

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS EM MODELOS COM CICLO
LIMITE**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Andressa Apio

Porto Alegre

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS EM MODELOS COM CICLO

LIMITE

Andressa Apio

Dissertação de Mestrado apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia

Área de concentração: Pesquisa e Desenvolvimento de Processos

Linha de Pesquisa: Projeto, Simulação, Modelagem, Controle e Otimização de Processo Químicos e Bioprocessos.

Orientador: Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Co-orientadora: Dra. Viviane Rodrigues Botelho

Porto Alegre

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Estimação de Parâmetros em Modelos com Ciclo Limite*, elaborada por Andressa Apio, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

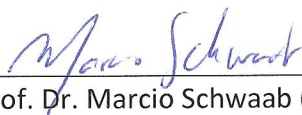
Comissão Examinadora:



Prof. Dra. Nina Paula Gonçalves Salau (CEQ/UFSM)



Prof. Dr. André Rodrigues Muniz (DEQUI/UFRGS)



Prof. Dr. Marcio Schwaab (DEQUI/UFRGS)

Resumo

Sistemas não-lineares podem apresentar um comportamento periódico, no qual o ponto de equilíbrio no diagrama de fase, quando se plota uma variável de estado versus outra variável de estado, é substituído por uma órbita circular, denominada ciclo limite. A estimação de parâmetros desses sistemas não é uma tarefa simples, devido a não convexidade do problema de otimização. A fim de estimar parâmetros em tais modelos, este trabalho propõe um método que quantifica o comportamento oscilatório do sistema em função do valor dos parâmetros, adicionando essa informação, na forma de uma penalidade à função objetivo do problema de otimização associado reduzindo a não convexidade do problema, conduzindo o modelo a produzir o comportamento oscilatório. Para avaliar a metodologia, primeiramente foi estudado o modelo de Jöbses et al. (1986), onde foi comparada metodologia proposta com abordagens disponíveis na literatura. A metodologia proposta também foi aplicada a modelos relativos à produção de petróleo *offshore*, onde foram considerados: o modelo simplificado de Meglio et al. (2009), com três estados dinâmicos, representando apenas a região do sistema *pipeline/riser*, o modelo estendido de Diehl et al. (2017), com seis estados dinâmicos, representando a dinâmica das regiões *anular/tubing* e *pipeline/riser* e, por fim, a aplicação real, onde foram estimados os parâmetros desse último modelo com os dados de planta de produção *offshore* de uma plataforma de petróleo nacional. Os resultados mostraram que o método proposto foi capaz de garantir o comportamento oscilatório, diferentemente das outras abordagens, reduzindo a não convexidade do problema de estimação e forçando o comportamento dinâmico do sistema a produzir o ciclo limite, mesmo quando a otimização fosse inicializada a partir de valores fora da região de ciclo limite.

Abstract

Non-linear systems may present a periodic behavior, where the phase diagram equilibrium point, obtained by plotting a state variable versus another state variable, is replaced by a circular orbit called limit cycle. The parameters estimation in these systems is not an easy task due to the non-convexity of the optimization problem. In order to estimate parameters in these models, this work proposes a method that quantifies the system oscillatory behavior in function of the parameters values, adding this information in the form of a penalty to the objective function of the associated optimization problem, reducing the non-convexity and leading the model to produce an oscillatory behavior. Firstly, to evaluate the methodology, it was studied the Jöbses *et al.* (1986) model, where the proposed methodology was compared to the approaches available in the literature. The methodology was also applied to models related to offshore oil production, where it was considered: the simplified Meglio *et al.* (2009) model, with three dynamical states, representing only the pipeline/riser region, the Diehl *et al.* (2017) extended model, with six dynamical states, representing the dynamics of the anular/tubing and pipeline/riser region and, lastly, to a real application, where the parameters were estimated with the Diehl *et al.* (2017) model using real data obtained from a national oil platform. The results showed that the proposed approach was able to ensure the oscillatory behavior, differently of other approaches, reducing the non-convexity of the estimation problem and forcing the dynamical behavior of the system to produce the limit cycle, even when the optimization was initialized with values outside the region of the limit cycle.

Agradecimentos

À Universidade Federal do Rio Grande do Sul e ao Departamento de Engenharia Química pela estrutura oferecida e excelente formação.

Ao meu orientador Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler pela confiança, paciência, e orientação desde o primeiro contato. Certamente sem o seu incentivo, não teria chegado ao fim desta etapa.

À minha coorientadora Prof. Dra. Viviane Rodrigues Botelho, a qual eu considero uma grande amiga, por toda a ajuda, atenção, disponibilidade e conselhos dados nos altos e baixos do desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus pais José Carlos e Zelfa e ao meu irmão Anderson, por acreditarem em mim e me incentivarem nos caminhos que escolhi.

Ao Igor, pela convivência, carinho, paciência e generosidade em todos os momentos que passamos juntos. Além disso, por me ter me desafiado a ficar na linha tênue entre conforto e comodismo, me fazendo uma pessoa melhor.

A todos os queridos amigos do GIMSCOP, que me receberam de braços abertos e que tornam o meu dia a dia mais divertido e descontraído. Agradeço, em especial, ao Denilson, que considero como um irmão.

Ao pessoal do projeto das golfadas, principalmente ao Giovani e ao Leonardo pela disponibilidade em me auxiliarem e pela eficiência no compartilhamento das informações sobre os poços. À Marthina pela amizade e carinho nestes últimos e importantes meses.

Às colegas de mestrado e amigas Caroline Machado e Débora Strossi pela amizade, conselhos e materiais divididos.

À Caroline Weber e Taís Garlet, minhas irmãs de alma, pela compreensão, carinho e por serem tão indispensáveis na minha vida. Às minhas amadas engenheiras Andressa Marchesan, Karen, Martina, Julia e Tanisa por serem minha segunda família e estarem sempre presentes apesar da distância. Agradeço também ao meu afilhado do coração, Raoli, pela valiosa amizade depois de todos esses anos.

Às minhas eternas professoras do ensino médio, Tatá Gouveia e Silvia Beber, por serem e terem sido meus exemplos de maturidade profissional e pessoal.

E, por fim, a todas as pessoas que cruzaram por minha vida e que, de alguma forma, contribuíram para a formação do meu caráter e/ou me motivaram a evoluir psicológica e intelectualmente.

“Give it all and ask for no return and very soon you'll see and you'll begin to learn that it's alright.”

(Black Sabbath – It's alright)

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução	1
1.1 Motivação.....	1
1.2 Objetivos do trabalho.....	3
1.3 Estrutura da dissertação	3
Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica	4
2.1 Bifurcação.....	4
2.2 Análise do plano de fase e o ciclo limite	6
2.3 A bifurcação Hopf.....	7
2.4 Métodos para estimação de parâmetros em modelos com bifurcação Hopf	11
Capítulo 3 – Metodologia	14
3.1 Critério ζ -Hopf	14
3.2 Adaptação do método de penalidade exata.....	16
3.3 Função objetivo.....	18
3.4 Estimação dos parâmetros utilizando o método <i>single-shooting</i>	19
Capítulo 4 – Estudo de caso	21
4.1 Métricas para otimização.....	21
4.1.1 Abordagens para a otimização do problema com ciclo limite	21
4.1.2 Avaliação numérica dos resultados	22
4.1.3 Intervalo de confiança dos parâmetros.....	23
4.2 Modelo de Jöbbses et al. (1986)	24
4.2.1 Modelagem matemática	24
4.2.2 Cenários.....	26
4.2.3 Análise da função objetivo	28
4.2.4 Resultados e discussão	30
4.2.5 Validação	33
Capítulo 5 – Aplicação na produção de petróleo <i>offshore</i>	36
5.1 Modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009).....	36
5.1.1 Modelagem matemática	37
5.1.2 Cenários.....	39
5.1.3 Análise da função objetivo	40
5.1.4 Resultados e discussão	41
5.2 <i>Fast Offshore Well Model (FOWM)</i>	45
5.2.1 Modelagem matemática	46
5.2.2 Cenários.....	51
5.2.3 Análise da função objetivo	51
5.2.4 Resultados e discussão	52
5.3 Aplicação do modelo FOWM utilizando dados reais	56
5.3.1 Cenários.....	56
5.3.2 Resultados e discussão	57
Capítulo 6 – Considerações Finais	62
6.1 Conclusões.....	62

6.2 Sugestões para trabalhos futuros	63
Referências	64
Apêndice A.....	68
A.1 Análise do plano de fase	68
A.1.1 Plano de fase de nós	68
A.1.2 Plano de fase de selas.....	69
A.1.3 Plano de fase foco.....	69
A.2 Análise de bifurcação	70
A.2.1 Bifurcação ponto limite (turning point).....	70
A.2.2 Bifurcação transcritical (transcritical bifurcation)	71
A.2.3 Bifurcação forquilha (pitchfork bifurcation).....	72
A.3 Funções teste de bifurcação	74

