CHRISTIAM SEGUNDO MORALES ALVARADO

Estudo e implementação de métodos de validação de modelos
matemáticos aplicados no desenvolvimento de sistemas de controle de
processos industriais

São Paulo

2017

CHRISTIAM SEGUNDO MORALES ALVARADO

Estudo e implementação de métodos de validação de modelos
matemáticos aplicados no desenvolvimento de sistemas de controle de
processos industriais

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para a obtenção do
título de Doutor em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Claudio Garcia

São Paulo

2017

CHRISTIAM SEGUNDO MORALES ALVARADO

Estudo e implementação de métodos de validação de modelos
matemáticos aplicados no desenvolvimento de sistemas de controle de
processos industriais

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para a obtenção do
título de Doutor em Ciências.

Área de Concentração:
Engenharia de Sistemas

Orientador:
Prof. Dr. Claudio Garcia

São Paulo
2017

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Alvarado, Christiam Segundo Morales

Estudo e implementação de métodos de validação de modelos matemáticos aplicados no desenvolvimento de sistemas de controle de processos industriais / C. S. M. Alvarado -- versão corr. -- São Paulo, 2017. 172 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle.

1. Identificação de Sistemas 2. Validação de modelos 3. Controle de pH 4. Controle preditivo 5. Lógica fuzzy I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia de Telecomunicações e Controle II. t.

Este trabalho é dedicado a minha esposa Priscilla com muitíssimo amor, gratidão, paciência e companhia em todo este tempo e, a minha mãe Vilma pelo imensurável carinho, amor e apoio.

Muito obrigado!

Porque todo o que é nascido de Deus vence o mundo; e esta é a vitória que vence o mundo, a nossa fé.

1 João 5:4

AGRADECIMENTOS

Ao Deus, por todas as bênçãos, as oportunidades, as ótimas pessoas no decorrer do tempo, os ensinamentos nesta vida e sobre todas as coisas, a aprender em confiar nele através da FE.

Ao professor, um grande amigo e orientador, Dr. Claudio Garcia. Muito obrigado professor pelas oportunidades que me brindou desde a minha chegada ao Brasil, pelos conselhos no profissional e pessoal e, sobretudo, sua amizade e confiança oferecida.

Às minhas avós Consuelo e Magdalena, meu pai Victor e meus irmãos Jair, e Ary pelo carinho e apoio.

À professora Cristina Borba, pela ajuda imensurável na correção e suporte de redação de meus trabalhos.

Aos meus professores, Dr. Jose Jaime da Cruz, Dr. Bruno Angélico, Dr. Henrique Takachi e Dr. Anselmo Bittar, pela sua amizade, ajuda e disposição.

Aos professores Dr. Alain Segundo Potts e Darci Odloak e ao Dr. Antônio Zanin, pela ajuda nas dúvidas que surgiram ao longo deste trabalho.

Aos meus caros amigos e colegas do Laboratório de Controle de Processos Industriais LCPI Andrés Velásquez, Bruno Silva, Fabian Larrotta, Fellipe Marques, Jorge Alvarado e Matheus Cammarosano, pela ajuda e amizade oferecida em todo momento.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro desse trabalho através de uma bolsa de doutorado.

RESUMO

A validação de modelos lineares é uma etapa importante em um projeto de Identificação de Sistemas, pois a escolha correta do modelo para representar a maior parte da dinâmica do processo, dentro de um número finito de técnicas de identificação e em torno de um ponto de operação, permite o sucesso no desenvolvimento de controladores preditivos e de controladores robustos. Por tal razão, o objetivo principal desta Tese é o desenvolvimento de um método de validação de modelos lineares, tendo como ferramentas de avaliação os métodos estatísticos, avaliações dinâmicas e análise da robustez do modelo. O componente principal do sistema de validação de modelos lineares proposto é o desenvolvimento de um sistema *fuzzy* para análise dos resultados obtidos pelas ferramentas utilizadas na etapa de validação. O projeto de Identificação de Sistemas é baseado em dados reais de operação de uma Planta-Piloto de Neutralização de pH, localizada no Laboratório de Controle de Processos Industriais da Escola Politécnica da USP. Para verificar o resultado da validação, todos os modelos são testados em um controlador preditivo do tipo QDMC (*Quadratic Dynamic Matrix Control*) para seguir uma trajetória de referência. Os critérios utilizados para avaliar o desempenho do controlador QDMC, para cada modelo utilizado, foram a velocidade de resposta do controlador e o índice da mínima variabilidade da variável de processo. Os resultados mostram que a confiabilidade do sistema de validação projetado para malhas com baixa e alta não-linearidade em um processo real, foram de 85,71% e 50%, respectivamente, com relação aos índices de desempenho obtidos pelo controlador QDMC.

Palavras-chave: Identificação de Sistemas, Validação de modelos matemáticos, Controle de pH, Controle preditivo multivariável, Lógica *fuzzy*, Controle robusto.

ABSTRACT

Linear model validation is the most important stage in System Identification Project because, the model correct selection to represent the most of process dynamic allows the success in the development of predictive and robust controllers, within identification technique finite number and around the operation point. For this reason, the development of linear model validation methods is the main objective in this Thesis, taking as a tools of assessing the statistical, dynamic and robustness methods. Fuzzy system is the main component of model linear validation system proposed to analyze the results obtained by the tools used in validation stage. System Identification project is performed through operation real data of a pH neutralization pilot plant, located at the Industrial Process Control Laboratory, IPCL, of the Escola Politécnica of the University of São Paulo, Brazil. In order to verify the validation results, all modes are used in QDMC type predictive controller, to follow a set point tracking. The criteria used to assess the QDMC controller performance were the speed response and the process variable minimum variance index, for each model used. The results show that the validation system reliability were 85.71% and 50% projected for low and high non-linearity in a real process, respectively, linking to the performance indexes obtained by the QDMC controller.

Keywords: System Identification, Mathematical model validation, pH control, Multivariable predictive control, Fuzzy logic, Robust control.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	– Visão geral do processo de validação de modelos matemáticos	8
Figura 2.2	– Gráficos dos valores preditos (y) pelos resíduos (R)	19
Figura 2.3	– Gráfico de digrama de caixas (Box Plot)	21
Figura 2.4	– (a) Sistema realimentado com incerteza aditiva no modelo, (b) Sistema realimentado com incerteza multiplicativa na entrada da planta, (c) Obtendo a função de transferência vista pela incerteza	39
Figura 2.5	– Diagrama de blocos do sistema de validação Fuzzy	41
Figura 2.6	– Diagrama de blocos de um sistema Fuzzy	42
Figura 2.7	– Função de pertinência da variável linguística “Métricas Estatísticas”	44
Figura 2.8	– Função de pertinência da variável linguística “Avaliação Dinâmica”	44
Figura 2.9	– Função de pertinência da variável linguística “Robustez do Modelo”	45
Figura 2.10	– Função de pertinência da variável linguística “Valor da Validação”	45
Figura 2.11	– Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Robustez do Modelo e Métricas Estatísticas	46
Figura 2.12	– Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Robustez do Modelo e Avaliação Dinâmica	46
Figura 2.13	– Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Métricas Estatísticas e Avaliação Dinâmica	47

Figura 2.14	– Diagrama de Blocos em Simulink do sistema de validação Fuzzy.	48
Figura 3.1	– P&ID da Planta-Piloto de neutralização de pH	51
Figura 3.2	– Resposta do Pré-teste das malhas de nível e pH	54
Figura 3.3	– Sinal GBN desenvolvido para a malha de nível (acima) e seu espectro de potência (abaixo)	57
Figura 3.4	– Sinal GBN desenvolvido para a malha de pH (acima) e seu espectro de potência (abaixo)	58
Figura 3.5	– Dados coletados das variáveis de saída de nível (acima) e variável manipulada (abaixo) aplicando os sinais GBN	59
Figura 3.6	– Dados coletados das variáveis de saída de pH (acima) e sinal de controle (abaixo) aplicando os sinais GBN	59
Figura 4.1	– Probabilidade cumulativa do erro normalizado dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	68
Figura 4.2	– Probabilidade cumulativa do erro normalizado para os modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	73
Figura 4.3	– Análise dos resíduos dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	78
Figura 4.4	– Boxplot do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	79
Figura 4.5	– Histograma com ajuste normal do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	81
Figura 4.6	– Diagrama Quantil – Quantil do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	83

Figura 4.7	–	Análise dos resíduos dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	85
Figura 4.8	–	Boxplot do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH .	86
Figura 4.9	–	Histograma com ajuste normal do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	88
Figura 4.10	–	Diagrama Quantil – Quantil do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	89
Figura 4.11	–	Resposta ao degrau dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível.	97
Figura 4.12	–	Resposta ao degrau dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	98
Figura 4.13	–	Ganho normalizado do erro no domínio da frequência gerados pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível	100
Figura 4.14	–	Ganho normalizado do erro no domínio da frequência gerados pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH	101
Figura 5.1	–	Estratégia de operação do MPC	107
Figura 5.2	–	Estrutura básica de um controlador MPC	108
Figura 5.3	–	Hierarquia das funções do sistema de controle em uma planta típica	109
Figura 5.4	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARX para as malhas de nível e pH	112
Figura 5.5	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARMAX para as malhas de nível e pH	113
Figura 5.6	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear OE para as malhas de nível e pH	113

Figura 5.7	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear BJ para as malhas de nível e pH	114
Figura 5.8	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ASYM-BJ para as malhas de nível e pH	114
Figura 5.9	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear MPEM para as malhas de nível e pH	115
Figura 5.10	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear EMPEM para as malhas de nível e pH	115
Figura 6.1	–	Sinal de Controle e sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$ de pH aplicado no processo de neutralização de pH	122
Figura 6.2	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARX para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	126
Figura 6.3	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARMAX para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	127
Figura 6.4	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear OE para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	127
Figura 6.5	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear BJ para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	128
Figura 6.6	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ASYM-BJ para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	128
Figura 6.7	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear MPEM para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	129

Figura 6.8	–	Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear EMPEM para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$	129
Figura 6.9	–	Sinal de Controle e sinal de excitação GBN de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico do processo de neutralização de pH	131
Figura 6.10	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ARX para a malha de pH	135
Figura 6.11	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ARMAX para a malha de pH	136
Figura 6.12	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear OE para a malha de pH	136
Figura 6.13	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear BJ para a malha de pH	137
Figura 6.14	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ASYM-BJ para a malha de pH	137
Figura 6.15	–	Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear MPEM para a malha de pH	138

LISTA DE QUADROS E TABELAS

Tabela 2.1	– Decisões da Hipótese Nula H_0	11
Tabela 3.1	– Parâmetros de sintonia dos controlador PID das malhas de nível e pH.	53
Tabela 3.2	– Estruturas de Modelos	61
Quadro 3.1	– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de nível . .	63
Quadro 3.2	– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH. . .	63
Quadro 3.3	– Modelos TISO para a malha de nível	64
Quadro 3.4	– Modelos TISO para a malha de pH	65
Quadro 4.1	– Resultados do teste não-paramétrico Kolgomorov-Smirnov para os modelos obtidos da malha de nível	67
Quadro 4.2	– Resultados do teste não-paramétrico Anderson-Darling para os modelos obtidos da malha de nível	69
Quadro 4.3	– Resultados do teste não-paramétrico Shapiro-Wilk para os modelos obtidos da malha de nível	70
Quadro 4.4	– Resultados do teste não-paramétrico Wilcoxon para os modelos obtidos da malha de nível	71
Quadro 4.5	– Resultados do teste não-paramétrico Kolgomorov-Smirnov para os modelos obtidos da malha de pH	71
Quadro 4.6	– Resultados do teste não-paramétrico Anderson-Darling para os modelos obtidos da malha de pH	74
Quadro 4.7	– Resultados do teste não-paramétrico Shapiro-Wilk para os modelos obtidos da malha de pH	75
Quadro 4.8	– Resultados do teste não-paramétrico Wilcoxon para os modelos obtidos da malha de pH	76

Quadro 4.9	– Métricas estatísticas geradas pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de nível	90
Quadro 4.10	– Coeficientes de Theil, Russell e Sprague e Geers gerados pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de nível	91
Quadro 4.11	– Métricas estatísticas geradas pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de pH	92
Quadro 4.12	– Coeficientes de Theil, Russell e Sprague e Geers gerados pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de pH	93
Quadro 4.13	– Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de nível . .	94
Quadro 4.14	– Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de pH	95
Quadro 4.15	– Índices baseado na integral do erro gerados pelos modelos identificados da malha de nível	97
Quadro 4.16	– Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de pH	98
Quadro 4.17	– Quantificação dos ganhos normalizados gerados pelos modelos obtidos para a malha de nível e pH	102
Quadro 4.18	– Quantificação das incertezas geral e do ganho dos modelos lineares obtidos para a malha de nível e pH	103
Quadro 4.19	– Resultado da validação do sistema fuzzy para os modelos obtidos das malhas de nível e pH	105
Quadro 5.1	– Parâmetros de sintonia e restrições do algoritmo QDMC	111

Quadro 5.2	– Índices de desempenho no teste em modo servo nas malhas de nível e pH	117
Quadro 5.3	– Índices de desempenho <i>ID</i> do teste em modo servo das malhas de nível e pH	118
Quadro 5.4	– Classificação dos modelos identificados das malhas de nível e pH na validação e no controlador preditivo	119
Quadro 6.1	– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH com excitação de ± 0.5 de pH	122
Quadro 6.2	– Modelos lineares TISO da malha de pH com excitação de ± 0.5 de pH	123
Quadro 6.3	– Validação dos modelos lineares para a malha de pH com excitação de ± 0.5 de pH aplicado na planta real.	125
Quadro 6.4	– Índices de desempenho <i>ID</i> do teste em modo servo da malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH	130
Quadro 6.5	– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH com excitação de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico	132
Quadro 6.6	– Modelos lineares da malha de pH com excitação de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico	132
Quadro 6.7	– Validação dos modelos lineares para a malha de pH com excitação de ± 0.5 de pH aplicado no modelo fenomenológico.	134
Quadro 6.8	– Índices de desempenho <i>ID</i> do teste em modo servo da malha de pH com excitação de ± 0.5 de pH aplicado no modelo fenomenológico	138

LISTA DE SIGLAS

AIC	Akaike Information Criterion
ARMAX	AutoRegressive Moving Average with eXogenous variable
ARX	AutoRegressive with eXogenous variable
ASYM	Método Assintótico
BIC	Bayesian Information Criterion
BJ	Box-Jenkins
CDF	Cumulative Distribution Function
CSTR	Continuous Stirred Tank Reactor
DI	Direct Identification
EF	Eficiência do Modelo
EMPEM	Enhanced Multistep Prediction Error Method
FPE	Final Prediction Error
GBN	Generalized Binary Noise
GIC	General Information Criterion
IAE	Integrated Absolute Error
i.i.d.	independent and identically distributed
IRQ	Faixa interquartil
ITAE	Integral of Time and Absolute Error
LCPI	Laboratório de Controle de Processos Industriais
MIMO	Multiple-Input Multiple-Output
MISO	Multiple Input – Single Output
MPC	Model Predictive Control
MPPEM	Multistep Prediction Error Method
MRI	MPC Relevant Identification
MSE	Mean Squared Error
OE	Output Error
P&ID	Piping and Instrumentation Diagram
PE	Potential Error
PEM	Prediction Error Method

PI	Performance Index
PWM	Pulse Width Modulation
QDMC	Quadratic Dynamic Matrix Control
QQ-plot	Grafico Quantil–Quantil
rme	relative magnitude error
RMS	Root Mean Square
RMSPE	Root Mean Square Percent Error
SISO	Single-Input Single-Output
TAP	Tanque de Ácido Primário
TAPI	Tanques de Ácido Intermediário Principal
TAS	Tanque de Ácido Secundário
TASI	Tanques de Ácido Intermediário Secundário
TBB	Tanque de Base para a Bomba
TIC	Theil Coefficient Inequality
TISO	Two-Input Single-Output
TR	Tanque do Reator
VI	Variability Index
ZOH	Zero-Order Hold

LISTA DE SÍMBOLOS

α, β	Pesos dos índices PI e t_r
$C_r, C_{S\&G}$	Erro global em função do erro relativo de magnitude e fase
d	Índice de concordância de Willmott
df	Grau de liberdade
D	Estatística de Kolgomorov-Smirnov
$e(i)$	Erro da diferença dos valores em um instante i
$F^*(x)$	Distribuição contínua hipotética da variável aleatória x
$F_0(\cdot)$	Tipo de distribuição assumida
$G_0(z), G(z)$	Planta nominal e real no tempo discreto
$\xi(n)$	Sequência de amostras residuais independentes e identicamente distribuídas
H_0, H_1	Hipótese nula e alternativa
I_k	Parte imaginaria do erro aplicando a transformada discreta de Fourier
$K(z)$	Controlador de um sistema realimentado no tempo discreto
M	Valores ordenados esperados da normal padrão
$M_A(z), M_M(z)$	Função de transferência vista pela incerteza aditiva e multiplicativa
M_{nk}	Ganho normalizado do erro aplicando a transformada discreta de Fourier
n, N	Quantidade de amostras de um vetor
$N(\mu_\xi, \sigma_\xi^2)$	Distribuição normal com media μ_ξ e variância σ_ξ^2
η_{Harris}	Índice de Harris
p_{sw}, p_{n-sw}	Probabilidade de chaveamento e não-chaveamento
$P_r, P_{S\&G}$	Fase do erro relativo
r	Coeficiente de correlação
R_k	Parte real do erro aplicando a transformada discreta de Fourier
T	Índice da estatística ANOVA

u_{max}, u_{min}	Valor máximo e mínimo no valor atual da entrada para o controlador QDMC
y_{max}, y_{min}	Valor máximo e mínimo no valor atual da saída para o controlador QDMC
μ_T	Média de um vetor de dados
μ_{R_k}, μ_{I_k}	Média da parte real e imaginária do erro
U^M	Proporção de desigualdade de erro devido ao bias
U^S	Proporção de desigualdade de erro devido à variância
U^C	Proporção s de desigualdade de erro devido à covariância
U	Coefficiente de Desigualdade de Theil
W	Estatística de Shapiro-Wilk
$\bar{x}$	Média dos dados observados
χ^2	Índice de ajuste Qui-quadrado
$\bar{y}, \hat{y}$	Média de um conjunto de dados reais e preditos
$\hat{y}(t)$	Valores preditos de um sistema
$y(t)$	Valores medidos de um sistema
Z	Estatística de Wilcoxon
$\Delta t_{(\cdot)}$	Período de amostragem de um sistema ($\cdot$)
$\Delta u_{max}, \Delta u_{min}$	Limite superior e inferior na variação da entrada para o controlador QDMC
Δ_A, Δ_M	Incerteza aditiva e multiplicativa
Ω_0	Frequência fundamental
$\sigma_{(\cdot)}$	Desvios padrão de ($\cdot$)
$\bar{\sigma}[\cdot]$	Valores singulares máximos
σ_{cap}	Capacidade do desvio padrão
σ_{fbc}	Desvio mínimo teórico
σ^2_T	Variância de um vetor de dados
$\sigma_{R_k}^2, \sigma_{I_k}^2$	Variância da parte real e imaginária do erro
$\tau_{(\cdot)}$	Constante de tempo de um sistema ($\cdot$)

$\theta_{(\cdot)}$	Tempo morto de um sistema $(\cdot)$
λ	Peso na Entrada
δ	Peso na Saída
$\ (\cdot)\ _{\infty}$	Norma- H_{∞} de $(\cdot)$

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 MOTIVAÇÃO.....	1
1.2 OBJETIVOS	4
1.3 CONTRIBUIÇÕES PROPOSTAS.....	5
1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO	6
2. VALIDAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS	7
2.1 VALIDAÇÃO APLICANDO TESTES ESTATÍSTICOS.....	9
2.1.2 Testes não-paramétricos	12
2.2 ANÁLISE VISUAL.....	18
2.2.1 Análise de Resíduos.....	19
2.2.2 Diagrama de caixas (<i>Boxplot</i>).....	20
2.2.3 Gráfico de Quantil-Quantil (<i>QQ-PLOT</i>).....	21
2.2.4 Histogramas com ajuste de distribuição	22
2.3 MÉTRICAS ESTATÍSTICAS PARA VALIDAÇÃO.....	22
2.3.1 Eficiência do Modelo (<i>EF</i>).....	23
2.3.2 Teste estatístico de Theil.....	24
2.3.3 Índice de concordância de Willmott	27
2.3.4 Métrica de Russell	28
2.3.5 Métrica de Sprague e Geers.....	29
2.3.6 Métrica ANOVA	30
2.4 CRITÉRIOS DE SELEÇÃO DE MODELOS	31
2.5 VALIDAÇÃO DA DINÂMICA DO MODELO	33
2.5.1 Resposta ao degrau	34

2.5.2	Análise residual no domínio da frequência	35
2.6	ANÁLISE DA ROBUSTEZ DE CONTROLADORES PREDITIVOS UTILIZANDO MODELOS IDENTIFICADOS.....	37
2.7	PROPOSTA DE UM SISTEMA DE VALIDAÇÃO FUZZY.....	41
3.	IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMAS APLICADA A UM PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH	49
3.1	PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH.....	50
3.2	IDENTIFICAÇÃO EM MALHA FECHADA	52
3.2.1	Sinais de Excitação	52
3.2.1.1	Sinal Degrau	53
3.2.1.2	Sinal GBN	54
3.3	IDENTIFICAÇÃO MULTIVARIÁVEL DO PROCESSO DE pH.....	60
4.	VALIDAÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS DO PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH	66
4.1	VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO TESTES NÃO- PARAMÉTRICOS.....	66
4.2	VALIDAÇÃO DE MODELOS REALIZANDO ANÁLISES VISUAIS.....	76
4.3	VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO MÉTRICAS ESTATÍSTICAS	90
4.4	VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO OS CRITÉRIOS DE SELEÇÃO DE MODELOS.....	94
4.5	VALIDAÇÃO DA DINÂMICA DOS MODELOS IDENTIFICADOS NO DOMÍNIO DO TEMPO E DA FREQUÊNCIA	96
4.6	VALIDAÇÃO DA ROBUSTEZ DO CONTROLADOR UTILIZANDO OS MODELOS IDENTIFICADOS.....	103

4.7	VALIDAÇÃO DE MODELOS LINEARES UTILIZANDO LÓGICA FUZZY	104
5.	CONTROLADOR PREDITIVO MULTIVARIÁVEL.....	107
5.1	IMPLEMENTAÇÃO DO CONTROLADOR MPC NA PLANTA-PILOTO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH	110
6.	VALIDAÇÃO DE MODELOS LINEARES APLICADAS ÀS MALHAS NÃO-LINEARES	121
6.1	INFLUÊNCIA DA NÃO-LINEARIDADE NO PROCESSO DE VALIDAÇÃO	121
6.2	INFLUÊNCIA DA REPETITIVIDADE NO PROCESSO DE VALIDAÇÃO	130
	CAPÍTULO 7	140
7.	CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS.....	140
7.1	CONCLUSÕES.....	140
7.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	142
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	143

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados os aspectos que levaram à pesquisa desenvolvida nesta tese, dentre os quais, a motivação, os objetivos propostos e as principais contribuições na área de Identificação de Sistemas (Seções 1.1, 1.2 e 1.3, respectivamente). Por último, na Seção 1.4 é apresentada a organização dos capítulos deste documento.

1.1 MOTIVAÇÃO

A modelagem de um sistema é uma das três principais áreas da investigação científica, sendo estas as ciências exatas, da saúde e filosóficas, incluindo a derivação teórica e experimentos físicos, tendo um papel importante no desenvolvimento científico. Na atualidade, as técnicas de modelagem são amplamente usadas em diversos campos como Aeronáutica, Sistemas de Potência, Processos Industriais e Bioengenharia, entre outros. A rigor, estas técnicas de modelagem têm a finalidade de analisar o comportamento dos sistemas em cada área e, para realizar estes estudos, requer-se uma estrutura matemática que permita representar os comportamentos estáticos e dinâmicos de cada sistema, sendo a modelagem matemática uma área das ciências aplicadas encarregadas deste estudo.

A modelagem matemática permite representar diferentes sistemas mediante um conjunto de equações, constituído por um número finito de variáveis e parâmetros. Esta área tem crescido progressivamente na engenharia nos últimos 60 anos, com o objetivo de estudar o comportamento de sistemas complexos, recriando o mesmo problema com suas características e comportamentos do sistema ante situações difíceis de observar na realidade (COR-JACQUES; SCHALK, 2012). Isto permite obter dados de simulações

próximos aos do sistema real, oferecendo uma grande vantagem na análise de um sistema, a fim de desenvolver um novo produto ou realizar testes de melhora contínua, os quais trazem como benefício a redução de custos de operação e tempo de testes.

Na área de controle de processos industriais, os modelos dinâmicos permitem realizar previsões e simulações. Estes modelos incorporam características essenciais e relevantes do processo, no domínio do tempo e da frequência. A finalidade desses modelos é desenvolver sistemas de controle que permitam otimizar os processos, utilizando a teoria matemática do controle ótimo. Por esta razão, a área de engenharia de controle evoluiu nos últimos 30 anos com o avanço dos sistemas computacionais, na busca de estratégias mais robustas e flexíveis nos sistemas de controle. Devido às exigências dos processos industriais e ao grau de complexidade, os sistemas de controle modernos tornam os processos de produção mais eficientes, reduzindo ao mínimo as perdas e sem sacrificar a qualidade do produto.

Controladores avançados atuais como os preditivos baseados em modelos (MPC, do Inglês *Model Predictive Control*), sistemas de controle robusto, adaptativos e redes neurais, entre outros, são baseados na modelagem dos sistemas dinâmicos, tanto de sua fenomenologia como as restrições de operação, permitindo descrever sua operação em qualquer instante do tempo. Estes modelos são utilizados como parte integrante do sistema de controle, assim como também para avaliar seu desempenho através de técnicas de simulação. Dependendo da complexidade do processo, os modelos de sistemas dinâmicos podem ser obtidos mediante leis físicas ou químicas, que descrevam sua dinâmica mediante equações diferenciais, sendo estes conhecidos como *modelos caixa branca*. Outra forma de obter sistemas dinâmicos é através da coleta de um conjunto de dados experimentais em certas condições de operação do processo. Estes modelos são conhecidos como *modelos caixa preta* e a área científica que abrange este tipo de modelagem é chamada *Identificação de Sistemas* (LJUNG, 1999).

A Identificação de Sistemas permite a construção de modelos adequados, que sirvam como base para realizar o projeto de sistemas de controle com um alto desempenho. O projeto de um sistema de controle é desenvolvido assumindo que o modelo identificado seja uma estrutura confiável e que reproduza com uma certa fidelidade o comportamento do processo real, no seu ponto de operação, a fim de atender aos requisitos de desempenho impostos pelo sistema a controlar.

Nos últimos anos, as técnicas de Identificação de Sistemas têm sido bem estabelecidas. Entre estas técnicas pode-se mencionar as mais utilizadas para a obtenção de modelos lineares: a identificação direta DI (do inglês *Direct Identification*), proposta em (LJUNG, 1999), baseada no teorema dos mínimos quadrados e erros de predição um passo à frente; o método assintótico ASYM, proposto em (ZHU, 2001), baseado na teoria assintótica proposta em (LJUNG, 1985) e os algoritmos MRI (do Inglês MPC *Relevant Identification*), que estimam os parâmetros do modelo, a fim de gerar predições confiáveis dentro de um amplo horizonte de predição, minimizando uma função objetivo múltiplos passos à frente (HUANG; WANG, 1999; POTTS et al., 2014). Apesar das múltiplas técnicas existentes na área de identificação, tem-se problemas no momento de quantificar a qualidade do modelo e, como consequência disto, torna-se difícil escolher o modelo mais adequado para o projeto do sistema de controle.

