
3.1 e 3.2	$\bar{y} = f(\bar{u})$ para $\min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i)$	$\partial \bar{y} / \partial \bar{u} \geq 0$	$2 \leq \bar{y}^* \leq 12$

Durante a estimação dos parâmetros usaram-se as informações auxiliares como restrições de desigualdade e em alguns casos (avaliação do procedimento 2) também como restrições de igualdade. Os parâmetros estimados para cada procedimento, juntamente com os estimados usando o RME, podem ser vistos na Tabela 5.6. O método de otimização utilizado foi a programação quadrática sequencial (SQP).

Tabela 5.6: Parâmetros estimados utilizando os procedimentos propostos no Capítulo 4. De θ_1 a θ_{21} são parâmetros do numerador e de θ_{22} a θ_{29} são parâmetros do denominador.

θ	Procedimento					
	RME	1	2a	2b	3.1	3.2
θ_1	23,2710	18,9446	10,9342	28,0204	22,1138	22,0534
θ_2	-0,0281	-7,5590	20,1340	-14,9752	-13,2748	-12,0675
θ_3	0,6324	-6,8984	20,2794	-17,3151	-13,8607	-12,9818
θ_4	0,0344	0,6845	1,0441	1,3818	1,2819	0,7626
θ_5	-1,1451	-0,4952	-4,5509	2,4287	0,3097	1,0802
θ_6	1,1719	-6,3590	21,5598	-16,2053	-14,2020	-12,4990
θ_7	-1,3645	-0,7146	0,2069	-0,6300	-0,7527	0,3557
θ_8	3,6027	0,3131	11,1425	-0,2021	2,1575	0,7238
θ_9	-4,5356	28,7911	58,8887	36,6230	31,0418	29,5310
θ_{10}	1,3198	1,9698	2,1323	1,5513	4,7924	2,0425
θ_{11}	5,2656	1,9759	14,4957	4,6909	4,4821	3,4972
θ_{12}	2,9222	-0,3675	11,4982	0,4730	1,2276	1,0125
θ_{13}	1,5772	2,2272	2,5677	3,5807	1,7061	1,9036
θ_{14}	1,0881	1,7381	2,9423	3,1938	2,1988	2,4576
θ_{15}	-1,6399	-0,9898	-0,8938	0,2924	0,4546	-0,1526
θ_{16}	4,7174	1,4278	14,0389	3,4509	2,0043	2,4498
θ_{17}	3,8396	0,5499	13,1135	2,0948	0,7047	1,0103
θ_{18}	0,8175	1,4676	2,0689	2,6597	0,6597	0,8613
θ_{19}	1,8840	2,5340	3,6076	0,6889	-1,3818	0,3672
θ_{20}	-3,3918	-2,7416	-1,8793	-0,7360	0,0007	0,0058
θ_{21}	-3,5110	-2,8608	-3,4847	-0,2235	2,6813	1,3814
θ_{22}	25,4752	29,8013	43,4814	41,7374	33,6705	33,0892
θ_{23}	0,1400	-5,0466	1,6489	-14,3266	-9,7226	-10,0975
θ_{24}	-0,7701	-0,3337	1,1605	3,1826	3,0194	3,1513
θ_{25}	0,5887	-4,5978	0,9375	-5,7019	-6,9524	-5,5497
θ_{26}	0,9124	1,3479	2,4586	1,9799	1,4746	-1,4446
θ_{27}	0,1457	0,5813	2,2352	0,3070	0,7912	1,5409
θ_{28}	-0,4409	-0,0045	-0,9018	1,1403	2,8426	3,0336
θ_{29}	0,7879	1,2235	1,1009	3,1831	0,2265	1,4013

Em primeira análise foi verificada a predição livre dos modelos com relação aos dados na faixa restrita de operação (Figuras 5.11).

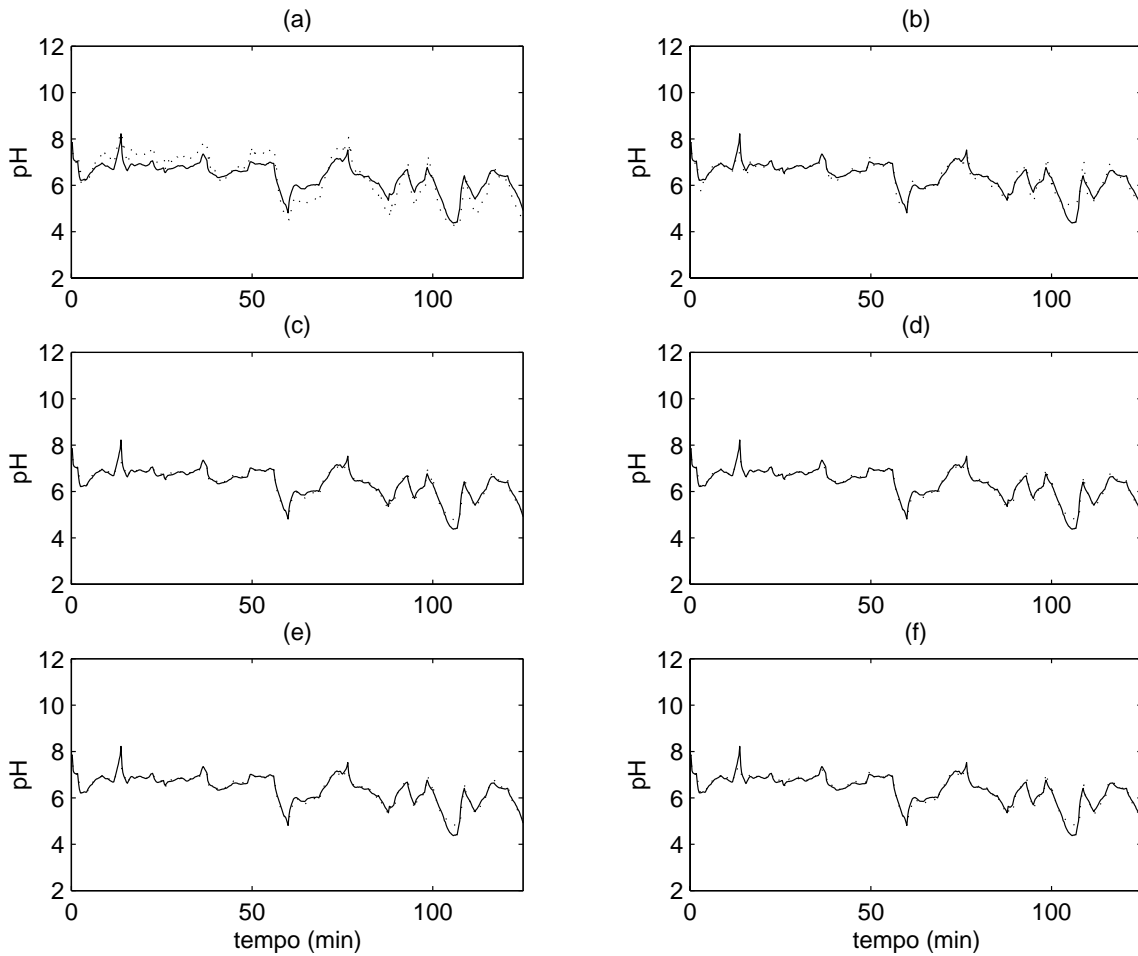


Figura 5.11: Resposta dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com os dados na faixa restrita de operação. (---) Resposta do modelo na predição livre. (—) Dados de identificação.

Observa-se pela Figura 5.11 juntamente com os índices $RMSE$ (ver coluna DI da Tabela 5.7), que os modelos identificados utilizando informação auxiliar tiveram, na massa de dados de identificação, pouca perda de desempenho em comparação ao modelo (5.1). Em alguns casos (2a, 3.1 e 3.2) o desempenho dos modelos identificados com o uso de informação auxiliar foram razoavelmente melhores.

Outra avaliação feita dos modelos foi verificar a predição livre dos mesmos com relação a toda faixa de operação (Figura 5.12).

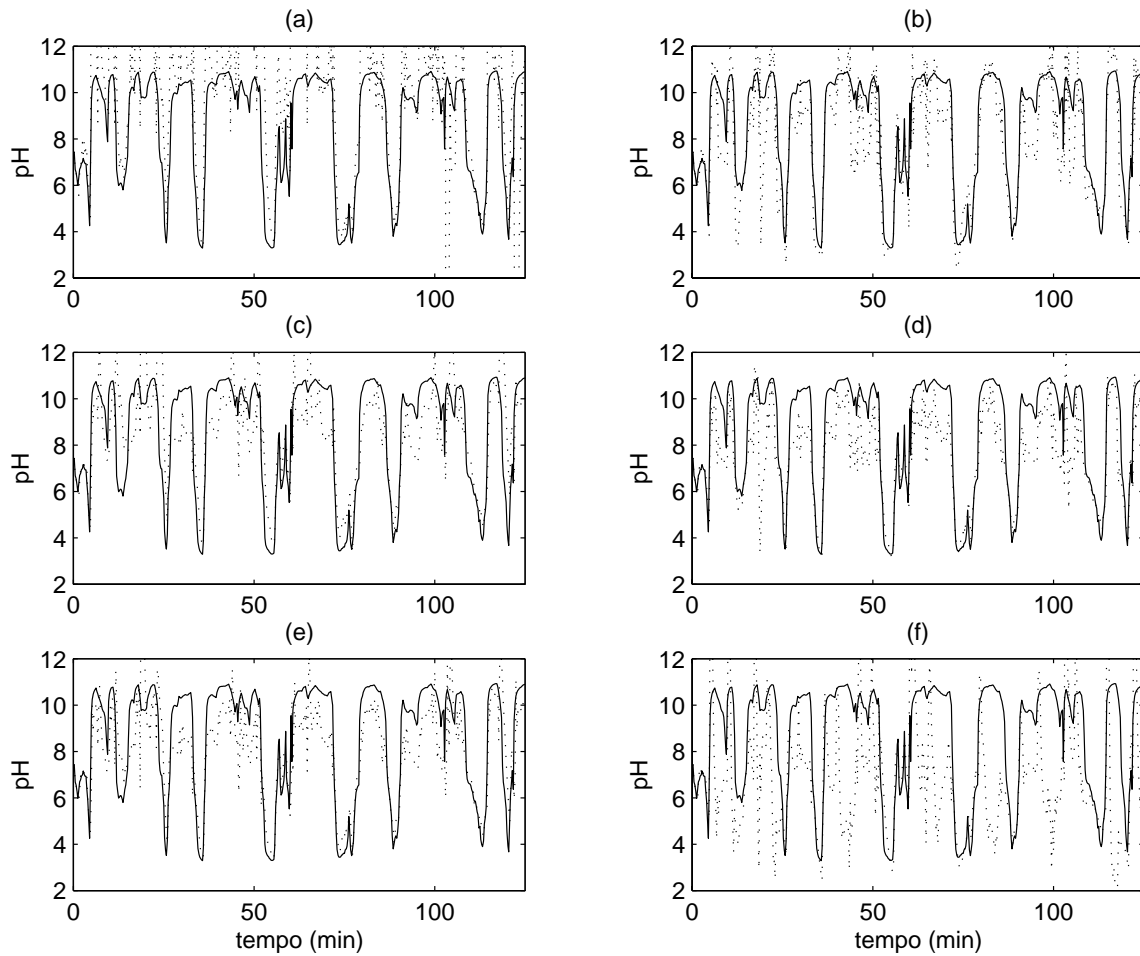


Figura 5.12: Resposta dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com os dados em toda faixa de operação. (---) Resposta do modelo na predição livre. (—) Dados de validação.

Analisando a Figura 5.12 e os índices $RMSE$ (Ver coluna DV da Tabela 5.7), fica claro que os modelos identificados utilizando informação auxiliar, com exceção para o procedimento 01, apresentam uma melhor aproximação dos dados de validação que o modelo (5.1). Apesar do modelo identificado utilizando o procedimento 01 apresentar um índice $RMSE$ maior que o modelo (5.1), observa-se graficamente que o mesmo teve uma razoável aproximação, principalmente na região ácida.

Tabela 5.7: Comparação dos índices $RMSE$ do modelo caixa-preta com os modelos identificados usando os procedimentos do Capítulo 4. Os índices $RMSE$ estão divididos em: **DI** - dados de identificação, **DV** - Dados de validação e **DE** - Dados estáticos

Proced.	RMSE		
	DI	DV	DE
RME	0,2102	1,4304	1,4355
1	0,6980	4,9705	0,0642
2a	0,3323	0,6058	0,2820
2b	0,2050	0,9428	0,3775
3.1	0,2033	0,6442	0,3750
3.2	0,2066	0,6447	0,3755

A Figura 5.13 apresenta a resposta do modelo em comparação com a curva estática do sistema. Como já era esperado o índice $RMSE$ (ver coluna DE da Tabela 5.7) foi muito melhor que o do modelo (5.1), uma vez que características intrínsecas da curva estática foram usadas como informação auxiliar.

5.3.2 Discussões

Os resultados apresentados demonstram que o uso de informação auxiliar melhora a característica global dos modelos NARX racionais identificados com uma massa de dados restrita a uma região de operação, mesmo que esta melhora não seja suficiente para aproximar o comportamento do sistema original.

Comparando-se os resultados encontrados utilizando o procedimento 01 (Figura 5.13a) e o resultado apresentado por Corrêa 2001 (Figura 4.2), observa-se que a restrição de monotonicidade proposta neste procedimento impede que a curva estática do modelo apresente derivada negativa. Deste modo o modelo atende a uma característica intrínseca do sistema, que no caso do pH, significa dizer que o aumento da vazão de base aumenta o pH.

Um fator a ser ressaltado é o uso dos procedimentos 2 e 3. Mesmo desconhecendo a curva estática do sistema, estes procedimentos permitem a identificação de modelos com desempenho melhor do que o modelo identificado com RME.

