



Universidade Federal de Ouro Preto
Instituto de Ciências Exatas e Aplicadas
Departamento de Engenharia Elétrica



Trabalho de Conclusão de Curso

Estudo de Caso: Identificação Caixa-Cinza do Reator CS \dot{T} R

Fernanda Martins dos Santos Falcão

João Monlevade, MG
2022

Fernanda Martins dos Santos Falcão

Estudo de Caso: Identificação Caixa-Cinza do Reator CSTR

Trabalho de Conclusão de curso apresentado à Universidade Federal de Ouro Preto como parte dos requisitos para obtenção do Título de Bacharel em Engenharia Elétrica pelo Instituto de Ciências Exatas e Aplicadas da Universidade Federal de Ouro Preto.

Orientadora: Prof^ª. Ms. Anny Verly

Coorientador: Prof^º. Dr. Rodrigo Augusto Ricco

Universidade Federal de Ouro Preto
João Monlevade
2022

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

F181e Falcão, Fernanda Martins dos Santos.
Estudo de caso [manuscrito]: identificação caixa-cinza do reator CSTR.
/ Fernanda Martins dos Santos Falcão. - 2022.
45 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientadora: Profa. Ma. Anny Verly.
Coorientador: Prof. Dr. Rodrigo Augusto Ricco.
Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto.
Instituto de Ciências Exatas e Aplicadas. Graduação em Engenharia
Elétrica .

1. Engenharia elétrica. 2. Identificação de sistemas. 3. Modelos matemáticos. 4. Reatores químicos. 5. Sistemas não-lineares - Polinômios. I. Ricco, Rodrigo Augusto. II. Verly, Anny. III. Universidade Federal de Ouro Preto. IV. Título.

CDU 621.3:519.6

Bibliotecário(a) Responsável: Flávia Reis - CRB6-2431



FOLHA DE APROVAÇÃO

Fernanda Martins dos Santos Falcão

Estudo de caso: identificação caixa-cinza do reator CSTR

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Elétrica da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Elétrica.

Aprovada em 10 de novembro de 2022

Membros da banca

[Mestre] - Anny Verly - Universidade Federal de Ouro Preto

[Mestre] - Marcus Vinicius de Paula - Centro de Inovação e Tecnologia/SENAI

[Doutora] - Wendy Yadira Eras Herrera - Universidade Federal de Ouro Preto

[Doutor] - Rodrigo Augusto Ricco - Universidade Federal de Ouro Preto

Anny Verly, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 10/1/2022



Documento assinado eletronicamente por **Anny Verly, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 10/11/2022, às 09:11, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0425109** e o código CRC **24624D89**.

Resumo

No presente trabalho é realizado um estudo de caso acerca da identificação de modelos para um reator de tanque contínuo. Para isso, cada etapa do procedimento de identificação é devidamente abordada, de forma a exemplificar o ferramental teórico empregado. Ensaios simulados são realizados sobre o reator CSTR com intuito de se obter dados que descrevam o comportamento dinâmico e estático do mesmo. Com efeito, utilizando as massas de dados obtidas, são empregadas metodologias clássicas de identificação de sistemas para obtenção de modelos polinomiais NARMAX e modelos de blocos interconectados, como os modelos de Hammerstein e Wiener. As performances dos três modelos estimados neste trabalho são comparadas. Os resultados sugerem que o modelo NARMAX possui maior capacidade de representar a planta do reator CSTR.

Palavras-chave: Identificação de Sistemas; Blocos Interconectados; NARMAX; Reator CSTR.

Abstract

This present paper is realized one case study about the models identification for a continuous tank reactor. For that, each step of procedure of identification is properly addressed, in order to exemplify the theoretical tools used. Simulated tests are performed on the CSTR reactor with the intention of obtain data that describe the dynamics and static behavior of the same. Indeed, using the mass of data obtained, classical methodologies are used of systems identification for obtain polynomial models of NARMAX and interconnected block models, like the Hammerstein and Wiener models. The performances of the three estimated models in this paper are compared. The results suggests the NARMAX model it has more capacity to represent the CSTR reactor plant.

Keywords: Systems Identification; Interconnected blocks; NARMAX; CSTR reactor

Lista de ilustrações

Figura 1 – Reator CSTR.	2
Figura 2 – Diagramas de blocos interconectados.	4
Figura 3 – Diagrama de fluxo para identificação de sistemas.	9
Figura 4 – Exemplo de um sinal PRBS.	10
Figura 5 – Ensaio estático do sistema.	22
Figura 6 – Curvas Estáticas Reais e Ajustadas do Sistema.	23
Figura 7 – Simulação, no <i>Simulink</i> , do código implementado.	24
Figura 8 – Sinal PRBS de entrada com <i>offset</i> de temperatura.	25
Figura 9 – FAC do sinal de entrada com máximo atraso igual a 100.	26
Figura 10 – Teste de Covariância do sinal de Concentração.	27
Figura 11 – Teste de Covariância do sinal de entrada decimado.	28
Figura 12 – Teste de Covariância do sinal de saída decimado	28
Figura 13 – Curvas de entrada e saída do sistema.	29
Figura 14 – Histogramas dos 5 primeiros parâmetros do modelo NARMAX.	33
Figura 15 – Histogramas dos 6 últimos parâmetros do modelo NARMAX.	33
Figura 16 – Histogramas dos parâmetros da parte dinâmica do modelo de Hammerstein.	34
Figura 17 – Histogramas dos parâmetros da parte dinâmica do modelo de Wiener.	35
Figura 18 – Validação por simulação livre do modelo NARMAX.	37
Figura 19 – Validação por simulação livre do modelo de Hammerstein.	38
Figura 20 – Validação por simulação livre do modelo de Wiener.	38
Figura 21 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo NARMAX, (4.5).	40
Figura 22 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo de Hammerstein, (4.6).	40
Figura 23 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo de Wiener, (4.7).	41

Lista de abreviaturas e siglas

AIC	Critério Informação de Akaike (do inglês, <i>Akaike's Information Criterion</i>);
CSTR	Reator de Tanque Contínuo (do inglês, <i>Continuous Stirred-Tank Reactor</i>);
FAC	Função de Autocorrelação de Resíduos;
IVM	Métodos de Variáveis Instrumentais;
MIMO	Múltiplas Entradas e Múltiplas Saídas (do inglês, <i>Multiple Inputs, Multiple Outputs</i>);
MISO	Múltiplas Entradas e Única Saída (do inglês, <i>Multiple Inputs, Single Output</i>);
MQ	Estimador de Mínimos Quadrados;
MQE	Estimador de Mínimos Quadrados Estendidos;
NARMAX	Modelo Auto-Regressivo com entradas Exógenas (do inglês, <i>Nonlinear AutoRegressive model with exogenous inputs</i>);
PEM	Métodos de Predição e Erro;
PRBS	Sinal Binário Pseudo-Aleatório (do inglês, <i>Binary Signal Pseudo-Aleatory</i>);
RMSE	Raiz do Erro Quadrático Médio (do inglês, <i>Root Mean Squared Error</i>);
SISO	Única Entrada e Única Saída (do inglês, <i>Single Input, Single Output</i>);

Lista de símbolos

Capítulo 1

R	Conjunto dos números reais;
x_k	Vetor de estados no instante $k \in R^n$;
y_k	Sinal de saída no instante $k \in R^l$;
u_k	Entradas do sistema no instante $k \in R^m$;
k	Tempo discreto;
$y(k)$	Sinal de referência de saída;
v_k	Sinal intermediário no instante $k \in R^l$;

Capítulo 2

X	Vetor de regressores $\in R^{n \times n}$;
ξ	Vetor de resíduos $\in R^N$;
$\hat{\theta}$	Vetor de parâmetros $\in R^n$;
$y(k)$	Valor estimado;
N	Número de dados;
$J_{MQ}(\cdot)$	Função custo;
$f(\cdot)$	Função estática não linear;
$G(q)$	Modelo dinâmico linear;
\triangleq	Iguais por definição;

Capítulo 3

j	Espécie química de interesse;
F_{j0}	Taxa de entrada da espécie j , dada em (molsj/tempo);
F_j	Taxa de saída da espécie j , dada em (molsj/tempo);
r_j	Velocidade de formação da espécie j , dada em (mols/dm ³ · s);
N_j	Número de mols da espécie j ;

F_j	Vazão molar, dada em (mols/tempo);
r_a	Velocidade de desaparecimento de A , dada em (mols/ $dm^3 \cdot s$);
F_A	Vazão de alimentação do reator, dada em (mols/tempo);
C_A	Concentração do reagente A no reator, dada em (mols/ dm^3);
ρ	Densidade do fluido;
C_p	Calor específico;
C_A^A	Concentração da alimentação do reator, dada em (mols/ dm^3);
T^A	Temperatura de alimentação do reator;
T	Temperatura do reator;
ΔH	Calor da reação;
k_0	Taxa de reação inicial;
E	Energia de ativação da reação;
R	Constante ideal dos gases;
U	Coefficiente de troca térmica da jaqueta;
T_c	Temperatura do líquido refrigerante;

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação e Justificativa	1
1.2	Formulação do Problema	3
1.3	Objetivo	5
1.4	Estrutura da Monografia	5
2	IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMAS	7
2.1	Modelagem Matemática	7
2.2	Identificação de Sistemas	7
2.3	Experimentação do Sistema	9
2.3.1	Sinais Binários Pseudo-Aleatórios (PRBS)	9
2.3.1.1	Escolha do tempo de amostragem	10
2.4	Representação do sistema	11
2.4.1	Modelo Polinomial NAR(MA) X	11
2.4.2	Modelos de blocos interconectados	12
2.4.2.1	Modelo de Hammerstein	12
2.4.2.2	Modelo de Wiener	12
2.5	Determinação da Estrutura	13
2.5.1	Critério Informação de Akaike	13
2.5.2	Taxa de Redução de Erro	14
2.6	Estimação dos parâmetros	14
2.6.1	Mínimos Quadrados e Mínimos Quadrados Estendidos (MQE)	14
2.7	Validação do Modelo	15
2.7.1	Índice RMSE	15
2.7.2	Simulação Livre	16
2.7.3	Função de Autocorrelação (FAC) e Análise de Resíduos	16
3	DESCRIÇÃO DA PLANTA DO REATOR CONTÍNUO DE TANQUE AGITADO	17
3.1	Descrição do Funcionamento	17
3.2	Descrição do Sistema	17
4	PROCEDIMENTOS PARA A IDENTIFICAÇÃO DE MODELOS DO SISTEMA CSTR	21
4.1	Experimentação do Sistema	21
4.1.1	Ensaio Estáticos	21

4.1.2	Ensaio Dinâmico	24
4.2	Escolha da Representação Matemática e Determinação da Estrutura	30
4.3	Estimação de Parâmetros	32
4.4	Validação do Modelo	37
4.5	Simulação Livre	37
4.6	Índice RMSE	39
4.7	Análise de Resíduos	39
4.8	Considerações Parciais	41
5	CONCLUSÃO	42
	Referências	43

1 Introdução

1.1 Motivação e Justificativa

A Revolução Industrial 4.0 traz um cenário importante de tendência à automatização de processos industriais, principalmente por meio de inteligência artificial, robótica e internet das coisas (Menelau et al., 2019). Esse fato tem como consequência direta o aumento da produtividade em diversos setores industriais (Clavijo, 2008).

Para aumentar a robustez e automatizar os processos, é preciso conhecer o comportamento dinâmico dos mesmos. Por isso, uma das tarefas do engenheiro é obter o modelo matemático dos processos. Contudo, dependendo do processo, obter modelos a partir das equações da física pode ser uma tarefa trabalhosa. Uma alternativa é utilizar dados de entrada e saída para obtenção de modelos que sejam capazes de representar o processo sob estudo.

Na prática, a maioria dos sistemas dinâmicos utilizados em indústrias são não lineares. Isso se dá, principalmente, pelo fato de que modelos lineares não conseguem representar certos regimes dinâmicos da mesma forma que os modelos não lineares produzem. Porém, os modelos não lineares trazem um aumento inevitável na complexidade dos algoritmos que são utilizados em sua identificação, eliminando a simplicidade associada às técnicas lineares. Porém, apesar de apresentar maior complexidade, existem algumas características de sistemas que só conseguem ser analisadas a partir da representação de um modelo não linear (Aguirre, 2015; da Silva, 2012).

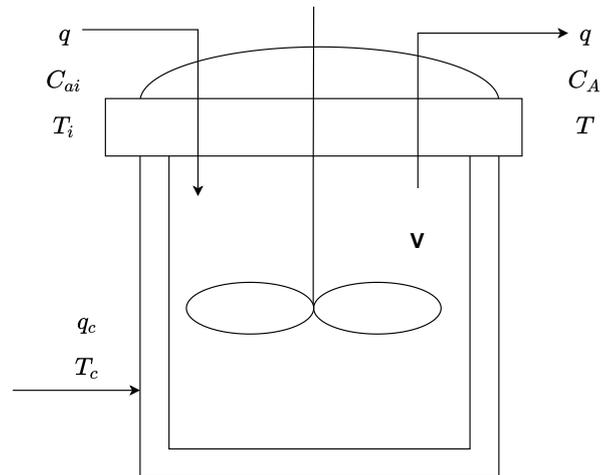
Na identificação de sistemas não lineares, os modelos de blocos interconectados, como os de Hammerstein e de Wiener, são amplamente conhecidos por possuírem relativa simplicidade estrutural (Aguirre, 2015; da Silveira Coelho, 2002; Santos et al., 2010). Tais modelos são originados dos trabalhos de Narendra and Gallman (1966), e possuem em um de seus blocos a função estática, que representa as características não lineares do sistema, e no outro bloco uma função linear, que representa as características dinâmicas. Nesse sentido, grande parte dos processos industriais podem ser representados por essa classe de modelos (de Souza Fernandes, 2006; da Silva, 2012; de Paula, 2016; Ferreira, 2017; Verly et al., 2018).

Um dos equipamentos que possuem maior influência no rendimento de um produto e um processo industrial é o reator químico. O Reator de Tanque Contínuo (do inglês, *Continuous Stirred-Tank Reactor*) é um exemplo clássico de sistema não linear. O CSTR é frequentemente utilizado em reações de fase líquida, em processos que normalmente ocorrem em estado estacionário e de forma não isotérmica. No processo do CSTR é possível verificar a existência de múltiplos pontos de equilíbrio, podendo ser estáveis ou não (Mota

and Vieira, 2015).

A Figura 1 representa um modelo ilustrativo de um reator CSTR encamisado. Esse tipo de reator possui um agitador em que os reagentes e produtos têm escoamento igual e por isso não há acúmulo dos reagentes em seu interior, ou seja, seu volume é constante.

Figura 1 – Reator CSTR.



Fonte: Adaptado de Guan et al. (2016).

Em que q é a vazão de entrada ou de saída, C_{ai} e T_i são, respectivamente, a concentração e temperatura iniciais do reator. q_c é a vazão do líquido refrigerante da camisa e T_c a temperatura do líquido refrigerante da camisa. C_A e T são, respectivamente, a concentração e temperatura de saída do reator.

