

FD-1260

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITECNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUIMICA

ANALISE EXPERIMENTAL E IDENTIFICAÇÃO DA DINAMICA DE
COLUNA DE DESTILAÇÃO COM PRATOS

GALO ANTONIO CARRILLO LE ROUX

Dissertação de Mestrado Apresentada à
Escola Politécnica da Universidade de
São Paulo para Obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Orientador: Prof. Dr. Cláudio A. Oller do Nascimento
Professor Associado do Departamento de
Engenharia Química da EPUSP.

SÃO PAULO
1991

A Rossana "del alma mia, luz
de donde el sol la toma"

AGRADECIMENTOS

Agradeço...

aos Professores Doutores Darci Odloak e Claudio Augusto Oller do Nascimento pela inestimável orientação;

ao Professor Giovanni Brunello pelo alento;

à Rossana por ser como ela é, e minha esposa;

aos amigos José Mauricio e Raymundo, em especial;

aos amigos que participaram nos bastidores: José Mauricio, Raymundo, Edio, Adevalda e Reinaldo;

aos amigos, os que já foram citados, e mais: Song, Ricardo, Adriana, Romário Limaverde e Luis Carlos, por tornarem o dia dia no laboratório uma experiência frutífera e agradável.

RESUMO

O objetivo deste trabalho é de estudar o comportamento dinâmico da seção de retificação de uma coluna de destilação.

A coluna de destilação foi instrumentada com aquisição de dados de temperatura em linha. Foi feita um experiência, na qual ela foi submetida a uma perturbação na vazão de alimentação seguindo uma sequência binária pseudo-aleatória. Foi aplicada identificação "off-line", linear e não linear, nos dados. Os dados foram melhor ajustados pelo modelo não linear.

ABSTRACT

The scope of this work is to study the dynamic behaviour of the stripping section of a distillation column.

The distillation column has been instrumented with on-line temperature data-aquisition. The column has been submitted to a disturbance in the liquid feed following a pseudo-random binary sequence. Off-line identification, both linear and non-linear, was applied to the data. The non-linear identification has proven to fit better the data.

INDICE

	Pag.
1. Introdução.....	01
2. Revisão Bibliográfica.....	04
3. Montagem Experimental: Equipamentos e Ensaios.....	07
3.1 Equipamentos Originalmente Existentes.....	08
3.2 Descrição do Escopo do Projeto.....	12
3.2.1 Descrição do Sistema.....	12
3.2.2 Equipamentos Instalados.....	14
3.2.3 Fluxo de Informações no Sistema.....	17
3.2.3.1 Sistema de Aquisição de Dados (SAD).....	17
3.2.3.2 Microcomputador de Controle do Processo..	21
3.2.3.3 Algumas Aplicações Possíveis dos Recursos Computacionais Disponíveis.....	26
3.2.4 Ensaios Preliminares.....	28
3.3 Descrição da Montagem Final.....	32
3.3.1 Descrição do Sistema Estudado.....	33
3.3.1.1 Modificações no Programa Aplicativo.....	35
3.3.2 Metodologia do Ensaio.....	38
4. Análise da Dinâmica do Sistema.....	40
4.1 Resultados Obtidos e Análise Preliminar.....	40
4.2 Análise Estatística.....	49

4.3	Identificação de Modelos Lineares Invariantes no Tempo...	57
4.3.1	Introdução.....	57
4.3.2	Descrição das Ferramentas.....	58
4.3.3	Resultados da Identificação.....	60
4.3.3.1	Estrutura ARX Usando a Rotina ARX.....	60
4.3.3.2	Estrutura ARX Usando a Rotina IV4.....	63
4.3.3.3	Estrutura ARMAX.....	67
4.3.3.4	Estrutura Box-Jenkins	70
4.4	Identificação de um Modelo Não Linear	74
4.4.1	Descrição do Modelo	74
4.4.2	Resultados da Identificação	77
5.	Conclusões	82
6.	Sugestões	85
Apêndice 1 - Tópicos Sobre Identificação		87
A1.1	Introdução	87
A1.2	Conjuntos de Modelos	87
A1.3	Modelos Lineares Invariantes no Tempo	89
A1.3.1	Algumas Estruturas de Modelos	91
A1.3.1.1	Estrutura ARX	91
A1.3.1.2	Estrutura ARMAX	93
A1.3.1.3	Estrutura Box-Jenkins	93
A1.3.2	Métodos de Identificação	94
A1.3.2.1	Métodos de Erro de Predição..	95
A1.3.2.2	Métodos de Variáveis Instrumentais	98

A1.3.3	Validação dos modelos	99
A1.3.3.1	Análise do resíduo	100
A1.3.3.2	Simulação sem ruído	100
A1.3.3.3	O Critério de Akaike do Erro Final de Predição	101
A1.4	Modelo não Linear na Forma de Variáveis de Estado	102
Apêndice 2	- Métodos Estatísticos Aplicados à Análise da Dinâmica de Processos	104
A2.1	No Domínio do Tempo	104
A2.1.1	Estimadores	105
A2.1.2	Aplicações	106
A2.2	No Domínio da Frequência	106
A2.2.1	Análise Espectral	108
A2.2.2	Estimadores	110
Apêndice 3	- Métodos Numéricos de Otimização	115
A3.1	Introdução	115
A3.2	Método de Gauss-Newton	117
A3.3	Método do Gradiente	120
A3.4	Método de Marquardt	122
Referências Bibliográficas	124

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 3.1	Esquema de operação da coluna conforme projeto original.....	08
Figura 3.2	Esquema do equipamento original.....	09
Figura 3.3	Diagrama de instrumentação e processo da coluna, conforme o escopo do projeto	13
Figura 3.4	Esquema dos equipamentos conforme o escopo do projeto.....	15
Figura 3.5	Esquema do fluxo de informações do processo	18
Figura 3.6	Representação do sistema estudado	32
Figura 3.7	Esquema dos equipamentos do sistema estudado	33
Figura 4.1	Gráfico das temperaturas nos pratos 1,2 e 3 em função do tempo	41
Figura 4.2	Gráfico das temperaturas nos pratos 7,6 e 8 em função do tempo	41
Figura 4.3	Gráfico da temperatura da alimentação em função do tempo	44
Figura 4.4	Gráfico do volume de vapor condensado em função do tempo	46
Figura 4.5	Gráfico do volume de destilado coletado em função do tempo	46
Figura 4.6	Gráfico de $y(t)$ e $u(t)$ (tracejado) em função do tempo	48
Figura 4.7	Gráfico de $\hat{R}u(t)$ em função do tempo	49
Figura 4.8	Gráfico de $\hat{R}y(t)$ em função do tempo	50
Figura 4.9	Gráfico de $\hat{\phi}u(\omega)$ em função da frequência	51
Figura 4.10	Gráfico de $\hat{\phi}y(\omega)$ em função da frequência	52

Figura 4.11	Gráfico de $\hat{R}_{yu}(t)$ em função do tempo	53
Figura 4.12	Gráfico de $\hat{R}_{\Delta yu}(t)$ em função do tempo	54
Figura 4.13	Gráfico de $ \hat{G}(e^{j\omega}) $, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência	55
Figura 4.14	Gráfico de $\text{Arg}(\hat{G}(e^{j\omega}))$, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência	55
Figura 4.15	Gráfico de $ \hat{G}(e^{j\omega}) $, estimado com uma janela de Hamming com $M=128$, em função da frequência	56
Figura 4.16	Gráfico de $\text{Arg}(\hat{G}(e^{j\omega}))$, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência	56
Figura 4.17	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 5s)	62
Figura 4.18	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	62
Figura 4.19	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 40s)	63
Figura 4.20	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 5s)	64
Figura 4.21	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	65
Figura 4.22	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 40s)	65

Figura 4.23	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em função do tempo (tempo de amostragem 5s)	68
Figura 4.24	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	68
Figura 4.25	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em função do tempo (tempo de amostragem 40s)	69
Figura 4.26	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 5s)	71
Figura 4.27	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	71
Figura 4.28	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 40s)	72
Figura 4.29	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 5s) para verificação de retro-alimentação no sistema	73
Figura 4.30	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela primeira identificação preliminar (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	78
Figura 4.31	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela segunda identificação preliminar (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	79

Figura 4.32	Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela identificação (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)	80
Figura A1.1	Sistema que pode ser representado por modelos lineares invariantes no tempo	90
Figura A2.1	Gráfico de uma janela de Hamming $W(t)$	113

INDICE DE TABELAS

Tabela 4.1	Resultados da identificação de modelo ARX através da rotina ARX	61
Tabela 4.2	Resultados da identificação de modelo ARX através da rotina IV4	64
Tabela 4.3	Resultados da identificação do modelo ARMAX	67
Tabela 4.4	Resultados da identificação da estrutura Box-Jenkins	70

NOMENCLATURA

- A, $A(q)$ polinômio no operador atraso q^{-1}
- A matriz do método de Gauss-Newton
- B, $B(q)$ polinômio no operador atraso q^{-1}
- C, $C(q)$ polinômio no operador atraso q^{-1}
- D, $D(q)$ polinômio no operador atraso q^{-1}
- D_m conjunto dos parâmetros definido por uma estrutura de modelos
- d número de parâmetros do conjunto parametrizado de modelos
- E esperança calculada em relação ao tempo
- E resíduo para o método de otimização
- $e(t)$ variável estocástica
- F, $F(q)$ polinômio no operador atraso q^{-1}
- F_x transformada de Fourier
- F_x transformada discreta de Fourier
- FPE estimador do erro final de predição
- $G(q)$ função de transferência do processo
- $H(q)$ modelo de ruído
- I matriz identidade
- j valor complexo $\sqrt{-1}$
- K_i constante de equilíbrio do etanol calculada nas condições do prato i

K_{zi}	constante de equilíbrio da água calculada nas condições do prato i
$K(q)$	filtro linear, instrumento do método IV
L	vazão molar de líquido
M	parâmetro da janela de Hamming
$M(q)$	filtro linear, instrumento de método IV
N	número de dados experimentais
$N(q)$	filtro linear, instrumento do método IV
n_a	ordem do polinômio A
n_b	ordem do polinômio B
n_c	ordem do polinômio C
n_d	ordem do polinômio D
n_f	ordem do polinômio F
n_k	número de períodos de amostragem de atraso
q	operador "defasagem para a frente"
$R_{xy}(\tau)$	função de correlação cruzada entre $x(t)$ e $y(t)$
$R_{xx}(\tau)$	função de auto-correlação de $x(t)$
T	período de amostragem
t	tempo
$u(t)$	entrada do processo
V	vazão molar de vapor
$V_N(\theta)$	norma do resíduo
Vol_1	volume de líquido nos pratos 1 a 4
Vol_2	volume de líquido nos pratos 5 a 8
X	matriz Jacobiana do método de Gauss-Newton

X_i	variável de estado
x_i	fração molar do etanol no prato i
x_0	composição do líquido alimentado à coluna
$y(t)$	variável de saída
$\hat{y}(t/\theta)$	valor de y no instante t previsto pelos dados experimentais e pelo conjunto de parâmetros θ
y_0	composição do vapor alimentado no fundo
$W_M(t)$	janela de Hamming
Z	vetor do método de Gauss-Newton

Letras Gregas

θ	parâmetros de um modelo
ρ_i	densidade molar da mistura líquida no prato i
ρ_{i1}	densidade do etanol puro nas condições do prato i
ρ_{i2}	densidade da água pura nas condições do prato i
τ	período de amostragem ou argumento de R_x
T	período de amostragem
$\epsilon(t)$	resíduo
$\varphi(t)$	vetor usado na resolução do método dos mínimos quadrados
$\zeta(t)$	variável instrumental
ω	frequência em radianos por segundo
ω_N	frequência de Nyquist

$\phi_x(\omega)$ espectro de auto-correlação de $x(t)$
 $\phi_{yx}(\omega)$ espectro de correlação cruzada de $y(t)$ e $x(t)$
 λ covariância de $e(t)$ ou $e^*(t)$

Sobrescrito

exp experimental
T transposto
^ estimador de

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

A destilação é um processo que apresenta uma dinâmica particular, que tem características de não linearidade e uma grande interação entre as diversas variáveis de processo. Estas características fazem da destilação um sistema exemplar para testes práticos de implementação e desenvolvimento de novas técnicas de controle e de simulação de sistemas de larga escala.

Um dos objetivos deste trabalho foi de colaborar no sentido de implantar uma estrutura laboratorial que permitisse testar estratégias de controle avançado e estudar a dinâmica, em uma coluna de destilação piloto.

A nossa colaboração foi dada: a montagem permite que sejam realizados ensaios operando a coluna à maneira de uma seção de retificação, com a finalidade de estudar o comportamento dinâmico desta seção frente a perturbações na vazão de alimentação.

O outro objetivo foi o de identificar a dinâmica desta seção através de modelos lineares invariantes no tempo e de um modelo não linear, permitindo uma comparação entre estas duas formas de representação da dinâmica do processo.

O trabalho é composto de seis capítulos e três apêndices.

No segundo capítulo apresentamos alguns trabalhos que descrevem a implantação de unidades piloto de destilação, e outros que versam sobre a identificação da dinâmica destas colunas.

No terceiro capítulo narramos, à guisa de relatório, a montagem experimental, etapa por etapa, até chegar à configuração utilizada no ensaio. Descrevemos tanto os equipamentos convencionais e a instrumentação, quanto os equipamentos eletrônicos e os programas utilizados. A finalidade deste capítulo, além de introduzir alguns detalhes sobre a implementação de sistemas digitais de automação é de deixar um registro da montagem que foi realizada para facilitar a continuidade do trabalho.

No quarto capítulo, dividido em quatro partes, apresentamos o resultado da análise dos dados. Na primeira parte apresentamos os dados obtidos na forma de gráficos e fazemos uma análise preliminar baseada nos mesmos. Na segunda parte empregamos métodos estatísticos com o intuito de verificar algumas propriedades importantes dos dados. Na terceira parte apresentamos os resultados da identificação através de modelos lineares invariantes no tempo, e na quarta, os resultados da identificação através do modelo não

linear.

O quinto capítulo contém as conclusões e o sexto as nossas sugestões para futuros trabalhos.

Os apêndices têm por finalidade introduzir os assuntos aos leitores não iniciados. O conhecimento destes assuntos é essencial à compreensão do trabalho. Tentamos ser didáticos e de maneira alguma tivemos a pretensão de esgotar os assuntos. O primeiro trata sobre identificação, o segundo sobre métodos estatísticos aplicados à análise da dinâmica dos processos e o terceiro sobre métodos de otimização.

CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRAFICA

Unidades de destilação em escala piloto foram implantadas em diversas universidades do mundo por serem especialmente adequadas para testes de estratégias de controle avançado. Algumas referências contém descrições detalhadas destas montagens e foram fonte de inspiração para a nossa.

Mellichamp et alii (1985) descrevem uma instalação existente no departamento de engenharia química e nuclear da Universidade da California. O sistema de controle desta instalação utiliza uma estrutura hierárquica, com um microcomputador para controle digital direto de variáveis de processo secundárias e um computador em tempo real para controle em alto nível das variáveis de processo primárias.

Arulalan (1985) trata sobre a aplicação de controle preditivo em uma coluna de destilação, para isto ele descreve ricamente a unidade piloto instalada na universidade de Louisville. Esta unidade é controlada através de controle digital direto e não utiliza uma estrutura hierárquica.

Uma referência é particularmente interessante pois descreve uma unidade piloto de destilação e a aplicação apresentada é a identificação da dinâmica desta coluna. Tuschák et alii (1982) descrevem a unidade piloto do departamento de automação da universidade técnica de Budapeste e apresentam uma aplicação na identificação da dinâmica da coluna. Os ensaios consistem inicialmente em testes de pulso na vazão de refluxo e identificação através de modelo de primeira ordem usando constantes de tempo diferentes para degraus positivos e negativos. Posteriormente é identificado um modelo de primeira ordem utilizando uma sequência pseudo-randômica binária como entrada do processo, para comparação com as constantes de tempo obtidas nos dois primeiros testes. Os testes de pulso foram aplicados também para perturbações na potência de aquecimento e na vazão de alimentação, sendo que no último caso foi identificado um modelo de segunda ordem para a temperatura do prato mais próximo do reboiler. No trabalho faz-se referência a um modelo não linear e mostra-se apenas uma comparação entre o perfil de temperatura no estado estacionário, experimental, e obtido através do modelo, para uma única condição de operação.

Outro trabalho que versa sobre identificação da dinâmica de colunas de destilação, desta vez uma aplicação

industrial, é o de Jouve et alii (1979). O sistema estudado é uma coluna de separação de estireno e etil-benzeno, a pressão reduzida. A dinâmica analisada é a da concentração de produto na saída em relação às seguintes entradas: vazão de vapor no reboiler, vazão de alimentação e vazão de etil-benzeno. Foram feitos dois ensaios perturbando as entradas através de degraus e de sequências pseudo-aleatórias binárias. O modelo identificado foi um ARX, de primeira ordem na saída, e as entradas somente com atraso e uma constante proporcional.

CAPÍTULO 3 - MONTAGEM EXPERIMENTAL: EQUIPAMENTOS E ENSAIOS

Neste capítulo descrevemos os equipamentos instalados no Laboratório de Modelagem Matemática, Simulação e Controle de Processos com a finalidade de se estudar a dinâmica de processos de separação. Com isto procuramos mostrar as possibilidades de utilização de tal equipamento, e em seguida apresentamos a forma em que ele foi usado neste trabalho.

No laboratório existia uma coluna de destilação em escala piloto, concebida para a realização de ensaios em estado estacionário. Essa coluna não tinha sido previamente operada. Foi feito um projeto com o objetivo de complementar o equipamento existente para permitir que a operação da coluna fosse de maneira semelhante a uma unidade de destilação industrial. Para tal, ela foi instrumentada e colocaram-se linhas adicionais.

A situação atual resulta numa simplificação do projeto, na realidade uma etapa na sua implementação. A operação do sistema com toda a sua potencialidade, depende ainda do refinamento do projeto, tendo em vista a compatibilidade dos diversos equipamentos instalados.

3.1 - Equipamentos Originalmente Existentes

A coluna de destilação, originalmente instalada no laboratório, foi projetada para operação com circulação total, sem alimentações ou retiradas laterais, isto é, o produto de topo era retornado ao tanque de fundo, conforme ilustrado na figura 3.1 .

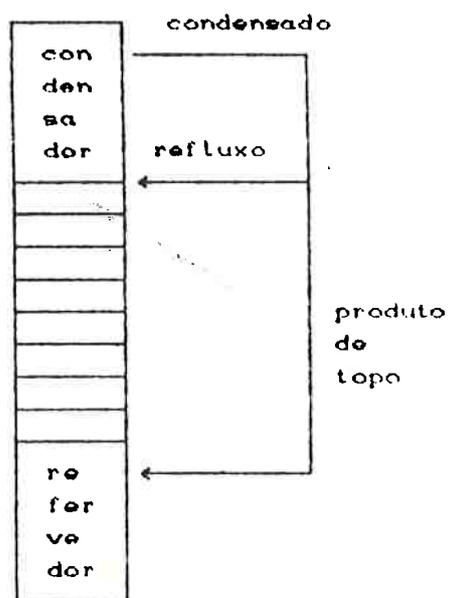


FIGURA 3.1 Esquema de operação da coluna conforme projeto original

Um esquema do equipamento original é apresentado na figura 3.2. O corpo da coluna é de vidro refratário e é composto por um conjunto de oito pratos, além do condensador, tanque de fundo e refervedor.

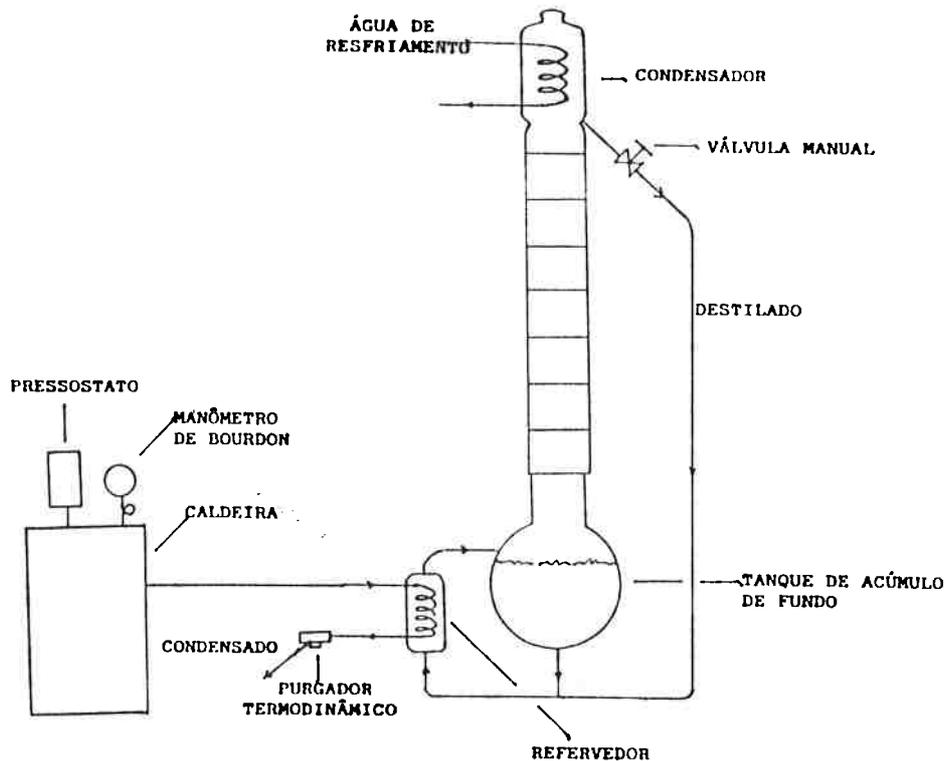


FIGURA 3.2 Esquema do equipamento original

Os pratos têm diâmetro de 4,5 polegadas e são munidos de um único borbulhador. O vertedouro é composto por um tubo de vidro. Neste trabalho adotaremos como convenção que os pratos estão numerados de 1 a 8, começando do topo.

O condensador é vertical e de serpentina. Ele se encontra no topo da coluna e a sua extremidade superior é aberta. Isto faz com que a coluna opere à pressão atmosférica, e evita a necessidade do controle de pressão. Por outro lado este fato faz com que ele possa operar somente como um condensador total. Se a carga térmica no condensador for insuficiente, o material destilado será perdido para a atmosfera.

Existe abaixo do condensador um dispositivo que impede que o líquido condensado retorne à coluna, mas que permite a passagem do vapor que vem do primeiro prato. O condensado é retirado por uma passagem lateral, e, na configuração original, havia uma válvula que fazia com que uma parte do líquido transbordasse, retornando ao primeiro prato, essa corrente correspondia ao refluxo.

O tanque de fundo é esférico e tem uma capacidade de 16 litros. O tanque é conectado a um refervedor do tipo termo-sifão e tem também uma retirada no fundo. O refervedor usa o princípio da convecção natural para a circulação do fluido pelo seu interior. O aquecimento é feito por uma serpentina com vapor.

O vapor é produzido por uma caldeira elétrica. A caldeira é composta por um vaso de pressão, uma bomba e um pequeno reservatório de água (capacidade de 10 litros). O

controle da pressão do vapor na caldeira é feito por um pressostato, que atua ligando ou desligando o jogo de resistências que se encontram dentro do vaso de pressão. O pressostato pode ser regulado para uma determinada pressão e também pode ser regulada a sua sensibilidade (banda). O nível do líquido dentro do vaso de pressão é controlado manualmente, ligando ou desligando a bomba, sendo que o sistema possui apenas um alarme de nível baixo. A leitura do nível é feita visualmente. O vaso de pressão possui também um manômetro do tipo Bourdon.

A linha de vapor possui na sua extremidade um purgador termodinâmico. O condensado é resfriado através de uma serpentina, caso contrário ele "flashear", pois a sua temperatura é superior à de ebulição da água à pressão atmosférica. Deste modo o volume de condensado pode ser medido, e assim ter-se uma idéia do consumo de vapor do sistema.

Como o volume de líquido no vaso de pressão é pequeno, ao alimentá-lo com água proveniente do tanque de armazenamento ocorre um resfriamento substancial que provoca uma brusca redução da pressão (de aproximadamente $0,3 \text{ kgf/cm}^2$). Para reduzir este problema, a água do tanque de armazenamento é pré-aquecida usando-se o calor proveniente do resfriamento do condensado do purgador (a serpentina

citada acima está mergulhada no tanque) e também repondo este condensado no tanque de armazenamento depois de efetuada a medição.

Estudar a dinâmica desse tipo de sistema não teria finalidade prática, já que é um sistema bastante específico, cuja principal função é a de fornecer dados de operação da coluna em estado estacionário para determinar a eficiência dos pratos ou obter informações sobre o equilíbrio.

3.2 - Descrição do Escopo do Projeto

3.2.1 - Descrição do Sistema

O diagrama de instrumentação e processo proposto para a coluna é apresentado na figura 3.3 . Como pode ser notado, à coluna da figura 3.1 foi acrescentado um mínimo de instrumentação que permitiria que ela fosse usada para testar estratégias de controle.

Foi acrescentada uma alimentação de líquido no quinto prato da coluna, e o condensado do topo é retirado totalmente (a válvula que fazia com que uma parte do destilado transbordasse de volta ao primeiro prato foi

suprimida) e passa ao tanque de acúmulo de topo, de onde uma parte retorna à coluna (refluxo) e a outra parte é enviada a um tanque de armazenamento (produto de topo). Do tanque de acúmulo do fundo sai outra corrente que é a de produto de fundo.

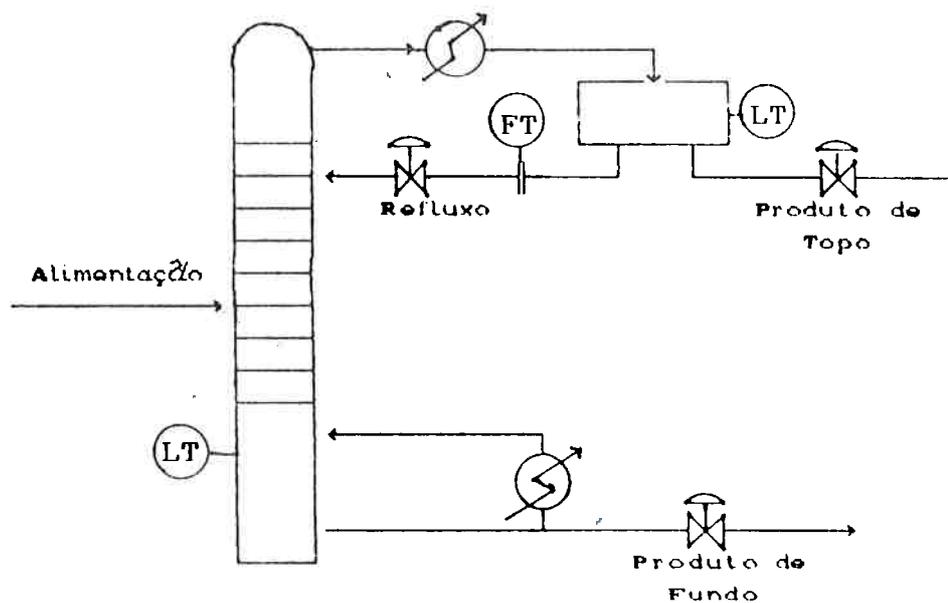


FIGURA 3.3 Diagrama de instrumentação e processo da coluna, conforme o escopo do projeto

A instrumentação colocada, permitiria o fechamento do balanço de massa da coluna, ou seja, controlaria o acúmulo total do sistema e poderia ser usada para controlar a composição do produto de topo. Nessa configuração não haveria controle dual de composição, já que não há atuação sobre a carga térmica do refeedor.

