

Modelagem de Colunas de Destilação Através de Modelos Auto-regressivos

Adelson Siqueira Carvalho

Luis Humberto Guillermo Felipe

Universidade Estadual do Norte Fluminense - Uenf

RESUMO

Sistemas dinâmicos são em sua grande maioria não lineares e de dinâmica não totalmente conhecida, desta forma costuma-se criar certa distância entre o sistema real e o gerado a partir de técnicas de modelagem analítica. Modelos mais significativos podem ser gerados a partir de métodos que utilizem um conjunto de dados oriundo do sistema real, dentre estes se podem destacar os modelos auto-regressivos. O presente trabalho objetiva apresentar a modelagem de uma coluna de destilação didática com estes modelos, e destacar as particularidades da metodologia. Como principal contribuição, a validação do modelo com dados de outros testes dinâmicos que não o utilizado para estimação dos parâmetros.

Palavras-Chave: Sistemas dinâmicos, modelos auto-regressivos, colunas de destilação.

1- INTRODUÇÃO

O problema abordado neste trabalho é a dificuldade ao se modelar sistemas dinâmicos e não lineares para otimizá-los, haja vista que estes não possuem explicitadas as relações entre suas variáveis e não linearidades destas relações.

Os sistemas dinâmicos encontrados na prática são, em última análise, não lineares. É bem verdade que em alguns casos aproximações lineares são suficientes para aplicações práticas AGUIRRE (2000).

Sistemas dinâmicos estão presentes na maioria das empresas de processos contínuos, onde as variáveis que influenciam na qualidade do produto final são analógicas. Dentre as quais se destacam: temperatura, vazão, nível e pressão. As indústrias petroquímicas, álcool, celulose e de cimento se enquadram nesta classe.

Nestas indústrias, cuja produção é contínua, e que possuem como essência a produção de derivados a partir de matéria-prima, a destilação é um processo de predominância. Sobretudo nas indústrias petroquímica e do álcool é o principal processo de transformação de matéria prima em produto acabado.

Colunas de destilação ou torres de destilação estão presentes em grande número nas usinas de produção de álcool e também em refinarias de petróleo, e unidades de processamento de gás-natural. Estes processos industriais são perfeitos exemplos de sistemas dinâmicos, multivariáveis e de comportamento não linear.

Na indústria é comum que a matéria prima seja destilada inicialmente em uma coluna A (fracionadora) obtendo assim uma gama de derivados. Alguns destes por sua vez seguem para uma coluna B (retificadora) para a extração de derivados de maior valor agregado. Este procedimento é presente tanto na indústria do petróleo quanto na do álcool.

A coluna de destilação do CEFET-Campos, assim como as colunas de destilação industriais, são sistemas dinâmicos¹, multivariáveis, e não lineares. Estes sistemas para serem otimizados primeiro devem ser modelados. O problema está então em encontrar a melhor classe de modelos que represente a relação entre suas variáveis.

A proposta deste trabalho é utilizar modelos auto-regressivos para modelar a relação entre as principais variáveis da coluna de destilação, levando em consideração as restrições construtivas do equipamento e do sistema de medição.

Este artigo apresenta na seção 2 o objeto de estudo e seu sistema de aquisição de dados, e na seção 3 o estado-da-arte da pesquisa. Na seção 4 o ferramental teórico utilizado para modelagem do sistema em questão. A seção 5 coloca a metodologia proposta e aplicação da mesma aos dados. Na seção 6 os resultados são apresentados na forma de gráficos e tabelas. Na seção 7 este artigo apresenta a conclusão do trabalho de pesquisa.

2- OBJETO DE ESTUDO

A partir de um sistema real instalado no laboratório de pesquisa e automação do CEFET-Campos, podem-se coletar dados das principais variáveis de processo de uma coluna de destilação didática, e a partir deles ajustar uma classe de modelos paramétricos que reproduzam de maneira satisfatória o comportamento do sistema real.

Visando o desenvolvimento de pesquisa e aprimoramento no processo de destilação, o professor Luiz Paulo Miranda Vaillant, do curso de Química da então Escola Técnica Federal de Campos, hoje Centro Federal de Educação Tecnológica de Campos – RJ (CEFET CAMPOS) projetou uma coluna de destilação para fins didáticos. Em 1989, como resultado de um intercâmbio entre a Refinaria Nacional de Sal – Sal Cisne – localizada em Cabo Frio – RJ e a instituição, o curso técnico de Instrumentação recebeu como doação a coluna de destilação CRESPO (2000).

De um modo geral as destilações na prática industrial envolvem misturas multicomponentes, porém a compreensão dos princípios da destilação de misturas binárias é particularmente importante, pois ela constitui a base de operações mais complexas GOMIDE (1988).

Diferente dos sistemas industriais a coluna de destilação em questão não apresenta subsistemas como retervedor da base da coluna e refluxo de topo. A fonte térmica é uma resistência elétrica de 1000W, alojada no interior da base da coluna. Todo o destilado obtido se condensa e é coletado em uma proveta, portanto a temperatura de topo é controlada totalmente através da vazão na entrada, uma vez que a resistência elétrica não varia.



Figura 1. Coluna de destilação didática do CEFET-Campos.

¹ Sistemas dinâmicos são sistemas cujas variáveis possuem determinado comportamento, que sofre influência do fator tempo.