Nos trabalhos desenvolvidos por (Aljamaan et al., 2015; Bahita and Belarbi, 2016; Luning et al., 2017; Guan et al., 2016; Han et al., 2017) são realizadas a modelagem e identificação de reatores químicos a partir de diferentes representações e estruturas diferentes. Na identificação realizada no trabalho de Bahita and Belarbi (2016), foi utilizada a rede Neural de Fuzzy associada a um controle adaptativo de referência. Já em Luning et al. (2017), é utilizada a estrutura de Controle de Modo Deslizante para identificar e controlar a planta de um CSTR. Vale destacar também os trabalhos de Guan et al. (2016), que utilizou a estrutura NARMAX (do inglês, *Nonlinear AutoRegressive model with exogenous inputs*), o de Aljamaan et al. (2015) que realizou a identificação do reator CSTR a partir do modelo de Hammerstein e o de Han et al. (2017), que utilizou o modelo combinado de Hammerstein-Wiener (H-W) em conjunto com a Rede Neural ELM na identificação do CSTR. Esses três trabalhos obtiveram modelos com excelentes resultados qualitativos e quantitativos. O ponto comum entre eles é a discussão que os autores trazem acerca da dificuldade na obtenção dos modelos para o reator CSTR devido à complexidade dinâmica desse sistema. E isso se deve principalmente pela forte não linearidade do processo.

Na literatura, não foram encontrados muitos trabalhos que abordam o tema da identificação desse tipo de reator utilizando as estruturas NARMAX, de Hammerstein

e de Wiener. Considerando a relevância do reator CSTR em processos industriais e o crescimento do interesse em estudar e aplicar técnicas de identificação de sistemas, em especial para sistemas não lineares, acredita-se que o presente trabalho é um estudo de caso relevante e apresenta uma contribuição para a sociedade acadêmica.

Dadas as considerações anteriores, cabe esclarecer que o interesse deste trabalho está na investigação da identificação do Reator de Tanque Contínuo. De forma resumida, busca-se responder a seguinte questão: Como as ferramentas da teoria de identificação de sistemas podem ser empregadas na obtenção de modelos matemáticos para o reator CSTR? Os caminhos para resolver tal questão envolvem procedimentos clássicos das etapas de identificação de sistemas. Nesse sentido, é proposta a utilização da modelagem *caixa cinza*, na qual é necessária o uso de informação auxiliar do sistema para realizar a identificação, do modelo clássico de NARX, (do inglês, *nonlinear autoregressive model with exogenous variables*) e os modelos de blocos interconectados de Wiener e de Hammerstein. Em adição, são realizadas investigações que apontem, dentre as metodologias utilizadas, qual é a mais indicada para representar o sistema.

1.2 Formulação do Problema

Seja o reator CSTR, definido em (Aljamaan et al., 2015; Bahita and Belarbi, 2016; Fogler, 2009; Ma et al., 2018; Simorgh et al., 2020), representado por (Aguirre, 2015, p. 390), no modelo genérico:

$$y(k) = F[y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-\tau_d), \dots, u(k-n_u)], \quad (1.1)$$

em que F é uma função não linear, $y(k) \in R^l$ e $u(k) \in R^p$ são as sequências de saída e entrada do sistema respectivamente; n_y , n_u e τ_d são, respectivamente, os máximos atrasos em y , em u e o tempo morto.

Usualmente, as representações NARX polinomiais podem ser utilizadas para descrever a função F . Nessas situações, a função 1.2 utiliza o modelo:

$$y(k) = \sum_i c_i \prod_{j=1}^{n_y} y(k-j) \prod_{r=1}^{n_u} u(k-r). \quad (1.2)$$

em que c_i são os parâmetros $[a_1 \dots a_n]$ e $[b_0 \dots b_n]$ dos regressores do modelo. Diante do exposto, pode-se enunciar o Problema 1.1.

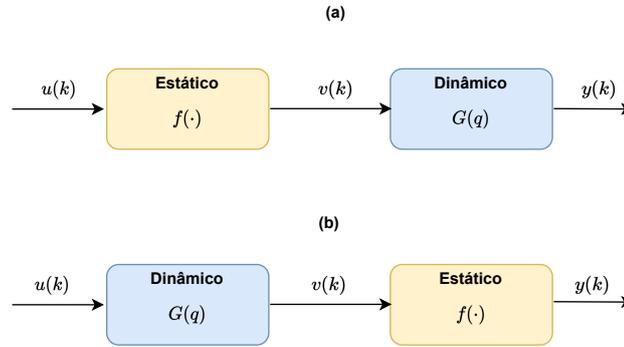
Problema 1.1 *Seja a função (1.2), com os sinais de entrada $u(k)$ e de saída $y(k)$ disponíveis, objetiva-se determinar os máximos atrasos n_u e n_y , bem como estimar os parâmetros c_i dos regressores do modelo.*

Com efeito, em um primeiro momento, projeta-se resolver o Problema 1.1 empregando-se as técnicas clássicas de identificação de sistemas, descritas no Capítulo 2 de (Aguirre, 2015).

Em situações práticas, nas quais os valores em regime permanente do sistema podem ser facilmente obtidos, é conveniente utilizar a notação de Hammerstein ou de Wiener, representadas pelas Figuras 2.(a) e 2.(b), respectivamente.

Na Figura 2 tem-se os diagramas de blocos interconectados de Hammerstein e Wiener, em que o bloco estático representa a função estática não linear $f(\cdot)$ e o bloco dinâmico representa a função dinâmica linear $G(q)$.

Figura 2 – Diagramas de blocos interconectados. Em (a) tem-se o diagrama de Hammerstein, em que o bloco com a função estática não linear do sistema antecede o bloco dinâmico linear; em contrapartida, no diagrama de Wiener, (b), o bloco estático não linear é subseqüente ao bloco dinâmico linear.



Fonte: Adaptado de Verly et al. (2018).

Em que $v_k \in R^m$ é o sinal intermediário; $f(\cdot)$ representa a função não linear estática do sistema e $G(q)$ representa a parcela dinâmica linear. As informações conhecidas são os sinais de entrada $u(k)$ e saída $y(k)$, já o sinal intermediário $v(k)$ é desconhecido e deve ser estimado (Verly et al., 2018).

O interesse por tais modelos de blocos interconectados aumentou devido a sua eficácia em problemas não lineares. Além disso, os modelos de Hammerstein e Wiener também podem ser escritos em tempo discreto, tal como representado em (1.3) e (1.4), respectivamente, por (Aguirre, 2015):

$$y(k) = a_1 y(k-1) + \dots + a_{n_y} y(k-n_y) + f[u(k-1) + \dots + u(k-n_u)], \quad (1.3)$$

$$y(k) = f[a_1 f^{-1}(y(k-1)) + \dots + a_{n_y} f^{-1}(y(k-n_y)) + b_0 u(k-\tau_d) + \dots + b_{n_u} u(k-n_u)], \quad (1.4)$$

em que assume-se f como invertível e τ_d é o atraso puro de tempo. A partir do exposto, define-se então o Problema 1.2.

Problema 1.2 *Sejam as funções (1.3) e (1.4), com os sinais de entrada $u(k)$ e saída $y(k)$, disponíveis, bem como os valores em estado estacionário do sistema, objetiva-se determinar os máximos atrasos n_u e n_y , assim como estimar os parâmetros $[a_1 \dots a_n]$ e $[b_0 \dots b_n]$ dos regressores do modelo, como também a característica estática $f(\cdot)$.*

Observação 1.1 *Em situações nas quais estejam disponíveis informações auxiliares sobre o sistema, além dos dados de entrada e saída, o problema de estimação dos parâmetros do modelo pode ser encarado como um problema de identificação caixa cinza. No presente trabalho, a informação auxiliar considerada são os valores em estado estacionário do Reator CSTR. Tais valores são utilizados para ajustar uma característica estática, bem como amparar a escolha dos máximos atrasos dos regressores e grau de não linearidade do modelo dinâmico.*

1.3 Objetivo

Este trabalho tem como principal objetivo resolver os Problemas 1.1 e 1.2, apresentados na Seção 1.2. Para atingir o objetivo principal, elecam-se os objetivos específicos:

- Aprofundar no estudo das etapas do processo de identificação de sistemas e nas metodologias utilizadas neste trabalho;
- Desenvolver os conceitos teóricos para modelagem caixa cinza do reator CSTR;
- Utilizar o modelo clássico NAR(MA)X e os modelos de blocos interconectados de Hammerstein e Wiener na descrição da dinâmica do reator CSTR;
- Realizar comparação entre os modelos estimados.

1.4 Estrutura da Monografia

Esta monografia está estruturada em cinco capítulos. No Capítulo 1 é apresentada a motivação e justificativa para o desenvolvimento deste trabalho, bem como a formulação do problema e seus principais objetivos. No Capítulo 2 é feito um detalhamento teórico dos passos necessários para a realização da identificação de sistemas, sendo eles: experimentação do sistema, escolha da representação matemática, determinação da estrutura do modelo, estimação de parâmetros e validação do modelo. Adicionalmente, são apresentadas as metodologias utilizadas neste trabalho, como, as representações matemáticas NARMAX, de Hammerstein e Wiener, os critérios de Akaike e de Taxa de Redução de Erro, o estimador de Mínimos Quadrados, e o índice RMSE (do inglês, *Root Mean Squared Error*), a Função de Autocorrelação e a técnica de Simulação Livre, utilizados na validação deste trabalho. O Capítulo 3 traz a teoria sobre reatores, e em específico, conhecimentos e características

do reator CSTR. Em adição, são introduzidas a modelagem matemática e a simulação do reator CSTR, sendo também apresentados os ensaios estáticos realizados, bem como seus resultados. O Capítulo 4 apresenta os passos do processo de identificação do reator CSTR que foi realizada nesse trabalho e discute os resultados obtidos. Por fim, no Capítulo 5, tem-se as considerações finais deste trabalho e as suas contribuições para a sociedade acadêmica.

2 Identificação de Sistemas

O presente capítulo traz referências clássicas, bem como atuais, que compõem o estado da arte da identificação de sistemas por meio da metodologia clássica NAR(MA)X e de blocos interconectados do Reator de Tanque Contínuo. Para isso, serão apresentados os pontos mais relevantes dos trabalhos que contribuíram para o desenvolvimento do presente trabalho, como os de (Clavijo, 2008; Ricco et al., 2011; da Silva, 2012; Aguirre, 2015; Paula et al., 2016; Ferreira, 2017; Ma et al., 2018; Prokop et al., 2019; Guan et al., 2016; Naregalkar and Durairaj, 2021; Simorgh et al., 2020). Somado a isso, as seções deste capítulo trazem detalhes de cada etapa do processo de identificação de sistemas.

2.1 Modelagem Matemática

Um modelo matemático de um sistema físico é um análogo matemático que representa algumas das características observadas em tal sistema. Esses modelos têm sido utilizados para diversos fins, por exemplo: entender e explicar fenômenos observados tanto na natureza quanto em sistemas sociais, biomédicos; projeto de sistemas de monitorização e controle; simulação e treinamento, dentre outros. Por isso, a utilização de modelo matemático depende do contexto do problema de modelagem que se quer solucionar.

É importante saber que o modelo desenvolvido para o sistema em questão é uma representação aproximada. Dessa forma, não há um único modelo do sistema, mas sim uma família de modelos com características e desempenhos variados. Além disso, a representação aproximada obtida não possui todas as características do sistema físico. Normalmente são feitas considerações simplificadoras para obter o modelo matemático (Aguirre, 2015).

Ainda segundo Aguirre (2015), tem-se a Modelagem Matemática como a área que estuda formas de desenvolvimento e implementação de modelos matemáticos de sistemas reais. Na *modelagem caixa branca*, também conhecida como *modelagem pela natureza do processo*, é necessário ter conhecimento acerca das relações matemáticas que descrevem os fenômenos envolvidos. Na *modelagem caixa-cinza*, é necessário obter um conhecimento prévio acerca do sistema ou processo. A *modelagem caixa preta* formula os seus modelos a partir dos dados de entrada e saída do sistema.

2.2 Identificação de Sistemas

Por sua vez, a identificação de sistemas é uma área que estuda técnicas alternativas de modelagem matemática. Trata-se de uma forma empírica de obtenção de modelos, e se baseia em coleta de dados e experimentos, exigindo pouco ou quase nenhum conhecimento

específico do processo (Aguirre, 2015). Na maioria dos casos existentes, é preferível utilizar técnicas de identificação de sistemas, visto que não se tem conhecimento sobre as relações físicas que regem a dinâmica de um sistema. Aguirre (2015) traz as principais etapas de um problema de identificação, descritas a seguir:

- *Experimentação do sistema.* Nessa etapa escolhe-se e projetam-se os sinais de excitação e o tempo de amostragem. Dentre os sinais utilizados na identificação de sistemas, destacam-se os sinais pseudo-aleatórios (PRBS, do inglês *Random Pseudo-Signal Binary*) e o ruído branco, visto que estes dois sinais podem excitar toda a dinâmica do sistema, já que são persistentemente excitantes. Escolher a taxa de amostragem também é de suma importância, pois taxas de amostragem diferentes podem resultar em modelos diferentes. Com relação à taxa de amostragem, existem três classificações: subamostrados, bem amostrados e superamostrados. Os sinais subamostrados não contêm informação dinâmica suficiente, impossibilitando a determinação de um modelo para o processo. Já o sinal superamostrado, em que amostras sucessivas tendem a estar fortemente correlacionadas, pode dificultar a determinação da estrutura do modelo (da Silveira Coelho, 2002).
- *Escolha da representação matemática.* Os tipos de modelos utilizados na identificação de sistemas podem ser o de *fuzzy*, NARMAX, redes neurais, função de transferência, autoregressivos, modelo em espaço de estados e modelos de blocos interconectados, dentre outros. Existe a necessidade de realizar testes de linearidade para verificar representações adequadas, além disso, o tipo de representação escolhida varia de acordo com a finalidade do modelo (Ferreira, 2017). Nesse trabalho serão utilizados o modelo NARMAX e os modelos de blocos interconectados de Hammerstein e de Wiener;
- *Determinação da estrutura do modelo.* A estrutura é um dos fatores que influenciam na qualidade do modelo obtido. Para determinar a estrutura do modelo desse trabalho, serão utilizados o critério de Akaike (AIC, do inglês, *Akaike's Information Criterion*), que permite quantificar quantos termos são necessários para representar o sistema e a Taxa de Redução de Erro (ERR, do inglês *Error Reduction Ratio*), que mostra numericamente a importância de cada regressor individualmente.
- *Estimação de parâmetros.* Essa fase se inicia com a escolha do algoritmo que será utilizado. Neste trabalho será utilizada a técnica de estimador de *Mínimos Quadrados* (MQE). Nessa técnica, o principal objetivo é obter os parâmetros de forma a minimizar a diferença entre o valor medido e o valor estimado.
- *Validação do modelo.* Após obter uma família de modelos, se faz necessário verificar se eles possuem as características de interesse do sistema original ou não. Portanto, essa é a última etapa do processo de identificação de um sistema. Neste trabalho serão

utilizados os índices quantitativos RMSE (do inglês, *Root Mean Squared Error*), o índice estatístico da *Função de Autocorrelação* (FAC, do inglês *Sample Autocorrelation Function*), e a análise qualitativa por meio da técnica de *Simulação Livre*.

Para facilitar a compreensão do processo descrito acima, tem-se na Figura 3 um diagrama que representa o fluxo para a identificação de sistemas.

Figura 3 – Diagrama de fluxo para identificação de sistemas.



Fonte: Do autor.

As seções posteriores discutem com mais detalhes as etapas supracitadas e, também, trazem alguns conceitos e indicações bibliográficas importantes.