A validação de modelos matemáticos é uma fase importante do processo de modelagem e simulação, pois permite avaliar a qualidade de um modelo em função dos objetivos estabelecidos. O fundamento dos métodos de validação é comparar resultados de séries temporais de dados reais com as saídas simuladas dos modelos identificados, através de técnicas tais como visuais, estatísticas, análises no domínio da frequência e da robustez do modelo. A forma mais usual de validar um modelo é através da análise visual, mas, muitas vezes não é a melhor opção no momento de decidir qual modelo representa melhor o processo real, pois pode ser subjetiva e estar sujeita a erros (ABLAN et al., 2011). Por esta razão, são requeridos métodos e critérios estatísticos, que permitam comparar os resultados do processo real e dos modelos obtidos, mediante o uso de índices de desempenho.

Atualmente, na área de Identificação de Sistemas, o método mais utilizado para validar modelos matemáticos é mediante o cálculo de um parâmetro em função dos dados reais e simulados, conhecido como índice *FIT*. No entanto, este método é insuficiente, devido à falta de informação que fornece sobre porque deve-se invalidar o modelo testado, caso seja obtido um índice menor que o esperado. Apesar disto, existem outras ferramentas matemáticas para a análise e a comparação de um conjunto de dados, que fornecem fundamentos qualitativos e quantitativos para validar/invalidar modelos matemáticos (DEGROOT, 1986; SPRAGUE; GEERS, 2004; COR-JACQUES; SCHALK, 2012).

1.2 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo principal desenvolver uma ferramenta métrica que permita validar/invalidar modelos matemáticos gerados pela Identificação de Sistemas e, assim, realizar a escolha do modelo mais adequado, que represente o processo real em um ponto de operação, para em seguida desenvolver o sistema de controle aplicado a um processo industrial. Esta metodologia é aplicada em uma Planta-Piloto de Neutralização de pH, localizada no Laboratório de Controle de Processos Industriais, LCPI, da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, EPUSP.

O objetivo mencionado conduz aos seguintes objetivos específicos:

- Estudar os métodos de validação de modelos matemáticos aplicados na área de engenharia;
- Utilizar dois tipos de sinais de excitação ao processo de pH; um sinal degrau e um sinal GBN - *Generalized Binary Noise* (TULLEKEN, 1990);
- Realizar a identificação multivariável da Planta-Piloto de neutralização de pH, baseada nas técnicas de identificação DI, ASYM e MRI;

- Desenvolver um sistema *fuzzy* para a avaliação e validação de modelos lineares identificados, a serem utilizados em sistemas de controle multivariáveis.
- Implementar um controlador preditivo multivariável do tipo QDMC no processo de pH com os modelos identificados e comparar seu desempenho em função dos resultados do processo de validação.

1.3 CONTRIBUIÇÕES PROPOSTAS

A principal contribuição deste trabalho é o desenvolvimento de uma metodologia para validar modelos lineares identificados, utilizando lógica *fuzzy*. Isto permitirá quantificar a qualidade dos modelos matemáticos, produto das distintas técnicas de Identificação de Sistemas, utilizadas em sistemas de controle avançado.

Outras contribuições do presente trabalho são mencionadas a seguir:

- A extensa revisão bibliográfica realizada neste trabalho, que permite verificar a qualidade de um modelo desde distintos aspectos da engenharia como estatísticos (testes estatísticos, gráficos e métricas), dinâmicos (no domínio do tempo e da frequência) e análise da robustez do modelo utilizado em um controlador preditivo multivariável.
- O método de validação de modelos, utilizando a abordagem dependente da frequência, proposto em (BALAGUER;VILANOVA, 2009), é aplicado utilizando dois graus de liberdade. No presente trabalho, considera-se a quantidade de graus de liberdade, o número de parâmetros dos modelos identificados. Também é desenvolvida uma métrica para quantificar o erro gerado pelo ganho normalizado e a distribuição χ^2 .

1.4 ESTRUTURA DO TRABALHO

No Capítulo 2 são abordadas técnicas de validação de modelos matemáticos, tais como os métodos estatísticos não-paramétricos, métodos de validação visual, teorias de validação utilizando métricas estatísticas, resposta em frequência e análise da robustez do modelo. Em seguida, é desenvolvida uma estrutura de validação, utilizando lógica *fuzzy* junto com as regras de inferência.

No Capítulo 3 é descrito brevemente o processo de neutralização de pH do Laboratório de Controle de Processos Industriais, LCPI. Em seguida, são aplicados os dois tipos de sinais de excitação (degrau e GBN) para realizar a identificação do processo de pH em malha fechada, a fim de obter modelos matemáticos do processo. Os modelos são obtidos aplicando-se os métodos de identificação direta (DI), o método assintótico (ASYM) e os algoritmos MRI.

A validação dos modelos matemáticos obtidos no procedimento de identificação é realizada no Capítulo 4. Este procedimento consiste em aplicar os métodos propostos no Capítulo 2 e, como resultado de cada teste de validação, gerar uma métrica que permita quantificar cada modelo testado, utilizando o sistema de validação *fuzzy*.

No Capítulo 5, com os modelos identificados do Capítulo 3, é projetado um controlador preditivo do tipo QDMC, a fim de corroborar o sistema de validação proposto no Capítulo 2.

No Capítulo 6, devido aos primeiros resultados da validação *fuzzy* para malhas com alta não-linearidade, são propostas duas hipóteses e verificadas a fim de dar maior credibilidade ao sistema desenvolvido para validar modelos lineares.

Finalmente, no Capítulo 7 são resumidas as conclusões da presente tese assim como também são citadas algumas propostas de trabalho, a fim de dar continuidade ao presente tema de pesquisa.

CAPÍTULO 2

2. VALIDAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS

A validação de um modelo matemático é definida como sua comprovação, dentro de seu domínio de aplicabilidade e para uma faixa satisfatória de precisão, coerente com o sistema real e sua aplicação prevista. O desenvolvimento da modelagem matemática de um processo deve ter um propósito específico e sua validade é determinada em concordância com tal propósito (SARGENT, 1987).

Em geral, a validação absoluta não existe, mas existem técnicas particulares que foram estabelecidas para validar os modelos de forma quantitativa, com um propósito específico e dentro de uma faixa de valores. O modelo desenvolvido é considerado válido se sua precisão estiver dentro da faixa de valores aceitáveis requerida para o propósito previsto.

O conjunto de testes que permite determinar se o modelo obtido é válido ou não é mencionado a seguir:

- Os testes estatísticos permitem validar modelos matemáticos mediante a análise de um conjunto de dados gerados pelo modelo e os dados reais do processo. O uso destes testes permite estabelecer um nível de confiabilidade que se requer, para que o modelo seja aceitável na aplicação prevista.
- As comparações visuais possibilitam uma forma intuitiva de verificar se as saídas preditas pelo modelo acompanham o sistema real. Para isto, é necessário um conjunto de dados empíricos, que deve ser independente dos dados usados na construção do modelo (validação cruzada).
- A análise espectral permite avaliar o nível de confiabilidade do modelo através da resposta em frequência em uma determinada faixa de frequências.

Um procedimento sistemático para a validação de modelos matemáticos foi desenvolvido baseado nos trabalhos de (SARGENT, 1987; COR-JACQUES; SCHALK, 2012), conforme é mostrado no fluxograma da Figura 2.1, mostrando semelhança com o procedimento de identificação de sistemas em caixa preta proposto em (SÖDERSTROM; STOICA, 1989; LJUNG, 1999).

Figura 2.1 – Visão geral do processo de validação de modelos matemáticos

Fonte: (COR-JACQUES; SCHALK, 2012)

De acordo com o fluxograma da Figura 2.1, os elementos do processo de validação mais importantes são:

- Etapa de experimento: Compreende a geração do sinal de excitação assim como a faixa de operação onde será estabelecido o modelo.
- Dados experimentais: Entradas e saídas do processo real, coletados a uma taxa de amostragem estabelecida.
- Entradas do modelo: Neste elemento são ingressados os dados experimentais, as ordens e o tipo de algoritmo a empregar para a obtenção da estrutura matemática do modelo.
- Modelo conceitual: É uma representação matemática/verbal/lógica do problema a desenvolver, ilustrando os conceitos importantes do domínio do problema, suas associações e atributos.

Além das definições, são mostradas duas etapas de validação. A primeira compreende a validação mediante testes estatísticos, a fim de obter um grau de confiabilidade do modelo dentro da região de aplicação; a segunda etapa compreende uma validação subjetiva, que consiste em realizar comparações gráficas entre os dados reais e preditos, assim como acertar a faixa de frequências em que o modelo é validado¹.

2.1 VALIDAÇÃO APLICANDO TESTES ESTATÍSTICOS

Os testes estatísticos são instrumentos para validar ou rejeitar as hipóteses de modelagem de um sistema real. Eles tentam distinguir o que é plausível do que é pouco verossímil em um modelo dado. A finalidade destes testes é determinar seu grau de certeza (ou confiabilidade) e o significado do resultado obtido.

Este tipo de validação é aplicado em casos em que seja possível obter dados experimentais para serem comparados com os dados simulados do modelo

¹ Baird et al. (1980) mencionam que os dados empíricos (dados do sistema real) usados para realizar a comparação (ou validação) com os dados de saída do modelo (dados simulados) devem ser independentes dos dados empregados para a construção do modelo; de outra forma só é possível realizar a verificação da simulação.

construído. A comparação é realizada mediante uma excitação na entrada tanto do sistema real como do modelo; os dados de saída real e simulada são comparados, a fim de determinar se existe uma representação adequada do sistema real.

Segundo (DEGROOT, 1986; RODRIGUES, 2010), os testes estatísticos podem ser divididos em dois grupos, os quais são mencionados a seguir:

- Testes paramétricos são aqueles que utilizam os parâmetros da distribuição ou uma estimativa destes (como por exemplo, a média e a variância), para o cálculo de sua estatística. Normalmente, estes testes são mais rigorosos e possuem mais pressuposições para sua validação. Os testes paramétricos incluem o requisito de que a variável em análise tenha distribuição de probabilidade conhecida, como a normal ou qualquer outra.
- Testes não-paramétricos não exigem suposições quanto à distribuição da variável, assim como também não estão condicionados por qualquer distribuição de probabilidades e não dependem de parâmetros estatísticos como a média e a variância dos dados observados na análise.

Para aplicar estes testes, deve-se verificar certas hipóteses no âmbito probabilístico. A ideia é que estas hipóteses possam ser aceitas ou rejeitadas, aplicando algum teste estatístico. A veracidade de uma hipótese, segundo o método científico, não pode ser demonstrada; mas sua falsidade sim (a hipótese que foi proposta é válida sempre e quando não seja demonstrado que é falsa). Para isto, é necessário formular as seguintes hipóteses:

- A hipótese nula (H_0), aquela que se assume inicialmente como verdadeira, até que uma prova estatística indique o contrário. Os dados devem comprovar se ela deve ser rejeitada ou não existem argumentos suficientes para ela ser rejeitada. Isto indica que é uma hipótese conservadora.

- A hipótese alternativa (H_1), aquela que tem valor probatório; a informação dos dados permite rejeitar claramente a hipótese nula. Frequentemente, essa hipótese pode ser expressa de forma simples: “ H_0 não é verdadeira”.

Mas, qualquer decisão que seja tomada implica na possibilidade de se cometer, basicamente, dois tipos de erros. Estes erros são denominados do Tipo I e Tipo II. O erro do Tipo I ocorre se a hipótese nula H_0 for rejeitada quando de fato é verdadeira e não deveria ser rejeitada; o erro do Tipo II ocorre se a hipótese nula H_0 for aceita quando de fato é falsa e não deveria ser aceita.

A relação entre os erros do Tipo I e II e as hipóteses nula e alternativa é mostrada na Tabela 2.1.

Tabela 2.1 – Decisões da Hipótese Nula H_0

Decisão	Realidade	
	H_0 é verdadeira	H_0 é falsa
Rejeitar H_0	α	$1 - \beta$
Aceitar H_0	$1 - \alpha$	β

Segundo a Tabela 2.1, o parâmetro α é denominado nível de significância do teste e o resultado de $1 - \alpha$ é a probabilidade de ser aceita a hipótese nula H_0 como verdadeira quando é falsa; o parâmetro β é denominado *característica da operação* e $1 - \beta$ é a probabilidade de rejeitar a hipótese nula quando é falsa. Este último valor também é conhecido como potência do teste. A definição formal dos erros de probabilidade α e β é mostrada na Equação (2.1).

$$\begin{aligned}\alpha &= P(\text{erro tipo I}) = P(\text{rejeitar } H_0 | H_0 \text{ é verdadeira}) \\ \beta &= P(\text{erro tipo II}) = P(\text{não rejeitar } H_0 | H_0 \text{ é falsa})\end{aligned}\tag{2.1}$$

Um teste ideal seria obter erros de probabilidade nulos, mas devido a incertezas dos dados, erros na coleta, *outliers*, etc, não é possível atingir o caso ideal.

O erro de probabilidade α é considerado um valor arbitrário, definido pelo usuário, que usualmente toma valores de 5%, 1% ou 0,1% (DEGROOT, 1986), sendo o mais utilizado 5%. Por outra parte, na maioria dos casos, o erro de probabilidade do erro tipo II (β) não pode ser calculado, porque a hipótese alternativa é uma consequência do erro tipo I e, usualmente, especifica um conjunto de valores para a probabilidade do teste predefinido, $p(\theta)^2$. Se for escolhido um α muito pequeno, o risco de rejeitar a hipótese nula é desprezível e, como consequência, aumenta a possibilidade de se obter um erro tipo II; por isto, a relação entre α e β é inversamente proporcional.

Com as hipóteses e o valor de significância definidos, uma forma de avaliar um determinado teste estatístico é calculando o valor p (p -value) utilizando os dados observados. Este valor é utilizado para atingir uma conclusão de aceitação ou rejeição da hipótese nula.

O p -value (algumas vezes chamado nível de significância observada) é uma medida estatística tradicional, mas controversa, pois descreve a inconsistência entre o valor da hipótese de uma população e o valor obtido de um conjunto de amostras observadas da população. Tecnicamente, este valor representa a probabilidade de observar um resultado como rejeitável. Por exemplo, um p -value maior ou igual a 0,05 significa que H_0 é verdadeira. Se o p -value for menor que o nível de significância α , a hipótese nula H_0 será rejeitada.

Neste trabalho, devido à não repetitividade e as características não lineares do processo, opta-se por utilizar os testes não paramétricos, pois parâmetros como a média e a variância do processo são desconhecidos.

2.1.2 Testes não-paramétricos

Os testes não-paramétricos não exigem suposições quanto à distribuição da variável, assim como também não estão condicionados por qualquer

² Neste trabalho, $p(\theta)$ é um valor imposto inicialmente no teste de hipóteses. Por exemplo, a probabilidade de que os dados reais e simulados sejam próximos é de 95%. Isto quer dizer $p(\theta) = 0,95$ e $\theta = \{\text{Dados reais e simulados sejam próximos}\}$.

distribuição de probabilidades e não dependem de parâmetros estatísticos, como a média e a variância dos dados observados na análise.

A aplicação dessas técnicas é independente da distribuição, quando muito, são por vezes exigidas algumas hipóteses como a de simetria ou a de continuidade da distribuição. Uma atribuição dos testes não-paramétricos é que os dados utilizados para realizar os cálculos de sua estatística são ordenados de forma crescente.

Os métodos não-paramétricos permitem testar a hipótese nula em que uma variável ou conjunto de variáveis observadas não se relacionam com outra variável ou conjunto de variáveis. A seguir, são descritos os principais métodos estatísticos não-paramétricos.

2.1.2.1 Teste de Kolgomorov-Smirnov (K-S)

O teste de Kolgomorov-Smirnov é considerado um teste não-paramétrico, porque a distribuição desconhecida das amostras aleatórias pode ser uma distribuição contínua qualquer (Exponencial, Normal, Gama, F, entre outras).

Este teste é utilizado para decidir se um conjunto de amostras provém de uma distribuição contínua hipotética $F^*(x)$. O teste se baseia em uma função de distribuição cumulativa empírica, CDF (do Inglês *Cumulative Distribution Function*). Assuma que se tenham as variáveis aleatórias $x_1, x_2, \dots, x_n$, a partir de uma distribuição hipotética com CDF $F^*(x)$; o CDF empírico é denotado pela Equação (2.2).

$$F_n(x) = \frac{1}{n} \cdot [\text{Número de observações} \leq x] \quad (2.2)$$

Para cada número x ($-\infty < x < \infty$), o valor do $F_n(x)$ é definido como a proporção da quantidade de valores observados na amostra total que sejam menores ou iguais a x . Definido o CDF empírico, a estatística de Kolgomorov-Smirnov, D , é tomada mediante o valor absoluto da maior diferença vertical entre o CDF empírico e teórico, tal como é mostrado na Equação (2.3).

$$D = \max_{1 \leq i \leq n} |F^*(x_i) - F_n(x), F_n(x) - F^*(x_i)|$$

$$D = \max_{1 \leq i \leq n} \left| F^*(x_i) - \frac{i-1}{n}, \frac{i}{n} - F^*(x_i) \right| \quad (2.3)$$

Com o valor obtido D e um valor de significância α (podendo assumir valores de 0,01, 0,05, etc), deve-se comprovar se a função de distribuição hipotética assumida e a distribuição empírica são próximas. Para isto, um teste de hipótese é aplicado a seguir:

- H_0 : Os dados observados seguem uma função de distribuição contínua $F^*(x)$.
- H_1 : Os dados observados não seguem uma função de distribuição contínua $F^*(x)$.

A hipótese nula, H_0 , é rejeitada a um nível de significância se o valor estatístico obtido for maior que o valor crítico obtido a partir de uma tabela ou uma equação. Isto depende da quantidade de amostras n que são utilizadas (por exemplo, para valores de $n > 10$ utiliza-se um $D_{critico, \alpha=0,05} = \frac{1,36}{\sqrt{n}}$ ou $D_{critico, \alpha=0,2} = \frac{1,07}{\sqrt{n}}$).

2.1.2.2 Teste de Anderson-Darling (A-D)

O teste de Anderson-Darling é uma versão modificada do teste de K-S; utiliza uma distribuição específica para calcular os valores críticos. Diferentemente do teste K-S, que utiliza uma distribuição livre, o teste A-D melhora a sensibilidade do teste K-S mediante a ponderação das caudas. A estatística do teste A-D é descrita através da Equação (2.4).

$$AD = -n - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (2i-1) [\ln F_0(x_i) + (1 - \ln F_0(x_{n-i+1}))] \quad (2.4)$$

Segundo a Equação (2.4), $F_0(\cdot)$ é um tipo de distribuição assumida e x_i é o valor da amostra. Dada a estatística de A-D, formula-se a hipótese nula a rejeitar:

- H_0 : Os dados observados seguem uma função de distribuição específica F_0 .
- H_1 : Os dados observados não seguem uma função de distribuição específica F_0 .

A hipótese nula é rejeitada se o valor da estatística de A-D for maior que o valor crítico, formulado pela Equação (2.5), caso contrário a hipótese é aceita.

$$AD > CV = 0,01265 + \frac{0,1757}{n} \quad (2.5)$$

2.1.2.3 Teste de Shapiro-Wilk (S-W)

O teste de Shapiro-Wilk é baseado em uma correlação das amostras estatísticas ordenadas $x_1, x_2, \dots, x_n$, onde se assume que seguem uma distribuição normal. A estatística de S-W é definida pela Equação (2.6).

$$W = \frac{\sum_{i=1}^n a_i x_i^2}{\sum_{i=1}^n x_i - \bar{x}} \quad (2.6)$$

De acordo com a Equação (2.6), $\bar{x}$ é a média dos dados observados e a_i são constantes geradas pela média, pela variância e pela covariância dos dados amostrados. Os valores de a_i são definidos como as componentes do seguinte vetor:

$$a = M'V^{-1}((M'V^{-1})(V^{-1}M))^{-1/2} \quad (2.7)$$

sendo M os valores ordenados esperados da normal padrão para uma amostra de dimensão n e V corresponde à matriz de covariância. Definida a estatística W , as hipóteses nula e alternativa são formuladas a seguir:

- H_0 : Os dados observados seguem uma função de distribuição Normal.
- H_1 : Os dados observados não seguem uma função de distribuição Normal.

A hipótese nula é rejeitada se o valor de W calculado for menor que $W_{critico}$, podendo este valor ser consultado na Tabela A.5 de (SHESKIN, 2004). O valor de W é limitado entre 0 e 1 e espera-se que, para aceitar fortemente a hipótese nula, a estatística W convirja a 1. Em caso de se obter um valor de W significativamente pequeno, é aceita a hipótese alternativa.

2.1.2.4 Teste de Wilcoxon

O teste de Wilcoxon (em Inglês, *Wilcoxon signed-ranks test*) é um método não-paramétrico, proposto em (WILCOXON, 1945), utilizado para comparar duas amostras pareadas através de cálculos numéricos da diferença entre cada par, gerando assim três condições possíveis: aumento (+), diminuição (−) ou igualdade (=). Estas diferenças calculadas entre os valores obtidos para cada par de dados são ordenadas pelo seu valor absoluto, substituindo os valores originais pelo posto que ocupam na escala ordenada.

Este teste não-paramétrico para dados pareados é considerado um dos mais robustos e populares pois, ao invés de considerar apenas o sinal das diferenças entre os pares, considera o valor dessas diferenças, dando assim um peso maior às diferenças grandes entre cada par de observações.

O teste estatístico de Wilcoxon, para uma quantidade de grande amostras, pode ser aproximado a uma distribuição normal com parâmetros de média μ_T e variância σ^2_T , tal como é mostrado nas Equações (2.8) e (2.9), respectivamente.

$$\mu_T = \frac{n(n+1)}{4} \quad (2.8)$$

$$\sigma^2_T = \frac{n(n+1)(2n+1)}{24} \quad (2.9)$$

O parâmetro n representa a quantidade de dados do vetor de amostras diferentes de zero e o prefixo T representa o menor número de T_+ e T_- ³. Finalmente, a estatística de Wilcoxon Z é calculada através da Equação (2.10).

$$Z = \frac{T - \mu_{T_+}}{\sigma_{T_+}} \quad (2.10)$$

Definida a estatística de Wilcoxon, as hipóteses nula e alternativa são formuladas a seguir:

- H_0 : O valor absoluto da diferença entre duas amostras é simétrico em torno de zero.
- H_1 : O valor absoluto da diferença entre duas amostras não é simétrico em torno de zero.

Finalmente, para avaliar as hipóteses propostas, a estatística de Wilcoxon Z é comparada com o valor crítico, a um nível de significância α , utilizando a tabela A1 de (SHESKIN, 2004). Se a estatística de Wilcoxon for maior que o valor crítico de Z_α , a hipótese nula é rejeitada.

2.1.2.5 Teste de qualidade de ajuste Qui-quadrado

O teste de qualidade de ajuste Qui-quadrado, denotado pela letra grega χ^2 , foi proposto em (PEARSON, 1900). Este método, com índice estatístico mostrado na Equação (2.11), é uma quantidade medida que permite avaliar a hipótese sobre a existência ou não de diferenças significativas entre um conjunto de dados observados O e esperados E , cada um deles com dimensão n , quando não é possível fazer uma análise de variância dos dados (variância real do sistema é desconhecida).

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i} \quad (2.11)$$

³ T_+ e T_- representam a soma dos postos positivos e negativos da diferença das observações, respectivamente.

Os valores de χ^2 obtidos pela Equação (2.11), apresentam uma distribuição aproximadamente qui-quadrado com grau de liberdade df^4 .

$$df = k - 1 \quad (2.12)$$

Definida a estatística χ^2 , as hipóteses nula e alternativa são formuladas a seguir:

- H_0 : Os vetores observados e esperados não apresentam discrepâncias.
- H_1 : Os vetores observados e esperados apresentam discrepâncias.

Se escolhe a hipótese H_0 em caso de não haver discrepâncias entre os valores observados e esperados, em função de um valor crítico para um nível de significância α , segundo a Tabela A4 de (SHESKIN, 2004), tal como é mostrado na Equação (2.13).

$$\chi_{crítico}^2 \geq \chi^2 \rightarrow \text{Aceita-se } H_0 \quad (2.13)$$

2.2 ANÁLISE VISUAL

No contexto de simulação, a análise visual é uma técnica heurística, utilizando o sentido comum, que permite avaliar alguns fenômenos aleatórios de especial interesse, que não foram considerados em uma análise paramétrica (GUASCH et al, 2002).

As técnicas heurísticas apresentadas a seguir têm como objetivo ajudar a avaliar qualitativamente a qualidade do ajuste. Um gráfico pode traduzir um conjunto de números em uma imagem, a qual está ligada à capacidade humana de reconhecer padrões visuais. A primeira possibilidade é o comportamento direto entre o histograma da amostra e a função de densidade de probabilidade candidata.

⁴ Segundo (KVM; VIDA KOVIC, 2007), o grau de liberdade se refere ao cálculo de parâmetros em uma determinada função.

2.2.1 Análise de Resíduos

A análise de resíduos⁵ é realizada usando o gráfico “resíduo” x “valor predito”, o qual permite diagnosticar a condição dos erros serem independentes e identicamente distribuídos, tal como é mostrado na Figura 2.2.

Figura 2.2 – Gráficos dos valores preditos ($\hat{y}$) pelos resíduos (R)

Fonte: (PANOSSO; MALHEIROS, 2015)

Conforme foi ilustrado, a análise do resíduo, que está em função dos dados reais e preditos pelo modelo, consiste em observar a distribuição dos pontos, a fim de serem independentes e identicamente distribuídos, i.i.d. (do Inglês *independent*

⁵ O resíduo, conhecido também como residual ou erro, é gerado pela diferença entre os valores dos dados reais e preditos.

and identically distributed). Segundo a Figura 2.2, as avaliações de cada distribuição do resíduo são realizadas a seguir:

- O gráfico (a) satisfaz as exigências do modelo, ou seja, os erros apresentam distribuição independente;
- O gráfico (b) mostra a presença de *outliers*⁶;
- O gráfico (c) mostra que variâncias aumentam conforme as predições $\hat{y}$ aumentam;
- O gráfico (d) mostra que as variâncias diminuem conforme as predições $\hat{y}$ aumentam;
- O gráfico (e) mostra uma variância maior para valores preditos $\hat{y}$ próximos da média;
- O gráfico (f) mostra variâncias menores quando os valores preditos $\hat{y}$ estão próximos da média e,
- O gráfico (g) e (h) mostram que os erros são dependentes.

2.2.2 Diagrama de caixas (*Boxplot*)

Um *Boxplot* fornece informações sobre o centro, dispersão, simetria ou assimetria dos dados observados, tal como é mostrado na Figura 2.3. Para construir um *Boxplot* dos dados observados são requeridas as seguintes informações:

- O valor mínimo das observações,
- O quartil⁷ menor,

⁶ Um *outlier* é considerado se a relação entre cada resíduo e a variância dos resíduos satisfaz a condição: $e_R < -2$ ou $e_R > 2$ (ROUSSEEUW; LEROY, 1987). Na análise de resíduos, além das informações se os erros são independentes e identicamente distribuídos, pode-se visualizar *outliers*.