Como forma de reproduzir em laboratório o ambiente encontrado na indústria, a coluna de destilação possui um sistema de aquisição de dados de porte industrial. Os instrumentos de medição das variáveis do processo são interligados em uma rede Foundation Fieldbus (H1) do fabricante Smar®. Através de uma DFI a rede de instrumentos se integra a uma rede ponto-a-ponto com o computador (HSE), onde são disponibilizadas as informações oriundas do processo e estas podem ser monitoradas e modificadas através do software de configuração dos instrumentos (Syscon®).

Através de uma integração entre os seguintes aplicativos: Syscon®, OPC link® e InTouch 6.0®, um script foi criado para registrar os valores numéricos das variáveis ao longo do tempo em arquivo texto. Este arquivo é manipulado posteriormente para que seja montada a matriz de dados para formar os conjuntos de estimação e validação dos modelos paramétricos para gerar o modelo do sistema.

As variáveis registradas pelo sistema de aquisição são: temperatura de topo da coluna, pressão do topo, temperatura da base, nível da base, vazão de entrada da mistura.

Posteriormente as variáveis serão divididas em dois conjuntos: variáveis de entrada e variáveis de saída do sistema.

3- ESTADO DA ARTE

A modelagem de colunas de destilação através de modelos auto-regressivos é consolidada sobre pesquisas relacionadas a diversas áreas de conhecimento, tais como: sistemas dinâmicos, engenharia de controle e processamento de sinais, sempre com intuito de obtenção do modelo dinâmico do processo para fundamentar análises e projetos que venham a melhorar seu desempenho em operação.

Sob a ótica da pesquisa operacional, uma coluna de destilação pode ser enxergada como um problema de otimização, dotado de função objetivo e restrições. Encontrar as relações implícitas aos dados oriundos deste sistema, é dar suporte para a modelagem da função objetivo do problema. A técnica se sustenta no potencial dos modelos auto-regressivos propostos para a modelagem de sistemas dinâmicos multivariáveis.

AGUIRRE *et ali* (1998), aplicaram modelos NARMAX (*auto-regressivos não lineares de média móvel e entradas externas*), para modelar um forno elétrico com elemento de aquecimento interno de 200W.

BARROSO *et ali* (2002) apresentaram a identificação de um conversor CC-CC BUCK, que possuía faixa restrita para os valores de entrada.

FURTADO *et ali* (2002), experimentaram modelos NARMAX para identificação de um forno a arco elétrico, modelados e gerados os dados no MATLAB®, apenas para verificação da eficácia do método.

JURADO e CARPIO (2003) aplicam os modelos NARX para identificação de uma micro-turbina composta pelos demais subsistemas: combustível, controle de velocidade e de temperatura.

MORAES (2004) apresenta uma abordagem com modelos auto-regressivos lineares com variáveis exógenas (ARX) para modelar os diversos subsistemas de uma unidade de fracionamento de Nafta, que grosso modo, nada mais é que uma coluna de destilação.

BRAVO (2006) utiliza modelos ARX para identificação da resposta dinâmica de um motor DC, utilizando dois softwares distintos: MATLAB® e LABVIEW®.

JÚNIOR e BARBABELA (2006) utilizaram modelos auto-regressivos para predição de valores futuros dos preços de derivados de petróleo, onde modelavam séries temporais com histórico superior a dez anos e através de correlação cruzada, definiram a ordem dos modelos auto-regressivos.

4- FERRAMENTAL TEÓRICO

4.1 - MODELOS AUTO-REGRESSIVOS

A metodologia proposta neste trabalho faz uso de representações lineares, para modelagem de sistemas dinâmicos, através de equações de recorrências conhecidas como modelos auto-regressivos.

A metodologia que assume a utilização de modelos auto-regressivos para a modelagem de sistemas e séries temporais teve suas bases inicialmente descritas por JÚNIOR e BARBABELA (2006), e possui etapas bem definidas.

Podem-se descrever as etapas desta metodologia em quatro itens gerais:

Identificação: é a etapa de definição dos filtros mais adequados para a série analisada. Utilizar filtros em excesso na descrição de uma série não promove previsões melhores, além de complicar desnecessariamente seu processamento matemático.

Estimação: escolhidos os filtros, estimam-se as ordens e os parâmetros que compõem os modelos. Novamente, é importante manter o modelo em sua forma mais simples, com a menor ordem em cada filtro. Elevar a ordem, ou seja, usar dados referentes ao passado distante que não exercem influência sobre o comportamento presente não melhora o desempenho do modelo.

Diagnóstico: determinar a acurácia do modelo estimado através da comparação dos dados previstos com os dados obtidos a partir da série real. Nessa etapa é realizada avaliação para verificar se o modelo é capaz de prever de forma segura o comportamento futuro do mercado. Caso não seja obtido sucesso no seu uso como “preditor”, retornam-se as etapas anteriores para a busca de um novo modelo.

Aplicação: após as etapas anteriores terem obtido êxito, a ferramenta é colocada em uso BOX e JENKINS (1994).

Estas combinações de filtros são as componentes possíveis ao selecionar a estrutura de modelo auto-regressivo, tendo em vista as características do sistema a ser modelado.

Os modelos auto-regressivos possuem diversas variações e formatos em que podem ser apresentados. Abaixo são apresentadas algumas destas variações em sua forma polinomial compacta e estendida.