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1: Relação entre as regiões de operação na produção de petróleo em relação à máxima produção, retorno financeiro e valor presente. Adaptado de Gerevini (2017).	2
Figura 2.1: Surgimento do ciclo limite na produção de petróleo em gráfico de a) variável de saída <i>versus</i> tempo e b) análise de plano de fase de variável de saída <i>versus</i> outra variável de saída e entrada. Adaptado de Gerevini (2017).	6
Figura 2.2: Transição de soluções estacionárias para periódicas exibida em um a) diagrama de bifurcação e em b) gráfico da saída <i>versus</i> o tempo para a produção de petróleo. Adaptado de Gerevini (2017).	7
Figura 2.3: Geração dos ciclos limites em $\lambda = 0$ (plano de fase dependente do parâmetro). Adaptado de Seydel (2010).	8
Figura 2.4: Geração de ciclos limites no ponto Hopf; dependência do tempo e do parâmetro. Adaptado de Seydel (2010).	8
Figura 2.5: Plano complexo dos autovalores; caminho dos autovalores relacionados à bifurcação Hopf em relação à abertura da válvula <i>choke</i> na produção de petróleo. Adaptado de Gerevini (2017).	9
Figura 2.6: Comportamento de estabilidade local de bifurcações Hopf. Adaptado de Seydel (2010).	10
Figura 3.1: Comportamento da a) resposta da saída y para diferentes valores de ζ e b) penalidade φ ao longo das iterações na estimação de parâmetros.	18
Figura 3.3: <i>Loop</i> interno da metodologia proposta para a estimação dos parâmetros.	20
Figura 4.1: Relação de variâncias entre os dados simulados e experimentais.	23
Figura 4.2: Perturbação na concentração de alimentação de substrato.	27
Figura 4.3: Distúrbios na taxa de diluição para o (a) cenário B e o (b) cenário C.	28
Figura 4.4: Gráfico da função objetivo do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 5e3$, (c) $\varphi = 1e4$ e (d) $\varphi = 1,5e4$	29
Figura 4.5: Cenário A do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) abordagem 1: sem penalidade e b) abordagem 2: com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	31
Figura 4.7: Cenário C do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) abordagem 1: sem penalidade e b) abordagem 2: com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	31
Figura 4.8: Cenário D do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) sem penalidade e (b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	32
Figura 4.9: Planos de fase para os cenários A, B, C e D do modelo de Jöbses et al. (1986).	33
Figura 4.10: Distúrbio na taxa de diluição para a etapa de validação para o modelo de Jöbses et al. (1986).	34
Figura 4.12: Validação do modelo de Jöbses et al. (1986) para o (a) cenário C e (b) cenário D. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	35
Figura 5.1: Diagrama esquemático do sistema. Fonte: Meglio <i>et al.</i> (2009).	37

Figura 5.2: Gráfico da função objetivo do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 10$, (c) $\varphi = 1e4$ e (d) $\varphi = 1e5$.	41
Figura 5.3: Cenário A do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	42
Figura 5.4: Cenário B do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	43
Figura 5.5: Cenário C do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados experimentais são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	43
Figura 5.6: Cenário D do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	44
Figura 5.7: Planos de fase para os cenários A, B, C e D do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009).	45
Figura 5.8: Sistema da produção de óleo e gás no mar modelado pelo FOWM. Retirado de Diehl <i>et al.</i> (2017).	46
Figura 5.9: Gráfico da função objetivo do FOWM para a (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 1e4$, (c) $\varphi = 1e8$ e (d) $\varphi = 1e12$.	52
Figura 5.10: Cenário A do FOWM sem penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	53
Figura 5.11: Cenário A do FOWM com penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	54
Figura 5.12: Cenário B do FOWM sem penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	54
Figura 5.13: Cenário B do FOWM com penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.	55
Figura 5.14: Planos de fase para os cenários A e B do modelo FOWM.	56
Figura 5.15: Entradas no modelo real do FOWM da abertura da válvula <i>choke</i> .	57
Figura 5.16: Resultados utilizando a metodologia proposta para o cenário A do FOWM sem penalidade (linha verde) e com penalidade (linha vermelha) utilizando dados reais (linha azul).	58
Figura 5.17: Resultados obtidos por Diehl <i>et al.</i> (2017) (linha vermelha) para o mesmo conjunto de dados reais (Azul).	59
Figura 5.18: Planos de fase para o cenário A do modelo FOWM utilizando dados reais.	60
Figura A.1: Nó estável no plano de fase para o caso não-linear (autovalores são pontilhados). Fonte: Seydel (2010).	68
Figura A.2: Sela em um plano de fase (autoespaço é indicado pelo seu autovalor μ). Fonte: Seydel (2010).	69
Figura A.3: Mudança de estabilidade do foco em um plano de fase. Fonte: Seydel (2010).	70
Figura A.4: Bifurcação ponto limite. Fonte: Seydel (2010).	70
Figura A.5: Estabilidade da bifurcação ponto limite. Fonte: Seydel (2010).	71

Figura A.6: Bifurcação transcritical. Fonte: Seydel (2010).....	72
Figura A.7: Bifurcação forquilha supercritical. Fonte: Seydel (2010).	73
Figura A.8: Bifurcação forquilha subcritical. Fonte: Seydel (2010).....	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1: Variáveis para resolução da matriz delimitada <i>Gbor</i>	13
Tabela 4.1: Valores originais para os parâmetros do modelo de Jöbbses et al. (1986).	26
Tabela 4.2: Cenários para a simulação do modelo de Jöbbses et al. (1986).	27
Tabela 4.3: Resultados dos erros quadráticos do modelo de Jöbbses et al. (1986) para todos os cenários e seus respectivos casos.	30
Tabela 4.4: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do modelo de Jöbbses et al. (1986) utilizando a abordagem 2.	32
Tabela 4.5: Resultados dos erros quadráticos e variâncias do modelo de Jöbbses et al. (1986) para todos os cenários e abordagem 2.	34
Tabela 5.1: Parâmetros do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009).	39
Tabela 5.2: Cenários para a simulação do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009).	39
Tabela 5.3: Resultados dos erros quadráticos do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) para os cenários e seus respectivos casos.	42
Tabela 5.4: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do modelo de Meglio <i>et al.</i> (2009) utilizando a abordagem 2.	44
Tabela 5.5: Parâmetros do <i>Fast Offshore Well Model</i>	50
Tabela 5.6: Cenários para os dados experimentais provenientes da simulação do FOWM.	51
Tabela 5.7: Resultados dos erros quadráticos do FOWM com dados experimentais simulados para os cenários e seus respectivos casos.	53
Tabela 5.8: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do FOWM utilizando dados experimentais simulados utilizando a abordagem 2.	55
Tabela 5.9: Cenários para os dados experimentais e reais provenientes da simulação do FOWM.	57
Tabela 5.10: Resultados dos erros quadráticos do FOWM com dados reais para o cenário A e seus respectivos casos.	58
Tabela 5.11: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do FOWM utilizando dados reais para a abordagem 2.	60

NOTAÇÃO E SIMBOLOGIA

y	vetor das saídas
x	vetor das entradas
t	tempo
T	determinado tempo decorrido
λ	parâmetro de bifurcação
μ	autovalores
G_{bor}	matriz delimitada
A	matriz do produto bialternado
B	matriz U da decomposição em valores singulares de A
C	matriz V da decomposição em valores singulares de A
D	matriz de zeros
p	polos de uma equação
ζ	fator de amortecimento
y_i^s	soluções estacionárias
g	função objetivo de mínimos quadrados
φ	parâmetro de penalidade
c_i	restrição do problema
F_{obj}	função objetivo
τ	tolerância
\hat{x}_i	predição do modelo
ns	número de amostras disponíveis
α	contribuição real do autovalor
β	contribuição imaginária do autovalor
MSE	erro quadrático médio
V_i	variância i
V_{sim}	variância simulada
V_{exp}	variância experimental
r_x	relação entre a variância simulada e experimental
s^2	estimativa da variância experimental
χ	probabilidade para intervalo de confiança
V_θ	matriz de covariância

θ_i	parâmetros do modelo
$\hat{\theta}_i$	valor do parâmetro estimado
v_i	variância para cada parâmetro i
tS	distribuição t-student
r_i	taxa de reação
B	matriz de sensibilidade
t_0	tempo inicial
t_n	tempo final
s^2	estimativa da variância experimental
s_{θ_i}	desvio padrão do parâmetro θ_i
C_{eo}	concentração de alimentação da biomassa E
C_{po}	concentração de alimentação do produto
D_f	taxa de diluição
K_S	constante de Monod
k_i	constante da taxa de reação
m_s	fator de manutenção baseado na formação de substrato
m_p	fator de manutenção baseado na formação de produto
Y_{Sx}	fator de rendimento da conversão de substrato em biomassa
Y_{Px}	fator de rendimento da conversão de biomassa em produto
m_{gb}	massa de gás na bolha alongada
m_{gr}	massa de gás no <i>riser</i>
m_{lr}	massa de líquido no <i>riser</i>
w_{gin}	vazão mássica de gás entrando no <i>riser</i>
w_{gout}	vazão mássica de gás saindo do <i>riser</i>
w_{lin}	vazão mássica de líquido entrando no <i>riser</i>
w_{gin}	vazão mássica de gás entrando no <i>riser</i>
ϵ	fração da vazão de gás
w_{out}	vazão mássica total
V_{eb}	volume da bolha alongada
V_{gr}	volume do gás no <i>riser</i>
V_r	volume do <i>riser</i>
p_{eb}	pressão na bolha acumulada
p_{rb}	pressão à montante da válvula virtual
p_{rt}	pressão no topo do <i>riser</i>
θ	inclinação do <i>riser</i>
A	área do corte transversal
ρ_l	densidade do líquido

p_s	pressão de separação
R	constante do gás
T	temperatura
M	massa molar do gás de elevação
g	constante de gravidade
D	diâmetro do <i>riser</i>
L	comprimento do <i>riser</i>
m_{lstill}	massa de mínima de líquido no <i>riser</i>
C_g	coeficiente de fluxo da bolha alongada
C_{out}	coeficiente de fluxo da <i>choke</i>
m_{ga}	massa de gás no anular
w_{gc}	vazão mássica de gás natural entrando no anular
w_{iv}	vazão mássica de gás natural através da válvula de injeção no <i>tubing</i>
m_{gt}	massa de gás no <i>tubing</i>
m_{lt}	massa de líquido no <i>tubing</i>
w_r	vazão mássica total proveniente do reservatório
w_{whg}	vazão mássica de gás saindo do <i>tubing</i>
w_{whl}	vazão mássica de líquido saindo do <i>tubing</i>
p_{tb}	pressão no ponto de injeção de elevação no <i>tubing</i>
p_{ai}	pressão no ponto de injeção de gás de elevação no anular
p_{tb}	pressão no ponto de injeção de elevação no <i>tubing</i>
p_{bh}	pressão no ponto de injeção de gás de elevação no <i>tubing</i>
p_r	pressão no reservatório
ρ_{ai}	massa específica do gás no anular
ρ_l	massa específica do óleo
α_{gt}	fração mássica de gás no <i>tubing</i>
α_l	fração mássica de líquido no <i>riser</i>
α_g	fração mássica de gás no <i>riser</i>
K_a	coeficiente de fluxo de válvula de injeção
K_w	coeficiente de fluxo da árvore de Natal
K_r	coeficiente de fluxo do reservatório
u	abertura da <i>choke</i>
V_a	volume do anular
ρ_{mr}	massa específica do líquido no <i>riser</i>