2.3 Experimentação do Sistema

2.3.1 Sinais Binários Pseudo-Aleatórios (PRBS)

Os sinais binários pseudo-aleatórios são sinais que podem assumir apenas dois valores, o valor correspondente ao nível lógico alto e o valor correspondente ao nível lógico baixo (Aguirre, 2015). Esse tipo de sinal é capaz de excitar todo o sistema, de modo a captar características pertinentes ao modelo.

Os sinais de sequência m são os mais comuns entre os sinais PRBS. Ao gerar esse tipo de sinal, deve-se ter atenção a três importantes variáveis para que o sinal seja eficiente na excitação do sistema, são elas: os valores correspondentes aos níveis alto (+V) e baixo (-V), o número de bits (n) e o intervalo entre bits (T_b).

Na escolha de (+V) e (-V), é preciso levar em consideração a máxima excursão do sinal que pode ser aplicada no sistema sem que este sofra danos. Ao escolher o número de bits (n), deve-se levar em conta o fato de que a periodicidade do sinal PRBS não deve ser menor do que o tempo de acomodação do sistema. Tal restrição assegura que a periodicidade do PRBS não influenciará de maneira indesejada nos resultados do teste. Já na escolha do intervalo entre bits (T_b), é necessário saber que se T_b for muito grande, o sistema interpretará o sinal PRBS como um degrau e se T_b for muito pequeno, o sistema não responderá a uma transição quando outra ocorrer (Aguirre, 2015).

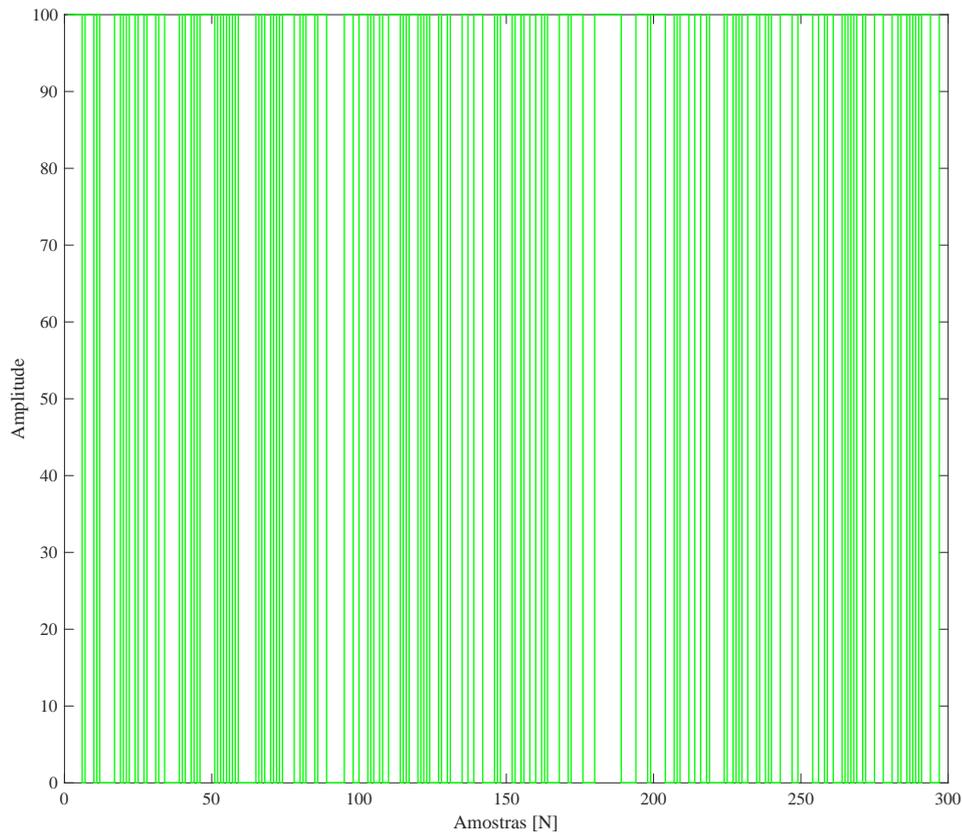
Para encontrar a periodicidade do PRBS, utiliza-se a descrição $T = N \cdot T_b$, em que $N = 2^n - 1$. De forma heurística, T_b pode ser escolhido conforme

$$\frac{\tau_{min}}{10} \leq T_b \leq \frac{\tau_{min}}{3}, \quad (2.1)$$

em que τ_{min} é a menor constante de tempo de interesse (Verly et al., 2018).

A Figura 4 traz um exemplo de um sinal PRBS, gerado com 125 amostras ($N = 125$), 2 bits ($n=2$) e amplitude entre 0 e 50.

Figura 4 – Exemplo de um sinal PRBS.



Fonte: Do autor.

2.3.1.1 Escolha do tempo de amostragem

O tempo de amostragem, T_s , de um sinal, corresponde ao período entre duas amostras deste sinal. A escolha de T_s é determinante para que o sinal seja bem amostrado, ou seja, que o sinal retenha características fundamentais do sinal original. Na prática, se o tempo de amostragem for muito curto, ou muito longo, o sinal não terá sua dinâmica excitada da melhor forma (Aguirre, 2015).

Existe um método para a determinação do período de amostragem que se baseia em análise de correlação dos sinais de saída. Esse método utiliza as funções de covariância linear (2.2) e não linear (2.3). O primeiro passo é superamostrar o sinal, ou seja, amostrar o sinal com um tempo de amostragem muito pequeno. A partir disso, determina-se uma taxa de decimação $\Delta \in N$ que será utilizada para decimar o sinal original, gerando assim

um sinal com tempo de amostragem maior. Dado um sinal $y(k)$ superamostrado, tem-se as funções:

$$r_y^*(\tau) = E[(y^*(k) - \bar{y}^*(k))(y^*(k - \tau) - \bar{y}^*(k))], \quad (2.2)$$

$$r_{y^{*2}}(\tau) = E[(y^{*2}(k) - \bar{y}^{*2}(k))(y^{*2}(k - \tau) - \bar{y}^{*2}(k))]. \quad (2.3)$$

em que $\bar{y}^*(k)$ e $\bar{y}^{*2}(k)$ representam os valores médios, e o apóstrofe (') a média extraída dos sinais. $E[\cdot]$ indica a esperança matemática.

A partir dessas funções, são determinados os primeiros mínimos τ_{y^*} e $\tau_{y^{*2}}$, em relação às funções (2.2) e (2.3), que servirão para determinar o valor de trabalho τ_m de acordo com a equação (2.4).

$$\tau_m = \min[\tau_{y^*}, \tau_{y^{*2}}], \quad (2.4)$$

em que τ_m é medido em números de atrasos com relação ao menor dos mínimos entre τ_{y^*} e $\tau_{y^{*2}}$. O valor de Δ é escolhido de forma que satisfaça a equação (2.5).

$$10\Delta \leq \tau_m \leq 20\Delta. \quad (2.5)$$

Os limites inferior e superior de (2.5) podem ser relaxados para 5 e 25, respectivamente. Portanto, caso o sinal amostrado de saída não esteja dentro da faixa estabelecida por (2.5), é necessário decimá-lo de forma a fazê-lo atender os limites estabelecidos.

2.4 Representação do sistema

A escolha da representação depende da finalidade do modelo e também das ferramentas disponíveis para a sua obtenção, além das informações disponíveis sobre o sistema (da Silveira Coelho, 2002). Dentre as representações não-lineares, destacam-se: modelos polinomiais, modelos baseados em redes neurais, os modelos de blocos interconectados e NARMAX, utilizados neste trabalho.

2.4.1 Modelo Polinomial NAR(MA)X

Os modelos NARX são discretos no tempo e tem como objetivo explicar o valor de saída $y(k)$ em relação aos valores prévios dos sinais de saída e de entrada. Para evitar a polarização de parâmetros, são incluídos termos de ruído ao modelo, e dessa forma, o modelo passa a ser NARMAX (Aguirre, 2015). Esse modelo é definido na Equação (1.1)

2.4.2 Modelos de blocos interconectados

Na maioria das vezes, os fenômenos não lineares são características inerentes a processos reais, podem ser não linearidades suaves, funções analíticas não lineares, ou ainda, não linearidades como saturação, zona morta e histerese (Ferreira, 2017). Por isso, tem crescido a busca por ferramentas de modelagem que quantifiquem tais fenômenos. Dessa forma, modelos de blocos interconectados surgem como alternativa à modelagem de sistemas não lineares em meio à metodologia clássica (da Silveira Coelho, 2002).

2.4.2.1 Modelo de Hammerstein

Na estrutura de Hammerstein, vista na Figura 2(a), um bloco representa a função estática não linear $f(\cdot)$, já o outro bloco, representa o modelo linear $G(q)$, que é a parcela dinâmica do sistema. O sinal de entrada $u(k)$ é aplicado ao bloco não linear, com isso, é obtido um sinal intermediário $v(k)$, que é o sinal $u(k)$ modificado pela não linearidade estática. Na sequência, o sinal passa pelo bloco com um modelo dinâmico linear, obtendo então o sinal de saída $y(k)$. Portanto, a modelagem do sistema é feita em duas etapas, sendo a primeira constituída pela estimação da curva estática e a segunda é a estimação do modelo dinâmico.

De acordo a da Silveira Coelho (2002), o modelo de blocos interconectados de Hammerstein apresenta as seguintes características:

- Possuir autovalores constantes com o ponto de operação (\bar{u}, \bar{y}) do sistema;
- Em estado estacionário, admite multiplicidade de entradas e apenas uma saída;
- A não linearidade estática atua apenas no sinal de entrada $u(k)$.

As equações que descrevem este modelo são:

$$v(k) = f(u(k)), \quad (2.6)$$

$$y(k) = G(q)v(k). \quad (2.7)$$

2.4.2.2 Modelo de Wiener

Neste modelo, ocorre a estimação de parâmetros descritos por dinâmicas lineares e saídas estáticas de blocos não lineares (Ferreira, 2017). No modelo de Wiener, apresentado na Figura 2(b), o sinal de entrada $u(k)$ passa primeiro no bloco do modelo dinâmico linear, gerando um sinal intermediário $v(k)$. Após isso, $v(k)$ passa pelo bloco estático não linear e é obtido então o sinal de saída $y(k)$. Assim como no modelo de Hammerstein, a modelagem de Wiener é feita em duas etapas, sendo a primeira a estimação da curva estática e a segunda é a estimação do modelo dinâmico.

Ainda de acordo a da Silveira Coelho (2002), o modelo de Wiener possui as seguintes características:

- Admitir apenas uma saída e uma entrada em estado estacionário;
- A não-linearidade atua nos sinais de entrada e saída;
- Possuir autovalores que podem variar com o ponto de operação (\bar{u}, \bar{y}) do sistema.

As equações que descrevem este modelo são:

$$v(k) = G(q)u(k), \quad (2.8)$$

$$y(k) = f(v(k)). \quad (2.9)$$

2.5 Determinação da Estrutura

Uma vez escolhida a forma de representação do sistema, o próximo passo consiste em determinar a sua estrutura. Essa é uma etapa muito importante na identificação de sistemas, pois a presença de termos desnecessários pode ocasionar instabilidade numérica e, com isso, comportamentos espúrios ao sistema. Nesse trabalho foram utilizados os critérios de informação de Akaike e o de Taxa de Redução de Erro, descritos nas Subseções 2.5.1 e 2.5.2, respectivamente.

2.5.1 Critério Informação de Akaike

O critério de informação de Akaike (AIC), descrito por (Akaike, 1974), permite estimar a redução da variância dos resíduos a cada adição de termos ao modelo. Portanto, esse critério permite a quantificação do quão longe os valores se encontram do valor esperado à medida que novos termos são adicionados. Ele é definido como:

$$AIC = N \ln[\text{var}(\xi(k))] + 2n_\theta, \quad (2.10)$$

sendo,

$$\xi(k) = y(k) - \hat{y}(k). \quad (2.11)$$

$\xi(k)$ é o resíduo entre o valor medido, $y(k)$, e o valor predito um passo à frente, $\hat{y}(k)$. N é o número de amostras, $\text{var}(\xi(k))$ é a variância do erro de modelagem e n_θ é o número de parâmetros do modelo.

2.5.2 Taxa de Redução de Erro

Na etapa de estimação de parâmetros na Identificação de Sistemas, assume-se que todos os regressores foram previamente determinados. A Taxa de Redução de Erro (ERR), dada por (2.12), é um critério utilizado na determinação dos regressores de um modelo (Aguirre, 2015).

$$\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N y(k)^2 = \sum_{k=1}^{n_\theta} \hat{g}_i^2 \langle \mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i \rangle + \langle \xi, \xi \rangle, \quad (2.12)$$

em que, \mathbf{w}_i são os regressores e ξ os resíduos. Pela equação (2.12), é possível interpretar que a *ERR* atribui a cada termo candidato um valor correspondente à contribuição deste na explicação do valor médio dos dados de saída (da Silveira Coelho, 2002).

Esse critério permite quantificar a importância de cada regressor individualmente, de forma que para escolher os regressores de um modelo, basta escolher os regressores com maior ERR.

2.6 Estimação dos parâmetros

Nessa seção será descrita a metodologia utilizada para estimar os parâmetros dos modelos. Neste trabalho serão utilizados o Estimador de Mínimos Quadrados e o Estimador de Mínimos Quadrados Estendidos, de forma a diminuir a diferença entre a predição e a saída estimada pelos modelos.

2.6.1 Mínimos Quadrados e Mínimos Quadrados Estendidos (MQE)

O método de *Mínimos Quadrados* tem origem nos trabalhos de *Gauss* e é um dos mais utilizados nas áreas da ciência e da tecnologia para estimar parâmetros de um modelo dinâmico. Esse método pode ser abordado em sistemas com solução única ou sistemas sobredeterminados (Aguirre, 2015). Seu principal objetivo é a obtenção de parâmetros de forma a minimizar a diferença entre o valor medido, $y(k)$, e o valor estimado, $\hat{y}(k)$. Com isso, podemos representar um modelo dinâmico como:

$$y(k) = \mathbf{x}_i^T(k-1)\hat{\theta} + \xi(k), \quad (2.13)$$

em que, $\hat{\theta}$, é o vetor de parâmetros. Ao tentar explicar o valor observado y a partir do vetor de regressores \mathbf{X} medido, e de $\hat{\theta}$ que é o vetor de parâmetros, é cometido o erro ξ . A equação (2.13) pode ser representada na forma matricial:

$$\mathbf{y} = \mathbf{X}\hat{\theta} + \boldsymbol{\xi}, \quad (2.14)$$

É interessante perceber que ξ deve ser minimizado, e dessa forma, a saída desse modelo será mais próxima possível da saída real. Para isso, é definida a função de custo (2.15):

$$J_{MQ}(\hat{\boldsymbol{\theta}}, Z^N) = \sum_{i=1}^N \xi(i)^2 = \boldsymbol{\xi}^T \boldsymbol{\xi} = \|\boldsymbol{\xi}\|^2. \quad (2.15)$$

A função (2.15) é utilizada para quantificar o quanto $\mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}$ consegue se ajustar ao vetor de dados \mathbf{y} . Sendo $\xi = \mathbf{y} - \mathbf{X}\hat{\boldsymbol{\theta}}$, pode-se substituir esse valor em (2.14) e realizar o cálculo do gradiente da função de custo a fim de minimizá-la. A solução é obtida pelo método dos mínimos quadrados (Aguirre, 2015).

$$\hat{\boldsymbol{\theta}} = [X^T X]^{-1} X^T \mathbf{y}, \quad (2.16)$$

$$= \mathbf{X}^\dagger \mathbf{y}. \quad (2.17)$$

Em que \mathbf{X}^\dagger é a matriz pseudoinversa de \mathbf{X} .