O modelo auto-regressivo AR é o mais comum destes modelos paramétricos e sua formulação é a seguinte:

$A(q^{-1})y(t) = e(t)$, onde o polinômio $A(q^{-1})$ pode ser expandido para:

$$A(q^{-1}) = 1 + a_1q^{-1} + \dots + a_{n_a}q^{-n_a}$$

Sendo assim a versão expandida do modelo AR fica sendo:

$$y(t) + a_1y(t-1) + \dots + a_{n_a}y(t-n_a) = e(t)$$

Se, ao modelo AR for acrescentado uma entrada externa $u(t)$ que nada mais é que uma série temporal de uma variável tida como entrada que também deve ser admitida como parte

que explica o comportamento de $y(t)$, ou seja, o valor de $y(t)$ não pode ser explicado somente pelos seus valores atrasados, mas também pelos valores atrasados de outra variável. Chega-se ao seguinte modelo ARX:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t - n_k) + e(t), \text{ onde:}$$

$$B(q^{-1}) = b_1 + b_2q^{-1} + \dots + b_{n_b}q^{-n_b+1}$$

O modelo ARX expandido seria:

$$y(t) + a_1y(t-1) + \dots + a_{n_a}y(t-n_a) = b_1u(t-n_k) + b_2u(t-n_k-1) + \dots + b_{n_b}u(t-n_k-n_b+1) + e(t)$$

onde n_a e n_b são as ordens dos polinômios $A(q^{-1})$ e $B(q^{-1})$, enquanto que n_k é o número de atrasos da saída para a entrada. Se acrescentada uma componente de média móvel (MA) ao modelo passamos a um modelo ARMAX, descrito por:

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t - n_k) + C(q^{-1})e(t), \text{ onde:}$$

$C(q^{-1}) = 1 + c_1q^{-1} + \dots + c_{n_c}q^{-n_c}$, é possível notar que o polinômio $C(q)$ é similar a o polinômio $A(q)$.

Aplicando os polinômios expandidos no modelo ARMAX, tem-se:

$$y(t) + a_1y(t-1) + \dots + a_{n_a}y(t-n_a) = b_1u(t-n_k) + b_2u(t-n_k-1) + \dots + b_{n_b}u(t-n_k-n_b+1) + e(t) + c_1e(t-1) + \dots + c_{n_c}e(t-n_c)$$

Existem ainda outras variações dos modelos auto-regressivos que possuem denominações próprias tais como os modelos OE (*Output Error*) e BJ (*Box & Jenkins*).

A estrutura do modelo OE é a seguinte:

$$y(t) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})}u(t - n_k) + e(t), \text{ onde:}$$

$$F(q^{-1}) = 1 + f_1q^{-1} + \dots + f_{n_f}q^{-n_f}, \text{ similar ao polinômio } A(q^{-1}),$$

a estrutura do modelo BJ é a seguinte:

$$y(t) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})}u(t - n_k) + \frac{C(q^{-1})}{D(q^{-1})}e(t), \text{ onde:}$$

$$D(q^{-1}) = 1 + d_1q^{-1} + \dots + d_{n_d}q^{-n_d}, \text{ similar ao polinômio } A(q^{-1})$$

De uma forma geral, existe um modelo que representa qualquer um dos modelos auto-regressivos anteriormente mencionados, ou seja, qualquer modelo linear e discreto no tempo. Dado pela equação:

$$A(q^{-1})y(t) = \frac{B(q^{-1})}{F(q^{-1})}u(t - n_k) + \frac{C(q^{-1})}{D(q^{-1})}e(t), \text{ podendo ser utilizado para todos os casos}$$

anteriores, sendo que estes seriam casos especiais onde, as ordens dos polinômios desnecessários seriam zeradas da seguinte forma:

Tabela 1. Tabela de polinômios desconsiderados por modelo.

| Modelo | Grau do polinômio a ser zero |
|--------|---|
| AR | $B(q^{-1}), F(q^{-1}), C(q^{-1}), D(q^{-1})$ ou seja, n_b, n_f, n_c e $n_d = 0$ |
| ARX | $F(q^{-1}), C(q^{-1}), D(q^{-1})$ ou seja, n_f, n_c e $n_d = 0$ |
| ARMAX | $F(q^{-1}), D(q^{-1})$ ou seja, n_f e $n_d = 0$ |
| OE | $A(q^{-1}), C(q^{-1}), D(q^{-1})$ ou seja, n_a, n_c e $n_d = 0$ |
| BJ | $A(q^{-1})$ ou seja, $n_a = 0$ |

Dependendo do sistema a ser modelado ele pode possuir mais de uma entrada externa gerando a seguinte estrutura:

$$A(q^{-1})y(t) = \frac{B_1(q^{-1})}{F_1(q^{-1})}u_1(t - n_{k_1}) + \dots + \frac{B_{n_u}(q^{-1})}{F_{n_u}(q^{-1})}u_{n_u}(t - nk_{n_u}) + \frac{C(q^{-1})}{D(q^{-1})}e(t)$$

Demais estruturas podem ser encontradas na literatura, mas para este trabalho explicar sobre estas, é o suficiente.

4.2 - O MÉTODO DE MÍNIMOS QUADRADOS

Dos modelos auto-regressivos apresentados na seção anterior, o escolhido para ajustar-se aos dados do sistema foi o ARX (auto-regressivo com entradas externas).