ρ_{mres}	massa específica de líquido no reservatório
ρ_{mt}	massa específica do líquido no <i>tubing</i>
ρ_{gt}	massa específica do gás no <i>tubing</i>
H_a	comprimento do anular
H_t	comprimento do <i>tubing</i>
H_{pdg}	distância até o medidor de pressão no <i>tubing</i>
H_{vgl}	distância até o ponto de injeção de gás de elevação no <i>tubing</i>
V_{gt}	volume de gás no <i>tubing</i>
V_t	volume do <i>tubing</i>
D_t	diâmetro do <i>tubing</i>
α_{gw}	fração de gás no reservatório
L_a	comprimento do anular

Capítulo 1 – Introdução

1.1 Motivação

Muitos processos dinâmicos são suscetíveis à presença de comportamento oscilatório devido ao ciclo limite, o qual é uma trajetória fechada no plano de fase onde ao menos uma trajetória espira dentro dela enquanto o tempo se aproxima do infinito. Um exemplo clássico de sistema com ciclo limite consiste no modelo de Lotka-Volterra, que descreve a dinâmica de sistemas biológicos quando duas espécies interagem: é o caso do predador-presa, onde o predador e a presa estão continuamente se sobrepondo. Muitos trabalhos reportam a presença de ciclos limites em processos de fermentação, conforme Wang et al. (2014), Daugulis et al. (1997), McLellan et al. (1999) e Jöbses et al. (1986). Da mesma forma, Zamamiri et al. (2001) e Zhang & Henson (2001) abordaram uma análise de multiplicidade e estabilidade de microorganismos em culturas contínuas. Em reatores químicos, Ourique et al. (2002) mostram que dependendo das condições de operação, é possível que se tenha múltiplos estados estacionários e soluções oscilatórias.

Na produção de petróleo é comum a existência de um fenômeno denominado golfada, o qual é proveniente do regime de escoamento multifásico, sendo caracterizado pelo fluxo intermitente de líquido seguido de ondas de gás. Segundo Filho (2011), existem diversos mecanismos físicos que geram as golfadas, sendo o mais relevante, o causado devido à inflexão das tubulações de transporte. As golfadas ocasionam grandes oscilações de pressão no sistema afetando diretamente a produtividade, a vida útil e a segurança das instalações. Pequenas perturbações do sistema podem causar uma mudança drástica de comportamento do fluxo, levando-a à ocorrência de golfadas, que são um sistema com ciclo limite. Meglio *et al.* (2009) confirma esta hipótese utilizando o critério Poincaré-Bendixson (KHALIL, 2002). Um exemplo onde a identificação de um modelo com ciclo limite é importante, é na produção de petróleo em sistemas de produção *offshore*, onde se utiliza o controle NMPC (GEREVINI et al., 2016).

A escolha por se operar em uma região instável, ou seja, onde o comportamento é oscilatório, pode ser vantajosa uma vez que é possível que a máxima produção nesse ponto de operação quando comparado a uma região estável. Gerevini (2017) discute a relação da abertura da válvula *choke* de produção em relação à produção de petróleo na Figura 1.1, onde é mostrado que quando se opera no regime das golfadas (ou com oscilações), se tem a máxima produção de petróleo e retorno financeiro. Enquanto isso, na operação em malha

aberta em uma região estável, por conhecimento empírico e intuição das equipes de operação, se tem uma menor produção de petróleo.

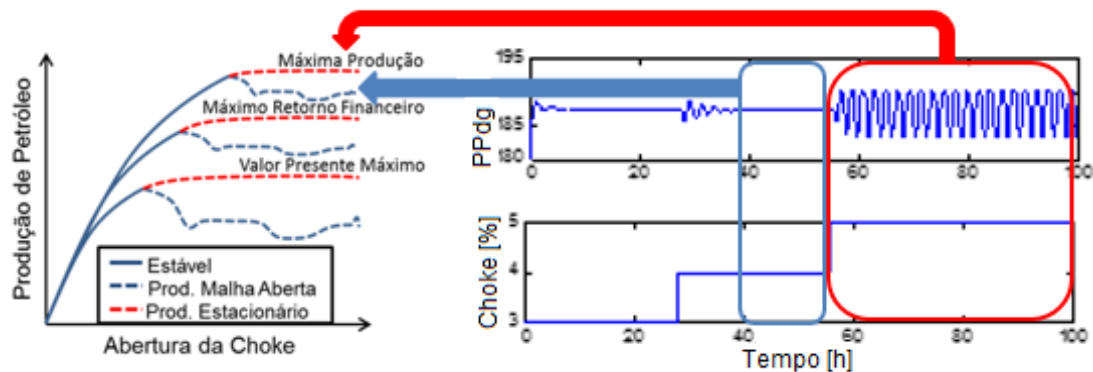


Figura 1.1: Relação entre as regiões de operação na produção de petróleo em relação à máxima produção, retorno financeiro e valor presente. Adaptado de Gerevini (2017).

A identificação de sistemas dinâmicos não-lineares possui grandes demandas na indústria de processos, especialmente nas áreas de controle e otimização. O principal objetivo da identificação do sistema dinâmico é construir um modelo a partir das observações experimentais que reproduza a dinâmica desses sistemas tão fielmente quanto possível. Para Qiao & Han (2012), em muitas situações práticas, no entanto, é praticamente inviável obter modelos matemáticos precisos do sistema devido à falta de conhecimento de alguns parâmetros. Dessa forma, a estimação dos parâmetros é uma etapa fundamental para obtenção de modelos com capacidade preditiva. Em sistemas com ciclo limite, a estimação de parâmetros é um problema mais complexo, quando comparado aos sistemas com comportamento dinâmico estável convencional. Isso porque a instabilidade destes sistemas tende a atrapalhar a convergência do problema de otimização associado à estimação.

A estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite é um tópico que vêm sendo frequentemente abordados na literatura. Dentre os métodos existentes, destacam-se os trabalhos de Guckenheimer et al. (1997), que foram aprimorados por Meerbergen & Spence (2010) e Elman et al. (2012), além das abordagens propostas por Cedersund & Knudsen (2005), Hynne et al. (1993) e Hynne et al. (2001) e Govaerts (2000), que descreve a abordagem mais difundida para detecção do ponto crítico do ciclo limite, a bifurcação Hopf. Nos trabalhos mencionados a maior dificuldade é a complexidade de implementação dessas metodologias, o que as torna, muitas vezes, inviáveis de serem aplicadas, dependendo do tamanho do modelo associado. Além disso, muitos deles exigem que modificações algébricas nos modelos sejam realizadas, as quais nem sempre são facilmente detectáveis.

Com base no que foi descrito, este trabalho propõe uma metodologia de estimação de parâmetros para modelos com ciclo limite simples de ser implementada e sem a necessidade de modificações algébricas no modelo. A ideia consiste em se utilizar um critério para detectar a presença de ciclos limite, incluindo-o na forma de penalização da função objetivo. Os modelos que serão empregados nesta dissertação são tipo caixa cinza, ou seja, são construídos sob fundamentos físicos com parâmetros estimados a partir dos

dados experimentais medidos. Segundo Romijn et al. (2008), esse modelo em caixa cinza é um sistema combinando mecanística (leis físicas e químicas) e componentes caixa preta (empírico), onde a principal ideia é minimizar a extra experimentação e pesquisa. Embora seja mais difícil de construir, esses sistemas podem levar a modelos melhores quando comparados à identificação caixa branca e caixa preta (KROLL, 2000), combinando as vantagens desses dois últimos principalmente para sistemas em que o comportamento não-linear precisa ser adequadamente capturado, como nos caso dos sistemas com ciclo limite.

1.2 Objetivos do trabalho

O principal objetivo deste trabalho é desenvolver uma metodologia simples que facilite a estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite, tendo como objetivos secundários a aplicação em:

- estudos de casos representativos encontrados na literatura, como o modelo de Jöbses et al. (1986), que descreve a produção de etanol com *Zymmona mobilis* e o modelo de Meglio et al. (2009), que representa o regime de fluxo das golfadas em tubos verticais, e
- um sistema real utilizando um modelo para produção *offshore* em um poço de petróleo de uma empresa nacional que possui o fenômeno das golfadas.

1.3 Estrutura da dissertação

Neste capítulo foi realizada uma apresentação geral deste trabalho, onde são abordadas as principais motivações e objetivos para o desenvolvimento desta pesquisa.

O capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica que visa solidificar conceitos importantes para o entendimento do trabalho.

A metodologia proposta nesta dissertação é descrita no capítulo 3 sendo aplicada no capítulo 4 no estudo de caso simulado empregando o modelo de Jöbses et al. (1986).

O capítulo 5 é aplicado na produção de petróleo *offshore* onde a metodologia proposta foi aplicada no modelo simplificado de Meglio et al. (2009), no modelo estendido de Diehl et al. (2017) e na aplicação real, onde foram estimados os parâmetros desse último modelo com os dados de planta de produção *offshore* de uma plataforma de petróleo nacional.

Já o capítulo 6 apresenta as conclusões finais e sugestões de trabalhos futuros.

Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica

Este capítulo é constituído por uma revisão bibliográfica dos principais assuntos necessários para o desenvolvimento deste trabalho. Inicialmente são abordados os fundamentos da teoria e conceitos de bifurcação e, por conseguinte, conceitos sobre análise do plano de fase para o entendimento do ciclo limite. Na sequência é feita uma revisão sobre o ciclo limite e o ponto Hopf e, por último, é realizado um levantamento sobre os principais métodos existentes para a detecção da bifurcação Hopf.

2.1 Bifurcação

O conceito de bifurcação foi introduzido em 1880 pelo francês Poincaré, sendo definido como uma mudança da dinâmica do sistema, sendo ela qualitativa ou quantitativa no plano de fase de um sistema dinâmico, decorrente da variação de algum parâmetro de controle. Assim, em um sistema de equações diferenciais, uma bifurcação no estado estacionário acontece se há alterações no número de soluções estacionárias ou na estabilidade do sistema (BEQUETTE, 1998). Ou seja, quando um determinado parâmetro do modelo atravessa um valor crítico, chamado de ponto de bifurcação (λ). Em outras palavras, segundo Bequette (1998), supondo um sistema contínuo que apresente determinada propriedade (como, por exemplo, o número de soluções de equilíbrio ou sua estabilidade) invariante para determinado parâmetro λ em um intervalo aberto (a, b) , mas essa propriedade não se mantém para nenhum intervalo maior. Então os pontos a e b são chamados de pontos de bifurcação.