As malhas seriam implementadas via programação. Ou seja não há um controlador (máquina) para cada malha. Este ponto ficará mais claro quando for descrito o fluxo de informações no processo.

Além da instrumentação representada na figura 3.3, existem diversos pontos de medição de temperatura que foram omitidos por uma questão de clareza. Estes pontos são:

- temperatura do vapor em cada prato ;
- temperatura do líquido no prato 1 (onde retorna o refluxo);
- temperatura do líquido no prato 5 (da alimentação);
- temperatura da alimentação;
- temperatura do refluxo;
- temperatura do vapor gerado no refeedor (medida em dois pontos).

3.2.2 - Equipamentos Instalados

Um esquema do sistema, incluindo as modificações introduzidas, é apresentado na figura 3.4 . A alimentação de líquido na coluna é feita através de uma linha munida de um rotâmetro com válvula de agulha ,manual , com precisão de 5

% do fundo de escala que é de 5 l/h. O líquido é aquecido antes de entrar na coluna por uma resistência elétrica justaposta à tubulação. O controle da temperatura é feito manualmente, a potência de aquecimento sendo regulada através de um reostato.

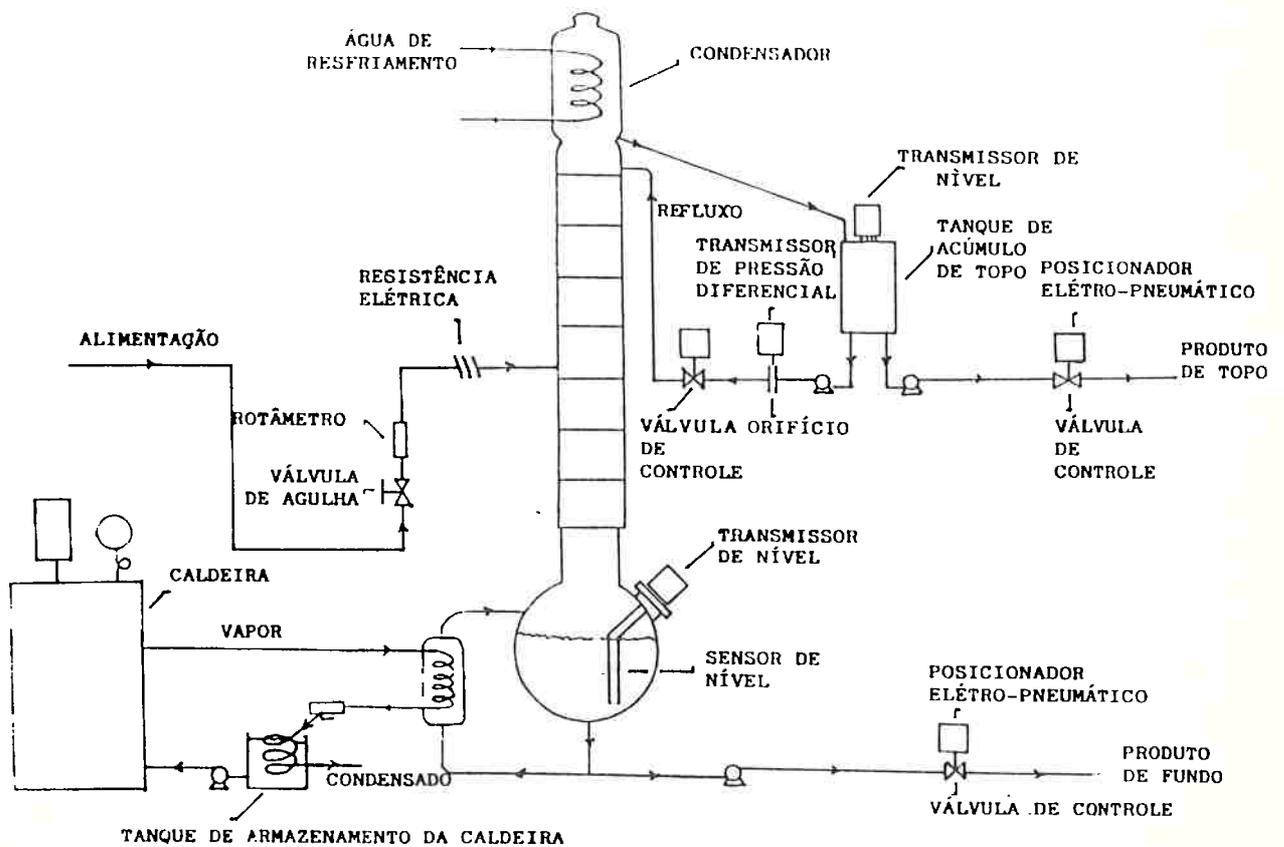


FIGURA 3.4 - Esquema dos equipamentos conforme o escopo do projeto

O condensado do topo é recolhido em um tanque cilíndrico de aço inox com capacidade de 5 litros. Deste tanque saem duas correntes, uma retorna à coluna no prato 1 e a outra vai para um tambor de armazenamento de produto de topo.

O nível dos tanques de acúmulo de topo e de fundo são medidos por dois sensores de nível, capacitivos, da marca Sitron. Os sensores possuem um indicador-transmissor cada um. O indicador é analógico e o sinal é convertido para a faixa de 4 a 20 mA.

Nas linhas de refluxo, produto de topo e produto de fundo foram instaladas válvulas de controle. As válvulas são da marca Hiter, com posicionador elétrico-pneumático. O coeficiente de descarga nominal, C_v , destas válvulas é de 0,06 e o atuador é de igual porcentagem. O acionamento das válvulas se dá através de um sinal elétrico de 4 a 20 mA, e a energia necessária é fornecida por ar comprimido a uma pressão de 20 psig.

Na linha de refluxo foi instalado um medidor-transmissor de pressão diferencial, da marca Hélix, com orifício integral, para medir a vazão. O orifício é montado dentro da caixa do transmissor e o líquido flui paralelamente a célula sensora. O sinal é transmitido com uma corrente de 4 a 20 mA, e o transmissor é alimentado por uma voltagem de 12 V.

Os termopares são do tipo K (Cromel-Alumel), e foram

feitos soldando fios de compensação finos (aproximadamente 0,2 mm), na extremidade. Deste modo, os termopares podem ser introduzidos pelas juntas de vedação da coluna sem provocar vazamentos e, além disso, a sua resposta é praticamente linear (temperatura da junta X temperatura medida), a sua dinâmica sendo muito rápida.

3.2.3 - Fluxo de Informações no sistema

O fluxo de informações no sistema está esquematizado na figura 3.5 . O sistema de aquisição de dados (SAD) é a interface entre o processo e o microcomputador. Ele foi fabricado pela ESCA e o seu modelo é QN-2000.

3.2.3.1 Sistema de Aquisição de Dados (SAD)

O SAD é basicamente um microcomputador com certas características especiais. Os seus principais componentes são:

- Uma unidade de processamento central (CPU);
- Uma unidade de memória RAM de 48 Kbytes;

- Uma unidade de memória EPROM de 16 Kbytes;
- Duas placas de conversão A/D;
- Uma placa de conversão D/A;
- Um cartão de comunicação serial;
- Placas de condicionamento de sinal.

A unidade de processamento central é do tipo Z80 A, de oito bits. Na memória EPROM estão armazenados os programas que o SAD utiliza. Esta memória é não volátil, cujo inconveniente é a programação feita através de um processo muito difícil, que envolve a retirada do "chip" de memória e sua regravação em um aparelho especial. A memória RAM é a que o SAD utiliza para armazenamento dinâmico de dados e onde mantém uma tabela com os últimos dados provenientes do processo.

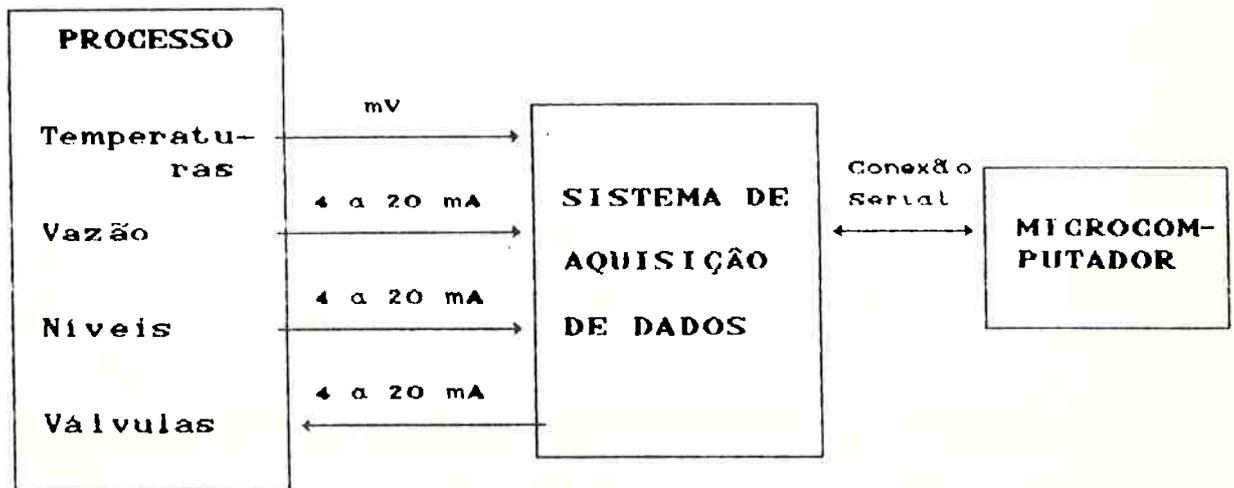


FIGURA 3.5 Esquema do fluxo de informações do processo

As placas de conversão A/D (analógico para digital) e D/A (digital para analógico) têm uma resolução de 12 bits, isto é, a precisão máxima alcançada é de 1/4096 do valor máximo da variável de processo. Cada placa D/A pode multiplexar até 16 entradas de 4 a 20 mA ou de 1 a 5 V. Ou seja que o número máximo de entradas que o sistema pode ter é de 32.

A placa D/A pode multiplexar até 8 saídas. Estas saídas ao serem comandadas em um determinado valor, o mantém através de um retentor de sinal ("holder").

A placa de comunicação serial é o elo de comunicação entre o SAD e o microcomputador. A sua principal característica é que ela permite a comunicação em apenas um sentido por vez: o diálogo entre o SAD e o microcomputador se dá de uma maneira bem concatenada, em que um espera o outro terminar a mensagem para responder. A velocidade de transmissão está programada em 9600 bauds (bits por segundo).

As placas de condicionamento de sinal, no nosso caso, têm a finalidade de tratar os sinais provenientes dos termopares, fazendo a compensação de junta fria, linearizando-os e amplificando-os para uma faixa de 4 a 20 mA, compatível com as placas D/A.

Como vimos, o SAD é um microcomputador com a habilidade de se comunicar com o processo, com a desvantagem de não ser facilmente programável. O programa utilizado é aquele proveniente de fábrica, em cuja concepção tivemos muito pouca intervenção. Nossa participação se limitou à definição do conjunto de funções básicas a serem usadas e do protocolo de comunicação.

A parte principal do programa é o sistema operacional múlti-tarefa em tempo real. Este sistema é o que mantém as tarefas do SAD ordenadas e sincronizadas no tempo. Para tal, ele conta com uma tabela de tarefas, com uma ordem hierárquica, que é varrida a cada intervalo de tempo, T_v . Dado este intervalo, T_v , ele passa a executar, hierarquicamente e em sequência as tarefas que estiverem indicadas como ativas na tabela. No nosso caso esse intervalo tem um valor de 100 ms.

A única tarefa que é executada obrigatoriamente a cada varredura, é aquela em que todos os dados analógicos são convertidos em digitais, e armazenados em uma determinada área da memória. Deste modo o SAD mantém nesta área dados sempre atualizados. As outras tarefas são:

- Enviar os dados da área de dados atualizados para o microcomputador;

- Alterar o valor de uma, ou várias, saídas analógicas;
- Verificar o funcionamento dos diversos componentes do SAD, etc...

Todas estas tarefas só são ativadas se o microcomputador as requisitar. Por outro lado o SAD não se comunica com o microcomputador a não ser que seja solicitado. É por isso que se dá a este tipo de protocolo o nome de "escravo-mestre".

Cabe ressaltar, também, que outros tipos de tarefas foram por nós imaginadas, como por exemplo, uma em que o SAD calculasse o novo valor de uma determinada saída baseado nos valores das entradas, através de um algoritmo PID, por exemplo, mas o fabricante não demonstrou interesse em desenvolver tais programas e nós não tivemos infra-estrutura para fazê-lo.

3.2.3.2 Microcomputador de Controle do Processo

Pelas razões que foram descritas anteriormente, a iniciativa das ações fica restrita ao microcomputador. O programa que nos foi fornecido pelo fabricante para o

microcomputador é composto de dois módulos: o gerenciador de comunicação e o programa de interface com o usuário, que chamaremos também de aplicativo.

O gerenciador de comunicações é um programa de baixo nível feito em linguagem Assembler. A sua função é de facilitar o acesso ao sistema de aquisição de dados para um aplicativo de nível superior. Ele é um programa que fica residente na memória após ser instalado e é composto por três interrupções. Interrupções são rotinas de baixo nível, residentes na memória, como por exemplo as que são usadas pelo computador para realizar funções básicas, como movimentar o cursor na tela, controlar a leitura ou gravação de um disco, etc...

As interrupções do gerenciador de comunicações são : uma principal (INT 08H), uma de interface com o aplicativo (INT 15H), e uma que passa a controlar a comunicação pelo canal serial no lugar da interrupção do DOS (INT 0CH).

A interrupção principal é instalada de tal forma que a cada 1/16 segundos ela é ativada. Os comandos que ela realiza têm que ser curtos de modo a que ela conclua as suas ações em menos de 1/16 s para que não haja superposição de instantes em que ela for ativada, o que poderia causar a entrada do microcomputador em um "loop" infinito, que faria com que o mesmo travasse. É também por causa disto que o

microcomputador pode processar outro aplicativo simultaneamente, já que a interrupção principal ocupa o processador por apenas alguns instantes a cada 1/16 segundos.

A interrupção de interface com o aplicativo faz o que nome diz: somente ela pode ser chamada pelo aplicativo e a sua função é passar o recado dos comandos do aplicativo para a interrupção principal. Isto se dá pela simples modificação de "flags" e variáveis, da interrupção principal (ela e a interrupção principal compartilham um mesmo segmento de memória), sendo que antes de fazer isto ela sempre verifica que o "flag" de "ocupado" não esteja setado, caso contrário ela responde ao aplicativo que o gerenciador está ocupado.

A última interrupção tem por finalidade facilitar à interrupção principal o acesso à comunicação pelo canal serial, com o protocolo do sistema de aquisição de dados.

As linguagens que permitem a chamada destas interrupções diretamente são o C, o Pascal e o próprio Assembler. O programa de interface com o usuário foi confeccionado em Pascal, e nos foi fornecido o código fonte pelo fabricante.

O aplicativo original tem quatro funções principais:

- Inicializar as variáveis do gerenciador;
- Pedido de Imagem do Processo;
- Varredura constante;

- Enviar dados para o processo.

Na opção "inicializar as variáveis" o aplicativo transmite um comando para o gerenciador de comunicações que faz com que ele cesse todas as ações e limpe a sua área de memória.

Nas opções "pedido de imagem do processo" e "Varredura constante" as tarefas básicas são: o aplicativo pede ao gerenciador que este requisite ao SAD o conteúdo da sua memória de dados atualizados, o gerenciador aguarda a resposta e, quando esta chega, transfere os dados para uma área pré-determinada pelo aplicativo, que, por sua vez, quando nota que a tarefa foi concluída, apresenta os dados na tela. Esta sequência de tarefas, um tanto burocrática, consome em média 400 ms (que equivale a cinco ativações da interrupção principal do gerenciador). A apresentação dos dados na tela era originalmente feita em formato hexadecimal.

A diferença entre as opções acima descritas é que na opção "varredura constante", a tarefa é repetida indefinidamente. Nesta opção tanto o gerenciador quanto o aplicativo passam a processar em "loop". O gerenciador repete a sequência indefinidamente, até que outra tarefa lhe seja atribuída pelo aplicativo, e enquanto isso, este último apresenta continuamente os dados contidos na área que

pré-estabeleceu ao gerenciador, sem esperar que o gerenciador lhe avise se concluiu, ou não, mais uma aquisição. Desta forma não há sincronismo entre o gerenciador e o aplicativo e os mesmos dados podem ser apresentados várias vezes, como em um indicador digital para múltiplas variáveis.

A principal deficiência deste modo de operação é que o intervalo de tempo entre cada conjunto de dados que são apresentados não é fixado a priori, mas sim pela estrutura do "loop", ou seja pelo soma total dos tempos de cada um dos comandos que são executados internamente ao "loop". Isto provoca uma flutuação do intervalo de tempo entre apresentações sucessivas, que pode ser aumentada pela inclusão de comandos dentro do "loop", como o armazenamento de dados em disco, cuja execução requer um tempo variável.

A última opção, "enviar dados para o processo", é a que permite que sejam modificados os valores das saídas analógicas do SAD, atendendo a um pedido do microcomputador. Deste modo, as válvulas podem ser manipuladas à distância.

3.2.3.3 Algumas Aplicações Possíveis dos Recursos Computacionais Disponíveis

O esquema de operação e de comunicação do sistema de aquisição de dados, como foi implantado, tem limitações para utilização visando o estudo da dinâmica do processo, ou o teste de estratégias de controle. Mas algumas extensões podem ser feitas nos programas para implementar estes objetivos.

Para realizar a aquisição de dados com intervalo de tempo constante entre aquisições sucessivas, as modificações precisariam ser pequenas se a frequência de aquisição for inferior a 2 Hz. Neste caso, as modificações poderiam ser feitas no programa aplicativo e o esquema de programação poderia ser sequencial (não haveria necessidade de se usar um sistema multi-tarefa em tempo real). Como foi explicado, o tempo que levam os dados mais recentes para chegar ao microcomputador é de aproximadamente 400 ms.

Caso se queira fazer a aquisição com uma frequência maior, o programa a ser modificado é o do SAD. Fora as dificuldades de programação, as modificações não seriam difíceis pois o SAD já possui um sistema multi-tarefa em tempo real. A única dificuldade é que o SAD teria que enviar

ao microcomputador vários dados de uma vez, pois o gargalo passaria a ser a comunicação. Neste caso a frequência de aquisição poderia ser de até 10 Hz.

O esquema sequencial poderia ser adotado para a implementação de controle automático, modificando o programa aplicativo. Neste caso o defasagem entre a leitura do dado do processo e a atuação, seria de aproximadamente 800 ms, e aumentaria com a complexidade do algoritmo utilizado.

Se quiséssemos reduzir um pouco esta defasagem, o gerenciador de comunicações poderia ser modificado, sendo que o algoritmo de controle teria que ser bastante simples para evitar o problema de superposição de chamadas, conforme foi explicado anteriormente. Outra solução seria a modificação do programa do SAD, mas isto implica em certas dificuldades de ordem prática, como também já foi explicado. Nesta situação a defasagem seria da ordem de dezenas de milisegundos e não mais de centenas, dependendo da complexidade do algoritmo e do número de malhas a serem controladas.

3.2.4 Ensaio Preliminares

A coluna de destilação utilizada neste trabalho estava instalada no departamento havia vários anos, sem nunca ter sido utilizada previamente, de modo que dados de operação ou projeto não eram disponíveis. A especificação e compra da instrumentação descrita no item 3.2.2 foi feita baseada em analogias feitas com dados da literatura e com dados obtidos por outros pesquisadores do departamento em colunas análogas (não similares).A especificação foi baseada em um dado geral de vazão de líquido estipulado em 30 l/h.

Foram feitos testes , utilizando água, para verificar a flexibilidade do sistema (as restrições de operação em estado estacionário). As restrições que foram analisadas relacionam-se com a flexibilidade da coluna (condições de afogamento), a flexibilidade da instrumentação (faixa de atuação das válvulas e dos medidores) e o vapor gerado no reboiler, que determina a ordem de grandeza das correntes da coluna (internas e externas). A vazão de vapor (molar) gerado no reboiler limita a operação da coluna pelo fato de, consideradas as hipóteses de McCabe-Thiele, o seu valor ser igual à soma da vazão de refluxo e destilado.

A coluna mostrou ter uma boa flexibilidade, sendo que

condições de afogamento foram alcançadas para relações L/V da ordem de 10, com L=40 l/h.

Para se testar a flexibilidade da instrumentação, em cada linha contendo uma válvula de controle foi instalada uma válvula manual, de agulha, e o ensaio realizado da seguinte forma: a válvula de controle comandada em 50 %, a vazão é ajustada para um determinado valor manualmente, depois mede-se a vazão com a válvula manual na mesma posição para a válvula de controle em 100% e 0%. Deste modo pode se saber qual a faixa que a válvula consegue controlar em torno de uma determinada vazão estacionária. Os resultados indicaram que as válvulas operam adequadamente para uma vazão superior a 10 l/h. Abaixo disto a variação da vazão pelo fechamento ou abertura total das válvulas é inferior a 30% e diminui, com a vazão em torno da qual se quer operar.

O medidor de vazão também foi testado e determinou-se que a sua faixa mínima está para um vazão de água entre 0 e 43 l/h.

Os ensaios para se medir a capacidade térmica do reboiler, foram realizados da seguinte forma: para uma determinada pressão da caldeira foi determinada a vazão de condensado recolhido no topo, sem nenhum líquido fluindo em contracorrente na coluna. Desta forma podem ser determinadas as ordens de grandeza das correntes internas da coluna.

Destes ensaios concluímos que:

- a caldeira não tem potência suficiente para atingir a pressão máxima admissível pelo refervedor ($3,5 \text{ kgf/cm}^2$). Nos ensaios, a pressão máxima em que ela operou foi de $2,5 \text{ kgf/cm}^2$, acima disto ela não atingia um regime estacionário, pois o calor gerado era menor que o consumo correspondente àquela pressão.
- Na condição de máxima pressão ($2,5 \text{ kgf/cm}^2$) a vazão de condensado recolhida no topo foi de 4 l/h , insuficiente para se operar as válvulas. Estes dados foram obtidos utilizando água. Ao se usar uma mistura etanol-água a vazão obtida foi 40% maior, para uma pressão de $2,2 \text{ kgf/cm}^2$. Isto se deve ao menor calor latente da mistura e à menor temperatura de ebulição (temperatura de bolha) da mistura, que faz com que a diferença de temperatura no refervedor seja maior, o que aumenta o transporte de calor.

Destes ensaios concluímos que a coluna não pode ser operada tal qual o projeto o almejava, pois :

- a ordem de grandeza da vazão de vapor gerado no refervedor faz com que o tanque de acúmulo de topo tenha um tempo de residência de aproximadamente 1 hora e o de fundo, de 4 horas, o que se sobreporia à dinâmica da coluna (cuja constante de tempo é da ordem

de minutos), fazendo com que esta se tornasse secundária;

- a limitação da vazão de vapor gerado no refervedor faz com que as vazões de produto de topo e refluxo estejam abaixo da faixa de operação das válvulas de controle, impedindo portanto que as mesmas sejam utilizadas;
- o mecanismo de perda de calor para as vizinhanças se torna extremamente importante o que reduz a semelhança com a operação de uma unidade industrial.

Para que os objetivos do projeto sejam atingidos a caldeira deverá ser substituída por uma de maior potência, além de outras providências que melhorariam ainda mais a performance da unidade, estas são: a substituição do refervedor por um de maior área e a diminuição do volume (ou substituição) do tanque de acúmulo de fundo. Estas medidas podem ser adotadas até o limite em que a flexibilidade da coluna não seja prejudicada (condições de afogamento), que, como já foi visto, é uma característica não muito restritiva.

3.3 Descrição da Montagem Final

Apesar das dificuldades descritas no item 3.2.3, o equipamento pôde ser usado para o estudo da dinâmica de um sistema de interesse prático: a seção de retificação ou esgotamento de uma coluna de destilação. O sistema está representado na figura 3.6 , e pode ser interpretado como sendo uma torre de absorção ou dessorção com pratos.

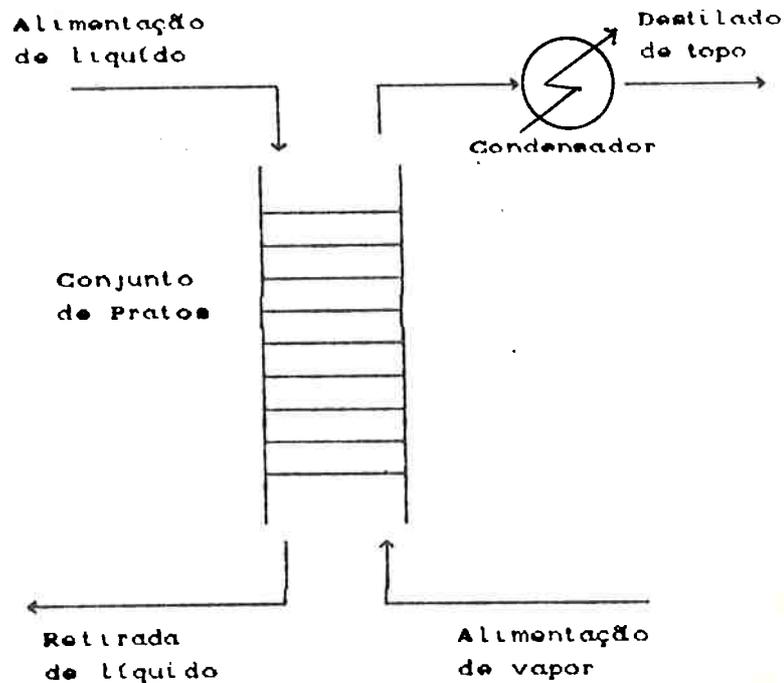


FIGURA 3.6 - Representação do sistema estudado

3.3.1 Descrição do Sistema Estudado

Um esquema dos equipamentos é apresentado na figura 3.7. A principal modificação é que a alimentação de líquido passou a ser feita no primeiro prato, onde antes entrava o refluxo. O tanque de acúmulo de fundo passou a não mais ter retirada.

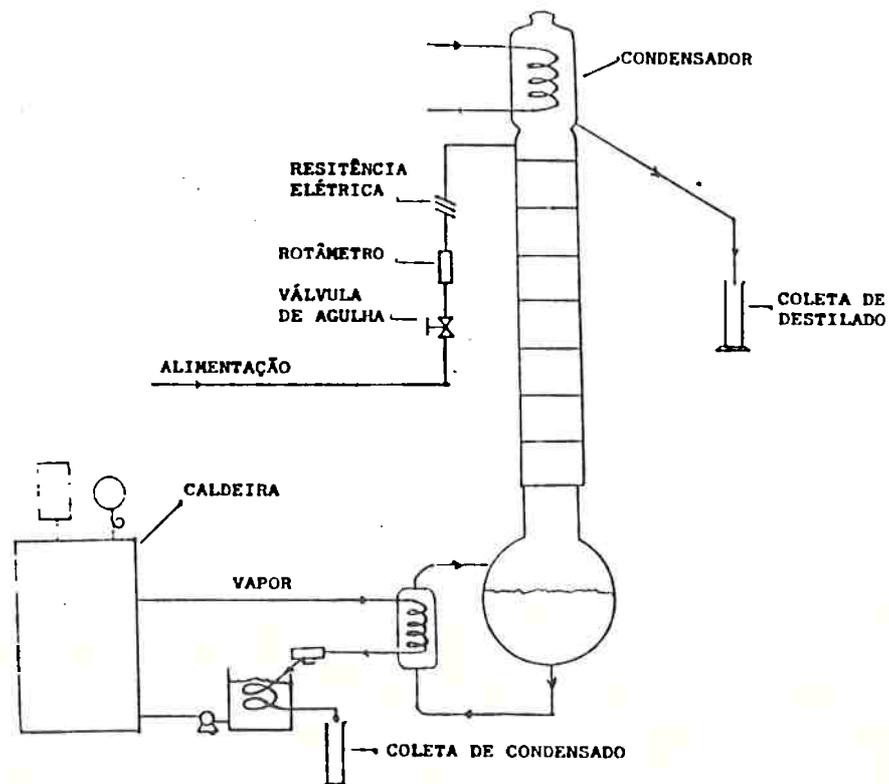


FIGURA 3.7 - Esquema dos equipamentos do sistema estudado

A linha de alimentação de líquido possui um rotâmetro e uma válvula manual, e é aquecida eletricamente, conforme já foi descrito no item 3.2.2 .