O modelo ARX da seção anterior pode ser visto como um sistema de equações e ter seus coeficientes estimados através do método dos mínimos quadrados. O método pode ser resumido da seguinte forma.

$$A(q^{-1})y(t) = B(q^{-1})u(t - n_k) + e(t), \text{ onde:}$$

$$A(q^{-1}) = 1 + a_1q^{-1} + \dots + a_{n_a}q^{-n_a}$$

$$B(q^{-1}) = b_1 + b_2q^{-1} + \dots + b_{n_b}q^{-n_b+1}$$

O modelo ARX expandido seria:

$$y(t) + a_1y(t-1) + \dots + a_{n_a}y(t-n_a) = b_1u(t-n_k) + b_2u(t-n_k-1) + \dots + b_{n_b}u(t-n_k-n_b+1) + e(t)$$

Modificando sua forma para aplicação do método dos mínimos quadrados:

$$y(t) = \phi^T(t-1)\theta + e(t) \quad (1)$$

$$\phi^T(t-1) = [-y(t-1), \dots, -y(t-n_a), u(t-1), \dots, u(t-1-n_b)]$$

$$\theta^T = [a_1, \dots, a_{n_a}, b_0, \dots, b_{n_b}]$$

Onde $\phi^T(t-1)$ é a matriz de valores coletados do processo para as variáveis envolvidas no modelo, neste caso considera-se um modelo relacionando uma variável de saída $y(t)$ com uma variável de entrada $u(t)$. O vetor de coeficientes a serem estimados através do método dos mínimos quadrados θ . Um erro obtido na modelagem representado por $e(t)$.

O método de mínimos quadrados é largamente utilizado para estimação de parâmetros do modelo de sistemas lineares discretos no tempo.

De início será assumido que se conhece o valor estimado do vetor de parâmetros, θ , e que é cometido um erro e ao se tentar explicar o valor observado de y a partir do vetor de regressores ϕ^T e de θ , ou seja,

$$y = \phi^T \theta + e \quad (2)$$

A partir daí o que se tem a fazer é determinar o índice de desempenho do método, sendo que J_{MQ} é a função custo a ser minimizada:

$$J_{MQ} = \sum_{i=1}^N e(i)^2 = e^T e = \|e\|^2 \quad (3)$$

J_{MQ} quantifica a qualidade de ajuste de $\phi^T \theta$ ao vetor de dados y . Portanto é tido como vantajoso que o valor estimado de θ minimize J_{MQ} .

Determinando-se e em (2) e substituindo-se o resultado em (3), tem-se:

$$J_{MQ} = (y - \phi^T \theta)^T (y - \phi \theta) = y^T y - y^T \phi \theta - \theta^T \phi^T y + \theta^T \phi^T \phi \theta \quad (4)$$

A fim de minimizar a função custo J_{MQ} com respeito à θ , é necessário resolver $(\partial J_{MQ} / \partial \theta) = 0$. Fazendo-se isso, tem-se:

$$\frac{\partial J_{MQ}}{\partial \theta} = -(y^T \phi)^T - \phi^T y + (\phi^T \phi + \phi^T \phi) \theta = -\phi^T y - \phi^T y + 2\phi^T \phi \theta \quad (5)$$

Igualando-se a última equação a zero tem-se:

$$\theta = [\phi^T \phi]^{-1} \phi^T y \quad (6)$$

Para que θ seja mínimo, é necessário verificar que:

$$\frac{\partial^2 J_{MQ}}{\partial \theta^2} = 2\phi^T \phi \geq 0 \quad (7)$$

A inequação (7) é verdadeira, pois $2\phi^T \phi$ é positiva definida por construção. Portanto, a equação (6) é o estimador que fornece o valor de θ que minimiza o somatório do quadrado dos erros. Resumindo:

$$\theta_{MQ} = \arg_{\theta} \min J_{MQ} = [\phi^T \phi]^{-1} \phi^T y \quad (8)$$

5- METODOLOGIA APLICADA

A metodologia aplicada aos dados do processo para a modelagem através dos auto-regressivos é apresentada nesta seção, na forma de etapas:



Figura 2. Etapas da metodologia aplicada aos dados.

Na etapa de tratamento dos dados, é necessário realizar certas adequações nos dados originais obtidos pelo sistema de aquisição, para que possam ser utilizados durante as etapas da metodologia.

Os dados originais foram tabulados em arquivo texto, e possuem 3540 amostras de cinco variáveis do processo, sendo elas: *temperatura no topo da coluna*, *vazão de entrada de produto*, *temperatura na base da coluna*, *pressão no topo da coluna* e *nível de produto na base da coluna*.

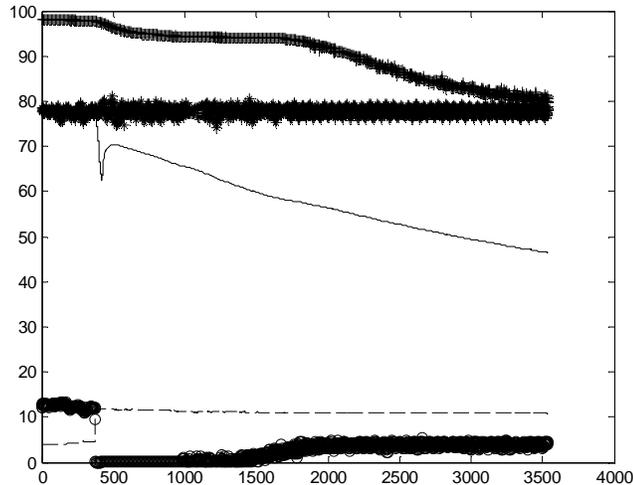


Figura 3. Gráfico das variáveis do processo: temperatura no topo da coluna (–), vazão de entrada de produto (- -), temperatura na base da coluna (+), pressão no topo da coluna (o) e nível de produto na base da coluna (*).