O diagrama de bifurcação é uma importante ferramenta para o estudo do comportamento dinâmico de um sistema e consiste em avaliar graficamente a relação entre um determinado parâmetro (λ) e os pontos de equilíbrio, também denominados soluções estacionárias do sistema, os quais estão associados à uma variável de estado. Esses diagramas são gerados a partir da análise da resposta do sistema a partir da variação de um parâmetro, onde regiões estáveis são representadas por linhas contínuas e regiões instáveis por linhas pontilhadas. Cada uma destas regiões é denominada ramo. Os autovalores da Jacobiana do sistema estão diretamente associados com o plano de fase, onde pontos estáveis (parte real negativa) são atratores e pontos instáveis (parte real positiva) são repulsores de soluções. O surgimento de autovalores complexos conjugados é a causa da ocorrência do ciclo limite.

O fenômeno da bifurcação acontece em modelos não-lineares, uma vez que nestes sistemas as saídas não são diretamente proporcionais às entradas, ou a mudança em uma variável não produz uma mudança proporcional na variável relacionada. Ou seja, os valores das saídas do sistema não são proporcionais aos valores em tempos próximos (WILLIAMS, 1997). Nesses sistemas, análises baseadas em simulação dinâmica podem ser incapazes de captar comportamentos característicos relevantes. Assim, análises da dinâmica não-linear são necessárias para sistemas complexos como reatores químicos e biorreatores (BEQUETTE, 1998). Portanto, uma das técnicas mais importantes no estudo de sistemas não-lineares é a análise dos diagramas de fase. Através dessa técnica é possível caracterizar comportamentos como o efeito das condições iniciais e da estabilidade de soluções estacionárias.

Nos últimos 50 anos, o fenômeno de multiplicidade e soluções para um dado ponto de operação foi estudado de forma generalizada em pesquisas da engenharia química e biológica e em particular, em reações químicas/biológicas. O fascínio por esse fenômeno tem sido amplamente difundido na literatura em sistemas como muitos trabalhos reportam a presença de oscilações principalmente em processos de fermentação (DAUGULIS; MCLELLAN; LI, 1997; JÖBSES et al., 1986; MCLELLAN; DAUGULIS; LI, 1999; WANG et al., 2014), reatores químicos (OURIQUE; BISCAIA; PINTO, 2002) e na produção de petróleo (DIEHL et al., 2017; MEGLIO; KAASA; PETIT, 2009). Parte da literatura de matemática aplicada também estuda esse fenômeno, mas de forma mais geral e em termos mais abstratos sob o nome de “teoria de bifurcação” (ELNASHAIE; UHLIG, 2007).

Embora a literatura seja rica em investigações teóricas de bifurcação e em laboratórios experimentais para verificação, ainda é pouco extensa no que diz respeito a esse fenômeno em sistemas industriais. Segundo Elnashaie & Uhlig (2007), apenas alguns trabalhos foram publicados que abordam a questão em relação a quando a multiplicidade de estados estacionários ou mudança de dinâmica do sistema é importante industrialmente. Ainda, segundo o mesmo autor, a filosofia industrial tenta evitar regiões problemáticas de operação e parâmetros de projeto que são caracterizados por instabilidades, uma vez que nestes casos o controle do sistema pode ser difícil. Essa filosofia conservativa era justificável antes dos grandes avanços das últimas décadas em relação à modelagem e simulação de modelos, além dos avanços no ramo de tecnologia da informação e no desenvolvimento de sensores e atuadores, os quais viabilizam a exploração das vantagens de se operarem regiões de multiplicidade de soluções ou mudança de comportamento dinâmico.

Em sistemas contínuos de primeira ordem, tem-se os três tipos de bifurcação mais tradicionais: ponto limite, transcritical e forquilha. Essas possuem uma característica em comum, que é a mudança de estabilidade em suas soluções estacionárias de um ramo estável para um ramo instável. Já o que as diferencia são as possíveis configurações, tal como a existência de mais de um ramo de soluções estacionárias (multiplicidade de soluções), para diversos parâmetros de controle. Esses tipos de bifurcação tradicionais são descritos no Apêndice A. As bifurcações citadas consistem de soluções estacionárias ($\dot{y} = 0 = f(y, \lambda)$), enquanto fenômenos com movimento podem ser representados por oscilações regulares, onde se tem ciclos limites no plano de fase, enquanto que as demais são apenas pontos no mesmo gráfico. Dentre os diferentes tipos de bifurcação mencionados, o enfoque deste trabalho é a bifurcação Hopf, que é o ponto crítico do ciclo limite, a qual é descrita mais detalhadamente no item 2.3, sendo que no item 2.2 é

apresentado o conceito do plano de fase e o ciclo limite, necessário para o seu entendimento.

2.2 Análise do plano de fase e o ciclo limite

A análise do plano de fase consiste em graficar curvas de uma variável de estado *versus* outra variável de estado, onde cada curva é baseada em uma condição inicial. Esse tipo de análise é uma das técnicas mais importantes para estudar o comportamento de sistemas não-lineares, já que frequentemente não se tem soluções analíticas para um sistema não-linear. Os padrões de planos de fase mais comuns são: o nó, a sela, o foco e o ciclo limite, que são classificados desta forma devido ao comportamento de seus autovalores. Neste caso é analisado profundamente apenas o último tipo, tendo em vista que ele está associado ao objetivo principal deste trabalho, sendo que os demais padrões de planos de fase são descritos no Apêndice A.

Segundo Seydel (2010), um ciclo limite é uma solução periódica (órbita periódica) que acontece apenas para modelos não-lineares. Nesse caso, depois que um certo período de tempo T é transcorrido, os valores da solução y de uma órbita periódica são os mesmos.

$$y(t + T) = y(t) \quad (2.1)$$

O mínimo valor de $T > 0$ que satisfaz essa equação é denominado período. Considerando o surgimento do ciclo limite no exemplo da produção de petróleo (GEREVINI, 2017) na Figura 2.1, sabe-se que neste caso o ponto de equilíbrio do diagrama de fase é substituído por uma órbita circular. Ou seja, para o caso onde se tem oscilações, o diagrama de fase converge para o ciclo limite (terceiro ciclo) ao invés de um ponto (primeiro e segundo ciclo).

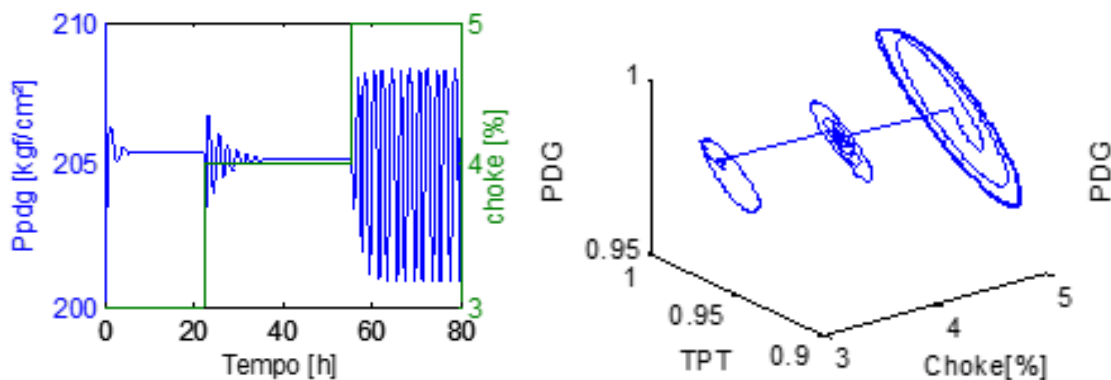


Figura 2.1: Surgimento do ciclo limite na produção de petróleo em gráfico de a) variável de saída *versus* tempo e b) análise de plano de fase de variável de saída *versus* outra variável de saída e entrada. Adaptado de Gerevini (2017).

Nesse caso, percebe-se que o diâmetro da espiral no plano de fase aumenta com o tempo, enquanto a amplitude da oscilação aumenta. Portanto, os ciclos limites representam movimentos regulares e não são necessariamente uma órbita fechada. Exemplos são impulsos nervosos, correntes elétricas em circuitos elétricos, dentre outros.

2.3 A bifurcação Hopf

A bifurcação Hopf conecta um ramo de equilíbrio com um ramo de oscilações (movimento periódico), conforme apresentado na Figura 2.2 para o exemplo da produção de petróleo.

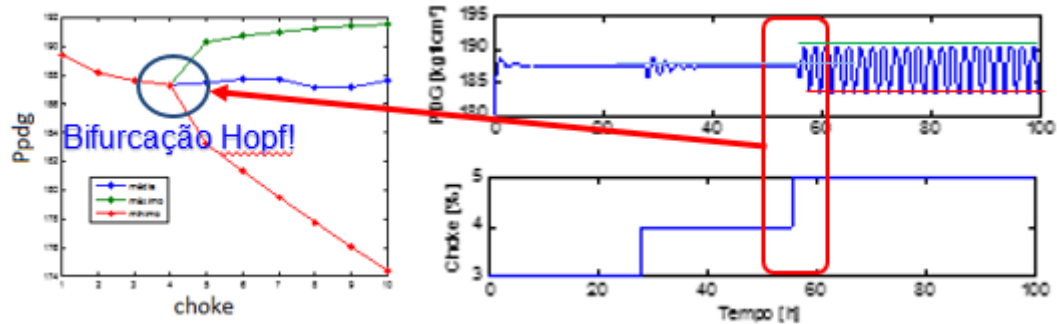


Figura 2.2: Transição de soluções estacionárias para periódicas exibida em um a) diagrama de bifurcação e em b) gráfico da saída *versus* o tempo para a produção de petróleo. Adaptado de Gerevini (2017).