A retirada do tanque de acúmulo de fundo foi suprimida pois não é necessária. O tanque tem um tempo de residência na faixa de 4 a 8 horas nas condições de operação, o que faz com que tanto o seu nível quanto a sua composição não se modifiquem substancialmente durante um ensaio, sendo que algumas das variáveis que afetam o nosso sistema (a coluna) são a vazão e a composição do vapor que o deixam. Na figura 3.6 as correntes de vapor e líquido no fundo da coluna são as correntes que entram e saem do tanque de acúmulo de fundo. A composição do líquido que entra neste tanque também não é muito afetada por uma perturbação na alimentação no topo. O grande volume do tanque de acúmulo de fundo amortece as perturbações (cujas médias são o valor no estado estacionário) e portanto podemos considerar a composição do seu conteúdo como invariante no tempo. Como consequência, a composição do vapor que o deixa e que entra no fundo da coluna é também constante.

O produto que condensa no topo é todo ele removido e coletado, e não é mais retornado à coluna: não há mais refluxo.

As variáveis medidas através do sistema de aquisição de dados são:

- temperatura do vapor em cada prato ;
- temperatura do líquido no prato 1 (onde entra a alimentação);
- temperatura da alimentação;
- temperatura do vapor gerado no refulvedor (medida em dois pontos).

Para realizar a aquisição destas variáveis o programa aplicativo foi modificado.

3.3.1.1 Modificações no Programa Aplicativo

Visando facilitar a interface com o usuário e resolver o problema da aquisição de dados com frequência constante, foram feitas diversas modificações no programa aplicativo original.

A apresentação dos dados passou a ser feita em formato alfa-numérico e o formato da entrada de dados, para envio ao processo, passou a ser alfa-numérico, em porcentagem do sinal máximo da saída, sem que o usuário tivesse necessidade de ter conhecimento prévio do protocolo de comunicação.

Uma nova opção foi acrescentada às anteriores: aquisição de dados em período constante. Nesta opção, a estrutura de operação do gerenciador foi mantida, sendo modificada a estrutura do aplicativo. O gerenciador repete o seu ciclo continuamente, com um período de aproximadamente 400 ms, enquanto o aplicativo passa a tratar (apresentar) estas informações com um período constante, T_{ovo} .

O controle das ações é mantido por um "loop" em que o tempo atual (θ) é comparado a um valor de referência (θ_{ref}) e ao valor de referência mais um determinado intervalo de tempo (T_{aq}). Se o valor de θ se encontrar neste intervalo, o aplicativo segue uma sequência de aquisição, senão ele simplesmente verifica se alguma tecla foi pressionada, e dependendo da tecla que foi pressionada, atribui a uma variável de aviso, "flag", o valor "falso" ou "verdadeiro".

O tempo T_{aq} , é o tempo máximo que o programa tem para fazer a sequência de aquisição. Esta sequência é composta dos seguintes itens:

- armazena os valores contidos na área de dados pré-especificada ao gerenciador (dados atuais do processo, de no máximo 400 ms atrás), em disco;
- apresenta os dados. O usuário tem a opção de escolher entre um formato gráfico ou alfa-numérico;

- armazena os dados em disco;
- renova o tempo de referência para $\theta_{ref} + T_{novo}$.

Deste modo a sequência de aquisição é seguida uma única vez a cada T_{novo} tempo.

Durante o tempo em que o aplicativo verifica se alguma tecla foi pressionada, que é o intervalo T_{novo} menos T_{aq} , o usuário pode escolher entre a apresentação das variáveis em formato alfa-numérico ou gráfico, ou também, se quer interromper a opção de aquisição em frequência constante.

Em resumo, dado um instante $(n T_{novo})$, com um erro de no máximo 5 ms, o aplicativo armazena e apresenta os dados mais recentes que o gerenciador obteve do processo; até instante $(n T_{novo} + T_{aq})$ não faz nada; entre os instantes $(n T_{novo} + T_{aq})$ e $((n+1) T_{novo})$ verifica se alguma tecla foi pressionada.

No modo de apresentação gráfico, são apresentadas na tela os cem últimos pontos aquisicionados de quatro variáveis. A cada nova aquisição a tela é renovada, isto possibilita ao usuário ter uma idéia clara de como o processo está se comportando.

Todos os dados são armazenados em um único arquivo, em disco, e em formato binário. A cada aquisição também são armazenados o instante em que isto se dá e uma variável que indica se não houve falha de comunicação, na obtenção deste

conjunto de dados.

3.3.2 Metodologia do Ensaio

O objetivo do ensaio é levantar o comportamento dinâmico do sistema frente a perturbações na vazão de alimentação de líquido no topo. Para tal esta vazão é variada seguindo uma sequência binária pseudo-randômica, com menor intervalo de tempo entre mudanças de 180 s, e as respostas aquisicionadas, ou medidas, em período constante.

O ensaio começa quando é atingido o estado estacionário. No "start-up" foi seguido o seguinte procedimento:

1) A caldeira é ligada e a pressão ajustada para 0,5 kgf/cm², para evitar que haja uma mudança brusca da temperatura da coluna (que é de vidro);

2) Quando o líquido contido no tanque de acúmulo de fundo entrar em ebulição, a pressão da caldeira é aumentada para o valor do ensaio;

3) O programa aplicativo é colocado no modo "aquisição em frequência constante", desta forma podem ser acompanhadas as temperaturas graficamente;

4) Quando a temperatura do vapor no primeiro prato for

igual à temperatura do vapor no refervedor vapor começa-se a resfriar o condensador e a alimentar o líquido no primeiro prato, com uma vazão baixa. Liga-se então a resistência e gradativamente ajusta-se a temperatura da alimentação para as condições do ensaio, assim como a vazão;

5) As temperaturas vão sendo acompanhadas graficamente até se verificar que o sistema atingiu o estado estacionário.

Esta etapa consome aproximadamente duas horas. O ensaio começa reinicializando a opção "aquisição em frequência constante", os dados de temperatura passam a ser adquiridos a cada cinco segundos. E são inicializadas as seguintes tarefas, que são repetidas a cada três minutos:

- 1) ler o volume de vapor condensado;
- 2) ler o volume de destilado coletado;
- 3) ler a pressão da caldeira;
- 4) Variar a vazão da alimentação segundo sequência previamente sorteada, ou seja a alimentação assume o valor máximo ou mínimo durante três minutos.

Simultaneamente a isto vão sendo controlados o nível de água na caldeira e a temperatura da alimentação.

O ensaio consome também aproximadamente duas horas, durante as quais são coletados aproximadamente 1500 pontos.

CAPÍTULO 4 - ANÁLISE DA DINÂMICA DO SISTEMA

4.1 Resultados Obtidos e Análise Preliminar

As condições do ensaio foram:

- A pressão da caldeira ajustada em $1,4 \text{ kgf/cm}^2$ e a banda em $0,1 \text{ kgf/cm}^2$ (mínimo);

- Vazão da alimentação (variada segundo sequência binária pseudo-aleatória):

valor estacionário: 3 l/h

valor mínimo : 2 l/h

valor máximo : 4 l/h ;

- Temperatura da alimentação : $74,4 \pm 1,2 \text{ }^\circ\text{C}$;

- Composição da alimentação : $0,833 \text{ mol de etanol/mol total}$.

O total de pontos amostrados foi de 1504, com um período de amostragem de 5 segundos. As temperaturas do vapor nos pratos 1, 2 e 3 em função do tempo estão apresentadas na figura 4.1 . As temperaturas do vapor nos pratos 6,7 e 8 estão apresentadas em função do tempo na figura 4.2 .

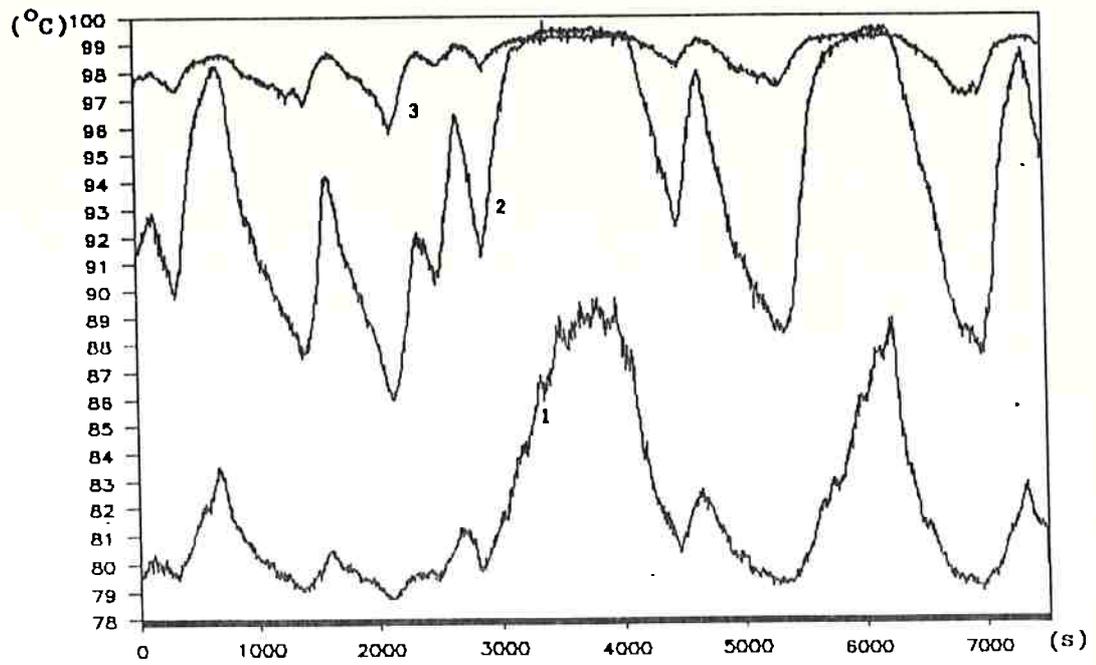


FIGURA 4.1 - Gráfico das temperaturas nos pratos 1,2 e 3 em função do tempo

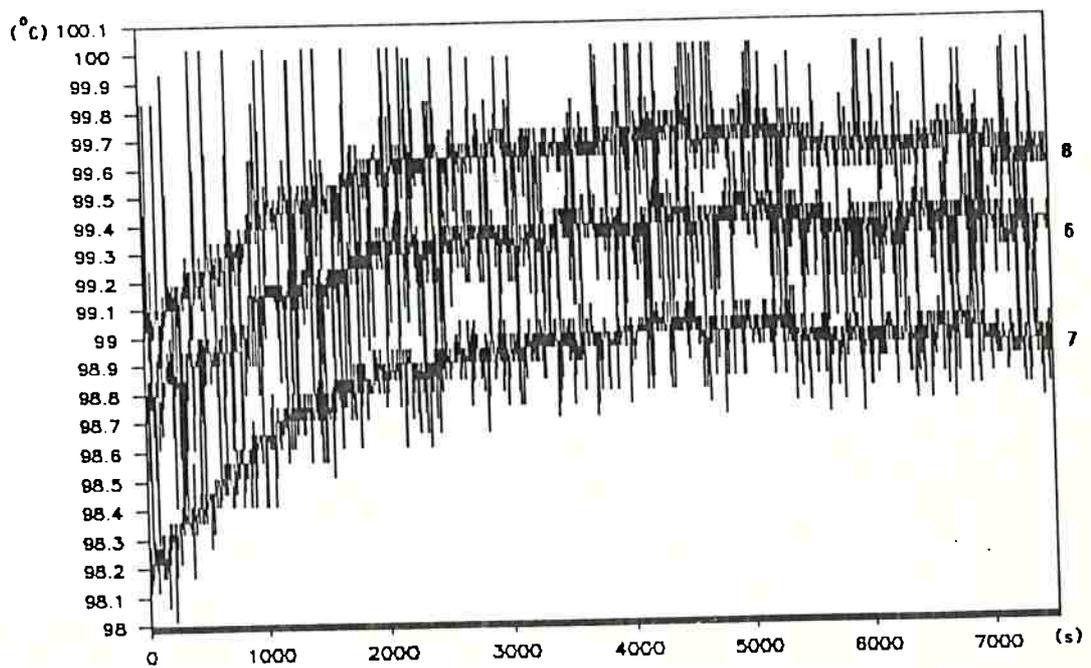


FIGURA 4.2 - Gráfico das temperaturas nos pratos 6,7 e 8 em função do tempo

A temperatura do vapor no prato 1 apresenta um comportamento muito afetado pelo ruído. Ela é muito suscetível a variações da temperatura da alimentação (que não serão consideradas como perturbações).

A temperatura do vapor no prato 2 é aquela que apresenta melhor correlação com a perturbação, tanto porque ela tem a maior faixa de variação dentre todas as temperaturas, quanto porque as perturbações na temperatura de alimentação são amortecidas pelo primeiro prato.

A temperatura do vapor no prato 3 não apresenta uma variação significativa, assim como também é muito influenciada pela limitação física de variação que corresponde à temperatura de ebulição da água, nas condições do ensaio, o que ocorre quando a composição do líquido no prato cai, aproximando-se de 0 (em fração molar de etanol).

As temperaturas do vapor nos pratos 4, 5 , 6, 7 e 8 apresentam um comportamento similar. Elas não apresentam variações significativas, pois a composição do líquido nos pratos é praticamente nula (em fração molar de etanol), porque a relação de vazão líquido-vapor favorece este comportamento.

Elas apresentam um comportamento praticamente constante no tempo . Fisicamente seria esperado que as temperaturas

correspondessem à de ebulição da água, e serem decrescentes do prato 1 ao 8, no entanto isto não se verifica e as temperaturas dos pratos 6 a 8 não são decrescentes. Este fato pode ser explicado pela grande margem de incerteza na calibração das placas condicionadoras de sinal de temperatura. Estas placas foram calibradas tomando as temperaturas de ebulição e fusão da água como referência (duas calibrações anteriores que envolveram remoção do equipamento do local da experiência não se mostraram efetivas). O ponto de ebulição da água apresenta uma grande dependência com as condições da calibração, assim como uma grande incerteza, da ordem de 1°C .

Estas temperaturas apresentam um comportamento não estacionário com o tempo, podemos ver que o aumento é da ordem de 0.6°C , em uma hora, o que pode ser explicado pela possibilidade de que o tanque de fundo não tivesse atingido o estado estacionário no instante em que se iniciaram as perturbações. A verificação de se o sistema estava ou não no estado estacionário, durante a aquisição, era feita visualmente, acompanhando um gráfico de tendência. O tempo de processo registrado nesse gráfico era de dez minutos, seria muito difícil detectar um variação de 0.1°C . É importante frisar também que a escala deste gráfico é muito pequena, e caso a faixa das ordenadas fosse de 10°C ,

difícilmente este comportamento seria percebido.

Na figura 4.3 apresentamos um gráfico da temperatura da alimentação em função do tempo. Vemos que a variação da temperatura apresenta características não estacionárias, devido ao fato do seu controle não ser ideal. Por isso nota-se uma grande correlação entre esta variável e a vazão de alimentação.

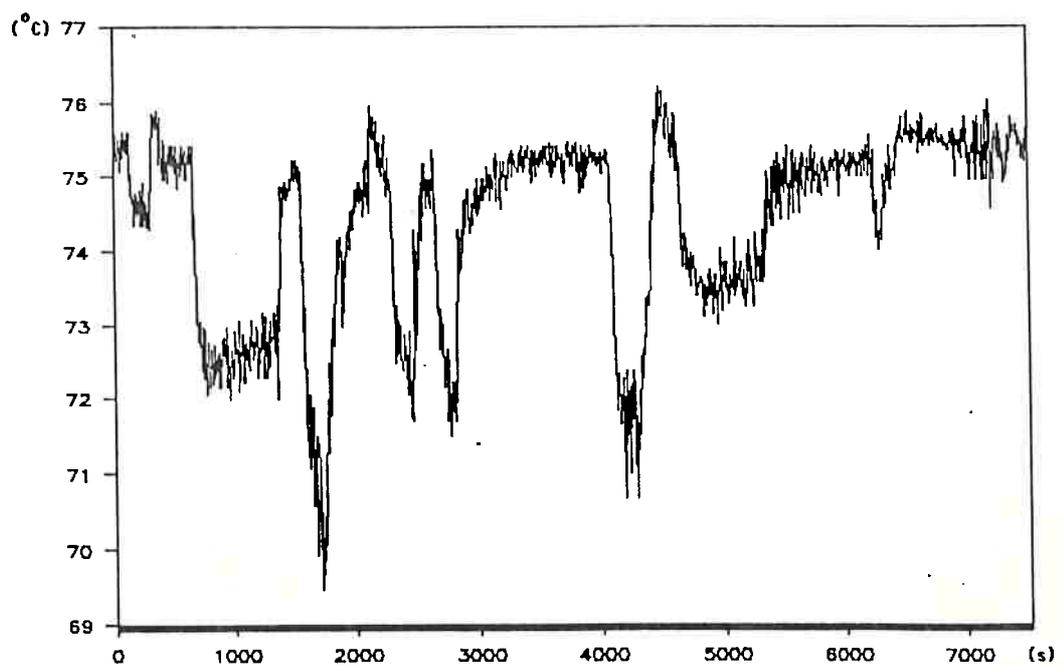


FIGURA 4.3 - Gráfico da temperatura da alimentação em função do tempo

Apesar disto a sua variação é pequena , $\pm 2^{\circ}\text{C}$ (variância de 1.2°C). O efeito que esse comportamento provoca, pensando do ponto de vista físico seria o de amplificar o efeito do aumento ou diminuição da vazão. Quando a vazão aumenta, a temperatura da alimentação cai, o que provoca um aumento ainda maior da corrente interna de líquido, portanto a relação líquido vapor é maior do que a esperada caso a alimentação estivesse na temperatura de bolha. Por isso não é necessário incluí-la nos modelos.

Por outro lado uma diferença de 2 a 6°C em relação à temperatura de bolha (que é de 76.1°C) da temperatura do líquido que entra na coluna, influi muito pouco no balanço de entalpia no primeiro prato, de modo a hipótese de que ela possa ser considerada constante não é muito restritiva.

Nas figuras 4.4 e 4.5 apresentamos gráficos dos volumes de vapor condensado e volumes de destilado em função do tempo, respectivamente. Estes gráficos permitem uma análise aproximada das variáveis neles representadas.

O vapor condensado apresenta um comportamento constante, dentro das incertezas do processo de medição, cujo período de amostragem é da ordem do período de descarga do purgador termodinâmico.

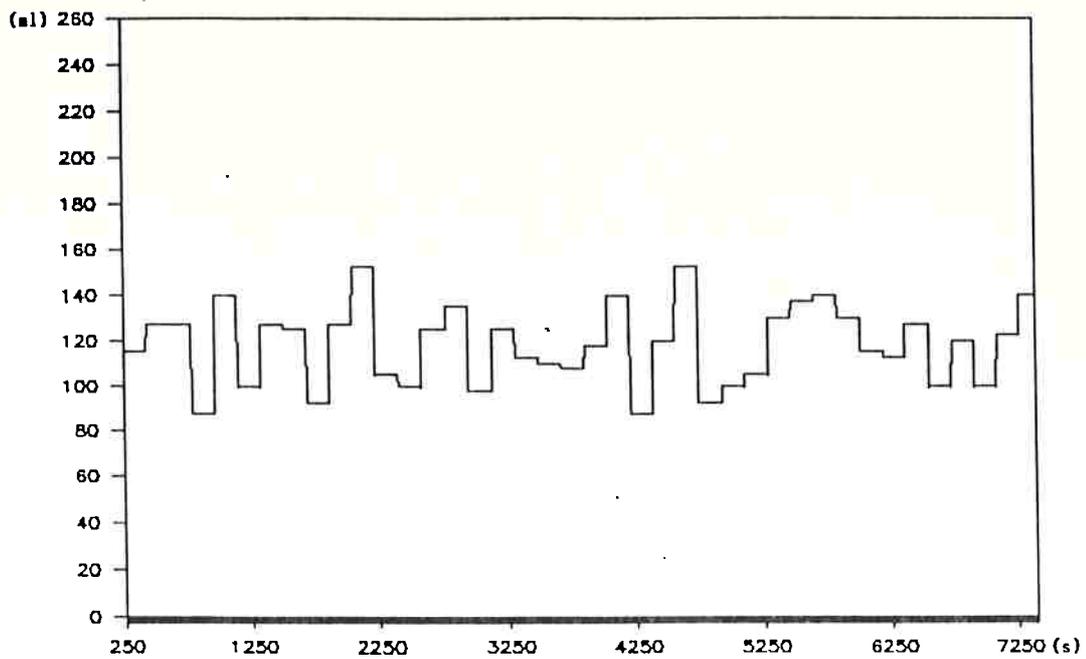


FIGURA 4.4 - Gráfico do volume de vapor condensado em função do tempo

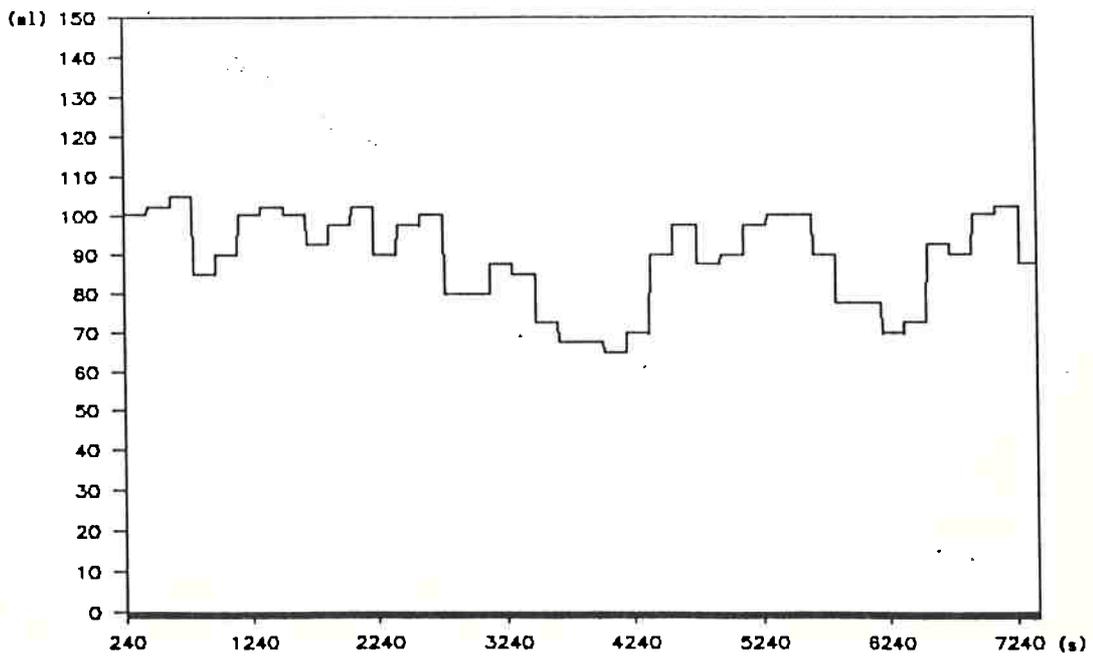


FIGURA 4.5 - Gráfico do volume de destilado coletado em função do tempo

O volume de destilado apresenta uma grande correlação com a vazão de alimentação, mas o período com que ele foi medido não permite que seja levado em conta na identificação, pois difere muito, na ordem de grandeza, do período de amostragem da aquisição, sendo que o número de pontos experimentais é reduzido.

Não é possível analisar como uma perturbação a pressão da caldeira pois a incerteza na sua medição, através do manômetro Bourdon, é grande, da ordem de sua variação. Podemos supor que o seu comportamento é estacionário.

Foi escolhida a temperatura do vapor no prato 2 como saída do processo. A variável de saída será considerada a partir do instante $t=125$ s, início das perturbações, pois antes disto a entrada não apresenta característica suficientemente excitante, o que pode levar a erro na identificação (restando portanto 1480 pontos experimentais). Foi subtraído desta variável o seu valor no estado estacionário (92.7°C). A esta variável daremos o nome de $y(t)$.

A perturbação (vazão de alimentação) foi considerada determinística e do seu valor foi subtraído 3l/h , o seu valor no estado estacionário. A esta sequência foi dado o nome de $u(t)$.

Na figura 4.6 apresentamos um gráfico de $y(t)$ e $u(t)$ em

função do tempo. Podemos perceber no gráfico a grande correlação existente entre estas variáveis, o valor que foi subtraído das mesmas é coerente e a finalidade é de evitar "bias" nos modelos identificados (Ljung, 1987).

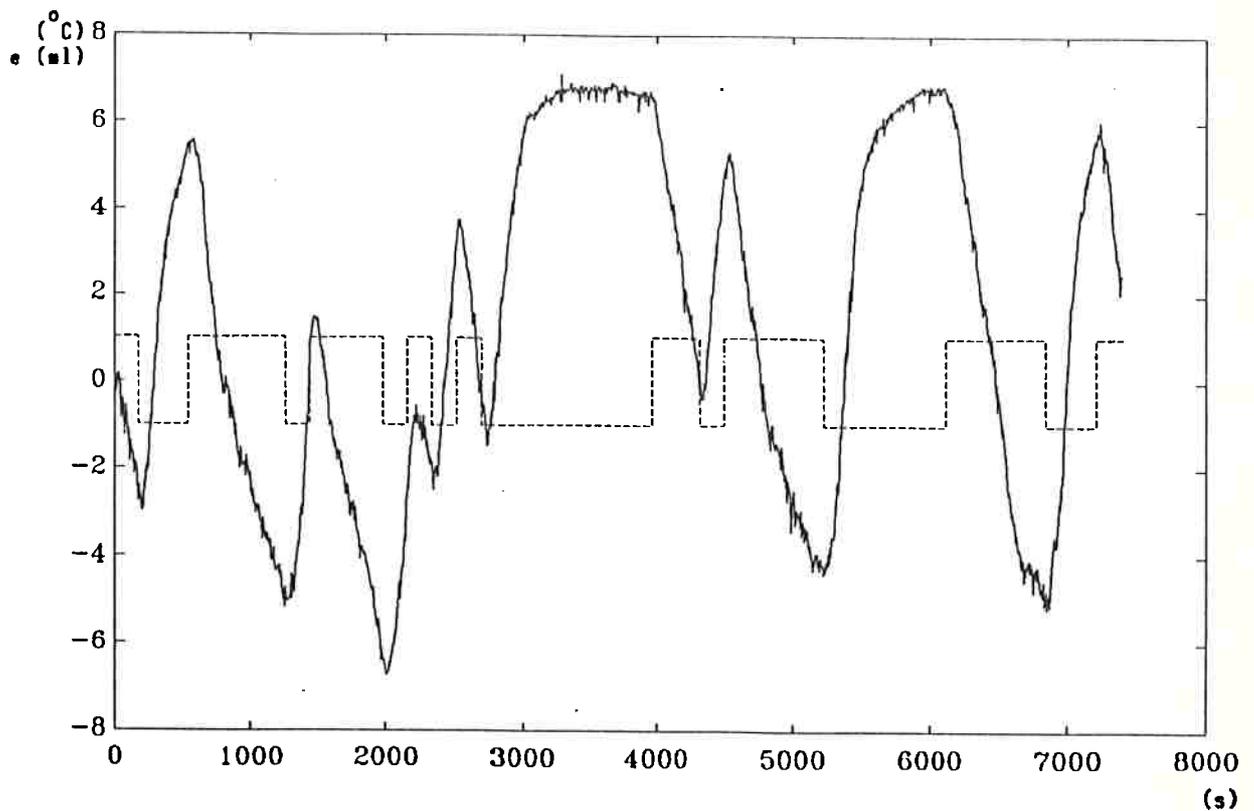


FIGURA 4.6 - Gráfico de $y(t)$ e $u(t)$ (tracejado) em função do tempo

4.2 Análise Estatística

As funções de auto-correlação das sequências experimentais de entrada e saída estão apresentadas nas figuras 4.7 e 4.8 . É interessante notar a mudança de inflexão no gráfico de $\hat{R}_u(t)$, correspondente ao intervalo mínimo entre mudanças (180 s).