⁷ O quartil de um conjunto de amostras organizadas crescentemente divide uma distribuição em blocos comprimidos de $p\%$. Os quartis de interesse são de 25%, 50% e 75%, que são denominados quartil inferior, quartil médio (mediana) e quartil superior, respectivamente. A faixa interquartil (IQR) de um conjunto de amostras é definida como a diferença entre os quartis superiores e inferiores; isto é: $IQR = 75\% - 25\%$.

- A mediana,
- O quartil superior e,
- O valor máximo das observações.

Figura 2.3 – Gráfico de digrama de caixas (Box Plot)

Fonte: Autor

A vantagem dos *Boxplot* é que eles permitem detectar *outliers*. Se o *outlier* for superior a 1,5 do valor de IQR de distância a partir de uma aproximação quartil (extremidade mais próxima da caixa) ele é considerado leve e é considerado um *outlier* extremo se for mais do que três vezes o valor de IQR do quartil mais próximo.

2.2.3 Gráfico de Quantil-Quantil (QQ-PLOT)

Como alternativa aos gráficos *Boxplot*, podem ser utilizados os gráficos de Quantil-Quantil para comparar duas amostras e analisar se estas procedem da mesma família de distribuição. Nos eixos x e y são colocados os valores das distribuições teórica e assumida, respectivamente. Se os dados pertencem à mesma família de distribuição, a relação entre eles é aproximadamente linear de inclinação um. Este método apresenta robustez em função das mudanças na locação e escala de qualquer distribuição. Este gráfico permite visualizar as

distribuições das amostras, caso sejam simétricas ou não, assim como também permite detectar a presença de *outliers*; pode ser usado para obter uma boa comparação visual e estatística.

Se ao realizar o gráfico do *QQ-plot*, tem-se como resultado uma curva em forma de "U" ou um gráfico com alguma curvatura, significa que a distribuição é assimétrica em relação à gaussiana, e quando se obtém um gráfico em forma de "S" significa que a distribuição tem caudas maiores ou menores que a normal, isto é, que existem poucas ou demasiadas observações nas caudas da distribuição.

2.2.4 Histogramas com ajuste de distribuição

Algumas distribuições estatísticas, quando são representadas mediante um histograma, podem apresentar formas alargadas, montanhosas ou simetria. Isto é, crescem para logo reduzir, sendo a seção crescente e decrescente aproximadamente simétricas. Um histograma é essencialmente uma distribuição de frequências, em que os valores dos dados de origem agrupam-se em bandejas ou intervalos de classe; permitem mostrar graficamente a distribuição dos diferentes elementos que compõem a série de dados observados obtidos.

Nestes casos pode-se tentar aproximá-las mediante um modelo teórico de distribuição normal, logarítmico, exponencial, gaussiano, entre outros. Uma forte vantagem de utilizar os histogramas é que são úteis para quantidades maiores de dados observados.

2.3 MÉTRICAS ESTATÍSTICAS PARA VALIDAÇÃO

A validação métrica é uma medida matemática que quantifica o nível de concordância entre dois resultados, o real e o predito, sendo esta baseada no cálculo quantitativo do erro gerado pelos dois conjuntos de dados. As validações métricas também requerem um nível de aceitação, que representa a dispersão típica do resultado experimental, em um campo ou aplicação específica onde

serão utilizadas. Na prática, para considerar a simulação tão próxima da experimental, a diferença máxima entre elas deve estar dentro do valor esperado da faixa de aceitação.

Quando é realizada a comparação entre as duas amostras, geralmente deve-se avaliar duas características: a amplitude e a fase⁸. A seguir, são formuladas métricas para avaliar o resíduo gerado pelos dados reais e preditos.

2.3.1 Eficiência do Modelo (EF)

A eficiência do modelo EF , proposta em (LOAGUE; GREEN, 1991), é um índice relativo que avalia o resultado de simulação de um modelo, comparando dois vetores de dados, permitindo assim medir a discrepância entre os valores medidos e estimados pelo modelo.

Para isto, parte-se da ideia do erro absoluto em magnitude de duas séries temporais, tal como é mostrado na Equação (2.14).

$$e_A(t) = y(t) - \hat{y}(t) \quad (2.14)$$

sendo $y(t)$ e $\hat{y}(t)$ os valores medidos e estimados de dimensão n cada um. Feito isto, o método mais comum em estatística para comparar a concordância entre dois conjuntos de dados é mediante a avaliação da soma quadrática de suas diferenças, MSE (do Inglês *Mean Squared Error*), tal como é mostrado na Equação (2.15).

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [y(t) - \hat{y}(t)]^2 \quad (2.15)$$

O parâmetro MSE é utilizado para designar um coeficiente de performance CP , ao se dividir o valor de MSE pela variação individual do processo; ou seja, o valor da variância multiplicado pelo número de amostras. Portanto, o índice CP é expresso através da Equação (2.16).

⁸ A fase entre duas amostras indica o ângulo que foram os dados reais e preditos quando são plotados no eixo x e y, respectivamente. Caso os dados sejam muito próximos, o ângulo formado entre as duas amostras será de 45°.

$$CP = \frac{\sum_{i=1}^n [y(t) - \hat{y}(t)]^2}{n \cdot \frac{\sum_{t=1}^N [y(t) - \bar{y}(t)]^2}{n-1}} \approx \frac{\sum_{i=1}^n [y(t) - \hat{y}(t)]^2}{\sum_{t=1}^N [y(t) - \bar{y}(t)]^2} \quad (2.16)$$

Este índice de erro é aproximadamente zero quando os dois conjuntos de dados apresentam concordância. O índice CP pode ser modificado para se aproximar de qualquer valor p mediante a operação de adição ou subtração do mesmo. A constante mais comum utilizada para p é a unidade, gerando assim o índice de Eficiência (EF), que é definido pela Equação (2.17).

$$EF = 1 - CP = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [y(t) - \hat{y}(t)]^2}{\sum_{t=1}^N [y(t) - \bar{y}(t)]^2} \quad (2.17)$$

Para tornar mais robusto o índice EF , extrai-se a raiz quadrada do CP , tal como indica a Equação (2.18), a fim de penalizar o comprimento da diferenças dos vetores medidos e estimados.

$$EF' = 1 - \sqrt{CP} = 1 - \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n [y(t) - \hat{y}(t)]^2}{\sum_{t=1}^N [y(t) - \bar{y}(t)]^2}} \quad (2.18)$$

O resultado final do índice EF' indica que para valores iguais a 1, é considerada uma aproximação perfeita dos valores medidos e estimados, e 0 mostra uma inconsistência entre os dados reais e estimados⁹.

2.3.2 Teste estatístico de Theil

A medida e interpretação do erro foi extensamente estudada por pesquisadores das áreas de estatística e economia. Uma das medidas mais comuns do erro é MSE, que está expresso na Equação (2.15).

O MSE tem a vantagem de que erros de magnitude muito grande sejam mais penalizados que os erros de magnitude pequena e os erros de sinal negativo não são cancelados com os erros de sinal oposto.

⁹ A eficiência do modelo EF' é igual ao parâmetro FIT proposto em (LJUNG, 1999).

Com frequência, a raiz quadrada do MSE, RMS (do Inglês *Root Mean Square*) é considerada com a finalidade de proporcionar uma medida do erro com as mesmas unidades da variável estudada. Mas, resulta mais factível calcular uma medida normalizada e adimensional do erro. Esta medida é conhecida como a raiz quadrada média do erro porcentual, RMSPE (do Inglês *Root Mean Square Percent Error*), que é dada pela Equação (2.19).

$$RMSPE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \left[\frac{y(t) - \hat{y}(t)}{y(t)} \right]^2} \quad (2.19)$$

Como pode-se observar, MSE e RMSPE são medidas que permitem dimensionar o erro total, mas é importante conhecer as fontes de erros para avaliar as causas e os problemas do modelo. Para isto, alguns métodos são propostos para decompor o erro total em porções sistemáticas e aleatórias.

Uma forma elegante de decompor o MSE é através da estatística de Theil, a qual permite revelar as fontes do erro (STERMAN, 1984). As fontes do erro são dadas em termos do *bias*, da variância e da covariância, tal como é expresso na Equação (2.20).

$$\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2 = (\bar{y} - \bar{\hat{y}})^2 + (\sigma_y - \sigma_{\hat{y}})^2 + 2(1 - r)\sigma_y\sigma_{\hat{y}} \quad (2.20)$$

De acordo com a Equação (2.20), $\bar{y}$ e $\bar{\hat{y}}$ representam as médias do conjunto de dados reais e simulados ($\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N y(t)$ e $\bar{\hat{y}} = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \hat{y}(t)$); σ_y e $\sigma_{\hat{y}}$ são os desvios padrão dos dados reais e simulados ($\sigma_y = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \bar{y})^2}$ e $\sigma_{\hat{y}} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (\hat{y}(t) - \bar{\hat{y}})^2}$) e finalmente r representa o coeficiente de correlação, que é expresso pela Equação (2.21).

$$r = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \bar{y})(\hat{y}(t) - \bar{\hat{y}}) \quad (2.21)$$

O termo $(\bar{y} - \bar{\hat{y}})^2$ indica o *bias* entre os dados reais e simulados; o termo $(\sigma_y - \sigma_{\hat{y}})^2$ é a componente do MSE devida à diferença entre as variâncias dos dados reais e simulados, medindo o grau de variação desigual entre as duas variáveis e, finalmente, o termo $2(1 - r)\sigma_y\sigma_{\hat{y}}$ é a componente do erro devida à covariância entre os dados reais e simulados, medindo o grau de falha da mudança nos dados simulados/reais com a mudança do valor real/simulado.

Para avaliar cada componente de forma independente, divide-se cada termo pelo MSE, ficando a Equação (2.20) da seguinte forma:

$$\frac{(\bar{y} - \bar{\hat{y}})^2}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2} + \frac{(\sigma_y - \sigma_{\hat{y}})^2}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2} + \frac{2(1 - r)\sigma_y\sigma_{\hat{y}}}{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2} = 1 \quad (2.22)$$

$$U^M + U^S + U^C = 1$$

Os termos U^M , U^S e U^C são conhecidos como *proporções de desigualdade*, que representam a quantidade de erro devido ao *bias*, variância e covariância, respectivamente. A soma total das proporções representa o MSE total.

Com isto, o teste estatístico para comparar os dados reais e simulados será utilizando o Coeficiente de Desigualdade de Theil, TIC (do Inglês *Theil Coefficient Inequality*) representado pela Equação (2.23). Este coeficiente é um indicador mais significativo, porque permite comparar e avaliar a similaridade de dados reais e simulados, superando as principais desvantagens de outras ferramentas estatísticas (THEIL, 1966; VAN WOENSEL; VANDAELE, 2006) ¹⁰.

$$TIC = U = \frac{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2}}{\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t))^2} + \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (\hat{y}(t))^2}} \quad (2.23)$$

O valor de U varia entre 0 (para predições perfeitas) e 1 (para piores predições). Segundo (ROWLAND; HOLMES, 1978) um modelo é aceitável quando o valor de U é menor que 0,4; um modelo é razoavelmente aceitável quando os

¹⁰ O coeficiente de Theil permite superar os inconvenientes do índice RMSPE (desproporcionalidade dos erros grandes) e leva em conta explicitamente o fato de comparar duas séries de tempo autocorrelacionadas.

valores de U estão entre os valores 0,4 e 0,7 e finalmente um modelo é rejeitado quando o valor de U é maior que 0,7.

2.3.3 Índice de concordância de Willmott

O índice de concordância proposto em (WILLMOTT, 1982), denominado pela letra d , é uma medida descritiva, de tipo relativo e delimitado. Desta maneira, o índice d determina as diferenças que atingem as magnitudes e sinais dos valores estimados com relação a $y(t)$ e aos desvios estimados em relação a $\bar{y}(t)$. Assume-se que $y(t)$ e $\bar{y}(t)$ não apresentem erro algum. A distância máxima possível que duas observações podem se separar é descrita a seguir:

$$|\hat{y}(t) - \bar{y}(t)| + |y(t) - \bar{y}(t)| \quad (2.24)$$

Elevando-se a Equação (2.24) ao quadrado e somando sobre todas as observações, deve-se encontrar uma variação potencial do erro PE (do Inglês *Potential Error*), que satisfaça a seguinte condição:

$$0 \leq MSE \leq \frac{1}{N} PE \quad (2.25)$$

$$0 \leq \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2 \leq \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (|\hat{y}(t) - \bar{y}(t)| + |y(t) - \bar{y}(t)|)^2$$

Finalmente, o índice d é definido mediante a Equação (2.26).

$$d = 1 - \frac{N \cdot MSE}{PE} = 1 - \frac{\sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2}{\sum_{t=1}^N (|\hat{y}(t) - \bar{y}(t)| + |y(t) - \bar{y}(t)|)^2} \quad (2.26)$$

Portanto, o índice d mostra a sensibilidade às diferenças entre $y(t)$ e $\hat{y}(t)$. Um valor $d = 1$ indica que existe uma concordância absoluta entre os valores reais e preditos.

Na possibilidade de existir variações grandes e pequenas no numerador e denominador, poderia surgir certa instabilidade no índice d . Portanto, para tornar o índice de concordância mais rigoroso, propõe-se extrair a raiz quadrada do fator $\frac{N \cdot MSE}{PE}$, tal como é mostrado na Equação (2.27).

$$d' = 1 - \sqrt{\frac{\sum_{t=1}^N (y(t) - \hat{y}(t))^2}{\sum_{t=1}^N (|\hat{y}(t) - \bar{y}(t)| + |y(t) - \bar{y}(t)|)^2}} \quad (2.27)$$

2.3.4 Métrica de Russell

A métrica de Russell (RUSSELL, 1997a, 1997b) permite avaliar o erro relativo gerado por duas funções ou por dados de testes analíticos. Para esta aplicação, os vetores de amostras são descritos em termos de uma magnitude e um vetor unitário. Isto proporciona uma medida de robustez para quantificar a diferença de magnitude, a fase e o erro global dos valores reais e preditos.

O cálculo da magnitude do erro relativo *rme* (do Inglês *relative magnitude error*) é mostrado na Equação (2.28), sendo $y_i(t)$ e $\hat{y}_i(t)$ os valores dos dados reais e preditos.

$$rme = \frac{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t)^2 - \sum_{i=1}^N y_i(t)^2}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t)^2 \sum_{i=1}^N y_i(t)^2}} \quad (2.28)$$

O valor de *rme* é expresso da seguinte forma: para um valor de $rme = 0$, obtém-se que as magnitudes de $\|y_i(t)\|$ e $\|\hat{y}_i(t)\|$ são iguais; se o valor de $rme \geq 0$, obtém-se tem que $\|y_i(t)\| \geq \|\hat{y}_i(t)\|$ e para um valor de $rme < 0$ se tem que $\|y_i(t)\| < \|\hat{y}_i(t)\|$.

A fase do erro relativo P_r é obtida mediante a Equação (2.29), sendo esta limitada entre 0 e 1. Um valor de P_r igual a 0 corresponde a uma correlação direta entre os vetores $y_i(t)$ e $\hat{y}_i(t)$ e um valor de P_r igual a 1 equivale a dizer que se têm fases diferentes.

$$P_r = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t) y_i(t)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t)^2 \sum_{i=1}^N y_i(t)^2}} \right) \quad (2.29)$$

Para calcular o erro global C_r , primeiro deve-se normalizar a magnitude do erro relativo da Equação (2.28), conforme é mostrado na Equação (2.30).

$$M_r = \text{sign}(rme) \log_{10}(1 + |rme|) \quad (2.30)$$

Finalmente, o erro global em função do erro relativo de magnitude e fase é obtido através da Equação (2.31) ¹¹.

$$C_r = \sqrt{\left| \frac{\pi}{4} (M_r^2 - P_r^2) \right|} \quad (2.31)$$

2.3.5 Métrica de Sprague e Geers

Sprague e Geers (2004) propuseram um enfoque de validação quantitativa para comparar curvas e dados reais com dados simulados, denominada métrica S&G. Os principais componentes da métrica são a magnitude $M_{S\&G}$ e a fase $P_{S\&G}$. O erro global $C_{S\&G}$ é obtido pela combinação da magnitude e da fase.

A magnitude do erro é calculada pela Equação (2.32).

$$M_{S\&G} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t)^2}{\sum_{i=1}^N y_i(t)^2}} - 1 \quad (2.32)$$

A fase do erro é obtida pela Equação (2.33).

$$P_{S\&G} = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(\frac{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t) y_i(t)}{\sqrt{\sum_{i=1}^N \hat{y}_i(t)^2 \sum_{i=1}^N y_i(t)^2}} \right) \quad (2.33)$$

Finalmente, o erro global $C_{S\&G}$ é dado pela Equação (2.34).

$$C_{S\&G} = \sqrt{(M_{S\&G}^2 + P_{S\&G}^2)} \quad (2.34)$$

Segundo (MONGIARDINIA et al., 2013) os valores de aceitação para o erro de magnitude e de fase deve ser menores que 40%.

¹¹ Na fórmula original proposta por Sprague e Geers (2004) para o cálculo do C_r não é considerado o valor absoluto da diferença entre M_r^2 e P_r^2 . Neste trabalho, considera-se o valor absoluto, a fim de se evitar resultados complexos ($M_r^2 < P_r^2$).

2.3.6 Métrica ANOVA

A métrica estatística ANOVA é baseada na análise do erro entre dois conjuntos de amostras, assumindo que o erro gerado apresenta características aleatórias. Este método, apresentado em (RAY, 1996) propõe avaliar uma estatística T em função da média e do desvio padrão dos resíduos em cada instante de tempo. O cálculo destes valores é mostrado nas Equações (2.35) e (2.36), respectivamente, sendo n o número de amostras e $y_i(t)$ e $\hat{y}_i(t)$ os valores dos dados reais e preditos, respectivamente.

$$\bar{e}^r = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{(y_i(t) - \hat{y}_i(t))}{m_{max}}}{n} \quad (2.35)$$

$$\bar{\sigma}^r = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (e^r - \bar{e}^r)^2} \quad (2.36)$$

Caso se deseje analisar o erro e o desvio padrão isoladamente, os valores críticos de aceitação para estes valores devem ser menores que 5% e 35%, respectivamente.

Com os valores da média e do desvio padrão residual, a estatística T é obtida através da Equação (2.37). Este valor é comparado com a distribuição t , para duas caudas e com um nível de significância α .

$$T = \frac{\bar{e}^r}{\bar{\sigma}^r} \sqrt{n} \quad (2.37)$$

Se os conjuntos de amostras m_i e p_i são próximos uns dos outros, a estatística T deve obedecer a desigualdade da Equação (2.38).

$$-t_{\alpha, n-1} \leq T \leq t_{\alpha, n-1} \quad (2.38)$$

Finalmente, o teste de ANOVA conduz à avaliação dos seguintes critérios:

- A média dos resíduos entre dois conjuntos de dados deve ser essencialmente zero,

- O desvio padrão dos resíduos deve ser menor que algum valor razoavelmente imposto e,
- O valor do *p-value* obtido da estatística T deve ser maior que o nível de significância da distribuição t para duas caudas e um número de amostras n .

2.4 CRITÉRIOS DE SELEÇÃO DE MODELOS

Em estatística, o procedimento de construção de um modelo é baseado na comparação de modelos com diferentes estruturas, para as componentes aleatória e sistemática e, através do uso de determinadas medidas ou critérios, decide-se qual é o modelo adequado. Estes critérios consideram um conjunto de dados dentro do espaço amostral ou fora dele. O primeiro faz referência a selecionar um modelo que se ajuste aos dados de um determinado conjunto. O segundo se refere à forma de como o modelo consegue prever os valores futuros de um espaço amostral distinto do utilizado na construção do modelo¹². Estes critérios são baseados no princípio da parcimônia, onde é recomendado selecionar um modelo em função da soma dos quadrados residuais, utilizando o mínimo número possível de variáveis.

Entretanto, a seleção do critério pode dar lugar a diferentes opções de tamanho do conjunto de variáveis do modelo, podendo ter diversos pontos de vista de magnitude das diferenças entre os modelos, sendo isto um aspecto relevante quando se compara um conjunto de modelos, permitindo realizar a escolha do modelo de uma maneira mais simples e automática.

Os critérios de informação comparam o ganho de se ter mais informação em termos da redução da variância nas inovações, com o custo de obter esse benefício em termos da perda de graus de liberdade na estimação. Este critério toma a forma de uma função de verossimilhança penalizada e um termo de

¹² Fazendo a analogia com o procedimento de validação em identificação de sistemas, o primeiro critério refere-se à autovalidação e o segundo à validação cruzada.

penalidade, que está em função do número de parâmetros do modelo. Obviamente, a seleção é baseada no menor valor que produz o critério de informação.

Dado que o modelo nominal é desconhecido, trata-se de quantificar a perda de informação de um modelo aproximado M , utilizando um conjunto de dados D para realizar a validação cruzada. Portanto, formula-se um critério de informação geral GIC (do Inglês *General Information Criterion*), expresso na Equação (2.39).

$$GIC = -2L(M, D) + \lambda|M| \quad (2.39)$$

Na Equação (2.39), $L(M, D)$ representa o logaritmo natural da verossimilhança do modelo M , dado um conjunto de dados D , permitindo medir a qualidade do ajuste do modelo com os dados; λ é um fator que permite controlar a penalidade exigida pela complexidade do modelo e $|M|$ é o número de parâmetros do modelo. A combinação destas duas operações pode ser vista como uma compensação entre o *bias* e a variância. O número de critérios de informação é derivado a partir de diferentes considerações teóricas, baseadas na penalidade do fator λ .

Um deles é o critério de informação proposto em (AKAIKE; 1974) denominado AIC (do Inglês *Akaike Information Criterion*). Este método estuda o problema da identificação do modelo, do ponto de vista da teoria de decisão estatística, o que permite trasladar o problema de ajuste do modelo à escolha da função perda mais adequada. O cálculo do AIC é realizado a partir da Expressão (2.40):

$$AIC = -2\ln(L(M, D)) + 2|M| \quad (2.40)$$

A definição do AIC é relacionada com conceitos estatísticos importantes, como a função de verossimilhança, a entropia associada e a informação contida no modelo.

Outro critério proposto por Akaike foi o erro de predição final FPE (do Inglês *Final Prediction Error*), que fornece uma medida da qualidade do modelo, simulando um conjunto de dados e comparando-os com um conjunto de dados

reais. A Equação (2.41) mostra o cálculo do coeficiente FPE, ressaltando que, o modelo é o mais adequado quando se tem um menor valor de FPE.

$$FPE = V \cdot \left(\frac{1 + \frac{|M|}{N}}{1 - \frac{|M|}{N}} \right) \quad (2.41)$$

O valor de V representa uma função perda em função dos parâmetros obtidos do modelo e os conjunto de dados reais e N é o comprimento do vetor de dados.

Schwarz (1978) propôs o índice BIC (do Inglês *Bayesian Information Criterion*), que introduz uma modificação no índice AIC do tipo bayesiano. Surge para valores de $\lambda = \ln(D)$, tal como é mostrado na Equação (2.42).

$$BIC = -2\ln(L(M, D)) + |M|\ln(D) \quad (2.42)$$

O índice BIC penaliza mais os modelos com maior número de parâmetros estimados, obtendo-se assim modelos com ordem inferior aos obtidos a partir do AIC, além de corrigir a tendência à sobreparametrização observada neste último.

O critério proposto em (HANNAN; QUINN, 1979) é baseado no fato que, para amostras finitas, o AIC tende a sobreparametrizar o modelo e o BIC tende a subparametrizá-lo. A solução proposta foi incrementar o termo de penalização de uma maneira lenta, reduzindo assim a possibilidade de subparametrizar o modelo. Este incremento é baseado em uma função que penaliza o tamanho da série para $\lambda = 2 \cdot c \cdot \ln \ln(D)$ com valores de $c > 1$, estabelecendo assim o índice HQ mostrado na Equação (2.43).

$$HQ = -2\ln(L(M, D)) + 2|M| \cdot c \cdot \ln \ln(D) \quad (2.43)$$

2.5 VALIDAÇÃO DA DINÂMICA DO MODELO

A validação da dinâmica do modelo consiste em avaliar a resposta no domínio do tempo e da frequência. No domínio do tempo, a validação consiste em realizar testes da resposta ao degrau, a fim de saber se o modelo acompanha a

resposta real do processo para uma mudança no valor do sinal de controle ou *set point* para sistemas em malha aberta e fechada, respectivamente. A validação da resposta em frequência, permite identificar a faixa de frequências de operação do modelo identificado, com a finalidade de ser considerado no desenvolvimento do sistema de controle, mostrando a validade ou não do modelo para uma região de frequência.

2.5.1 Resposta ao degrau

A resposta ao degrau é utilizada com muita frequência na validação de modelos paramétricos, pois permite fornecer informações sobre as propriedades dinâmicas básicas do modelo (neste caso, do modelo obtido pelo processo de identificação), tais como constante de tempo, ganho estático e atraso puro (tempo morto). A resposta ao degrau ajuda a verificar se o modelo linear captou a dinâmica do processo real.

Uma forma de quantificar a resposta ao degrau é utilizando as métricas baseadas em critérios do erro. Para isto, é necessário dois conjuntos de sinais com o mesmo tamanho, os dados reais e simulados do processo, permitindo gerar o erro através da diferença dos valores em um instante i . A seguir, são mencionados os principais índices baseados na integral do erro:

- **A integral do erro absoluto, IAE** (do Inglês *Integrated Absolute Error*) considera o módulo do erro (valor absoluto), ponderando assim de igual forma erros grandes e pequenos. A representação do IAE no tempo discreto é mostrada na Equação (2.44).

$$IAE = \sum_{i=1}^n |e(i)| \quad (2.44)$$

- **A integral do tempo multiplicado pelo erro absoluto, ITAE** (do Inglês *Integral of Time and Absolute Error*) é insensível a erros iniciais, mas penaliza fortemente os erros que permanecem ao longo

do tempo. Sua expressão matemática no tempo discreto é representada pela Equação (2.45).

$$ITAE = \sum_{i=1}^n i \cdot |e(i)| \quad (2.45)$$

2.5.2 Análise residual no domínio da frequência

Os testes residuais no domínio do tempo são trasladados ao domínio da frequência, mediante a aplicação da transformada discreta de Fourier e são calculadas propriedades estatísticas com o espectro do resíduo. A finalidade do teste é analisar e comparar o espectro e as propriedades do resíduo, realizando N testes distintos e verificando cada k -ésimo componente da frequência, com um sinal de ruído branco.

Com isto, a análise residual no domínio da frequência permite validar ou invalidar o modelo identificado em uma região de frequências e seguindo as propriedades estatísticas de um sinal normalmente distribuído e com média zero (BALAGUER; VILANOVA, 2009).

Para realizar esta análise são empregados dois teoremas. O primeiro deles faz referência à aplicação da transformada discreta de Fourier ao resíduo. O segundo teorema permite quantificar o resíduo no domínio da frequência, para ser comparado com a distribuição χ^2 .