Nos diagramas de bifurcação se tem representações gráficas da relação entre os valores do parâmetro de bifurcação em relação ao comportamento do sistema no qual o parâmetro é medido. Neste caso, considera-se que cada valor do parâmetro de bifurcação é correspondente à medida da variável de estado no estacionário. No diagrama da Figura 2.2 observa-se que quando ocorre a bifurcação Hopf, ou seja, a transição das soluções estacionárias para as oscilatórias, o ramo de equilíbrio é substituído por três novos ramos: a amplitude máxima (linha verde), mínima (linha vermelha) e o ponto de equilíbrio (linha azul) das oscilações. Considerando um sistema de equações onde existe bifurcação Hopf (SEYDEL, 2010):

$$\dot{y}_1 = -y_2 + y_1(\lambda - y_1^2 - y_2^2) \quad (2.2)$$

$$\dot{y}_2 = y_1 + y_2(\lambda - y_1^2 - y_2^2) \quad (2.3)$$

a única solução estacionária para o parâmetro λ é $y_1 = y_2 = 0$.

Os autovalores que advêm do determinante da matriz Jacobiana associada à linearização do modelo, devem possuir necessariamente parte imaginária na forma $\alpha \pm i\beta$ para ser bifurcação Hopf. Neste caso, o equilíbrio é estável para $\alpha < 0$ e instável para $\alpha > 0$, ou seja, existe uma perda de estabilidade em $\alpha = 0$, mas não se tem mudança de estabilidade dentro do espaço de equilíbrio. Na Figura 2.3, variando λ , as órbitas formam um ramo o qual se mescla $\lambda = 0$ com o ramo de equilíbrio. Nesse caso, perturbações no sistema induzem a formação de diferentes órbitas fechadas.

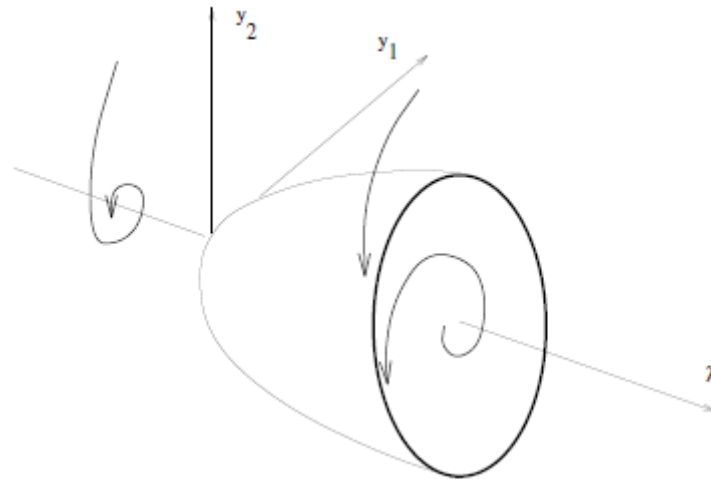


Figura 2.3: Geração dos ciclos limites em $\lambda = 0$ (plano de fase dependente do parâmetro). Adaptado de Seydel (2010).

No exemplo, em $\lambda = 0$ existe uma mudança de estabilidade do equilíbrio estável para ciclo limite estável. O ciclo limite cerca o equilíbrio instável. A Figura 2.4 ilustra como o comportamento temporal da variável de estado muda com o parâmetro de bifurcação. Apenas estados estáveis são mostrados. A figura deixa evidente o aumento da amplitude das órbitas periódicas com a variação do parâmetro. Neste exemplo, a Jacobiana avaliada no ponto Hopf possui um par de autovalores imaginários.

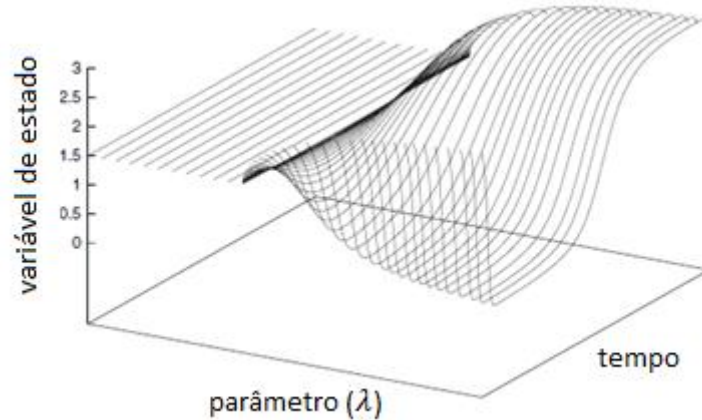


Figura 2.4: Geração de ciclos limites no ponto Hopf; dependência do tempo e do parâmetro. Adaptado de Seydel (2010).

O Teorema de Hopf (1942) apresenta três condições que devem ser satisfeitas para se ter a bifurcação Hopf, conforme a seguir:

- (1) $f(y_0, \lambda_0) = 0$;
- (2) $\frac{df}{dy}(y_0, \lambda_0)$ possui um simples par de autovalores imaginários $\mu(\lambda_0) = \pm i\beta$ e nenhum autovalor com parte real zero;

$$(3) \frac{d(\operatorname{Re}\mu(\lambda_0))}{d\lambda} \neq 0$$

A origem dos ciclos limites ocorre em (y_0, λ_0) . O período inicial (oscilação de zero amplitude) é:

$$T_0 = \frac{2\pi}{\beta} \quad (2.4)$$

onde y é a variável de estado, λ é o parâmetro de bifurcação, μ são os autovalores nos pontos de operação y_0 e λ_0 e β é a contribuição imaginária dos autovalores.

A Figura 2.5 ilustra o comportamento dos autovalores no plano complexo quando existe bifurcação Hopf para o exemplo da produção de petróleo.

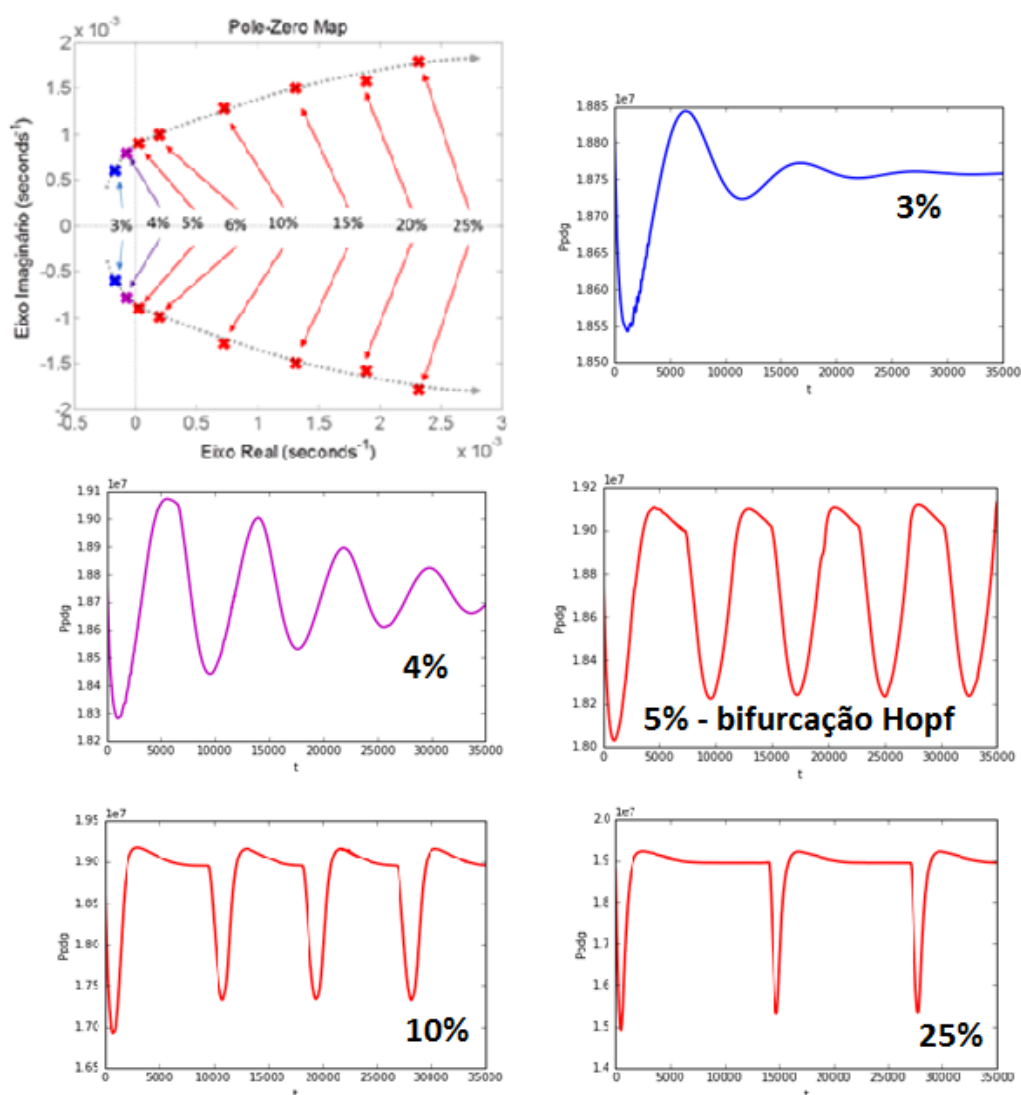


Figura 2.5: Plano complexo dos autovalores; caminho dos autovalores relacionados à bifurcação Hopf em relação à abertura da válvula *choke* na produção de petróleo.

Adaptado de Gerevini (2017).

A Figura 2.5 mostra que o caminho dos autovalores satisfazem $\mu(\lambda_0) = \pm i\beta$, lembrando que a hipótese (3) do teorema de Hopf é responsável pelo cruzamento transversal do eixo imaginário. Quando a parte real dos autovalores é negativa, a solução

tende a convergir para uma solução, conforme as aberturas da válvula *choke* de 3% e 4%. A bifurcação Hopf ocorre quando os autovalores cruzam o eixo real, ou seja, possuem parte real igual a zero, onde a solução possui oscilações de frequência e amplitude constante, segundo abertura da válvula *choke* de 5%. Já quando a parte real dos autovalores é positiva, as oscilações tendem a aumentar a frequência ou a amplitude, conforme aberturas da válvula *choke* de 10% e 25%.

O ciclo limite existe, portanto, quando os autovalores complexos têm a sua parte real diferente de zero com a parte imaginária conjugada. Nesse caso, a parte real dos autovalores pode estar localizada à direita ou à esquerda, conquanto que esteja próxima do eixo imaginário. O ponto Hopf se dá, portanto, quando o autovalor real é zero, e existe parte imaginária conjugada.