Como primeiro passo no tratamento dos dados foi realizado uma seleção de amostras para compor o conjunto de dados para a estimação do modelo auto-regressivo e um outro conjunto para a etapa de validação do modelo.

Devido à alta taxa de amostragem do sistema de aquisição e registro das variáveis, as amostras serão selecionadas para compor os conjuntos e também reduzindo o conjunto original. As amostras para estimação serão selecionadas com intervalo uniforme de dez, e contendo, portanto 354 amostras. O padrão de validação seguirá passo uniforme de vinte, contendo, portanto 177 amostras. Em valores percentuais, seleciona-se do novo conjunto 66,6% para estimação e 33,3% para validação.

O objetivo da montagem de dois subconjuntos a partir do original é utilizar dados não inclusos no procedimento de estimação dos parâmetros do modelo auto-regressivo, para validar o modelo obtido e seu poder de predição da saída da planta para novos cenários de entrada.

Os conjuntos montados na primeira etapa da metodologia são referentes a um único teste na forma de degrau na vazão de entrada da coluna, sendo assim tanto o conjunto de estimação quanto os de validação possuem dinâmica similar. Todavia, testes dinâmicos diferentes foram realizados na planta, serão utilizados para uma segunda etapa de validação e o desempenho do modelo será verificado.

A segunda etapa da metodologia visa à seleção da macro-estrutura do modelo auto-regressivo utilizado. Esta escolha passa pela montagem de uma combinação de componentes, a componente AR indica que o modelo possui a característica de ser auto-regressivo, ou seja, o processo gerador da série temporal em estudo pode ser descrito por uma combinação linear de seus valores em instantes passados e coeficientes a serem estimados pelo método dos mínimos quadrados.

A componente X representa que a série temporal a ser predita sofre influência de séries temporais externas.

Por momento outras componentes, tais como MA *média móvel* e S *sazonalidade*, para o modelo não serão investigadas. Logo o modelo a ser submetido aos dados e ao procedimento de estimação é do tipo ARX (*auto-regressivo com entradas externas*).

Na terceira etapa da metodologia aplica-se o modelo auto-regressivo selecionado aos dados, para que os estimadores mínimos quadrados possam encontrar um conjunto de coeficientes que venha a minimizar os quadrados dos desvios entre saída do modelo e saída da planta.

Logo, nesta etapa o grande problema é definir a ordem do modelo auto-regressivo, o que implica em definir o tamanho do modelo final, uma vez que estas ordens representam o número de valores passados das séries temporais envolvidas serão considerados no modelo para que este venha a prever a resposta de maneira mais correta possível.

A regra mais utilizada em séries temporais é o chamado critério de informação de Akaike, denotado por AIC. A definição mais comumente utilizada é:

$$AIC = n \log(\hat{\sigma}_\epsilon^2) + 2m$$

Onde m é o número de parâmetros em modelos ARMA(p, q) $m = p + q + 1$, e $\hat{\sigma}_\epsilon^2 = (1/n) \sum \hat{\epsilon}_i^2$. EHLERS (2003).

O uso do AIC pressupõe que existe uma ordem predefinida para inclusão dos termos candidatos sequencialmente no modelo. Primeiramente, assume-se que o número de termos do ruído é fixo, portanto, com os termos do ruído no modelo, uma ordem de inclusão dos demais termos seria: $y(k-1), u(k-1), y(k-2), u(k-2)$, e assim por diante. Quando AIC passar por um mínimo o procedimento pode ser terminado e a ordem terá sido determinada AGUIRRE (2000).

A rotina que seleciona a melhor ordem do modelo ARX baseada nos conceitos apresentados foi implementada no MATLAB e culminou na seleção de um modelo ARX (5 [5 5 5 5] [5 5 5 5]) onde o mesmo possui quatro variáveis externas (vazão de entrada, temperatura da base, pressão do topo e nível da base) e uma variável resposta (temperatura de topo). A mesma rotina foi desenvolvida utilizando o FPE (Final Prediction Error) e a ordem dos modelos foi idêntica, bem como os parâmetros estimados.

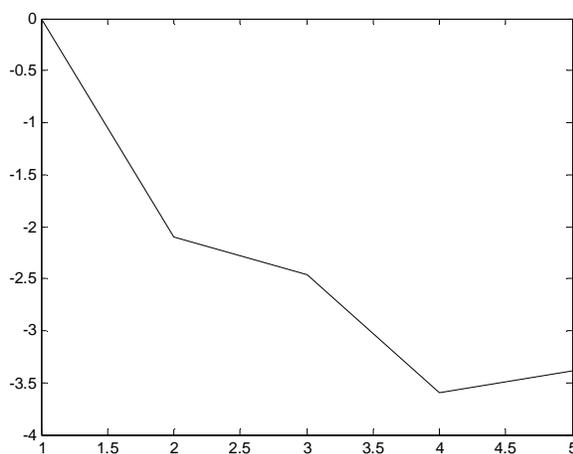


Figura 4. A curva do AIC calculado através das iterações da rotina.