Teorema 1: Define-se $\xi(n)$ como uma sequência de amostras residuais independentes e identicamente distribuídas de dimensão N , que pertencem a uma distribuição normal $N(\mu_\xi, \sigma_\xi^2)$. O resíduo é expresso no domínio da frequência aplicando a serie discreta de Fourier, tal como é mostrado na Equação (2.46):

$$\xi_k = R_k - jI_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \xi(n) e^{-j\Omega_0 kn} \quad (2.46)$$

sendo R_k e I_k as partes real e imaginária produto da aplicação da transformada de Fourier, respectivamente; N é o número de amostras; Ω_0 é a frequência

fundamental que toma um valor de $\Omega_0 = \frac{2\pi}{N}$ e o valor k representa um número inteiro com valores de $k \in \{0, 1, 2, \dots, N-1\}$. Aplicando-se a identidade de Euler ao resíduo, as partes real e imaginária são expressas a seguir:

$$R_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \xi(n) \cos(\Omega_0 kn) \quad (2.47)$$

$$I_k = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \xi(n) \sin(\Omega_0 kn) \quad (2.48)$$

Logo, segundo a Equação (2.47), a parte real R_k é uma variável aleatória normalmente distribuída com média μ_{R_k} e variância $\sigma_{R_k}^2$, expressas da seguinte forma:

$$\mu_{R_k} = \mu_\xi \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \cos(\Omega_0 kn) \quad (2.49)$$

$$\sigma_{R_k}^2 = \sigma_\xi^2 \frac{1}{N^2} \sum_{n=0}^{N-1} \cos^2(\Omega_0 kn) \quad (2.50)$$

De forma similar, a parte imaginária I_k , mostrada na Equação (2.48), é uma variável normalmente distribuída com média μ_{I_k} e variância $\sigma_{I_k}^2$, dadas pelas Equações (2.51) e (2.52).

$$\mu_{I_k} = \mu_\xi \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \sin(\Omega_0 kn) \quad (2.51)$$

$$\sigma_{I_k}^2 = \sigma_\xi^2 \frac{1}{N^2} \sum_{n=0}^{N-1} \sin^2(\Omega_0 kn) \quad (2.52)$$

Teorema 2: O ganho normalizado M_{nk}^{13} é definido através da Equação (2.53).

¹³ Na fórmula original do ganho normalizado proposta por Balaguer (2011) foi extraída a raiz quadrada de M_{nk} a fim de se ter uma penalização maior.

$$M_{nk} = \sqrt{\left(\frac{R_k - \mu_{R_k}}{\sigma_{R_k}}\right)^2 + \left(\frac{I_k - \mu_{I_k}}{\sigma_{I_k}}\right)^2} \quad (2.53)$$

Em (BALAGUER; VILANOVA, 2009) se menciona que o valor de M_{nk} apresenta uma distribuição χ^2 com dois graus de liberdade, caso R_k e I_k sejam independentes. Em contrapartida, fazendo a análise da variação do erro, este último está em função dos distintos valores que assumem os parâmetros do modelo para uma estrutura determinada. Caso os parâmetros do modelo sejam próximos dos parâmetros do sistema real, o erro apresentará características de ruído branco.

Portanto, seguindo o raciocínio anterior, neste trabalho propõe-se o teste de hipóteses baseado na Expressão (2.54).

$$\begin{aligned} H_0: M_{nk} &\in \chi_{q,\alpha}^2 \\ H_1: M_{nk} &\notin \chi_{q,\alpha}^2 \end{aligned} \quad (2.54)$$

sendo q e α a quantidade de parâmetros que possui o modelo e o nível de significância, respectivamente. Para quantificar a diferença entre a tolerância imposta da distribuição χ^2 e o valor de M_{nk} , se propõe a Equação (2.55):

$$\varphi = \sqrt{\sum_{i=1}^N |\chi_{q,\alpha_i}^2 - M_{nk_i}|} \quad (2.55)$$

2.6 ANÁLISE DA ROBUSTEZ DE CONTROLADORES PREDITIVOS UTILIZANDO MODELOS IDENTIFICADOS

As incertezas em um modelo, além de apresentar limitações do conhecimento de um processo real, não representam fielmente a dinâmica real do processo. Como principal limitação, quando for desenvolvido o projeto de controle baseado unicamente nesse modelo, este último não pode funcionar como planejado quando estiver em operação no processo real.

As principais causas ou origens de incertezas no modelo são mencionadas a seguir (SKOGESTAD; POSTLETHWAITE,1996):

- presença de erros nos valores dos parâmetros do modelo identificado;
- variação dos parâmetros do modelo linear devido à presença de não-linearidade ou variação no ponto de operação;
- erros de medição ou erros associados aos instrumentos (sensores ou atuadores) e
- em altas frequências, a estrutura do modelo é desconhecida, podendo ultrapassar o ganho do processo. A importância de avaliar sistemas em alta frequência permite analisar o ruído de medição dos instrumentos a fim de serem rejeitados pelo controlador.

Embora as incertezas sejam desconhecidas, as mais comuns são:

- incerteza aditiva, modelada por:

$$G(z) = G_0(z) + \Delta_A \quad (2.56)$$

- incerteza multiplicativa na entrada do processo, modelada por:

$$G(z) = G_0(z)[1 + \Delta_M] \quad (2.57)$$

Nas Expressões (2.56) e (2.57), $G(z)$ e $G_0(z)$ representam a planta real e nominal, respectivamente; Δ_A e Δ_M representam as incertezas aditiva e multiplicativa, respectivamente.

Das Equações (2.56) e (2.57), considera-se um sistema realimentado, com controlador $K(z)$ para cada incerteza, conforme é mostrado na Figura 2.4 (a) e (b). O objetivo do sistema realimentado é que o controlador seja capaz de controlar um processo, apesar do modelo utilizado não ser perfeito. Isto é, que o compensador estabiliza o sistema robustamente se o sistema em malha fechada for estável para a planta real $G(z)$. A formulação do problema de robustez é mostrada na Figura 2.4 (c).

Figura 2.4 – (a) Sistema realimentado com incerteza aditiva no modelo, (b) Sistema realimentado com incerteza multiplicativa na entrada da planta, (c) Obtendo a função de transferência vista pela incerteza

Fonte: Autor

Em seguida, procede-se a reorganização das equações dinâmicas do sistema, incluindo as incertezas aditiva e multiplicativa presentes e deduz-se a condição de estabilidade robusta. Considerando o sistema realimentado da Figura 2.4(a), para uma referência nula ($r(z) = 0$), as equações do sistema são:

$$u(z) = -K(z)y(z) \quad (2.58)$$

$$y(z) = v(z) + G_0(z)u(z) \quad (2.59)$$

A função de transferência vista pela incerteza aditiva, considerando um sistema SISO (do Inglês, *Single-Input Single-Output*), cuja representação é $M_A(z)$, é expressa a seguir:

$$M_A(z) = \frac{u(z)}{v(z)} = \frac{-K(z)}{1 + K(z)G_0(z)} \quad (2.60)$$

Para sistemas MIMO (do Inglês, *Multiple-Input Multiple-Output*) a função de transferência da incerteza aditiva é representada pela Equação (2.61).

$$\mathbf{M}_A(z) = \frac{\mathbf{u}(z)}{\mathbf{v}(z)} = -\mathbf{K}(z)(\mathbf{I} + \mathbf{K}(z)\mathbf{G}_0(z))^{-1} \quad (2.61)$$

Para representar a função de transferência vista pela incerteza multiplicativa da Figura 2.4(b), o sistema é representado pela Equação (2.62).

$$y(z) = G_0(z)[v(z) + u(z)] \quad (2.62)$$

A função de transferência vista pela incerteza multiplicativa $M_M(z)$ para sistemas SISO é expressa a seguir:

$$M_M(z) = \frac{u(z)}{v(z)} = \frac{-K(z)G_0(z)}{1 + K(z)G_0(z)} \quad (2.63)$$

No caso multivariável, a função de transferência da incerteza multiplicativa $\mathbf{M}_M(z)$ é representada pela Equação (2.64).

$$\mathbf{M}_M(z) = \frac{\mathbf{u}(z)}{\mathbf{v}(z)} = -\mathbf{K}(z)\mathbf{G}_0(z)(\mathbf{I} + \mathbf{K}(z)\mathbf{G}_0(z))^{-1} \quad (2.64)$$

Com as funções de transferência $M_A(z)$ e $M_M(z)$, uma importante ferramenta para a análise da estabilidade de sistemas, para os casos SISO e MIMO, na presença de incertezas de modelagem é o teorema do Ganho Pequeno (MORARI; ZAFIRIOU, 1989). Dado o sistema $\mathbf{M}(z)$ ¹⁴ pela Figura 2.4(c), pode-se analisar sua robustez usando o teorema do Ganho Pequeno, assumindo-se $\mathbf{M}(z)$ como um sistema estável com $\|\mathbf{M}(z)\|_\infty \leq \gamma$, para qualquer $\gamma > 0$. Logo, o sistema

¹⁴ Neste trabalho, pelo fato da planta sendo testada ser um sistema multivariável, a norma- H_∞ para $\mathbf{M}(z)$ (caso seja incerteza aditiva ou multiplicativa), é definida por: $\|\mathbf{M}(z)\|_\infty = \sup_{Re(z)>0} \bar{\sigma}(\mathbf{M}(z)) = \sup_{\omega \in \mathbb{R}} \bar{\sigma}[\mathbf{M}(j\omega)]$, sendo $\bar{\sigma}[\cdot]$ os valores singulares máximos.

com incerteza em malha fechada é estável, para qualquer tipo de incerteza imposta, desde que se cumpra a Inequação (2.65).

$$\bar{\sigma}(\mathbf{M}_{A,M}(j\omega))\|\Delta\|_{\infty} < 1 \quad (2.65)$$

A Equação (2.65) permite avaliar a estabilidade robusta, mas se não for satisfeita, não significa que a estabilidade não será atingida. Isto é, para modelos lineares identificados, a Inequação (2.65) pode ser testada dado um controlador $K(z)$ e verificando-se se a estabilidade é garantida para um modelo identificado, dentro de um conjunto de incertezas do sistema real.

2.7 PROPOSTA DE UM SISTEMA DE VALIDAÇÃO FUZZY

A pesquisa realizada sobre os métodos de validação de modelos matemáticos mostra as diversas formas de validar/invalidar um modelo.

Devido à incerteza de cada método de validação e caso os resultados de cada teste seja incompatível um com o outro, nesta seção pretende-se desenvolver um sistema de validação baseado em lógica *Fuzzy*, mostrado na Figura 2.5, considerando conhecimentos nas áreas de Identificação de Sistemas e de Controle Preditivo.

Figura 2.5 – Diagrama de blocos do sistema de validação *Fuzzy*

Fonte: Autor

Segundo a Figura 2.5, a avaliação do modelo identificado não somente será através de um parâmetro estatístico, mas também por meio da dinâmica do

modelo e sua robustez. Para isto, as entradas no sistema *fuzzy* devem ser valores normalizados no intervalo de 0 a 10, para cada resultado dos testes¹⁵.

O sistema *fuzzy*, tipicamente, é composto pelos elementos fuzzificação, base de regras, máquina de inferência *fuzzy* e defuzzificação, tal como é mostrado no diagrama de blocos da Figura 2.6.

Figura 2.6 – Diagrama de blocos de um sistema *Fuzzy*

Fonte: Autor

No desenvolvimento do sistema de inferência *fuzzy* para validar modelos identificados, os elementos da Figura 2.6 são descritos a seguir:

- **Fuzzificação:** A responsabilidade deste elemento é converter valores escalares para valores *fuzzy* equivalentes. Para isto, são definidas as variáveis linguísticas (Baixo, Médio, Alto) e as funções de pertinência (duas trapezoidais e uma triangular) para representar os valores *fuzzy*. Como resultado, as Figuras 2.7, 2.8 e 2.9 mostram as funções de pertinência das variáveis linguísticas de entrada “Métricas Estatísticas”, “Avaliação Dinâmica” e “Robustez do Modelo”, respectivamente; a função de pertinência da variável linguística de saída “Valor da Validação” é mostrada na Figura 2.10¹⁶.
- **Máquina de Inferência *Fuzzy*:** Este elemento traduz, matematicamente, cada proposição *fuzzy* por meio de técnicas de

¹⁵ O processo de normalização destes valores é realizado utilizando a Equação (3.5) do Capítulo 3.

¹⁶ As formas das funções de pertinência das entradas e saídas das variáveis linguísticas, assim como os intervalos de cada função, foram baseadas no trabalho de (POTTS et al., 2017).

raciocínio aproximado. A máquina de inferência fornece um valor de saída a partir de cada entrada *fuzzy* e da relação definida pela base de regras. Neste trabalho, o modelo proposto por (MAMDANI, 1973), conhecida também de *Max-Min*, é utilizado para o processamento de inferências cuja regra é formalizada pela estrutura **se** (antecedente) **então** (consequente). A quantidade de regras desenvolvidas neste trabalho é 27 no total. O resultado da formulação das regras pode ser visto na curva de superfície das Figuras 2.11, 2.12 e 2.13, mostrando a relação entre as entradas “Robustez do Modelo” e “Métricas Estatísticas”, “Robustez do Modelo” e “Avaliação Dinâmica” e “Métricas Estatísticas” e “Avaliação Dinâmica”, respectivamente.

- Defuzzificação: Este último elemento converte a saída *fuzzy* em um número real. Neste trabalho, a conversão *fuzzy* $\rightarrow$ escalar é realizada utilizando o método do Centro de Gravidade, também conhecido como centroide ou centro de área. O método do Centro de Gravidade, semelhante a uma média aritmética, considera a área representada por $\varphi_B(u_i)$, indicando o grau de compatibilidade do valor u_i com o conceito modelado pelo conjunto *fuzzy* B . Esta formulação é representada pela Equação (2.66).

$$G(B) = \frac{\sum_{i=0}^n u_i \varphi_B(u_i)}{\sum_{i=0}^n \varphi_B(u_i)} \quad (2.66)$$

Figura 2.7 – Função de pertinência da variável linguística “Métricas Estatísticas”

Fonte: Autor

Figura 2.8 – Função de pertinência da variável linguística “Avaliação Dinâmica”

Fonte: Autor

Figura 2.9 – Função de pertinência da variável linguística “Robustez do Modelo”

Fonte: Autor

Figura 2.10 – Função de pertinência da variável linguística “Valor da Validação”

Fonte: Autor

Figura 2.11 – Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Robustez do Modelo e Métricas Estatísticas

Fonte: Autor

Figura 2.12 – Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Robustez do Modelo e Avaliação Dinâmica

Fonte: Autor

Figura 2.13 – Curva de superfície gerada pelas regras do mecanismo de inferência entre as entradas Métricas Estatísticas e Avaliação Dinâmica

Fonte: Autor

Finalmente, o desenvolvimento do sistema de validação fuzzy na forma de diagrama de blocos, em elaborado no *Simulink*, é mostrado na Figura 2.13. Para isto foi considerado pesos para os blocos de métricas estatísticas, avaliação da dinâmica dos modelos e a robustez do controlador, utilizando os modelos identificados. A função $f(u)$ corresponde à função de normalização mostrada na equação (3.5).

Figura 2.14 – Diagrama de Blocos em *Simulink* do sistema de validação *Fuzzy*

Fonte: Autor

CAPÍTULO 3

3. IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMAS APLICADA A UM PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH

A Identificação de Sistemas do tipo caixa-preta permite realizar a modelagem matemática de um determinado processo baseado em dados experimentais coletados do mesmo (LJUNG, 1999). A ideia é tentar reproduzir a dinâmica e as características estocásticas do processo em torno de um ponto de operação, através de uma estrutura matemática que tenda ao processo real. Para tal fim, é desejável ter um conhecimento prévio do processo, escolher uma estrutura matemática para representar o modelo e aplicar um método apropriado para a estimação dos parâmetros do mesmo.

Recentemente, uma contribuição importante da teoria de Identificação de Sistemas foi na área de controle, sendo esta extensão conhecida como Identificação para Controle (GEVERS, 2004).

A Identificação para Controle tem como objetivo fornecer os melhores modelos matemáticos de um determinado processo industrial, com a finalidade de desenvolver o sistema de controle para aplicações de controle moderno de processos industriais. Um exemplo desta aplicação é a sintonia de controladores PID através do modelo estimado. Também, existem sistemas de controle que proporcionam robustez quando internamente consideram um modelo nominal do processo a controlar. Este tipo de controlador é conhecido como controlador preditivo MPC (do Inglês *Model Predictive Controller*) ou controladores adaptativos.

Portanto, neste trabalho é realizado o projeto de identificação de uma planta-piloto de neutralização de pH, localizada no Laboratório de Controle de Processos Industriais, LCPI, da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, EPUSP, operando em malha fechada. A finalidade do projeto é fornecer um modelo matemático com a maior quantidade de informação, tanto na parte dinâmica como na parte estocástica do processo.

3.1 PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH

O processo de neutralização de pH é visto em indústrias químicas, petroquímicas, plantas de tratamento de água e indústria farmacêutica, entre outras. O processo de neutralização consiste em atingir um valor de pH desejado de um influente, chamado distúrbio, mediante o ingresso de um reagente, chamado variável manipulada. O pH apresenta um comportamento não-linear e variante no tempo, devido à relação logarítmica do pH e às substâncias químicas presentes no processo.

Neste trabalho, os ensaios experimentais foram realizados em uma planta-piloto de neutralização de pH, a fim de coletar dados de um processo real. Segundo o P&ID (do Inglês *Piping and Instrumentation Diagram*) mostrado na Figura 3.1, a planta piloto conta com um Tanque do Reator (TR), onde é realizado o processo de neutralização. A homogeneização das soluções dentro do TR é realizada mediante o agitador mecânico MZ-81.

As variáveis do processo dentro do TR são o nível e pH, sendo estas medidas através de um transmissor-indicador LIT-10 e do conjunto de sensores AE-40 e TE-40 com o transmissor AITY-40, respectivamente.

Os controladores do nível LIC-16 e do pH AIC-40 atuam sobre as válvulas de controle LV-20A, 20B, sendo a válvula LV-20B de *backup*, e então sobre a bomba dosadora FZ-41, respectivamente. Por esta razão é que o TR é classificado como um Reator Contínuo de Tanque Agitado, CSTR (do Inglês, *Continuous Stirred Tank Reactor*).

Figura 3.1 – P&ID da Planta-Piloto de neutralização de pH

Fonte: Autor

As soluções ácidas são preparadas em dois tanques principais; um Tanque de Ácido Primário (TAP) e um Tanque de Ácido Secundário (TAS). As soluções ácidas do TAP e TAS fluem para os Tanques de Ácido Intermediário Principal e Secundário, TAPI e TASI, através do acionamento das válvulas solenoide FV-35 e FV-36, respectivamente. As válvulas solenoide FV-31 e FV-32 permitem a passagem da solução ácida dos tanques TAPI e TASI para o TR, respectivamente.

A solução básica é preparada no Tanque de Base para a Bomba (TBB). A substância armazenada no TBB flui através da bomba dosadora FZ-41 para o TR.

Realizada a descrição do P&ID, pode-se perceber que o processo de pH apresenta duas malhas de controle, que são a malha do nível e a malha do pH. No TR, o controle do nível é realizado mediante um sinal PWM (do Inglês *Pulse Width Modulation*), enviado para a válvula solenoide LV-20A. A faixa de operação do

nível é de 0 a 100% equivalente a 0 a 10 segundos. O controle do pH é realizado mediante a variação da frequência de acionamento da bomba dosadora, que está na faixa de 0 a 100%. Esta variação do sinal de controle da bomba gera uma variação de 2,35 a 12,25 aproximadamente na saída do pH do TR.

As soluções empregadas na planta piloto são: a substância ácida de HCl, que apresenta uma concentração de 0,0056 mol/litro, em que são diluídos 100,5 ml de HCL a 36,5% em um tanque com 180 litros de água destilada; a solução básica de NaOH, que apresenta uma concentração de 0,0185 mol/litro, em que são diluídos 134,5g de NaOH a 99% em um tanque com 206 litros de água destilada.

3.2 IDENTIFICAÇÃO EM MALHA FECHADA

Devido à instabilidade da malha de pH em malha aberta, os ensaios realizados na planta-piloto foram considerando os controladores de nível e pH ativos, isto é, os sinais de excitação mencionados a seguir são aplicados no *set point* de cada malha de controle.

3.2.1 Sinais de Excitação

O processo de neutralização de pH foi excitado com dois tipos de sinais, a fim de obter parâmetros relevantes do processo, inicialmente, e poder realizar o processo de identificação do sistema. Estes sinais apresentam variações em torno de seu valor nominal para cada malha.

Os sinais de excitação utilizados neste trabalho são mencionados a seguir:

- Sinal Degrau, que permite fornecer informação prévia do processo como ganho, tempo de acomodação e constante de tempo;
- Sinal GBN, que é utilizado para o processo de identificação a fim de fornecer parâmetros de estimação dos modelos.

3.2.1.1 Sinal Degrau

O sinal tipo degrau apresenta variações bruscas em um instante de tempo definido. Este sinal, pela simplicidade que apresenta, é muito utilizado em testes de controladores, a fim de avaliar o comportamento dinâmico da malha, e em identificação de sistemas, porque apresenta uma baixa relação sinal/ruído na banda de alta frequência.

A Equação (3.1) mostra a forma representativa deste sinal.

$$u(t) = \begin{cases} u_0, & t < 0 \\ u_0 + u_F, & t \geq t_f \end{cases} \quad (3.1)$$

onde u_0 é a amplitude inicial do sinal e u_F é a variação da amplitude do degrau no instante t até o valores da variável de saída estabilizar em t_f . Segundo (SÖDERSTROM; STOICA, 1989), o sinal degrau fornece informações do processo como o tempo de acomodação, tempo de subida, constantes de tempo dominantes do processo, sobressinal, ganho estático e tempo morto.

Com este sinal é realizada uma etapa de Pré-teste no processo de neutralização de pH. O controlador utilizado para a malha de nível e pH foram um PI e PID, respectivamente. A sintonia da malha de nível e pH são mostradas na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 – Parâmetros de sintonia dos controlador PID das malhas de nível e pH

Parâmetro	Malha de nível	Malha de pH
K_p	4,2	2,3
T_i	180	180
T_d	0	0,1

Em seguida, são realizadas variações no *set point* das malhas de nível e pH da seguinte forma:

- Para a malha do nível, o processo em estado estacionário possui um valor de 75% e as variações no *set point* estão em um intervalo de $\pm 3\%$.

- Para a malha do pH, o processo em estado estacionário vale 7 e as variações no *set point* são realizadas no intervalo de ± 1 .

As respostas obtidas do Pré-teste para a malha de nível (acima) e pH (abaixo) são mostradas na Figura 3.2.

Figura 3.2 – Resposta do Pré-teste das malhas de nível e pH

Fonte: Autor

No experimento realizado para ambos os casos, o tempo de cada patamar é de 33 minutos aproximadamente, tempo razoável para se estabilizar as malhas de nível e pH.

3.2.1.2 Sinal GBN

O GBN (do Inglês *Generalized Binary Noise*), proposto em (TULLEKEN, 1990), é um sinal que apresenta propriedades estocásticas e com a possibilidade de especificar uma faixa de frequências onde se deseja concentrar a maior potência do sinal, permitindo assim definir um sinal ótimo para a identificação de sistemas. Este sinal apresenta dois estados fixos $+a$ e $-a$, onde a variação do

sinal segue uma distribuição de probabilidades, de acordo com a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} P[u(t) = -u(t-1)] &= p_{sw} \\ P[u(t) = u(t-1)] &= p_{n-sw} = 1 - p_{sw} \end{aligned} \quad (3.2)$$

sendo p_{sw} e p_{n-sw} a probabilidade de chaveamento e não-chaveamento, respectivamente.

Para o desenvolvimento dos sinais de excitação GBN das malhas de nível e pH do processo de neutralização de pH, são requeridas a constante de tempo τ , o tempo de acomodação t_s e o tempo de amostragem Δt de cada malha. Com estes valores é calculada p_{n-sw} . Os parâmetros relevantes do processo, para cada malha, são calculados através do método proposto por (SUNDARESAN; KRISHNASWAMY, 1978) ou método dos 35,3% e 85,3%. Para isto, impõe-se uma variação no *set point* do nível de 75% a 78% e 75% a 72% e de 7 a 8 e 7 a 6 no *set point* do pH, segundo mostra a Figura 3.2. Com isto, obtêm-se os tempos $t_{0,353}$ e $t_{0,853}$, a fim de calcular a constante de tempo e o tempo morto das malhas de nível e de pH.

A seguir, são obtidos estes parâmetros a partir da curva de reação da Figura 3.2.

- Para a malha de nível, segundo a curva de reação da Figura 3.2, os tempos de subida $t_{0,353-nível-sub}$ e $t_{0,853-nível-sub}$ são 110 e 206 segundos, respectivamente; os tempos de descida $t_{0,353-nível-des}$ e $t_{0,853-nível-des}$ são 74 e 144 segundos, respectivamente. Aplicando-se as equações propostas em (SUNDARESAN; KRISHNASWAMY, 1978), a partir das constantes de tempo de subida ($\tau_{nível-sub} = 64,8 \text{ seg.}$) e descida ($\tau_{nível-des} = 47,25 \text{ seg.}$) e os tempos mortos de subida $\theta_{nível-sub} = 82,16 \text{ seg.}$ e descida $\theta_{nível-des} = 53,7 \text{ seg.}$, a média dos valores da constante de tempo e do tempo morto da malha de nível são:

$$\tau_{nível} = \frac{\tau_{nível-sub} + \tau_{nível-des}}{2} = 56,03 \text{ seg}$$

$$\theta_{nível} = \frac{\theta_{nível-sub} + \theta_{nível-des}}{2} = 67,93 \text{ seg}$$

O período de amostragem foi obtido pela seguinte expressão:

$$\Delta t_{Nível} < \frac{\tau_{Nível} + \theta_{nível}}{10} \rightarrow \Delta t_{Nível} \cong 10 \text{ seg.}$$

- Para a malha de pH, da mesma forma que no caso anterior, os tempos de subida $t_{0,353-pH-sub}$ e $t_{0,853-pH-sub}$ são 33 e 111 segundos, respectivamente; os tempos na descida são de $t_{0,353-pH-des}$ e $t_{0,853-pH-des}$ são 64 e 168 segundos, respectivamente. Aplicando-se as equações propostas em (SUNDARESAN; KRISHNASWAMY, 1978), a partir das constantes de tempo de subida ($\tau_{pH-sub} = 52,65 \text{ seg.}$) e descida ($\tau_{pH-des} = 70,2 \text{ seg.}$) e os tempos mortos de subida $\theta_{pH-sub} = 10,38 \text{ seg.}$ e descida $\theta_{pH-des} = 33,84 \text{ seg.}$, a média dos valores da constante de tempo e do tempo morto da malha de pH são:

$$\tau_{pH} = \frac{\tau_{pH-sub} + \tau_{pH-des}}{2} = 61,43 \text{ seg}$$

$$\theta_{pH} = \frac{\theta_{pH-sub} + \theta_{pH-des}}{2} = 22,11 \text{ seg}$$

O cálculo do período de amostragem é realizado da seguinte forma:

$$\Delta t_{pH} < \frac{\tau_{pH} + \theta_{pH}}{10} \rightarrow \Delta t_{pH} \cong 5 \text{ seg}$$

A seguir, calculam-se as frequências mínimas do nível e pH, onde a potência dos sinais GBN está centrada. Estas frequências são estimadas a partir da Equação (3.3), proposta em (GAIKWAD; RIVERA, 1996).

$$\omega \geq \frac{1}{\beta_s \tau_{dom}} \quad (3.3)$$

sendo β_s um parâmetro em função do tempo de acomodação. Em regime estacionário, próximo ao 95%, o parâmetro β_s é igual a 3. O termo τ_{dom} representa a constante dominante do processo. Portanto, os valores de frequência para as malhas do nível e pH são $\omega_{nível} = 0,0015 \text{ rad/s}$ e $\omega_{pH} = 0,004 \text{ rad/s}$, respectivamente.

