

IDENTIFICAÇÃO DE SISTEMAS NÃO-LINEARES DINÂMICOS UTILIZANDO MODELOS AUTOREGRESSIVOS APLICADO EM UM PROCESSO DE NEUTRALIZAÇÃO DE pH

I.C. FRANCO¹, A. S. MOTA¹, M. R. MENEZES¹

¹ Centro Universitário da FEI, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: icfranco@fei.edu.br

RESUMO – Neste trabalho propõe-se um estudo de identificação de sistemas aplicado a um processo de neutralização de pH. Modelos auto regressivos (ARX, ARMAX e NARX) foram utilizados para o desenvolvimento de modelos de predição do pH efluente de um sistema de neutralização. O conjunto de dados utilizados para identificar o processo foi obtido experimentalmente em uma planta piloto de neutralização utilizando-se soluções de NaOH e HCl com concentrações de $4,0 \times 10^{-3}$ M. Os modelos desenvolvidos demonstraram serem capaz de prever a 1 e 5 passos à frente o valor do pH do efluente do reator. Índices de desempenho *fit* (porcentagem da variação da saída em relação ao valor real) superiores a 98 % foram alcançados para predições 1 passo à frente e de aproximadamente 92 % para 5 passos à frente para os modelos ARX, ARMAX e NARX. Assim, os modelos ARX e ARMAX apresentam potencial para serem utilizados em controladores MPC.

1. INTRODUÇÃO

Pode-se determinar um modelo matemático por meio de uma análise fenomenológica do sistema ou por meio de identificação de sistema. Quando os fenômenos que descrevem o sistema são bem definidos modelos fenomenológicos são utilizados, porém, quando o sistema é muito complexo sendo os fenômenos que o descreve de difícil entendimento realiza-se uma modelagem por meio de identificação de sistema. A identificação de sistema é a metodologia de criação de modelos matemáticos de sistemas dinâmicos com base em dados de entrada e saída (Girault et al., 2010) e pode compreender uma variedade de modelos que descrevem o sistema assim como diferentes critérios de seleção e parametrização (Diversi et al, 2010).

Sistema de neutralização de pH é um dos processos mais importante nas indústrias química, biológica e petroquímica. O desenvolvimento de modelos de neutralização de pH iniciou-se com Kramers (1956) e Geerlings (1957) a partir de estudos realizados em um reator CSTR. Um rigoroso estudo da dinâmica de sistemas de neutralização de pH em reatores CSTR foi apresentado por McAvoy *et al.* (1972) e reforçado por Gustafsson (1982) e Gustafsson e Waller (1983). Desde então, a modelagem de sistemas de neutralização do pH se tornou parte fundamental de projetos de controladores destes sistemas.

Muitos trabalhos de identificação de sistemas não lineares utilizando modelos auto regressivos vem sendo realizados para descrever processos como coluna de destilação, neutralização de pH, processos biológicos, amplificadores de potência, sistemas de potência de vapor, sistemas de refrigeração dentre outros (Eskinat, et al., 1991; Kalafatis, et al., 1995; Hunter e Korenber, 1986; Roll, et al., 2005; Kim e Konstantinou; Zhao et al., 2014; Guo et al., 2014). Neste trabalho realizou-se a identificação de um sistema de neutralização de pH por meio modelos auto regressivos ARX, ARMAX e NARX.

1.1. Modelos AR (Auto-regressivos)

Segundo Aguirre (2007), em identificação de sistemas, uma representação muito útil, é o modelo *auto-regressivo* (AR) que é representado pela Equação 1:

$$y(k) = a_1 y(k-1) + a_2 y(k-2) + \dots + a_n y(k-n_y) \quad (1)$$

Representação em tempo discreto (Aguirre, 2007): Considere o seguinte modelo geral representado pela Equação 2:

$$A(q)y(q) = \frac{B(q)}{F(q)}u(k) + \frac{C(q)}{D(q)}v(k) \quad (2)$$

sendo q^{-1} o operador de atraso, de forma que $y(k)q^{-1} = y(k-1)$, $v(k)$ ruído branco e $A(q)$, $B(q)$, $C(q)$, $D(q)$ e $F(q)$ polinômios definidos pelas Equações 3-7:

$$A(q) = 1 - a_1 q^{-1} - \dots - a_{n_y} q^{-n_y} \quad (3)$$

$$B(q) = b_1 q^{-1} + \dots + b_{n_u} q^{-n_u} \quad (4)$$

$$C(q) = 1 + c_1 q^{-1} + \dots + c_{n_v} q^{-n_v} \quad (5)$$

$$D(q) = 1 + d_1 q^{-1} + \dots + d_{n_d} q^{-n_d} \quad (6)$$

$$F(q) = 1 + f_1 q^{-1} + \dots + f_{n_f} q^{-n_f} \quad (7)$$

Modelos ARX (Auto-regressivo com entrada exógena): O modelo ARX, Equação 8, pode ser obtido substituindo na Equação 2, $C(q) = D(q) = F(q) = 1$ sendo $A(q)$ e $B(q)$ polinômios arbitrários:

$$A(q)y(k) = B(k)u(k) + v(k) \quad (8)$$

Quando existe no modelo p saídas e r entradas este é considerado multivariável e pode ser escrito conforme Equação 9:

$$y(k) = A_1 y(k-1) \dots + A_{n_y} y(k-n_y) + B_1 u(k-1) \dots + B_{n_u} u(k-n_u) + e(k) \quad (9)$$

sendo $A_i \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $B_i \in \mathbb{R}^{p \times r}$ e $\mathbf{y}(k) = [y_1(k) \ y_2(k) \ \dots \ y_p(k)]^T$, $\mathbf{u}(k) = [u_1(k) \ u_2(k) \ \dots \ u_r(k)]^T$, $\mathbf{e}(k) = [e_1(k) \ e_2(k) \ \dots \ e_p(k)]^T$.

$A(q)$ e $B(q)$ na Equação 8 podem ser definidas como matrizes em que cada elemento é um polinômio, assim: $A(q) = I - A_1 q^{-1} - \dots - A_{n_y} q^{-n_y}$; $B(q) = B_1 q^{-1} + \dots + B_{n_u} q^{-n_u}$.

Modelo ARMAX (Auto-regressivo com média móvel e entradas exógenas): O modelo ARMAX, Equação 10, pode ser obtido substituindo na Equação 2, $D(q) = F(q) = I$ sendo $A(q)$, $B(q)$ e $C(q)$ polinômios arbitrários:

$$A(q)y(k) = B(k)u(k) + C(q)v(k) \quad (10)$$

Modelo NARX (Auto-regressivo não-linear com variáveis exógenas): Os modelo NARX são modelos discretos no tempo que explicam o valor de saída $y(k)$ em função de valores prévios de saída e de entrada e pode ser representado pela Equação 11:

$$y(k) = F[y(k-1), \dots, y(k-n_y), u(k-\tau_d), \dots, u(k-n_u)] \quad (11)$$

2. METODOLOGIA

2.1 Planta piloto

Para a realização do experimento utilizou-se o sistema de neutralização de pH disponível no Centro Universitário da FEI, Figura 1.

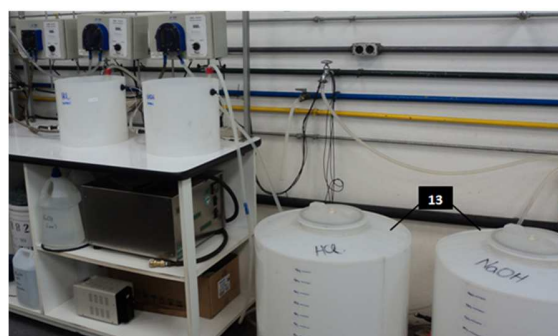
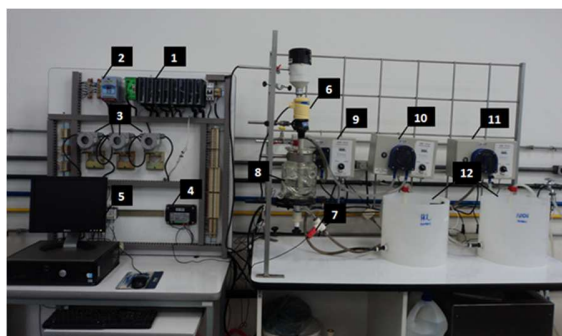