Outro fator importante e particular do procedimento 03 é que, sendo o modelo válido em uma região restrita de operação, os dados estáticos gerados pelo mesmo (nesta região), podem ser usados, juntamente com os limites mínimos e máximos, como informação auxiliar durante

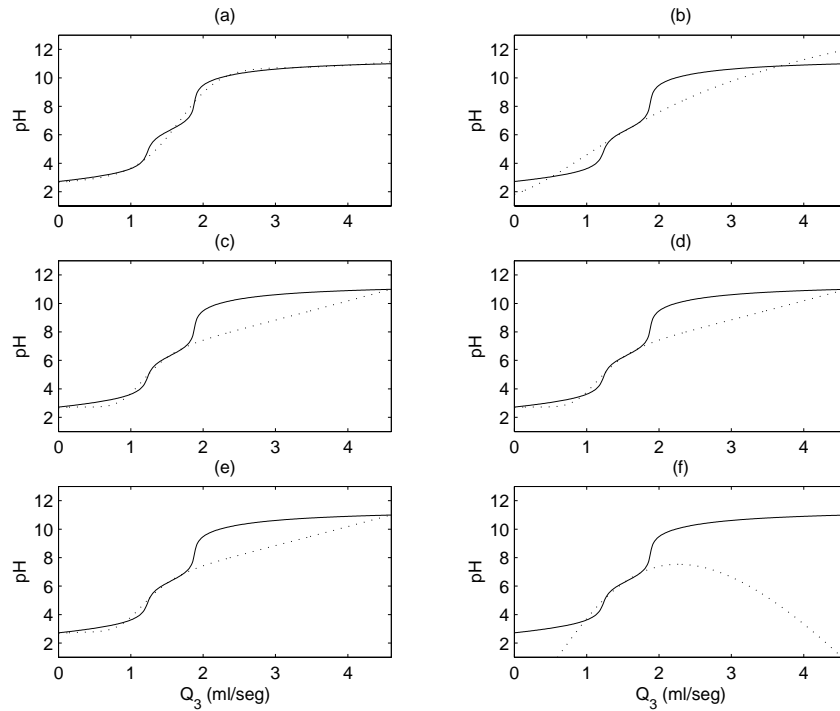


Figura 5.13: Resposta estática dos modelos identificados usando (a) Procedimento 01, (b) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2$ e $\bar{y}_{max}^* = 12$), (c) Procedimento 02 ($\bar{y}_{min}^* = 2,7$ e $\bar{y}_{max}^* = 11$), (d) Procedimento 3.1, (e) Procedimento 3.2 e (f) RME, comparados com a curva estática do sistema simulado. (--) Resposta do modelo. (—) Dados estáticos do sistema simulado.

a estimação de parâmetros.

5.4 Uso de informação auxiliar para estimação de parâmetros - Dados Reais

Nesta seção, os procedimentos 2 e 3 apresentados no Capítulo 4 são usados para inserir informação auxiliar na estimação de parâmetros de um modelo NARX racional. Os dados usados para estimação dos parâmetros são dados reais coletados durante os experimentos na planta de neutralização de pH. Vale ressaltar que não foram coletados dados do comportamento estático da planta de neutralização de pH, por isso o uso somente dos procedimentos 2 e 3.

Projetaram-se dois sinais aleatórios distintos para excitação da planta de pH. Um dos sinais foi gerado para coletar dados em uma faixa restrita de operação (Figura 5.14a) e o outro para coletar dados em toda faixa de operação (Figura 5.16a). Os sinais aleatórios foram aplicados na

planta, sendo que a saída foi medida utilizando-se uma sonda de pH interligada a uma placa de aquisição de dados. Durante os experimentos o tempo mínimo de permanência em cada patamar de vazão (T_{min}) foi de 60 segundos e o tempo máximo (T_{max}) de 120 segundos. O tempo de amostragem escolhido para os experimentos foi igual a 3 segundos. Seguindo o procedimento para a escolha do tempo de amostragem da seção (2.4.1), chegou-se a um fator de decimação igual 12. Conseqüentemente, os dados experimentais tem um tempo de amostragem de 36 segundos.

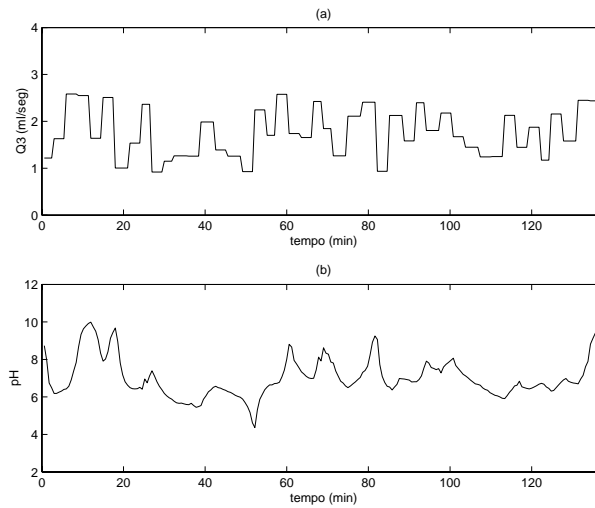


Figura 5.14: Entrada e saída da planta de pH em uma faixa restrita de operação. Dados de (a) entrada e (b) saída da planta de pH.

A Figura 5.14 apresenta os dados usados para identificação dos modelos nas seções posteriores, no qual o pH está restrito a $4,36 \leq pH \leq 9,98$ e o sinal de vazão de Q_3 variando entre $0,91 \text{ ml/seg} \leq Q_3 \leq 2,58 \text{ ml/seg}$. Avaliando o histograma dos dados de identificação 5.15 observa-se que mais de 84% dos dados encontram-se entre o pH 5,5 e 8,2.

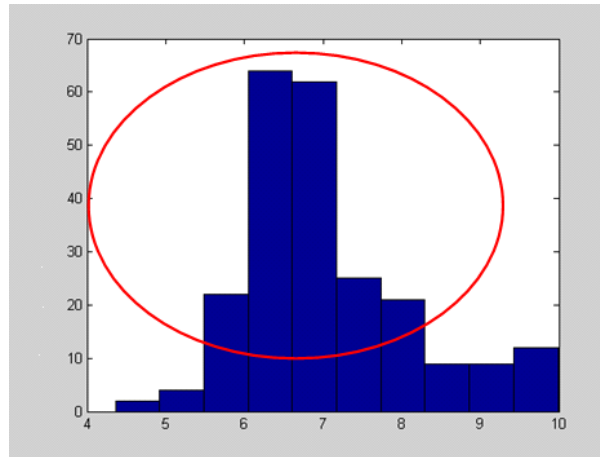


Figura 5.15: Histograma com a distribuição dos dados utilizados para identificação.

A Figura 5.16 apresenta os dados usados para validação dos modelos nas seções posteriores, no qual o pH está restrito a $3,32 \leq pH \leq 10,55$ e o sinal de vazão de Q_3 variando entre $0,62 \text{ ml/seg} \leq Q_3 \leq 3,07 \text{ ml/seg}$.

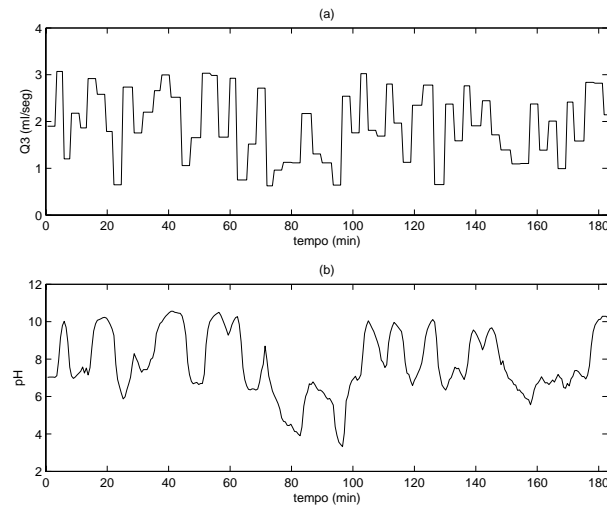


Figura 5.16: Entrada e saída da planta de pH em toda faixa de operação. Dados de (a) entrada e (b) saída da planta de pH.

A partir dos dados mostrados na Figura 5.14 foram identificados dois modelos (*mph39* e *mph49*), com estruturas diferentes, usando o estimador RME. Os resultados destes modelos servem de base para comparação com os resultados obtidos utilizando informação auxiliar.

O modelo *mph39* é representado pela equação (5.3), no qual é constituído por 30 termos de processo, sendo 20 termos no numerador e 10 termos no denominador. O grau de não linearidade do numerador (ℓ_α) é igual a 5 e do denominador (ℓ_β) igual a 3. O máximo atraso entre os regressores de saída (n_y) é igual a 2 e de entrada (n_u) é igual a 3. Devido à saída do sistema estudado apresentar apenas um estado estacionário, o maior expoente para termos da saída do processo y é igual a 1. Assim, como demonstrado pela equação (2.49), o modelo tem apenas uma saída em estado estacionário. Os termos cruzados, tanto do numerador quanto do denominador, são excluídos para evitar o aparecimento de mais de uma curva estática. Os parâmetros desse modelo podem ser visualizados na Tabela 5.9.

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

no qual

$$\begin{aligned}
 den = & \theta_{21} + \theta_{22} \times u(k-1) + \theta_{23} \times u(k-1)u(k-1)u(k-3) + \theta_{24} \times u(k-3) \\
 & + \theta_{25} \times u(k-1)u(k-3) + \theta_{26} \times u(k-1)u(k-1) + \theta_{27} \times u(k-1)u(k-1)u(k-1) \\
 & + \theta_{28} \times u(k-1)u(k-3)u(k-3) + \theta_{29} \times u(k-3)u(k-3) \\
 & + \theta_{30} \times u(k-3)u(k-3)u(k-3)
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

A partir da equação (5.3), fazendo o agrupamento de termos, chega-se à expressão que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$, ou seja:

$$\bar{y} = \frac{2,0651 - 7,0816.\bar{u} + 9,8631.\bar{u}^2 - 6,3421.\bar{u}^3 + 1,9484.\bar{u}^4 - 0,2307.\bar{u}^5}{0,0675 - 0,0566.\bar{u} + 0,0543.\bar{u}^2 - 0,0148.\bar{u}^3} \tag{5.4}$$

A equação (5.4) determina matematicamente o comportamento estático do modelo *mph39*. O comportamento estático deste modelo pode ser visto na Figura 5.18.

O modelo *mph49* é representado pela equação (5.5), no qual é constituído por 26 termos de

processo, sendo 20 termos no numerador e 6 termos no denominador. O grau de não linearidade do numerador (ℓ_α) é igual a 5 e do denominador (ℓ_β) é igual a 2. O máximo atraso entre os regressores de saída (n_y) é igual a 1 e de entrada (n_u) é igual a 3. Devido à saída do sistema estudado apresentar apenas um estado estacionário, o maior expoente para termos da saída do processo y é igual a 1. Assim, como demonstrado pela equação (2.49), o modelo tem apenas uma saída em estado estacionário. Os termos cruzados, tanto do numerador quanto do denominador, são excluídos para evitar o aparecimento de mais de uma curva estática.

$$\begin{aligned}
 y(k) = & \frac{1}{den} \times \{ \theta_1 \times y(k-1) + \theta_2 \times u(k-1) + \theta_3 \times u(k-2)u(k-2)u(k-3) \\
 & + \theta_4 + \theta_5 \times u(k-2) + \theta_6 \times u(k-2)u(k-2)u(k-2) \\
 & + \theta_7 \times u(k-2)u(k-2)u(k-2)u(k-2)u(k-3) \\
 & + \theta_8 \times u(k-3) + \theta_9 \times u(k-2)u(k-3) + \theta_{10} \times u(k-1)u(k-1) \\
 & + \theta_{11} \times u(k-1)u(k-1)u(k-1)u(k-1)u(k-1) \\
 & + \theta_{12} \times u(k-2)u(k-2)u(k-2)u(k-2) + \theta_{13} \times u(k-1)u(k-3) \\
 & + \theta_{14} \times u(k-1)u(k-2)u(k-3) \\
 & + \theta_{15} \times u(k-1)u(k-2)u(k-2)u(k-2)u(k-2) \\
 & + \theta_{16} \times u(k-1)u(k-1)u(k-1) + \theta_{17} \times u(k-1)u(k-1)u(k-1)u(k-1) \\
 & + \theta_{18} \times u(k-1)u(k-2) + \theta_{19} \times u(k-1)u(k-2)u(k-2)u(k-3) \\
 & + \theta_{20} \times u(k-2)u(k-2)u(k-3)u(k-3) \}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

no qual

$$\begin{aligned}
 den = & \theta_{21} + \theta_{22} \times u(k-2) + \theta_{23} \times u(k-2)u(k-2) + \theta_{24} \times u(k-2)u(k-3) \\
 & + \theta_{25} \times u(k-3) + \theta_{26} \times u(k-3)u(k-3)
 \end{aligned}$$

A partir da equação (5.5), fazendo o agrupamento de termos, chega-se à expressão que relaciona $\bar{y} = f(\bar{u})$, ou seja:

$$\bar{y} = \frac{0,7687 - 2,9277.\bar{u} + 5,3315.\bar{u}^2 - 4,1095.\bar{u}^3 + 1,4329.\bar{u}^4 - 0,1847.\bar{u}^5}{0,0676 + 0,0009.\bar{u} - 0,0049.\bar{u}^2} \tag{5.6}$$

A equação (5.6) determina matematicamente o comportamento estático do modelo *mph49*. O comportamento estático deste modelo pode ser visto na Figura (5.18).