Quanto à estabilidade do ponto Hopf, a bifurcação supercrítica ocorre quando órbitas estáveis circulam o equilíbrio instável (conforme primeira linha da Figura 2.6), enquanto na bifurcação subcrítica órbitas periódicas instáveis circulam o equilíbrio estável (segunda linha da Figura 2.6). No caso da terceira linha da figura, um autovalor cruza o eixo imaginário transversalmente, de modo que a bifurcação Hopf se torna uma ramificação para órbitas periódicas instáveis, não importando a direção.

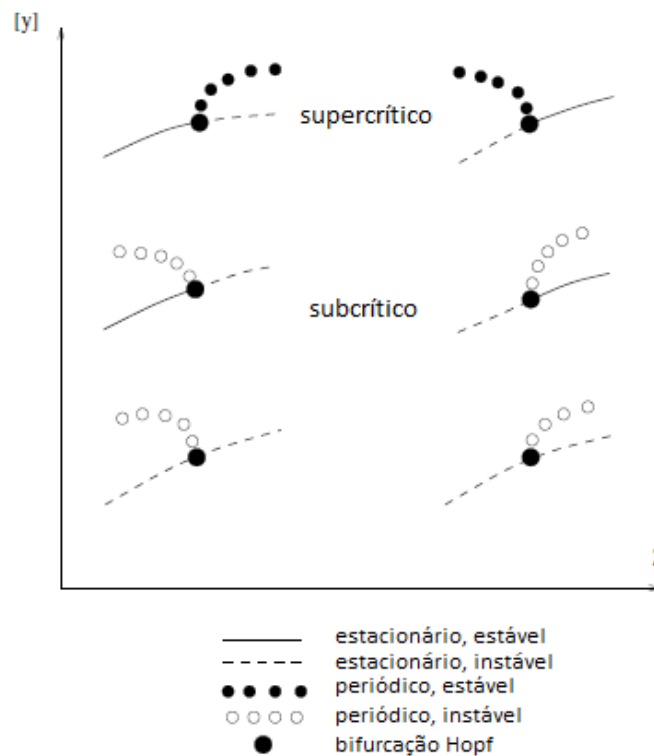


Figura 2.6: Comportamento de estabilidade local de bifurcações Hopf.
 Adaptado de Seydel (2010).

2.4 Métodos para estimação de parâmetros em modelos com bifurcação Hopf

Conforme mencionado na seção 2.1, muitos trabalhos reportam a presença de oscilações principalmente em processos de fermentação (DAUGULIS; MCLELLAN; LI, 1997; JÖBSES et al., 1986; MCLELLAN; DAUGULIS; LI, 1999; WANG et al., 2014), reatores químicos (OURIQUE; BISCAIA; PINTO, 2002) e na produção de petróleo (DIEHL et al., 2017; MEGLIO; KAASA; PETIT, 2009). No entanto, a estimação de parâmetros nesses modelos com ciclo limite é difícil, já que o comportamento oscilatório associado aos sistemas com ciclo limite, tende a atrapalhar a convergência do problema de otimização associado.

Alguns métodos para estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite vêm sendo abordados na literatura. Dentre os trabalhos, Guckenheimer et al. (1997) propuseram dois novos métodos que dependem da ampliação da condição de equilíbrio para que a bifurcação Hopf ocorra em um ponto regular e isolado do sistema estendido. Esses novos métodos são baseados em resultados clássicos algébricos em relação às raízes das equações polinomiais e propriedades do produto Kronecker para matrizes. A vantagem deste método é que ele permite a estimação dos parâmetros que correspondem ao ponto Hopf sem a necessidade de avaliar os autovalores da matriz Jacobiana. Entretanto, como esse método utiliza a soma dos produtos Kronecker, ele envolve a solução de matrizes de dimensão quadrada, que é praticamente impraticável para aplicações em larga-escala devido às dimensões da matriz gerada pelo produto de Kronecker. Assim, o método só se torna eficiente quando bons chutes iniciais estiverem disponíveis para o parâmetro e se o autovalor for puramente imaginário.

Meerbergen & Spence (2010) propuseram um método para obter bons chutes iniciais para o método de Guckenheimer et al. (1997), baseado em encontrar os autovalores imaginários de um problema de dois parâmetros para autovalores, os quais advêm de um processo de linearização. Esse problema é reformulado como um método de iteração inexato inverso que requer a solução de uma sequência de equações de Lyapunov com um baixo rank no lado direito. Elman et al. (2012) refinaram o método de iteração inversa a fim de torná-lo mais robusto e eficiente. Neste caso o algoritmo proposto pertence à classe de métodos iterativos interna-externa, onde a iteração externa é inversa para o problema especial de autovalores, e o problema interno se resume em resolver uma equação de Lyapunov. Baseando-se na teoria existente de métodos de iteração interna-externa, as equações de Lyapunov não necessitam ser resolvidas com alta precisão; ao invés disso, uma tolerância suave é o suficiente.

Uma abordagem diferente foi proposta por Cedersund & Knudsen (2005), os quais mostraram como o conhecimento da bifurcação Hopf pode ser reformulado em um problema de otimização não-linear com restrições através da adição de n novos parâmetros descrevendo o ponto fixo correspondente à estimativa dos atuais parâmetros. Isso permite a introdução de $n+1$ novas restrições, e o resultado é que o espaço de busca é reduzido a um grau de liberdade. O preço para a redução é que mais métodos avançados de otimização podem ser utilizados. Devido ao comportamento da restrição, os métodos de otimização utilizados devem garantir que os parâmetros estimados nunca cheguem longe demais da região possível, e por isso, indica-se a utilização dos métodos de eliminação e métodos de gradientes reduzidos.

A estimação de parâmetros para modelos com bifurcação Hopf também foram estudados por Hynne et al. (1993) e Hynne et al. (2001), mas eles eram focados na avaliação algébrica de modelos, não incluindo o uso de séries temporais coletadas durante a fase de estimação. Cedersund & Knudsen (2005) contribuíram com um método de identificação que inclui o conhecimento da localização da bifurcação Hopf em um algoritmo de otimização que usa toda a série temporal durante a simulação. Esse método é realizado utilizando uma sobre-parametrização no problema original, onde é permitida a adição de restrições extras, levando à redução do espaço de busca.

Ainda que os métodos apresentados anteriormente se mostrem teoricamente eficientes, quando se trata da modelagem de sistemas reais com bifurcação Hopf, eles são de difícil aplicação prática. Isso porque eles são demasiadamente complexos, em termos matemáticos, de modo que, dependendo da dimensão do sistema, número de parâmetros a serem estimados e da qualidade dos dados experimentais disponíveis, o problema de otimização associado à estimação se torna computacionalmente impraticável. Neste contexto, a abordagem mais difundida para detecção de bifurcação Hopf consiste no método descrito por Govaerts (2000). Esse método é muito utilizado pelos softwares tradicionais para análise de bifurcação em modelos dinâmicos, tais como *MatCont* (DHOOGHE; GOVAERTS; KUZNETSOV, 2003) e *PyDsTool* (CLEWLEY, 2012). Baseando-se neste critério, o método considera que, como na bifurcação Hopf existem autovalores complexos cruzando o eixo imaginário, a seguinte igualdade pode ser escrita:

$$J\phi = \mu\phi \quad (2.5)$$

onde J é a Jacobiana em seu ponto de equilíbrio e μ são os autovalores associados ao autovetor ϕ . Neste caso onde se tem um problema de bifurcação Hopf, os autovalores possuem apenas a contribuição imaginária, de modo que

$$\mu = i\beta \quad (2.6)$$

onde β é o termo de contribuição imaginária do autovalor.

A fim de multiplicar a matriz que possui autovalores complexos, é utilizado o produto bialternado \odot (GOVAERTS; SIJNAVE, 1999), e para evitar o determinante de matrizes singulares se tem o métodos de matrizes delimitadas G_{bor} (WERNER, 1996)

$$G_{bor}(2J\odot I_n) = 0 \quad (2.7)$$

onde I_n é a matriz identidade de tamanho n . Segundo o autor, a igualdade apresentada pela Equação 2.9 garante a existência de um ponto de bifurcação Hopf no sistema.

O produto bialternado de $2J\odot I_n$, segundo Govaerts & Sijnave (1999), pode ser obtido explicitamente da seguinte forma:

$$(2J \odot I_n)_{(k,l),(m,n)} = \begin{cases} -j_{kn} & \text{se } m = l, \\ j_{km} & \text{se } m \neq k \text{ e } n = l, \\ j_{kk} + j_{ll} & \text{se } m = k \text{ e } n = l, \\ j_{ln} & \text{se } m = k \text{ e } n \neq l, \\ -j_{lm} & \text{se } n = i, \\ 0 & \text{outro} \end{cases} \quad (2.8)$$

Já a matriz delimitada G_{bor} de $2J \odot I_n$, conforme Werner (1996), é dada por

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C^T & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V \\ G \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

onde as variáveis para resolução desse problema são dadas na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Variáveis para resolução da matriz delimitada G_{bor} .

$A_{(n,m)}$	$2J \odot I_n$
B	Matriz U da decomposição em valores singulares de A
C	Matriz V da decomposição em valores singulares de A
s	Máximo entre m e n
r	Corank de A
p	$s - m + r$
q	$s - n + r$
D	$0_{(q,p)}$
k	Número de linhas da matriz J
l	Número de colunas da matriz J
m	Número de linhas da matriz I_n
n	Número de colunas da matriz I_n
V	Resultado da fatoração LU do sistema dada pela Equação 2.10
$G = G_{bor}$	$V[-1 * p:, :]$

Capítulo 3 – Metodologia

Neste trabalho foi desenvolvida uma metodologia para a detecção do ciclo limite, que é baseada no conceito do fator de amortecimento de sistema de segunda ordem, oriundo da teoria de funções de transferência, e na utilização de uma modificação do método de penalidade exata para otimização com restrições. Todas as implementações foram realizadas em linguagem *Python*, pois além de ser um *software* livre, suporta a instalação de pacotes com diferentes ferramentas numéricas e de otimização. Para a simulação dos modelos dinâmicos foi utilizada a plataforma livre *JModelica* (ÅKESSON et al., 2010), que é uma extensão da linguagem *Modelica* para a otimização, simulação e análise de sistemas dinâmicos complexos. O *JModelica* integra as ODE/DAE utilizando o SUNDIALS (*SU*ite of *N*onlinear and *D*ifferential/*A*lgebraic equation *S*olvers) para o *solver* CVode, e o RADAU5 (HAIRER; WANNER, 1987) para o *solver* Radau5DAE, sendo esses os principais *solvers* utilizados neste trabalho. Esta plataforma foi desenvolvida para ser incorporada ao ambiente *Python*, juntamente com outros pacotes que possibilitam o tratamento de dados, otimização do modelo e visualização dos dados.