Figura 1 – Planta piloto de neutralização de pH: 1) módulo de automação de comunicação; 2) inversor de frequência; 3) conversores *Fieldbus*; 4) conversor de pH; 5) micro computador; 6) sensor de nível; 7) sensor de pH; 8) reator; 9) bomba de ácido; 10) bomba de base; 11) bomba de efluente; 12) tanques pulmão de ácido e base; 13) reservatório de ácido e de base

2.2 Identificação do sistema

Para o desenvolvimento do modelo por meio de identificação de sistemas realizou-se ensaios a fim de obter dados experimentais para o treinamento (R1) e validação dos modelos (R2). Para

todos os ensaios utilizou-se soluções de NaOH e HCl com concentração igual a $4 \times 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$. Os modelos desenvolvidos são modelos MISO (*mult-input single-output*) onde as entradas são u1: vazão de solução básica (NaOH) e u2: vazão de solução ácida (HCl) e a saída é y1:pH.

Para a obtenção dos dados para treinamento e validação dos modelos, realizou-se um estudo do comportamento dinâmico do sistema para a determinação do tempo de acomodação (t_a) obtendo $t_a = 400 \text{ s}$ para perturbações na vazão de NaOH e $t_a = 500 \text{ s}$ para perturbações na vazão de HCl. Uma vez determinado o tempo de acomodação determinou-se o tempo de mudança (t_{sw}) nos sinais das variáveis u1 e u2 por meio da Equação 12 (SEBORG *et al.*, 2004):

$$t_{sw} = t_a/3 \quad (12)$$

Assim, o tempo de mudança (t_{sw}) para as perturbações na vazão de NaOH foi igual a 133 s e na vazão de HCl igual a 167 s. Com a definição dos tempos de mudança nos sinais das variáveis de entrada u1 e u2 foram realizados os ensaios R1 e R2.

ENSAIO R1: Neste ensaio, representado pela Figura 2 (a e b), fixou-se a vazão de HCl variando a vazão de NaOH a cada 133 s e posteriormente variando, a cada 167 s, a vazão de HCl e fixando a vazão de NaOH. **ENSAIO R2:** Para a validação dos modelos realizou-se um ensaio variando as vazões de NaOH e HCl separadamente, com base nos tempos de mudança (t_{sw}) de cada vazão, conforme apresentado na Figura 2 (c e d).