A aplicação dos Mínimos Quadrados Estendidos se faz necessária quando há polarização do sinal. Essa polarização é gerada como consequência da correlação existente no vetor de erros e da presença de regressores da saída. Para solucionar esse problema, sugere-se inserir a parte correlacionada do vetor de erro na matriz de regressores, Ψ , fazendo uma extensão da mesma, garantindo que a parcela correlacionada com os regressores fique de fora da matriz. A matriz de regressores estendida é definida como Ψ^* e o novo vetor de parâmetros estendidos é representado por $\boldsymbol{\theta}^*$. Uma consequência direta disso é que o resultado em $\boldsymbol{\theta}^*$ não será linear. (Aguirre, 2015).

2.7 Validação do Modelo

Par investigar quais modelos são os mais apropriados para um estudo, se faz necessário quantificar a qualidade dos ajustes destes modelos aos dados experimentais do sistema. As ferramentas de validação de modelos se dividem em critérios estatísticos, quantitativos e qualitativos. Nesta seção são descritas as ferramentas de validação utilizadas neste trabalho, sendo, o índice quantitativo RMSE, a validação estatística da análise de resíduos, e a análise qualitativa com a técnica de simulação livre.

2.7.1 Índice RMSE

Esse índice é útil na quantificação da qualidade das predições. São utilizados os resíduos do modelo, ou outras variáveis, como média e variância dos resíduos, desde que possuam as mesmas propriedades (Aguirre, 2015).

$$RMSE = \frac{\sqrt{\sum_{k=1}^N (y(k) - \hat{y}(k))^2}}{\sqrt{\sum_{k=1}^N (y(k) - \bar{y})^2}}, \quad (2.18)$$

em que \bar{y} é o valor médio do sinal medido $y(k)$, e \hat{y} é o valor estimado.

2.7.2 Simulação Livre

A simulação livre é uma das técnicas mais comuns de validação, pois é uma metodologia simples. Nela, há um comparativo da simulação do modelo obtido com os dados medidos, em que deseja-se saber se o modelo reproduz ao longo do tempo os dados observados.

Apesar de ser uma técnica simples, alguns cuidados devem ser tomados, como por exemplo, não usar os dados utilizados para obter o modelo na validação. Esse cuidado se dá porque dado um modelo obtido a partir de um determinado conjunto de dados, deseja-se saber se o modelo consegue explicar um outro conjunto de dados observados do mesmo sistema (Aguirre, 2015).

2.7.3 Função de Autocorrelação (FAC) e Análise de Resíduos

A Função de Autocorrelação (FAC) é utilizada para calcular a resposta ao impulso, $h(t)$, do sistema, e mede a dependência temporal entre dois sinais. Ao utilizar sinais PRBS na identificação de sistemas, a sua FAC pode ser analisada a partir de intervalos de confiança, de forma que ao se manter dentro desse intervalo, o sinal é garantido como aleatório (Aguirre, 2015).

A FAC também é utilizada para realizar a análise de resíduos de um sistema. Essa análise verifica se os resíduos do modelo são aleatórios ou não, informando se o procedimento de estimação de parâmetros foi estatisticamente satisfatório. É sabido que o modelo encontrado deve explicar o máximo de dados possíveis, dessa forma, os resíduos não conterão informações úteis que explicam o modelo, e portanto, serão ruídos brancos. Em contrapartida, quando os resíduos não forem brancos, ele conterá informações explicáveis acerca dos dados, e portanto, o modelo não terá explicado tudo que era possível (Aguirre, 2015).

É aceitável que em sistemas não lineares, um modelo linear consiga explicar toda a informação linear dos dados. Porém, é esperado a presença de correlações não lineares no vetor de resíduos. Além disso, ressalta-se que nos casos em que os resíduos não são totalmente brancos, os modelos podem ter uma boa representação do sistema estudado. Essa análise é importante, pois indica se o modelo estimado tem a capacidade de explicar a parte que pode ser explicada nos dados de identificação (Aguirre, 2015).

3 Descrição da planta do Reator Contínuo de Tanque Agitado

Esse capítulo descreve a planta do reator CSTR. Na primeira parte, Seção 3.1, são introduzidos conceitos que caracterizam e ressaltam a importância da utilização desse sistema. Neste capítulo também são apresentadas, na Seção 3.2, a descrição das equações químicas e as equações matemáticas que modelam este tipo reator. A Seção 4.1.1, por sua vez, traz os ensaios estáticos realizados, bem como os resultados obtidos.

3.1 Descrição do Funcionamento

Os equipamentos onde acontecem reações para a transformação de matérias-primas em produtos comercializáveis são chamados de reatores químicos. Eles possuem formas e tamanhos diferentes; os tipos mais comuns de reatores ideais são: batelada (BR), tubular (PFR) e tanque contínuo (CSTR)(Fogler, 2009). Neste capítulo serão abordados os principais tópicos referentes ao Reator CSTR .

O reator de tanque contínuo, CSTR, é comumente utilizado em processamento industrial. É usado principalmente para reações químicas em fase líquida. Ele é operado normalmente em estado estacionário, e nesse estado as condições não variam com o tempo. Além disso, é considerado perfeitamente misturado. Como consequência, a temperatura, concentração ou velocidade de reação dentro desse tipo de reator não dependem do tempo ou da posição. Desse modo, cada variável é a mesma em cada ponto dentro do reator (Bahita and Belarbi, 2016; Guan et al., 2016; Fogler, 2009).

Partindo da premissa de que a temperatura e a concentração são idênticas em qualquer ponto no interior do tanque onde acontece a reação química, elas são as mesmas na saída. Dessa forma, a temperatura e a concentração na corrente de saída do tanque são modeladas como sendo iguais àquelas no interior do reator (Fogler, 2009).

Embora esse tipo de reator não possua o maior rendimento quando comparado aos outros reatores contínuos, ele é usado na indústria quando é requerida uma maior agitação. Apesar da relativa simplicidade, o sistema CSTR é muito importante para a indústria química e também em processos biotecnológicos (Fogler, 2009).

3.2 Descrição do Sistema

Fogler (2009) descreve a equação geral de balanço molar da seguinte forma:

$$F_{j0} - F_j + \int^V r_j dV = \frac{dN_j}{dt}, \quad (3.1)$$

em que F_{j0} é a taxa que a espécie química de interesse, j , entra no sistema. F_j é a taxa de j que sai do sistema. O volume do reator é V , e r_j é a velocidade de formação da espécie j . N_j representa o número de mols da espécie j .

Ao aplicar a equação (3.1) em um reator CSTR em estado estacionário, temos que:

$$\frac{dN_j}{dt} = 0. \quad (3.2)$$

É possível perceber que não há variações especiais na velocidade de reação, confirmando ser um reator de mistura perfeita. Desse modo,

$$\int^V r_j dV = Vr_j. \quad (3.3)$$

Com isso, a equação adquire a forma conhecida como a *equação de projeto* para um CSTR

$$V = \frac{F_{j0} - F_j}{-r_j}. \quad (3.4)$$

Nota-se que esse tipo de reator é modelado de tal modo que as condições na corrente de saída sejam idênticas àsquelas no tanque. A vazão molar F_j é o produto da concentração da espécie j e a vazão volumétrica v , de modo que

$$F_j = C_j v. \quad (3.5)$$

Ao combinar as equações (3.4) e (3.5), tem-se a descrição do balanço para a espécie reagente A

$$V = \frac{v_0 C_{A0} - v C_A}{-r_A}, \quad (3.6)$$

em que r_A é a velocidade de desaparecimento de A .

Quando em escoamento, a vazão de alimentação F_{A0} e a vazão volumétrica v são utilizadas para determinar a concentração C_A

$$C_A = \frac{F_{A0}}{v}(1 - X), \quad (3.7)$$

em que X a conversão que se deseja alcançar.

Para encontrar as equações de modelagem deste reator, foi considerada uma reação em que um reagente gera um único produto, ou seja:



O CSTR é modelado como sendo um reator bem misturado, ou seja, não há variações espaciais no reator. Foram consideradas também o balanço de massa dos componentes

presentes na reação e o balanço de energia envolvendo o reator e a camisa de refrigeração. A partir dos trabalhos de (Aljamaan et al., 2015; Bahita and Belarbi, 2016; Guan et al., 2016; Ma et al., 2018; Simorgh et al., 2020), tem-se abaixo as equações diferenciais para as duas variáveis de estado, concentração e temperatura:

$$\dot{C}_A = \frac{F_i}{V}(C_{ai} - C_A) - k_0 C_A e^{\frac{-E}{RT}}, \quad (3.9)$$

sendo F_i a vazão e V o volume total do reator. k_0 é a taxa inicial da reação, C_{ai} é a concentração inicial do reagente A no reator e C_A é a concentração de saída da reação. A temperatura é dada por

$$\dot{T} = \frac{F_i}{V}(T_i - T) + \frac{-\Delta H}{\rho C_p} k_0 C_A e^{\frac{-E}{RT}} + \frac{\rho_c C_{pc}}{V \rho C_p} q_c [1 - \exp(-\frac{U_A S}{\rho_c C_{pc} q_c})](T_c - T), \quad (3.10)$$

sendo ρ a densidade do fluido, C_p o calor específico da solução, C_{pc} o calor específico do líquido refrigerante e T_i e T são, respectivamente, a temperatura de entrada e de saída do reator. ΔH é o calor da reação, k_0 é a taxa de reação inicial, E é a energia de ativação da reação, R é constante ideal dos gases. U_A é o coeficiente de transferência de calor, S é a área de transferência de calor e q_c e T_c são, respectivamente, a vazão e a temperatura de entrada do líquido refrigerante. (Aljamaan et al., 2015; Bahita and Belarbi, 2016; Ma et al., 2018; Simorgh et al., 2020).

A concentração de saída da solução, C_A , e a temperatura de saída do reator, T , são as duas variáveis de estado do sistema. A temperatura do líquido refrigerante, T_c , é a entrada de controle u . Os valores desses desses parâmetros são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros do reator CSTR.

Significao	Parâmetro	Valor
Vazão do líquido refrigerante	q_c	80 L/min
Vazão da solução	q	100 L/min
Volume do Reator	V	100 L
Concentração de entrada	C_{ai}	1 mol/L
-	E/R	10^4 K
Calor da Reação	ΔH	-2×10^5 Cal/mol
Temperatura de entrada	T_i	350 K
Taxa de reação inicial	k_0	$7,2 \times 10^{10} \text{ min}^{-1}$
Densidade do material	ρ	1000 g/L
Densidade do líquido refrigerante	ρ_c	1000 g/L
Calor específico da solução	C_p	1 Cal/(gK)
Calor específico do líquido refrigerante	C_{pc}	1 Cal/(gK)
Coefficiente de transferência térmica	U_{AS}	$7 \cdot 10^5$ Cal/(min·K)

Fonte: (Guan et al., 2016; Vojtesek and Dostal, 2008).

4 Procedimentos para a Identificação de Modelos do Sistema CSTR

Neste capítulo são descritas as etapas realizadas neste trabalho para identificar os possíveis modelos do reator CSTR.

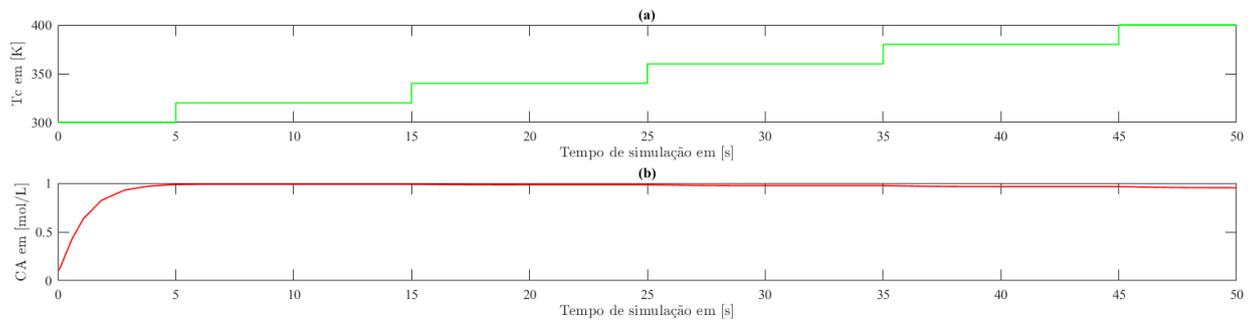
4.1 Experimentação do Sistema

4.1.1 Ensaios Estáticos

Nos trabalhos encontrados na literatura sobre esse sistema, foram utilizadas diferentes variáveis de entrada e de saída (Bahita and Belarbi, 2016; Ma et al., 2018; Aljamaan et al., 2015; Simorgh et al., 2020; Han et al., 2017). Em (Bahita and Belarbi, 2016) e (Han et al., 2017), utilizou-se a vazão do líquido de resfriamento da jaqueta, q_c , como entrada, e a temperatura, T e concentração, C_a , como saídas. Na planta desenvolvida no presente trabalho, optou-se por utilizar como variável de entrada do sistema, a temperatura de resfriamento da jaqueta do tanque, T_c , assim como utilizado em (Aljamaan et al., 2015), e a concentração, C_a , como variável de saída. Optou-se por seguir essa metodologia, pois segundo Aljamaan et al. (2015), a relação entre o fluxo de líquido de resfriamento e a concentração de saída do sistema é instável, e portanto, aconselha-se a utilização da temperatura de resfriamento da jaqueta como variável de entrada.

Para a obtenção da curva estática do sistema, informação auxiliar utilizada na *modelagem caixa cinza* deste trabalho, foram realizados ensaios estáticos na planta do CSTR. Estes ensaios consistiram na aplicação de degraus consecutivos, de amplitude crescente, com as temperaturas T_c iguais a 300K, 320K, 340K, 360K, 380K e 400K. O tempo de simulação foi de 50s. O primeiro degrau foi aplicado em 5s e os demais em intervalos de 10s. A Figura 5 representa os gráficos obtidos a partir do ensaio estático.

Figura 5 – Ensaio estático do sistema. A curva em (a) representa a entrada em degraus aplicada ao sistema, dada por amplitudes crescentes de 300K, 320K, 340K, 360K, 380K e 400K. Em (b) tem-se a curva da concentração, que representa o comportamento desta saída à entrada degrau aplicada.



Fonte: Do Autor.

A partir da Figura 5, a cada degrau aplicado na entrada u do sistema, registrou-se o valor da concentração em regime permanente. É possível perceber, a partir da Figura 5 que a concentração apresenta baixa variação em sua curva.

Como forma de determinar uma representação paramétrica para curva estática $f(\cdot)$, obteve-se o modelo polinomial a partir dos sinais estáticos de entrada u e saída y . Para isso, foram utilizadas as funções *polyfit* e *polyval* para encontrar e ajustar os coeficientes dos polinômios por meio do método dos Mínimos Quadrados.

A fim de encontrar as curvas de ajuste adequadas, variou-se a ordem dos polinômios da concentração em 1, 2 e 3, e foram estimadas suas funções e os respectivos índices $RMSE_e$, que é definido como sendo o índice RMSE estático. Os resultados são apresentados na Tabela 2, em que o índice \bar{u} representa termo estático..

Tabela 2 – Índice RMSE para diferentes ajustes estáticos da concentração.