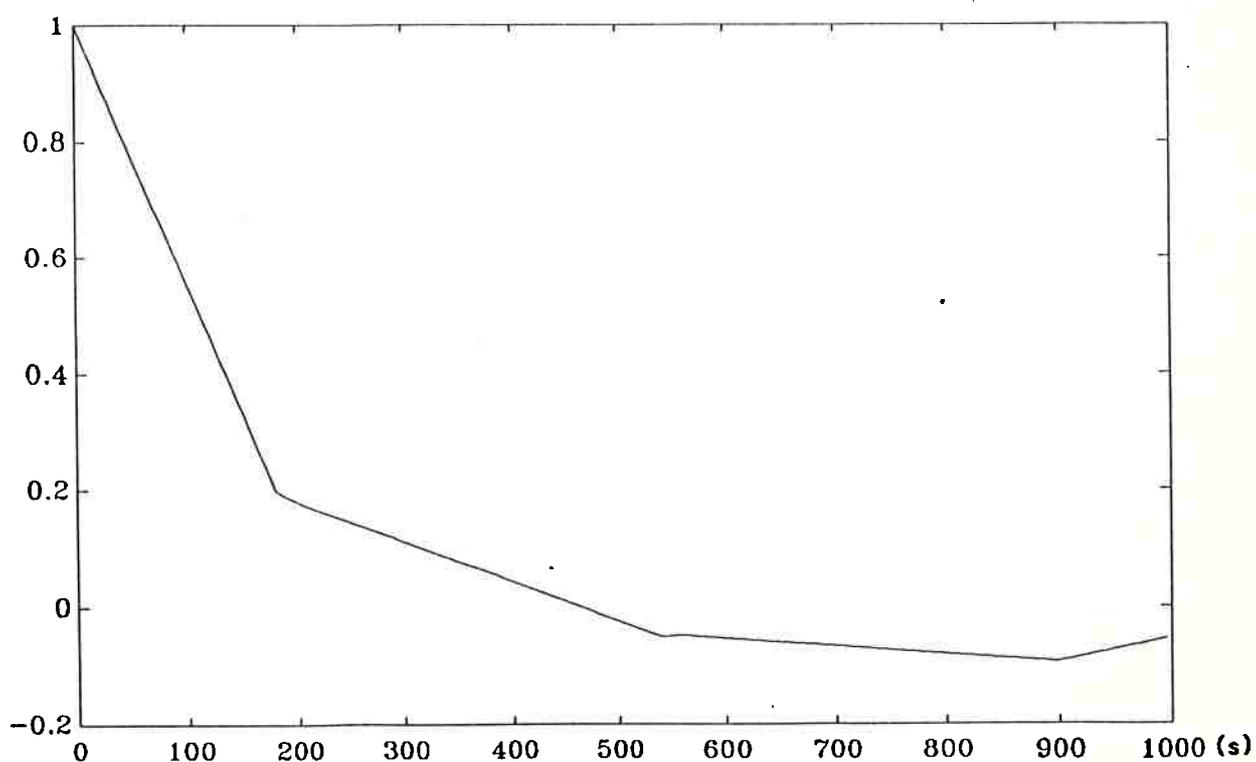


FIGURA 4.7 - Gráfico de $\hat{R}_u(t)$ em função do tempo

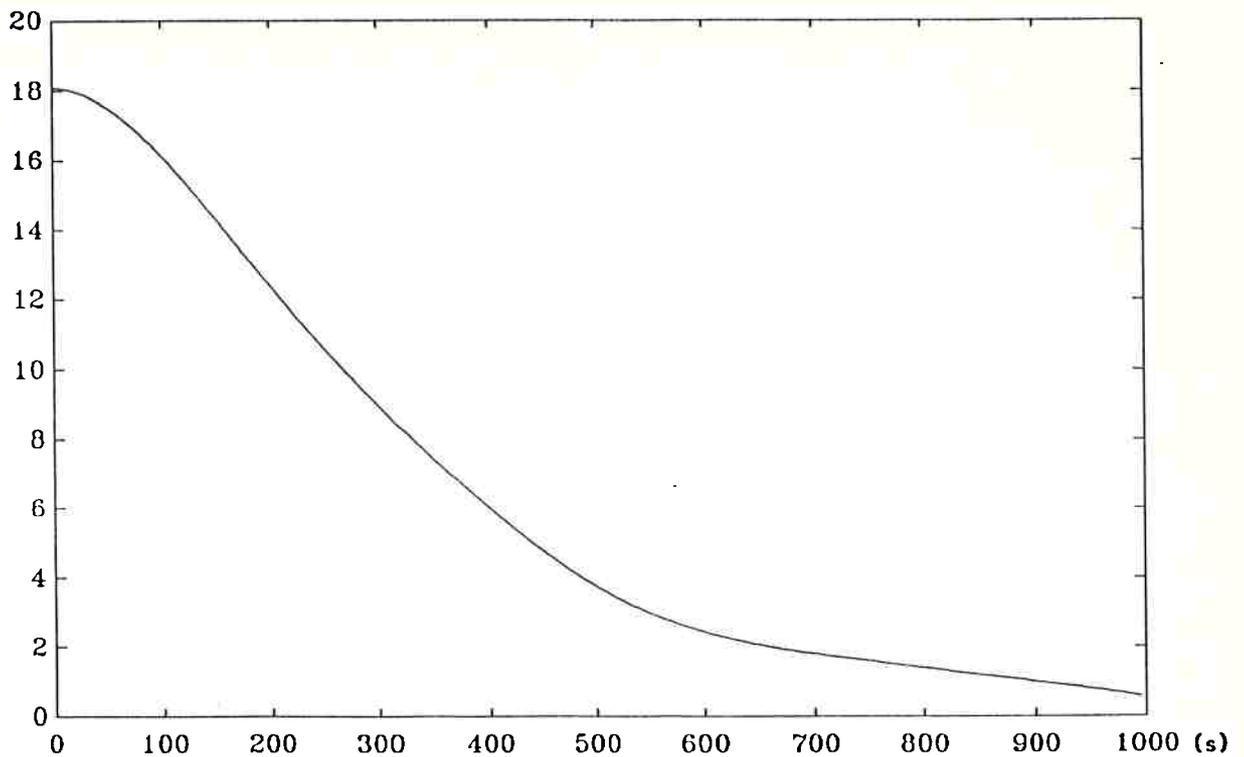


FIGURA 4.8 - Gráfico de $\hat{R}_y(t)$ em função do tempo

Nas figuras 4.9 e 4.10 apresentamos os espectros de $u(t)$ e $y(t)$, calculados usando a média do espectro de várias sub-sequências, cada uma com 256 pontos. No espectro de $u(t)$ vemos claramente que o mesmo foi gerado partir de uma frequência básica de $1/180$ Hz, sem no entanto apresentar características oscilatórias pois os picos não são muito elevados e se repetem indefinidamente, o que não ocorreria se o sinal fosse puramente oscilatório. Por outro lado o fato dele não se anular, no intervalo em que está calculado,

o classifica como sendo persistentemente excitante (definição 14.2, pag.364, Ljung, 1987). Isto é, quando aplicado a um processo em malha aberta, se existir dentro do conjunto de modelos lineares invariantes no tempo, um modelo que descreva a sua saída, este modelo é único dentro deste conjunto (não a sua parametrização necessariamente).

Analisando o espectro de $y(t)$ vemos que o mesmo não apresenta picos acima da faixa de 0.02 Hz, sendo ele menos aberto que o espectro de $u(t)$, e também não apresenta os picos que o espectro de $u(t)$ apresenta.

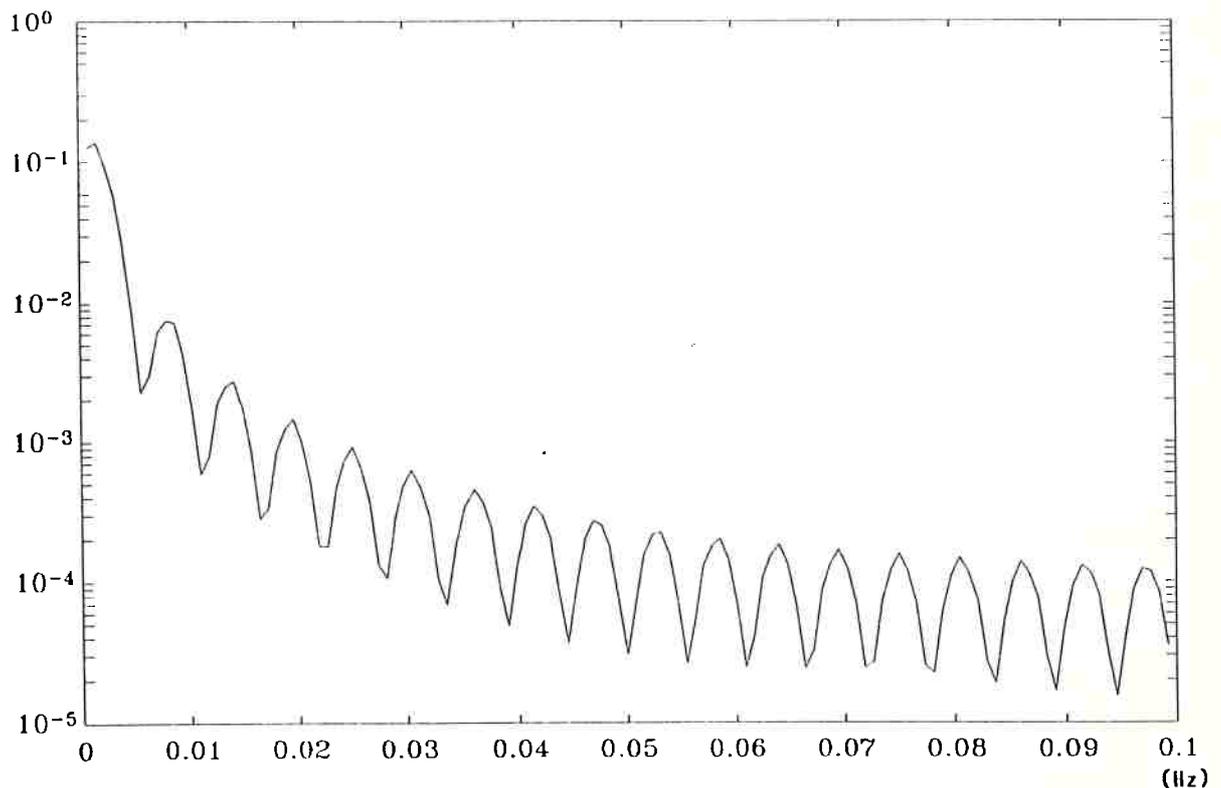


FIGURA 4.9 - Gráfico de $\hat{\phi}_u(\omega)$ em função da frequência

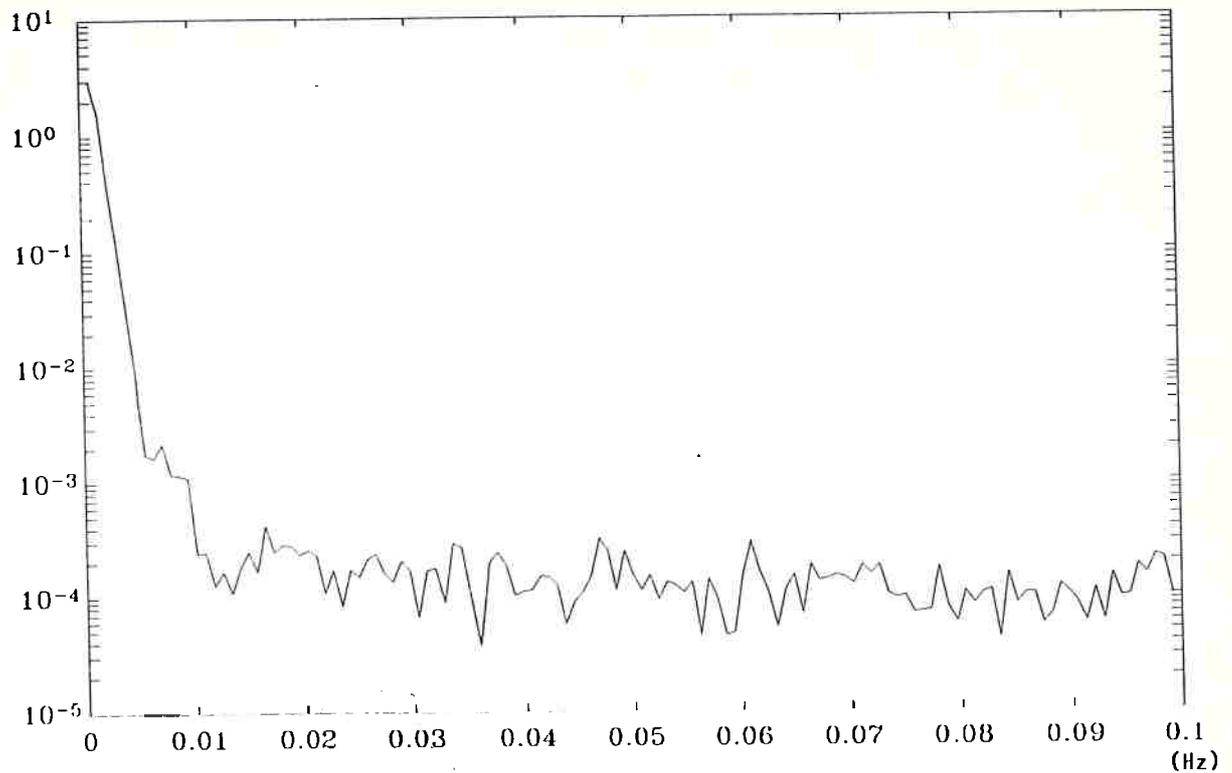


FIGURA 4.10 - Gráfico de $\hat{\phi}_y(\omega)$ em função da frequência

Na figura 4.11, apresentamos um gráfico de correlação entre $u(t)$ e $y(t)$. Este gráfico apresenta um mínimo para valores positivos de t , correspondendo a $t=180$ s, que também corresponde ao intervalo mínimo entre mudanças da perturbação.

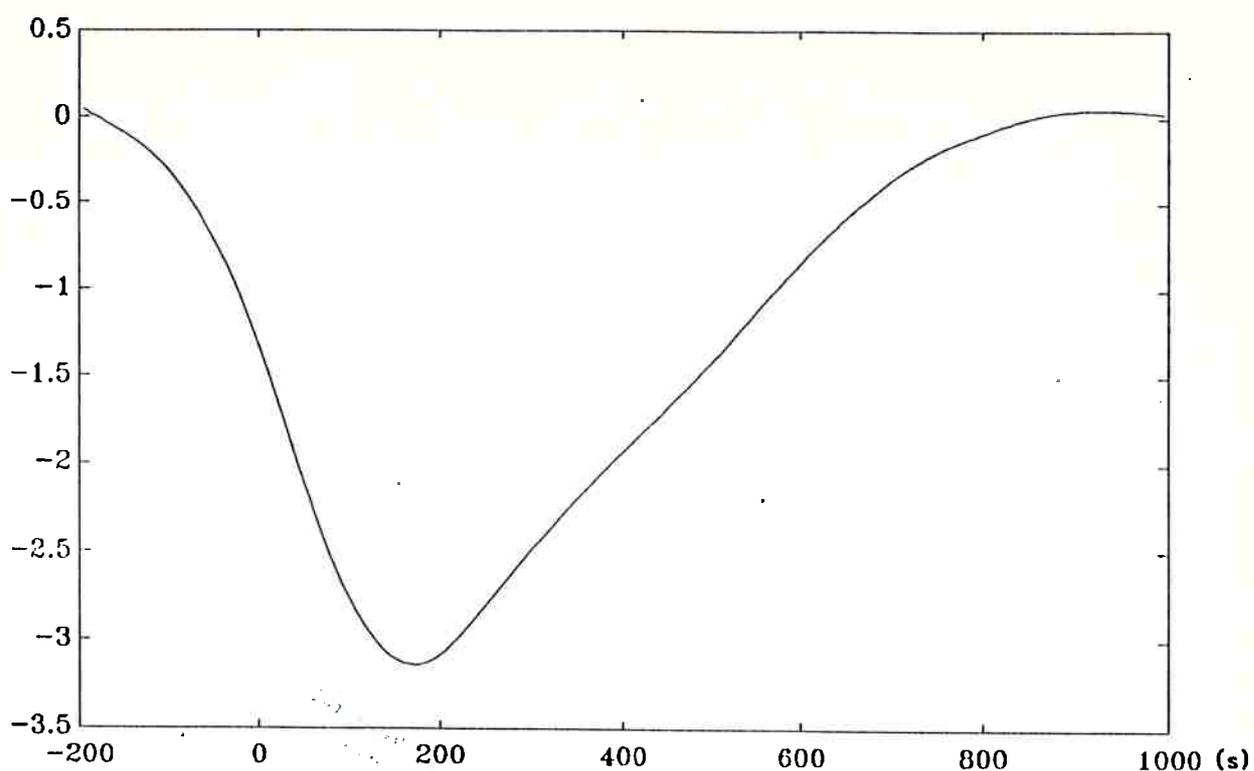


FIGURA 4.11 - Gráfico de $\hat{R}_{yu}(t)$ em função do tempo

Para tentar verificar a existência de atraso no sistema, investigamos a correlação entre a entrada e os incrementos da saída $(y(t)-y(t-\tau))$. A função de correlação de $(y(t)-y(t-\tau))$ e $u(t)$ apresenta um mínimo na faixa de 20 a 90 s. Isto pode ser interpretado como um atraso no sistema, ou como uma constante de tempo da função de transferência, como pode ser visto na figura 4.12, pois indica uma defasagem entre a resposta dinâmica do sistema e a entrada.

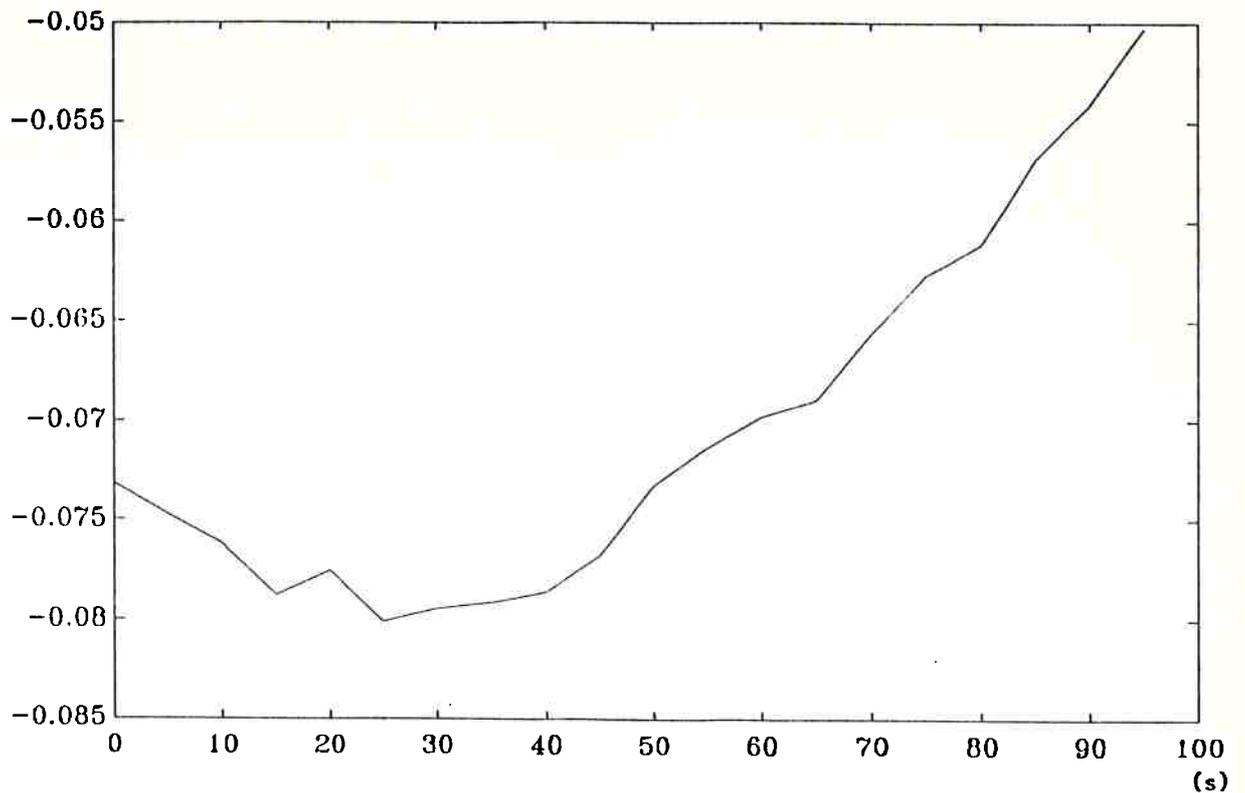


FIGURA 4.12 - Gráfico de $\hat{R}\Delta y_u(t)$ em função do tempo

Não conseguimos obter uma boa estimativa de $G(e^{j\omega})$ pois para janelas de Hamming pequenas a estimativa é muito afetada pelo espectro particular de $u(t)$, ou seja, apresenta picos regulares que correspondem aos picos de $\hat{\varphi}_u(\omega)$ (figuras 4.13 e 4.14). Para valores maiores de M , a estimativa apresenta um grande número de picos randômicos, e o gráfico da fase de $\hat{G}(e^{j\omega})$ apresenta um comportamento estranho pois não decresce com ω , conforme pode ser visto nas figuras 4.15 e 4.16. Por outro lado os dois diagramas de Bode (para $M=20$ e $M=128$) não se aproximam significativamente nem para baixas frequências.

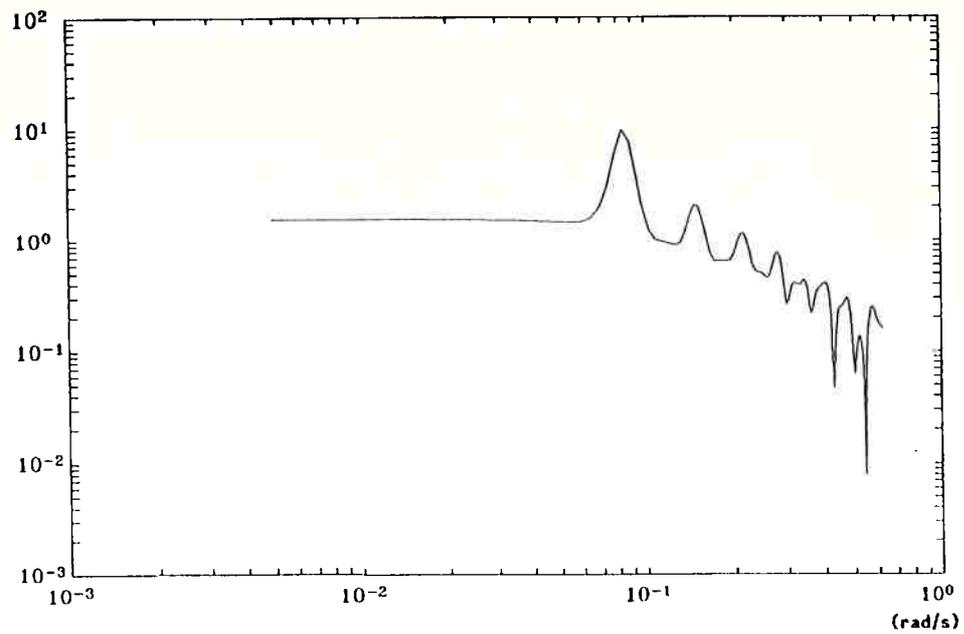


FIGURA 4.13 - Gráfico de $|\hat{G}(e^{j\omega})|$, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência

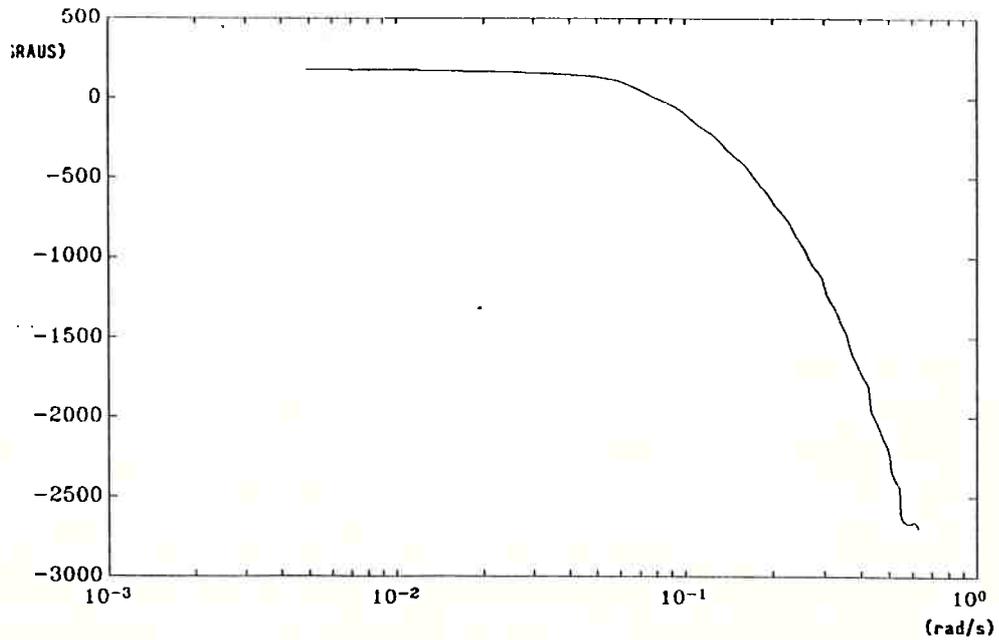


FIGURA 4.14 - Gráfico de $\text{Arg}(\hat{G}(e^{j\omega}))$, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência

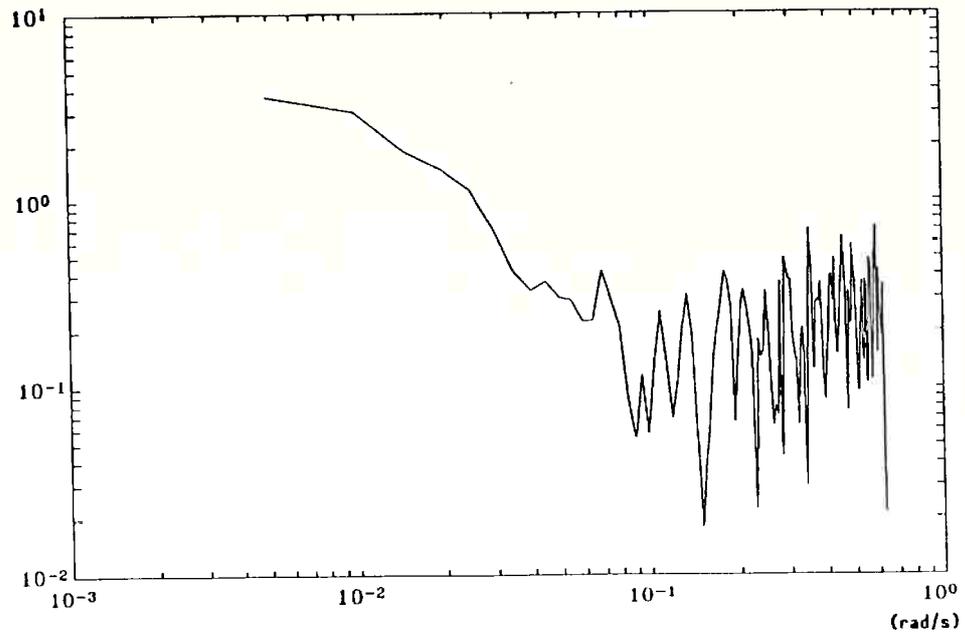


FIGURA 4.15 - Gráfico de $|\hat{G}(e^{j\omega})|$, estimado com uma janela de Hamming com $M=128$, em função da frequência

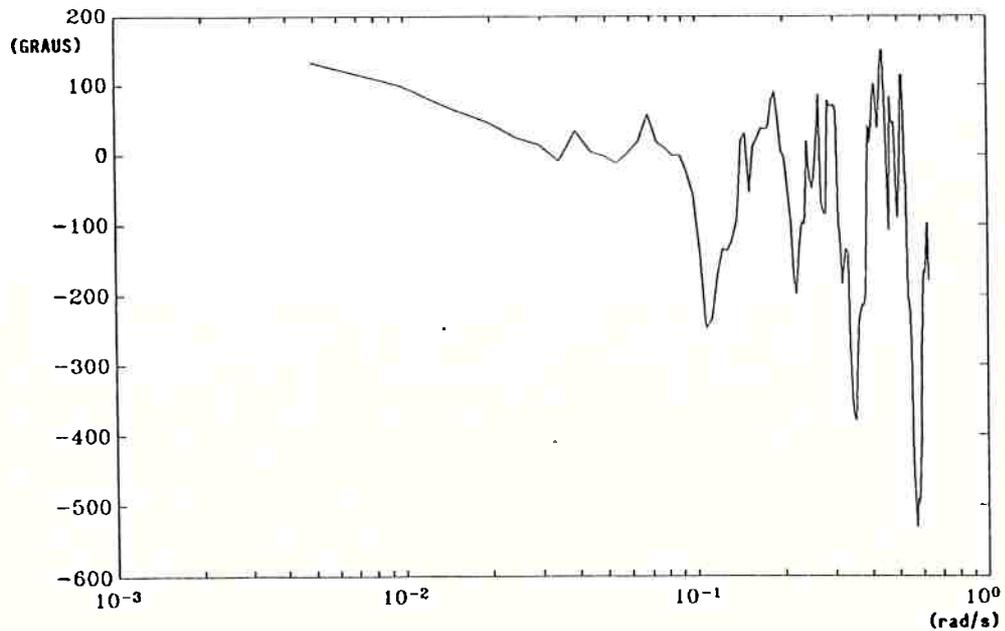


FIGURA 4.16 - Gráfico de $\text{Arg}(\hat{G}(e^{j\omega}))$, estimado com uma janela de Hamming com $M=20$, em função da frequência

4.3 Identificação de Modelos Lineares Invariantes no Tempo

4.3.1 Introdução

Nesta etapa foi realizada a identificação da dinâmica do sistema através de modelos lineares invariantes no tempo. As rotinas utilizadas fazem parte do pacote comercial PCMATLAB.

A metodologia de determinação das ordens dos diferentes polinômios dos modelos foi guiada pela finalidade de encontrar um modelo que representasse bem o sistema, sem levar em conta possíveis aplicações práticas do modelo identificado. A melhoria ou não de um modelo pela mudança das ordens era verificada através dos seguintes critérios:

- Variância do resíduo;
- Erro Final de Predição (FPE);
- Auto-correlação do resíduo;
- Correlação entre o resíduo e entrada;
- Zeros e Polos do modelo Identificado;
- Simulação do modelo sem ruído.

A primeira fase consistia na procura de uma estimativa do atraso, assumindo ordens baixas nos outros polinômios, verificamos o efeito do seu aumento ou decréscimo.

Identificada a ordem do atraso, as outras ordens eram variadas. Quando o resultado obtido não permitisse mais melhorias significativas, sobretudo no erro final de predição, pela mudança das ordens, era testada a variação do atraso novamente. O critério portanto foi a minimização do FPE.

4.3.2 Descrição das Ferramentas

As rotinas utilizadas foram ARX, IV4, ARMAX e BJ. A rotina ARX faz a identificação de uma estrutura ARX, resolvendo o problema de mínimos quadrados analiticamente (já que o modelo preditor ARX é linear nos parâmetros) conforme descrito no apêndice 1. São argumentos desta rotina as ordens de A e B, o número de períodos de atraso (nk), a frequência de amostragem (τ) e as sequências de dados experimentais $u(t)$ e $y(t)$. A rotina calcula além dos parâmetros a serem identificados, as suas respectivas variâncias, a variância do resíduo e o FPE.

A rotina IV4, utiliza o método de variáveis instrumentais de quatro estágios, também analítico. Ela é usada para identificar uma estrutura ARX e os seus argumentos e saídas são iguais aos da rotina ARX.

As rotinas ARMAX e BJ fazem a identificação de

estruturas ARMAX e Box-Jenkins respectivamente, descritas no apêndice 1. Elas empregam o método de Gauss-Newton, descrito no apêndice 3, para minimizar a norma do resíduo. São argumentos destas rotinas as ordens dos polinômios, o número de períodos de atraso (nk), as sequências de dados experimentais, o número máximo de iterações no algoritmo de Gauss-Newton, a tolerância relativa na função objetivo, o período de amostragem (τ) e um limite para cálculo da norma robustificada (LIM).

A saída das rotinas ARMAX e BJ são os parâmetros identificados, as suas respectivas variâncias, a variância do resíduo e o FPE. Durante o processamento as rotinas apresentam, a cada iteração, os valores da norma do resíduo, a norma do vetor de Gauss-Newton, o número de iterações (bissecções) com o mesmo vetor, e o valor dos parâmetros a cada nova iteração. Se o número de iterações com uma mesma direção for superior a 10 o programa considera que o mínimo foi atingido pois não conseguiu um valor dos parâmetros que diminuisse ainda mais a função objetivo. Os valores "default" dos parâmetros são 10 para o número máximo de iterações e 0.01 para a tolerância.

4.3.3 Resultados da Identificação

Foram testados valores de período de amostragem diferentes do de aquisição dos dados. Isto foi feito decimando-se os dados. Ou seja os dados foram reagrupados retirando-se, por exemplo, três pontos de cada quatro, obtendo assim uma sequência cuja relação de número de pontos é de 1:4 para a sequência original e cujo período de amostragem é de 4 vezes o original. A decimação foi aplicada com o intuito de analisar qual o melhor período de amostragem para se estudar a dinâmica do sistema.

Apresentamos principalmente os melhores modelos identificados para cada estrutura. Alguns comentários pertinentes e análises também são incluídos.

4.3.3.1 Estrutura ARX Usando a Rotina ARX

Os resultados da identificação da estrutura ARX através da rotina ARX estão apresentados na tabela 4.1. Nas figuras 4.17, 4.18 e 4.19 apresentamos gráficos do resultado da simulação sem ruído através do modelo identificado,

juntamente com a sequência experimental.

	intervalo de amostragem 5 s	intervalo de amostragem 20 s	intervalo de amostragem 40 s
A	-0.6096 ± 0.0259	-0.9577 ± 0.0508	-1.3169 ± 0.0720
	-0.2865 ± 0.0304	-0.2821 ± 0.0703	0.2062 ± 0.1165
	-0.1606 ± 0.0312	0.1510 ± 0.0712	0.1594 ± 0.0649
	-0.0507 ± 0.0315	0.1289 ± 0.0440	
	0.0039 ± 0.0314		
	-0.0112 ± 0.0305		
	0.1285 ± 0.0253		
B	-0.0827 ± 0.0249	-0.1282 ± 0.0359	-0.2983 ± 0.0514
	-0.0272 ± 0.0257	-0.1602 ± 0.0413	-0.3104 ± 0.0728
			0.0071 ± 0.0744
			0.2406 ± 0.0651
nk	9 (45 s)	2 (40 s)	1 (40 s)
$V_N(\hat{\theta})$	0.0388	0.0729	0.1493
FPE	0.0393	0.0790	0.1611

Tabela 4.1 - Resultados da identificação de modelo ARX através da rotina ARX.

Durante a identificação dos dados amostrados com período de 5 s, notamos que à medida que aumentávamos a ordem de A, a variância do resíduo e o FPE diminuíam, tendo limitado a análise a sete pois quando foi testada uma ordem de 11 para A, a variância e o FPE foram menores também, apesar do resultado da simulação sem ruído não ter apresentado melhoras significativas.

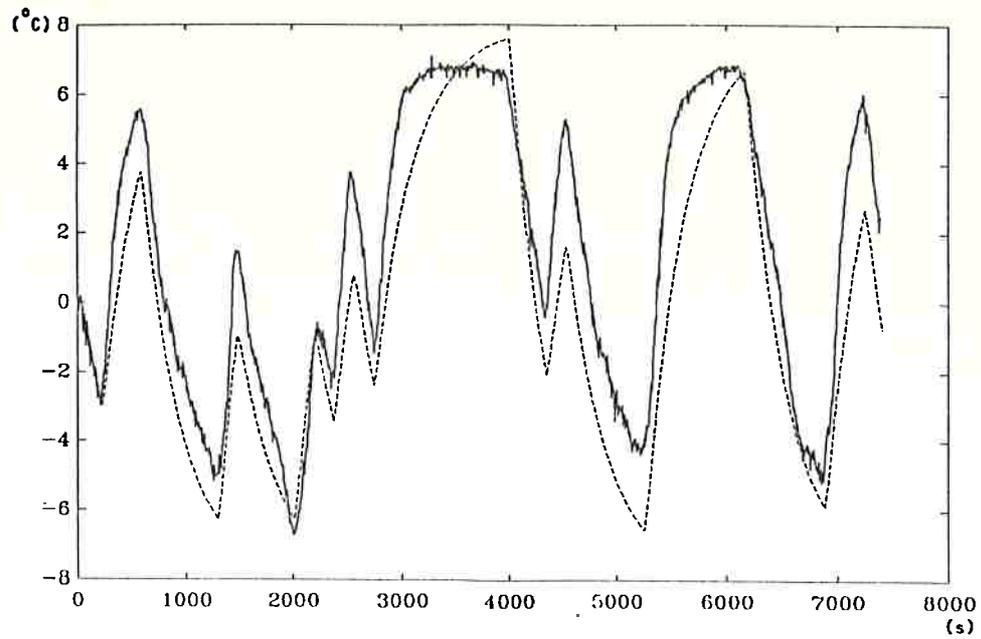


FIGURA 4.17 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 5s)

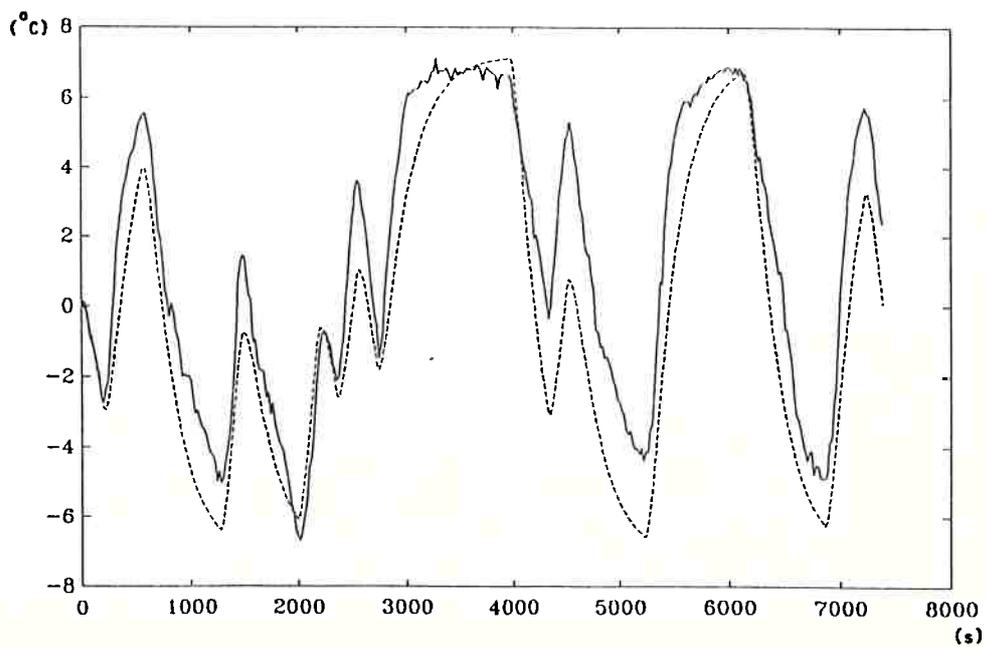


FIGURA 4.18 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

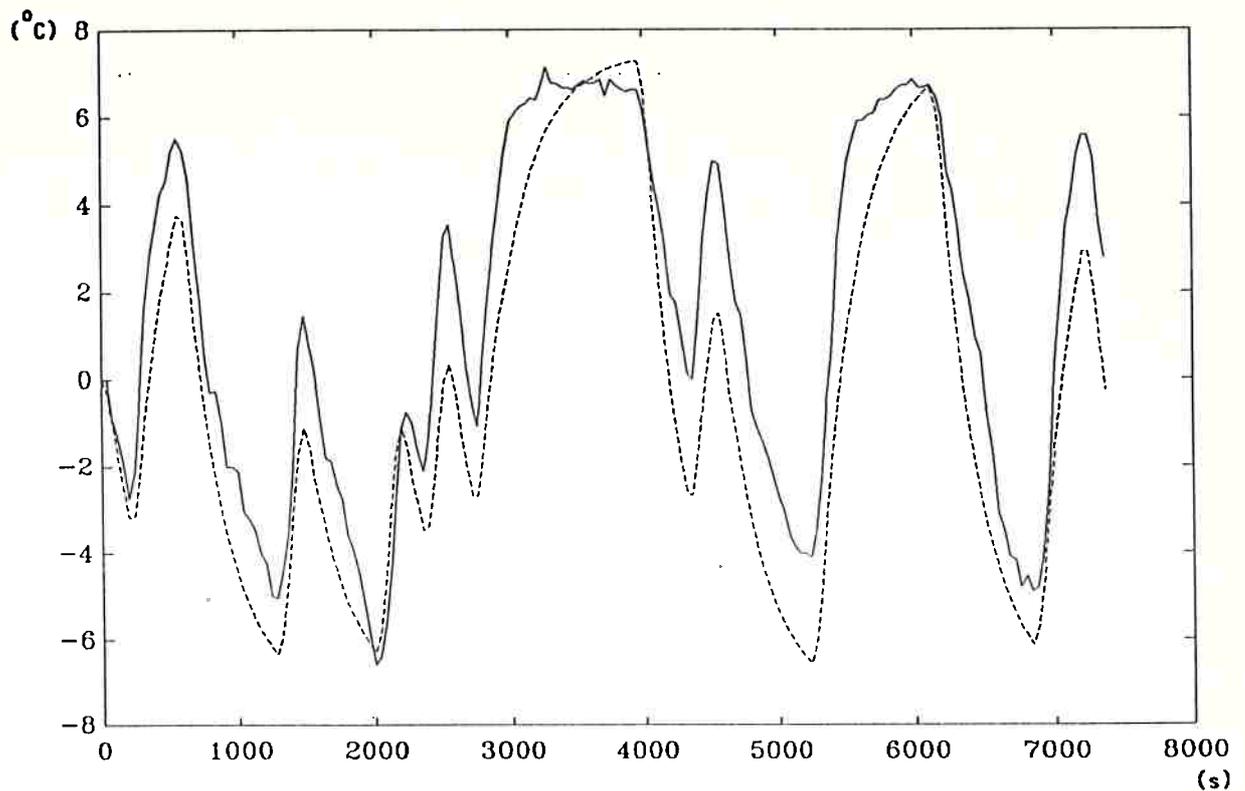


FIGURA 4.19 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina ARX, em função do tempo (tempo de amostragem 40s)

4.3.3.2 Estrutura ARX Usando a Rotina IV4

Os resultados da identificação da estrutura ARX através da rotina IV4 estão apresentados na tabela 4.2 . Nas figuras 4.20, 4.21 e 4.22 apresentamos gráficos do resultado da simulação sem ruído através do modelo identificado, juntamente com a sequência experimental.

	intervalo de amostragem 5 s	intervalo de amostragem 20 s	intervalo de amostragem 40 s
A	-0.5257 ± 0.7612	-0.8358 ± 0.3138	-1.5707 ± 0.6908
	-0.5642 ± 1.0547	-0.5977 ± 0.5209	0.7621 ± 1.3292
	-0.3370 ± 1.0625	0.4860 ± 0.2207	-0.0123 ± 0.9539
	-0.1971 ± 1.0264		-0.1127 ± 0.2827
	0.6300 ± 0.6989		
B	-0.0396 ± 0.0127	-0.1323 ± 0.0349 -0.1960 ± 0.0591	-0.2863 ± 0.0489 -0.2172 ± 0.2509
n_k	0	2 (40 s)	1 (40 s)
$V_N(\hat{\theta})$	0.0385	0.0729	0.1354
FPE	0.0388	0.0749	0.1445

Tabela 4.2 - Resultados da identificação de modelo ARX através da rotina IV4.

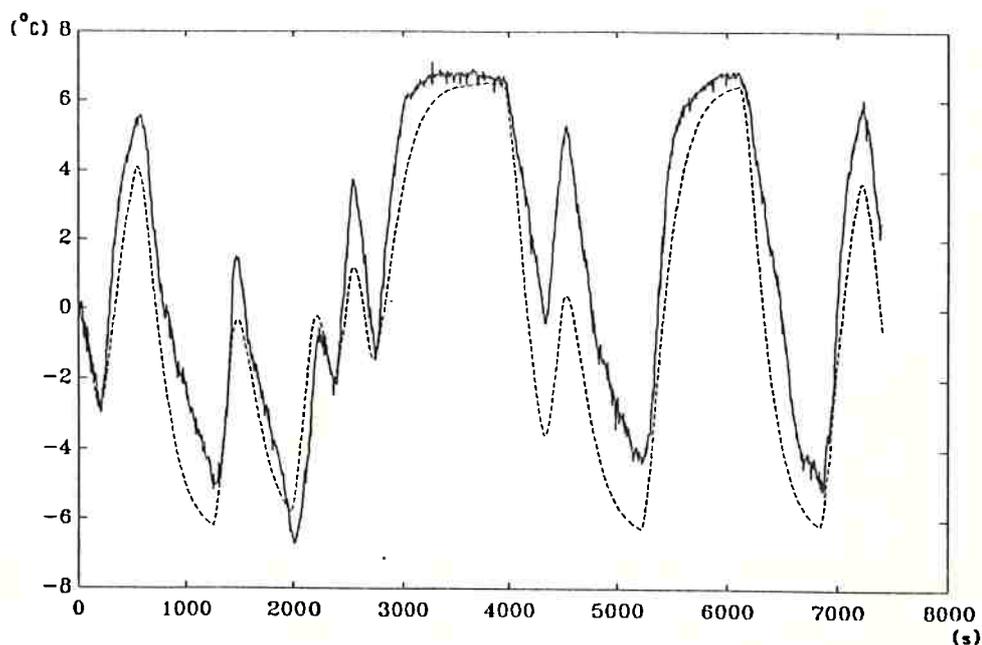


FIGURA 4.20 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 5s)

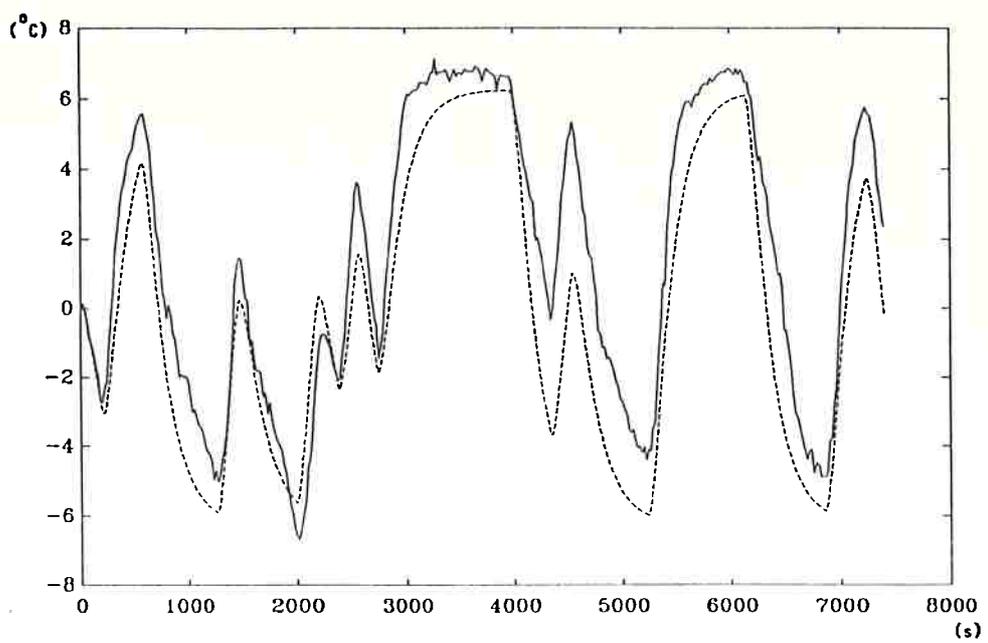


FIGURA 4.21 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

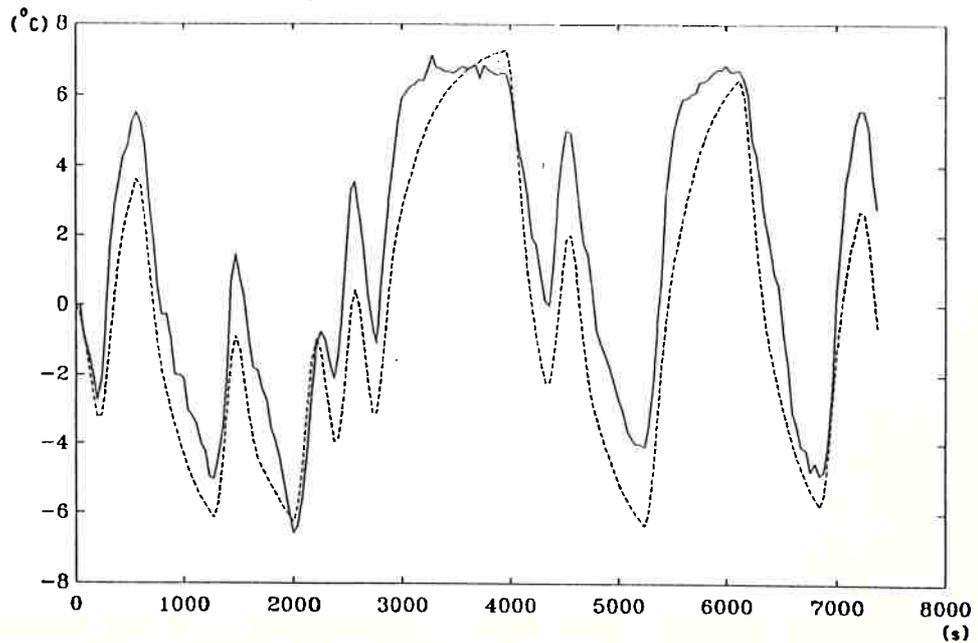


FIGURA 4.22 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARX identificado pela rotina IV4, em função do tempo (tempo de amostragem 40s)

É interessante notar que a rotina identificou como sendo nulo o atraso, com os dados experimentais obtidos com um período de amostragem de 5 s. Caso o atraso, ou a ordem de B fossem aumentados o resultado da identificação seria um modelo não estável (com polos fora do círculo unitário) que apresentava grande correlação entre o resíduo e a entrada. As razões disto podem ter sido numéricas, pois para certas condições a rotina mostrava um aviso dizendo que a matriz estava mal condicionada, ou seja o resultado da resolução do sistema de equações algébricas lineares poderia conter um grande erro numérico. Quatro hipóteses podem explicar este fato: $u(t)$ e $e(t)$ não são independentes, existe retro-alimentação no sistema, a ordem de B na realidade é 1 (caso a ordem do modelo esteja superestimada a matriz principal do método se anula (Ljung, 1987, pag. 232) e finalmente a frequência de amostragem que pode ser grande demais, provocando um mau condicionamento numérico dos dados.

Como este fato não se registrou para os dados amostrados com frequências menores, a última hipótese será considerada. Apesar disto a figura 4.20 mostra uma boa aproximação dos dados experimentais pelo modelo, por isto é que a ordem do sistema foi aumentada apesar dos parâmetros de A, de ordem superior a 2 terem o seu valor significativamente zero

(variância maior que o parâmetro).

4.3.3.3 Estrutura ARMAX

Os resultados da identificação da estrutura ARMAX estão apresentados na tabela 4.3. Nas figuras 4.23, 4.24 e 4.25 apresentamos gráficos do resultado da simulação sem ruído através do modelo identificado, juntamente com a sequência experimental.

	intervalo de amostragem 5 s	intervalo de amostragem 20 s	intervalo de amostragem 40 s
A	-2.0982 ± 0.0489 1.2803 ± 0.0935 -0.1808 ± 0.0454	-0.7849 ± 0.1805 -0.4451 ± 0.2022 0.0747 ± 0.0718 0.1996 ± 0.0707	-1.3092 ± 0.0541 0.3828 ± 0.0509
B	-0.0239 ± 0.0073 0.0146 ± 0.006	-0.1208 ± 0.0355 -0.1987 ± 0.0526	-0.2921 ± 0.0533 -0.2540 ± 0.0691
C	-1.5432 ± 0.6452 0.0383 ± 0.0366	0.1950 ± 0.1913	—————
n_k	4 (20 s)	2 (40 s)	1 (40 s)
$V_N(\hat{\theta})$	0.0366	0.0756	0.1612
FPE	0.0369	0.0785	0.1683

Tabela 4.3 - Resultados da identificação do modelo ARMAX.