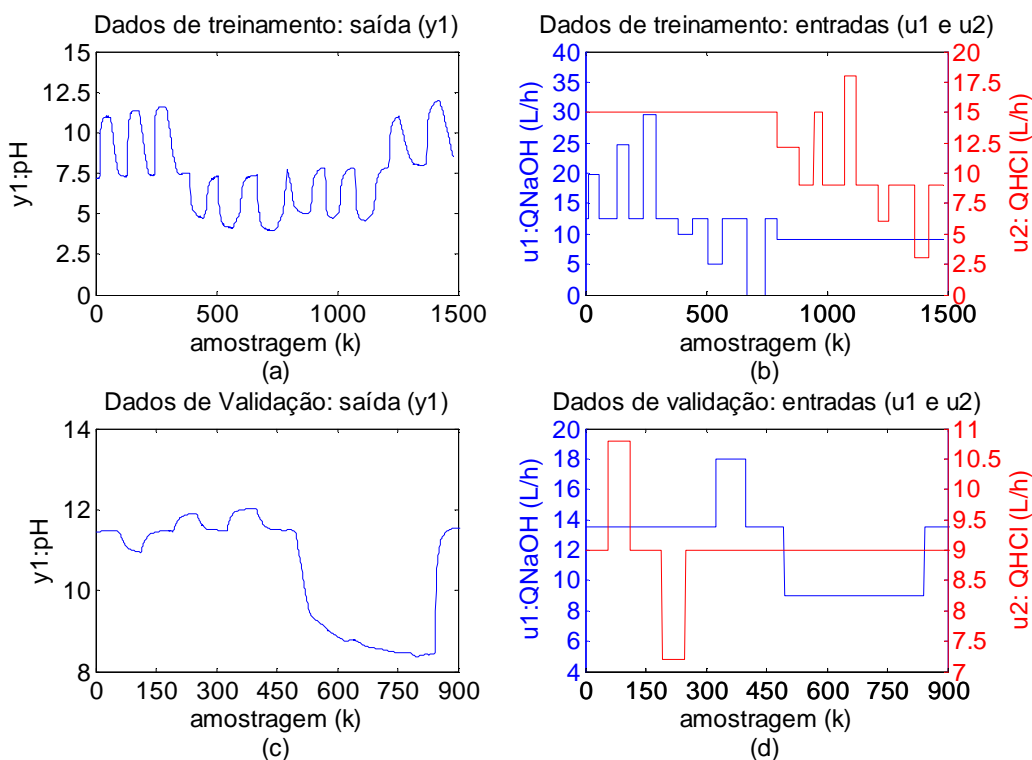


Figura 2 – Dados de treinamento e validação dos modelos auto regressivos

2.2.1 Seleção da estrutura de modelos: Um dos aspectos importantes na determinação da estrutura de modelos é a escolha da ordem do modelo. Por exemplo, para modelos lineares pode-se utilizar o *critério de informação de Akaike (AIC)* (AKAIKE, 1974) definido como (AGUIRRE, 2007):

$$AIC(n_{\theta}) = N \ln[\sigma_{\text{erro}}^2(n_{\theta})] + 2n_{\theta} \quad (12)$$

onde: N é o número de dados, $\sigma_{\text{erro}}^2(n_{\theta})$ é a variância do erro de modelagem (erro de predição de um passo à frente) e $n_{\theta} = \dim[\theta]$ é o número de parâmetros do modelo.

Com o auxílio do MATLAB®, obteve-se as estruturas ARX: Critério MDL (na=[2], nb=[4 1] e nk=[1 1]); Critério AIC e melhor ajuste (na=[4], nb=[4 4] e nk=[1 1]).

```
var=arxstruc(dados_treinamento,dados_de_validação, struc([na] [nb] [nk]));
selstruc(var);
```

3. RESULTADOS

Os modelos ARX, ARMAX e NARX para predição do pH do efluente do sistema de neutralização foram desenvolvidos no MATLAB® utilizando-se, respectivamente, os comandos:

```
m = arx(dados_treinamento,[na nb nk])
m = armax(dados_treinamento,[na nb nc nk])
m = nlarx(dados_treinamento,[na nb nk], sigmoidnet('num',10))
```

A validação dos modelos foi realizada com predição a 1 passo à frente, para a verificação do desempenho do modelo, e com predição a 5 passos à frente para a verificação da possibilidade de utilização do modelo em controladores MPC (Controle Preditivo baseado em Modelo). A verificação do desempenho dos modelos foi realizado por meio do comando (MATLAB®):

```
compare(dados_validação, modelo, passo_de_predição)
```

O desempenho dos modelos AR's é avaliado por meio da porcentagem da variação da saída em relação ao valor real (*fit*) que é representado pela Equação 13.

$$fit = \left[\frac{1 - \text{norm}(y - y_m)}{\text{norm}(y_m - \bar{y}_m)} \right] \times 100\% \quad (13)$$