Ordem do Sistema (n)	Funções Estimadas	$RMSE_e$
1	$f(\bar{u}) = -3,2350 \cdot 10^{-4}\bar{u} + 1,0913$	0,1967
2	$f(\bar{u}) = 1,3750 \cdot 10^{-6}\bar{u}^2 - 0,0013\bar{u} + 1,2684$	0,1702
3	$f(\bar{u}) = 1,0833 \cdot 10^{-7}\bar{u}^3 - 1,1563 \cdot 10^{-4}\bar{u}^2 + 0,0407\bar{u} - 3,7330$	0,0642

Fonte: Do Autor.

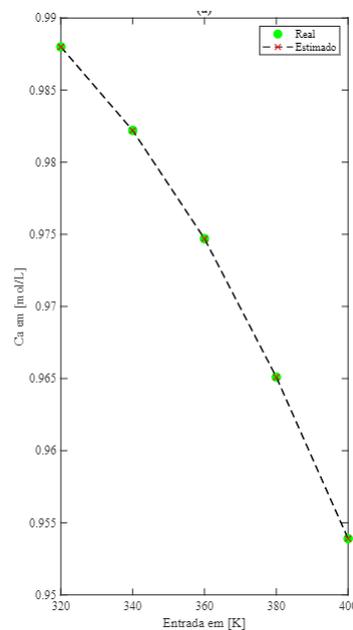
A partir da Tabela 2, percebeu-se que as funções encontradas possuem comportamento praticamente linear e índices $RMSE_e$ próximos a zero. A curva da concentração

que possui melhor índice tem ordem igual a 3, dessa forma, sugere-se utilizar o ajuste de terceira ordem para a variável da concentração, definida em (4.1).

$$f(\bar{u}) = 1,0833 \cdot 10^{-7} \bar{u}^3 - 1,1563 \cdot 10^{-4} \bar{u}^2 + 0,0407 \bar{u} - 3,7330. \quad (4.1)$$

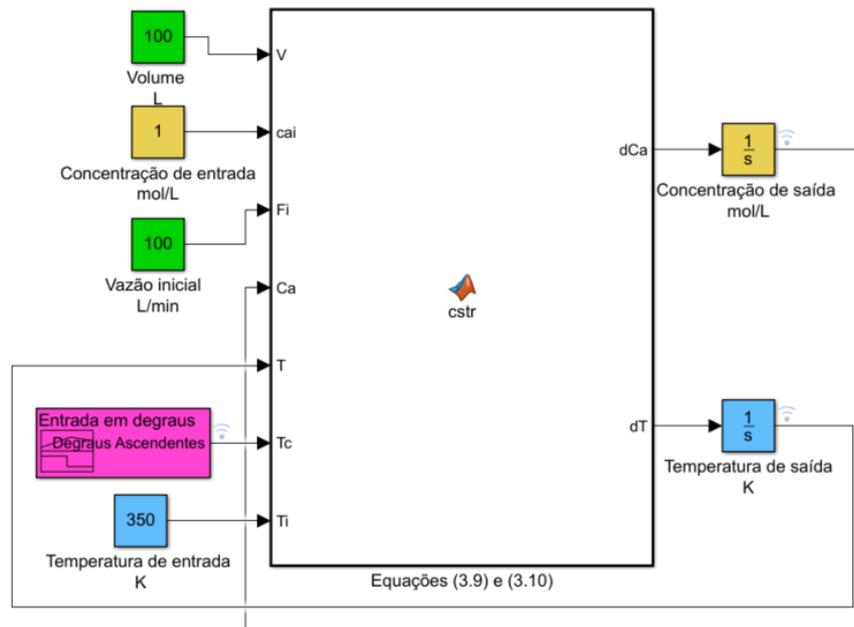
A Figura 6 representa as curvas estáticas do sistema verdadeiro e dos polinômios ajustados da concentração. É possível perceber que a curva de ajuste encontrada está próxima da curva verdadeira do sistema.

Figura 6 – Curvas Estáticas Reais e Ajustadas do Sistema para a concentração. Os círculos em verde representam os valores que foram coletados em estado estacionário das curvas reais do sistema. Os marcadores "x" em vermelho, interligados pelas linhas tracejadas pretas, representam os valores ajustados pelo método dos mínimos quadrados.



Fonte: Do Autor.

Os ensaios, previamente descritos, do reator CSTR, foram desenvolvidos no ambiente *Simulink*, software auxiliar do *Matlab*. A Figura 7 representa essa simulação, em que no bloco *MATLAB Function* estão contidas as equações (3.9) e (3.10). Os parâmetros utilizados nas equações foram retirados da Tabela 1. A entrada T_c recebe os degraus ascendentes. Os valores das saídas de concentração e temperatura são coletados após passarem pelo bloco integrador. Esse bloco é necessário pois a simulação está trabalhando com derivadas em tempo contínuo. Portanto, é necessário integrar o resultado para captar os valores dessas variáveis em função do tempo.

Figura 7 – Simulação, no *Simulink*, do código implementado.

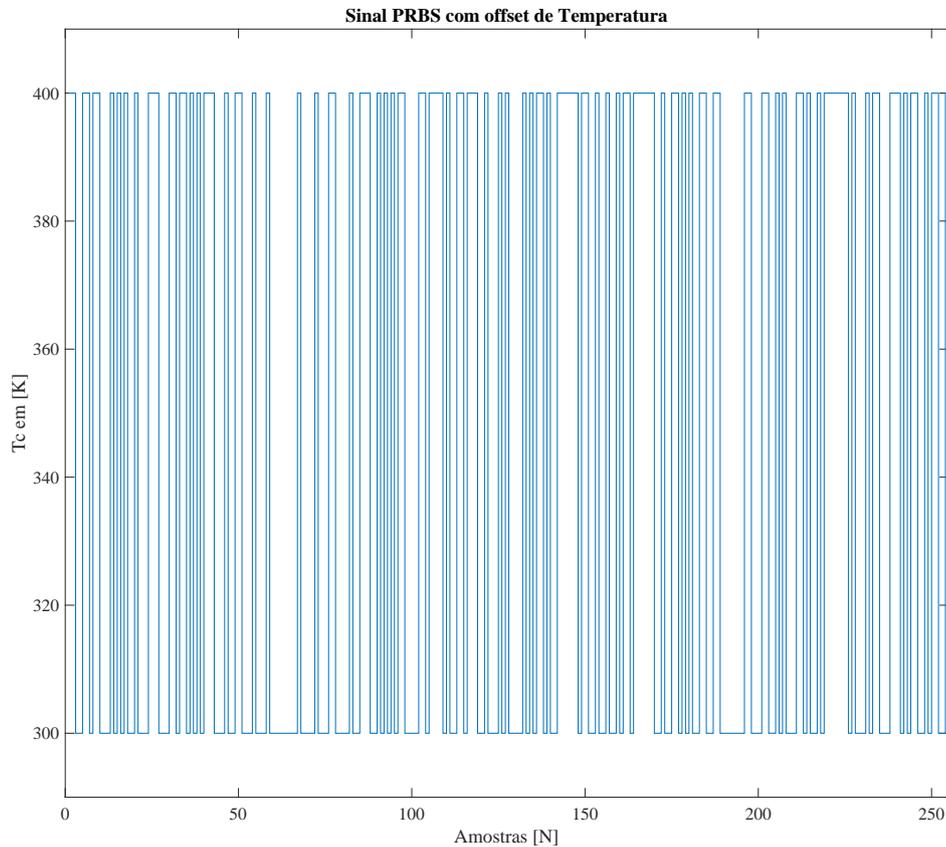
Fonte: Do Autor.

4.1.2 Ensaio Dinâmico

No ensaio dinâmico, foi projetado um sinal PRBS baseado nos ensaios apresentados na Figura 5. Tal sinal é utilizado na variável de entrada, T_c . A partir desses dados, foram calculadas as constantes de tempo do sistema, e o maior valor de τ_{max} encontrado foi de 0,8. Esse valor foi aplicado na Equação (2.1) a fim de calcular o intervalo entre bits do sistema, que resultou em 1 ($T_b=1$). Foi escolhido o número de bits, n , igual a 9, e então determinado o valor de $N = 255$ amostras.

Posteriormente, foram definidas as amplitudes máxima de 50K e mínima de -50K. Ao sinal PRBS foi adicionado um sinal constante de 350K. O resultado é representado na Figura 8:

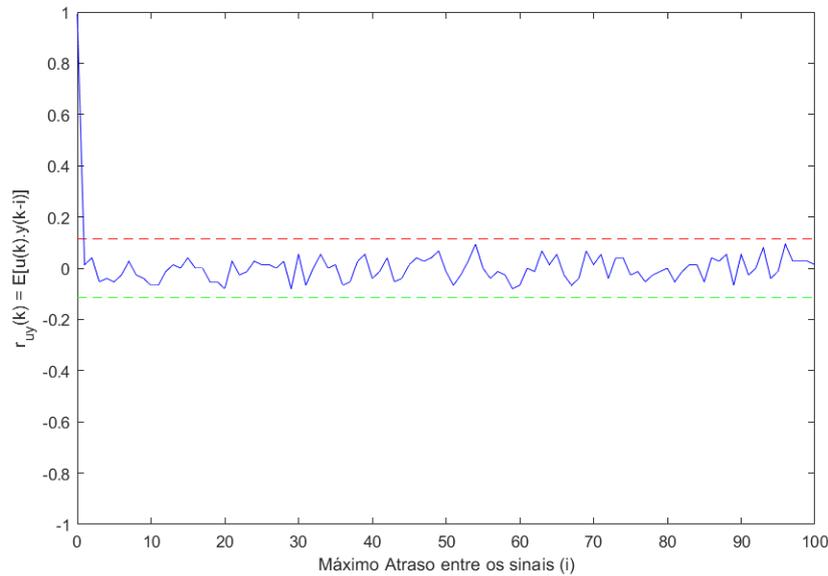
Figura 8 – Sinal PRBS de entrada com *offset* de temperatura. Para o projeto deste sinal PRBS, foram utilizados 9 bits, 255 amostras e um intervalo entre bits igual a 1; amplitudes mínima e máxima de, respectivamente, -50K e 50K. Por fim, foi somado um *offset* de 350K.



Fonte: Do Autor.

A fim de validar o sinal de entrada, foi utilizada a FAC, conforme descrito na Subseção 2.7.3, com máximo atraso igual a 100. Na Figura 9, é possível perceber que o sinal de autocorrelação converge rapidamente para próximo do zero, e ao se manter dentro do intervalo de confiança, entre $-0,2$ e $0,2$, garante-se em 95 % que a função tem comportamento impulsivo. Com isso, é garantido que o sinal de entrada utilizado se comporta como um ruído branco, sendo suficiente para excitar toda a dinâmica do sistema e modelando todas as informações do mesmo.

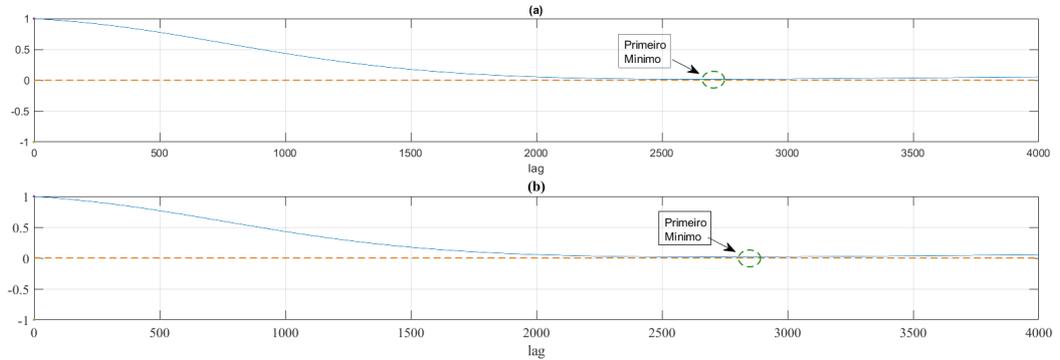
Figura 9 – FAC do sinal de entrada com máximo atraso igual a 100. A autocorrelação do sinal PRBS mostra que o sinal projetado consegue excitar toda a dinâmica do sistema.



Fonte: Do Autor.

Para verificar se o sinal utilizado estava bem amostrado, foi realizado o teste de covariância linear e não linear, conforme descrito na Subseção 2.3.1.1. O teste foi realizado no sinal de saída da concentração e inicialmente foi considerado um atraso máximo de 4000. Ao analisar o comportamento do sistema, (Figura 10), foram determinados os primeiros mínimos $\tau_{y^*} = 2600$ para a autocovariância linear e $\tau_{y^{*2}} = 2700$ para a autocovariância não linear, sendo o menor destes valores o valor de trabalho τ_m . Percebeu-se então que o sinal estava superamostrado, o que quer dizer que este tipo de sinal está na mais alta frequência possível e contém dados espúrios que não possuem informações do sistema.

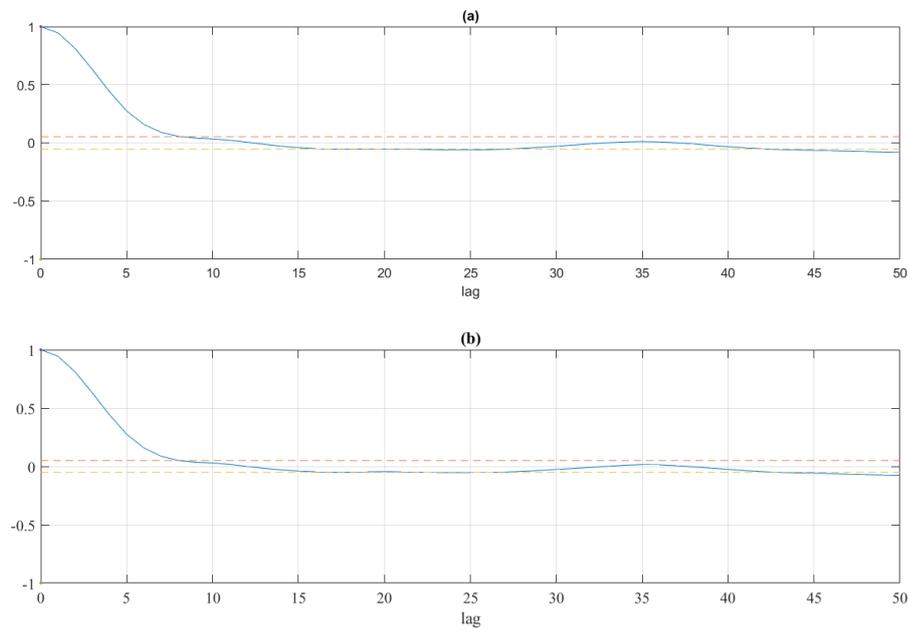
Figura 10 – Teste de Covariância do sinal de Concentração. Em (a) tem-se o teste de covariância linear, com o primeiro mínimo em 2600 amostras, em (b) está o teste de covariância não linear, com o primeiro mínimo em 2700.



Fonte: Do Autor.