Com estes valores de frequência e os tempos de amostragem são definidas as probabilidades de não-chaveamento. Em (CHEN; YU, 1997) é proposta a Equação (3.4):

$$p_{n-sw} = \frac{1}{1 + \tan\left(\frac{\omega \cdot \Delta t}{2}\right)} \quad (3.4)$$

portanto, as probabilidades de não-chaveamento para as malhas do nível e pH são $p_{n-sw-nível} = 0,9923$ e $p_{n-sw-pH} = 0,9901$, respectivamente.

Finalmente, as Figuras 3.3 e 3.4 representam os sinais GBN para as malhas do nível e pH com seu espectro de potência correspondente. Cabe ressaltar que a potência dos sinais fica na região de baixa frequência.

Figura 3.3 – Sinal GBN desenvolvido para a malha de nível (acima) e seu espectro de potência (abaixo)

Fonte: Autor

Figura 3.4 – Sinal GBN desenvolvido para a malha de pH (acima) e seu espectro de potência (abaixo)

Fonte: Autor

Os sinais GBN desenvolvidos são aplicados ao processo de neutralização de pH, tal como é mostrado nas Figuras 3.5 e 3.6 para as malhas de nível e pH, respectivamente. As linhas de cor preta representam os *set point* e as linhas de cor cinza são os valores das variáveis de processo (acima); abaixo de cada variável de processo são mostrados as variáveis manipuladas da malha de nível e pH. O tempo de amostragem utilizado para a coleta de dados foi de 5 segundos, o qual representa o valor mínimo entre os tempos de amostragem obtidos das malhas de nível e pH.

Figura 3.5 – Dados coletados das variáveis de saída de nível (acima) e variável manipulada (abaixo) aplicando os sinais GBN

Fonte: Autor

Figura 3.6 – Dados coletados das variáveis de saída de pH (acima) e sinal de controle (abaixo) aplicando os sinais GBN

Fonte: Autor

Para realizar a identificação do processo de neutralização de pH, com os dados coletados das Figuras 3.5 e 3.6, é necessário normalizar os dados

coletados, a fim de não ter problemas de convergência nos algoritmos a utilizar. Para isto, utiliza-se o método de normalização proposto por (CHUANG-STEIN, 1992), a fim de ajustar valores de diversas escalas para um intervalo de referência.

Defina-se X como o valor do teste que pertence ao intervalo $[L_X, U_X]$, sendo L_X e U_X os limites mínimo e máximo da escala. Além disso, define-se também a sendo X_s o novo valor de normalização dentro do intervalo $[L_S, U_S]$, sendo estes últimos os valores mínimo e máximo da nova escala, o qual é obtido mediante a Expressão (3.5).

$$X_s = L_S + (X - L_X) \frac{(U_S - L_S)}{(U_X - L_X)} \quad (3.5)$$

A Equação (3.5) tem que satisfazer a Expressão (3.6) para a qual, X e X_s apresentam a mesma unidade de distância para L_X e L_S , respectivamente, onde a unidade de distância é definida por $(U_X - L_X)$ e $(U_S - L_S)$ sob os dois conjuntos de intervalos de referência.

$$\frac{(X_s - L_S)}{(U_S - L_S)} = \frac{(X - L_X)}{(U_X - L_X)} \quad (3.6)$$

Na normalização dos dados coletados para a identificação do processo de neutralização de pH, foram considerados como valores máximos e mínimos da escala padrão 1 e -1, respectivamente, nas variáveis do processo. A escolha desse intervalo permite que os algoritmos de identificação converjam em um valor constante distinto de zero.

3.3 IDENTIFICAÇÃO MULTIVARIÁVEL DO PROCESSO DE pH

A identificação multivariável permite obter um conjunto de modelos onde uma entrada pode ter correlação com mais de uma saída. Considerando que existam m variáveis de entrada e n variáveis de saída, tal sistema dinâmico multivariável pode ser representado da seguinte forma:

$$\mathbf{A}(q)\mathbf{y}(t) = \mathbf{F}^{-1}(q)\mathbf{B}(q)\mathbf{u}(t) + \mathbf{D}^{-1}(q)\mathbf{C}(q)\mathbf{e}(t) \quad (3.7)$$

sendo $\mathbf{A}(q)$, $\mathbf{B}(q)$, $\mathbf{C}(q)$, $\mathbf{D}(q)$ e $\mathbf{F}(q)$ matrizes polinomiais que dependem do número de entradas e saídas do sistema e com dimensão nxn , nxm , nxn , nxn e nxm , respectivamente; $\mathbf{y}(t)$, $\mathbf{u}(t)$ e $\mathbf{e}(t)$ são os vetores de saída, de entrada e de ruído, respectivamente. De acordo com a Equação (3.7), a combinação dos polinômios permite obter distintas estruturas, tal como referenciadas na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Estruturas de Modelos

Polinômio usado de acordo com a Equação (3.7)	Nome da estrutura de modelo
A, B	ARX (AutoRegressive with eXogenous variable)
A, B, C	ARMAX (AutoRegressive Moving Average with eXogenous variable)
B, F	OE (Output Error)
B, C, D, F	BJ (Box-Jenkins)

Logo, para obter os coeficientes dos polinômios de acordo com a estrutura de modelo escolhida, são aplicados três métodos de identificação, descritos a seguir:

- Método de predição do erro PEM (*Prediction Error Method*): Este método, proposto em (LJUNG, 1999), é baseado no preditor um passo à frente, para um conjunto de dados coletados das entradas e saídas do processo.
- Método Assintótico (ASYM): O método ASYM, proposto em (ZHU, 1998), realiza a identificação de uma forma sistemática, que consiste em: estimar um modelo de alta ordem que apresente uma resposta em frequência próxima ao processo real. Reduzir a ordem do modelo estimado, buscando reduzir a variância em função da ordem elevada e validar o modelo reduzido. Neste trabalho é utilizada a estrutura de modelo BJ.

- Algoritmos MRI: Estes algoritmos fornecem modelos para aplicações com MPC dentro de um amplo horizonte de predição. Em (HUANG; WANG, 1999) é proposto o algoritmo MPEM (do Inglês *Multistep Prediction Error Method*) que minimiza uma função objetivo, filtrando os sinais de entrada e saída e aplicando o preditor um passo à frente na estimativa dos parâmetros do modelo. Em (POTTS et al., 2014) é desenvolvido o algoritmo EMPEM (do Inglês *Enhanced Multistep Prediction Error Method*) baseado nas características dos dois algoritmos anteriores, mas buscando otimizar o modelo do processo e da perturbação.

Na busca dos melhores modelos do processo e perturbação que representem de forma próxima o processo de pH, foram empregados os três métodos de identificação com os dados coletados das entradas (sinal de controle) e saídas (variáveis de saída) do processo, usando um tempo de amostragem de 5 segundos e aplicando os sinais de excitação apresentados na Subseção 3.2.2, considerando os seguintes critérios:

- Na aplicação dos algoritmos MRI, o horizonte de predição para a identificação é calculado dividindo o tempo de acomodação mais alto pelo tempo de amostragem do processo¹⁷. Neste trabalho, adotou-se o valor de 60 para o horizonte de predição.
- Na seleção das ordens dos modelos para o método DI e o método ASYM é realizada uma busca do menor valor da função custo usando o critério FPE proposto em (AKAIKE, 1974) para um passo à frente. As ordens das estruturas de modelo utilizadas pelos algoritmos MRI foram obtidas através do critério FPEP proposto em (POTTS et al., 2012), para 60 passos à frente.

¹⁷ O tempo de acomodação do processo mais alto foi do processo de nível com um valor de 292 segundos e o tempo de amostragem adotado foi o mínimo valor obtido, sendo este igual a 5 segundos.

As ordens para as estruturas dos modelos obtidos em malha fechada são mostradas nos Quadros 3.1 e 3.2 para as malhas de nível e pH, respectivamente.

Quadro 3.1– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de nível

Método	Estrutura	Ordem				
		<i>na</i>	<i>nb</i>	<i>nc</i>	<i>nd</i>	<i>nf</i>
DI	ARX	4	4	----	----	----
	ARMAX	2	4	1	----	----
	OE	----	1	----	----	2
	BJ	----	2	4	2	4
ASYM	BJ	----	4	3	4	4
MRI	MPEM	----	3	4	3	4
	EMPEM	----	4	4	1	4

Fonte: Autor

Quadro 3.2 – Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH

Método	Estrutura	Ordem				
		<i>na</i>	<i>nb</i>	<i>nc</i>	<i>nd</i>	<i>nf</i>
DI	ARX	4	4	----	----	----
	ARMAX	3	3	4	----	----
	OE	----	2	----	----	3
	BJ	----	4	3	2	4
ASYM	BJ	----	3	4	4	4
MRI	MPEM	----	3	3	3	4
	EMPEM	----	4	4	3	4

Fonte: Autor

Os valores obtidos pelos Quadros 3.1 e 3.2, mostram que as ordens dos modelos do processo ficam no intervalo de 2 a 3 e para o modelo da perturbação, as ordens ficam no intervalo de 2 a 4, para as malhas de nível e pH, respectivamente.

Finalmente, com as ordens obtidas de ambas as malhas, os Quadros 3.3 e 3.4 mostram os modelos TISO (Two-Input Single-Output) para as malhas de nível e pH, respectivamente.

Quadro 3.3 – Modelos TISO para a malha de nível

Saídas\Entradas		Sinal de Controle Nível	Sinal de Controle pH
ARX	Nível	$\frac{-0,0018955 z^{-1} (1 + 1,272z^{-1}) (1 - 0,5828z^{-1} + 0,5397z^{-2})}{(1 - z^{-1}) (1 - 0,4195z^{-1}) (1 + 0,3753z^{-1} + 0,07467z^{-2})} xz^{-2}$	$\frac{0,0011381 z^{-1} (1 + 0,6203z^{-1}) (1 - 0,6809z^{-1}) (1 - 0,3198z^{-1})}{(1 - z^{-1}) (1 - 0,4195z^{-1}) (1 + 0,3753z^{-1} + 0,07467z^{-2})} xz^{-3}$
ARMAX	Nível	$\frac{-0,0018865 z^{-1} (1 - 1,002z^{-1}) (1 + 0,7388z^{-1} + 0,9034z^{-2})}{1 - 2,001z^{-1} + 1,001z^{-2}} xz^{-2}$	$\frac{0,0013559 z^{-1} (1 - 0,9783z^{-1}) (1 - 0,6719z^{-1}) (1 + 0,3702z^{-1})}{1 - 2,001z^{-1} + 1,001z^{-2}} xz^{-3}$
OE	Nível	$\frac{-0,0001821z^{-1}}{(1 - 0,9802z^{-1}) (1 - 0,9654z^{-1})} xz^{-2}$	$\frac{-0,002378z^{-1}}{(1 - z^{-1}) (1 + 0,9788z^{-1})} xz^{-3}$
BJ	Nível	$\frac{-0,0018792 z^{-1} (1 + 1,333z^{-1})}{(1 - 0,9991 z^{-1}) (1 - 0,7057 z^{-1}) (1 + 1,053 z^{-1} + 0,879 z^{-2})} xz^{-2}$	$\frac{0,0014783z^{-1} (1 - 0,6196z^{-1})}{(1 - 0,9992z^{-1}) (1 - 0,5096z^{-1}) (1 + 0,5132z^{-1} + 0,6049z^{-2})} xz^{-4}$
ASYM BJ	Nível	$\frac{-0,00034801z^{-1} (1 + 2,268z^{-1}) (1 - 1,898z^{-1} + 2,639z^{-2})}{(1 - 0,8039z^{-1}) (1 - 0,9982z^{-1}) (1 + 0,608z^{-1} + 0,501z^{-2})} xz^{-2}$	$\frac{0,0009265 z^{-1} (1 - 0,3776z^{-1}) (1 + 1,59z^{-1} + 0,6471z^{-2})}{(1 + 0,9501z^{-1}) (1 + 0,2985z^{-1}) (1 + 0,2686z^{-1} + 0,3471z^{-2})} xz^{-4}$
MPEM	Nível	$\frac{0,00081968 z^{-1} (1 - 2,926z^{-1}) (1 - 0,9599z^{-1})}{(1 + 0,816z^{-1}) (1 - 0,8798z^{-1}) (1 - 0,9367z^{-1}) (1 - 0,9988z^{-1})} xz^{-1}$	$\frac{-0,0003266z^{-1} (1 - 2,005z^{-1}) (1 - 0,6006z^{-1})}{(1 + 0,9967z^{-1}) (1 - z^{-1}) (1 - 1,685z^{-1} + 0,7915z^{-2})} xz^{-2}$
EMPEM	Nível	$\frac{0,0014617z^{-1} (1 - 2,749z^{-1}) (1 - 0,9643z^{-1}) (1 - 0,8288z^{-1})}{(1 - z^{-1}) (1 - 0,2022z^{-1}) (1 - 1,873z^{-1} + 0,8771z^{-2})} xz^{-1}$	$\frac{-0,00035969 z^{-1} (1 - 2,937z^{-1}) (1 + 1,15z^{-1} + 0,9226z^{-2})}{(1 - z^{-1}) (1 + 0,2532z^{-1}) (1 + 1,028z^{-1} + 0,9903z^{-2})} xz^{-2}$

Fonte: Autor

Quadro 3.4 – Modelos TISO para a malha de pH

Saídas\ Entradas		Sinal de Controle Nível	Sinal de Controle pH
ARX	pH	$\frac{0,00087382 z^{-1} (1 - 0,9411z^{-1}) (1 + 0,4426z^{-1} + 0,8467z^{-2})}{(1 - 0,9995z^{-1}) (1 - 0,1579z^{-1}) (1 + 0,2136z^{-1} + 0,1087z^{-2})} xz^{-16}$	$\frac{0,0026361z^{-1} (1 + 0,4737z^{-1}) (1 - 0,5016z^{-1} + 0,3652z^{-2})}{(1 - 0,9995z^{-1}) (1 - 0,1579z^{-1}) (1 + 0,2136z^{-1} + 0,1087z^{-2})} xz^{-1}$
ARMAX	pH	$\frac{0,00021269 z^{-1} (1 - 1,847z^{-1} + 0,8572z^{-2})}{(1 - 0,9959z^{-1}) (1 - 1,817z^{-1} + 0,8318z^{-2})} xz^{-16}$	$\frac{0,0026008z^{-1} (1 - 1,844z^{-1} + 0,8659z^{-2})}{(1 - 0,9959z^{-1}) (1 - 1,817z^{-1} + 0,8318z^{-2})} xz^{-1}$
OE	pH	$\frac{5,9804e^{-5} z^{-1} (1 - 0,98z^{-1})}{(1 + 0,9948z^{-1}) (1 - 1,992z^{-1} + 0,9925z^{-2})} xz^{-16}$	$\frac{0,00052843 z^{-1} (1 - 0,9984z^{-1})}{(1 - 0,8449z^{-1}) (1 - 1,996z^{-1} + 0,9959z^{-2})} xz^{-1}$
BJ	pH	$\frac{0,00079357 z^{-1} (1 + 1,068z^{-1}) (1 - 1,177z^{-1} + 1,627z^{-2})}{(1 + 0,997z^{-1}) (1 - 0,6426z^{-1}) (1 - 0,04887z^{-1} + 0,7714z^{-2})} xz^{-37}$	$\frac{0,0010345z^{-1} (1 - 0,8463z^{-1}) (1 + 0,02609z^{-1} + 0,5018z^{-2})}{(1 - 0,9296z^{-1}) (1 - 0,9963z^{-1}) (1 - 0,8087z^{-1} + 0,7047z^{-2})} xz^{-1}$
ASYM BJ	pH	$\frac{-2,6003e^{-5} z^{-1} (1 + 0,4967z^{-1} + 1,122z^{-2})}{(1 - 0,9945z^{-1}) (1 + 0,9826z^{-1}) (1 + 0,58z^{-1} + 0,9994z^{-2})} xz^{-37}$	$\frac{0,0012396 z^{-1} (1 + 0,4647z^{-1} + 1,344z^{-2})}{(1 - 0,9993z^{-1}) (1 + 0,4831z^{-1}) (1 - 0,4241z^{-1} + 0,4203z^{-2})} xz^{-1}$
MPEM	pH	$\frac{-0,0011501 z^{-1} (1 - 1,071z^{-1}) (1 - 0,9887z^{-1})}{(1 + 0,6425z^{-1}) (1 - 0,524z^{-1}) (1 - 0,9676z^{-1}) (1 - z^{-1})} xz^{-6}$	$\frac{0,00058633z^{-1} (1 - 0,7625z^{-1}) (1 + 0,7377z^{-1})}{(1 - 0,9127z^{-1}) (1 - 0,9967z^{-1}) (1 - 0,9525z^{-1} + 0,7019z^{-2})} xz^{-1}$
EMPEM	pH	$\frac{-0,0012562 z^{-1} (1 + 0,8916z^{-1}) (1 - 0,9383z^{-1}) (1 - 1,136z^{-1})}{(1 + 0,9721z^{-1}) (1 - z^{-1}) (1 - 0,9074z^{-1}) (1 + 0,2115z^{-1})} xz^{-6}$	$\frac{-0,0011353z^{-1} (1 - 3,303z^{-1}) (1 - 1,745z^{-1} + 0,7834z^{-2})}{(1 - 0,9963z^{-1}) (1 - 0,8882z^{-1}) (1 - 0,6138z^{-1}) (1 - 0,3711z^{-1})} xz^{-1}$

Fonte: Autor

CAPÍTULO 4

4. VALIDAÇÃO DOS MODELOS MATEMÁTICOS DO PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH

Os modelos matemáticos obtidos para o processo de neutralização de pH têm a finalidade de descrever matematicamente a resposta do nível e do pH. Por isto, visando validar esses modelos matemáticos, os métodos propostos no Capítulo 2 são aplicados ao conjunto de modelos do processo, comparando os dados reais e os dados preditos pelos modelos, com o objetivo de obter um modelo adequado, que permita representar as partes dinâmicas e estacionárias do sistema.

A seguir, são aplicados os métodos de validação propostos aos modelos das malhas de nível e pH, a fim de realizar uma análise heurística (validação visual) e estatística.

4.1 VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO TESTES NÃO-PARAMÉTRICOS

Os testes não-paramétricos são utilizados para validar os modelos obtidos para as malhas de nível e pH. Para o cálculo do erro relativo entre o valor crítico e o valor obtido pelo teste, utiliza-se a equação (4.1).

$$e_{teste-não\ paramétrico}(\%) = \frac{Valor\ estatístico - Valor\ Crítico}{Valor\ Crítico} \quad (4.1)$$

Também, se a hipótese nula for aceita, o valor obtido será 0, caso for rejeitada, o valor obtido será 1.

Em seguida, os modelos MISO (do Inglês *Multiple Input – Single Output*) da malha de nível são validados, aplicando-se os testes estatísticos propostos na Subseção 2.1.3.

O teste não-paramétrico proposto por Kolgomorov e Smirnov é utilizado para avaliar o erro gerado pelos dados reais e preditos para a malha do nível, tal como expressa o Quadro 4.1.

Quadro 4.1 – Resultados do teste não-paramétrico Kolgomorov-Smirnov para os modelos obtidos da malha de nível

Método	Estrutura	Kolgomorov-Smirnov (K-S)		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	0,2529	0,03642	1
	ARMAX	0,1083		1
	OE	0,1823		1
	BJ	0,0794		1
ASYM	BJ	0,2721		1
MRI	MPEM	0,0662		1
	EMPEM	0,0515		1

Fonte: Autor

De acordo com os valores obtidos, todos os modelos foram rejeitados, considerando um nível de significância de 5%. Em contrapartida, os modelos com maior proximidade da região de confiabilidade foram EMPEM e MPEM, que apresentaram diferenças de 41,40% e 81,78%, respectivamente.

Avaliando os resultados de forma gráfica, a Figura 4.1 mostra as probabilidades acumuladas reais (linha de cor preta) e as empíricas (linha de cor cinza), esta última utilizando uma distribuição normal.

Figura 4.1 – Probabilidade cumulativa do erro normalizado dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

Pode-se apreciar que a probabilidade cumulativa gerada pelo modelo BJ apresenta um bom acompanhamento sobre a probabilidade empírica; isto reflete o

valor estatístico obtido sobre $\alpha = 5\%$. Os resultados dos modelos ARX, ARMAX, OE e ASYM-BJ apresentam variações da probabilidade cumulativa real por cima e por baixo da probabilidade empírica para um erro normalizado entre -1 a 2,5. Para os modelos BJ, MPEM e EMPEM o acompanhamento da probabilidade cumulativa e o erro normalizado apresentam poucas diferenças para $\alpha = 5\%$ imposto.

Em seguida, os modelos obtidos da malha de nível são avaliados utilizando o teste de Anderson-Darling, obtendo-se os resultados mostrados no Quadro 4.2.

Quadro 4.2 – Resultados do teste não-paramétrico Anderson-Darling para os modelos obtidos da malha de nível

Método	Estrutura	Anderson-Darling (A-D)		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	116,1166	0,7514	1
	ARMAX	32,2072		1
	OE	64,6453		1
	BJ	13,0531		1
ASYM	BJ	130,1330		1
MRI	MPEM	12,5358		1
	EMPEM	9,6083		1

Fonte: Autor

Os resultados mostram que os erros normalizados gerados pelos modelos identificados não provêm de uma distribuição normal, pois a estatística AD é maior que o valor crítico e, portanto a H_0 foi rejeitada.

Avaliando-se o teste estatístico Shapiro-Wilk, o Quadro 4.3 mostra os resultados obtidos para os modelos da malha de nível, a fim de avaliar a hipótese nula e se o erro normalizado apresenta características de uma distribuição normal.

Quadro 4.3 – Resultados do teste não-paramétrico Shapiro-Wilk para os modelos obtidos da malha de nível

Método	Estrutura	Shapiro-Wilk (W)		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	0,7962	0,947	1
	ARMAX	0,9223		1
	OE	0,8909		1
	BJ	0,9741		0
ASYM	BJ	0,7820		1
MRI	MPEM	0,9547		0
	EMPEM	0,9678		0

Fonte: Autor

De acordo com os valores estatísticos W , os modelos BJ, EMPEM e MPEM foram aceitos para o nível de significância de 5%. Os modelos ARX, ARMAX, OE e ASYM BJ foram rejeitados, sendo este último o que obteve o menor valor do índice W .

Por último, o teste estatístico de Wilcoxon foi aplicado aos modelos identificados para a malha de nível, através da análise da mediana da diferença das amostras. Os resultados são mostrados no Quadro 4.4.

Os resultados obtidos indicam que os modelos ARMAX, BJ e MPEM apresentam uma distribuição de forma simétrica em torno do zero para os erros gerados. Os dados preditos gerados pelos modelos ARX, OE, ASYM-BJ e EMPEM apresentam diferenças significativas dos dados reais e, portanto é rejeitada a hipótese H_0 , sendo este último modelo o que obteve o índice mais próximo à região de confiabilidade, dentre os modelos rejeitados, com uma diferença do 15,22%.

Quadro 4.4 – Resultados do teste não-paramétrico Wilcoxon para os modelos obtidos da malha de nível

Método	Estrutura	Wilcoxon		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	10,3361	1,96	1
	ARMAX	1,6863		0
	OE	11,6189		1
	BJ	0,4259		0
ASYM	BJ	16,1965		1
MRI	MPEM	0,6132		0
	EMPEM	2,2584		1

Fonte: Autor

Finalizada a análise dos modelos para a malha de nível, em seguida avaliam-se os modelos identificados da malha de pH.

Primeiro, aplica-se o teste não-paramétrico de Kolgomorov-Smirnov ao erro normalizado gerado pelos dados reais e preditos fornecidos pelos modelos da malha de pH, obtendo como resultado o Quadro 4.5.

Quadro 4.5 – Resultados do teste não-paramétrico Kolgomorov-Smirnov para os modelos obtidos da malha de pH

Método	Estrutura	Kolgomorov-Smirnov		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	0,1184	0,03642	1
	ARMAX	0,1631		1
	OE	0,0862		1
	BJ	0,0726		1
ASYM	BJ	0,1409		1
MRI	MPEM	0,0423		1
	EMPEM	0,0380		1

Fonte: Autor

De acordo com os valores obtidos no Quadro 4.5, percebe-se que nenhum dos modelos passou no teste de hipóteses, devido a que a estatística obtida é maior que o valor crítico imposto para um nível de significância $\alpha = 5\%$. Os modelos EMPEM e MPEM apresentam uma proximidade ao valor crítico com diferenças de 4,33% e 16,14%, respectivamente.

As probabilidades acumuladas reais (linha de cor preta) e as empíricas (linha de cor cinza), esta última utilizando uma distribuição normal, são mostradas na Figura 4.2.

Figura 4.2 – Probabilidade cumulativa do erro normalizado para os modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Segundo a Figura 4.2, as probabilidades cumulativas geradas pelos modelos EMPEM, MPEM e BJ apresentam um bom acompanhamento sobre a probabilidade empírica; isto reflete o valor estatístico obtido para uma região de confiabilidade de 95%. Os resultados dos dados gerados pelo modelo OE apresentam poucas variações da probabilidade cumulativa real por cima e por baixo da probabilidade empírica para um erro normalizado entre -2 a 1. Já nos modelos ARX, ARMAX e ASMY-BJ as variações da probabilidade cumulativa real são mais notórias por cima e por baixo da probabilidade empírica para um erro normalizado entre -2 a 2.

Em seguida, é utilizado o teste estatístico de Anderson-Darling. Os resultados da aplicação do teste são mostrados no Quadro 4.6.

Quadro 4.6 – Resultados do teste não-paramétrico Anderson-Darling para os modelos obtidos da malha de pH

Método	Estrutura	Anderson-Darling		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	32,5614	0,7514	1
	ARMAX	60,4454		1
	OE	15,9337		1
	BJ	7,3697		1
ASYM	BJ	43,2987		1
MRI	MPEM	4,3338		1
	EMPEM	4,3009		1

Fonte: Autor

Os valores obtidos do Quadro 4.6 mostram que os erros normalizados gerados pelos modelos identificados evidenciam, estatisticamente, que não provêm de uma distribuição normal, pois foi rejeitada a hipótese nula.

O teste não paramétrico de Shapiro–Wilk é utilizado para avaliar o erro normalizado gerado pelos dados reais e preditos para a malha de pH. O Quadro 4.7 mostra os resultados da aplicação do teste.