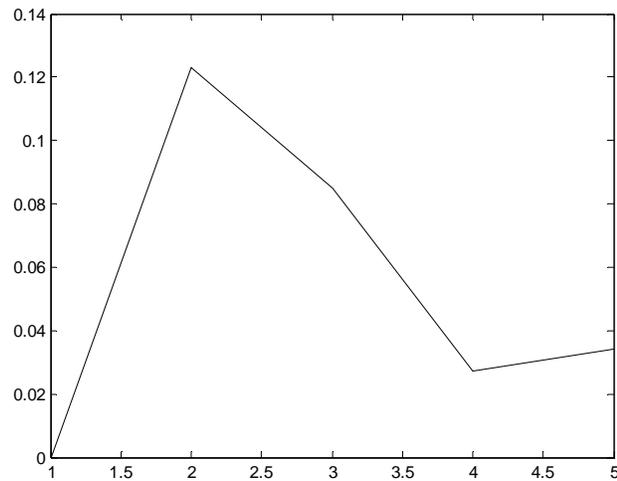


Figura 5. A curva do FPE calculado através das iterações da rotina.

Ao final da aplicação da metodologia:

$$A(q)y(t) = B(q)u(t) + e(t) \quad A(q) = 1 + \sum_{n=1}^5 a_n q^{-n} \quad B1(q) = b_1 + \sum_{n=2}^5 b_n q^{-n-1}$$

$$B2(q) = b_1 + \sum_{n=2}^5 b_n q^{-n-1} \quad B3(q) = b_1 + \sum_{n=2}^5 b_n q^{-n-1} \quad B4(q) = b_1 + \sum_{n=2}^5 b_n q^{-n-1}$$

Tabela 2. Tabela dos coeficientes do modelo auto-regressivo obtido.

| Coeficientes dos polinômios encontrados pela pelo método EMQ | | | | | | | | | |
|--|---------|---------|----------|---------|-----------|---------|-----------|---------|-------------|
| $A(q)$ | | $B1(q)$ | | $B2(q)$ | | $B3(q)$ | | $B4(q)$ | |
| a_1 | - 2,248 | b_1 | 0,4129 | b_1 | 0,007853 | b_1 | -0,008054 | b_1 | -0,01412 |
| a_2 | 1,305 | b_2 | - 1,249 | b_2 | - 0,01017 | b_2 | - 0,0276 | b_2 | - 0,0008789 |
| a_3 | 0,9101 | b_3 | 0,6213 | b_3 | - 0,00962 | b_3 | - 0,01039 | b_3 | - 0,01158 |
| a_4 | - 1,338 | b_4 | 0,7253 | b_4 | 0,01178 | b_4 | 0,04191 | b_4 | 0,005631 |
| a_5 | 0,3709 | b_5 | - 0,4801 | b_5 | 0,002372 | b_5 | 0,01722 | b_5 | 0,01357 |

6- RESULTADOS

Depois de estimados os valores para os parâmetros do modelo auto-regressivos via mínimos quadrados, este foi simulado com dados do conjunto de estimação e dados do conjunto de validação.

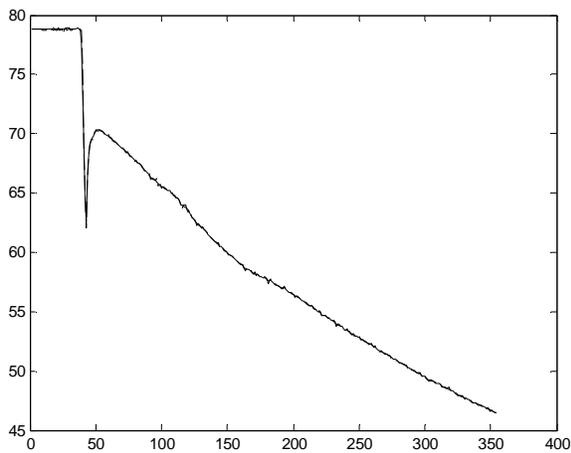


Figura 6. Saída do modelo (---) comparada à saída do sistema (—) para os dados utilizados na estimação.

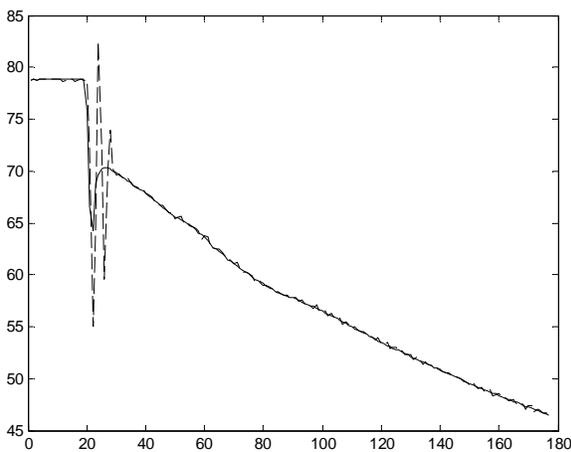


Figura 7. Saída do modelo (---) comparada à saída do sistema (—) para os dados de validação.

A seguir são apresentados os resíduos da modelagem para os conjuntos de estimação e validação.

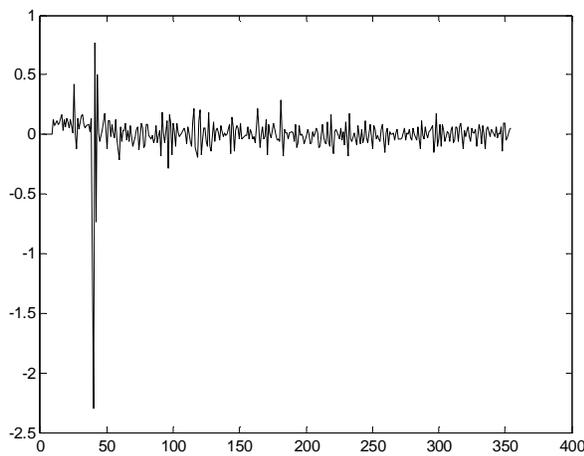


Figura 8. Resíduos da modelagem para o conjunto de estimação.