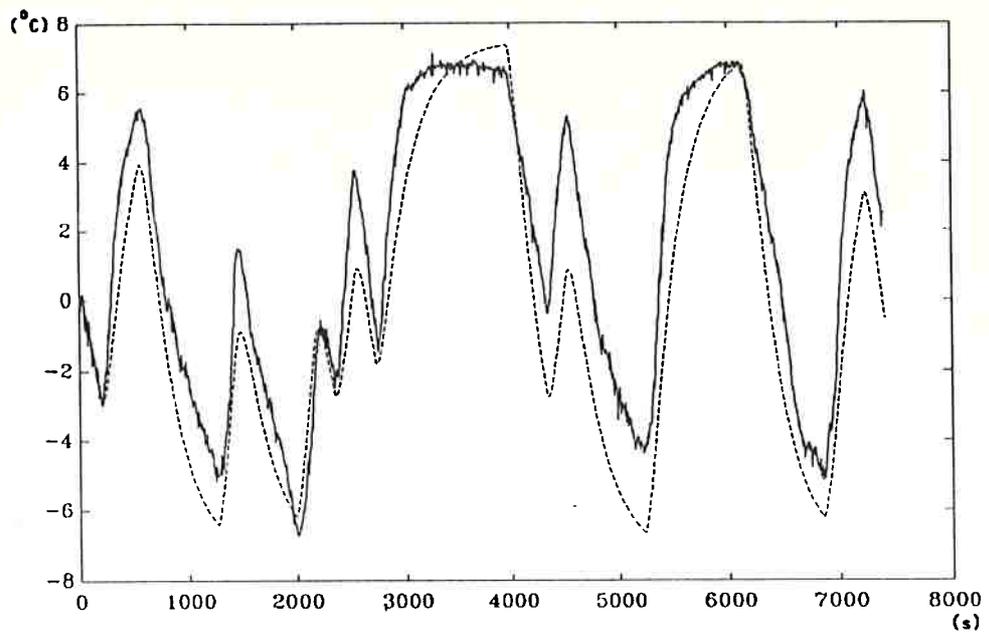


FIGURA 4.23 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em função do tempo (tempo de amostragem 5s)

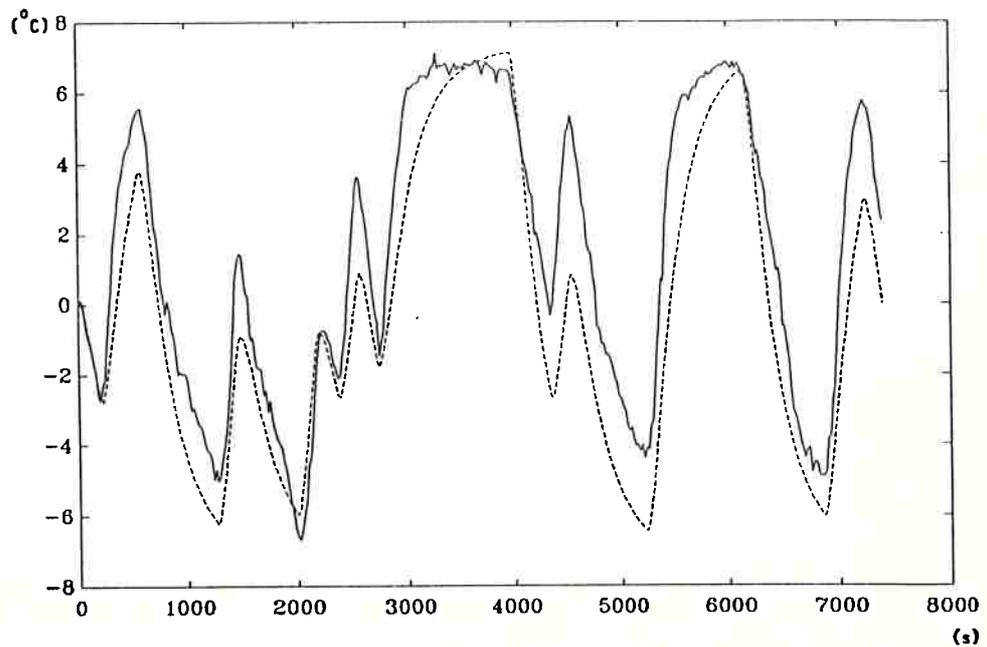


FIGURA 4.24 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em

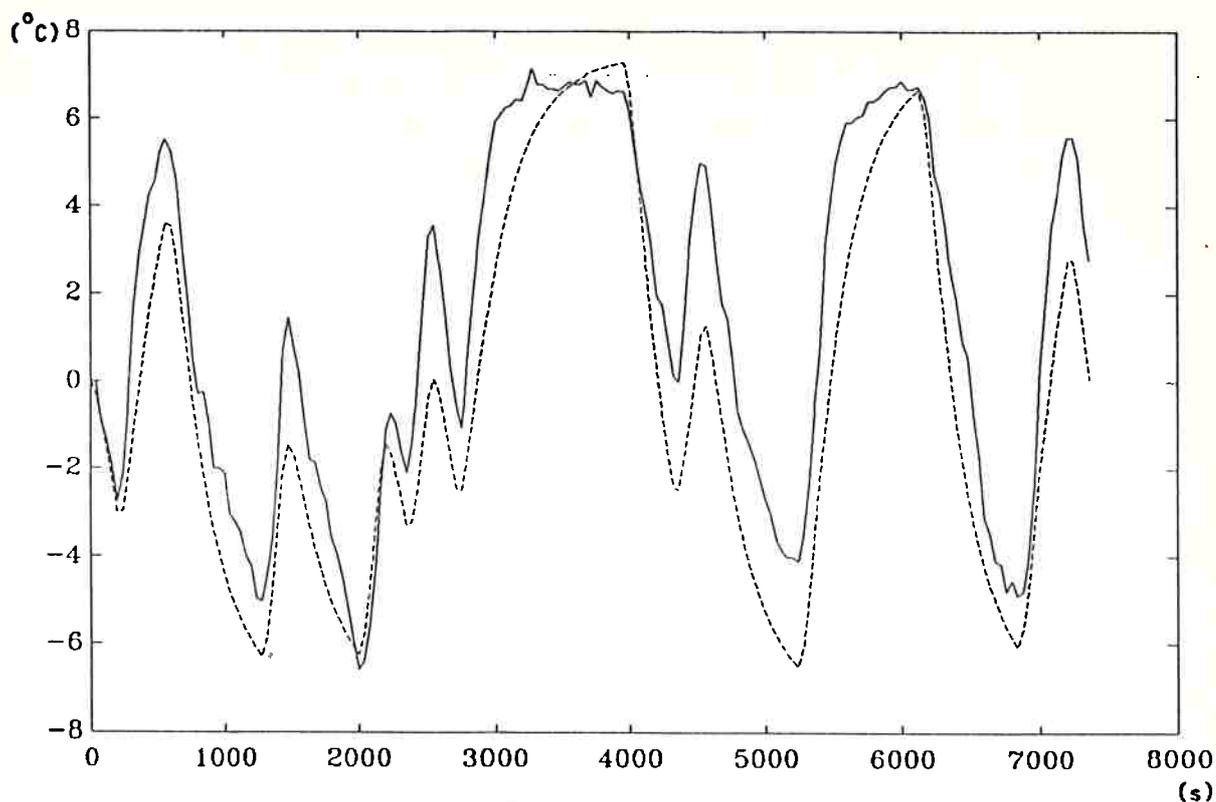


FIGURA 4.25 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de modelo ARMAX em função do tempo (tempo de amostragem 40s)

Com os dados obtidos pela amostragem com período de 40 s, a estrutura ARMAX identificada pertence à estrutura ARX, pois a ordem de C é 0. Todas as tentativas de aumentar a ordem de C geraram modelos com um resíduo com variância superior ou um valor para os coeficientes de C próximos de zero e significativamente zero (variância maior que o coeficiente).

4.3.3.4 Estrutura Box-Jenkins

Os resultados da identificação da estrutura Box-Jenkins estão apresentados na tabela 4.4 . Nas figuras 4.26, 4.27 e 4.28 apresentamos gráficos do resultado da simulação sem ruído através do modelo identificado, juntamente com a sequência experimental.

	intervalo de amostragem 5 s	intervalo de amostragem 20 s	intervalo de amostragem 40 s
B	-0.0518 ± 0.0242 0.0823 ± 0.0486 -0.0558 ± 0.0273	-0.0396 ± 0.0246 -0.0419 ± 0.0396	-0.2770 ± 0.0489 -0.1693 ± 0.1130
C	_____	_____	0.2345 ± 0.0738 0.1527 ± 0.0759
D	-0.5848 ± 0.0258 -0.2753 ± 0.0289 -0.1374 ± 0.0258	-0.9931 ± 0.0075	-0.9652 ± 0.0196
F	-1.2449 ± 0.2863 -0.2912 ± 0.5407 0.5401 ± 0.2559	-2.3549 ± 0.1070 1.9241 ± 0.1774 -0.5567 ± 0.0740	-1.7158 ± 0.1782 1.0955 ± 0.2602 -0.3160 ± 0.1003
nk	4 (20 s)	2 (40 s)	1 (40 s)
$V_N(\hat{\theta})$	0.0374	0.0770	0.1390
FPE	0.0379	0.0795	0.1515

Tabela 4.4 - Resultados da identificação da estrutura Box-Jenkins.

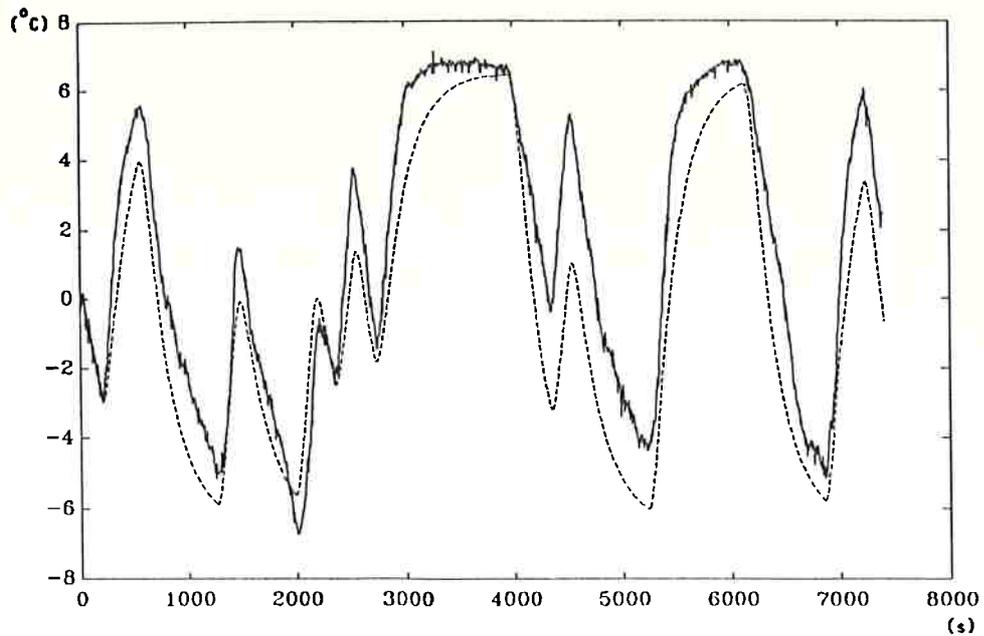


FIGURA 4.26 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 5s)

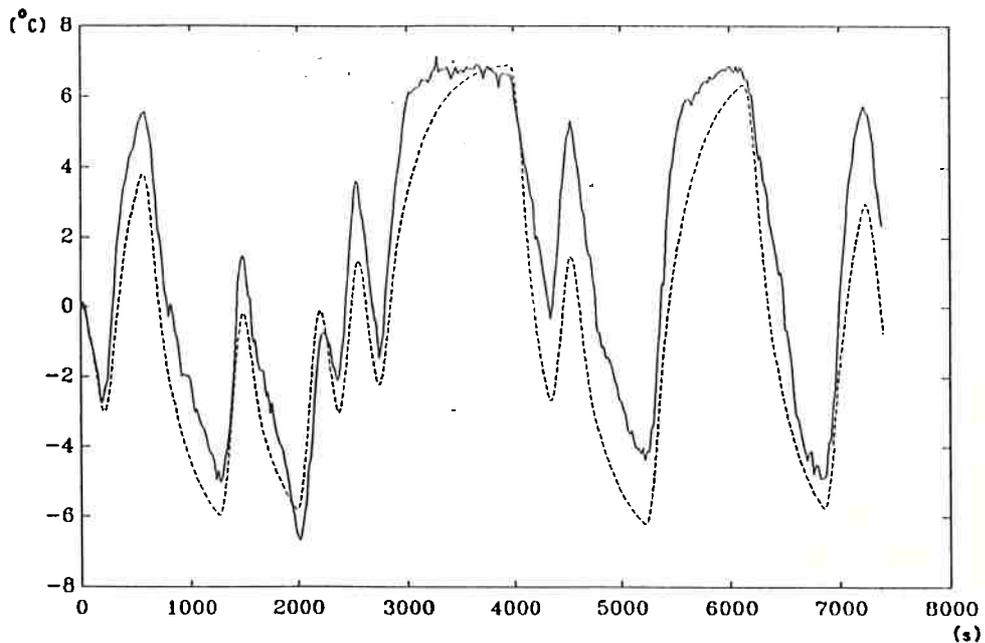


FIGURA 4.27 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

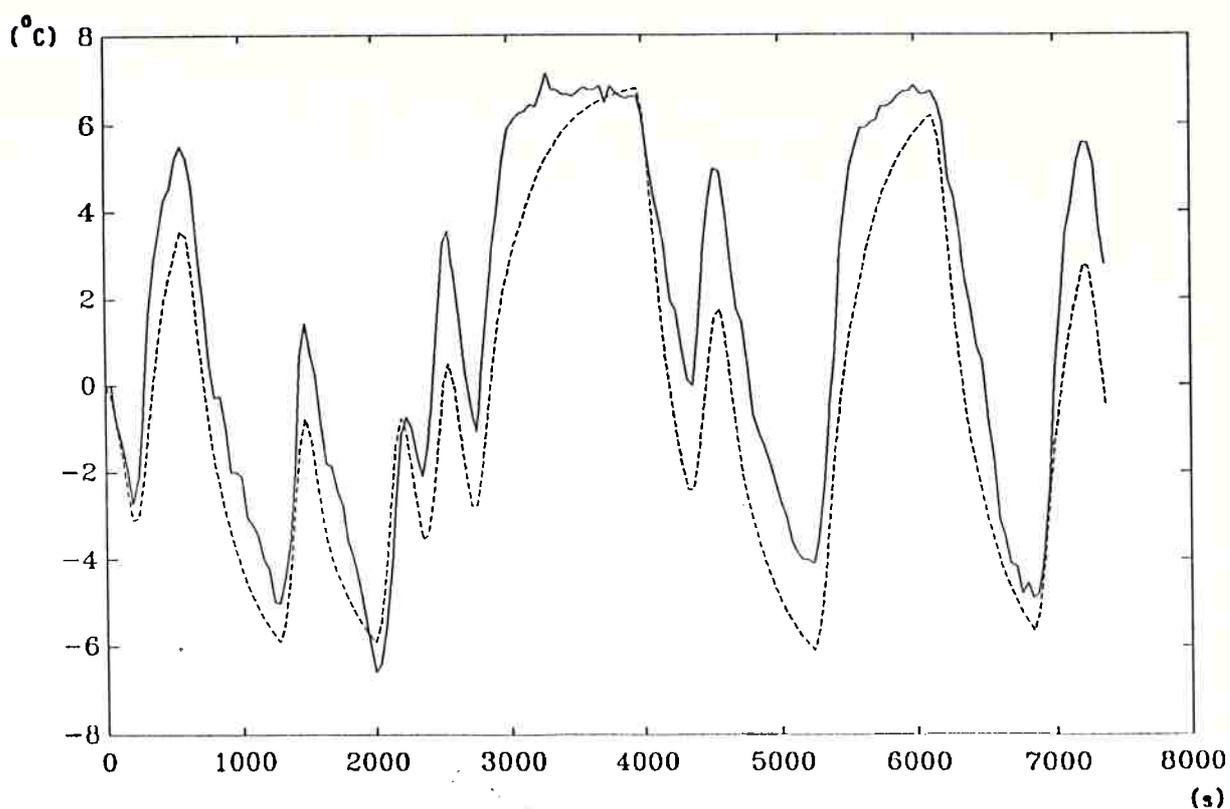


FIGURA 4.28 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 40s)

Realizamos um teste para verificar a existência de retro-alimentação no processo. A estrutura Box-Jenkins tendo uma parametrização independente para o modelo de ruído e do sistema, permite representar adequadamente o sistema mesmo quando o modelo de ruído não for adequado, se não existir retro-alimentação.

Foi feito um teste colocando-se as ordens de C e D iguais a zero. O resultado obtido apresentou uma variância

de 3.7 , mas a simulação sem ruído apresentou resultados comparáveis àqueles obtidos usando um modelo melhor para o ruído, conforme pode ser visto na figura 4.29.

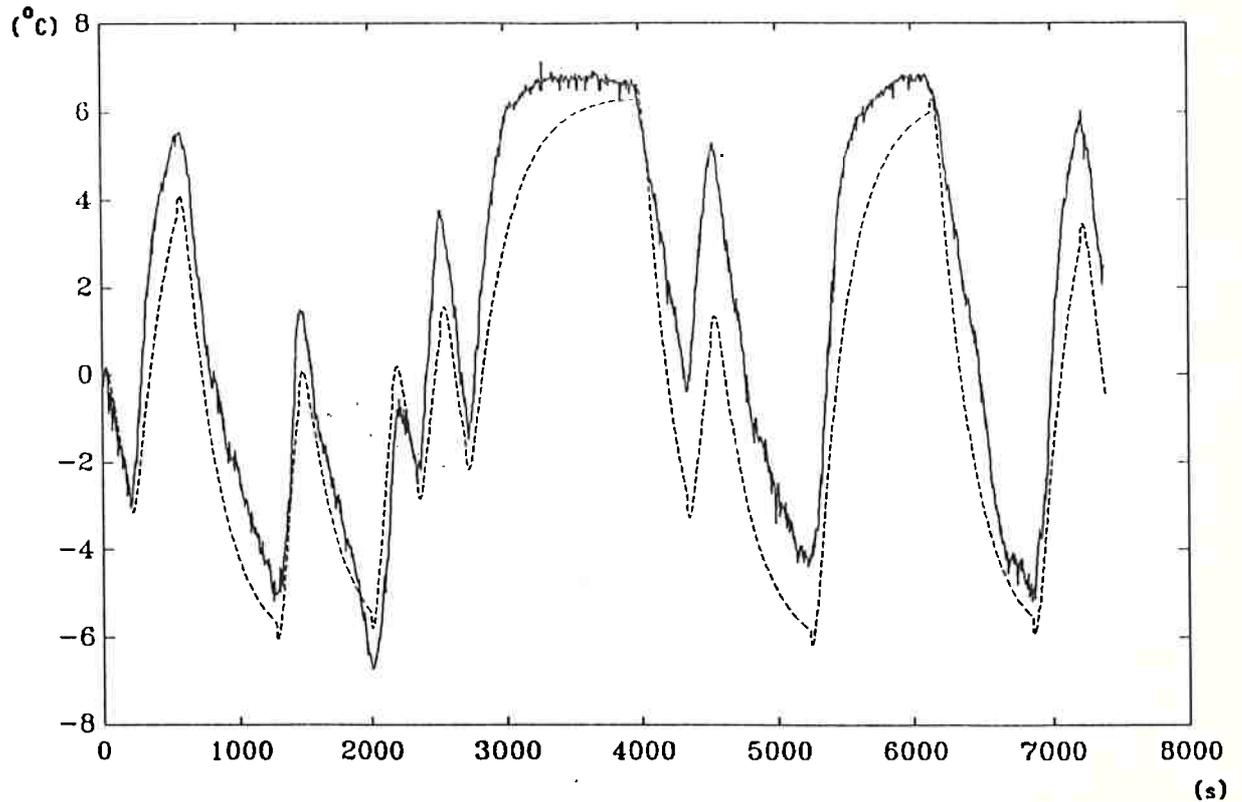


FIGURA 4.29 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação sem ruído (tracejado) através de estrutura Box-Jenkins em função do tempo (tempo de amostragem 5s) para verificação de retroalimentação no sistema

4.4 Identificação de um Modelo Não Linear

Foi feita a identificação dos parâmetros de um modelo não linear na forma de variáveis de estado. O método de Identificação está descrito no apêndice 1. Por problemas de tempo de processamento, os dados foram decimados na razão 1:4, o que nos fornece um total de 370 pontos experimentais.

Para a identificação foi utilizada a rotina DMARQ de autoria do Professor Reinaldo Giudici do Departamento de Engenharia Química da Universidade de São Paulo (Giudici, 1990). A rotina é baseada no método de Marquardt, descrito no apêndice 3. É empregado o método de Runge-Kutta-Gill de 4^a ordem para realizar a integração do sistema de equações ordinárias, cujas variáveis dependentes são as variáveis de estado. Adotamos o peso, w_t (ver apêndice 1) igual a um, para todos os pontos.

4.4.1 Descrição do Modelo

O modelo foi gerado partindo de relações físicas, fazendo as seguintes hipóteses:

- Vazão molar de líquido e vapor constantes ao longo da coluna;
- Volume de líquido constante em cada prato;
- As correntes de vapor e líquido que deixam o prato estão em equilíbrio.

O modelo, na forma de variáveis de estado, é descrito pelas seguintes equações:

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{dX_1}{dt} &= [L (x_0 - X_1/\rho_1) + V (K_2 X_2 - K_1 X_1)] / Vol_1 \\
 \frac{dX_2}{dt} &= [L (X_1/\rho_1 - X_2/\rho_2) + V (K_3 X_3 - K_2 X_2)] / Vol_1 \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 &\vdots \\
 \frac{dX_7}{dt} &= [L (X_6/\rho_6 - X_7/\rho_7) + V (K_8 X_8 - K_7 X_7)] / Vol_7 \\
 \frac{dX_8}{dt} &= [L (X_7/\rho_7 - X_8/\rho_8) + V (y_9 - K_8 X_8)] / Vol_8
 \end{aligned} \right\} \quad (4.1)$$

$$\hat{y}(t) = \text{Temperatura do Prato 2}$$

X_i é a retenção molar específica de etanol no prato (mol de etanol por litro) e é o produto da fração molar de etanol (x_i) pela densidade molar da mistura líquida no prato (ρ_i).

L é a vazão molar de líquido e V a vazão molar de vapor, consideradas constantes ao longo da coluna.

V_{0i} é o volume de líquido do prato i .

K_i é a constante de equilíbrio calculada nas condições do prato i .

x_0 é a composição do líquido alimentado à coluna e y_0 a composição do vapor alimentado no fundo.

A resolução do sistema não é evidente pois ρ_i e K_i não são funções explícitas de X_i . Na realidade ρ_i é função da temperatura no estágio e da fração molar de líquido, e K_i é função da temperatura e da pressão. A maneira como são resolvidas as equações com a finalidade de calcular ρ_i e K_i é a seguinte:

- Calcula-se a temperatura de bolha (T_i^k) a partir de uma estimativa de x_i (x_i^k). Usa-se o método de Newton-Raphson nesta etapa para convergir:

$$K_i(x_i^k, T_i^k) x_i + K_{zi}(x_i^k, T_i^k) (1-x_i) = 1 \quad (4.2)$$

Onde K_{zi} é a constante de equilíbrio da água;

- calcula-se x_i^{k+1} resolvendo :

$$X_i = \rho_i(T_i^k, x_i^{k+1}) x_i^{k+1} \quad (4.3)$$

A convergência de x_i é feita através do método de Wegstein.

As constantes de equilíbrio são calculadas a partir da equação de Wilson, usando a equação de Antoine para cálculo da pressão de vapor dos componentes puros. Os dados das constantes foram obtidos de Gmehling & Onken (1986).

A densidade dos líquidos puros saturados foi calculada através da correlação COSTALD (Hankinson, R.D. & Thomson, G. H., 1979) usando as constantes tabeladas no artigo. A densidade dos líquidos puros comprimidos foi obtida através da correlação de Thomson et alii (1982). A densidade da mistura foi calculada através de uma regra simples, a aditividade dos volumes molares:

$$\rho_i = 1 / (x_i/\rho_{i1} + (1-x_i)/\rho_{i2}) \quad (4.4)$$

Onde ρ_{i1} e ρ_{i2} são as densidades do etanol e da água puros, respectivamente, nas condições do prato i .

4.4.2 Resultados da Identificação

Os parâmetros do modelo a ser identificado, são a vazão de vapor, o volume de líquido nos pratos 1 a 4, considerados iguais, e os volumes de líquido nos pratos 5 a 8, considerados iguais.

Duas identificações preliminares foram realizadas, uma considerando a vazão de vapor conhecida, obtida a partir dos dados no estado estacionário. O resultado desta identificação é apresentado na figura 4.30, onde são apresentados os resultados da simulação com o melhor conjunto de parâmetros e os pontos experimentais. Vemos que a dinâmica não está bem representada pois o modelo não tem um comportamento análogo ao dos dados experimentais.

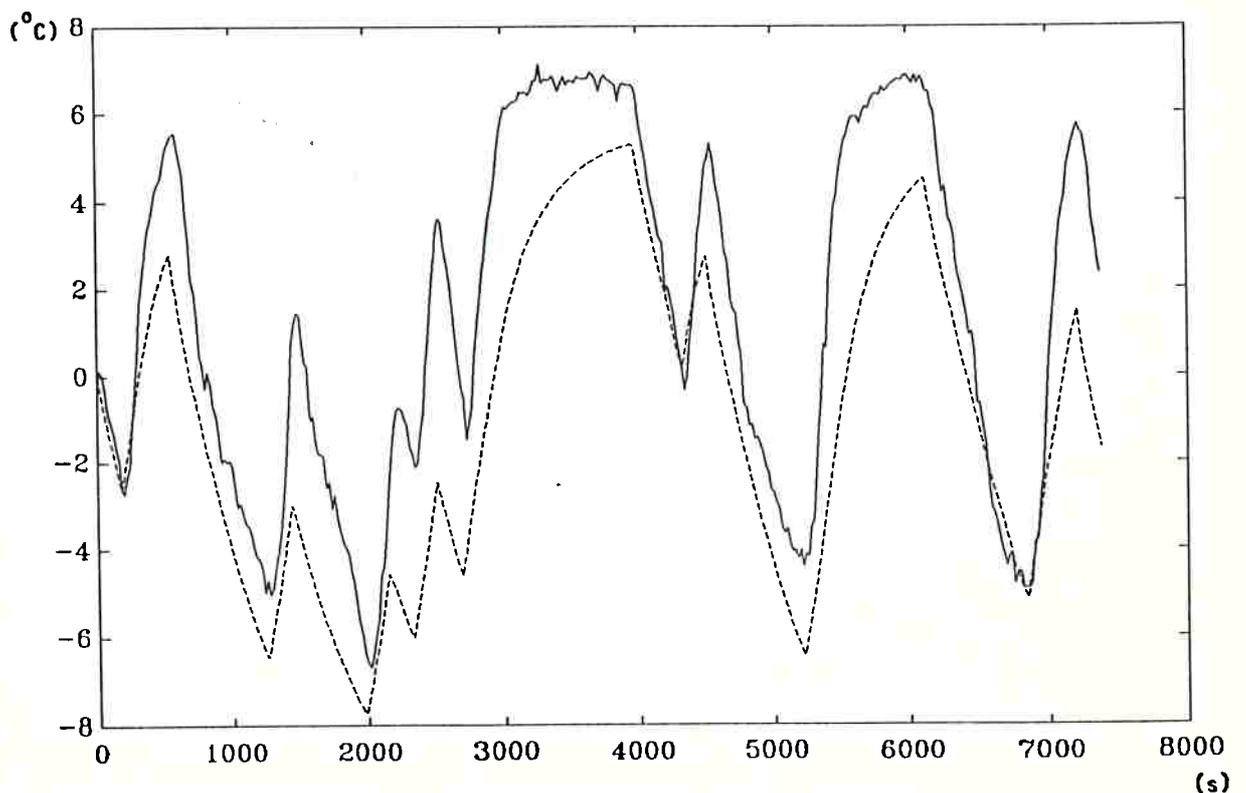


FIGURA 4.30 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela primeira identificação preliminar (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

Na segunda identificação preliminar realizada, foi considerada a vazão de vapor como um parâmetro a ser identificado. Os resultados estão apresentados na figura 4.31, onde vemos que o modelo representa de maneira mais adequada a dinâmica do sistema, mas também notamos a presença de um "bias". Este "bias" é causado pela calibração das placas de condicionamento de sinal dos termopares. A temperatura máxima que o modelo prevê é de 98.14 °C devido à restrição do ponto de ebulição da água à pressão do sistema. A temperatura medida do prato 2 alcançava até 99.9 °C.