Quadro 4.7 – Resultados do teste não-paramétrico Shapiro-Wilk para os modelos obtidos da malha de pH

Método	Estrutura	Shapiro-Wilk		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	0,9195	0,947	1
	ARMAX	0,8795		1
	OE	0,9717		0
	BJ	0,9832		0
ASYM	BJ	0,9087		1
MRI	MPEM	0,9872		0
	EMPEM	0,9862		0

Fonte: Autor

De acordo com os valores obtidos, pode-se observar que os valores estatísticos W permitem aceitar a hipótese nula para o nível de significância estabelecido, dos modelos MPEM, EMPEM, BJ e OE, pois a estatística é maior que o valor crítico e, portanto isto permite enfatizar a proximidade do erro normalizado a uma distribuição normal. Já para os modelos ARX, ARMAX e ASYM-BJ foram rejeitadas as hipóteses nulas, devido a que o índice estatístico obtido é menor que o valor crítico estabelecido.

Por último, o teste não-paramétrico de Wilcoxon foi aplicado aos dados preditos gerados pelos modelos identificados para a malha de pH, para serem comparados com os dados reais do processo. Os resultados obtidos são mostrados no Quadro 4.8.

Quadro 4.8 – Resultados do teste não-paramétrico Wilcoxon para os modelos obtidos da malha de pH

Método	Estrutura	Wilcoxon		
		Índice Estatístico	Valor Crítico	H_0
DI	ARX	8,6738	1,96	1
	ARMAX	18,7106		1
	OE	10,3389		1
	BJ	1,0818		0
ASYM	BJ	0,0059		0
MRI	MPEM	1,3348		0
	EMPEM	2,2092		1

Fonte: Autor

Os resultados do Quadro 4.8 indicam que os modelos ASYM-BJ, BJ e MPEM apresentam uma distribuição de forma simétrica em torno do zero aos erros gerados pelos dados reais e preditos. Os dados preditos gerados pelos modelos ARX, ARMAX, OE e EMPEM apresentam divergências significativas com os dados reais e portanto é rejeitada a hipótese nula, sendo este último próximo à região de confiabilidade com uma diferença de 12,71%.

Baseado nos testes não-paramétricos, a validação mostrou que os modelos MPEM e EMPEM para a malha de nível e pH, além de passar nos testes de hipótese Shapiro-Wilk e de Wilcoxon, estiveram próximos de passar nos testes K-S e A-D. Portanto, são estas as estruturas a escolher para representar os modelos das malhas de nível e pH.

4.2 VALIDAÇÃO DE MODELOS REALIZANDO ANÁLISES VISUAIS

As técnicas de análise visual utilizadas para validar modelos permitem complementar outros métodos de validação, pois facilitam a identificação de comportamentos dos valores dos dados e aproveitam a capacidade de percepção

visual humana. Desta forma, os erros normalizados gerados pelos dados reais e preditos são analisados visualmente, utilizando o diagrama de caixas (*boxplot*), o histograma com ajuste normal e o gráfico Quantil–Quantil; a resposta ao degrau dos modelos identificados de nível e pH é aplicada a fim de avaliar o ganho, a constante de tempo e o tempo de acomodação. Por tal razão, os modelos obtidos para a malha do nível são avaliados a seguir, aplicando as técnicas heurísticas expostas anteriormente.

Os erros normalizados em função dos dados reais e preditos dos modelos obtidos da malha de nível são mostrados na Figura 4.3.

Figura 4.3 – Análise dos resíduos dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

De acordo com os valores obtidos e considerando o análise do resíduo da Figura 2.2, pode-se observar que os modelos ARMAX, BJ, MPPEM e EMPEM mostram que a variância é menor quando as previsões são próximas à média; o

modelo OE mostra dependência do erro e os modelos ARX e ASYM-BJ apresentam uma distribuição próxima à uniformidade, mas com *outliers* na parte positiva e negativa da média.

Em seguida, a detecção de *outliers* pode ser mais notória quando se utiliza o gráfico *boxplot*. A Figura 4.4 mostra os *boxplots* para os erros normalizados gerados pelos dados reais e preditos dos modelos da malha de nível.

Figura 4.4 – *Boxplot* do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

Segundos os valores obtidos na Figura 4.4, percebe-se que o modelo ARX e ASYM-BJ não gera *outliers* para a faixa interquartil (*IRQ*) assumida. O modelo ARMAX gera *outliers* na região negativa para os *IRQ* impostos. Para os modelos OE, BJ, MPEM e EMPEM a presença de *outliers* é mais notória no *IRQ* positivo.

Em seguida, a Figura 4.5 mostra os histogramas com ajuste normal para os erros normalizados dos modelos da malha de nível.

Figura 4.5 – Histograma com ajuste normal do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

Segundo os gráficos obtidos, percebe-se que as estruturas BJ, MPEM e EMPEM mostram que as distribuições dos erros normalizados apresentam um

ajuste próximo à distribuição normal, mas com alguns valores fora do intervalo de distribuição em torno da média dos erros. Os erros dos modelos ARX e ASYM-BJ mostram um tipo de distribuição assimétrica positiva, pois o maior número de dados se concentra no intervalo de 0 a -1. As estruturas ARMAX e OE apresentam dispersão dos erros nas regiões positivas e negativas e fora da média.

Para verificar se existe uma relação linear entre os erros normalizados com uma distribuição normal, a Figura 4.6 mostra o diagrama Quantil–Quantil dos erros gerados pelos modelos da malha de nível.

Figura 4.6 – Diagrama Quantil – Quantil do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

De acordo com os gráficos obtidos, mostra-se que o modelo BJ apresenta uma maior linearidade entre os erros normalizados e a distribuição normal, seguido dos modelos MPEM e EMPEM. Os erros gerados pelos modelos ARX e

ASYM-BJ apresentam um comportamento de distribuição platicúrtica, ou seja, as amostras tendem a dispersar-se mais que a distribuição normal. Já os modelos ARMAX e OE apresentam distribuições assimétricas à direita e esquerda, respectivamente.

Em seguida, avaliam-se os modelos identificados para a malha de pH.

Primeiro, os erros normalizados e os dados preditos gerados pelos modelos identificados da malha de pH são representados, tal como é mostrado na Figura 4.7, a fim de avaliar a distribuição do erro à medida em que aumenta o número de predições.

Figura 4.7 – Análise dos resíduos dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Segundo os resultados obtidos e considerando o análise do resíduo da Figura 2.2, pode-se observar que os modelos ARX, ARMAX e ASYM-BJ apresentam erros dependentes. Os modelos OE e BJ mostram distribuições dos erros de forma independente, mas com a presença de *outliers*. Para os modelos

MPEM e EMPEM, a variância é menor quando os valores preditos estão próximos da média.

Para obter uma melhor visualização dos *outliers*, a Figura 4.8 mostra o diagrama *boxplot* para os erros normalizados gerados pelos dados reais e preditos dos modelos da malha de pH.

Figura 4.8 – *Boxplot* do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH.

Fonte: Autor

Da Figura 4.8 se pode perceber que os modelos ARX, ARMAX, OE e ASYM-BJ não geram *outliers* para a faixa interquartil (IRQ) assumida. O modelo BJ gera *outliers* na região positiva, com valor da mediana próximo do zero e para os modelos MPEM e EMPEM a presença de *outliers* é mais notória tanto no IRQ positivo como negativo, com um valor da mediana igual a zero.

Em seguida é realizado um ajuste normal dos erros normalizados gerados pelos modelos obtidos da malha de pH através de um histograma, tal como se mostra na Figura 4.9.

Figura 4.9 – Histograma com ajuste normal do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Avaliando-se os resultados obtidos, percebe-se que as estruturas MPEM, EMPEM mostram distribuições dos erros normalizados com um bom ajuste a uma distribuição normal. Para os modelos OE e BJ, a distribuição dos erros normalizados apresenta dispersões na região negativa, o que resulta em uma

distribuição assimétrica negativa. Por último, os erros normalizados gerados pelos modelos ARX, ARMAX e ASYM-BJ apresentam uma dispersão dos erros nas regiões positivas e negativas e fora da média.

Para verificar a linearidade entre os erros normalizados e a distribuição normal são gerados os diagramas Quantil–Quantil, tal como se mostra na Figura 4.10 para os modelos da malha de pH.

Figura 4.10 – Diagrama Quantil – Quantil do erro normalizado gerado pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Segundo os gráficos obtidos, os modelos OE, BJ, MPEM e MPEM apresentam uma linearidade próxima dos erros normalizados e a distribuição normal. A distribuição platicúrtica é notada nos erros dos modelos ARX e ASYM-BJ. Já o modelo ARMAX apresenta uma distribuição assimétrica para a esquerda. Assim, a validação visual permitiu analisar o erro gerado pelos dados reais e preditos para as malhas de nível e pH.

Para as malhas de nível e pH, os modelos BJ, MPEM e foram as opções adequadas para representar o comportamento do erro, considerando as características de i.i.d., a distribuição normal e a curva Quantil-Quantil.

4.3 VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO MÉTRICAS ESTATÍSTICAS

Os cálculos de métricas estatísticas comparam um conjunto de valores estimados ou preditos, proporcionados por um modelo, com dados reais de um sistema e assim podem determinar quão bem o modelo estimado pode fazer previsões próximas à realidade. Por esta razão, os modelos identificados para as malhas de nível e pH são avaliados a fim de realizar uma escolha ótima, baseada no desempenho da predição dos modelos.

Primeiro, avaliam-se os modelos identificados para a malha de nível. O Quadro 4.9 mostra os resultados da aplicação das métricas vistas na Seção 2.3.

Quadro 4.9 – Métricas estatísticas geradas pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de nível

Método	Estrutura	Eficiência	TIC	d (Willmott)	Russell	Sprague e Geers	ANOVA		
							Índice Estatístico T	Valor crítico	H_0
DI	ARX	6,62%	0,4022	0,9808	0,2314	0,2661	6,8937	1,96	1
	ARMAX	56,28%	0,1827	0,9930	0,0965	0,1258	-24,7018		1
	OE	36,32%	0,3085	0,9864	0,1211	0,3259	0,0000		0
	BJ	79,86%	0,0859	0,9965	0,0348	0,0676	0,2382		0
ASYM	BJ	6,13%	0,5505	0,9832	0,1955	0,4895	-27,2954		1
MRI	MPEM	82,82%	0,0716	0,9972	0,0404	0,0457	0,0000		0
	EMPEM	81,71%	0,0780	0,9969	0,0269	0,0644	0,0000		0

Fonte: Autor

Realizando uma análise dos resultados do Quadro 4.9, surgem os seguintes comentários:

- Quanto ao índice de eficiência do modelo, percebe-se que os maiores índices de eficiência foram obtidos pelos modelos MPEM, EMPEM e BJ, com valores de 82,82%, 81,71% e 79,86%, respectivamente. O menor índice obtido foi para o modelo ASYM-BJ com um valor de 6,13%, demonstrando que este modelo não consegue prever corretamente o conjunto de dados utilizados para a validação cruzada. Isto também é refletido pelos índices TIC, Willmott, Russell e Sprague e Geers.
- Finalmente, a estatística de ANOVA indicou que os modelos OE, BJ, MPEM e EMPEM passaram no teste H_0 , pois o valor obtido é menor que o valor crítico.

Por outro lado, a estatística de Theil fornece valores da média U_m , variância U_s e covariância U_c e as métricas de Russell e Sprague e Geers que fornecem valores da magnitude e fase entre os dados reais e preditos. O Quadro 4.10 mostra os resultados obtidos para os modelos da malha de nível.

Quadro 4.10 – Coeficientes de Theil, Russell e Sprague e Geers gerados pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de nível

Método	Estrutura	Theil			Russell		Sprague e Geers	
		Um	Us	Uc	Magnitude	Fase	Magnitude	Fase
DI	ARX	0,0000	0,0025	0,9975	-0,0332	0,2632	-0,0388	0,2633
	ARMAX	0,0000	0,0174	0,9822	0,0399	0,1160	0,0494	0,1157
	OE	0,0000	0,2705	0,7295	-0,2197	0,1720	-0,2767	0,1721
	BJ	0,0000	0,0621	0,9379	-0,0357	0,0530	-0,0419	0,0530
ASYM	BJ	0,0000	0,1412	0,8584	-0,2707	0,3492	-0,3430	0,3492
MRI	MPEM	0,0000	0,0004	0,9996	0,0025	0,0456	0,0029	0,0457
	EMPEM	0,0000	0,0802	0,9198	-0,0368	0,0477	-0,0432	0,0477

Fonte: Autor

Os resultados obtidos para os coeficientes de Theil mostram que para todos os modelos, os *bias* foram iguais a zero. No caso do erro da variância e da covariância, os modelos MPEM e OE obtiveram valores máximos e mínimos comparados com os outros modelos.

Para os valores de magnitude e fase fornecidos pela métrica de Russell, os valores máximos e mínimos obtidos foram dos modelos ASYM-BJ e MPEM, respectivamente, o que significa que o modelo MPEM conseguiu prever melhor o conjunto de dados de validação; já o modelo ASYM-BJ apresenta erros nas previsões na quantificação da magnitude e fase. Este raciocínio é corroborado com o resultado obtido pelas métricas de Sprague e Geers.

Em seguida, são avaliados os modelos identificados da malha de pH, cujos resultados são mostrados no Quadro 4.11.

Quadro 4.11 – Métricas estatísticas geradas pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de pH

Método	Estrutura	Eficiência	TIC	d (Willmott)	Russell	Sprague e Geers	ANOVA		
							Índice Estatístico T	Valor crítico	H_0
DI	ARX	-107,88	0,6692	0,9785	0,1626	1,2984	-7,6621	1,96	1
	ARMAX	11,76	0,4385	0,9850	0,1721	0,6989	-48,5488		1
	OE	72,54	0,1283	0,9960	0,0508	0,1049	-35,6923		1
	BJ	80,14	0,0941	0,9971	0,0530	0,0602	-1,5564		0
ASYM	BJ	-14,24	0,5089	0,9829	0,2802	0,3745	-5,7730		1
MRI	MPEM	89,92	0,0480	0,9985	0,0262	0,0316	0,0000		0
	EMPEM	88,36	0,0558	0,9983	0,0281	0,0391	0,0000		0

Fonte: Autor

A análise dos resultados do Quadro 4.11 é realizada a seguir:

- Os índices de eficiência dos modelos MPEM, EMPEM e BJ, com valores de 89,92%, 88,36% e 80,14%, respectivamente, demonstram que estas estruturas conseguem prever, de forma coerente, o conjunto de dados utilizados para a validação cruzada. Já as

estruturas ARX e ASYM-BJ, com valores de -107,88% e -14,24%, respectivamente, indicam que tiveram as piores predições. O raciocínio destes resultados também pode ser corroborado pelos índices TIC, Willmott, Russell e Sprague e Geers.

- Aplicando-se a estatística de ANOVA, os modelos MPEM, EMPEM e BJ passaram no teste H_0 , pois o valor obtido foi menor que o valor crítico.

A seguir, a estatística de Theil, que fornece valores da média U_m , variância U_s e covariância U_c e as métricas de Russell e Sprague e Geers que fornecem valores da magnitude e fase entre os dados reais e preditos são mostradas no Quadro 4.12 para os modelos da malha de pH.

Quadro 4.12 – Coeficientes de Theil, Russell e Sprague e Geers gerados pelos dados reais e preditos dos modelos obtidos para a malha de pH

Método	Estrutura	Theil			Russell		Sprague e Geers	
		U_m	U_s	U_c	Magnitude	Fase	Magnitude	Fase
DI	ARX	0,0000	0,3251	0,6748	0,4451	0,4055	1,2334	0,4057
	ARMAX	0,0000	0,3159	0,6832	0,3119	0,2441	0,6549	0,2442
	OE	0,0000	0,0675	0,9318	0,0545	0,0791	0,0689	0,0791
	BJ	0,0000	0,0008	0,9992	0,0047	0,0600	0,0053	0,0600
ASYM	BJ	0,0000	0,0223	0,9777	0,1158	0,3367	0,1636	0,3369
MRI	MPEM	0,0000	0,0076	0,9924	-0,0072	0,0305	-0,0083	0,0305
	EMPEM	0,0000	0,0246	0,9754	-0,0149	0,0351	-0,0173	0,0351

Fonte: Autor

Os resultados obtidos para os coeficientes de Theil mostram que todos os modelos apresentaram *bias* iguais a zero. As menores variâncias foram obtidas pelos modelos MPEM e BJ, com valores de 0,0076 e 0,0008, respectivamente, e os maiores valores da covariância também foram obtidos pelos modelos MPEM e BJ, com valores de 0,9924 e 0,9992, respectivamente.

Os valores de magnitude e fase fornecidos pela métrica de Russell e Sprague e Geers, indicam que os menores valores de magnitude, próximos de

zero, foram gerados pelos modelos MPEM e BJ, respectivamente. Já o maior problema nas predições foi da estrutura ARX, que teve um desempenho baixo comparado com as demais estruturas.

As validações métricas permitem avaliar a eficiência do modelo quanto à sua capacidade de predição. Para as malhas de nível e pH, os modelos MPEM, EMPEM e BJ apresentaram melhor eficiência para todas as estatísticas métricas aplicadas, sendo estas estruturas as mais adequadas para representar o processo de pH.

4.4 VALIDAÇÃO DE MODELOS APLICANDO OS CRITÉRIOS DE SELEÇÃO DE MODELOS

Os métodos de seleção de modelos baseados na teoria da informação estimam um parâmetro através do log da verossimilhança (vide Equação (2.39)), em função dos dados observados e do número de parâmetros do modelo. Esta estimativa é utilizada como um critério para comparar um conjunto de modelos, considerando que o modelo será escolhido como ótimo quando se obtêm os menores valores para cada critério de seleção aplicado. A seguir, são aplicados os critérios de informação, propostos por (AKAIKE, 1974), (SCHWARZ, 1978) e (HANNAN; QUINN, 1979), para os conjuntos de modelos das malhas de nível e pH.

Os modelos identificados da malha de nível são avaliados através dos critérios de informação, mostrando os resultados no Quadro 4.13.

Quadro 4.13 – Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de nível

Método	Estrutura	Critérios de informação		
		AIC	BIC	HQ
DI	ARX	-2,292	-2,229	-2,269
	ARMAX	-4,725	-4,668	-4,704
	OE	-3,348	-3,296	-3,329

	BJ	-6,512	-6,418	-6,477
ASYM	BJ	-2,318	-2,198	-2,273
MRI	MPEM	-6,945	-6,842	-6,904
	EMPEM	-6,773	-6,663	-6,732

Fonte: Autor

Dos resultados obtidos, pode-se perceber que o modelo MPEM obteve os menores valores de AIC, BIC e HQ com valores de -6,945, -6,842 e -6,904, respectivamente e como pior desempenho, o modelo ASYM-BJ obteve maiores valores de AIC, BIC e HQ, sendo estes -2,318, -2,198 e -2,273, respectivamente.

Para os modelos identificados da malha de pH, o Quadro 4.14 mostra os resultados obtidos dos critérios AIC, BIC e HQ.

Quadro 4.14 – Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de pH

Método	Estrutura	Critérios de informação		
		AIC	BIC	HQ
DI	ARX	1,217	1,280	1,241
	ARMAX	-1,770	-1,702	-1,744
	OE	-5,39	-5,344	-5,377
	BJ	-5,451	-5,341	-5,410
ASYM	BJ	-0,605	-0,490	-0,562
MRI	MPEM	-7,327	-7,223	-7,2880
	EMPEM	-6,922	-6,802	-6,877

Fonte: Autor

Segundo os resultados obtidos, pode-se perceber que os menores valores de AIC, BIC e HQ foram obtidos pelo modelo MPEM com valores de -7,327, -7,223 e -7,288, respectivamente. Já, os maiores valores de AIC, BIC e HQ foram gerados pelo modelo ASYM-BJ com valores de -0,605, -0,490 e -0,562, respectivamente, concluindo que este modelo teve um desempenho pobre nas

predições dos dados de validação cruzada. Os modelos restantes ficaram no intervalo de -6,9 a -1,2, -6,8 a -1,3 e -6,9 a -1,2, respectivamente.

Os critérios de seleção foram utilizados para avaliar o comportamento, a eficiência e consistência dos modelos, frente a um conjunto de amostras e a quantidade de parâmetros dos modelos.

Tanto para a malha de nível como a de pH, o modelo MPEM apresentou uma melhor eficiência para todos os critérios de seleção descritos na Seção 2.4, seguido das estruturas EMPEM e BJ.

Portanto, as estruturas a escolher para representar o modelo de processo caso se esteja utilizando o critério de seleção de modelos, como primeira opção seria o modelo MPEM, seguido dos modelos EMPEM e BJ, para as malhas de nível e pH.

4.5 VALIDAÇÃO DA DINÂMICA DOS MODELOS IDENTIFICADOS NO DOMÍNIO DO TEMPO E DA FREQUÊNCIA

A validação da dinâmica dos modelos é realizada no domínio do tempo e da frequência.

No domínio do tempo, a análise é realizada aplicando-se um degrau na malha de nível e pH, um de cada vez e comparando com os degraus aplicados aos modelos identificados. Isto permite analisar o comportamento transitório e o estado estacionário.

Primeiro, analisa-se os resultados obtidos pelos modelos identificados da malha de nível, de forma visual e quantitativa, tal como é mostrado na Figura 4.11 e no Quadro 4.15.

Figura 4.11 – Resposta ao degrau dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

Quadro 4.15 – Índices baseado na integral do erro gerados pelos modelos identificados da malha de nível

Método	Estrutura	Índices baseados no erro	
		IAE	ITAE
DI	ARX	510,08	443159,88
	ARMAX	994,22	925270,88
	OE	69,60	66626,73
	BJ	46,26	47410,37
ASYM	BJ	5250,4	5524680,21
MRI	MPEM	35,52	35616,74
	EMPEM	39,78	44333,22

Fonte: Autor

Com os resultados obtidos da resposta ao degrau se demonstra que os modelos OE, BJ, EMPEM e MPEM, apresentaram um bom acompanhamento da saída do processo real, tanto no estado estacionário como no comportamento transitório. Isto pode ser corroborado com os valores obtidos através dos índices

IAE e ITAE, sendo o modelo MPEM o que gerou índices de erro menor que as outras estruturas. Já os modelos ARMAX, ASYM-BJ e ARX apresentaram problemas na dinâmica do modelo, pois a resposta obtida perde estabilidade em torno da média da resposta real do sistema.

Para a malha de pH, a Figura 4.12 e o Quadro 4.16 mostram a resposta ao degrau e os índices baseado no erro obtidos pelos modelos identificados, respectivamente.

Figura 4.12 – Resposta ao degrau dos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Quadro 4.16 – Índices do critério de informação para os dados preditos gerados pelos modelos obtidos para a malha de pH

Método	Estrutura	Índices baseados no erro	
		IAE	ITAE
DI	ARX	56,85	40902,45
	ARMAX	945,38	1111785,49
	OE	189,89	228202,58
	BJ	23,46	20278,22
ASYM	BJ	31,70	27796,32
MRI	MPEM	18,76	16467,61
	EMPEM	21,22	17967,07

Fonte: Autor

Dos resultados da Figura 4.12 e do Quadro 4.16, pode-se perceber que os modelos BJ, EMPEM e MPEM foram os que melhor representaram a parte transitória e estacionária do processo; isto é corroborado pelos índices de erro. Os modelos ARX e ASYM-BJ apresentaram um comportamento estacionário coerente, mas perderam confiabilidade na parte transitória, quando é aplicado o degrau. O modelo OE responde de forma oscilatória à medida que as previsões aumentam e por esta razão foi o que obteve o maior valor nos índices do erro. Finalmente, a estrutura ARMAX teve problemas de instabilidade na parte estacionária da resposta.

Em seguida, com a finalidade de validar o comportamento do erro normalizado gerado pelos dados reais e preditos, no domínio da frequência, a transformada discreta de Fourier é utilizada no vetor de dados do erro para uma região de frequências. Esta análise é realizada aplicando a abordagem do erro dependente, impondo um valor limite que é obtido mediante a estatística Qui-quadrado para um nível de significância $\alpha = 5\%$.

Para a malha do nível e pH, as Figuras 4.13 e 4.14 mostram os ganhos normalizados gerados pelos dados reais e preditos no domínio da frequência.

Figura 4.13 – Ganho normalizado do erro no domínio da frequência gerados pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de nível

Fonte: Autor

Figura 4.14 – Ganho normalizado do erro no domínio da frequência gerados pelos modelos obtidos com os métodos DI (a), ASYM (b) e MRI (c) da malha de pH

Fonte: Autor

Dos resultados obtidos, mostra-se que os erros normalizados dos modelos identificados para as malhas de nível e pH apresentam um pico máximo na frequência de 0,6 rad/s. Visualmente, pode-se perceber que os modelos ASYM BJ e EMPEM – malha de nível – e os modelos ARX, OE e EMPEM – malha de pH – apresentaram bons desempenhos, pois os ganhos normalizados são menores comparados com as demais estruturas.

Esta análise da resposta em frequência do erro permitiu avaliar a faixa de frequências onde o erro apresenta características de i.i.d. permitindo validar os modelos, de forma visual, para uma região de frequência aonde os ganhos normalizados são menores ao valor de significância imposto.

Finalmente, para quantificar o erro é aplicado a equação (2.55). O Quadro 4.17 mostra os valores da quantificação dos ganhos normalizados.

Quadro 4.17 – Quantificação dos ganhos normalizados gerados pelos modelos obtidos para a malha de nível e pH

Método	Estrutura	Ganho normalizado	
		Nível	pH
DI	ARX	30,44	13,58
	ARMAX	35,43	18,49
	OE	23,67	12,40
	BJ	18,25	16,29
ASYM	BJ	11,58	21,36
MRI	MPEM	20,08	18,74
	EMPEM	13,74	15,44

Fonte: Autor

Conforme se mostra no Quadro 4.17, os resultados indicam que os modelos ASYM-BJ e OE obtiveram os menores índices para as malhas de nível e pH, respectivamente. No resultado da malha de nível, o resultado corrobora à validade do modelo, analisando a faixa de frequências. Para a malha de pH, o resultado indica que os erros gerado pelo modelo OE foram menores, para o intervalo de confiabilidade imposta (5%).

4.6 VALIDAÇÃO DA ROBUSTEZ DO CONTROLADOR UTILIZANDO OS MODELOS IDENTIFICADOS

Apesar de um modelo matemático ser minuciosamente desenvolvido, considerando um conjunto de equações relacionando as variáveis de entrada e saída, ele não consegue representar o processo real devido às diversas incertezas existentes, como condição inicial, perturbações, variação de parâmetros, entre outros. Por isto, o objetivo da análise da robustez é garantir o desempenho do sistema na presença de incertezas consideráveis sobre o processo a controlar. Esta metodologia é aplicada a modelos identificados usados em controladores MPC. Utilizando as Equações (2.61) e (2.64), os resultados dos testes para quantificar a incerteza aditiva (considerando problemas na dinâmica do modelo) e multiplicativa (sobre o ganho do modelo) dos modelos identificados, respectivamente, são mostrados no Quadro 4.18.