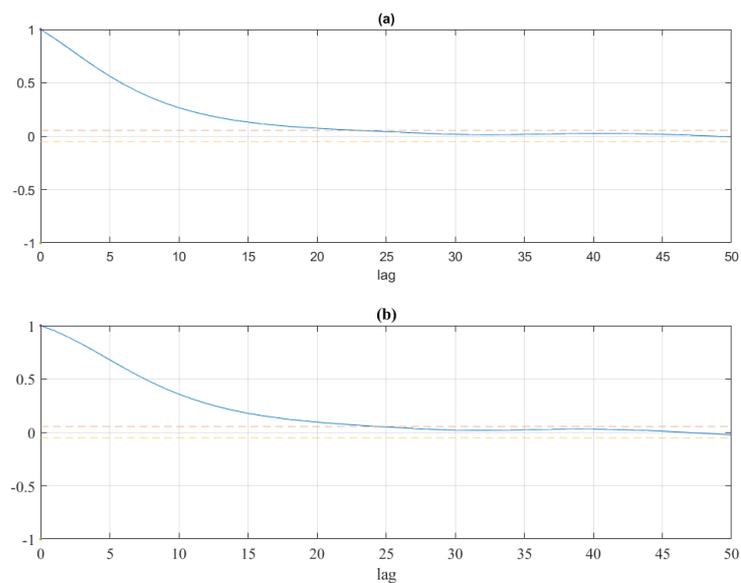
Como o sinal não estava dentro da faixa estabelecida por (2.5), foi necessário decimá-lo para que este atendesse os limites necessários. Para escolher a taxa Δ de decimação, foi inserido o valor de $\tau_m = 2600$ na Equação (2.5) e calculados os limites máximo e mínimo permitidos. Os limites encontrados foram de $260 \leq \tau_m \leq 130$, e foi escolhido o valor de $\Delta = 200$. Portanto, foram realizadas as decimações dos dois sinais do sistema a um máximo de atraso igual a 50, (Figuras 11 e 12), sendo o sinal de entrada T_c , e a concentração de saída, C_a .

Figura 11 – Teste de Covariância do sinal de entrada decimado. Em (a) tem-se o teste de covariância linear, e em (b) o teste de covariância não linear.



Fonte: Do Autor.

Figura 12 – Teste de Covariância do sinal de saída decimado. Em (a) tem-se o teste de covariância linear, em (b) está o teste de covariância não linear.

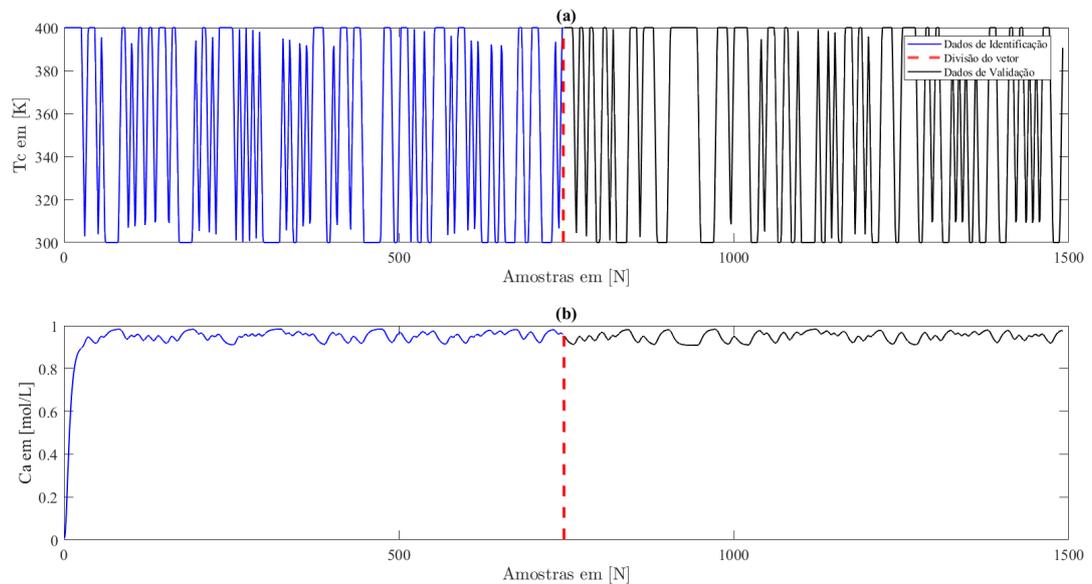


Fonte: Do Autor.

Pode-se perceber que os sinais decimados se encontram dentro do intervalo de confiança indicados pelas linhas tracejadas em vermelho, e portanto são adequados para

uso. Trabalha-se então com os sinais amostrados adequadamente e de aproximadamente 1500 amostras para a detecção da estrutura NARMAX. O sinal PRBS foi inserido como entrada T_c do sistema simulado. É possível perceber, por meio da Figura 13, que com a entrada utilizada, a curva de saída da concentração se comporta como o esperado, pois além de ter apenas a sua parte dinâmica excitada, ela possui comportamento aperiódico. Para a execução dos próximos passos da identificação do reator CSTR, os dados de entrada e saída do ensaio dinâmico foram divididos em duas partes, de forma que a primeira metade dos dados fosse destinada à identificação e a outra parte utilizada na validação, como pode ser observado na Figura 13.

Figura 13 – Curvas de entrada e saída do sistema. Em (a) Curva da temperatura T_c de entrada do sistema e (b) curva de concentração C_a de saída do sistema. A barra vertical tracejada, em vermelho, separa os dados de identificação (à esquerda) dos dados de validação (à direita).



Fonte: Do Autor.

Para determinar as estruturas de Wiener e Hammerstein, foram realizadas novas decimações dos sinais de entrada e saída. Isso se fez necessário porque a taxa de decimação utilizada no modelo clássico não conseguiu excitar o sistema adequadamente. Portanto, após a realização de testes para encontrar a taxa de decimação mais adequada, foram encontradas as taxa de $\Delta = 600$ e de $\Delta = 70$ para a identificação dos modelos de Wiener e de Hammerstein, respectivamente. Assim como realizado na metodologia clássica, os vetores contendo os dados de entrada e saída utilizados na metodologia de blocos interconectados foram divididos em duas partes, sendo a primeira metade dos dados destinada à identificação e a outra parte utilizada na validação.

4.2 Escolha da Representação Matemática e Determinação da Estrutura

A etapa de escolha da representação matemática depende das características do processo, como a correlação existente entre os dados de entrada e saída e da finalidade de aplicação do modelo. A partir desses fatores, foram escolhidas três representações matemáticas para este sistema: a representação polinomial não linear NARX e as de blocos interconectados de Hammerstein e de Wiener.

Após a escolha da forma de representar o modelo, é necessário definir qual estrutura será utilizada. No modelo NARX, precisa-se definir o grau de não linearidade l do sistema e quais termos de processo $u(k - n_u)$ e $y(k - n_y)$ serão incluídos. Em sistemas não lineares, o número de termos candidatos cresce rapidamente com o aumento do grau de não linearidade e dos máximos atrasos do sistema n_u e n_y (da Silveira Coelho, 2002).

Já nos modelos de blocos interconectados, de Hammerstein e Wiener, para a obtenção do bloco dinâmico linear, também são determinados os máximos atrasos do sistema. Porém, por se tratar de um bloco linear, determina-se a linearidade igual a 1. Portanto, a fim de obter um modelo que não seja subparametrizado ou sobreparametrizado, é importante utilizar critérios que auxiliem nessa escolha.

Para isso, foi utilizado o critério de informação de Akaike (AIC) em conjunto com a Taxa de Redução de Erro (ERR), descritos nas Subseções 2.5.1 e 2.5.2. A partir dessas duas metodologias, foi possível saber a quantidade de termos candidatos que compõem o modelo e ranqueá-los em ordem de importância.

A Tabela 3 apresenta os resultados da representação NAR(MA)X - o termo (MA) foi inserido no modelo, devido à utilização de regressores de ruído n_e - para uma iteração e diferentes atrasos do sistema, utilizando o ajuste estático apresentado na Equação (4.1). O índice $RMSE$ calculado é dinâmico, obtido pelo MQE com a excitação do sistema a partir do sinal PRBS descrito na Figura 13.

Tabela 3 – Estruturas encontradas para o modelo NAR(MA)X. Para os dois ensaios, foram utilizados regressores de ruído $n_e = 5$ durante o processo de estimação pelo MQE.

n_u e n_y	l	$RMSE$
2 e 2	3	0,0330
2 e 2	2	0,0177

Fonte: Do autor.

Para determinar as estruturas dos modelos de blocos interconectados de Hammerstein e de Wiener, foram seguidos os mesmos passos e os mesmos critérios utilizados para

a estrutura clássica NARMAX. A Tabela 4 apresenta os resultados encontrados com a utilização do ajuste estático, (Tabela 2), para uma iteração.

Tabela 4 – Estruturas encontradas para os modelos de blocos interconectados. Para os dois ensaios, foram utilizados regressores de ruído $n_e = 3$ durante o processo de estimação pelo MQE.

<i>Estrutura</i>	n_u e n_y	<i>RMSE</i>
Hammerstein	3 e 3	0,0892
Wiener	3 e 3	0,1351

Fonte: Do autor.

Como realizado anteriormente, foram utilizados os critérios AIC e ERR para definir a melhor estrutura de cada modelo. A Tabela 5 apresenta os resultados provenientes da aplicação desses critérios aos modelos.

Tabela 5 – Sequência de comandos para seleção de estrutura. Para cada modelo utilizado, n_{cand} são os termos candidatos, $AIC(n)$ é a quantidade de termos encontrados pela técnica AIC e a coluna de Termos (ERR) traz os termos do modelo com maior grau de importância.

Modelo	n_{cand}	$AIC(n)$	Termos (ERR)
NARMAX	24	11	$y(k-1), y(k-2), u(k-1), u(k-2), u(k-2)^2, u(k-2)u(k-1), u(k-1)^2, u(k-2)y(k-1), u(k-1)y(k-1), u(k-1)y(k-2), u(k-2)y(k-2).$
Hammerstein	9	6	$y(k-1), y(k-2), y(k-3), u(k-1), u(k-3), u(k-2).$
Wiener	9	6	$y(k-1), u(k-2), u(k-1), u(k-3), y(k-2), y(k-3).$

Fonte: Do autor.

Pelas Tabelas 3 e 5, a estrutura NARMAX que apresenta o menor índice $RMSE$ possui n_u, n_y e l iguais a 2. A estrutura dinâmica possível pode ser representada por 4.2.

$$\begin{aligned} &\theta_1 y(k-1) + \theta_2 y(k-2) + \theta_3 u(k-1) + \theta_4 u(k-2) + \theta_5 u(k-2)^2 + \theta_6 u(k-2) * u(k-1) \\ &+ \theta_7 u(k-1)^2 + \theta_8 u(k-2) * y(k-1) + \theta_9 u(k-1) * y(k-1) + \theta_{10} u(k-1) * y(k-2) \\ &+ \theta_{11} u(k-2) * y(k-2) . \end{aligned} \tag{4.2}$$

A partir das Tabelas 4 e 5, tem-se que as estruturas lineares dinâmicas possíveis para as representações de Hammerstein e de Winener estão, respectivamente, em (4.3) e (4.4).

$$\theta_1 y(k-1) + \theta_2 y(k-2) + \theta_3 y(k-3) + \theta_4 u(k-1) + \theta_5 u(k-3) + \theta_6 u(k-2), \quad (4.3)$$

$$\theta_1 y(k-1) + \theta_2 u(k-2) + \theta_3 u(k-1) + \theta_4 u(k-3) + \theta_5 y(k-2) + \theta_6 y(k-3). \quad (4.4)$$

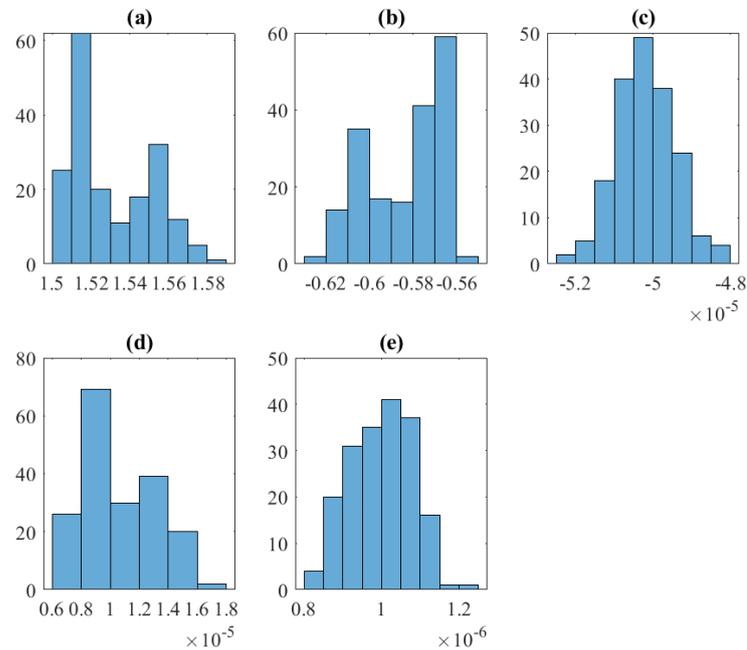
Ao analisar as estruturas encontradas, pode-se reforçar a importância da utilização de critérios AIC e ERR. A partir deles, as estruturas se tornam mais robustas e eficientes.

4.3 Estimação de Parâmetros

Após determinar a estrutura do modelo, a próxima etapa consiste em estimar os parâmetros do mesmo. Para a estimação dos parâmetros do modelo não linear NAR(MA)X, utilizou-se o método de Mínimos Quadrados Estendidos. Com um intuito de analisar o desempenho dos métodos de estimação utilizados, adicionou-se ruído branco ao modelo.

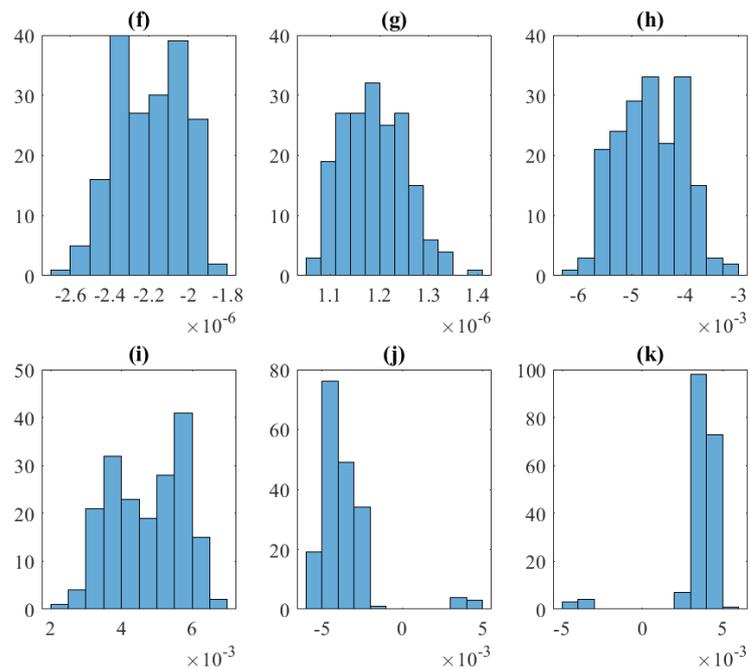
A estrutura 4.2 possui 11 parâmetros, e para determiná-los, foram executadas 200 iterações aleatoriamente acompanhadas de 200 realizações de ruídos aditivo ao sinal de saída. Destas, foram retiradas 14 iterações da amostragem por apresentarem modelos incompatíveis com o padrão. A partir disso, foi gerado o vetor médio da saída do sistema, e o índice *RMSE* que comparou esse vetor com a saída validada do sistema, foi de 0,0352. Para representar graficamente a distribuição da frequência dos parâmetros estimados, foi desenvolvido um histograma para cada parâmetro, como pode ser visto nas Figuras 14 e 15.