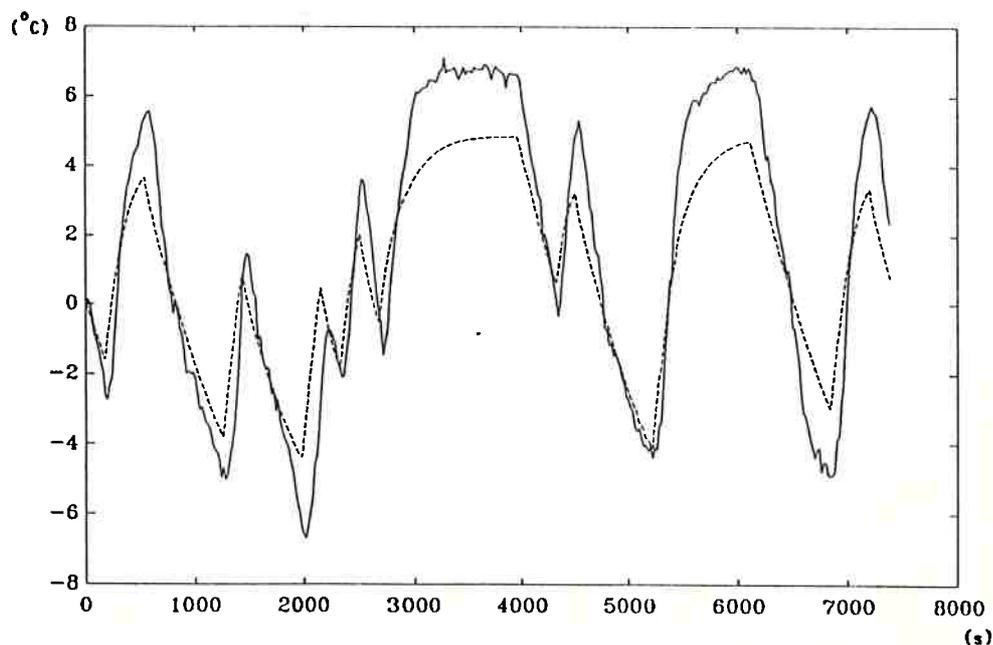


FIGURA 4.31 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela segunda identificação preliminar (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

Na identificação definitiva foi adicionado à saída do sistema o valor de 2°C , e como vemos pela figura 4.32, o "bias" foi reduzido significativamente, sendo que o modelo consegue representar com bastante fidelidade a dinâmica do sistema.

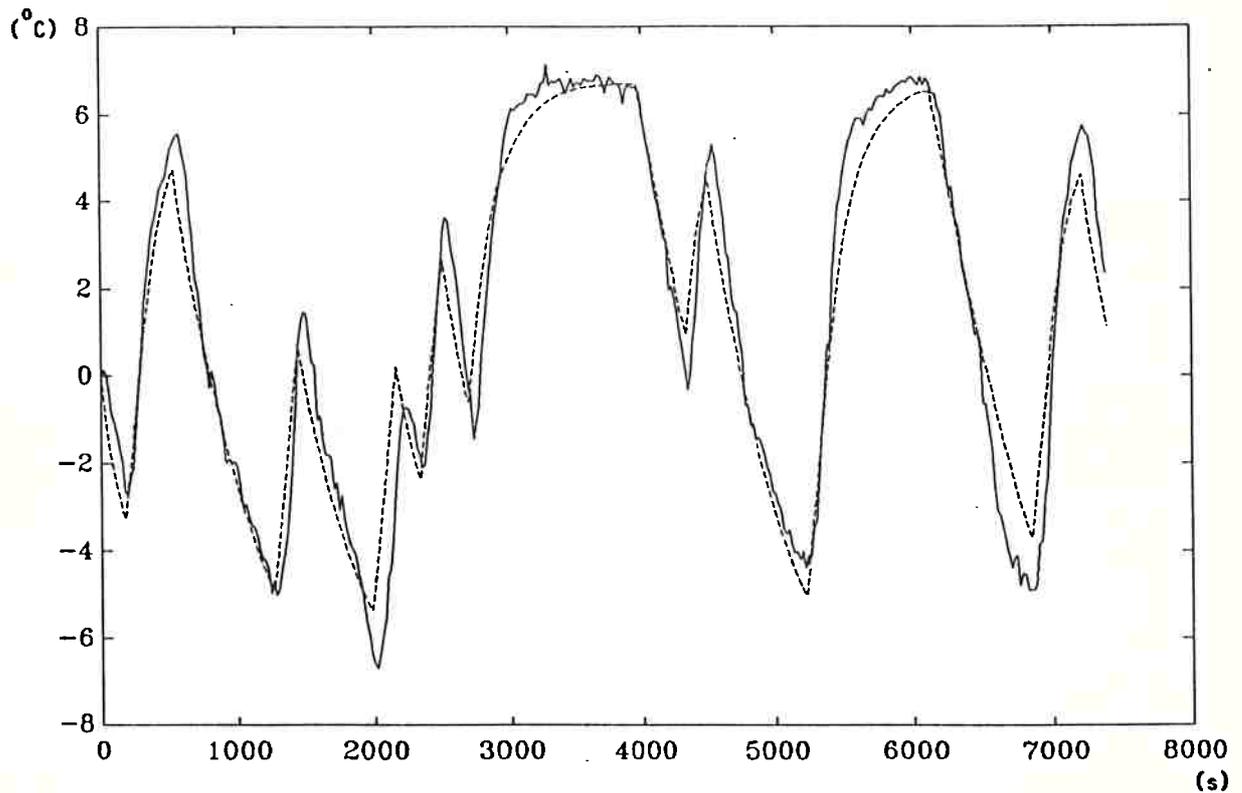


FIGURA 4.32 - Gráfico dos dados experimentais e do resultado da simulação usando o conjunto de parâmetros obtidos pela identificação (tracejado) em função do tempo (tempo de amostragem 20s)

Os valores obtidos para os parâmetros são:

Volume de líquido nos pratos 1 a 4: 234.81 ml

Volume de líquido nos pratos 5 a 8: 100 ml

Vazão molar de vapor: 0.02358 mol/s

O valor da vazão molar de vapor indica uma relação L/V de 0.664, que não é muito diferente daquela obtida através da identificação de parâmetros no estado estacionário (0.707), mostrando que o seu valor é fisicamente coerente.

O volume dos pratos 1 a 4 também é fisicamente coerente.

O volume do líquido nos pratos 5 a 8 foi identificado no valor da restrição deste parâmetro. Isto se deve ao fato da dinâmica nestes pratos praticamente não influir na temperatura do prato 2, a sua influência aumentando à medida que esta for mais rápida (o valor do volume ser pequeno).

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES

Da comparação dos resultados obtidos para a identificação do sistema através de modelos lineares invariantes no tempo e não lineares, podemos concluir que a sua dinâmica é não linear, porque o modelo com estas características representa o processo com muito mais fidelidade.

Por outro lado, os modelos lineares apresentaram resultados suficientemente bons para serem usados com finalidades práticas, tais como a sintonia de malhas. Pudemos também verificar que um tempo de amostragem de 5 s é excessivo, podendo ser este aumentado para 40 s, sem prejuízo da qualidade, em termos de informação, do experimento.

Na comparação dos resultados obtidos pelas diferentes estruturas de modelos verificamos que aquelas que melhor conseguem representar o sistema são a ARX, obtida pelo método IV4, e a Box-Jenkins, sendo que a ARX, para um tempo de amostragem de 40 s perde um pouco de sua capacidade de representar o sistema. Este fato deve ser explicado pelas

principais hipóteses nas quais estes métodos se baseiam. A estrutura Box-Jenkins possui uma parametrização independente de modelo do sistema do modelo de ruído. O método das variáveis instrumentais se baseia na independência entre o resíduo e a entrada (e não a saída pois $\{y(t)\}$ é formado unicamente a partir de $u(t)$). Caso o sistema tenha uma resposta não linear, um modelo linear não consegue eliminar a correlação entre o ruído e o valor de saída previsto, sendo gerado um "bias" adicional na estimativa caso o método dependa desta hipótese. Como a estrutura Box-Jenkins não necessita de um bom modelo de ruído para identificar o modelo do sistema (caso não haja retro-alimentação), ela não depende desta hipótese. O mesmo ocorre com o método das variáveis instrumentais.

Os resultados obtidos para as estruturas ARX, pelo método dos mínimos quadrados, e ARMAX são muito parecidos (o modelo identificado pela rotina ARMAX, para o tempo de amostragem de 40 s foi um ARX) mostrando que o ruído do sistema não possui características de média móvel. O resultado de $C=0$ foi obtido também na estrutura Box-Jenkins para tempos de amostragem de 5 e 20 s.

Devemos no entanto esclarecer que as condições do ensaio foram especiais, pois a ordem de grandeza da perturbação (33% do valor estacionário) era tal que dificilmente o

sistema poderia ser aproximado por um modelo linear.

O fato da não linearidade do sistema, nas condições de operação do ensaio, ter sido verificada, permite que o mesmo seja usado no teste de técnicas de controle, modelagem e identificação não linear e sua comparação, em termos de eficiência com as técnicas tradicionais. O insucesso obtido na identificação de modelos lineares, e o sucesso obtido com o modelo não linear, é uma mostra do ganho obtido pelo uso destas técnicas.

CAPÍTULO 6 - SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Algumas sugestões práticas para a melhoria das condições experimentais:

- Para se conseguir uma estrutura de controle mais ágil, sem modificar o programa do SAD, a solução mais prática é a utilização de um sistema multi-tarefa em tempo real no microcomputador, e, de preferência acoplado a um programa de supervisão e controle, comercial, como o THE FIX, ONSPEC ou GENESIS. De qualquer maneira a defasagem entre a leitura e a atuação continuará sendo da ordem da centena de milisegundos, sendo o gargalo deste processo a velocidade de comunicação.
- A substituição do SAD por um microcomputador munido de placas de transdução permitiria o controle digital direto com uma flexibilidade muito maior, já que o gargalo da comunicação seria eliminado.
- A relação de tempo de residência no tanque de fundo com a potência de aquecimento deve ser modificada, seja pela substituição da caldeira e aumento da área de troca de

refervedor (melhor solução) ou pela diminuição do volume do tanque de fundo, sempre pensando nas limitações impostas pelas curvas de afogamento da coluna (que também deverão ser levantadas) e pela instrumentação da coluna.

- Fazer um levantamento da hidrodinâmica da coluna (relação entre acúmulo nos pratos e vazões de líquido e vapor) com a finalidade de permitir o teste de modelos mais refinados.

Algumas sugestões de trabalhos que possam ser realizados com base na montagem existente:

- Identificar a dinâmica da coluna para outras condições de operação e também variando a amplitude das perturbações.
- Com base nestes modelos implementar um controlador da temperatura de algum dos pratos usando a vazão de alimentação como variável manipulada (problema servo). Podem se testar alguns algoritmos diferentes, baseados no modelo não linear identificado.

APÊNDICE 1 - TÓPICOS SOBRE IDENTIFICAÇÃO

A1.1 - Introdução

A identificação da dinâmica de processos tem como finalidade localizar dentro de diversos conjuntos de modelos aquele que melhor representa o processo segundo um determinado critério. Este critério é função da aplicação que será dada ao modelo identificado (síntese de controladores, etc..) e é geralmente subjetivo.

Dentro de uma determinada estrutura de modelos a localização de um modelo que melhor represente o processo depende de um critério local, este sim não subjetivo.

O conteúdo deste apêndice foi extraído de Ljung (1987) e do manual de referência do PCMATLAB (Ljung,1986).

A1.2 - Conjuntos de Modelos

Os modelos podem ser caracterizados por serem lineares

(ou não) e os seus parâmetros serem invariantes no tempo (ou não). Uma característica importante dos modelos lineares é a superposição de efeitos.

Por outro lado os modelos podem ser puramente determinísticos ou incluir alguma variável estocástica. Os modelos podem ser colocados com a variável independente (o tempo) na forma contínua ou discreta. Quanto às equações do modelo, estas podem ser colocadas em forma polinomial ou na forma de variáveis de estado. As equações do modelo podem ser baseadas em relações físicas ou serem do tipo "caixa preta".

Com isto descrevemos algumas características que modelos dinâmicos podem ter. Ao se fixar uma determinada característica definimos um conjunto de modelos. Por exemplo, o conjunto de modelos lineares. Além disto um conjunto de modelos pode ser parametrizado de forma a permitir a construção de conjuntos com uma estrutura similar a \mathbb{R}^d , onde d é o número de parâmetros. Por exemplo o conjunto de modelos tais que:

$$\frac{dy}{dt} = a u(t) \quad a \in \mathbb{R} \quad (A1.1)$$

Neste caso, "a" é uma parametrização deste conjunto.

Uma estrutura de modelos é uma definição na qual se restringe o conjunto $D_m \subset \mathbb{R}^d$ no qual os parâmetros podem variar. Esta restrição é feita de maneira a que os modelos variem de forma suave com os parâmetros, e pode conter outros tipos de restrições como que os modelos sejam estáveis. No caso acima este conjunto seria tal que $D_m = \mathbb{R}^-$.

O problema da identificação se resume a encontrar um estimador $\hat{\theta} \in D_m$ tal que o modelo $M(\hat{\theta})$ represente melhor um conjunto de realizações do processo (dados experimentais) dentro de um determinado critério.

A1.3 Modelos Lineares Invariantes no Tempo

Esta classe de modelos pode ser usada para descrever sistemas conforme descritos na figura A1.1. Nesta figura $u(t)$ representa uma variável determinística, $e(t)$ uma variável estocástica, $G(q)$ e $H(q)$ as suas respectivas funções de transferência e $y(t)$ a saída do processo. A letra q representa o operador "defasagem para a frente" definido por:

$$q y(t) = y(t+\tau) \quad \text{ou} \quad q^k y(t) = y(t+k\tau) \quad (\text{A1.2})$$

onde τ é o período de amostragem.

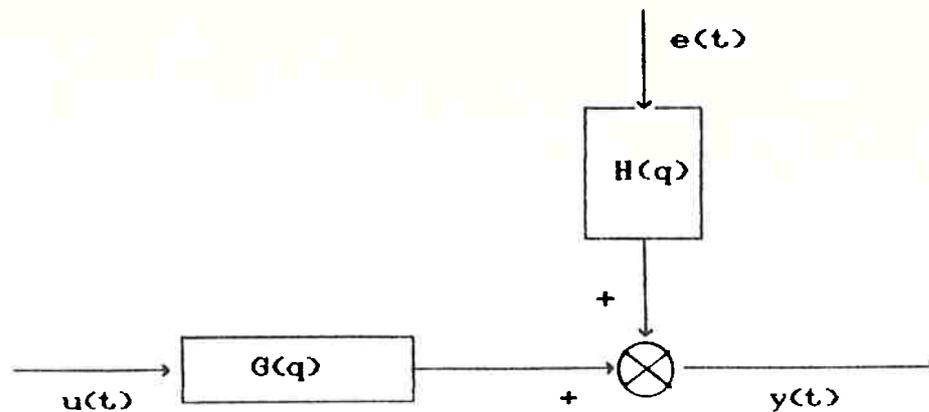


Figura A1.1 - Sistema que pode ser representado por modelos lineares invariantes no tempo.

A $G(q)$ dá-se o nome de função de transferência do processo e a $H(q)$, o de modelo de ruído.

A relação entre $y(t)$, $u(t)$ e $e(t)$ é dada por:

$$y(t) = G(q) u(t) + H(q) e(t) \quad (A1.3)$$

Ou,

$$y(t) = \sum_{k=1}^{\infty} g(k\tau) u(t-k\tau) + \sum_{k=0}^{\infty} h(k\tau) e(t-k\tau) \quad (A1.4)$$

Portanto:

$$G(q) = \sum_{k=1}^{\infty} g(k\tau) q^{-k} \quad (A1.5)$$

$$H(q) = \sum_{k=0}^{\infty} h(k\tau) q^{-k} \quad (A1.6)$$

Representam convoluções discretas.

Restringimos a nossa análise a casos em que $G(q)$ e $H(q)$ sejam expressos por funções racionais em q^{-1} e a seguir apresentamos algumas estruturas de modelos usuais.

Para definir completamente uma estrutura que inclua alguma variável estocástica é necessário definir também a função densidade de probabilidade da mesma.

A1.3.1 Algumas Estruturas de Modelos

A1.3.1.1 Estrutura ARX

O nome ARX surge do fato de que este conjunto de modelos inclui uma parcela Auto-Recursiva, ou seja, os valores da saída dependem de valores passados da saída, e inclui também uma variável exógena ($u(t)$).

A forma geral do modelo é dada por:

$$A(q) y(t) = B(q) q^{-nk} u(t) + e(t) \quad (A1.7)$$

Onde $A(q)$ e $B(q)$ são polinômios no operador atraso q^{-1} :

$$A(q) = 1 + a_1 q^{-1} + a_2 q^{-2} + \dots + a_{na} q^{-na} \quad (A1.8)$$

$$B(q) = b_1 + b_2 q^{-1} + b_3 q^{-2} + \dots + b_{nb} q^{-nb+1} \quad (A1.9)$$

Colocado explicitamente:

$$\begin{aligned} y(t) + a_1 y(t-\tau) + a_2 y(t-2\tau) + \dots + a_{na} y(t-na\tau) = \\ b_1 u(t-nk\tau) + b_2 u(t-(nk+1)\tau) + \dots + b_{nb} u(t-(nk+nb)\tau) \\ + e(t) \end{aligned} \quad (A1.10)$$

q^{-nk} indica que o modelo inclui um atraso de nk períodos de amostragem (o que equivale a uma outra parametrização, com $B'(q) = q^{-nk} B(q)$, com os nk primeiros coeficientes iguais a zero).

Comparando este conjunto de modelos com a forma geral vemos que:

$$G(q) = q^{-nk} \frac{B(q)}{A(q)} \quad (A1.11)$$

$$H(q) = \frac{1}{A(q)} \quad (A1.12)$$

Na estrutura de modelos correspondente, $D_m \in \mathbb{R}^{na+nb}$. Além disto, $e(t)$ é suposto ruído branco, isto é, a sua função densidade de probabilidade é normal.

A1.3.1.2 Estrutura ARMAX

A estrutura ARMAX inclui além das parcelas da estrutura anterior uma parcela de média móvel ("Moving Average") no ruído. Ela é baseada em:

$$A(q) y(t) = B(q) q^{-nk} u(t) + C(q) e(t) \quad (A1.13)$$

Onde

$$C(q) = 1 + c_1 q^{-1} + c_2 q^{-2} + \dots + c_{nc} q^{-nc} \quad (A1.14)$$

A1.3.1.3 Estrutura Box-Jenkins

Esta estrutura é baseada em:

$$y(t) = \frac{B(q)}{F(q)} u(t) + \frac{C(q)}{D(q)} e(t) \quad (A1.15)$$

Onde:

$$F(q) = 1 + f_1 q^{-1} + f_2 q^{-2} + \dots + f_{nf} q^{-nf} \quad (A1.16)$$

$$D(q) = 1 + d_1 q^{-1} + d_2 q^{-2} + \dots + d_{nd} q^{-nd} \quad (A1.17)$$

Neste caso :

$$G(q) = \frac{B(q)}{F(q)} \quad (A1.18)$$

$$H(q) = \frac{C(q)}{D(q)} \quad (A1.19)$$

Esta estrutura de modelos apresenta a característica especial que $G(q)$ e $H(q)$ são parametrizados independentemente.

A1.3.2 Métodos de Identificação

Seja:

$$u = [u^{\text{exp}}(\tau) \ u^{\text{exp}}(2\tau) \ \dots \ u^{\text{exp}}(N\tau)] \quad (A1.20)$$

$$y = [y^{\text{exp}}(\tau) \ y^{\text{exp}}(2\tau) \ \dots \ y^{\text{exp}}(N\tau)] \quad (A1.21)$$

um conjunto de N dados experimentais, amostrados com um período τ . Apresentamos dois tipos de critério, usuais, através dos quais podem ser estimados $\hat{\theta}$, o conjunto de parâmetros de uma estrutura de modelos que melhor represente os dados.

A1.4.1 Métodos de Erro de Predição

A partir da fórmula geral, pode ser deduzido que:

$$y(t) + e(t) = H^{-1}(q) G(q) u(t) + [1-H^{-1}(q)] y(t) \quad (A1.22)$$

O membro à direita da equação só depende de valores passados de u e y ($u(t-\tau)$, $y(t-\tau)$, etc...). Para um conjunto de dados experimentais, e para um conjunto de parâmetros de uma estrutura de modelos usamos esta expressão para calcular $\hat{y}(t|\theta)$, o valor de y no instante t , previsto pelos dados experimentais e pelo conjunto de parâmetros θ .

$$\hat{y}(t|\theta) = H^{-1}(q) G(q) u^{\text{exp}}(t) + [1-H^{-1}(q)] y^{\text{exp}}(t) \quad (A1.23)$$

Onde $H(q)$ e $G(q)$ são também funções de θ .

Uma boa medida da precisão com que o conjunto de parâmetros faz com que o modelo represente os dados experimentais é o vetor:

$$\varepsilon(t) = y(t) - \hat{y}(t) \text{ para } t = \tau, 2\tau, \dots, N\tau \quad (\text{A1.24})$$

ou melhor, a norma deste vetor, que pode ser calculada por:

$$V_N(\theta) = \sum_{l=\tau}^{l=N\tau} \varepsilon(t)^2 \quad (\text{A1.25})$$

Outra norma muito útil é a norma robustificada do resíduo que é calculada através de:

$$V_N(\theta) = \sum_{l=\tau}^{l=N\tau} r(t) \quad (\text{A1.26})$$

$$\text{onde } r(t) = \begin{cases} |\varepsilon(t)| & \text{se } |\varepsilon(t)| > \text{LIM} \\ \varepsilon(t)^2 & \text{se } |\varepsilon(t)| \leq \text{LIM} \end{cases} \quad (\text{A1.27})$$

Esta norma tem um comportamento linear fora de um determinado intervalo. O uso deste limite tem a função de impedir que o resultado seja desviado por algum dado que

destoe muito dos outros.

A identificação de um modelo dentro de uma determinada estrutura de modelos se resume a um problema de otimização, no qual se procura minimizar $V_N(\theta)$, com θ restrito a $D_m \subset \mathbb{R}^d$.

$\varepsilon(t)$ é chamado de resíduo, e $\hat{y}(t)$ é uma estimativa da realização da variável estocástica $e(t)$, portanto se a identificação for bem sucedida é de se esperar que $\varepsilon(t)$ não esteja correlacionado no tempo, com a saída ($y(t)$), com a entrada ($u(t)$) e nem com ele mesmo.

No caso da estrutura ARX, a fórmula de predição é linear nos parâmetros, considerando o caso sem atraso:

$$\hat{y}(t|\theta) = \varphi^T(t) \theta \quad (A1.28)$$

$$\text{Onde } \varphi(t) = [y^{\text{exp}}(t-\tau) \ y^{\text{exp}}(t-2\tau) \ \dots \ y^{\text{exp}}(t-na\tau) \ u^{\text{exp}}(t-\tau) \ u^{\text{exp}}(t-2\tau) \ \dots \ u^{\text{exp}}(t-nb\tau)]^T \quad (A1.29)$$

$$\text{e } \theta = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_n \ b_1 \ b_2 \ \dots \ b_n]^T \quad (A1.30)$$

Neste caso o problema pode ser encarado como um problema de regressão linear usando o método dos mínimos quadrados, cuja solução é:

$$\hat{\theta} \text{ solução de: } \sum_{t=\tau}^{L=NT} \varphi(t) \varepsilon(t) = 0 \quad (A1.31)$$

Que pode ser calculada analiticamente através de:

$$\hat{\theta} = \left[\frac{1}{N} \sum_{t=\tau}^{t=NT} \varphi(t) \varphi(t)^T \right]^{-1} \frac{1}{N} \sum_{t=\tau}^{t=NT} \varphi(t) y(t)^T \quad (\text{A1.32})$$

A equação () pode ser interpretada também como o fato de que $\varepsilon(t)$ não esteja correlacionado com y e u .

A1.3.2.2 Métodos de Variáveis Instrumentais

Este método é baseado na necessidade de que a variável u não esteja correlacionada com $\varepsilon(t)$ no tempo e é empregado em estruturas cujo modelo preditor é linear nos parâmetros, em especial a ARX.

Ao invés de usar-se a variável φ para testar a correlação entre y , u e $\varepsilon(t)$ conforme a equação () usa-se uma variável derivada de u , chamada de variável instrumental, que notaremos ζ . ζ é obtida a partir de u pelas fórmulas:

$$\zeta(t) = K(q) [x(t-\tau) \ x(t-2\tau) \ \dots \ x(t-na\tau) \ u^{\text{exp}}(t-\tau) \ u^{\text{exp}}(t-2\tau) \ \dots \ u^{\text{exp}}(t-nb\tau)]^T \quad (\text{A1.33})$$

$$M(q) x(t) = N(q) u^{\text{exp}}(t) \quad (\text{A1.34})$$

$K(q)$, $M(q)$ e $N(q)$ são filtros lineares chamados de instrumentos do método e $\hat{\theta}$ obtido de:

$$\hat{\theta} \text{ solução de: } \sum_{l=\tau}^{l=NT} \zeta(l) \varepsilon(l) = 0 \quad (\text{A1.35})$$

Que pode ser calculada analiticamente através de:

$$\hat{\theta} = \left[\frac{1}{N} \sum_{l=\tau}^{l=NT} \zeta(l) \varphi(l)^T \right]^{-1} \frac{1}{N} \sum_{l=\tau}^{l=NT} \zeta(l) y(l) \quad (\text{A1.36})$$

Um dos métodos de variáveis instrumentais bastante empregado é o método de quatro estágios. Neste método usam-se diversos estágios de identificação, usando o método de erros de predição para se obter os parâmetros de um modelo ARX (mínimos quadrados) e usando o resultado deste como instrumento no estágio posterior ($M(q)=A(q)$, $N(q)=B(q)$, $K(q)=1$).

A1.3.3 Validação dos modelos

As principais técnicas usadas para se verificar a adequação do modelo em representar o sistema em estudo são sucintamente descritas a seguir.

A1.3.3.1 Análise do resíduo

Como já foi dito, caso o modelo represente bem o sistema, o resíduo é independente de $y^{\text{exp}}(t)$ e $u^{\text{exp}}(t)$, para tal um teste de correlação entre o resíduo e a entrada e um teste de auto-correlação do resíduo podem ser conclusivos. Caso o resíduo esteja correlacionado com ele mesmo isto indica que ele não é ruído branco e que portanto a identificação não foi bem sucedida. A correlação entre o resíduo e $u^{\text{exp}}(t)$ pode ser indicativa da existência de retro-alimentação e da inacurácia da identificação.