Quadro 4.18 – Quantificação das incertezas geral e do ganho dos modelos lineares obtidos para a malha de nível e pH

Método	Estrutura	Incerteza Geral		Incerteza no Ganho	
		Nível	pH	Nível	pH
DI	ARX	13,61	2,11	2,89	1,11
	ARMAX	45,63	15,89	3,44	1,41
	OE	0,57	7,46	1,47	4,16
	BJ	0,87	0,90	1,48	1,62
ASYM	BJ	92,11	1,21	1,38	1,58
MRI	MPEM	0,87	0,53	1,53	1,69
	EMPEM	0,82	0,85	1,52	1,66

Fonte: Autor

De acordo com os resultados do Quadro 4.18, seguem os seguintes comentários:

- Para a malha de nível, analisando-se a incerteza aditiva (ou geral) no modelo, os valores singulares máximos dos modelos BJ, MPEM, EMPEM e OE são menores que o valor limite de incerteza do

teorema do ganho pequeno, isto é, o controlador preditivo garantirá sua robustez dentro da região de estabilidade. Sobre a incerteza no ganho, todos os valores singulares máximo resultaram fora do limite imposto pelo teorema do ganho pequeno, mas os erros menores de incerteza no ganho obtidos foram de 38%, 47%, 48%, 52% e 53%, para os modelos ASYM-BJ, BJ, EMPEM, MPEM e OE, respectivamente.

- Para a malha de pH, na incerteza aditiva (ou geral) no modelo, os valores singulares máximos das estruturas BJ, MPEM e EMPEM resultaram menores que o valor limite imposto pelo teorema do ganho pequeno; isto pode ser interpretado como o controlador MPC garantindo sua robustez com esses modelos. Os resultados dos valores singulares máximos da incerteza do ganho do modelo mostram que nenhum modelo satisfaz o teorema do valor pequeno, mas as estruturas próximas à região de estabilidade foram os modelos ARX e ARMAX, com diferença de 11% e 41%, respectivamente.

Finalmente, caso se queira validar modelos identificados, utilizando a análise da robustez do modelo, as estruturas OE, BJ, MPEM e EMPEM seriam as ideais para representar a dinâmica do modelo.

4.7 VALIDAÇÃO DE MODELOS LINEARES UTILIZANDO LÓGICA FUZZY

O sistema de validação *fuzzy*, proposto no Diagrama 2.4, é utilizado para analisar e processar os resultados obtidos dos métodos de validação estudados neste trabalho, considerando as regras das variáveis de entrada, como as métricas estatísticas, avaliações dinâmicas e análise da robustez do modelo normalizadas, e saída, o qual corresponde ao valor final da validação, desenvolvidas com suas respectivas funções de pertinência.

Como resultado da validação, o Quadro 4.19 mostra os valores (ou notas) finais da validação de modelos para as malhas de nível e pH, normalizadas de 0 a 10.

Quadro 4.19 – Resultado da validação do sistema *fuzzy* para os modelos obtidos das malhas de nível e pH

Método	Estrutura	Valor da validação utilizando sistema <i>fuzzy</i>		Índice de eficiência (<i>FIT</i>) %	
		Nível	pH	Nível	pH
DI	ARX	7,69	7,42	6,62	-107,88
	ARMAX	1,38	5,77	56,28	11,76
	OE	7,64	7,64	36,32	72,54
	BJ	7,93	7,71	79,86	80,14
ASYM	BJ	7,44	7,81	6,13	-14,24
MRI	MPEM	7,93	7,71	82,82	89,92
	EMPEM	7,83	7,86	81,71	88,36

Fonte: Autor

No Quadro 4.19 foi incluído o índice de eficiência (ou *FIT*), a fim de comparar um índice comumente utilizado na área de Identificação de Sistemas e um novo índice proposto neste trabalho. Segundo os resultados, pode-se concluir o seguinte:

- Na malha de nível, o sistema de validação *fuzzy* aceita como modelos confiáveis todos os modelos identificados, com exceção do modelo ARMAX, apresentando este último um pior desempenho na parte estatística, dinâmica e robusta. Se fosse considerada uma validação utilizando o índice de eficiência, os modelos aceitos para representar a malha de nível seriam BJ, MPEM, EMPEM e próximo da média de aceitação o modelo ARMAX, sendo as piores opções as estruturas ARX e ASYM-BJ.
- Na malha de pH, os resultados com a validação *fuzzy* foram similares à malha de nível; todos os modelos, com exceção do

ARMAX, são confiáveis para representar essa malha. Porém, o índice de eficiência (*FIT*) mostra que os modelos OE, BJ, MPEM e EMPEM são os adequados para representar a malha de pH, tendo como pior opção as estruturas ARX e ASYM-BJ.

Com estes resultados, a finalidade deste processo de validação é verificar se os resultados obtidos se refletem no desempenho do controlador preditivo. Para isto, no Capítulo 5 o controlador QDMC é desenvolvido, a fim de verificar a validade/invalidade de cada modelo identificado.

CAPÍTULO 5

5. CONTROLADOR PREDITIVO MULTIVARIÁVEL

O controle preditivo baseado em modelo MPC (*Model Predictive Control*) é um algoritmo de controle que permite calcular os sinais de controle que ingressam no processo, minimizando uma função objetivo, baseado em um modelo linear. Este método é baseado na teoria de controle ótimo. O principal objetivo do MPC é otimizar o processo dentro de um horizonte de predição, restringindo as variáveis de entrada e saída do processo (CAMACHO; BORDONS, 2000).

Em cada iteração do sistema, o algoritmo calcula uma nova sequência de ações de controle, minimizando a função do erro das saídas previstas até esse horizonte de predição, chamado também de horizonte deslizante. O tamanho dessa sequência corresponde ao horizonte de controle, considerando que apenas a primeira ação de controle da sequência calculada é aplicada na planta. Como breve resumo, a estratégia do MPC é apresentada na Figura 5.1.

Figura 5.1 – Estratégia de operação do MPC

Fonte: (GARCÍA; MORSHEDI, 1989)

De acordo com a Figura 5.1, a cada instante k , as saídas futuras $y(k + N)$ para $N = 1, 2, \dots, p$ são preditas usando um modelo dinâmico do processo, em

torno do horizonte de predição p . Com as saídas preditas e a trajetória de referência, o algoritmo de controle MPC calcula uma sequência de ações de controle, $(u(k), u(k+1), \dots, u(k+c))$, onde c é definido como o horizonte de controle, minimizando uma função objetivo, até o horizonte de predição imposto. Por se tratar de um sistema digital, a cada intervalo de amostragem, o algoritmo minimiza a função custo e apenas o primeiro elemento da entrada futura calculada $u(k)$ é aplicado ao processo, o resto é descartado. O valor $u(k)$ é mantido constante por um segurador de ordem zero, ZOH (do Inglês, *Zero-Order Hold*), até que uma nova sequência de ações seja calculada no próximo intervalo de amostragem.

Uma estrutura típica de um controlador MPC é apresentada na Figura 5.2.

Figura 5.21 – Estrutura básica de um controlador MPC

Fonte: (CAMACHO; BORDONS, 2000)

De acordo com a Figura 5.2, a Trajetória de referência (ou *set point*) indica o comportamento da variável controlada no futuro; o Modelo é uma estrutura matemática que representa de forma linear o processo, considerando seu comportamento dinâmico de forma aproximada; o Preditor é baseado nos valores medidos do processo e no modelo matemático, o qual fornece uma previsão da

saída futura da planta e o Otimizador, que minimiza uma função objetivo em cada intervalo de amostragem, com base nos valores dos erros futuros e as restrições do sistema.

Segundo (QIN; BADGWELL, 2003), na indústria de processos, os controladores preditivos MPC formam parte de um nível de hierarquia das funções de controle, substituindo uma série de controladores clássicos. Isto pode ser mostrado na Figura 5.3.

Figura 5.3 – Hierarquia das funções do sistema de controle em uma planta típica

Fonte: (QIN; BADGWELL, 2003)

Da Figura 5.3, uma estrutura típica de controle convencional (esquerda) é posta ao lado de uma estrutura que emprega o controlador MPC (direita). Na parte superior da hierarquia, um otimizador global de nível corporativo é quem determina os pontos estacionários ótimos para cada unidade da planta em uma base de tempo diária. Em seguida, otimizadores locais, em uma base de tempo de minutos, têm a função de calcular um estado estável ótimo econômico para sua respectiva unidade e enviá-lo para o controle dinâmico com restrições para implementação. Para atingir esta etapa, se for utilizada uma estrutura convencional, deve-se considerar uma combinação de controladores PID, sistemas do tipo Lead-Lag (L/L) e seletores lógicos (High/Low). Utilizando uma estrutura baseada em controladores preditivos, a combinação de blocos convencionais é substituída apenas por um controlador MPC, o qual é responsável por enviar, para o controle de nível regulatório e a cada intervalo de amostragem, um *set point* que otimize o comportamento futuro da planta.

5.1 IMPLEMENTAÇÃO DO CONTROLADOR MPC NA PLANTA-PILOTO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH

Um tipo de controlador MPC muito empregado na indústria de processos é o algoritmo QDMC (do Inglês *Quadratic Dynamic Matrix Control*). Este algoritmo, proposto por (GARCÍA; MORSHEDI, 1986), emprega os coeficientes da resposta ao degrau do modelo para prever os sinais futuros de saída do processo e calcular o sinal de entrada que ingressa no processo. Para calcular estes sinais de entrada é necessário, em cada período de amostragem, minimizar uma função custo quadrática *on-line*, esta última é representada através da Equação (5.1), para o caso SISO (do Inglês *Single-Input Single-Output*), considerando as restrições do processo.

$$J = \min_{\Delta u} \sum_{i=1}^P \delta(y^{ref}(k+i) - \hat{y}(k+i))^2 + \sum_{i=0}^{c-1} \lambda \Delta u(k+i)^2 \quad (5.1)$$

sujeito a:

$$\begin{aligned}\Delta u_{min} &\leq \Delta u \leq \Delta u_{max} \\ u_{min} &\leq u \leq u_{max} \\ y_{min} &\leq y \leq y_{max}\end{aligned}\quad (5.2)$$

De acordo com a Equação (5.2), P representa o horizonte de predição, c é o horizonte de controle e δ e λ são os pesos da variável de processo e da variável manipulada. Δu_{min} e Δu_{max} são os valores máximos e mínimos de variação na entrada; u_{min} e u_{max} representam os limites máximos e mínimos do valor atual da entrada e, finalmente, y_{min} e y_{max} são os limites máximos e mínimos da saída do processo.

Para o caso multivariável, a função custo se representa da mesma forma, considerando que os pesos da entrada (δ) e saída (λ) são representados por matrizes diagonais expressas como Q e R , respectivamente.

Na implementação do controlador QDMC, aplicado na Planta-Piloto de Neutralização de pH, os valores de sintonia do controlador são mostrados no Quadro 5.1.

Quadro 5.1 – Parâmetros de sintonia e restrições do algoritmo QDMC

Pesos e Restrições – QDMC	Malha	
	Nível	pH
Peso na Entrada (λ)	0,7	0,7
Peso na Saída (δ)	10	10
Valor máximo no valor atual da entrada (u_{max})	90	90
Valor mínimo no valor atual da entrada (u_{min})	10	10
Valor máximo no valor atual da saída (y_{max})	79	8,1
Valor mínimo no valor atual da saída (y_{min})	71	5,9
Limite superior na variação da entrada (Δu_{max})	10	10
Limite inferior na variação da entrada (Δu_{min})	-10	-10

Fonte: Autor

Além dos parâmetros de sintonia do Quadro 5.1, os valores assumidos para o horizonte de predição e o horizonte de controle são de 60 e 2, respectivamente.

Com os valores de sintonia e, considerando todos os modelos identificados pelos métodos DI, ASYM e MRI, a Figura 5.4 (modelo ARX), Figura 5.5 (modelo ARMAX), Figura 5.6 (modelo OE), Figura 5.7 (modelo BJ), Figura 5.8 (modelo ASYM-BJ), Figura 5.9 (modelo MPEM) e Figura 5.10 (modelo EMPEM) mostram os resultados do comportamento da variável de processo das malhas de nível e pH. O teste de controle realizado foi em modo servo (seguimento de trajetória).

Figura 5.4 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARX para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.5 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARMAX para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.6 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear OE para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.7 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear BJ para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.8 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ASYM-BJ para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.9 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear MPEM para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Figura 5.10 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear EMPEM para as malhas de nível e pH

Fonte: Autor

Segundo os resultados das Figuras 5.4 a 5.10, visualmente, percebe-se que, para a malha de nível, o controlador QDMC utilizando todos os modelos, com exceção do ARMAX, consegue acompanhar as variações de trajetória (*set point*)

impostas. Também se percebe que o modelo OE gerou um *offset* de 0,5%, aproximadamente, na mudança de set point de 75% para 72%. O sobressinal máximo da variável de processo foi obtido pelo modelo EMPEM de 1%, já para as estruturas OE e ARX, o valor em média do sobressinal foi de 0,5%. Para as estruturas BJ, ASYM-BJ e MPEM, o controlador QDMC conseguiu uma estabilidade superior da variável de processo que com as outras estruturas.

Para a malha de pH, novamente, utilizando todas as estruturas com exceção do modelo ARMAX no controlador QDMC, o acompanhamento da variável de processo para uma variação no *set point* foi adequado. De forma geral, a variabilidade da variável de processo é maior quando existe uma mudança de *set point* na região de 7,5 a 8 de pH.

A fim de quantificar os resultados do teste em modo servo, dois índices de desempenho são propostos neste trabalho. O primeiro deles é o tempo de subida (t_r) da variável de processo, que é calculado como a média dos intervalos de tempo dados para uma variação na trajetória de referência e o primeiro cruzamento da variável de processo com a trajetória. O segundo é um índice em função da variância nas saídas do processo e a mínima variabilidade do processo (HARRIS, 1989; SHUNTA, 1995). Para isto, é necessário calcular o desvio mínimo teórico σ_{fbc} , que está em função da capacidade do desvio padrão σ_{cap} , e o desvio padrão total da saída σ_{tot} , tal como indica a Equação (5.3).

$$\sigma_{fbc} = \sigma_{cap} \sqrt{2 - \left(\frac{\sigma_{cap}}{\sigma_{tot}}\right)^2} \quad (5.3)$$

O valor da capacidade do desvio padrão σ_{cap} é obtido via a Equação (5.4).

$$\sigma_{cap} = \sqrt{\frac{\sum_{i=2}^{i=n} (y_i - y_{i-1})^2}{2(n-1)}} \quad (5.4)$$

Na Equação (5.4), y_i representa os dados de saída no instante i do processo e o desvio padrão total σ_{tot} . Com os valores obtidos da variância mínima teórica e o desvio padrão total, define-se o índice de variabilidade VI (do Inglês

Variability Index), mostrado na Equação (5.5), que indica a qualidade do controlador de uma malha de controle.

$$VI(\%) = 100 \left(1 - \frac{\sigma_{fbc} + s}{\sigma_{tot} + s} \right) \quad (5.5)$$

O valor de s representa o fator de sensibilidade, considerado como 0,1% do valor da escala da variável. Finalmente, o índice de desempenho PI (do Inglês *Performance Index*) ou índice de Harris, é calculado da seguinte forma:

$$PI(\%) = \eta_{Harris}(\%) = 100 - VI \quad (5.6)$$

o qual fica normalizado entre 0 a 100%, onde valores próximos a 100% indica um bom controle sobre a variância mínima da saída teoricamente alcançável.

Com isto, o Quadro 5.2 mostra os resultados obtidos pelo tempo de subida t_r e pelo índice de desempenho PI .

Quadro 5.2 – Índices de desempenho no teste em modo servo nas malhas de nível e pH

Modelos identificados	Malhas			
	Nível		Ph	
	PI (%)	t_r (s)	PI (%)	t_r (s)
ARX	32,67	132,25	54,79	168,13
ARMAX	8,76	----	29,232	377,6
OE	29,16	146,5	50,59	213,38
BJ	33,26	124,5	50,81	255
ASYM – BJ	31,64	218,25	53,92	199,5
MPEM	30,04	110,75	52,75	202,75
EMPEM	30,7	121	52,4	220,5

Fonte: Autor

Segundo os resultados do Quadro 5.2, para a malha de nível, o controlador QDMC com os modelos BJ e ARX obteve um desempenho melhor, porém, o controlador QDMC com os modelos MPEM e EMPEM gerou velocidades de resposta maior que as outras estruturas, provavelmente, os modelos MPEM e

EMPEM agem de forma agressiva, a fim de atingir a estabilidade do sistema mais rápido que as outras estruturas, gerando o sobressinal na mudança de *set point*.

Já na malha de pH, o índice de desempenho e a velocidade de reposta maior foi obtido pelo controlador QDMC com a estrutura ARX; para o modelo ARMAX, a velocidade de resposta do controlador foi a pior pois, além do modelo não ser adequado para representar a malha de pH, foi considerado 60% dos degraus aplicados no *set point* no cálculo do valor médio do tempo de subida, pois, segundo a Figura 5.5, nos degraus de 7 a 8 o modelo responde às variações de trajetória impostas mas, nas variações de 7 a 6, a estrutura ARMAX somente acompanha no primeiro degrau de 7 a 6,5.

Neste trabalho, um índice de desempenho chamado *ID* é proposto para avaliar o desempenho do controlador QDMC, como visto na Equação (5.6).

$$ID = \alpha PI + \beta t_r \quad (5.6)$$

O valor de t_r foi normalizado entre 0 a 100%, usando a Equação (3.5); os parâmetros α e β são os pesos de cada índice¹⁸. Finalmente, o resultado do desempenho do controlador QDMC normalizado, utilizando todos os modelos identificados com os métodos DI, ASYM e MRI, é mostrado no Quadro 5.3.

Quadro 5.3 – Índices de desempenho *ID* do teste em modo servo das malhas de nível e pH

Modelos usados no controlador QDMC	Malhas	
	Nível	pH
	<i>ID</i> (%)	<i>ID</i> (%)
ARX	45,91	66,44
ARMAX	6,13	24,75
OE	40,41	58,36
BJ	47,98	53,79
ASYM – BJ	26,81	62,27
MPEM	48,66	61,08
EMPEM	46,93	58,82

Fonte: Autor

¹⁸ Neste trabalho os valores dos pesos α e β foram considerados de 0,8 e 0,2, respectivamente.

Com isto, a classificação do desempenho do controlador QDMC mostra que os modelos MPEM e BJ foram melhores que o resto, para a malha de nível. Para a malha de pH, o modelo ARX teve um desempenho superior que as outras estruturas. Finalmente, o Quadro 5.4 mostra as classificações dos modelos identificados com a validação *fuzzy* e seu desempenho no controlador QMDC.

Quadro 5.4 – Classificação dos modelos identificados das malhas de nível e pH na validação e no controlador preditivo

Modelos usados no controlador QDMC	Malhas			
	Nível		pH	
	Val. <i>fuzzy</i>	ID	Val. <i>fuzzy</i>	ID
ARX	4	4	6	1
ARMAX	7	7	7	7
OE	5	5	5	5
BJ	2 (1)	2	4 (3)	6
ASYM – BJ	6	6	2	2
MPEM	1 (2)	1	3 (4)	3
EMPEM	3	3	1	4

Fonte: Autor

Conforme os resultados do Quadro 5.4, seguem os seguintes comentários:

- Para a malha de nível, o Quadro 4.19 mostra que os modelos BJ e MPEM resultaram com notas iguais, porém, na validação do controlador QDMC, estes modelos ficaram em 1° e 2° lugar, respectivamente. Ainda que estes modelos possuam os mesmos valores na validação *fuzzy*, eles apresentam os melhores índices de desempenho no controlador preditivo diferenciados em $\pm 0,8\%$. Já para as demais estruturas, o valor obtido pela validação *fuzzy* corrobora o índice de desempenho *ID* do controlador QDMC.
- Para a malha de pH, o sistema de validação *fuzzy* não consegue repetir a coerência da malha de nível, porém, os modelos ARMAX,

OE, ASYM-BJ e MPEM corroboram os resultados da validação e do controle preditivo.

CAPÍTULO 6

6. VALIDAÇÃO DE MODELOS LINEARES APLICADAS ÀS MALHAS NÃO-LINEARES

O sistema de validação *fuzzy* desenvolvido na Seção 2.7 corroborou que, para malhas de baixa não-linearidade, como é o caso da malha de nível do processo de neutralização de pH, o grau de correlação entre os valores da validação e o valor do desempenho no controlador QDMC obtidos foram muito próximos e com uma probabilidade de concordância do 85,71%. Já para a malha de pH, o grau de correlação entre a validação e a aplicação dos modelos no controlador QDMC obtido foi de 50%. Este último resultado pode gerar duas principais hipóteses:

- a influência da não-linearidade no processo de validação e,
- a falta de repetitividade dos testes assim como também a suposição de propriedades de ruído gaussiano no erro.

A seguir são realizados testes de identificação e controle preditivo a fim de corroborar a veracidade ou falsidade destas hipóteses.

6.1 INFLUÊNCIA DA NÃO-LINEARIDADE NO PROCESSO DE VALIDAÇÃO

Uma das hipóteses mencionadas foi a influência da não-linearidade da malha de pH no processo de validação. No processo de identificação, a região de excitação da zona de linearidade da malha de pH, provavelmente, foi alto e por causa disto, os métodos de identificação lineares geraram erros com propriedades dinâmicas e estocásticas pobres. Para descobrir se a hipóteses proposta é verdadeira ou falsa, procede-se a realizar o projeto de identificação de sistemas, reduzindo a faixa de excitação do sinal GBN aplicado na Planta-Piloto de Neutralização de pH.

Os dados coletados do sinal de controle e a variável de processo de pH é mostrada na Figura 6.1, para uma variação no *set point* de $\pm 0,5$ de pH.

Figura 6.1– Sinal de controle e sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$ de pH aplicado no processo de neutralização de pH

Fonte: Autor

Com os dados coletados da Figura 6.1 e aplicando-se os mesmos critérios da Seção 3.3, as ordens obtidas para os modelos lineares identificados com os métodos DI, ASYM e MRI são mostradas no Quadro 6.1, e os modelos lineares TISO da malha de pH são mostrados no Quadro 6.2.

Quadro 6.1– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH

Método	Estrutura	Ordem				
		<i>na</i>	<i>nb</i>	<i>nc</i>	<i>nd</i>	<i>nf</i>
DI	ARX	4	4	----	----	----
	ARMAX	3	4	4	----	----
	OE	----	3	----	----	4
	BJ	----	4	4	4	4
ASYM	BJ	----	3	3	4	4
MRI	MPEM	----	3	3	3	4
	EMPEM	----	4	1	1	4

Fonte: Autor

Quadro 6.2– Modelos lineares TISO da malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH

Saídas\ Entradas		Sinal de Controle Nível	Sinal de Controle pH
ARX	pH	$\frac{0.0013409z^{-1}(1 + 1.164z^{-1})(1 - 1.007z^{-1})(1 - 0.5534z^{-1})}{(1 - 0.9973z^{-1})(1 + 0.388z^{-1})(1 - 0.1805z^{-1} + 0.1919z^{-2})}xz^{-3}$	$\frac{-0.016886(1 - 1.229z^{-1})(1 + 0.2795z^{-1} + 0.1152z^{-2})}{(1 - 0.9973z^{-1})(1 + 0.388z^{-1})(1 - 0.1805z^{-1} + 0.1919z^{-2})}$
ARMAX	pH	$\frac{0.0015217z^{-1}(1 - 1.012z^{-1})(1 + 1.155z^{-1} + 0.7876z^{-2})}{(1 - 0.9973z^{-1})(1 + 0.8899z^{-1} + 0.9448z^{-2})}xz^{-3}$	$\frac{-0.016798(1 - 1.227z^{-1})(1 + 0.9178z^{-1} + 0.9676z^{-2})}{(1 - 0.9973z^{-1})(1 + 0.8899z^{-1} + 0.9448z^{-2})}$
OE	pH	$\frac{0.00031352z^{-1}(1 - 1.244z^{-1})(1 + 0.1554z^{-1})}{(1 - 0.9972z^{-1})(1 + 0.8739z^{-1})(1 + 0.007505z^{-1} + 0.981z^{-2})}xz^{-3}$	$\frac{-0.012418(1 - 1.243z^{-1})(1 - 0.9976z^{-1})}{(1 + 0.5499z^{-1})(1 - 0.5409z^{-1})(1 - 1.996z^{-1} + 0.9959z^{-2})}$
BJ	pH	$\frac{0.0013058z^{-1}(1 + 1.397z^{-1})(1 - 0.8643z^{-1} + 0.302z^{-2})}{(1 - 0.8137z^{-1})(1 + 0.3898z^{-1})(1 + 0.6112z^{-1} + 0.5813z^{-2})}xz^{-3}$	$\frac{-0.016825(1 - 1.223z^{-1})(1 - 1.841z^{-1} + 0.8613z^{-2})}{(1 - 0.9952z^{-1})(1 - 0.1342z^{-1})(1 - 1.772z^{-1} + 0.7921z^{-2})}$
ASYM BJ	pH	$\frac{0.0020657z^{-1}(1 + 1.173z^{-1})(1 - 0.5352z^{-1})}{(1 - 0.8331z^{-1} + 0.5519z^{-2})(1 + 1.013z^{-1} + 0.6382z^{-2})}xz^{-3}$	$\frac{-0.00014903(1 - 6.063z^{-1})(1 + 3.449z^{-1})}{(1 + 0.7538z^{-1})(1 - z^{-1})(1 - 1.048z^{-1} + 0.5397z^{-2})}$
MPEM	pH	$\frac{0.00085601z^{-1}(1 - 0.9498z^{-1})(1 - 0.8213z^{-1})}{1 - 1.972z^{-1} + 0.9882z^{-2}}xz^{-1}$	$\frac{-0.013309z^{-1}(1 - 1.307z^{-1})(1 - 0.9967z^{-1})}{1 - 1.995z^{-1} + 0.9948z^{-2}}xz^{-1}$
EMPEM	pH	$\frac{-0.0016127z^{-1}(1 - 2.304z^{-1})(1 - 2.006z^{-1} + 1.007z^{-2})}{(1 - 1.991z^{-1} + 0.9932z^{-2})(1 - 0.6349z^{-1} + 0.4712z^{-2})}xz^{-1}$	$\frac{-0.006418z^{-1}(1 + 1.001z^{-1})(1 - 0.9968z^{-1})(1 - 1.371z^{-1})}{(1 + 0.9943z^{-1})(1 - 0.4124z^{-1})(1 - 1.995z^{-1} + 0.9948z^{-2})}xz^{-1}$

Fonte: Autor

O processo de validação dos modelos do Quadro 6.2 é realizado, utilizando as técnicas estudadas do Capítulo 2 tais como, os testes estatísticos, métricas estatísticas, validações da dinâmica do modelo e a robustez do mesmo. Os resultados numéricos da aplicação destas técnicas são mostrados no Quadro 6.3. Em seguida, com os valores numéricos dos testes aplicados, no Quadro 6.3 também são mostrados os valores de validação *fuzzy* para a malha de pH, proposto na Subseção 2.7, com excitação de ± 0.5 de pH. Para realizar a validação utilizando o sistema *fuzzy*, deve-se de normalizar os valores entorno do intervalo de 0 a 10, usando a Equação (3.5).