A resposta do comportamento dinâmico, tanto do modelo *mph39* quanto do modelo *mph49* pode ser visualizada na Figura 5.17.

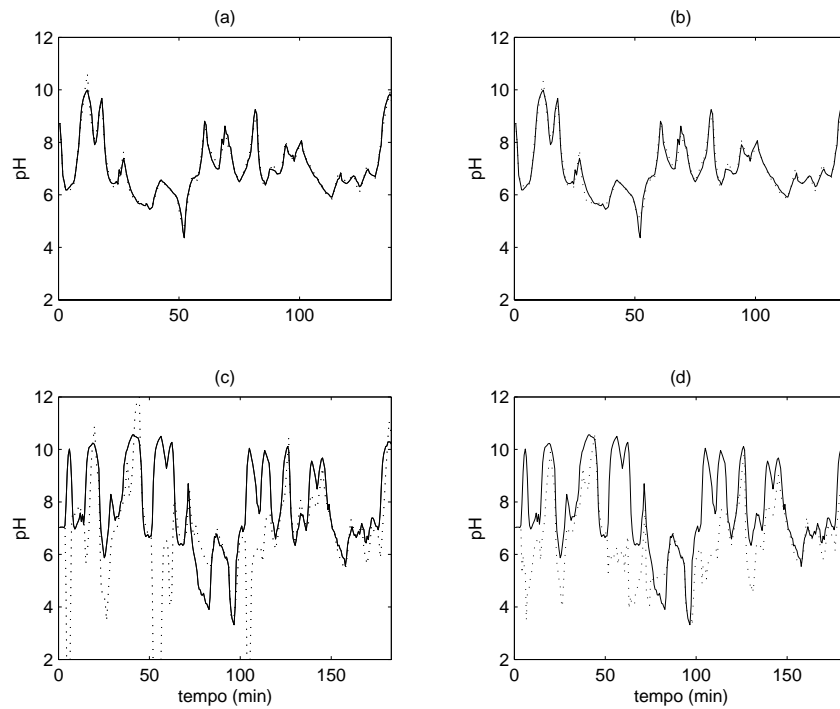


Figura 5.17: Gráfico comparador das respostas dos modelos identificados utilizando RME na faixa restrita e em toda faixa de operação. (a) e (c) são os gráficos referentes ao modelo *mph39*. (c) e (d) são os gráficos referentes ao modelo *mph49*. (—) Respostas dos modelos e (---) dados reais.

Analisando os índices $RMSE$ do modelo *mph39* observa-se que o mesmo apresentou índices iguais a 0,1465 e 1,5557 para os dados de identificação e validação, respectivamente. Para o modelo *mph49* os índices foram 0,1658 e 1,0580.

O comportamento estático de ambos os modelos (Figura 5.18), demonstram que os mesmos apresentam derivada negativa. No caso do modelo *mph39* a derivada negativa ocorre no início e no final da faixa de operação, já no modelo *mph49* este comportamento ocorre somente no final.

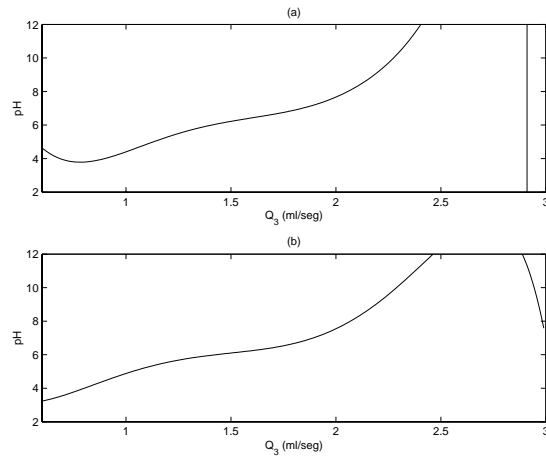


Figura 5.18: Comportamento estático dos modelo identificados usando RME. (a) modelo *mph39*. (b) modelo *mph49*.

As curvas estáticas na região na qual os modelos são estatisticamente válidos é apresentada pela Figura (5.19).

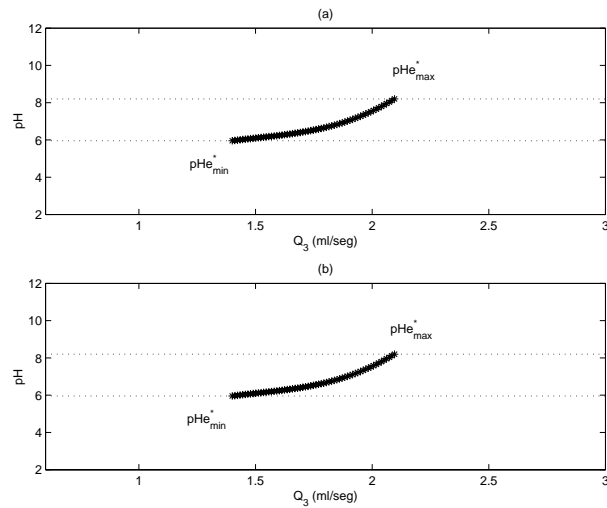


Figura 5.19: Dados gerados na região na qual os modelos modelos são estatisticamente válidos. (a) Região para o modelo *mph39* e (b) a região para o modelo *mph49* pHe_{min}^* - é o valor estático para vazão de 1,4 ml/seg. pHe_{max}^* é o valor estático para a vazão de 2,1 ml/seg

5.4.1 Avaliação dos procedimentos

Conforme já citado anteriormente, os modelos *mph39* e *mph49* têm seus parâmetros estimados a partir da utilização dos procedimentos 2 e 3. O objetivo é avaliar o desempenho destes procedimentos na melhoria do comportamento global dos modelos identificados a partir de dados reais. As informações auxiliares utilizadas em cada procedimento podem ser vistas na Tabela 5.8.

Tabela 5.8: Restrições impostas durante a estimação dos parâmetros para cada procedimento.

Estrutura	Proced.	Informações Auxiliares		
		Info1	Info2	Info3
mph39	2	$\partial \bar{y}^* / \partial \bar{u} \geq 0$	$\bar{y}_{min}^* = 2,21$	$\bar{y}_{max}^* = 12,25$
	3.1	$\bar{y} = f(\bar{u})$ para $\min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i)$	$\partial \bar{y}^* / \partial \bar{u} \geq 0$	$2,21 \leq \bar{y}^* \leq 10,68$
mph49	2	$\partial \bar{y}^* / \partial \bar{u} \geq 0$	$\bar{y}_{min}^* = 2,88$	$\bar{y}_{max}^* = 12,5$
	3.1	$\bar{y} = f(\bar{u})$ para $\min(u_i) \leq \bar{u} \leq \max(u_i)$	$\partial \bar{y}^* / \partial \bar{u} \geq 0$	$2,88 \leq \bar{y}^* \leq 12,5$

Após a definição das informações auxiliares, as mesmas foram usadas como restrições de desigualdade e em alguns casos (avaliação do procedimento 2) também como restrições de igualdade durante a estimação dos parâmetros. Os parâmetros estimados para cada procedimento juntamente com os estimados usando o RME, podem ser vistos na Tabela 5.9.

Em primeira análise, verifica-se a predição livre dos modelos com relação aos dados na faixa restrita de operação (Figura 5.20).

Tabela 5.9: Parâmetros estimados utilizando os procedimentos 2 e 3 propostos no Capítulo 4. De θ_1 a θ_{20} são parâmetros do numerador e os demais são parâmetros do denominador.

	Procedimentos					
	<i>mph39</i>			<i>mph49</i>		
θ	RME	2	3	RME	2	3
θ_1	0,7056	0,6507	0,9193	0,3652	360,5015	109,538
θ_2	-1,4665	-4,1221	0,9624	16,3421	128,055	-92,0005
θ_3	-0,1282	0,7423	1,8665	1,0193	111,6867	-42,2911
θ_4	0,2751	3,9321	-0,5343	0,7687	-107,906	93,78773
θ_5	2,0651	1,2750	-2,1766	-18,2922	109,642	-116,69
θ_6	-0,3133	-1,0299	15,4748	-10,3520	96,94118	-40,6202
θ_7	-5,6637	-4,0810	1,1616	-0,2134	68,83107	-2,33616
θ_8	7,6907	7,4034	5,6485	-0,9777	160,5307	-98,8605
θ_9	1,2114	-7,5264	-9,1972	19,3253	231,8177	114,549
θ_{10}	2,3747	-4,0203	-6,1840	-19,8903	132,7269	66,23234
θ_{11}	-0,4198	-11,1807	-9,1705	0,1882	8,064103	-3,66812
θ_{12}	-7,2126	-8,7216	-10,8086	2,2259	-94,8747	26,13379
θ_{13}	-0,1925	-3,0681	-15,4782	-15,5536	198,024	60,97586
θ_{14}	0,8514	1,4578	-0,9795	-4,6146	142,8876	-77,3224
θ_{15}	0,2753	12,6922	19,8160	-0,1595	16,72389	-0,02039
θ_{16}	-0,3408	6,8480	4,7678	9,8379	76,05675	-47,3936
θ_{17}	-1,1286	4,6130	5,3997	-2,2576	-89,0392	17,83986
θ_{18}	0,0485	0,6982	6,0876	21,4501	209,0685	108,5384
θ_{19}	2,1724	6,7012	4,1480	1,4819	-38,3594	12,65617
θ_{20}	-0,0046	-1,1290	-3,3259	-0,0173	-77,2218	6,115096
θ_{21}	0,6449	0,6609	3,3279	0,4329	480,9567	116,724
θ_{22}	-0,5016	5,1353	8,8252	-0,1227	6,765833	5,130137
θ_{23}	0,1955	-1,1896	-2,5649	0,0198	64,01923	14,81128
θ_{24}	0,4450	-3,0961	-6,4162	-0,0099	148,2884	-27,8703
θ_{25}	-0,5452	-0,5892	-0,0661	0,1236	-35,8625	-23,0499
θ_{26}	0,6025	3,9709	6,4622	-0,0147	-45,4399	21,20801
θ_{27}	-0,1707	-10,1445	-14,6635	-	-	-
θ_{28}	-0,0883	4,4367	8,4186	-	-	-
θ_{29}	-0,0029	-4,7670	-8,7052	-	-	-
θ_{30}	0,0487	7,1860	9,3468	-	-	-

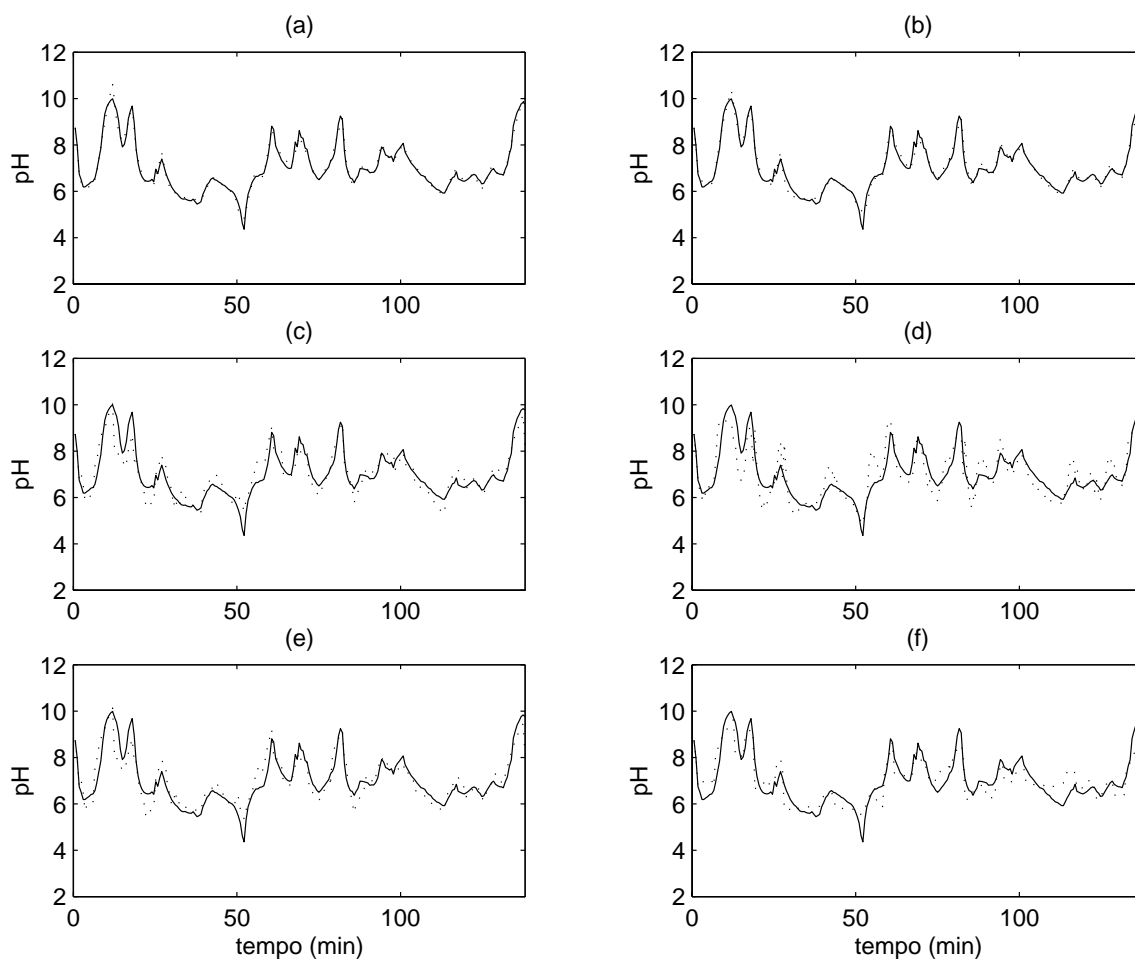


Figura 5.20: Predição livre dos modelos na região restrita de operação (dados de identificação). (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo *mph39* usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo *mph49* usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.