Para toda a metodologia apresentada neste trabalho, considera-se que todos os modelos possuem equações que são funções de seus estados x_i , de suas entradas u_i , e de seus parâmetros θ_i (sendo o parâmetro de bifurcação λ um deles), de modo que as saídas são y_i , conforme Equação 3.1.

$$f(x_i, u_i; \theta_i) = y_i \quad (3.1)$$

3.1 Critério ζ -Hopf

O fator de amortecimento é uma medida adimensional que descreve como a amplitude das oscilações em um sistema decaem após o mesmo ser perturbado. Usualmente esse parâmetro é denotado pela letra grega ζ (zeta). Na teoria de controle, o fator de amortecimento caracteriza o grau de oscilação da resposta de uma função de transferência de segunda ordem cujo o denominador consiste no seguinte polinômio de segunda ordem:

$$\tau^2 s^2 + 2\zeta\tau s + 1 \quad (3.2)$$

Neste trabalho é considerado que o ciclo limite pode aparecer desde o caso subamortecido ($\zeta < 1$), onde a solução decai exponencialmente, até o ponto Hopf, que é equivalente ao caso não-amortecido ($\zeta \rightarrow 0$). Neste caso, quanto mais próximo de zero estiver o valor de ζ , maior a possibilidade de o sistema gerar uma resposta oscilatória. Ou seja, o ponto Hopf é o caso em que $\zeta = 0$, enquanto o ciclo limite abrange este ponto e os demais que ficam na proximidade de $\zeta \rightarrow 0$, possuindo oscilações constantes, crescentes ou decrescentes. Considera-se que as suas raízes (ou polos) são encontradas utilizando a fórmula quadrática da Equação 3.2:

$$p_i = \frac{-2\zeta\tau \pm \sqrt{4\zeta^2\tau^2 - 4\tau^2}}{2\tau^2} \quad \therefore \quad -\frac{\zeta}{\tau} \pm \frac{\sqrt{\zeta^2 - 1}}{\tau} \quad (3.3)$$

Como é considerado o caso subamortecido, onde o ciclo limite pode aparecer entre $0 < \zeta < 1$, são obtidos dois complexos conjugados:

$$p_i = -\frac{\zeta}{\tau} + j \frac{\sqrt{(1-\zeta^2)}}{\tau} \quad (3.4)$$

no qual as partes real (α) e imaginária (β) são escritas, respectivamente como:

$$\alpha = -\frac{\zeta}{\tau}, \quad (3.5)$$

$$\beta = \frac{\sqrt{(1-\zeta^2)}}{\tau} \quad (3.6)$$

Portanto, a partir da razão entre o termo imaginário e o termo real do polo é obtido o parâmetro ζ :

$$\zeta = \sqrt{\frac{1}{1 + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2}} = \sqrt{\frac{\alpha^2}{\alpha^2 + \beta^2}} \quad (3.7)$$

Quando se lineariza um sistema de equações diferenciais utilizando a matriz Jacobiana, o número de autovalores é equivalente à dimensão dessa matriz (ou ao número das variáveis de estado). Portanto, para um sistema com mais de quatro equações diferenciais, para um problema com ciclo limite, dificilmente existem dois pares de autovalores conjugados. O que é mais comum acontecer é a troca da posição desses pares de autovalores conjugados, sendo o cálculo do parâmetro ζ realizado com o par mencionado.

Da Equação 3.7 é possível determinar o grau de oscilação do sistema em um determinado ponto, indo desde o caso menos oscilatório/mais amortecido ($\zeta \rightarrow 1$), até o caso mais oscilatório (ponto Hopf $\zeta \rightarrow 0$) a partir dos autovalores da matriz Jacobiana. Para essa medida é utilizada a informação dos autovalores no seu ponto estacionário, obtida através da linearização do modelo em cada estado x no sistema de n equações:

$$f_x(x) = 0 \quad (3.8)$$

ou seja, a Jacobiana é avaliada no seu ponto de equilíbrio

$$J(x^s) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(x_1^s, x_n^s) & \frac{\partial f_1}{\partial y_n}(x_1^s, y_n^s) \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(x_1^s, x_n^s) & \frac{\partial f_n}{\partial y_n}(x_1^s, x_n^s) \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

onde J é a Jacobiana e x^s é o valor do estado estacionário.

Como a solução de um problema com ciclo limite é oscilatória, a determinação de seu ponto estacionário não é direta, assim como no caso de um sistema amortecido. Dessa forma será utilizada a determinação de pontos estacionários definida por Seydel (2010).

$$\frac{dx_1}{dt} = 0, \quad \frac{dx_n}{dt} = 0. \quad (3.10)$$

No ponto de equilíbrio o sistema está em repouso: soluções no equilíbrio são soluções constantes. Esses pontos (x_1^s, x_n^s) são também denominados soluções estacionárias, que são as soluções do sistema de equação dadas pelo lado direito das equações diferenciais.

$$f_1(x_1^s, x_n^s) = 0, f_n(x_1^s, x_n^s) = 0 \quad (3.11)$$

Para modelos simples, geralmente é possível determinar as raízes das equações, ou seja, os valores das variáveis de estado no estacionário, utilizando o método de Newton. No entanto, para modelos mais complexos, é adequado a formulação de um problema de otimização que visa minimizar os resíduos quadraticamente somados das respectivas equações, o qual pode ser resolvido através de métodos baseados em aproximações lineares, tais como o BOBYQA (*Bound Optimization BY Quadratic Approximation*) e o COBYLA (*Constrained Optimization BY Linear Approximation*). Como a penalidade oferece apenas um “direcionador” da região Hopf, é possível fazer uma aproximação do estado estacionário simulando o modelo para o dado conjunto de parâmetros e avaliando:

$$x_n^s = \frac{(x_{n,min}^s + x_{n,max}^s)}{2} \quad (3.12)$$

O modelo linearizado pode ser obtido através do cálculo da Jacobiana simbólica utilizando o pacote *SymPy*, que é um pacote para matemática simbólica. Outra forma que pode ser empregada quando se tem modelos mais complexos e/ou ordem maior do que quatro, consiste no cálculo da Jacobiana numericamente através do pacote *Numdifftools* (D’ERRICO, 2006), que resolve problemas de diferenciações numéricas em uma ou mais variáveis.

3.2 Adaptação do método de penalidade exata

O método da penalidade exata é uma técnica para a solução de problemas de otimização com restrição (NOCEDAL; WRIGHT, 2006) da forma:

$$\min_{\theta} g(x^s, u_k; \theta_k) \quad (3.13)$$

$$s. t. c_i(x^s, u_k; \theta_k) \quad (3.14)$$

onde $g(x^s, u_k; \theta_k)$ é a função objetivo original do problema (mínimos quadrados, no caso deste trabalho) e $c_i(x^s, u_k; \theta_k)$ é a sua restrição no estado estacionário x^s , com as entradas u_k e no valor do parâmetro θ_k . Este método é capaz de substituir a utilização de restrições em um problema de programação não-linear, incorporando-as na função objetivo na forma de uma penalidade, de modo que para certas escolhas de parâmetros de

penalidade, a minimização pode levar a solução exata do problema. A função objetivo de um problema com penalidade exata, conforme Equações 3.13 e 3.14 pode ser escrita como:

$$\min_{\theta} g(x^s, u_k; \theta_k) + \varphi \sum_{i \notin \varepsilon} |c_i(x^s, u_k; \theta_k)| \quad (3.15)$$

onde φ é o parâmetro de penalidade. Este parâmetro de penalidade deve ser atualizado à medida que o problema se aproxima da solução. Nocedal & Wright (2006) apresentam um algoritmo para a avaliação de um problema clássico de penalidade exata:

Dado $\varphi_0 > 0$, tolerância $tol > 0$, ponto inicial θ_k ;

Para $k = 0, 1, 2, \dots$

Encontrar um minimizador θ_k aproximado de $F_{obj}(x^s, u_k; \theta_k, \varphi_k)$, começando em θ_k ;

Se $|c_i(x^s, \theta_k)| \leq tol$

Parar com a solução aproximada θ_k ;

Fim (se)

Escolher um novo parâmetro de penalidade $\varphi_{k+1} > \varphi_k$;

Escolher um novo ponto de partida θ_{k+1} ;

Fim (para)

Usualmente o esquema mais simples para atualizar o parâmetro φ_k consiste na multiplicação deste por um múltiplo contante (por exemplo, 5 ou 10). Para o caso da metodologia proposta, o primeiro loop inicia com um valor de parâmetro de penalidade elevado ($\varphi_0 = 1 \times 10^4$ até 1×10^{12}) multiplicado ao valor de ζ , a fim de direcionar o primeiro passo da otimização para um conjunto de parâmetros que leve a uma solução com ciclo limite. Diferentemente do algoritmo de penalidade exata apresentado por Nocedal & Wright (2006), a escolha do próximo parâmetro de penalidade é obrigatoriamente menor ou igual ao anterior.

$$\varphi_{k+1} \leq \varphi_k \quad (3.16)$$

Assim, na metodologia proposta neste trabalho, o valor do parâmetro de penalidade é atualizado através da multiplicação do parâmetro de penalidade anterior pelo fator de amortecimento determinado pela equação 3.7.

$$\varphi_{k+1} = \zeta \cdot \varphi_k \cdot \quad (3.17)$$

Desta forma, φ_{k+1} pode se manter igual se a solução for amortecida ($\zeta \rightarrow 1$), ou pode diminuir à medida que a solução se torna mais oscilatória ($\zeta \rightarrow 0$), conforme Figura 3.1a. Considerando que no decorrer das iterações a solução já possui caráter oscilatório, a penalidade se aproxima de zero à medida que os parâmetros se aproximam da região de Hopf (Figura 3.1b). Deste ponto em diante o termo dos mínimos quadrados ($g(x^s, u_k; \theta_k)$) passa a ser o que possui o maior peso na função objetivo, ajustando a aderência do modelo aos dados experimentais.