A1.3.3.2 Simulação sem ruído

A saída do processo pode ser simulada usando apenas os dados de entrada, considerando o ruído nulo. Desta maneira pode se comparar os dados experimentais de saída do

processo, com os dados simulados e certificar se eles se aproximam.

A1.3.3.3 O Critério de Akaike do Erro Final de Predição

Um estimador do erro final de predição, definido por Akaike, é dado por:

$$\text{FPE} = \frac{1+d/N}{1-d/N} V_N(\hat{\theta}) \quad (\text{A1.37})$$

Onde d é o número de parâmetros que foram identificados, N o número de pontos experimentais e $V_N(\hat{\theta})$, a norma do resíduo para os parâmetros identificados.

Este critério (A1.37), que foi apresentado por Akaike (1969), reflete a variância do erro de predição que seria obtido caso o modelo com os parâmetros $\hat{\theta}$ fosse empregado como preditor para outro conjunto de dados.

Este critério serve portanto como comparação entre modelos de uma mesma coleção, sendo que aquele que apresente um FPE menor deverá ser o escolhido.

A1.4 Modelo não linear na Forma de Variáveis de Estado

Um modelo não linear na forma de variáveis de estado pode ser representado por:

$$\frac{dx_1}{dt} = f_1(x_1, x_2, \dots, x_n, u(t), \theta) \quad (A1.38)$$

$$\frac{dx_2}{dt} = f_2(x_1, x_2, \dots, x_n, u(t), \theta)$$

.

.

$$\frac{dx_n}{dt} = f_n(x_1, x_2, \dots, x_n, u(t), \theta) \quad (A1.39)$$

$$y(t) = g(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Onde: x_1, x_2, \dots, x_n são as variáveis de estado

$u(t)$ a entrada do processo

$y(t)$ a saída do processo

θ o conjunto de parâmetros do modelo

O método de identificação consiste em calcular $\hat{y}(t)$, a partir dos dados iniciais $x_1(\tau), x_2(\tau), \dots, x_n(\tau)$ e comparar com os valores experimentais usando um critério

análogo ao do método de erros de predição:

$$\varepsilon(t) = \hat{y}(t) - y(t) \quad (\text{A1.40})$$

$$V_N(\theta) = \sum_{l=2T}^{l=NT} w_l \varepsilon(t)^2 \quad (\text{A1.41})$$

O termo $t=2T$ não é utilizado no cálculo do residuo porque este ponto corresponde à condição inicial de integração. w_l são pesos que podem ser atribuídos às medidas, sendo esta uma forma de robustificar a norma. A solução consiste em calcular o conjunto $\hat{\theta}$ que minimiza $V_N(\theta)$.

APÊNDICE 2 - METODOS ESTATISTICOS APLICADOS A ANALISE DA DINAMICA DE PROCESSOS

O conteúdo deste apêndice foi extraído de Ljung (1987) e Bendat e Piersol (1986).

A2.1 No Domínio do Tempo

Uma medida da correlação entre duas variáveis $x(t)$ e $y(t)$, no tempo, é dada pela correlação cruzada entre as mesmas:

$$R_{xy}(\tau) = E [x(t) y(t-\tau)] \quad (A2.1)$$

Onde E representa a esperança calculada em relação ao tempo.

Outra definição importante é a auto-correlação:

$$R_x(\tau) = E [x(t) x(t-\tau)] \quad (\text{A2.2})$$

Que têm as propriedades:

$$R_x(\tau) = R_x(-\tau) \quad (\text{A2.3})$$

$$R_{xy}(\tau) = R_{yx}(-\tau) \quad (\text{A2.4})$$

A2.1.1 Estimadores

Sejam duas seqüências de dados obtidas experimentalmente:

$$x = [x^{\text{exp}}(T) \ x^{\text{exp}}(2T) \ \dots \ x^{\text{exp}}(NT)] \quad (\text{A2.5})$$

$$y = [y^{\text{exp}}(T) \ y^{\text{exp}}(2T) \ \dots \ y^{\text{exp}}(NT)] \quad (\text{A2.6})$$

Um bom estimador de $R_x(\tau)$ é:

$$\hat{R}_x(kT) = \frac{1}{(N-k)} \sum_{t=T}^{t=(N-k)T} x^{\text{exp}}(t) x^{\text{exp}}(t+kT) \quad (\text{A2.7})$$

A2.1.2 Aplicações

As funções de auto-correlação de variáveis particulares (ruído branco, senóides, etc..) são conhecidas. A comparação das funções de auto-correlação empíricas com estas últimas permite depreender certas características das variáveis, como por exemplo a periodicidade.

A função de correlação cruzada permite extrair alguns dados a respeito da função de transferência entre as duas variáveis como por exemplo tempo morto ou não correlação entre as mesmas.

A2.2 No Domínio da Frequência

A transformada de Fourier de uma função $x(t)$, é definida por:

$$F_x(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} x(t) e^{-j\omega t} dt \quad (A2.8)$$

Onde j é o valor complexo $\sqrt{-1}$ e ω dado em radianos por segundo.

Seja uma série obtida pela amostragem de $x(t)$ em

intervalos constantes T:

$$\dots, x(-T), x(0), x(T), x(2T), \dots, x(kT), \dots \quad (A2.9)$$

Chamamos de transformada discreta de Fourier de $x(t)$:

$$F_x(\omega) = T \sum_{k=-\infty}^{k=\infty} x(kT) e^{-j\omega kT} \quad (A2.10)$$

Existe uma propriedade importante que relaciona a transformada de Fourier à transformada discreta, que pode ser expressa da seguinte forma:

Se $x(t)$ é tal que:

$$F_x(\omega) = 0, \quad \forall \omega \in \left[-\pi, -\frac{\pi}{T}\right] \cup \left[\frac{\pi}{T}, \pi\right] \quad (A2.11)$$

$$\text{Então: } F_x(\omega) = F_x(\omega)$$

A $\omega_N = \pi/T$ é dado o nome de frequência de Nyquist. Esta propriedade pode ser expressa como que a sequência $x(kT)$ pode ser reconstruída de maneira única a partir da sua transformada de Fourier caso a variável da qual ela foi gerada não possua componentes de frequência maiores que a frequência de Nyquist.

A2.2.1 Análise Espectral

O (auto) espectro de $x(t)$ é definido como a transformada de Fourier da sua função de auto-correlação:

$$\phi_x(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} R_x(t) e^{-j\omega t} dt \quad (\text{A2.12})$$

O espectro de correlação é definido por:

$$\phi_{xy}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} R_{xy}(t) e^{-j\omega t} dt \quad (\text{A2.13})$$

Os espectros tem a característica importante de dar uma noção muito clara do comportamento do sinal em termos da frequência.

Seja um processo cuja dinâmica pode ser descrita por (ver apêndice 1):

$$y(t) = G(q) u(t) + H(q) e(t) \quad (\text{A2.14})$$

Onde $e(t)$ é uma variável estocástica não auto-correlacionada no tempo (ruído branco) com média zero e covariância λ e independente de $u(t)$ (função de correlação cruzada igual a zero). Sejam $G(e^{j\omega})$ e $H(e^{j\omega})$ as funções

obtidas substituindo q por $e^{j\omega}$ (chamadas de funções de frequência), então:

$$\phi_y(\omega) = |G(e^{j\omega})|^2 \phi_u(\omega) + \lambda |H(e^{j\omega})|^2 \quad (\text{A2.15})$$

e

$$\phi_{yu}(\omega) = G(e^{j\omega}) \phi_u(\omega) \quad (\text{A2.16})$$

$G(e^{j\omega})$ tem um significado muito importante pois um sistema que fosse descrito por:

$$y(t) = G(q) u(t) \quad (\text{A2.17})$$

sem o componente estocástico, teria como resposta a uma perturbação, $u(t) = \cos(\omega t)$:

$$y(t) = A \cos(\omega t + \varphi) \quad (\text{A2.18})$$

$$\text{com } A = |G(e^{j\omega})| \quad (\text{A2.19})$$

$$\text{e } \varphi = \text{Arg}(G(e^{j\omega})) \quad (\text{A2.20})$$

A2.2.2 Estimadores

Dá se o nome de transformada finita de Fourier de uma sequência de dados:

$$x(T), x(2T), \dots, x(kT), \dots, x(NT) \quad (A2.21)$$

a:

$$X^N(\omega) = T \sum_{k=1}^{k=N} x(kT) e^{-j\omega kT} \quad (A2.22)$$

Existem algoritmos muito rápidos que permitem calcular a transformada para valores de ω_k múltiplos de $\frac{2\pi}{NT}$:

$$\omega_k = k \frac{2\pi}{NT}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, N-1 \quad (A2.23)$$

A estes algoritmos se dá o nome de transformadas rápidas de Fourier (FFT). Eles são baseados na relação de Euler:

$$e^{j\omega} = \cos(\omega) + j \sin(\omega) \quad (A2.24)$$

em propriedades trigonométricas e na otimização da combinação de produtos e somatórias. As FFT exigem também que o número de dados seja uma potência de 2, o que pode ser

feito com qualquer sequência, inserindo-se zeros no fim da mesma (como efeito disto temos apenas uma diminuição da resolução).

Outro fato importante é que ao se avaliar a transformada de Fourier, as frequências ω_k , com $k > \frac{N}{2}$, não devem ser levadas em conta pois ω_k é maior que a frequência de Nyquist.

Como vimos, os espectros de auto-correlação e de correlação cruzada são definidos como a transformada de Fourier das funções de auto-correlação e de correlação cruzada, definamos:

$$\hat{\phi}_x(\omega) = T \sum_{k=\tau}^{k=N\tau} R_x(kT) e^{-j\omega kT} \quad (A2.25)$$

Existe uma propriedade muito importante que relaciona $\hat{\phi}_x(\omega)$ e $\hat{\phi}_{xy}(\omega)$ com a transformada finita de Fourier das variáveis:

$$\hat{\phi}_x(\omega) = \frac{1}{N T} |X^N(\omega)|^2 \quad (A2.26)$$

$$\hat{\phi}_{xy}(\omega) = \frac{1}{N T} X^N(\omega) Y^{N*}(\omega) \quad (A2.27)$$

Onde $Y^{N*}(\omega)$ representa o conjugado de $Y^N(\omega)$

A teoria mostra que $\hat{\phi}_x(\omega)$ é um bom estimador de $\phi_x(\omega)$ (sem "bias") mas cuja variância não diminui com o aumento de N , e por outro lado a estimativa de $\phi_x(\omega)$, para um determinado ω_1 é independente daquela para um outro ω qualquer. Os espectros calculados através destas fórmulas se distribuem randômicamente em torno do valor esperado $\phi_x(\omega)$.

Um método desenvolvido para melhorar a qualidade do estimador de $\phi_x(\omega)$ é dividir a sequência amostrada em N_d sub-sequências de N' pontos (de modo que $N = N_d N'$). A transformada finita de Fourier de cada uma dessas sub-sequências, $X_i^{N'}(\omega)$, é calculada:

$$X_i^{N'}(\omega_k) = T \sum_{l=1}^{N'} x(lT) e^{-j2\pi ljk/N'} \quad (A2.28)$$

para $i = 1, 2, \dots, N_d$

E o auto espectro estimado por:

$$\hat{\phi}(\omega_k) = \frac{1}{N T} \sum_{i=1}^{N_d} |X_i^{N'}(\omega_k)|^2 \quad (A2.29)$$

O estimador não tem "bias". Com o aumento de N_d o erro randômico diminui ao custo da resolução, que é dada por:

$$\Delta\omega = \frac{2\pi}{T N'} \quad (A2.30)$$

Outro método utilizado para melhorar a qualidade do estimador de $\phi_x(\omega)$ é o de utilizar janelas com a finalidade de suprimir o efeito de bordas. O efeito de borda pode ser descrito como a superposição de frequências múltiplas de $2\pi/T_{\text{total}}$, onde T_{total} é o tempo total de amostragem, o que não aconteceria se fosse tomada uma sequência infinita. Para diminuir este efeito os dados podem ser multiplicados por $W_M(t)$, que é o que se chama de janela. Na figura A2.1 é apresentado um gráfico de uma janela de Hamming.

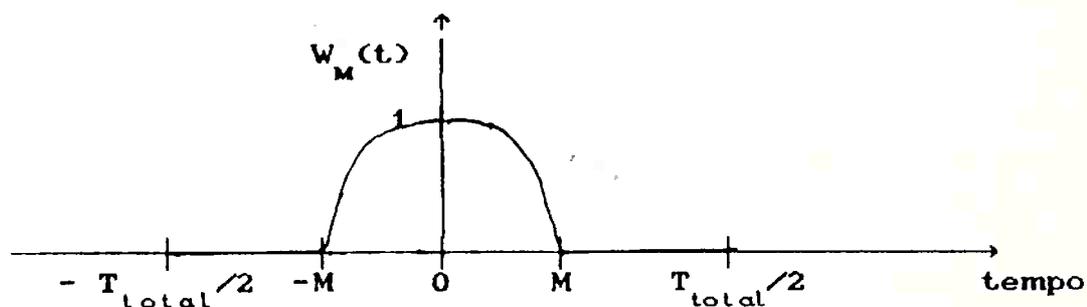


FIGURA A2.1 - Gráfico de uma janela de Hamming $W(t)$.

Neste caso a janela de Hamming é dada por:

$$W_M(\tau) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 + \cos \frac{\pi \tau}{M} \right) & \text{para } |\tau| \leq M \\ 0 & \text{para } |\tau| > M \end{cases} \quad (\text{A2.31})$$

A expressão para o espectro fica sendo:

$$\hat{\phi}_x(\omega_k) = T \sum_{l=-MT}^{l=MT} W_M(t) \hat{R}_x(t) e^{-j2\pi k t / N} \quad (A2.32)$$

O efeito do uso da janela é o de que o espectro calculado é suavizado, apresentando menos picos randômicos.

M é um parâmetro importante nesta expressão. Com o aumento de M, a variância do estimador aumenta, ou seja surgem picos randômicos nos gráficos de $\hat{\phi}_x(\omega)$, no entanto diminui o "bias" do estimador.

Na análise da dinâmica de um processo devem ser calculados $\hat{\phi}_{yu}(\omega)$, $\hat{\phi}_y(\omega)$ e $\hat{\phi}_u(\omega)$ para estimar a função de transferência e o espectro do ruído, segundo o modelo (A2.14) através de:

$$\hat{G}(e^{j\omega_k}) = \frac{\hat{\phi}_{yu}(\omega_k)}{\hat{\phi}_u(\omega_k)} \quad (A2.33)$$

$$\hat{\phi}_v(\omega_k) = \hat{\phi}_y(\omega_k) - \frac{|\hat{\phi}_{yu}(\omega_k)|^2}{\hat{\phi}_u(\omega_k)} \quad (A2.34)$$

Com um M pequeno podem ser identificados picos de ressonância no diagrama de Bode mas o seu valor é acometido de incerteza, à medida que M é aumentado vão surgindo picos randômicos de maneira a que estes se tornam indistiguíveis.

APÊNDICE 3 - MÉTODOS NUMÉRICOS DE OTIMIZAÇÃO

O conteúdo deste apêndice foi extraído de Himmelblau (1970) e Ljung (1987).

A3.1 Introdução

A identificação de modelos é baseada na minimização de :

$$V_N(\theta) = \sum_{t=\tau}^{t=NT} (y(t) - \hat{y}(t))^2 \quad (\text{A3.1})$$

em relação aos parâmetros $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_d)$. Os métodos que serão apresentados são todos baseados em um algoritmo cuja esquema básico é:

- partindo de um determinado conjunto de parâmetros, $\theta^{(0)}$, ir construindo uma sequência:

$$\theta^{(1)}, \theta^{(2)}, \dots, \theta^{(k)}, \dots \quad (\text{A3.2})$$

de modo que:

$$V_N(\theta^{(1)}) > V_N(\theta^{(2)}) > \dots > V_N(\theta^{(k)}) \dots \quad (\text{A3.3})$$

até que a sequência atinja um mínimo, que pode ser detectado pelo fato do algoritmo não conseguir construir:

$$\theta^{(k+1)} < \theta^{(k)} \quad (\text{A3.4})$$

ou que o algoritmo tenha gerado $\theta^{(k+1)}$ tal que a redução em termos relativos, esteja abaixo de um determinado limite, isto é:

$$\frac{|V_N(\theta^{(k+1)}) - V_N(\theta^{(k)})|}{|V_N(\theta^{(k)})|} < \text{TOL} \quad (\text{A3.5})$$

Dado um $\theta^{(k)}$, a procura de $\theta^{(k+1)}$ satisfazendo (A3.4) é iterativa. Esta procura é baseada na correção de $\theta^{(k)}$ por um vetor $\Delta\theta^{(k),j}$:

$$\theta^{(k),j} = \theta^{(k)} + \Delta\theta^{(k),j} \quad (\text{A3.6})$$

Até que $\theta^{(k),j}$ satisfaça (A3.4), quando então:

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k),j} \quad (\text{A3.7})$$

Caso o método não tenha conseguido encontrar um $\theta^{(k),j}$ satisfazendo (A3.4), após um determinado número de iterações $j = \text{ITMAX}$, supõe-se que um mínimo foi atingido (o algoritmo não conseguiu construir $\theta^{(k+1)}$, tal que $\theta^{(k+1)} < \theta^{(k)}$).

O número de iterações necessárias para que o algoritmo atinja um mínimo é uma medida de sua eficiência. Por outro lado, o algoritmo tem que ser suficientemente robusto para que este mínimo esteja o mais próximo possível de um mínimo real (verdadeiro) de $V_N(\theta)$.

Os algoritmos que serão apresentados (na verdade categorias de algoritmos) diferem entre si na maneira em que é feita a correção (A3.6). Os dois primeiros são baseados na procura em uma dada direção, isto é:

$$\Delta\theta^{(k),j} = h_j \Delta\theta^{(k)} \quad (\text{A3.8})$$

Onde $\Delta\theta^{(k)}$ é avaliado uma única vez para cada $\theta^{(k)}$.

A3.2 Método de Gauss-Newton

O método é baseado na linearização do modelo preditor ($\hat{y}(t)$) em relação aos parâmetros em torno de $\theta^{(k)}$:

$$\hat{y}^l(t) = \hat{y}(t/\theta^{(k)}) + \sum_{i=1}^{i=d} \left[\frac{\partial \hat{y}(t/\theta)}{\partial \theta_i} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \Delta\theta_i^{(k)} \quad (\text{A3.9})$$

Onde $\hat{y}(t/\theta^{(k)})$ é o modelo preditor calculado com os parâmetros $\theta^{(k)}$ e $\left[\frac{\partial \hat{y}(t/\theta)}{\partial \theta_n} \right]_{\theta=\theta^{(k)}}$ é a derivada parcial de $\hat{y}(t/\theta)$ em relação a θ_n , no ponto $\theta = \theta^{(k)}$.

A solução analítica do problema de minimização é dada por:

$$\frac{\partial V_N(\theta)}{\partial \theta_i} = \frac{\partial \left[\sum_{t=\tau}^{L=NT} (y(t) - \hat{y}(t))^2 \right]}{\partial \theta_i} = 0 \quad (\text{A3.10})$$

para $i=1,2, \dots, d$

Substituindo $\hat{y}(t)$ pelo modelo linearizado, $\hat{y}^l(t)$, obtemos como solução os incrementos $\Delta\theta_1, \Delta\theta_2, \dots, \Delta\theta_d$, que representam a melhor direção de busca caso o modelo fosse linear. Deste modo a solução caso o modelo fosse linear seria:

$$\theta^{(k+1)} = \theta^{(k)} + \Delta\theta^{(k)} \quad (\text{A3.11})$$

onde chamamos $\Delta\theta^{(k)}$ ao vetor $(\Delta\theta_1^{(k)}, \Delta\theta_2^{(k)}, \dots, \Delta\theta_d^{(k)})$. Na realidade o sistema sendo não linear, $\Delta\theta^{(k)}$ é uma direção de busca válida em alguma vizinhança de $\theta^{(k)}$. Portanto a busca é feita de forma iterativa, com:

$$\theta^{(k),j} = \theta^{(k)} + h_j \Delta\theta^{(k)} \quad (\text{A3.12})$$

Até encontrar uma vizinhança de $\theta^{(k)}$, ou seja um $h_j < 1$, tal que $\theta^{(k),j} < \theta^{(k)}$.

$\Delta\theta^{(k)}$ é obtido como solução de um sistema de equações lineares, deduzidas de (A3.10) substituindo a expressão (A3.9) do modelo linearizado em relação aos parâmetros. O sistema pode ser colocado na seguinte forma:

$$A \Delta\theta^{(k)} = Z \quad (A3.13)$$

onde A é uma matriz $d \times d$ e Z um vetor de dimensão d .

A é dada por:

$$A = X^T X \quad (A3.14)$$

com :

$$X = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial \hat{y}(\tau/\theta)}{\partial \theta_1} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} & \left[\frac{\partial \hat{y}(\tau/\theta)}{\partial \theta_2} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} & \dots & \left[\frac{\partial \hat{y}(\tau/\theta)}{\partial \theta_d} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \\ \left[\frac{\partial \hat{y}(2\tau/\theta)}{\partial \theta_1} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ \left[\frac{\partial \hat{y}(N\tau/\theta)}{\partial \theta_1} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} & \dots & \dots & \left[\frac{\partial \hat{y}(N\tau/\theta)}{\partial \theta_d} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \end{bmatrix} \quad (A3.15)$$

e Z dado por:

$$Z = X^T E \quad (A3.16)$$

onde E é o resíduo, para $\theta = \theta^{(k)}$:

$$E = \begin{bmatrix} (y(\tau) - \hat{y}(\tau/\theta^{(k)})) \\ (y(2\tau) - \hat{y}(2\tau/\theta^{(k)})) \\ \vdots \\ (y(N\tau) - \hat{y}(N\tau/\theta^{(k)})) \end{bmatrix} \quad (A3.17)$$

A3.3 Método do Gradiente

O método do gradiente se baseia na utilização do oposto do gradiente da função objetivo, $V_N(\theta)$, como direção de busca, já que esta é a direção em que a função objetivo decresce mais rapidamente:

$$\Delta\theta^{(k)} = -\nabla\langle V_N(\theta^{(k)}) \rangle = \begin{bmatrix} \left[\frac{\partial V_N(\theta)}{\partial\theta_1} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \\ \left[\frac{\partial V_N(\theta)}{\partial\theta_2} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \\ \vdots \\ \left[\frac{\partial V_N(\theta)}{\partial\theta_d} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \end{bmatrix} \quad (\text{A3.18})$$

Pode se usar também um vetor normalizado:

$$\Delta\theta^{(k)} = -\nabla\langle V_N(\theta^{(k)}) \rangle / \|\nabla\langle V_N(\theta^{(k)}) \rangle\| \quad (\text{A3.19})$$

A procura por um $\theta^{(k+1)} < \theta^{(k)}$ é feita de maneira análoga:

$$\theta^{(k),j} = \theta^{(k)} + h_j \Delta\theta^{(k)}. \quad (\text{A3.20})$$

Existe uma relação importante entre o gradiente e o vetor Z definido em ():

$$-\nabla\langle V_N(\theta^{(k)}) \rangle = 2Z \quad (\text{A3.21})$$

Para demonstrá-la basta aplicar a regra da cadeia na expressão ():

$$\left[\frac{\partial V_N(\theta)}{\partial \theta_i} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} = -2 \sum_{t=\tau}^{L=NT} (y(t) - \hat{y}(t/\theta^{(k)})) \left[\frac{\partial \hat{y}(t/\theta)}{\partial \theta_i} \right]_{\theta=\theta^{(k)}} \quad (\text{A3.22})$$

A3.4 Método de Marquardt

O método de Marquardt é mais eficiente que os dois métodos anteriores, pois a direção de procura é variável, e é dada por:

$$(A + \lambda_j I) \Delta\theta^{(k),j} = Z \quad (\text{A3.23})$$

A e Z já foram definidos anteriormente, I é a matriz identidade, $\Delta\theta^{(k),j}$ é o vetor de correção para a iteração j e λ_j um parâmetro importante do método. A correção é feita através de:

$$\theta^{(k),j} = \theta^{(k)} + \Delta\theta^{(k),j} \quad (\text{A3.24})$$

Se λ_j for pequeno o método se aproxima a:

$$A \Delta\theta^{(k)} = Z \quad (A3.25)$$

ou seja $\Delta\theta^{(k)}$ é a direção definida para o método de Gauss-Newton. Se λ_j for grande a direção de $\Delta\theta^{(k),j}$ vai se aproximando daquela do método do gradiente.

λ_j vai sendo corrigido iterativamente através de um algoritmo cujas minúcias não serão apresentadas aqui, mas basicamente λ_j é mantido pequeno, e só é aumentado nas condições em que o algoritmo de Gauss-Newton não é satisfatório.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- AKAIKE, H.; Fitting Auto-regressive models for prediction, Ann. Inst. Stat. Math., vol 21, 243-347, 1969, in Ljung, 1987.
- ARULALAN, G.; Application of Model Predictive Control to Distillation, Thesis Doctor of Philosophy, University Microfilms International, 1985.
- BENDAT, J. & PIERSOL, A.; Random Data, John Wiley & Sons, N.Y., 566p., 1986.
- DRAHOS, J., Anotações de Aula da Pós-Graduação da USP-EP-DEQ, 1989.
- GIUDICI, R. & MILANI, S.; Manual do Usuário do Programa DMARQ.FOR, USP-EP-DEQ, 1990.
- GMEHLING, J. & ONKEN, U., Vapor Liquid Equilibrium Data Collection, Vol. 1, Part a, DECHEMA Chemistry Data Series, 1977.
- HANKINSON, R. & THOMSON, G.; A New Correlation for Saturated Densities of Liquid and Their Mixtures, AICHE Journal, 25, 4:653-662, 1979.
- HIMMELBLAU, D.; Process Analysis by Statistical Methods, John Wiley & Sons, N.Y., 463p., 1970.
- JOUBE, P.; DEFAYE, G.; GARALP, L.; Identification of a Model in Concentration of an Industrial Distillation at Low Pressure: On-Line Application in View of a Control, Proceedings of the Fifth Identification and System Parameter Estimation Symposium; Germany, 2:917-919, 1979.
- LJUNG, L.; System Identification, Prentice-Hall Inc., N.J., 519p., 1987.
- , System Identification Toolbox for Use With MATLAB, The Math Works, Inc., 1986.
- MARCHETTI, J.; BENALLOU, A.; SEBORG, D.; MELLICHAMP, D.; A Pilot-Scale Distillation Facility for Digital Computers Control Research, Computers & Chemical Engineering, 9, 3:301-309, 1985.
- REID, R.; PRAUSNITZ, J.; POLING, B.; The Properties of Gases and Liquids, M^c Graw-Hill, Inc., 1987.

Dunham

CPS

Thompson

PAT

THOMSON, G., BROBST, R., HANKINSON, R., Extension of HBT Methods to Prediction of Compressed Liquid Volumes, AICHE Journal, 21:21, 1981, in Reid & alli, 1987.

TUSCHAK, R.; BEZI, I.; TEVESZ, G.; HETTHESSY, J.; HABER, R., Practical Experiences on the Setup and Identification of a Distillation Pilot Plant, Proceedings of the Fifth Identification and System Parameter Estimation Symposium; Germany, 1:767-772, 1979.