3.1 Modelo de predição ARX

O modelo MISO utilizando a estrutura ARX (na=[4], nb=[4 4] e nk=[1 1]) para predição do pH (y_1) tendo como variáveis de entrada as vazões de NaOH (u_1) e de HCl (u_2) pode ser escrito explicitamente por: $A(q)y(t) = B(q)u(t) + e(t)$, onde:

$$\begin{aligned} A(q) &= 1 - 1,51300q^{-1} + 0,47900q^{-2} - 0,02776q^{-3} + 0,06338q^{-4} \\ B_1(q) &= 0,00438q^{-1} + 0,04486q^{-2} - 0,03619q^{-3} - 0,01065q^{-4} \\ B_2(q) &= 0,00367q^{-1} - 0,00866q^{-2} - 0,00975q^{-3} + 0,01369q^{-4} \end{aligned}$$

A validação do modelo ARX é apresentada na Figura 3.

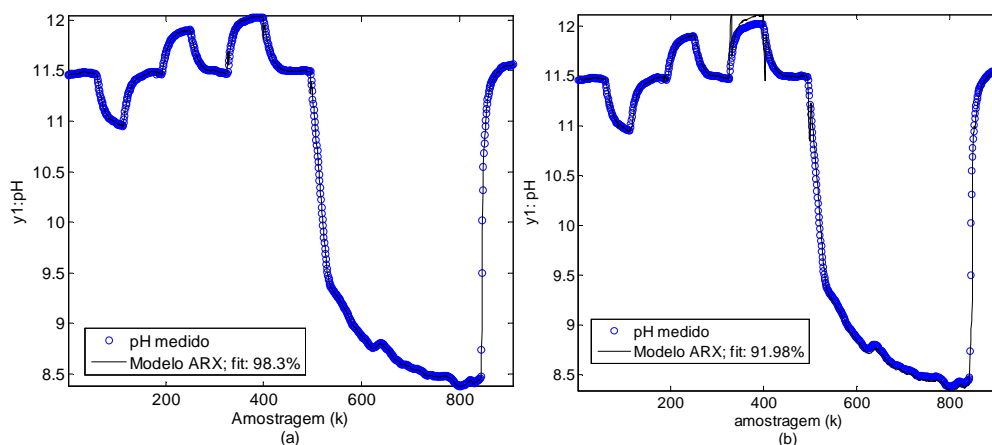


Figura 3 – Predição do pH utilizando estrutura ARX: a) predição 1 passo à frente; b) predição 5 passos à frente.

3.2 MODELO DE PREDIÇÃO ARMAX

O modelo MISO ARMAX ($n_a=[4]$, $n_b=[4\ 4]$, $n_c=[1]$ e $n_k=[1\ 1]$) para predição do pH pode ser representado explicitamente como: $A(q)y(t) = B(q)u(t) + C(q)e(t)$, onde:

$$\begin{aligned} A(q) &= 1 - 2,27500q^{-1} + 1,67000q^{-2} - 0,42680q^{-3} + 0,03217q^{-4} \\ B1(q) &= 0,00403q^{-1} + 0,04176q^{-2} - 0,07664q^{-3} + 0,03124q^{-4} \\ B2(q) &= 0,00395q^{-1} - 0,01186q^{-2} - 0,01287q^{-3} + 0,02070q^{-4} \\ C(q) &= 1 - 0,76460q^{-1} \end{aligned}$$

Na Figura 4 é apresentada a validação do modelo ARMAX.