Observa-se pela Figura 5.20 e pelos índices $RMSE$ (ver coluna DI da Tabela 5.10), que os modelos identificados utilizando informação auxiliar tiveram perda de desempenho na região estudada, em comparação aos modelos caixa-preta.

Outra avaliação feita dos modelos foi verificar a predição livre dos mesmos com relação a toda faixa de operação (Figura 5.21).

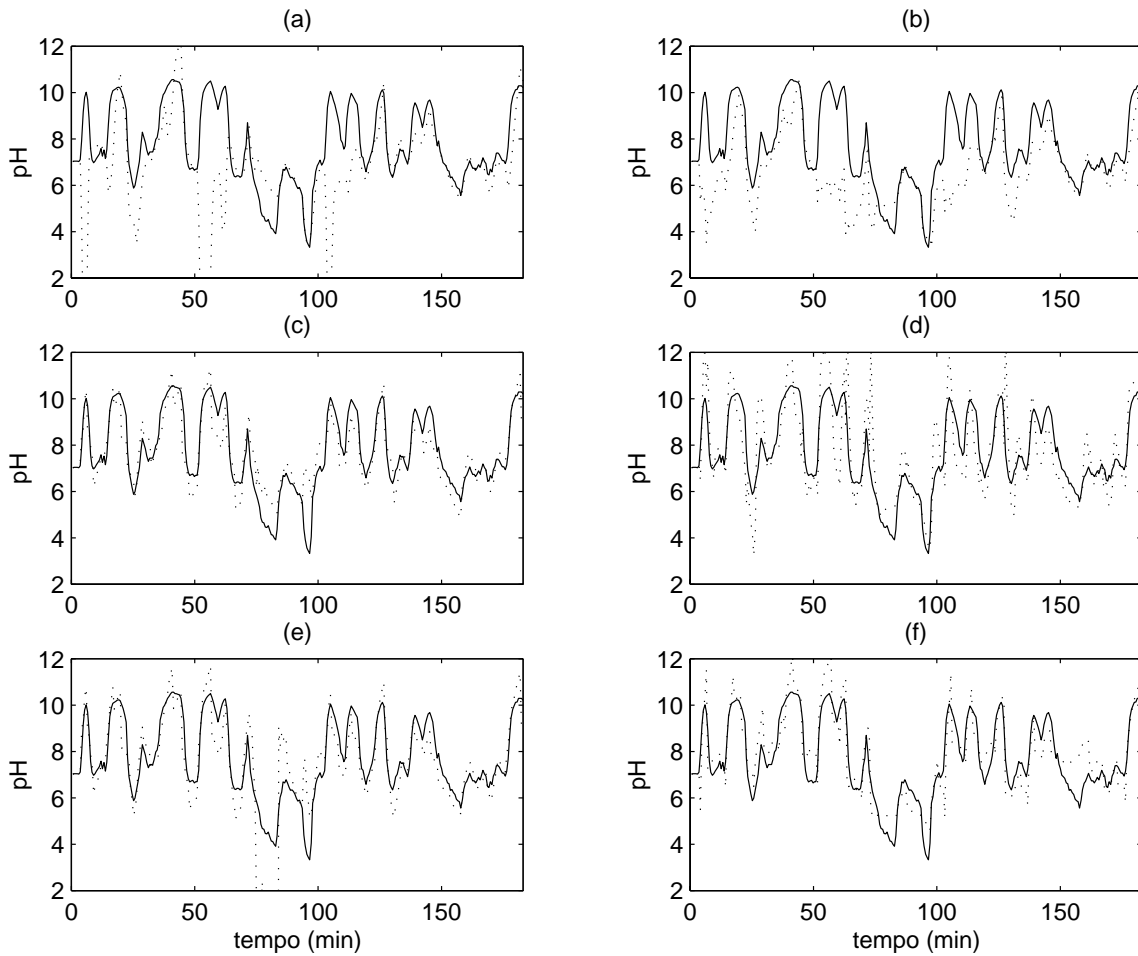


Figura 5.21: Predição livre dos modelos em toda faixa de operação. (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo *mph39* usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo *mph49* usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.

Analisando a Figura 5.21 e os índices RMSE (ver coluna DV da Tabela 5.10), fica claro que os modelos identificados utilizando informação auxiliar, com exceção do modelo *mph39* utilizando o procedimento 03, apresentam uma melhor aproximação dos dados de validação que o modelo (5.1). Apesar do modelo *mph39* identificado utilizando o procedimento 03 apresentar um índice RMSE muito maior que o modelo caixa-preta, observa-se graficamente que o mesmo teve uma aproximação razoável em grande parte da curva.

Tabela 5.10: Comparação dos índices $RMSE$ dos modelos $mph39$ e $mph49$ utilizando estimação caixa-preta(RME), procedimento 02 e procedimento 03. Os índices $RMSE$ estão divididos em: **DI** - dados de identificação, **DV** - Dados de validação e **DE** - Dados estáticos.* Para este índice RMSE foram retirados os dados da região de instabilidade

	RMSE			
	Estrutura mph39		Estrutura mph49	
Proced.	DI	DV	DI	DV
RME	0,1465	1,5557	0,1658	1,0580
2	0,4355	0,5034	0,5613	0,7427
3.1	0,4378	0,5673*	0,4718	0,5251

A Figura 5.22 apresenta a resposta estática dos modelos identificados utilizando informação auxiliar com relação aos modelos caixa-preta.

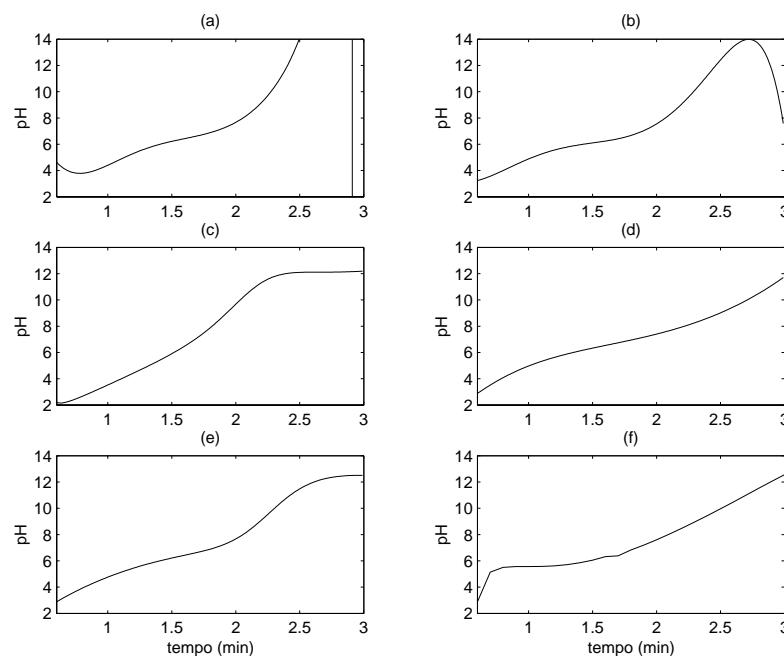


Figura 5.22: Resposta dos estática modelos identificados. (a), (c) e (e) são respectivamente a resposta do modelo $mph39$ usando RME, procedimento 02 e procedimento 03. (b), (d) e (f) são respectivamente a resposta do modelo $mph49$ usando RME, procedimento 02 e procedimento 03.

Pode ser observado que após os modelos terem tido seus parâmetros estimados com as

informações auxiliares, a curva estática respeitou a característica de monotonicidade e os limites mínimos e máximos de extrapolação.

5.4.2 Discussões

Os resultados obtidos demonstram, em um sistema piloto, os mesmos comportamentos observados nos dados simulados. O uso dos procedimentos 2 e 3 permitiram obter modelos com características globais melhores que os modelos caixa-preta, mesmo sem o conhecimento da curva estática do sistema.

Durante a avaliação dos procedimentos é observado que a estrutura escolhida para o modelo influencia os resultados obtidos, como pode ser visto comparando o modelo *mph39* e *mph49*. Essa consideração torna-se relevante pois demonstra que os procedimentos propostos dependem da solução do problema de escolha de estrutura. Inclusive, tanto os modelos identificados com dados reais quanto simulados necessitam de uma estrutura com grande número de parâmetros para apresentarem boas respostas globais, ou seja, esse ponto se destaca como uma desvantagem dos procedimentos propostos.

Outros aspectos relevantes são encontrados durante a inserção de informação auxiliar. Observa-se que as restrições de limites mínimos e máximos, bem como o valor inicial dos parâmetros antes da otimização, influenciam o resultado final da identificação. Levanta-se como hipótese para influencia dos limites mínimos e máximos, a estrutura escolhida para o modelo, pois analisando as Figuras 5.22a e 5.22b, fica claro que fora da região da massa de dados de identificação cada modelo apresenta um ganho estático diferente. Deste modo, dependendo do ganho do modelo fora da faixa de dados de identificação, faz com que os limites mínimos e máximos restrinjam a otimização na busca dos melhores parâmetros para a estrutura usada. Apesar deste fato não ter sido investigado neste trabalho, observa-se que a variação dos limites máximos e mínimos tem relação direta com a determinação dos melhores parâmetros.

5.5 Considerações Finais

Este capítulo foi dividido em duas etapas distintas, sendo que na primeira (Seção 5.2) foi feita a avaliação modelo fenomenológico desenvolvido e na segunda (Seções 5.3 e 5.4) a avaliação dos procedimentos para inserção de informação auxiliar na estimação de parâmetros de modelos NARX racionais.

Na Seção 5.2 avaliou-se de forma comparativa a resposta do modelo desenvolvido no Ca-

pítulo 3 com os dados obtidos no processo piloto. Durante a avaliação foi constatado que o modelo apresentou um comportamento dinâmico satisfatório, mas evidenciou uma diferença de ganho na região ácida, necessitando assim de um ajuste de parâmetros para tornar o modelo válido.

Foi observado também que para cada experimento foi necessário um parâmetro de ajuste diferente, sendo esse ajuste justificado pela hipótese das propriedades da água utilizada para preparo dos reagentes estarem influenciando na concentração dos mesmos e conseqüentemente no pH do processo.

Na Seção 5.3 foi feita a avaliação dos modelos identificados utilizando os procedimentos propostos no Capítulo 4 e o resultado dos mesmos comparados com o modelo obtido utilizando o método de mínimos quadrados para modelo racional (RME). Como já era esperado, foi observado que houve uma melhora no comportamento global dos modelos após a inserção da informação auxiliar na estimação dos parâmetros.

Na Seção 5.4 foi feita a mesma avaliação realizada na Seção 5.3, tendo como diferença a utilização de dados reais. Apesar da melhora do comportamento global após a inserção de informação auxiliar, foram levantadas algumas limitações dos procedimentos propostos. Dentre as limitações citam-se a necessidade de ter o problema de estrutura solucionado para o uso dos procedimentos e a influência dos limites mínimos e máximos de extrapolação.

Uma contribuição importante verificada neste capítulo é que os procedimentos propostos possibilitam melhorar a resposta global de um modelo, mesmo tendo dados de identificação em uma faixa restrita de operação e desconhecendo dados do comportamento estático do processo.

Capítulo 6

Conclusões

Com o passar dos anos evidenciam-se mais trabalhos apresentando técnicas de identificação e controle de sistemas não-lineares. As técnicas de identificação necessitam de dados do processo para que possam ser avaliadas. A coleta desses dados muitas vezes torna-se difícil devido ao fato de não ser possível variar o processo em toda sua faixa de operação, muito menos excitar suas não linearidades. As novas técnicas de controle, na maioria das vezes, são avaliadas em sistemas simulados devido à ausência de processos reais disponíveis para avaliação experimental.

Dentro deste contexto, este trabalho apresentou duas abordagens distintas. A primeira consistiu na modelagem fenomenológica e na construção de uma planta de neutralização de pH. A planta piloto de neutralização de pH é pequena, versátil e tida como um processo em escala de laboratório. É uma bancada de testes que atende aos requisitos para modelagem e testes de técnicas de controle, pois é bem conhecida e diferentes condições operacionais são criadas facilmente.

Foram realizados diversos experimentos para comparar a planta piloto construída com o modelo fenomenológico desenvolvido neste trabalho. Com base nos resultados conclui-se que, embora o modelo seja considerado válido ($RMSE < 1$), nem todas as condições de operação do processo real foram contempladas pelo modelo, como foi o caso da necessidade de ajuste da vazão da solução tampão para corrigir o ganho do modelo na região ácida. Algumas hipóteses foram levantadas sobre a possível causa para a diferença de ganho entre a planta piloto e o modelo matemático. O fator mais relevante para essa diferença foi atribuído as propriedades da água utilizada no preparo dos reagentes, uma vez que no modelo consideram-se os reagentes preparados com água destilada.

A segunda abordagem deste trabalho está relacionada ao uso de informação auxiliar na melhoria das características globais dos modelos NARX racionais identificados com uma massa de dados restrita a uma região de operação, mais especificamente, o uso dos procedimentos propostos no Capítulo 4. Esses procedimentos permitem de forma simplificada a inserção de informações auxiliares durante a estimação de parâmetros. As informações usadas nesses procedimentos são as características intrínsecas na maioria dos sistemas, sendo elas, a monotonicidade e os limites de operação mínimos e máximos. Dados simulados e reais foram usados para avaliar o desempenho dos modelos NARX racionais identificados a partir dos procedimentos propostos. Com base nos resultados conclui-se que o uso dos procedimentos propostos permitiu melhorias nos mesmos, ou seja, permitiu a obtenção de modelos com características mais globais mesmo quando os dados do comportamento estático do sistema eram desconhecidos. Para o caso do sistema de pH, o uso dos procedimentos permitiu a obtenção de modelos NARX racionais com características estáticas com derivada sempre positiva, respeitando assim a monotonicidade crescente.