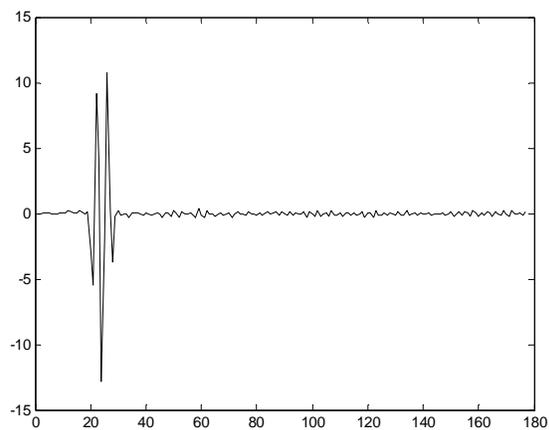


Figura 9. Resíduos da modelagem para o conjunto de validação.

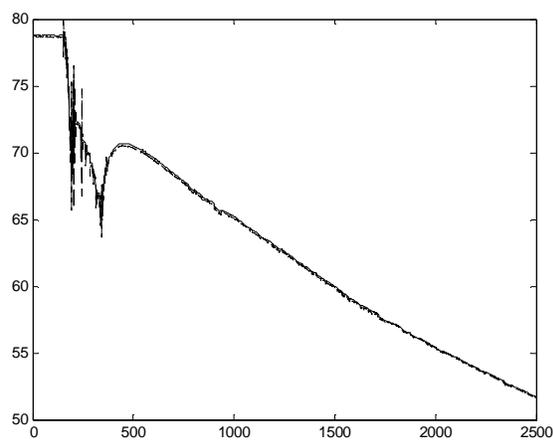


Figura 10. Saída do modelo (---) comparada à saída do sistema (—) validação com dados do teste dinâmico dois.

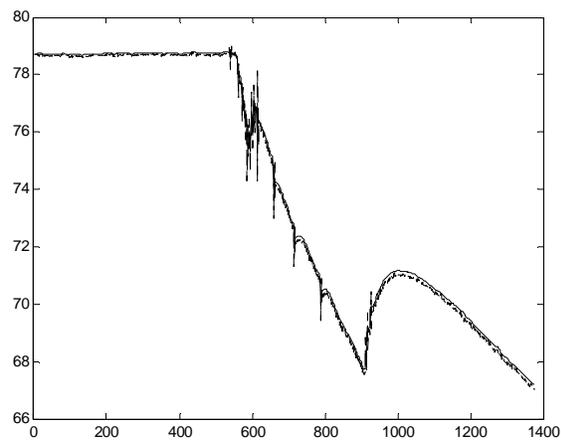


Figura 11. Saída do modelo (---) comparada à saída do sistema (—) validação com dados do teste dinâmico três.

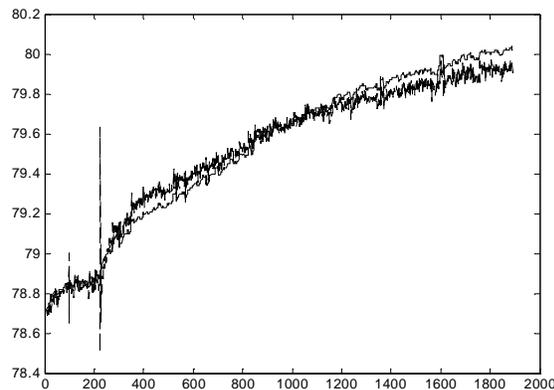


Figura 12. Saída do modelo (- -) comparada à saída do sistema (—) validação com dados do teste dinâmico quatro.

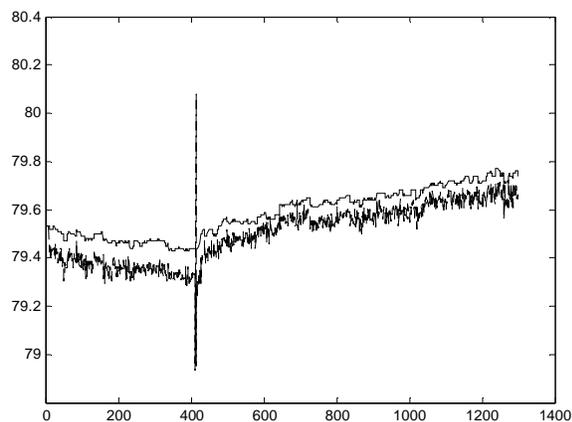


Figura 13. Saída do modelo (- -) comparada à saída do sistema (—) validação com dados do teste dinâmico cinco.

Os testes dinâmicos considerados foram efetuados na coluna de destilação, quando a mesma operava em regime permanente (estacionário), os três primeiros testes foram realizados para perturbações na forma de degrau positivo na vazão de entrada da coluna e os dois últimos na forma de degrau negativo. Em todos os testes o objetivo foi observar o comportamento da temperatura de topo da coluna de destilação em função de variações nas variáveis de entrada. O primeiro teste dinâmico foi utilizado para a montagem dos conjuntos de estimação e validação (*in sample*), os demais testes foram utilizados na íntegra para a etapa de validação com diferentes testes dinâmicos (*out sample*).