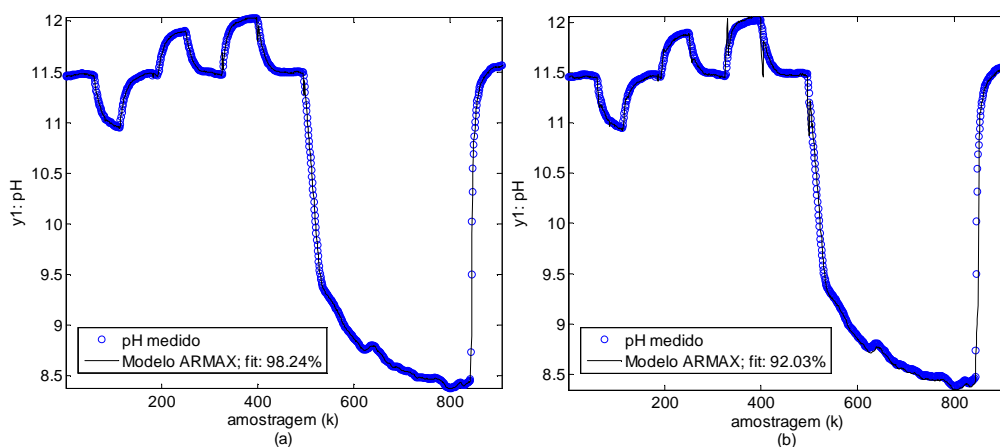


Figura 4 – Predição do pH utilizando estrutura ARMAX: a) predição 1 passo à frente; b) predição 5 passos à frente.

3.3 MODELO DE PREDIÇÃO NARX

O modelo MISO NARX ($n_a=[3]$, $n_b=[3 \ 3]$ e $n_k=[1 \ 1]$), para predição do pH, foi desenvolvido utilizando-se o estimador da não-linearidade do tipo *sigmoidnet* com 10 termos de expansão da rede sigmoide. A função sigmoide da rede é baseada na função representada pela Equação 14:

$$F(x) = (x - r) + a_1 f((x - r)Qb_1 - c_1) + \dots + a_n f((x - r)Qb_n - c_n) + d \quad (14)$$

onde: P e Q são matrizes de projeção ($m \times p$); r é um vetor ($1 \times m$) que representa o valor médio do vetor regressor calculado a partir de dados de estimativa; d, a_k e c_k são parâmetros; L é um vetor ($p \times 1$) e b_k são vetores ($q \times 1$) sendo q o número de componente de x usado na função sigmoide. Sendo: f é a função sigmoide definida pela Equação 15:

$$f(z) = \frac{1}{e^z + 1} \quad (15)$$

A validação do modelo NARX é representada pela figura 5.

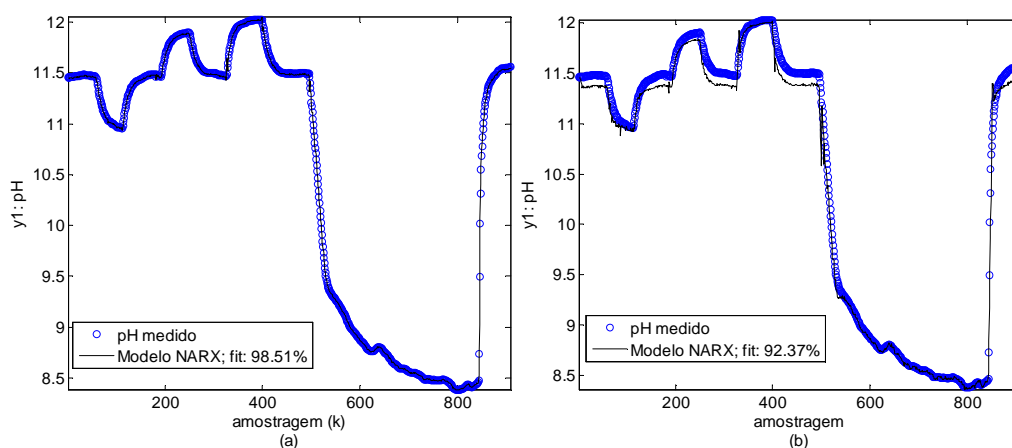


Figura 5 – Predição do pH utilizando estrutura NARX: a) predição 1 passo à frente; b) predição 5 passos à frente.