Outra conclusão advinda dos resultados durante o uso dos procedimentos propostos, foi que a obtenção dos melhores resultados está relacionada à estrutura usada para o modelo, aos valores iniciais dos parâmetros para otimização e aos limites de operação.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

A partir dos resultados deste trabalho e de algumas idéias que surgiram no decorrer do mesmo, são, a seguir, destacadas algumas propostas para trabalhos futuros.

- Investigar os procedimentos propostos utilizando diferentes rotinas de otimização;
- Aplicar os procedimentos propostos para outras representações;
- Investigar técnicas para a detecção de estrutura de modelos NARX racionais utilizando como informação auxiliar a monotonicidade e os limites de operação;
- Investigar a influência da água utilizada para preparo dos reagentes no comportamento da planta de neutralização de pH;
- Estender os procedimentos propostos para identificação em malha-fechada;
- Expandir o projeto da planta para inserção de mais uma bomba de dosagem e um tanque, sendo esse conjunto bomba-tanque usado para simular efluentes a serem neutralizados;

-
- Desenvolvimento de procedimentos para excitação de processos de forma a extrair o máximo de informações dinâmicas e não-lineares;
 - Investigar e criar procedimentos para determinar a porcentagem mínima de dados estáticos do modelo identificado que pode ser usada como informação auxiliar;

Bibliografia

- AGUIRRE, L. A. (2004). *Introdução à identificação de Sistemas: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais*. UFMG, Editora UFMG- Belo Horizonte, Minas Gerais, 2 edition.
- AGUIRRE, L. A., 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.
- BEQUETTE, B. W. (2003). *Process Control - Modeling, Design and Simulation*. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey 07458.
- BILLINGS, S. A. e AGUIRRE, L. A. (1995). Effects of the sampling time on the dynamics and identification of nonlinear models. *Internacional Journal of Bifurcation and Chaos*, 5(6):1541–1556.
- BILLINGS, S. A. e CHEN, S. (1989). Representation non-linear systems: the narmax model. *International Journal of Systems Science*, 15(6):601–615.
- BILLINGS, S. A., CHEN, S., e KORENBERG, M. J. (1989). Identification of mimo non-linear systems using a forward-regression orthogonal estimator. *International Journal of Control*, 59(9):2157–2189.
- BILLINGS, S. A. e MAO, K. Z. (1997). Rational model data smoothers and identification algorithms. *Int. Journal Control*, 68(2):297–310.
- BILLINGS, S. A. e VOON, W. S. F. (1986). Correlation based model validity test for nonlinear models. *Int. J. Control*, 1(44):235–244.
- BILLINGS, S. A. e ZHU, Q. M. (1991). Rational model identification using an extended least-square algorithm. *International Journal of Control*, 54(3):529–546.

- BILLINGS, S. A. e ZHU, Q. M. (1992). A structure detection algorithm for nonlinear dynamic rational models. Technical Report 439, University of Sheffield.
- BOLING, J. M., SEBORG, D. E., e HESPANHA, J. P. (2007). Multi-model adaptive control of a simulated pH neutralization process. *Contr. Eng. Practice*, 15:663–672.
- BRAESS, D. (1986). Nonlinear approximation theory. *Spring Verlag*.
- CANNON, R. H. (1967). *Dynamic of physical systems*, volume 1. McGraw-Hill, New York - USA.
- CHEN, C.-T. (1998). *Linear system theory and design*. Oxford University Press, Inc., New York - USA, 3 edition.
- CORRÊA, M. V. (1997). Identificação de sistemas dinâmicos não-lineares utilizando modelos narmax racionais - aplicação a sistemas reais. Dissertação, UFMG, Belo Horizonte.
- CORRÊA, M. V. (2001). *Identificação caixa-cinza de sistemas não-lineares utilizando modelos NARMAX racionais e polinomiais*. Tese doutorado, UFMG, Belo Horizonte.
- CORRÊA, M. V. e AGUIRRE, L. A. (2004). Identificação não linear caixa-cinza: Uma revisão e novos resultados. *Revista Controle e Automação*, 15(2):109–126.
- FISCHER, G. C. (2005). *Instruções do transmissor de pH/ORP +GF+ SIGNET 8750-1*. George Fischer Signet Inc., 3401 Aerojet Avenue, El Monte, CA - USA, e edition.
- GARCIA, C. (2005). *Modelagem e simulação de processos industriais e de sistemas eletromecânicos*. Editora USP, São Paulo.
- 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.
- 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.
- GUSTAFSSON, T. K. e WALLER, K. V. (1983). Dynamic modeling and reaction invariant control of pH. *Chemical Engineering Science*, 38(3):389–398.
- HALL, R. C. e SEBORG, D. E., editors (1989). *Modelling and self-tuning control of a multivariable pH neutralization process. I. Modelling and multiloop control*, volume 2, Pittsburgh. American Control Conference, American Control Conference. (pp.1822-1827).

- HENRIQUE, H. M., LIMA, E. L., e SEBORG, D. E. (2000). Model structure determination in neural network models. *Chemical Engineering Science*, 55:5457–5469.
- JOHANSEN, T. A. (1996). Identification of non-linear sustms using empirical data and prior knowledge - an optimization approach. *Automatica*, 32(3):337–356.
- LEE, J. e PARK, H. (2000). Nonlinear ph control using a three parameter model. *ICASE: The Institute of Control, Automation and Systems Engineers, KOREA*, 2(2):130–136.
- LENNOX, B., MONTAGUE, G. A., FRITH, A. M., GENT, C., e BEVAN, V. (2001). Industrial application of neural networks - an investigation. *Journal of Process Control*, 1(11):497–507.
- LINDSKOG, P. (1996). Methods, algorithms and toos for system identification based on prior knowledge. Dissertação de Mestrado, Linkosping Studies in Science and Technology - Department of Electrical Engineering, Swenden.
- LJUNG, L. (1999). *System identification - Theory for the user*. Prentice-Hall International,, New Jersey, 2nd edition.
- LJUNG, L. e TORDEL, G. (1994). *Modeling of dynamic systems*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersay 07632, 1st edition.
- LUIBEN, W. L. (1996). *Process Modeling and Control Center*. McGraw-Hill Publishing Company, 2nd edition.
- MACEDO, J. A. B. d. (2004). *Águas e Águas*. Conselho Regional de Química - CRQ-MG, Belo Horizonte - MG, 1st edition.
- MATOS, N. A. F. (2005). Predição de séries temporais para análise dinâmica de estrutura offshore. Dissertação de Mestrado, UFRJ.
- McAVOY, T., HSU, E., e LOWENTHAL, S. (1972). Dynamic of ph in controlled stirred tank reator. *Ind. Engineer Chemical Process*, 1(11):67–70.
- MENDES, E. M. A. M. (1995a). *Identification of Nonlinear Discrete Systems with*. Tese de Doutorado, University of Sheffield.
- MENDES, E. M. A. M. (1995b). Rotinas ratms4 - rotinas para identificacao de modelos.
- 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. G. (2002). Identificação multiobjetivo de sistemas não lineares. Dissertação de Mestrado, UFMG, Belo Horizonte - MG.
- NEPOMUCENO, E. G., TAKAHASHI, R. H. C., AGUIRRE, L. A., NETO, O. M., e MENDES, E. M. A. M. (2004). Multiobjective nonlinear system identification: a case study with thyristor controlled series capacitor (tcsc). *International Journal of Systems Science*, 35(9):537–546.
- NISE, N. S. (2002). *Engenharia de Sistemas de Control*, volume 1. LTC, Rio de Janeiro - RJ, 3rd edition.
- OGATA, K. (2000). *Engenharia de controle moderno*. Prentice Hall, 3 edition.
- PEARSON, R. K. e POTTMANN, M. (2000). Gray-box identification of block-oriented nonlinear models. *Journal of Process Control*, 10:301–315.
- PONTON, J. W. (1993). The use of multivariable rational functions for non linear data presentation and classification. *Computer and Chemical Engineering*, 1(17):1047–1052.
- POTTMANN, M. e PEARSON, R. K. (1998). Block-oriented NARMAX models with output multiplicities. *AIChE Journal*, 44(1):131–140.
- RATKOWSKY, D. A. (1987). The statistical properties and utility of rational functions models. *The Canadian Journal of chemical Engineering*, 65:845–851.
- SONTAG, E. D. (1979). Polynomial response maps-lecture notes in control and information sciences. *Springer Verlag*, 13.
- SYAFIIE, F. T. e MARTINEZ, E. (2005). 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., TADEO, 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.
- THOMPSON, M. L. e KRAMER, M. A. (1994). Modeling chemical processes using prior knowledge and neural networks. *AIChE Journal*, 40(8):1328–1340.
- VÁSQUEZ, K. R. (1999). *Multiobjective evolutionary algorithms in non-linear system identification*. Tese de Doutorado, University of Sheffield, Sheffield, S1 3JD.

- YANG, D. R., LEE, T. C., SOON, K., e YOON, T. W. (2001). Indirect adaptative backstepping 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, Helsinki: University of Technology, Control Engineering Laboratory, <http://lib.hut.fi/Diss/>.
- YOO, A., LEE, T. C., e YANG, D. R. (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.
- ZHU, Q. M. (2003). A back propagation algorithm to estimate the parameters of non-linear dynamic rational models. *Applied Mathematical Modelling*, 1(27):169–187.
- ZHU, Q. M. e BILLINGS, S. A. (1991). Recursive parameter estimation for nonlinear rational models. *Journal System Engineering*, 1:63–76.
- ZHU, Q. M. e BILLINGS, S. A. (1993). Parameter estimation for stochastic nonlinear rational models. *International Journal of Control*, 57(2):309–333.

Apêndice A

Projeto da planta piloto de neutralização de pH

A construção de protótipos ou processos pilotos exigem do projetista conhecimentos de detalhes elétricos, mecânicos e químicos, como é o caso do projeto da planta de neutralização de pH. Tais conhecimentos permitem um menor tempo e custo de execução do projeto, ou seja, o projetista pode prever com antecedência situações adversas que podem prejudicar a construção. Este trabalho foi norteado por meio das seguintes etapas para desenvolvimento do projeto:

1. Modelar de forma matemática o processo de neutralização de pH
2. Determinar as simplificações que podem ser feitas no processo de acordo com os interesses operacionais e científicos.
3. Especificar todos os componentes (equipamentos, materiais e ferramentas) necessários para construção da planta piloto.
4. Construir a planta.
5. Calibração dos instrumentos envolvidos no funcionamento do processo.
6. Preparo dos reagentes
7. Descrição dos procedimentos operacionais.

As etapas 1 e 2 foram desenvolvidas no capítulo 3 (seções (3.3) e (3.6)). As demais etapas serão abordadas de forma geral neste capítulo.

A.1 Especificação dos componentes

A.1.1 Equipamentos e materiais

Apresentam-se, nesta seção, os equipamentos e os materiais utilizados para construção da planta piloto de neutralização de pH, bem como os seus fabricantes/modelos. Alguns materiais de uso específico foram adaptados para a sua utilização neste projeto.

Uma forma eficaz de detalhar dos equipamentos utilizados em um processo é por meio do *lay-out* funcional do mesmo (Figura A.1), ou seja, uma representação esquemática do fluxo do sistema a ser construído.

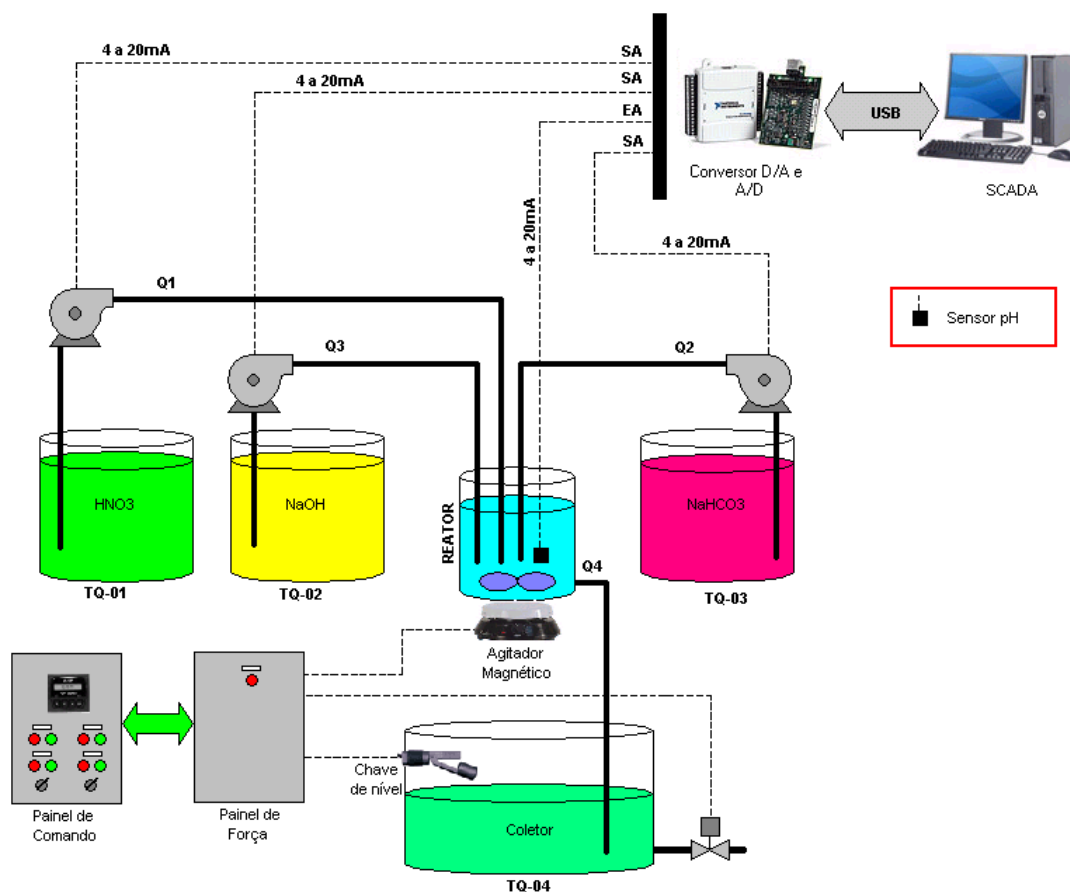


Figura A.1: *Lay-out* funcional com os equipamentos principais da planta de neutralização de pH construída