Quadro 6.3– Validação dos modelos lineares para a malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH aplicado na planta real

Método	Estrutura	Testes Não-Paramétricos				Métrica						CI			Dinâmica do Modelo			Robustez do Modelo		Valid. Fuzzy
		<i>KS</i>	<i>AD</i>	<i>SW</i>	<i>W</i>	<i>FIT(%)</i>	<i>U</i>	<i>d</i>	<i>Russ.</i>	<i>SG</i>	<i>T</i>	<i>AIC</i>	<i>BIC</i>	<i>HQ</i>	<i>IAE</i>	<i>ITAE</i> (10 ³)	<i>Freq.</i>	<i>SG</i>	<i>SK</i>	
DI	ARX	0,128	27,95	0,936	0,582	48,15	0,324	0,666	0,210	0,394	18,078	-2,75	-2,69	-2,72	527,40	529,68	64,02	9,47	1,14	3,01
	ARMAX	0,126	26,82	0,938	0,621	48,94	0,318	0,673	0,207	0,387	18,180	-2,78	-2,70	-2,75	527,65	528,76	76,28	9,51	1,13	3,36
	OE	0,092	15,38	0,957	3,936	66,79	0,190	0,808	0,168	0,269	2,379	-3,61	-3,54	-3,58	10,78	8,92	20,10	0,37	2,44	7,74
	BJ	0,090	23,84	0,934	0,690	56,09	0,259	0,734	0,160	0,310	17,253	-3,11	-2,99	-3,07	350,43	362,53	6,95	73	44	7,68
ASYM	BJ	0,106	20,34	0,945	3,036	48,12	0,310	0,681	0,179	0,362	1,255	-2,56	-2,46	-2,52	37,41	39,92	31,58	0,55	1,92	7,82
MRI	MPEM	0,111	28,16	0,932	4,590	67,23	0,189	0,810	0,174	0,273	0,031	-3,64	-3,56	-3,61	9,91	9,42	29,49	0,34	2,12	7,56
	EMPEM	0,067	12,20	0,962	0,857	61,21	0,226	0,770	0,161	0,287	16,678	-3,41	-3,32	-3,37	119,68	114,36	13,24	2,16	2,69	7,74

Fonte: Autor

Em seguida, para comparar o grau de coerência e corroborar o resultado de classificação do processo de validação, os modelos obtidos são testados dentro do controlador preditivo de tipo QDMC, utilizando como parâmetros de sintonia os valores do Quadro 5.1. Os resultados para o teste de seguimento de *set point*, em torno da faixa de ± 0.5 de pH, são mostrados nas Figuras 6.2 até 6.8, testando os modelos ARX, ARMAX, OE, BJ, ASYM-BJ, MPEM e EMPEM, respectivamente.

Figura 6.2 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARX para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.3 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ARMAX para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.4 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear OE para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.5 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear BJ para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.6 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear ASYM-BJ para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.7 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear MPEM para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

Figura 6.8 – Teste em modo servo utilizando o controlador QDMC e o modelo linear EMPEM para a malha de pH com sinal de excitação GBN de $\pm 0,5$

Fonte: Autor

A fim de quantificar o desempenho do controlador QDMC para cada modelo obtido, o Quadro 6.4 mostra os resultados do índice de variância mínima (ou índice de Harris) e a velocidade média da resposta do sistema de controle testado. Além disso, mostra-se também o índice de desempenho obtido a partir da Equação (5.6).

Quadro 6.4– Índices de desempenho ID do teste em modo servo da malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH

Modelos identificados	Malha de pH		
	PI (%)	t_r (s)	ID (%)
ARX	23,82	-----	23,56
ARMAX	42,91	250	42,59
OE	45,04	137,25	52,75
BJ	42,41	157,75	49,11
ASYM – BJ	46,56	117	55,49
MPEM	42,62	170	48,36
EMPEM	46,05	142,5	53,17

Fonte: Autor

Finalmente, os resultados do Quadro 6.4, comparados com os valores de validação do Quadro 6.3 mostram que, a porcentagem de confiabilidade do sistema para malhas não-lineares e com amplitude de excitação reduzida foi de 85,71%. Isto significa que, a hipótese proposta resultou parcialmente verdadeira.

6.2 INFLUÊNCIA DA REPETITIVIDADE NO PROCESSO DE VALIDAÇÃO

Outra hipótese do porque se obteve uma porcentagem da baixa confiabilidade do sistema de validação na malha de pH, obtida na Seção 4.7, pode ser que o erro não possui características estatísticas similares à de um ruído gaussiano, assim como também, à falta de repetitividade por causa do comportamento variante no tempo da malha de pH. A identificação de uma malha com alta não-linearidade, utilizando métodos de identificação de sistemas de

modelos lineares, provavelmente, não seja o mais apropriado. Isto pode influenciar no processo de validação dos modelos e gerar diferenças significativas em aplicações com controladores preditivos.

Para provar a veracidade/falsidade desta hipótese, é utilizado o modelo fenomenológico aproximado do processo de neutralização de pH, desenvolvido em (MARQUES, 2014). Os testes de excitação com sinal GBN realizados no modelo simulado do processo de pH são mostrados na Figura 6.9, a qual mostra o sinal GBN aplicado na malha de pH, considerando variações no *set point* de ± 1 de pH.

Figura 6.9 – Sinal de controle e sinal de excitação GBN de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico do processo de neutralização de pH

Fonte: Autor

Em seguida, com os dados coletados do modelo simulado da Planta-Piloto de Neutralização de pH e aplicando os mesmos critérios da Seção 3.3 para obter as ordens dos modelos lineares identificados com os métodos DI, ASYM e MRI (conforme mostrado no Quadro 6.5) e os modelos lineares SISO da malha de pH são mostrados no Quadro 6.6.

Quadro 6.5– Ordens das estruturas dos modelos para a malha de pH com excitação de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico

Método	Estrutura	Ordem				
		<i>na</i>	<i>nb</i>	<i>nc</i>	<i>nd</i>	<i>nf</i>
DI	ARX	4	3	----	----	----
	ARMAX	3	4	4	----	----
	OE	----	3	----	----	3
	BJ	----	2	4	4	3
ASYM	BJ	----	4	4	3	4
MRI	MPEM	----	1	4	4	2

Fonte: Autor

Quadro 6.6 – Modelos lineares da malha de pH com excitação de ± 1 de pH aplicado no modelo fenomenológico

Saídas\ Entradas		Sinal de Controle pH
ARX	pH	$\frac{0.037508 z^{-1}(1 + 0.9693z^{-1})(1 - 0.4918z^{-1})}{(1 - 0.9966z^{-1})(1 - 0.5737z^{-1})(1 + 0.404z^{-1} + 0.2213z^{-2})}xz^{-1}$
ARMAX	pH	$\frac{0.037404 z^{-1}(1 + 0.6502z^{-1})(1 - 1.847z^{-1} + 0.9253z^{-2})}{(1 - 0.9961z^{-1})(1 - 1.785z^{-1} + 0.8726z^{-2})}xz^{-1}$
OE	pH	$\frac{-0.031626z^{-1}(1 - 2.538z^{-1})(1 - 0.9964z^{-1})}{(1 + 0.03961z^{-1})(1 - 1.993z^{-1} + 0.9932z^{-2})}xz^{-1}$
BJ	pH	$\frac{0.037109z^{-1}(1 + 0.4899z^{-1})}{(1 - 0.9974z^{-1})(1 - 0.1605z^{-1} + 0.2368z^{-2})}xz^{-1}$
ASYM BJ	pH	$\frac{0.037403z^{-1}(1 + 0.9796z^{-1})(1 + 1.575z^{-1} + 0.9992z^{-2})}{(1 - 0.9963z^{-1})(1 + 0.6922z^{-1})(1 + 1.187z^{-1} + 0.5632z^{-2})}xz^{-1}$
MPEM	pH	$\frac{0.02077z^{-1}}{(1 - 0.9969z^{-1})(1 - 0.5858z^{-1})}xz^{-1}$

Fonte: Autor

Os modelos lineares da malha de pH do Quadro 6.6, identificados no modelo simulado, são validados, utilizando as técnicas estudadas no Capítulo 2. Os resultados numéricos da aplicação dos testes estatísticos, métricas estatísticas, a avaliação da dinâmica do modelo e sua robustez, são mostrados no Quadro 6.7. O valor de validação *fuzzy* também é mostrado no Quadro 6.7, considerando que, para aplicar o método proposto na Seção 2.7, os resultados numéricos devem ser normalizados em torno do intervalo de 0 a 10, usando a Equação (3.5).

Quadro 6.7– Validação dos modelos lineares para a malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH aplicado no modelo fenomenológico

Método	Estrut.	Testes Não-Paramétricos				Métrica						CI			Dinâmica do Modelo			Robustez do Modelo		Val. Fuzzy
		<i>KS</i>	<i>AD</i>	<i>SW</i>	<i>W</i>	<i>FIT (%)</i>	<i>U</i>	<i>d</i>	<i>Russ.</i>	<i>SG</i>	<i>T</i>	<i>AIC</i>	<i>BIC</i>	<i>HQ</i>	<i>IAE</i>	<i>ITAE (10⁵)</i>	<i>Freq.</i>	<i>SG</i>	<i>SK</i>	
DI	ARX	0,07	13,12	0,96	16,14	52,32	0,222	0,759	0,056	0,25	30,62	-2,98	-2,95	-2,97	467,74	3,45	30,4	10,8	1,08	7,55
	ARMAX	0,08	10,68	0,97	17,52	56,18	0,203	0,780	0,062	0,23	31,27	-3,27	-3,21	-3,25	526,87	3,97	22,7	12,2	1,11	7,55
	OE	0,16	38,86	0,93	0,571	77,75	0,108	0,887	0,061	0,07	12,97	-4,52	-4,48	-4,51	111,77	0,769	10,2	4,85	1,86	2,30
	BJ	0,25	124,7	0,73	5,391	84,93	0,072	0,926	0,038	0,05	0,11	-5,37	-5,30	-5,34	33,18	0,199	17,6	1,03	2,09	7,66
ASYM	BJ	0,07	12,37	0,96	17,91	51,53	0,222	0,759	0,094	0,28	30,12	-2,89	-2,82	-2,87	479,92	3,624	16,9	11,2	1,13	7,75
MRI	MPEM	0,21	98,61	0,77	5,878	86,19	0,067	0,930	0,037	0,04	0,077	-5,62	-5,56	-5,59	32,735	0,195	17,7	0,91	2,08	2,71

Fonte: Autor ¹⁹

¹⁹ No Quadro 6.7 não foi considerado o algoritmo EMPEM, pois com os dados coletados do modelo simulado, o algoritmo não conseguiu convergir no cálculo dos parâmetros do modelo.

Para corroborar o grau de coerência entre o processo de validação e o desempenho dos modelos em um controlador preditivo, todos os modelos são testados com o QDMC, utilizando como parâmetros de sintonia os valores do Quadro 5.1. Os resultados para testes de seguimento de *set point* com variações de 0,5 de pH, em torno da faixa de ± 1 pH, são mostrados nas Figuras 6.10 até 6.15, testando os modelos ARX, ARMAX, OE, BJ, ASYM-BJ e MPEM, respectivamente.

Figura 6.10 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ARX para a malha de pH

Fonte: Autor

Figura 6.11 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ARMAX para a malha de pH

Fonte: Autor

Figura 6.12 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear OE para a malha de pH

Fonte: Autor

Figura 6.13 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear BJ para a malha de pH

Fonte: Autor

Figura 6.14 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear ASYM-BJ para a malha de pH

Fonte: Autor

Figura 6.15 – Teste em modo servo utilizando o modelo fenomenológico com controlador MPC e o modelo linear MPEM para a malha de pH

Fonte: Autor

A quantificação do desempenho dos modelos dentro do controlador MPC é mostrada no Quadro 6.8, mostrando o índice de variância mínima e a velocidade média da resposta do sistema de controle. Também é mostrado o índice de desempenho obtido a partir da Equação (5.6).

Quadro 6.8– Índices de desempenho ID do teste em modo servo da malha de pH com excitação de $\pm 0,5$ de pH aplicado no modelo fenomenológico

Modelos identificados	Malha de pH		
	PI (%)	t_r (s)	ID (%)
ARX	59,20	299,37	57,40
ARMAX	58,29	329	54,75
OE	25,61	----	25,30
BJ	60,73	269,87	60,54
ASYM – BJ	63,37	162,25	69,64
MPEM	56,25	412,75	47,68

Fonte: Autor

Os resultados do Quadro 6.8 comparados com a classificação da validação *fuzzy* do Quadro 6.7 mostram que, a percentagem de confiabilidade do sistema para a malha de pH com repetitividade constante e propriedades do erro gaussiano foi de 71,43%. Isto significa que, a hipóteses proposta resultou sendo parcialmente verdadeira.

CAPÍTULO 7

7. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Realizado o procedimento de identificação de sistemas multivariável de uma Planta-Piloto de Neutralização de pH, desde a parte do desenvolvimento do sinal de excitação, a obtenção de modelos matemáticos com diversas técnicas e estruturas e a validação dos modelos utilizando diversas metodologias, estes modelos foram utilizados no desenvolvimento de um controlador baseado no algoritmo QDMC. Neste capítulo são formuladas as conclusões finais, assim como também são feitas algumas sugestões para trabalhos futuros nesta linha de pesquisa.

7.1 CONCLUSÕES

Uma metodologia baseada em lógica *fuzzy* para validar modelos lineares utilizados em controladores preditivos foi proposta neste trabalho. Esta metodologia foi aplicada a um processo real de neutralização de pH, tornando o trabalho aplicado em uma planta real, que apresenta características não-lineares, incertezas desconhecidas e ruído de medição.

Como principal índice de avaliação dos modelos identificados, o índice de eficiência (*FIT*) demonstrou não ser confiável ao rejeitar/invalidar estruturas que são utilizadas no desenvolvimento de controladores QDMC. Isto é corroborado pelos modelos ARX e ASYM-BJ, os quais apresentaram os piores índices de eficiência, porém um bom desempenho no teste em modo servo no controlador QDMC.

Para a análise da robustez do modelo, incertezas no ganho com um erro acima de 50% demonstraram que conseguem obter bons resultados em controladores MPC, como é o caso das estruturas MPEM, EMPEM e ARX, para a

malha de nível e as estruturas ASYM-BJ, BJ e MPEM, para a malha de pH. Esta afirmação é corroborada nas Figuras 4.11 e 4.12 da resposta ao degrau.

Na análise do desempenho do controlador QDMC, a importância de utilizar o índice *PI* junto com a velocidade de resposta do controlador permitiu, não somente avaliar a variância da variável controlada, mas também avaliar quanto mais rápido cada modelo testado no controlador preditivo responde a uma variação na trajetória de referência.

Considerando a classificação do Quadro 5.4, a validação *fuzzy* da malha de nível demonstrou muita coerência com os resultados do desempenho do controlador QDMC, apresentando uma confiabilidade de 85,71%.

Já para a malha de pH, das sete estruturas testadas, somente quatro conseguiram corroborar o resultado da validação e do desempenho do controlador preditivo. Com tudo isso, o método de validação *fuzzy*, proposto nesta tese, apresentou uma confiabilidade de 50%, não invalidando modelos com índice de eficiência pior, mas sim considerando outras características, propriedades dos modelos e incertezas nos métodos de validação. O valor de confiabilidade obtido gerou duas hipóteses para a validação de malhas não-lineares e com características estocásticas pobres. Para demonstrar a veracidade/falsidade destas hipóteses, no Capítulo 6 foi mostrado que, quando é reduzido o sinal de excitação para $\pm 0,5$ de pH, com a finalidade de excitar o processo de pH em uma região mais próxima da linearidade, a confiabilidade do método *fuzzy* foi de 85,71%. Sobre a hipótese de repetitividade e erro com características gaussianas, o modelo fenomenológico da Planta-Piloto de Neutralização de pH, desenvolvido por (MARQUES, 2014), mostrou uma confiabilidade do método *fuzzy* de 71,43% de coerência, entre o processo de validação e o desempenho do controlador preditivo.

Finalmente, nesta tese, todos os dados para realizar o projeto de identificação de sistemas e o desenvolvimento do controlador preditivo multivariável foram coletados em uma Planta-Piloto de Neutralização de pH com dados reais, localizada no Laboratório de Controle de Processo Industriais da

Escola Politécnica da USP, cujo diferencial foi não realizar testes com dados simulados, pois em alguns casos, levam a conclusões incorretas dentro do ambiente prático.

7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A fim de dar continuidade ao estudo de validação de modelos na área de Identificação de Sistemas, seguem algumas sugestões para trabalhos futuros:

- Corroborar o método de validação *fuzzy* proposto na área de identificação de sistemas não-lineares.
- No Capítulo 2, a validação de modelos utilizando testes não paramétricos foi realizada considerando distribuições do tipo gaussiano. Na identificação de sistemas não-lineares pode-se estudar outros tipos de distribuições, a fim de representar melhor as características do erro gerados pelos dados reais e preditos.
- Desenvolver outras formas de avaliar o desempenho de controladores preditivos multivariáveis, onde seja considerada a robustez em testes de seguimento da trajetória de referência e corroborado na etapa de validação de modelos.
- Utilizar técnicas de inferência de modelos fuzzy tipo II devido a que cada função de pertinência é um conjunto fuzzy, permitindo uma maior robustez do sistema de validação fuzzy.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABLAN, M.; MARQUEZ, R.; RIVAS, Y.; MOLINA, A.; QUERALES, J. Una librería en R para validación de modelos de simulación. **Jornada de Modelado y Simulación**, p. 117-126, Venezuela, 2011.

ALLEN, D. M. Mean square error of prediction as a criterion for selecting variables, **Technometrics** v. 13, p. 469-475, 1971a.

ALLEN, D. M. The prediction sum of squares as a criterion for selecting prediction variables, Technical Report N°. 23, Dept. of Statistics, University of Kentucky, 1971b.

AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. **IEEE Transactions on Automatic Control**, Boston, v. 9, n. 6, p. 716–723, 1974.

BAIRD, A. M.; GOLDMAN, R. B.; BRYAN, W. C.; HOLT, W. C.; BELROSE, F. M. Verification and Validation of RF-Environmental Models – Methodology Overview, Boeing Aerospace Company, 1980.

BALAGUER, P.; VILANOVA, R. A New Frequency Dependent Approach to Model Validation. *Frontiers in Adaptive Control*, Shuang Cong, InTech, 2009.

BARCELÓ, J; CASAS, J. Dynamic network simulation with AIMSUN. Pre-prints of the Proceedings of the International Symposium on Transport Simulation, Yokohama, 2002.

CAMACHO, E. F.; BORDONS, C. *Model Predictive Control*, Springer-Verlag, London, 2000.

CHEN, J.; YU, C. Optimal input design using generalized binary sequence. **Automatica**, v. 33(11), p. 2081-2084, 1997.

CHUANG-STEIN, C. Summarizing laboratory data with different reference ranges in multi-center clinical trials. **Drug Information Journal** v. 26.1, p. 77-84, 1992.

COR-JACQUES, K.; SCHALK, P. E. Validation metric based on relative error, **Mathematical and Computer Modelling of Dynamical Systems**, v. 18(5), p. 487-520, 2012.

DEGROOT, M. H. *Probability and statistics*, AddisonWesley, 2nd edition, Massachusetts, USA, 1986.

GAIKWAD, S. V.; RIVERA, D. E. Control-relevant input signal design for multivariable system identification: Application to high-purity distillation. In: 13TH IFAC WORLD CONGRES, San Francisco, California, 1996.

GARCÍA, C. E.; MORSHEDI, A. M. Quadratic programming solution of dynamic matrix control (QDMC). **Chemical Engineering Communications**, v. 46, p. 73–87, 1986.

GEVERS, M. Identification for control: Achievements and open problems. In Proceedings of the 7th IFAC Symposium on System Identification, pp. 401-412, Massachusetts, USA, 2004.

GOPALUNI, R. B., PATWARDHAN, R. S. & SHAH, S. L. The nature of data pre-filters in MPC relevant identification – open- and closed-loop issues, **Automatica** v. 39, p. 1617–1626, 2003.

GOPALUNI, R. B., PATWARDHAN, R. S. & SHAH, S. L. MPC relevant identification – tuning the noise model, **Journal of Process Control**, v. 14, p. 699–714, 2004.

GUASCH, A.; PIERA, M. A.; CASANOVAS, J.; FIGUERAS, J. *Modelado y simulación: aplicación a procesos logísticos de fabricación y servicios*. Edicions UPC, 2002.

HAIR, J.; TAHA, R.; ANDERSON, R.; BLACK, W. *Multivariate Data Analysis*. Prentice Hall, USA, 1998.

HANNAN, E. J.; QUINN, B. G. The determination of the order of an autoregression. **Journal of the Royal Statistical Society**, v. 41 n. 2, p. 190-195, 1979.

HARRIS, T. Assessment of closed loop performance. **Canadian Journal Of Chemical Engineering**, v. 67, p. 856 – 861, 1989.

HOLDEN, K.; PEEL, D. A.; THOMPSON, J. L. *Economic forecasting: An introduction*. Cambridge University Press, Cambridge, 1990.

HUANG, B.; WANG, Z. The role of data prefiltering for integrated identification and model predictive control, **Proceedings** of the 14th IFAC World Congress, Beijing, China, p. 151–156, 1999.

KVAM, P. H.; VIDAČKOVIĆ, B. *Nonparametric Statistics with Applications to Science and Engineering*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2007.

LJUNG, L. Asymptotic variance expressions for identified black-box transfer functions models. **IEEE Transactions on Automatic Control**, v. 30, n. 9, p. 834-941, 1985.

LJUNG, L. *System Identification: Theory for the user*. Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2nd edition, 1999.

LOAGUE, K.; GREEN, R. E. Statistical and graphical methods for evaluating solute transport models: Overview and application. *J. Contam. Hydrol.* Vol. 7, pp. 51-73, 1991.

MAMDANI, E. H. Applications of fuzzy algorithms for control of simple dynamic plant. **Proceedings**. IEE 121, v. 12, p. 1585-1588, 1973.

MARQUES, F. G. Modelagem de uma Planta-Piloto de Neutralização de pH utilizando a combinação das abordagens Fenomenológica e Empírica. Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo, 2014.

MICHAELSEN, J. Cross validation in statistical climate forecast models, **Journal of Climate and Applied Meteorology**, v. 26, p. 1589-1600, 1987.

MILLER, A. *Subset Selection in Regression*. Chapman and Hall, 1990.

MONGIARDINIA, M.; RAYB, M. H.; GRZEBIETAA, R.; BAMBACHA, M. Verification and validation of models used in computer simulations of roadside barrier crashes. **Proceedings** of the Australasian Road Safety Research, Policing & Education Conference 28th – 30th August, Brisbane, Queensland, 2013.

MORARI, M.; ZAFIRIOU, E. Robust process control. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989

NAYLOR, T. H.; FINGER, J. M. Verification of Computer Simulation Models. **Management Science**, v. 14, n. 2, 1967.

PANOSSO, A., R.; MALHEIROS, E. B. Regressão Linear Simples. Apostila do curso, Departamento de Ciências Exatas, UNESP, 2015.

PEARSON, K. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling. *Phil. Mag.* v. 5, n. 50, 157-175, 1900.

PECK, R.; OLSEN, C; DEVORE, J. L. *Introduction to Statistics and Data Analysis*. Cengage Learning Books, 2008.

POTTS, A. S.; ALVARADO, C. S. M.; GARCIA, C. Detection of No-Model Input-Output pairs in closed-loop systems. **ISA Transactions**, 2017 (Submitted).

POTTS, A. S.; ROMANO, R. A.; GARCIA, C. Improving performance and stability of MPC relevant identification methods. **Control Engineering Practice**, v. 22, p. 20-33, 2014.

QIN, S. J; BADGWELL, T. A. A survey of industrial model predictive control technology. **Control Engineering Practice**, v. 11, p. 733-764, 2003.

RAY, M. H. Repeatability of Full-Scale Crash Tests and Criteria for Validating Finite Element Simulations. *Transportation Research Record—Journal of the Transportation Research Board*, v. 1528, p. 155–160, 1996.

RODRIGUES, C. W. *Estatística Aplicada*, 8^{va} edição, Universidade Severino Sombra, Rio de Janeiro, 2010.

ROUSSEEUW P. J.; LEROY A. M. Robust Regression and Outlier Detection. John Wiley & Sons, 1987.

ROWLAND, J. R.; HOLMES, W. M. Simulation Validation with Sparse Random **Data Computers and Electrical Engineering**, v. 5, p. 37-49, 1978.

RUSSELL, D. M. Error Measures for Comparing Transient Data: Part I: Development of a Comprehensive Error Measure, **Proceedings** of the 68th Shock and Vibration Symposium, Hunt Valley, MD, p. 175 – 184, 1997a.

RUSSELL, D. M. Error Measures for Comparing Transient Data: Part II: Error Measures Case Study, 68th Shock and Vibration Symposium, Hunt Valley, MD, p. 185–198, 1997b.

SARGENT, R. An Overview of Verification and Validation of Simulation Models, Proc. Winter Simulation Conf., Society for Computer Simulation, 1987.

SCHWARZ, G. Estimating the dimension of a model. **Annals of Statistics**, v. 6, p. 461-464, 1978.

SHESKIN, D. *Handbook of Parametric and Nonparametric Statistical Procedures*. Third Edition, Chapman & Hall/CR, 2004.

SHINSKEY, F. G. *Process control systems—application, design, and tuning*. McGraw-Hill Inc, 4th ed., New York, 1996.

SÖDERSTROM, T.; STOICA, P. *System identification*. New York, Prentice Hall, 1989.

SKOGESTAD, S.; POSTLETHWAITE I. Multivariable feedback control analysis and design. Wiley, Chichester, U.K., 1996

SHUNTA, J. P. Achieving World Class Manufacturing Through Process Control, Prentice Hall PTR, 1995.

SPRAGUE M. A.; GEERS, T. L. A Spectral-Element Method for Modeling Cavitation in Transient Fluid-Structure Interaction, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, v. 60, n.15, p. 2467-2499, 2004.

STEPHAN, T. D. **The Use of Statistical Measures to Validate System Dynamics Models**. Thesis, Naval Postgraduate School, Washington State University, Monterey, California, Apr. 1992.

STERMAN, J. D. Appropriate Summary Statistics for Evaluating the Historical Fit of System Dynamists Models. **Dynamica**, v. 10, p. 51-66, 1984.

SUNDARESAN, K. R.; KRISHNASWAMY, P., R. Estimation of delay, time constant parameters in time, frequency and Laplace domains. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**. v. 56, n.2, p. 257-262, 1978.

THEIL, H. *Applied economic forecasting*. North-Holland Publising Company, Amsterdam 1966.

TULLEKEN, H. J. A. F. Generalized binary noise test-signal concept for improved identification-experiment design. **Automatica**, v. 26, n. 1, p. 37-49, 1990.

TYTULA, T.P. "A Method for Validating Missile System Simulation Models," Technical Report E-78-11, U.S. Army Missile Research and Development Command, 1978.

VAN DER KLAUW, A. C. **Closed-loop Identification Issues in the Process Industry**. PhD. Thesis, Delft University of Technology, 1995.

VAN DEN BOSCH, P. P. J.; VAN DER KLAUW, A. C. *Modeling, Identification and Simulation of Dinamical System*. CRC Press, 1994.

VAN WOENSEL, T; VANDAELE, N. Empirical Validation of a queueing approach to uninterrupted traffic flows. *4OR, A Quarterly Journal of Operations Research*. v. 4, p. 59-72, 2006.

WILCOXON, F. Individual Comparisons by Ranking Methods. **Biometrics Bulletin**. v. 1, p. 80–83, 1945.

WILLMOTT, C., J. Some Comments on the Evaluation of Model Performance. **Bulletin of the American Meteorological Society**, v. 63, p. 1309–1313, 1982.

ZHU, Y. *Multivariable System Identification for Process Control*. Elsevier Science, First edition Oxford, 2001.