Os índices calculados são o R^2 , MAE (mean absolute error), MSE (mean square error). Todos são índices de desempenho de modelos citados em literatura.

O R^2 é um índice que mede o quanto o modelo encontrado se ajusta aos dados observados do sistema varia entre 0 e 1. O MAE retorna a média dos valores absolutos dos erros encontrados quando se compara saída do modelo e saída do sistema. O MSE é semelhante ao MAE, porém é mais preciso, pois não mascara a variância, ao utilizar o quadrado dos erros, problema ocorrido no MAE por utilizar a função modular.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{obs}(i) - y_{calc}(i))^2}{\sum_{i=1}^n (y_{obs}(i) - \overline{y_{obs}(i)})^2} \quad MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_{obs}(i) - y_{calc}(i)|}{n} \quad MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{obs}(i) - y_{calc}(i))^2}{n}$$

Sendo y_{obs} os valores observados da saída do sistema, y_{calc} os valores calculados na saída do modelo e n o número de amostras utilizadas.

Tabela 3. Tabela dos índices de desempenho calculados para o modelo ajustado, aplicado aos diferentes testes dinâmicos.

| Índices de desempenho do modelo ajustado | | | |
|--|--------|--------|--------|
| Teste dinâmico | R^2 | MSE | MAE |
| Teste 1 (validação) | 0,9726 | 2,4940 | 0,3923 |
| Teste 2 | 0,9979 | 0,1088 | 0,1667 |
| Teste 3 | 0,9981 | 0,0362 | 0,1287 |
| Teste 4 | 0,9717 | 0,0042 | 0,0539 |
| Teste 5 | 0,1203 | 0,0086 | 0,0856 |

7- CONCLUSÕES

Os modelos auto-regressivos se apresentam como ferramenta de grande potencial na modelagem de sistemas dinâmicos multivariáveis, haja vista o desempenho do modelo encontrado sob a luz dos critérios aplicados.

Foi possível encontrar um modelo de ordem reduzida que apresenta um bom poder de generalização e extrapolação do comportamento do sistema estudado, isto fica evidente ao se verificar o bom ajuste aos dados não utilizados na etapa de estimação dos parâmetros. Com isso consegue-se contornar o problema do superdimensionamento do modelo, e obtém-se um modelo parcimonioso.

Cabe comentar a importância dos critérios de informação como o AIC, para determinar a ordem do modelo na qual um aumento da mesma não implica em melhoria do ajuste do mesmo aos dados.

O fato do conjunto de dados utilizado na estimação ser reduzido, sem perda de significância do comportamento do sistema, foi importante para obtenção do modelo parcimonioso.

Fica como sugestão para trabalhos futuros, investigação de modelos auto-regressivos dotados de componentes de média móvel (MA), sazonalidade (S), não linearidades (N). Investigar ainda a influência de novos testes na planta objetivando excitar dinâmicas ocultas do sistema. Para este fim o autor sugere os sinais de entrada do tipo PRBS (*Pseudo Random Binary Signals*).

A utilização de modelos ajustáveis a dados oriundos do processo garante modelos mais próximos da realidade, desde que estes dados sejam representativos da dinâmica do sistema.

8- REFERÊNCIAS

AGUIRRE, L. A. Introdução à Identificação de Sistemas Técnicos Lineares e Não Lineares Aplicadas a Sistemas Reais. 2000, UFMG – MG.

BARROSO, M. F. S.; SALDANHA R. R. e AGUIRRE, L. A., Comparação de Métodos Mono-Objetivo em Identificação Caixa-Cinza, 2002, TEMA: Publicação da Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional.

BOX, G. E. P.; JENKINS, G. M.; REINSEL, G. C., Time Series Analysis Forecasting and Control, 3^a ed., Editora Prentice Hall, 1994.

BRAVO, M. A. S., Métodos Matemáticos de Sistemas mediante Identificación Paramétrica, 2006. III Seminario Internacional de Aplicaciones de la Matemática, Lima.

CRESPO, L. S. Montagem Identificação e Modelamento de uma Torre de Destilação Piloto. 2000, Dissertação (Mestrado em Automação) – Universidade Federal do Espírito Santo, Vitória.

EHLERS, R. S., Análise de Séries Temporais, 2003. Departamento de Estatística, Universidade Federal do Paraná.

FURTADO, E. C., MENDES, E. M. A. M., NEPOMUCENO, E. G., SILVA, V. V. R. E., Identificação de Sistemas Dinâmicos Não-Lineares Contínuos Utilizando Modelos NARMAX: Estudo de Caso de um Forno a Arco Elétrico, 2002, Congresso Brasileiro de Automática, Rio Grande do Norte.

GOMIDE, R. Operações Unitárias Volume IV, 1988. *Edição do Autor*, São Paulo.

JÚNIOR, C. A. V.; BARBABELA, B. A., Análise exploratória da aplicação de modelos auto-regressivos na previsão do comportamento dos preços de derivados de petróleo. 2006, IX SEMEAD – Seminários em Administração FEA-USP, São Paulo, SP, Brasil.

JURADO F.; CARPIO J., Modelado de la Micro-Turbina em el Sistema de Distribución mediante Estructuras NARX, 2003, Revista IEEE América Latina.

MORAES, C. A. S. de, Modelagem, Controle e Minimização do Consumo de Energia de uma Unidade de Fracionamento de Nafta. 2004, Dissertação de Mestrado, FEEC/UNICAMP, Campinas/SP.