A Figura (A.1) apresenta de forma funcional o *lay-out* da planta de neutralização de pH

com os seus principais equipamentos, sendo eles:

- TQ-01 - tanque de reagente responsável pela armazenagem da solução de ácido nítrico (HNO_3) que será utilizada no processo de neutralização;
- TQ-02 - tanque de reagente responsável pela armazenagem da solução de hidróxido de sódio ($NaOH$) que será utilizada no processo de neutralização;
- TQ-03 - tanque de reagente responsável pela armazenagem da solução de bicarbonato de sódio ($NaHCO_3$) que será utilizada no processo de neutralização;
- Reator - tanque no qual são processadas as misturas dos reagentes e medição do pH;
- TQ-04 - tanque responsável pela coleta de todo produto do tanque reator;
- Q1, Q2 e Q3 - vazão das bombas responsáveis pela dosagem de HNO_3 , $NaOH$ e $NaHCO_3$ respectivamente;
- Q4 - vazão de saída do tanque reator para coleta no tanque TQ-04;
- Agitador magnético - equipamento para fazer a agitação dos reagentes dentro do tanque reator por meio de indução das barras magnéticas submersas;
- SCADA - do inglês "*Supervisory Control And Data Acquisition*", ou seja, neste caso é o computador responsável pela supervisão e aquisição de dados na planta piloto de neutralização de pH;
- Painel de força e comando - painéis responsáveis pela alimentação elétrica da planta de pH e comandos/sinalizações, respectivamente;
- Chave de nível - é um sensor responsável para monitorar o nível alto do tanque coletor (TQ-04);
- Conversor A/D e D/A - são as placas de aquisição de dados juntamente com os transdutores responsáveis pela medição/envio de referência do pH e vazão.

Cada equipamento anteriormente descrito é detalhado nas sub-seções seguinte.

A.1.1.1 Dosagem

Para o bombeamento e a dosagem das soluções, foram especificados dois modelos de bombas peristálticas do mesmo fabricante (Provitec). Para a dosagem de ácido HNO_3 e de base $NaOH$ (fluxos Q_1 e Q_3) foram utilizadas bombas do modelo AWM4900 que permitem o controle e a medição de vazões entre 3,8 l/h a 15 l/h. Para a dosagem de solução tampão $NaHCO_3$ (fluxo Q_2) foi utilizada a bomba do modelo DM4900 que permite uma vazão entre 90 ml/h a 360 ml/h.

A.1.1.2 Agitação

Para agitar da solução foi especificado um agitador magnético sem aquecimento, com corpo em chapa de aço revestido de epóxi da Fisaton, modelo 741.

A.1.1.3 Medição do pH

O sistema de medição de pH especificado é de fabricação da George Fischer Signet composto por uma sonda para submersão (Mod. 3-2716), um pré-amplificador (Mod.3-2720) e um transmissor indicador (Mod. 3-8750-1P) com saída 4 a 20mA e precisão no pH de 0,01.

A.1.1.4 Tanques

Existem dois tipos de tanques no sistema, ou seja, tanque para dosagem e tanque para coleta, ambos de fabricação da empresa PROMINENT. Os tanques para dosagem num total de 3 tanques com capacidade de 60 litros cada e são usados para armazenagem dos reagentes. O tanque de coleta com capacidade de 140 litros é usado para armazenar as misturas realizadas no processo. O material de constituição de todos os tanques é o polietileno (PE).

A.1.1.5 Mini-Reator

O mini-reator CSTR construído a partir da adaptação de um pote multi uso tem capacidade de 2,1 litros de fabricação da empresa PLASVALE (Mod. Ref. 555). O material de constituição do pote é o polipropileno (PP). Para fechamento do reator fez-se necessária a adaptação de um 1 niple PVC de 3/4", 2 luvas PVC de 3/4", um tampo de PVC para tubo de 4". A saída do efluente é feita por meio de um espugão instalado a uma altura de 180mm com referência a base do reator.

A.1.1.6 Aquisição de Dados

Na planta existem 4 variáveis analógicas, sendo três para referência de dosagem das bombas e uma para medição do pH. Para gerar e receber os sinais analógicos foram especificadas duas placas USB-6008 de fabricação da NATIONAL INSTRUMENTS. As entradas e as saídas das placas USB-6008 trabalham com níveis de tensão, por isso se fez necessário a especificação de conversores de sinal, uma vez que as variáveis analógicas do processo são em *loop* de corrente. Os transdutores(conversores) utilizados são do modelo ULTRA SLIMPAK[®] G408/0001 de fabricação da ACTION INSTRUMENTS. As placas de aquisição de dados são conectadas, via Hub USB de 4 portas, a um microcomputador Pentium[®] IV 3,06 GHz armazena os dados.

A.1.1.7 Supervisão

Para supervisionar e parametrizar as vazões das bombas, é usado como plataforma de desenvolvimento o software LABVIEW[®] versão 7.01, desenvolvido pela NATIONAL INSTRUMENTS.

A.1.1.8 Outros Materiais

- 12 metros de mangueira de silicone 3/8" para conexão das bombas aos tanques.
- 1 válvula solenóide 1/2" modelo VS-12 de fabricação da DANFOSS.
- 1 chave de nível tipo boia modelo CB2000 de fabricação da MarGirius eletric.
- 1 Rack perfilado de alumínio, conforme especificações descritas na seção A.2.1.
- 1 cabo extensor USB de 15 metros.
- 2 Quadros elétricos nas dimensões L400xA300xP200, modelo CE-4030-20 de fabricação da empresa CEMAR. Estes quadros de comando são usados para constituição dos painéis de força e comando.
- 1 fonte chaveada de 24 Vcc/4,5 A modelo S-100-24 de fabricação da empresa LEAD INDUSTRIAL.
- 1 mini-contator modelo CAW04.22-220V de fabricação da empresa WEG.
- 1 mini-contator modelo CAW04.31-220V de fabricação da empresa WEG.
- 2 disjuntores bipolares modelo GE32-B16 de fabricação da empresa GENERAL ELECTRIC.

- 5 sinaleiros 22mm na cor vermelha modelo KPR-L 220V de fabricação da empresa KACON.
- 3 sinaleiros 22mm na cor verde modelo KPR-L 220V de fabricação da empresa KACON.
- 1 sinaleiros 22mm na cor alaranjado modelo KPR-L 220V de fabricação da empresa KACON.
- 2 Chaves seletoras de duas posições(0-1) modelo STRAHL de fabricação da empresa STECK.
- 2 Blocos de contato normal aberto para seletora STRAHL de fabricação da empresa STECK.
- 2 Blocos de contato fechado aberto para seletora STRAHL de fabricação da empresa STECK.
- 2 canaletas ventiladas nas dimensões 30x30mm de fabricação da empresa HELERMANN TYTON.
- 1 Trilhos DIN 32 de fabricação da empresa CEMAR.
- 2 metros de eletroduto flexível de 32mm de fabricação da empresa SEAL TUBOS.
- 8 conectores de 32mm para eletroduto flexível de fabricação da empresa SEAL TUBOS.
- 6 metros de cabo de controle flexível 6x1mm² de fabricação da empresa CONDUMIG.
- 12 metros de cabo PP flexível 3x1mm² de fabricação da empresa CONDUMIG.
- 16 metros de cabo de instrumentação modelo MONTSINAL-SVVF2 de fabricação da empresa AMPHENOL TFC.
- 1 rolo de 100 metros de cabo 1 mm² azul.
- 1 rolo de 100 metros de cabo 1 mm² amarelo.
- 1 rolo de 100 metros de cabo 1 mm² azul.
- 50 fixadores de 25x35mm branco, modelo SAF-TC/2 de fabricação da HELERMANN.
- 73 bornes tipo SAK para cabos de até 2,5mm².
- 3 postes de fixação para bornes.

- 3 placas de fechamento para borne tipo SAK de 2,5mm².
- 4 bornes fusível.
- 2 pacotes com 100 abraçadeira de Nylon.
- 150 terminais tipo agulha para cabo 1mm²
- 150 terminais tipo agulha para cabo 2,5mm²
- 25 min-crachás para identificação de componente em painel.
- 1 registro esfera de 1/2".
- 1 niple MN8-MN8.
- 1 niple MN12-MN8.
- 1 Espurgão 1/2"x1/2".
- 4 abraçadeiras de aço 13-19.
- 1 Kit tomada(N-3006) e plugue (N-3076) industrial de fabricação da empresa STECK.
- 1 rolo de fita isolante.

A.1.2 Ferramentas utilizadas

- 1 multímetro modelo EP-2042A de fabricação de empresa Minipa[®].
- 1 calibrador por *loop* de corrente DRUCK modelo UPS-II
- 1 fonte de tensão contínua variável Polimed[®] modelo PMI-30035
- 1 furadeira tipo Boch modelo GBM13-2
- 1 furadeira tipo Boch modelo GBM10
- 1 Serra TICO-TICO
- 1 chave de fenda 2/8"
- 1 chave de fenda 1/8"
- 1 chave PHILLIPS 1/8"

- 1 jogo de chave ALLEN
- 1 jogo de chave de BOCA
- 1 alicate UNIVERSAL
- 1 alicate de Bico Meia Cana Reto
- 1 alicate de corte diagonal
- 1 alicate multi-uso para eletricitista
- 1 estilete Vonder corpo plástico
- Suporte fixo para serra copo 6,5M A4
- SERRA COPO AR STARR 22mm
- Lamina SERRA T TICO STARR
- Broca AR PARAL 338 1/4"
- SERRA COPO AR STARR 14mm
- Disco C F 4.1/2x3/64x7/8 WAL
- SERRA COPO AR STARR 25mm
- SERRA COPO AR STARR 33mm
- SUPORTE SERRA COPO STARR 32-152 A2

A.1.3 Projeto Elétrico

O projeto elétrico da planta de neutralização é composto por dois painéis elétricos, sendo o primeiro responsável pelo circuito de alimentação elétrica (painel de força) da planta de neutralização de pH e o segundo responsável pelos comandos/sinalizações locais da planta(painel de comando).

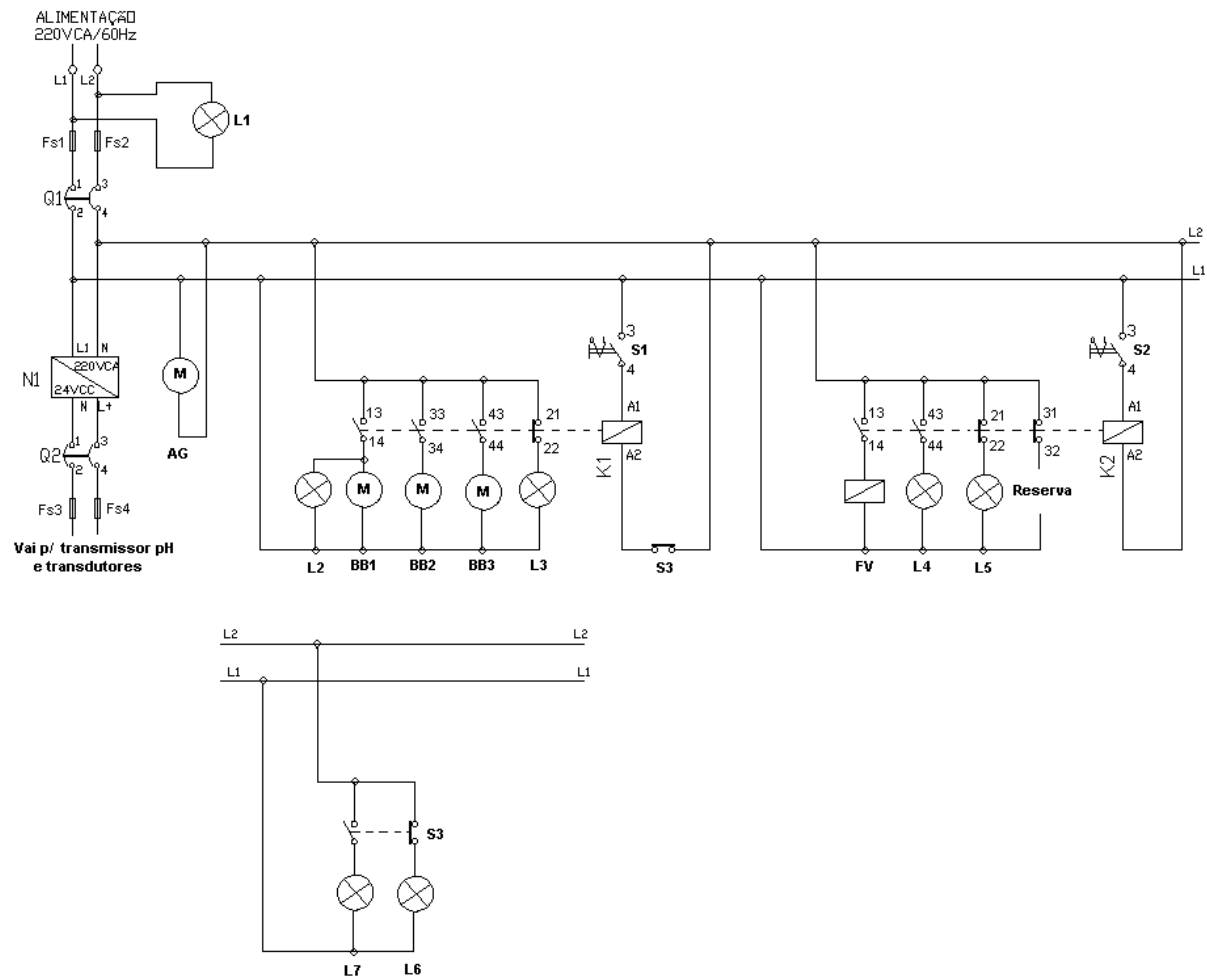


Figura A.2: Projeto elétrico da planta de neutralização de pH

A Figura (A.2) apresenta o projeto elétrico da planta de neutralização de pH, no qual tem-se:

- L_1 e L_2 - fases de alimentação CA da planta. Entrada de alimentação elétrica;
- Q1 - disjuntor de alimentação geral da planta;
- Q2 - disjuntor de alimentação de 24Vcc dos instrumentos de medição;
- F_{S1} , F_{S2} , F_{S3} , F_{S4} - fusíveis de proteção;

- N1 - fonte de alimentação de 24Vcc;
- AG - agitador magnético;
- BB₁, BB₂ e BB₃ - bombas de dosagem de ácido, tampão e base, respectivamente;
- L1 - sinaleiro para indicação de sistema energizado;
- L2 - sinaleiro para indicação de bombas energizadas;
- L3 - sinaleiro para indicação de bombas sem energização;
- L4 - sinaleiro para indicação de válvula saída coletor aberta;
- L5 - sinaleiro para indicação de válvula saída coletor fechada;
- L6 - sinaleiro para indicação de nível operacional no tanque coletor;
- L7 - sinaleiro para indicação de nível alto no tanque coletor;
- S1 - chave de seleção com duas posições para energização das bombas de dosagem;
- S2 - chave de seleção com duas posições para comando "Abrir" válvula solenóide;
- S3 - chave de nível com contato reversível instalada no tanque coletor;
- FV - válvula solenóide de saída do tanque coletor;
- K1 - contator responsável pelo circuito de energização das bombas de dosagem;
- K2 - contator responsável pelo intertravamento da válvula solenóide com o nível do tanque coletor.

A.1.4 Reagentes utilizados

Nesta seção são descritas as especificações dos reagentes em condição concentrada antes do preparo das soluções a serem usadas na planta de neutralização de pH.

A.1.4.1 HNO₃

- Peso molecular(PM)- 63,01
- Densidade (g/ml à 20°C) - 1,4
- Ensaio (*HNO₃*) - 65-68%
- Resíduos após ignição (max em %) - 0,0005
- Cloreto (max em %) - 0,00005
- Sulfato (max em %) - 0,0001
- Arsênio (max em %) - 0,000001
- Ferro (max em %) - 0,00002
- Metais pesados (max em %) - 0,00002

A.1.4.2 NaHCO₃

- Peso molecular(PM)- 84,01
- Ensaio (*NaHCO₃*) - 99,5%
- Materiais insolúveis - 0,015"
- Cloreto - 0,003"
- Fosfato - 0,001"
- Compostos sulfurados - 0,003"
- Amônia - 0,0005"
- Precipitado de *Ca*, *Mg* e *P₂O₃* - 0,02"
- Metais pesados - 0,0005"
- Ferro - 0,001"
- Potássio - 0,005"

A.1.4.3 NaOH

- Peso molecular(PM)- 40
- Ensaio (*NaOH*) - 99%
- Carbonato (max %) - 1
- *Cl* (max %) - 0,0005
- *PO₄* (max %) - 0,0005
- *SiO₂* (max %) - 0,002
- *SO₄* (max %) - 0,0005
- *N* (max %) - 0,0003
- *Pb* (max %) - 0,0005
- *Al* (max %) - 0,0005
- *As* (max %) - 0,0001
- *Ca* (max %) - 0,0005
- *Cu* (max %) - 0,0002
- *Fe* (max %) - 0,0005
- *K* (max %) - 0,05
- *Mg* (max %) - 0,0005
- *Ni* (max %) - 0,0005
- *Zn* (max %) - 0,001

A.2 Construção da planta

A.2.1 Especificações estruturais

A partir do *lay-out* apresentado nas Figuras (3.3) e (A.1), aliados aos interesses científicos e operacionais já citados em outras seções, chega-se a uma planta piloto que apresenta 4 níveis distintos para instalação de equipamentos A.3, especificados a seguir:

- Primeiro nível: local de instalação do tanque coletor. O tanque coletor tem a função de armazenar o efluente final do processo e apresenta as seguintes características; diâmetro de 500 mm, altura de 860 mm, capacidade para 140 litros e peso aproximado de 150Kg.
- Segundo nível: local de instalação dos tanques de reagentes. Os tanques responsáveis pelo armazenamento dos reagentes são três, com diâmetro de 410 mm, altura de 590 mm, capacidade para 60 litros e peso aproximado de 80Kg. O segundo nível apresenta um desnível de 260 mm em relação ao primeiro nível de forma a reduzir a altura de sucção das bombas de dosagem que são de 2 metros máximo.

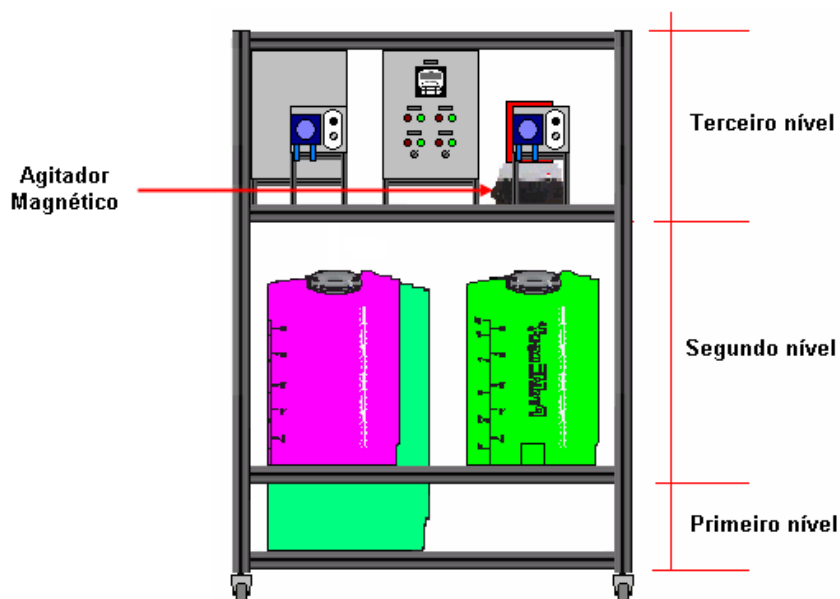


Figura A.3: Vista frontal da planta de neutralização de pH

- Terceiro nível: local de instalação do tanque reator, agitador magnético, bombas de dosagem, painéis de força e comando. O reator apresenta como características diâmetro de

150 mm, altura máxima de 280 mm e peso aproximado de 2 Kg. O agitador magnético é instalado sob o tanque reator A.3 e apresenta como características diâmetro de 240 mm e altura de 125mm. As bombas de dosagem (3 no total), cada uma delas apresenta as dimensões de L 180 mm - A 180 mm - P 170 mm e peso de 3,5Kg. Os painéis de comando e força são independentes, mas apresentam as mesmas dimensões A 400 mm - L 300 mm - P 250 mm e peso aproximado de 15Kg/painel. Cada bomba será instalada em um mini pedestal com fixação conforme Figura (A.6).

Cada tanque de reagente tem uma mangueira que passa por sua respectiva bomba peristáltica para dosagem no tanque reator. Cada bomba de dosagem esta instalada no terceiro nível na direção de seu respectivo tanque reagente (segundo nível). O tanque reator encontra-se interligado, via mangueira de silicone, ao tanque coletor, deste modo existem furos no tampo do terceiro nível para passagem da mangueira que interliga o reator (terceiro nível) ao tanque coletor (primeiro nível), bem como as mangueiras de sucção dos tanques reagentes (segundo nível) e sua respectiva bomba de dosagem (terceiro nível).

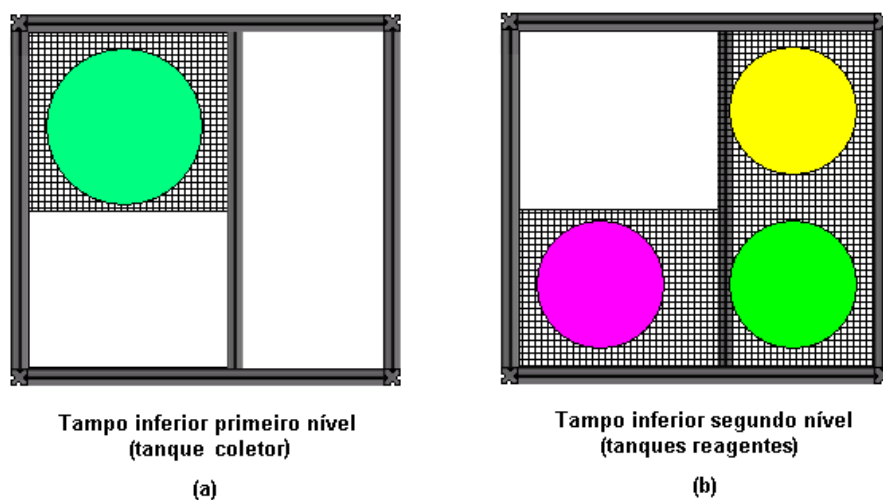


Figura A.4: (a) Vista superior do tampo inferior do primeiro nível (b) Vista superior do tampo inferior do segundo nível

A Figura (A.4) apresenta o *lay-out* do posicionamento do tanque coletor no primeiro nível e dos tanques reagentes no segundo nível.

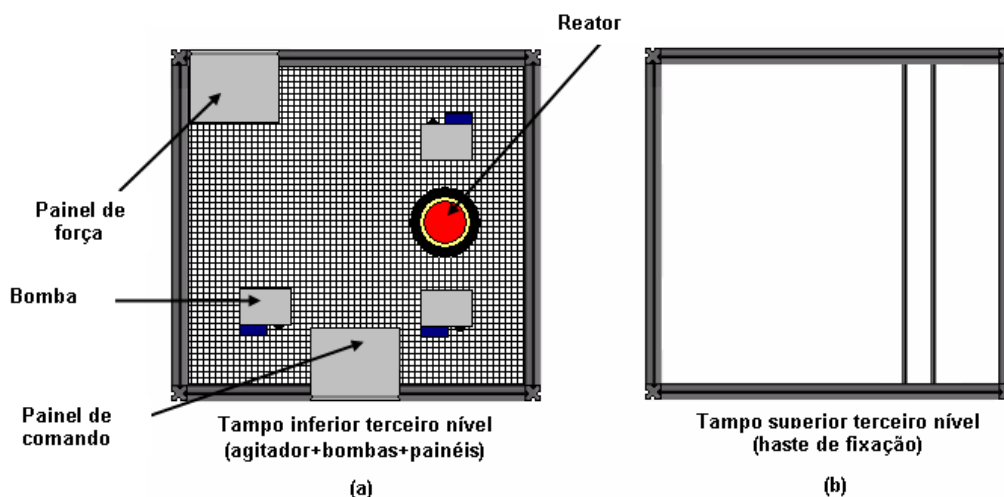


Figura A.5: (a)Vista superior do tampo inferior do terceiro nível (b) Vista superior do tampo superior do terceiro nível.

A Figura A.5(a) apresenta o *lay-out* do posicionamento do reator no terceiro nível, das bombas de dosagem e dos painéis de força e controle, enquanto a Figura A.5(b) apresenta o *lay-out* do posicionamento das hastes de fixação das mangueiras de dosagem e instrumentos de medição que são instalados no reator. Deve ser observado que o tampo superior do terceiro nível não apresenta fechamento, ou seja, existem duas hastes de perfil de alumínio 20x20mm no qual são instaladas mangueiras de dosagem e sonda de pH. As bombas de dosagem têm suas fixações na parte traseira das mesmas, deste modo perfis de alumínio 20x20mm são usados para fixá-las conforme Figura (A.6).

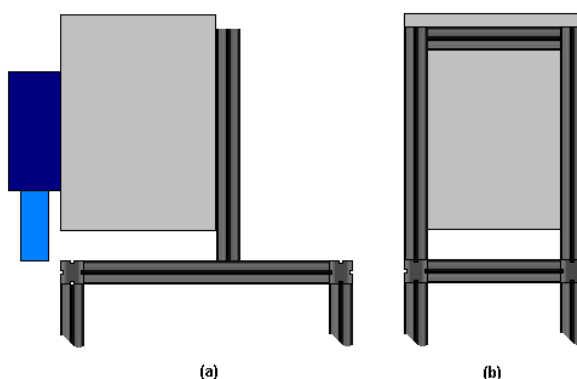


Figura A.6: (a)Vista lateral da fixação da bomba no perfil (b) Vista traseira da fixação da bomba.

A base da planta deve apresenta rodízios, sendo os frontais com freio e os traseiros livres. A estrutura desta planta não foi projetada para demonstrações itinerantes.