Figura 14 – Histogramas dos 5 primeiros parâmetros do modelo NARMAX. Em que as médias de $a = \theta_1$, $b = \theta_2$, $c = \theta_3$, $d = \theta_4$ e $e = \theta_5$.



Fonte: Do Autor.

Figura 15 – Histogramas dos 6 últimos parâmetros do modelo NARMAX. Em que as médias de $f = \theta_6$, $g = \theta_7$, $h = \theta_8$, $i = \theta_9$, $j = \theta_{10}$ e $k = \theta_{11}$.

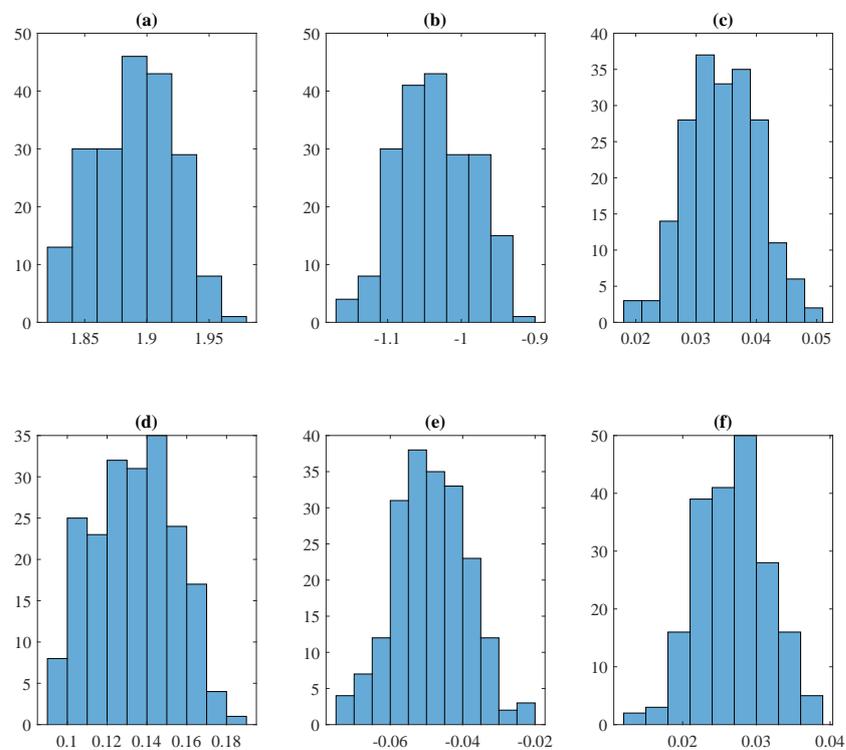


Fonte: Do Autor.

É possível perceber que dos 11 parâmetros estimados, apenas dois, θ_{10} e θ_{11} , apresentam uma parte da frequência distoante em relação à outra. Porém, isso não interferiu no resultado do modelo encontrado em (4.2).

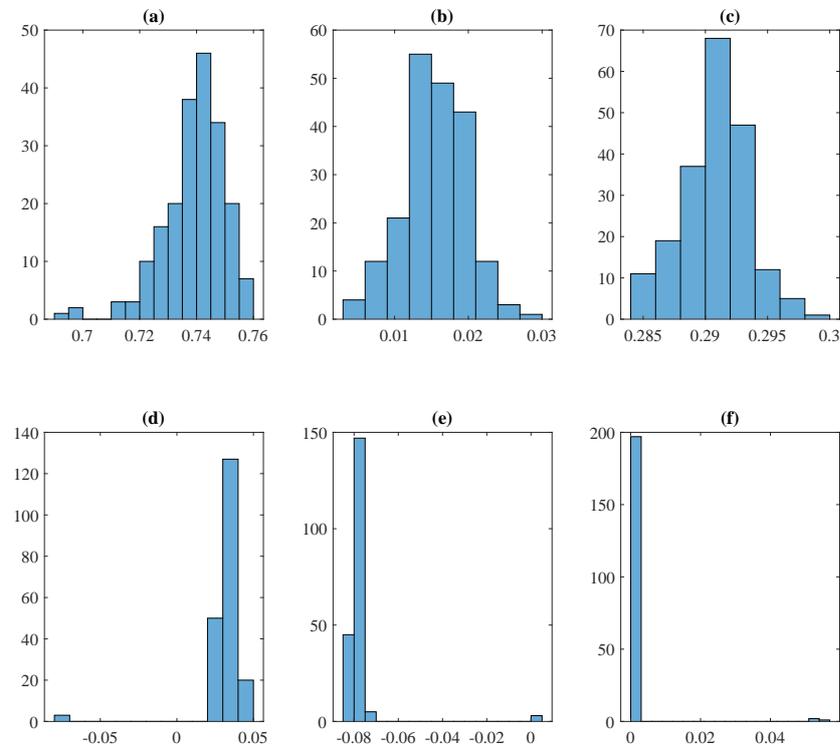
Para determinar os 6 parâmetros da parte dinâmica das estruturas de blocos interconectados, também foram executadas 200 iterações aleatórias em cada representação. O vetor médio da saída dinâmica do sistema foi criado, e o índice $RMSE$ para a parte dinâmica do modelo de Hammerstein foi de 0,1291 e de Wiener, 0,1293. Nas Figuras 16 e 17, encontram-se respectivamente, os histogramas dos parâmetros estimados para a parte dinâmica dos modelos de Hammerstein e Wiener.

Figura 16 – Histogramas dos parâmetros da parte dinâmica do modelo de Hammerstein. Em que as médias de $a = \theta_1$, $b = \theta_2$, $c = \theta_3$, $d = \theta_4$, $e = \theta_5$ e $f = \theta_6$



Fonte: Do Autor.

Figura 17 – Histogramas dos parâmetros da parte dinâmica do modelo de Wiener. Em que as médias de $a = \theta_1$, $b = \theta_2$, $c = \theta_3$, $d = \theta_4$, $e = \theta_5$ e $f = \theta_6$



Fonte: Do Autor.

Percebe-se, a partir dos histogramas da Figura 17, que os últimos 3 parâmetros do modelo de Wiener, $d = \theta_4$, $e = \theta_5$ e $f = \theta_6$, possuem uma parte da frequência distante das demais. Porém, como esses valores apareceram poucas vezes fora da maior faixa de distribuição, eles não interferiram na qualidade do modelo encontrado em (4.3) e (4.4).

Os parâmetros estimados para as estruturas NARMAX, de Hammerstein e Wiener, são apresentados na Tabela 6.

Tabela 6 – Parâmetros estimados para as três representações matemáticas utilizadas.

Parâmetros	NARMAX	Hammerstein	Wiener
θ_1	1,5463	1,8862	0,7393
θ_2	-0,5973	-1,0293	0,0155
θ_3	$-4,9462 \cdot 10^{-5}$	0,0346	0,2908
θ_4	$1,1447 \cdot 10^{-5}$	0,1308	0,0319
θ_5	$1,0959 \cdot 10^{-6}$	-0,0490	-0,0775
θ_6	$-2,4245 \cdot 10^{-6}$	0,0268	0,0026
θ_7	$1,2602 \cdot 10^{-6}$	-	-
θ_8	-0,0037	-	-
θ_9	0,0032	-	-
θ_{10}	-0,0026	-	-
θ_{11}	0,0030	-	-

Fonte: Do autor.

Com as representações matemáticas escolhidas e de posse dos parâmetros estimados, (Tabela 6), é possível concluir a etapa de estimação de parâmetros. Os modelos dinâmicos estão em (4.5), (4.6) e (4.7), sendo NARMAX, Hammerstein e Wiener, respectivamente.

$$\begin{aligned}
y(k) = & 1,5463y(k-1) - 0,5973y(k-2) - 4,9462 \cdot 10^{-5}u(k-1) + 1,1447 \cdot 10^{-5}u(k-2) \\
& + 1,0959 \cdot 10^{-6}u(k-2)^2 - 2,4245 \cdot 10^{-6}u(k-2)u(k-1) + 1,2602 \cdot 10^{-6}u(k-1)^2 \\
& + 0,0037u(k-2)y(k-1) + 0,0032u(k-1)y(k-1) - 0,0026u(k-1)y(k-2) \\
& + 0,0030u(k-2)y(k-2), \quad (4.5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y(k) = & 1,8905y(k-1) - 1,0365y(k-2) + 0,0344u(k-3) + 0,1337y(k-3) \\
& - 0,0487u(k-2) + 0,0267u(k-1), \quad (4.6)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y(k) = & 0,7393y(k-1) + 0,0155u(k-2) + 0,2908u(k-1) + 0,0319u(k-3) \\
& - 0,0775y(k-2) + 0,0026y(k-3). \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Evidentemente, por descrever a dinâmica não linear do sistema, o modelo NARMAX (4.5) possui maior complexidade matemática do que a parte dinâmica linear dos modelos de blocos interconectados. É sabido que os blocos interconectados são compostos pelo conjunto estático e dinâmico, e a não linearidade desses modelos se encontra na parte estática, como pode ser visto na curva estática da Figura 6 e descrito na Equação (4.1).

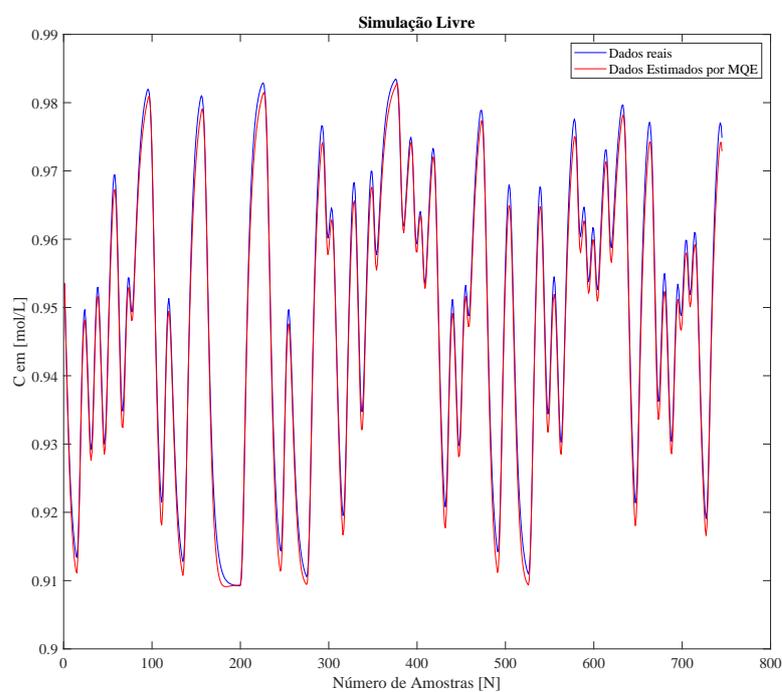
4.4 Validação do Modelo

Para realizar a validação qualitativa dos modelos dinâmicos, utilizou-se a metodologia de simulação livre, descrita na Subseção 2.7.2.

4.5 Simulação Livre

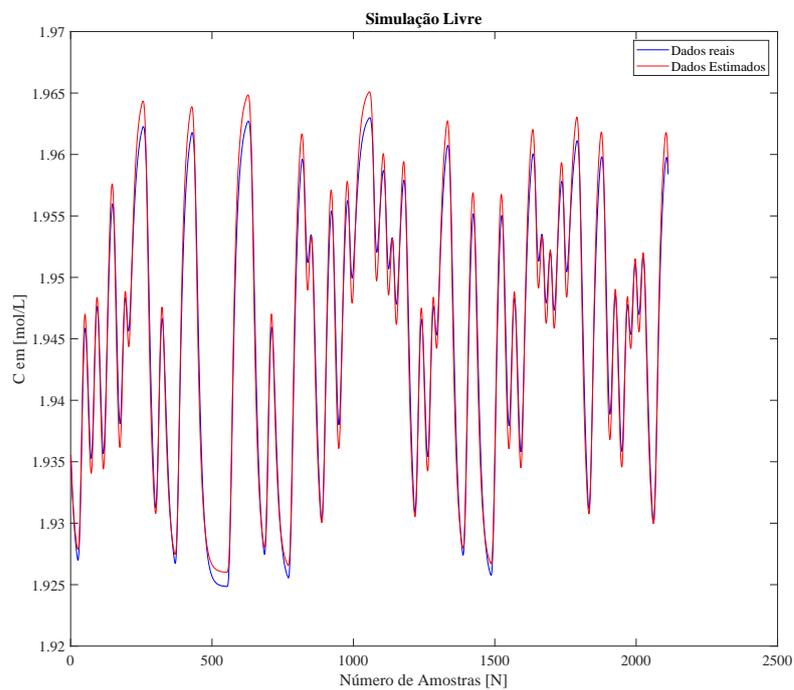
Nas Figuras 18, 20 e 19, encontram-se, respectivamente, a simulação livre dos modelos dinâmicos estimados NARMAX, Hammerstein e de Wiener, representados numericamente por (4.5), (4.6) e (4.7).

Figura 18 – Validação por simulação livre do modelo NARMAX.



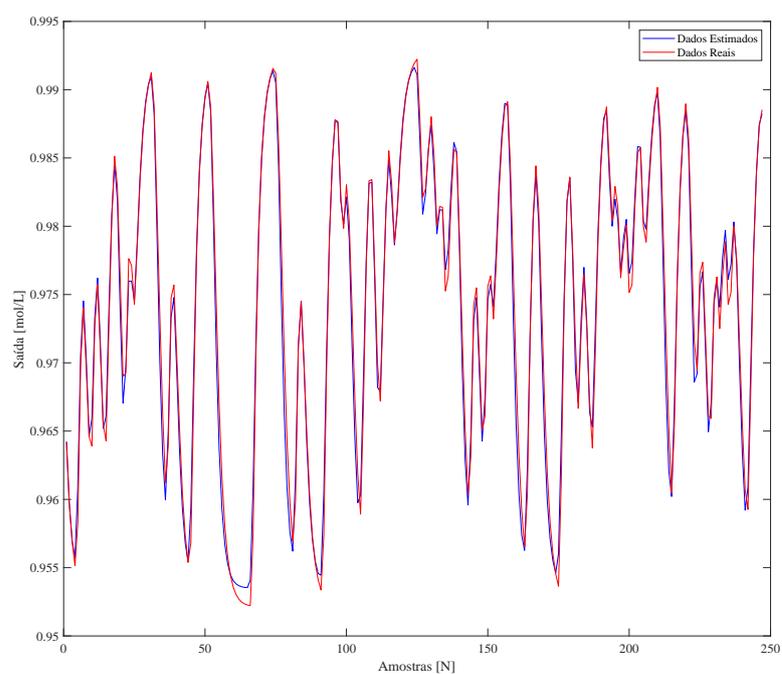
Fonte: Do Autor.

Figura 19 – Validação por simulação livre do modelo de Hammerstein.



Fonte: Do Autor.

Figura 20 – Validação por simulação livre do modelo de Wiener.



Fonte: Do Autor.

Nas Figuras 18, 19 e 20, as curvas em azul representam os dados de validação do sistema original, enquanto as curvas em vermelho representam os dados estimados pelo estimador de Mínimos Quadrados Estendidos. É possível perceber que as curvas apresentam shape e amplitudes semelhantes, a partir disso, pode-se afirmar que os modelos encontrados conseguem representar bem o sistema.

4.6 Índice RMSE

A validação quantitativa desse trabalho foi realizada por meio do índice *RMSE*. A Tabela 7 apresenta o comparativo entre os modelos dinâmicos selecionados e os índices *RMSE* obtidos por meio dos dados de validação. Os modelos de Hammerstein e Wiener são compostos pela parte estática, (4.1) e pela parte dinâmica $y(k)$. Dentre os três modelos encontrados, o de NARMAX possui menor índice *RMSE*.