4. CONCLUSÃO

Os Modelos Auto regressivos desenvolvidos apresentaram bom desempenho na predição do pH do efluente do reator de neutralização. Para os modelos ARX, ARMAX e NARX foram obtidos *fit* (coeficiente de desempenho adotado) superiores a 98 % quando realizada a simulação com valores reais com predição a 1 passo à frente. Para as simulações 5 passos à frente os modelos AR's apresentaram *fit* de aproximadamente 92 % que representa também um bom desempenho para os modelos. A simulação 1 passo à frente é importante quanto a validação do modelo e a simulação 5 passos à frente demonstra se os modelos desenvolvidos tem potencial para serem utilizados em controles MPC. Assim, os modelos

ARX e ARMX desenvolvidos apresentam potencial para a utilização em controladores MPC. O desenvolvimento do Modelo NARX foi apenas para comparação com os modelos lineares.

5. REFERÊNCIAS

- AGUIRRE, L. A.; *Introdução à identificação de sistemas*. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2007.
- AKAIKE, H. A new look at the statistical model identification. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 19(6), p. 716-723, 1974.
- DIVERSI, R.; GUIDORZI, R.; SOVERINI, U. Identification of ARX and ARARX Models in the Presence of Input and Output Noises. *European Journal of Control*, 16(3), p. 242-255, 2010.
- ESKINAT, E.; JOHNSON, S.; LUYBEN, W. L. Use of Hammerstein models in identification of nonlinear systems. *AIChE Journal*, 37(2), p. 255-268, 1991.
- GIRAULT, M.; VIDECOQ, E.; PETIT, D. Estimation of time-varying heat sources through inversion of a low order model built with the modal identification method from in-situ temperature measurements. *International Journal. Heat Mass Transfer*, 53, p. 206-219, 2010.
- GEERLINGS, M. W. *Plant and Process Characteristics*. London: Butterworths Science Publications, pp. 101-127, 1957.
- GUO, Y.; NAZARIAN, E.; KO, J.; RAJURKAR, K. Hourly cooling load forecasting using time-indexed ARX models with two-stage weighted least squares regression. *Energy Conversion and Management*, 80, p. 46-53, 2014.
- GUSTAFSSON, T. K. Calculation of the pH value of a mixture solutions an illustration of the use of chemical reaction invariants. *Chemical Engineering Science*, 37(9), pp. 1419-1421, 1982.
- GUSTAFSSON, T. K., WALLER, K. V. Dynamic modeling and reaction invariant control of pH. *Chemical Engineering Science*, 38(3), pp. 389-398, 1983.
- HUNTER, I. W.; KORENBERG, M. J. The identification of nonlinear biological systems: Wiener and Hammerstein cascade models. *Biological Cybernetics*, 55, pp. 136-144, 1986.
- KALAFATIS, A.; ARIFIN, N.; WANG, L.; CLUETT, W. R. A new approach to the identification of pH processes based on the Wiener model. *Chemical Engineering Science*, 50(23), pp. 3693-3701, 1995.
- KRAMER, C., Y. Extension of Multiple Range Test to Group Means with Unequal Numbers of Replications. *Biometrics*, 12(3), pp. 307-310, 1956.
- KIM, J.; KONSTANTINOU, K. Digital predistortion of wideband signals based on power amplifier model with memory. *IEE Electronics Letters*, 37(23), p. 1417-1418, 2001.
- MCAVOY, T. J., HSU, E., LOWENTHALS, S. Dynamics of pH in controlled stirred tank reactor. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 11(1), pp. 68-78, 1972.
- ROLL, J.; NAZIN, A.; LJUNG, L. Nonlinear system identification via direct weight optimization. *Automatica*, 41(3), pp. 475-490, 2005.
- SEBORG, D. E., MELLICHAMP, D. A., EDGARD, T. F., DOYLE III, F. J. *Chemical Process Control*. New York: Wiley, 2004.
- ZHAO, J.; MA, X.; ZHAO, S.; FEI, J. Hammerstein identification of supercharged boiler superheated steam pressure using Laguerre-Fuzzy model. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 70, p. 33-39, 2014.