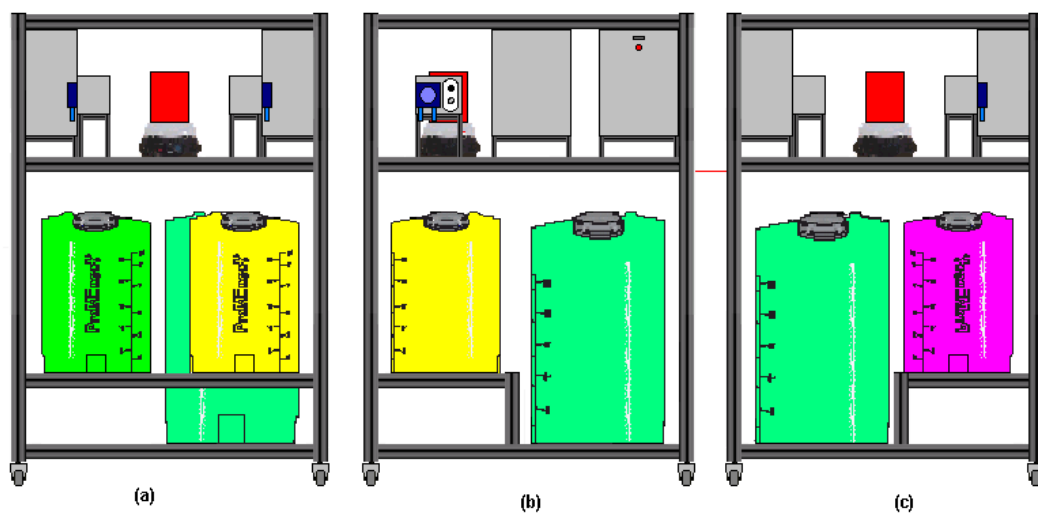


Figura A.7: (a) Vista lateral direita, (b) Vista traseira e (c) Vista lateral esquerda da planta de neutralização de pH.

A Figura A.8 apresenta a foto da planta piloto de pH construída, na qual pode-se visualizar o real posicionamento dos equipamentos.



Figura A.8: Foto da planta piloto de neutralização de pH construída neste trabalho.

Os tanques envolvidos neste processo poderão ser retirados da planta para abastecimento ou despejo dos reagentes/produtos.

A.3 Calibração de instrumentos

A.3.1 Calibração dos transdutores

A interface das placas de aquisição de dados com a planta de neutralização de pH ocorre por meio de 4 transdutores de sinal. Um dos transdutores está configurado para converter sinal de corrente em tensão elétrica (4 a 20mA para 0 a 10V) que é utilizado para enviar o sinal da sonda de pH para placa de aquisição de dados. Os outros três transdutores estão configurados para converter sinal de tensão em corrente elétrica (0 a 5V para 4 a 20mA) que são utilizados para enviar sinal da placa de aquisição de dados para as bombas de dosagem. Os instrumentos utilizados na calibração dos transdutores foram: uma fonte de tensão contínua variável Polimed[®] modelo PMI30035 (para gerar os sinais de tensão de 0 a 5V); um calibrador DRUCK modelo UPS-II (para gerar/medir sinais de corrente de 4 a 20mA) e um multímetro Minipa[®] modelo ET-2042A (para medir sinais de tensão). A calibração dos transdutores ocorre por meio de dois potenciômetros (*Zero* e *Span*). O potenciômetro de *zero* é utilizado para ajustar o início da escala de saída do transdutor, já o potenciômetro de *Span* é utilizado para ajustar o fundo de escala da saída do transdutor.

A.3.1.1 Procedimento de calibração do transdutor V-I

Fez-se a ligação da entrada do transdutor a uma fonte de tensão contínua variável e a saída ao calibrador por *loop* de corrente. Por meio do potenciômetro da fonte foram gerados os sinais de tensão, conforme Tabela (A.1), e ajustados os potenciômetros de *Zero* e *Span* até o sinal de saída condizer com os valores de referência.

A Tabela (A.1) apresenta a variação de tensão a cada 10% do fundo de escala do sinal de entrada do transdutor V-I e os valores de corrente referenciais a cada 10% da faixa de variação da saída.

A.3.1.2 Procedimento de calibração do transdutor I-V

Fez-se a ligação da entrada do transdutor a um calibrador por *loop* de corrente e a saída a um voltímetro. Por meio dos botões de comando do calibrador foram gerados os sinais de corrente, conforme Tabela (A.2), e ajustados os potenciômetros de *Zero* e *Span* até o sinal de

Tabela A.1: Tabela referencial de conversões tensão-corrente durante calibração

Item	Tensão (V)	Corrente (mA)
1	0,0	4,0
2	0,5	5,6
3	1,0	7,2
4	1,5	8,8
5	2,0	10,4
6	2,5	12,0
7	3,0	13,6
8	3,5	15,2
9	4,0	16,8
10	4,5	18,4
11	5,0	20,0

saída condizer com os valores de referência.

Tabela A.2: Tabela referencial de conversões corrente-tensão durante calibração

Item	Corrente (mA)	Tensão (V)
1	4,0	0,0
2	5,6	1,0
3	7,2	2,0
4	8,8	3,0
5	10,4	4,0
6	12,0	5,0
7	13,6	6,0
8	15,2	7,0
9	16,8	8,0
10	18,4	9,0
11	20,0	10,0

A Tabela (A.2) apresenta a variação de tensão a cada 10% do fundo de escala do sinal de entrada do transdutor I-V e os valores de corrente referenciais a cada 10% da faixa de variação da saída.

A.3.2 Calibração das bombas de dosagem

Como este processo não apresenta medidores de vazão na saída das bombas, necessita-se encontrar uma relação algébrica entre o sinal de referência a ser enviado e a vazão de saída das bombas. Com isso, fez-se necessário medir a real vazão das bombas para cada sinal de referência. Os sinais de referência para as bombas foram variados de 0 a 100% do seu fundo de escala (neste caso de 0 a 5V). Para coletar os dados usou-se o seguinte procedimento em cada sinal de referência às bombas:

1. Gerou-se o sinal de tensão de referência, via *software* LABVIEW[®] e aguardou-se 10 segundos para estabilização da vazão da bomba.
2. Após o tempo de estabilização inseriu-se a mangueira de saída da bomba de dosagem em um balão volumétrico de 250ml e, no mesmo instante, iniciou-se a cronometragem de tempo.
3. No instante em que o fluido atingiu a marca de 250ml no balão volumétrico, interrompeu-se a cronometragem e realizou-se o cálculo da vazão conforme a equação (A.1)

$$Q = \frac{250}{t} \quad (\text{A.1})$$

no qual t é o tempo cronometrado em segundos e 250 é o volume do balão volumétrico em mililitros(ml)

4. Armazenou-se o valor calculado na Tabela da bomba conforme sua realização.

Para as bombas B1 e B2 foram coletadas 3 amostras para cada patamar de tensão (ver Tabelas (A.3) e (A.4)), já para a bomba B3, o número de amostras foi superior(ver Tabela (A.5)), devido a necessidade de reduzir o erro de medição, pois a modelagem do processo é em função da vazão da mesma.

Tabela A.3: Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 01

	Amostras (ml/seg)			
Tensão(V)	A1	A2	A3	Média
0,63	0,85	0,85	0,83	0,84
1,12	1,30	1,29	1,27	1,28
1,61	1,70	1,70	1,70	1,70
2,09	2,07	2,07	2,08	2,07
2,58	2,47	2,48	2,48	2,48
3,06	2,87	2,88	2,88	2,88
3,55	3,26	3,26	3,28	3,27
4,03	3,70	3,73	3,72	3,72
4,52	4,16	4,15	4,12	4,14
5,00	4,44	4,44	4,50	4,460

A Tabela (A.3) apresenta as medições e os cálculos realizados para a bomba 01, bem como a média das amostras para cada valor de tensão de referência. A partir dos valores médios de vazão da bomba 01 foi feito um ajuste polinomial para encontrar a relação tensão e vazão (equação (A.2)).

$$V_{Q_1} = 0,0023.Q_1^2 + 1,1895.Q_1 - 0,3928 \quad (\text{A.2})$$

no qual V_{Q_1} é a tensão de referência e Q_1 é a vazão da bomba 01.

Tabela A.4: Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 02

	Amostras (ml/seg)			
Tensão(V)	A1	A2	A3	Média
0,49	0,0196	0,0210	0,0210	0,0205
0,99	0,0291	0,0283	0,0291	0,0288
1,49	0,0361	0,0372	0,0366	0,0366
2,00	0,0444	0,0455	0,0458	0,0452
2,50	0,0533	0,0531	0,0533	0,0532
3,00	0,0610	0,0620	0,0616	0,0615
3,50	0,0690	0,0710	0,0691	0,0697
3,99	0,0770	0,0783	0,0783	0,0779
4,50	0,0866	0,0890	0,0879	0,0878
5,00	0,0966	0,0966	0,0954	0,0962

A Tabela (A.4) apresenta as medições e os cálculos realizados para a bomba 02, bem como a média das amostras para cada valor de tensão de referência. A partir dos valores médios de vazão da bomba 02 foi feito um ajuste polinomial de forma a encontrar a relação tensão e vazão (equação (A.3)).

$$V_{Q_2} = -53,443.Q_2^2 + 66,022.Q_2 - 0,8581 \quad (\text{A.3})$$

no qual V_{Q_2} é a tensão de referência e Q_2 é a vazão da bomba 02.

Tabela A.5: Tabela de amostras de vazão para calibração da bomba 03

	Amostras (ml/seg)					
Tensão(V)	A1	A2	A3	A4	A5	Média
0,43	0,679348	0,679348	0,652742	0,750751	0,623441	0,677
0,63	0,862069	0,862069	0,811688	0,847458	0,859107	0,848
0,83	1,037344	1,033058	1,020408	1,063830	1,020408	1,035
1,11	1,295337	1,282051	1,282051	1,308901	1,336898	1,301
1,60	1,724138	1,712329	1,724138	1,724138	1,748252	1,727
2,08	2,155172	2,118644	2,118644	2,136752	2,136752	2,133
2,57	2,551020	2,551020	2,551020	2,551020	2,551020	2,551
3,05	2,976190	2,941176	2,976190	2,976190	2,976190	2,969
3,54	3,378378	3,378378	3,378378	3,378378	3,378378	3,378
4,02	3,787879	3,787879	3,787879	3,787879	3,787879	3,788
4,51	4,166667	4,237288	4,166667	4,166667	4,237288	4,195
5,00	4,310345	4,385965	4,385965	4,385965	4,310345	4,356

A Tabela (A.5) apresenta todas as realizações feitas com a bomba 03, bem como a média das amostras para cada valor de tensão de referência. A partir dos valores médios de vazão da bomba 03 foi feito um ajuste polinomial de forma a encontrar a relação tensão e vazão (equação (A.4)).

$$V_{Q_3} = 0,044214.Q_3^2 + 0,971547.Q_3 - 0,225447 \quad (\text{A.4})$$

no qual V_{Q_3} é a tensão de referência e Q_3 é a vazão da bomba 03.

As equações (A.2), (A.3) e (A.4) foram inseridas em sub-rotinas do aplicativo de supervisão da planta de neutralização de pH, no qual convertem os sinais de vazão calculados internamente em níveis de tensão.

A.3.3 Calibração do medidor de pH

Para calibração da sonda de pH são necessárias as soluções padrões nos pH's 4,00, 7,00 e 10, de acordo com a faixa de operação do processo. Para processos com soluções ácidas o pHmetro deve ser calibrado com as soluções padrões 4 e 7, para soluções alcalinas a calibração deve ser feita com as soluções padrões 7 e 10. Processos no qual as soluções podem variar de ácidas a alcalinas, ou vice-versa, a calibração deve ser realizada utilizando soluções padrões 4 e 10. Para o presente trabalho foi considerado o pH do processo variando entre 2 a 12, ou seja, foram utilizadas as soluções padrões 4 e 10. O procedimento para calibração foi:

1. A sonda de pH foi limpa utilizando água destilada e posteriormente a mesma foi enxuta.
2. 20mL de solução padrão com pH 4 foram adicionadas em um baquer e posteriormente inserida a sonda a esta solução.
3. Foi aguardado um tempo de estabilização de 30 segundos e posteriormente calibrada a sonda para este valor de pH.
4. Repetiu-se a etapa 1.
5. Em um segundo béquer foram adicionados 20ml de solução pH 10 e posteriormente inserida a sonda.
6. Repetiu-se a etapa 3.

Este procedimento de calibração é sugerido pelo fabricante da sonda de pH (FISCHER, 2005).

A.4 Preparo de reagentes

A.4.1 Preparo da solução de Hidróxido de sódio($NaOH$) 0,006 molar + Bicarbonato de sódio ($NaHCO_3$) 0,0001 molar

Em um béquer foram adicionados $NaOH$ (14,4 g), $NaHCO_3$ (0,50 g) e água destilada (1,0 L). A mistura foi agitada até completa dissolução dos sólidos. A seguir, a solução foi transferida para um balão volumétrico de 2,0 L e o volume completado com água destilada. A solução final foi então diluída no tanque TQ-02 até completar o volume para 60,0 L.

A.4.2 Preparo da solução de Ácido nítrico (HNO_3) 0,006 molar

Em um béquer contendo água destilada (1,0 L), foi acrescentado HNO_3 fumegante (15,3 mL) e a mistura foi agitada até completa homogeneização. A seguir, a solução foi transferida para um balão volumétrico de 2,0 L e o volume completado com água destilada. A solução final foi então diluída no tanque TQ-01 até completar o volume para 60,0 L.

A.4.3 Preparo da solução de Bicarbonato de sódio ($NaHCO_3$) 0,06 molar

Em um béquer foram adicionados $NaHCO_3$ (50,4 g) e água destilada (1,0 L). A mistura foi agitada até completa dissolução do sólido. A seguir, a solução foi transferida para um balão volumétrico de 2,0 L e o volume completado com água destilada. A solução final foi então diluída no tanque TQ-03 até completar o volume para 10,0 L.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)