Tabela 7 – Comparativo entre os modelos dinâmicos estimados.

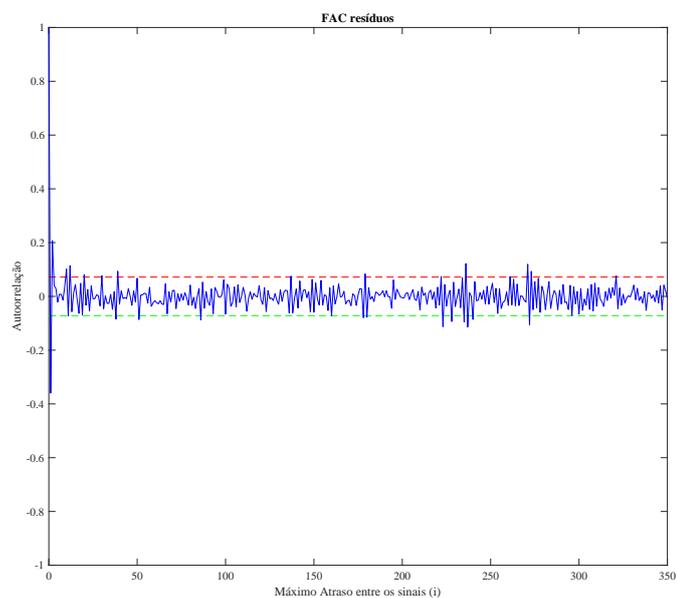
<i>Tipo de Modelo</i>	<i>Modelos Estimados</i>	<i>RMSE</i>
NARMAX	$y(k) = 1,5463y(k-1) - 0,5973y(k-2) - 4,9462 \cdot 10^{-5}u(k-1) + 1,1447 \cdot 10^{-5}u(k-2) + 1,0950 \cdot 10^{-6}u(k-2)^2 - 2,4245 \cdot 10^{-6}u(k-2)u(k-1) + 1,2602 \cdot 10^{-6}u(k-1)^2 - 0,0037u(k-2)y(k-1) + 0,0032u(k-1)y(k-1) - 0,0026u(k-1)y(k-2) + 0,0030u(k-2)y(k-2).$	0,0352
Hammerstein	$y(k) = 1,8905y(k-1) - 1,0365y(k-2) + 0,0344y(k-3) + 0,1337u(k-1) - 0,0487u(k-3) + 0,0267u(k-2)$	0,1291
Wiener	$y(k) = 0,7393y(k-1) + 0,0155u(k-2) + 0,2908u(k-1) + 0,0319u(k-3) - 0,0775y(k-2) + 0,0026y(k-3)$	0,1293

Fonte: Do autor.

4.7 Análise de Resíduos

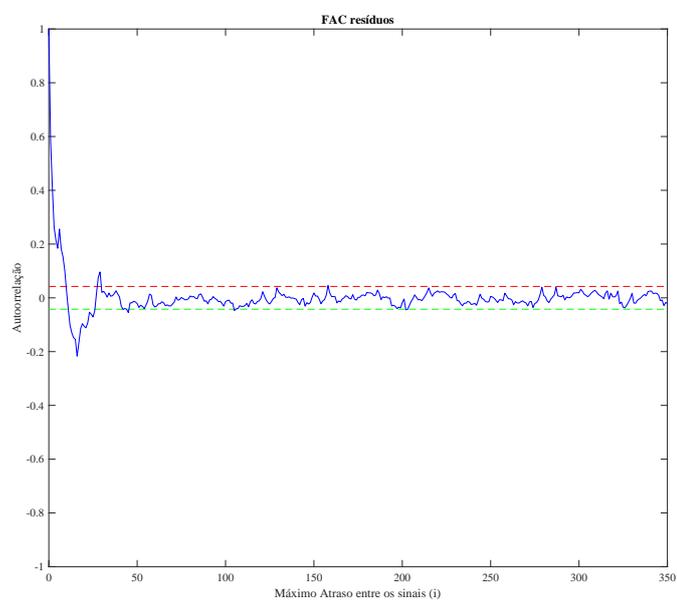
A validação estatística dos três modelos foi feita por meio da correlação de resíduos, como descrito na Seção 2.7.3. Nas Figuras 21, 22 e 23, as linhas horizontais tracejadas indicam o intervalo de confiança de 95%. Ao analisar essas figuras, é possível perceber que, para um máximo atraso igual a 350, os três modelos estimados possuem quase todos os valores dentro desse intervalo. Isso indica que os ruídos não são totalmente brancos, conforme descrito na Seção 2.7.3.

Figura 21 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo NARMAX, (4.5).



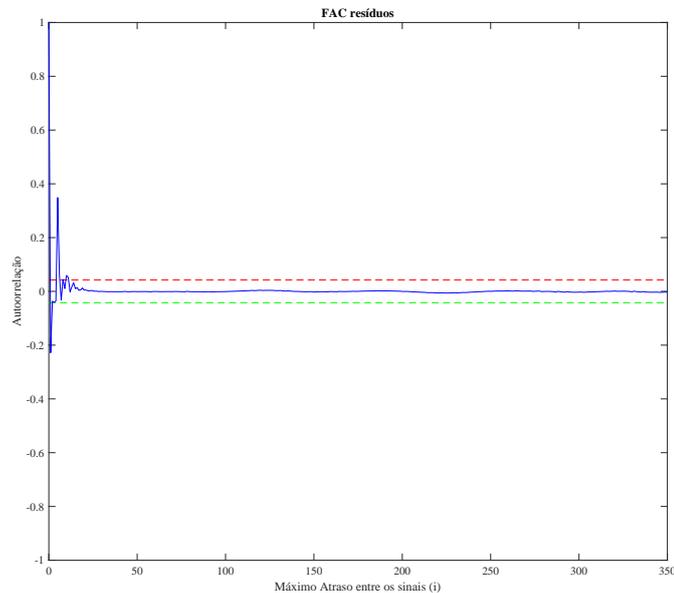
Fonte: Do Autor.

Figura 22 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo de Hammerstein, (4.6).



Fonte: Do Autor.

Figura 23 – Correlação dos Resíduos obtidos do ajuste do modelo de Wiener, (4.7).



Fonte: Do Autor.

4.8 Considerações Parciais

Ao analisar as validações qualitativas, Figuras 18, 19 e 20, em conjunto com os índices quantitativos RMSE apresentados na Tabela 7 e com a validação estatística das Figuras 21, 22 e 23, conclui-se que os três modelos apresentaram excelentes resultados e conseguiram representar o reator CSTR. Dentre eles, o modelo NARMAX possui melhor performance, de forma a ser capaz de representar o sistema com maior eficiência. Esses resultados estão em consonância com os resultados obtidos nos trabalhos de (Guan et al., 2016), (Han et al., 2017), e (Aljamaan et al., 2015), visto que, no primeiro, a representação NARMAX conseguiu ótimos resultados qualitativos ao identificar o reator CSTR; o segundo obteve resultados efetivos na identificação do reator CSTR a partir da utilização do conjunto Hammerstein-Wiener e o estimador de Mínimos Quadrados; no último trabalho, (Aljamaan et al., 2015) conseguiu resolver o problema da identificação do reator CSTR por meio da representação de Hammerstein.

5 Conclusão

Neste trabalho foi realizado um estudo com o propósito de solucionar o Problema 1.1: determinar os máximos atrasos n_u e n_y , bem como estimar os parâmetros c_i dos regressores do modelo; e o Problema 1.2: determinar os máximos atrasos n_u e n_y , assim como os parâmetros $[a_1 \dots a_n]$ e $[b_0 \dots b_n]$ dos regressores do modelo, como também a característica estática $f(\cdot)$. Para que isso fosse possível, foram determinados, por meio da metodologia caixa-cinza, modelos matemáticos para o sistema do Reator CSTR utilizando as estruturas NARMAX, Hammerstein e Wiener. Para atingir esse objetivo, foram feitos estudos acerca das etapas necessárias para a realização da identificação de sistemas.

Posteriormente, foi realizada uma simulação da planta do reator de tanque contínuo. Utilizou-se da simulação para realizar os testes estáticos desse sistema, e a partir disso identificar e compreender o seu comportamento em regime permanente. Com esses dados coletados, foram realizadas as etapas de identificação de sistemas e estimados os modelos para cada estrutura escolhida. A fim de demonstrar a eficiência dos modelos estimados, foram realizados vários ensaios para encontrar representações matemáticas que apresentassem baixos índices *RMSE* e fossem mais adequadas ao sistema.

De posse dos modelos encontrados, pôde-se concluir que o modelo NARMAX possuiu melhor desempenho qualitativo e quantitativo, com $RMSE = 0,0352$, conseguindo portanto, representar o sistema de forma mais eficiente. Este resultado está em concordância com os trabalhos utilizados como referência para o desenvolvimento deste estudo, (Guan et al., 2016; Han et al., 2017; Aljamaan et al., 2015), que utilizaram na identificação do reator CSTR as representações NARMAX, Hammerstein e Wiener.

Por fim, futuros trabalhos poderão ser desenvolvidos tomando esse como referência, podendo utilizar diferentes representações matemáticas, bem como realizar a adição de controladores ao sistema.

Referências

- Luis Antonio Aguirre. *Introdução à identificação de sistemas—Técnicas lineares e não-lineares : teoria e aplicação*. Editora UFMG, 2015. 1, 3, 4, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 16
- H. Akaike. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19(6):716–723, 1974. doi: <10.1109/TAC.1974.1100705>. 13
- I. Aljamaan, D. Westwick, and M. Foley. Non-linear closed-loop identification of cstr in the presence of a non-stationary disturbances. *IFAC - Conference Paper Archive*, 2015. 2, 3, 19, 21, 41, 42
- M. Bahita and K. Belarbi. Model reference neural - fuzzy adaptive control of the concentration in a chemical reactor (cstr). In *2016 International Federation of Automatic Control*, pages 158–162, 2016. doi: <10.1109/ChiCC.2016.7553655>. 2, 3, 17, 19, 21
- David Giraldo Clavijo. Métodos de subespaços para identificação de sistemas: propostas de alterações, implementações e avaliações. Master’s thesis, Universidade Estadual de Campinas, 2008. 1, 7
- Moisés Tavares da Silva. Identificação de sistemas usando modelos hammerstein e wiener utilizando método do relé. Master’s thesis, Universidade Federal de Campina Grande, 2012. 1, 7
- Mara Cristina da Silveira Coelho. Modelos de hammerstein e de wiener: conexões com modelos narx e sua aplicação em identificação de sistemas não-lineares. Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, 2002. 1, 8, 11, 12, 13, 14, 30
- Marcus Vinicius de Paula. Identificação de modelos de hammerstein e wiener para sistemas não lineares multivariáveis utilizando métodos de subespaços. Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, 2016. 1
- Fabício de Souza Fernandes. Identificação por predição de erro e síntese de controladores robustos. Master’s thesis, Universidade Federal de Minas Gerais, 2006. 1
- F.E. Ferreira. Identificação de modelos de hammerstein e wiener com curva estática intervalar, 2017. Monografia (Bacharel em Engenharia Elétrica), UFOP (Universidade Federal de Ouro Preto), João Monlevade, Brasil. 1, 7, 8, 12
- H. Scott Fogler. *Elementos de Engenharia das Reações Químicas*. Edição, LTC, 2009. 3, 17
- Xing Chen Guan, Dong Ya Zhao, and Quan Min Zhu. Narmax modelling and u-model control design for continuous stirred tank reactor (cstr). In *2016 35th Chinese Control Conference (CCC)*, pages 1964–1969, 2016. doi: <10.1109/ChiCC.2016.7553655>. 2, 7, 17, 19, 20, 41, 42

- Zhenzhen Han, Bin Cheng, Cheng Wang, and Wenhuan Yang. Identification of cstr using extreme learning machine based hammerstein-wiener model. In *2017 3rd IEEE International Conference on Control Science and Systems Engineering (ICCSSE)*, pages 733–736, 2017. doi: <10.1109/CCSSE.2017.8088031>. 2, 21, 41, 42
- Ma Luning, Ynag Xiao, Zhao Dongya, and Sarah K. Spurgeon. Disturbance observer based sliding mode control for a continuous stirred tank reactor (cstr). In *2017 36th Chinese Control Conference (CCC)*, pages 3748–3753, 2017. doi: <10.23919/ChiCC.2017.8027943>. 2
- Luning Ma, Dongya Zhao, and Sarah K. Spurgeon. Disturbance observer based discrete time sliding mode control for a continuous stirred tank reactor. In *2018 15th International Workshop on Variable Structure Systems (VSS)*, pages 372–377, 2018. doi: <10.1109/VSS.2018.8460344>. 3, 7, 19, 21
- S. Menelau, F. G. L. Macedo, P. L. de Carvalho, T. G. Nascimento, and A. D. de C. Júnior. Mapeamento da produção científica da indústria 4.0 no contexto dos brics: reflexões e interfaces. *Cadernos EBAPE.BR*, 17, 2019. 1
- M. V. de C Mota and F.T. Vieira. Análise do reator do tipo tanque agitado (cstr): Comportamento dinâmico na partida e estabilidade da operação estacionária. *Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica*, 2015. 1
- Akshaykumar Naregalkar and Subbulekshmi Durairaj. A novel lssvm-l hammerstein model structure for system identification and nonlinear model predictive control of cstr servo and regulatory control. In *Chemical Product and Process Modeling*, 2021. doi: <10.1515/cppm-2021-0020>. 7
- K. Narendra and P. Gallman. An iterative method for the identification of nonlinear systems using a hammerstein model. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 11(3): 546–550, 1966. doi: <10.1109/TAC.1966.1098387>. 1
- M. V. de Paula, R. A. Ricco, and B. O. S. Teixeira. Identificação semi-paramétrica de sistemas mimo do tipo wiener por meio de sinais harmônicos e métodos de subespaços. *XXI Congresso Brasileiro de Aeronáutica*, 2016. 7
- R. Prokop, Ů. R. Matus, and J. Vojtesek. Robust control of continuous stirred tank reactor jacket cooling. *Chemical Engineering Transactions*, 2019. 7
- R. A. Ricco, A. Verly, B. O. S. Teixeira, and L. A. Aguirre. Identificação usando técnicas de subespaços de uma planta de bombeamento de água - um estudo de caso. *X SBAI - Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente*, 2011. 7
- Ana Paula L. Santos, Nádia R. L. Milagres, Aline A. Campos, Luciana M. Margoti, Gleison F. V. Amaral, and Márcio F. S. Barroso. Aplicação de representações em blocos interconectados em identificação caixa-cinza de sistemas dinâmicos não lineares. *XIII Congresso Brasileiro de Automática*, 2010. 1
- Abolfazl Simorgh, Abolhassan Razminia, and Vladimir I. Shiryaev. System identification and control design of a nonlinear continuously stirred tank reactor. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2020. 3, 7, 19, 21

Anny Verly, Flávio Henrique Pessoa Do Carmo, Marcus Vinicius De Paula, Rodrigo Augusto Ricco, and Bruno Otávio Soares Teixeira. Identificação de modelos para uma planta de nível didática smar pd3-f. *XII Simpósio Brasileiro de Automação*, 2018. 1, 4, 10

Jiri Vojtesek and Petr Dostal. Simulation analyses of continuous stirred tank reactor. 2008. doi: <10.7148/2008-0506>. 20