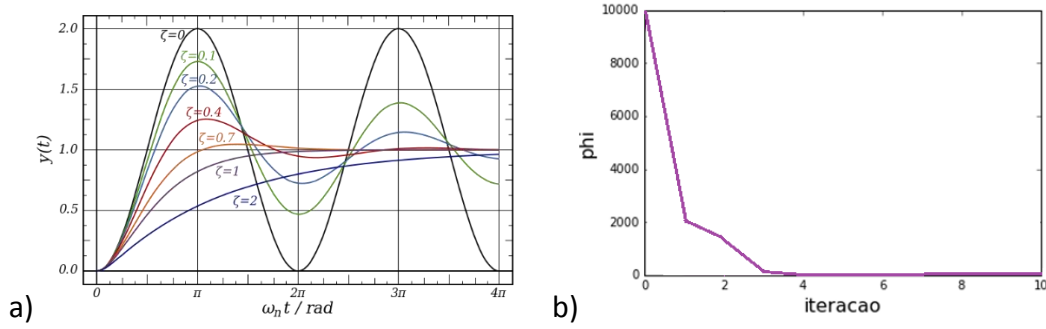


Figura 3.1: Comportamento da a) resposta da saída y para diferentes valores de ζ e b) penalidade φ ao longo das iterações na estimação de parâmetros.

É importante observar que a utilização do conceito do fator de amortecimento resulta em um valor entre 0 e 1, que é capaz de ponderar de forma normalizada o grau de oscilação para dado conjunto de parâmetros. A vantagem em se utilizar a abordagem proposta, em relação a um método com restrição é que, apenas a utilização de uma restrição, considerando que $\zeta = 0$, não é o suficiente para a obtenção dos resultados esperados, uma vez que o ciclo limite não se encontra apenas nesse ponto. A utilização de uma restrição de desigualdade também não seria o mais adequado, pois apesar de se conhecer o limite inferior ($\zeta = 0$), o limite superior é desconhecido. O ciclo limite pode existir, portanto, na proximidade $\zeta \rightarrow 0$, que pode ser encontrado utilizando o método da penalidade exata descrito neste item. Esta hipótese será abordada nos estudos de caso (Capítulo 4 e 5), onde este resultado fica evidente.

3.3 Função objetivo

A função objetivo é a responsável por direcionar o problema de otimização. No caso da estimação de parâmetros, a sua finalidade é avaliar o comportamento do modelo frente aos dados. Uma vez que a identificação de modelos fenomenológicos tem por objetivo gerar modelos representativos de sistemas reais, tal avaliação consiste em analisar a discrepância entre os valores dos estados reais medidos e dos estados simulados frente a um determinado conjunto de parâmetros (BOTELHO, 2012).

A seguinte metodologia utiliza em sua função objetivo o termo de mínimos quadrados, que procura minimizar o quadrado dos erros/resíduos, adicionado ao termo de penalidade, conforme equação abaixo:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}(\theta_k))^2 + \varphi \zeta(\theta_k) \quad (3.18)$$

onde y_i representa as saídas medidas, \widehat{y} representa as saídas previstas pelo, ns é o número de amostras disponíveis, φ é o parâmetro de penalidade e ζ é o fator de amortecimento, e θ_k é o conjunto de parâmetros a ser estimado.

Conforme descrito no item 3.1, o termo de penalidade é importante para a obtenção de soluções oscilatórias com ciclo limite. No primeiro passo é necessário o cálculo do estado estacionário para dado conjunto de parâmetros; a partir do modelo linearizado (Jacobiana) e dos valores das variáveis de estado no estacionário, são avaliados os

autovalores do sistema para o conjunto de parâmetros atual. Por conseguinte, calcula-se a penalidade, dada pelo critério ζ -Hopf multiplicado pelo parâmetro de penalidade φ .

3.4 Estimação dos parâmetros utilizando o método *single-shooting*

A metodologia para a estimação dos parâmetros deste trabalho é baseada no método *single-shooting* (BIEGLER; GROSSMANN, 2004), o qual consiste um método sequencial onde dadas as condições iniciais e um conjunto de parâmetros, o modelo de equações diferenciais é integrado e resolvido em um *loop* interno, enquanto este conjunto de parâmetros é atualizado do lado externo do *loop* utilizando um algoritmo de otimização. O método *single-shooting* é adequado para esta metodologia, pois a cada passo da otimização é necessário atualizar o valor dos estado, da Jacobiana e do ζ , sendo que tudo isso depende da simulação do modelo sob dadas condições e conjuntos de parâmetros fornecidos pelo otimizador.

A sub-rotina desenvolvida para a estimação dos parâmetros foi baseada na utilização do pacote NLOpt (JOHNSON, 2008), que é uma biblioteca livre para a otimização não-linear. Essa suporta otimizações em larga escala e contém diferentes algoritmos NLP. Para este trabalho foi utilizado o método COBYLA. Sua vantagem é que este solver não necessita do cálculo do gradiente da função objetivo sendo baseado em aproximações lineares da função objetivo e de cada restrição. Ele foi desenvolvido por Powell (1994), e em cada iteração uma aproximação do problema de programação linear é resolvido para se obter um candidato para a solução ótima. A solução candidata é avaliada utilizando a função objetivo original e as restrições, resultando em um novo ponto de dados no espaço de otimização. Essa informação é utilizada para melhorar a aproximação do problema de programação linear usado para a próxima iteração do algoritmo. Quando a solução não pode ser mais melhorada, o tamanho do passo é reduzido, refinando a busca. Quando o passo se torna suficientemente pequeno, o algoritmo termina.

As Figuras 3.2 e 3.3 mostram um esquema simplificado de como é realizada a estimação de parâmetros com o método *single-shooting* para os estudos de caso deste trabalho, onde a Figura 3.2 exhibe o *loop* externo e a Figura 3.3 o *loop* interno da metodologia.

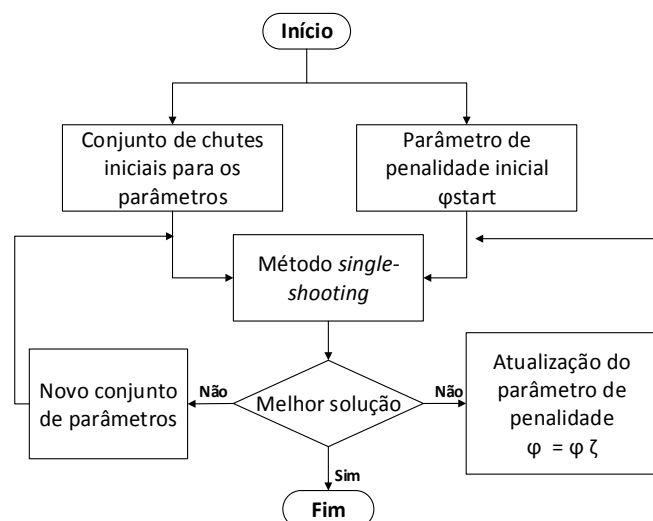


Figura 3.2: Loop externo da metodologia proposta para a estimação dos parâmetros.

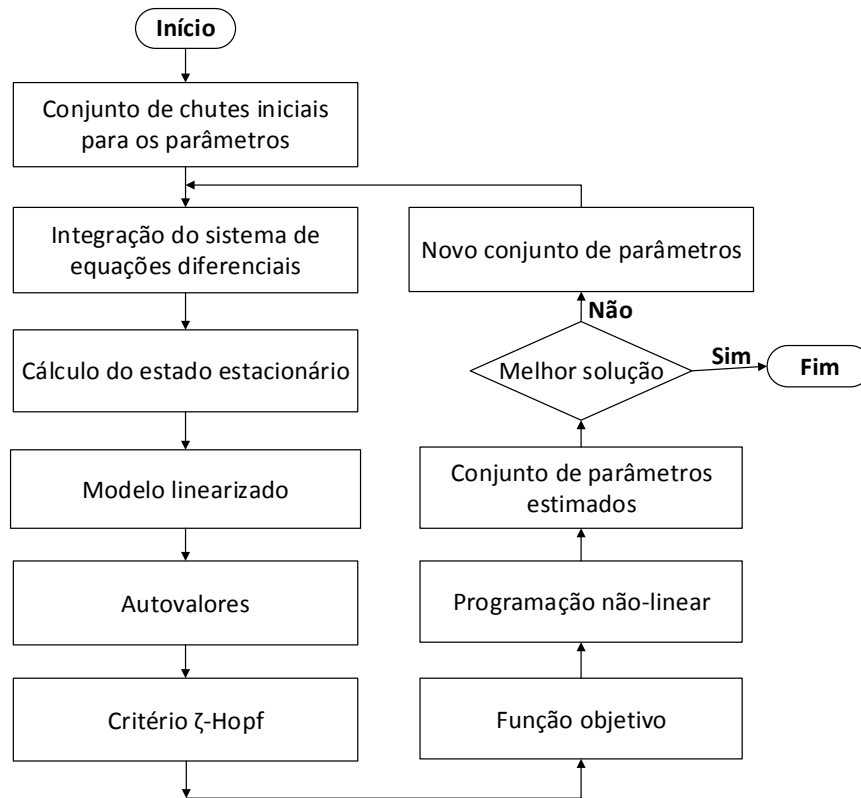


Figura 3.3: Loop interno da metodologia proposta para a estimação dos parâmetros.

Capítulo 4 – Estudo de caso

Neste capítulo primeiramente são apresentadas as abordagens, incluindo a proposta, que têm como objetivo direcionar o problema de otimização a regiões com ciclo limite. O estudo de caso apresentado neste capítulo é o modelo proposto por Jöbges et al. (1986), o qual representa a fermentação contínua da glicose com a bactéria *Zymomonas mobilis*. Nesse estudo de caso é realizada uma análise detalhada, onde são comparados os resultados de todas as abordagens mencionadas.

4.1 Métricas para otimização

4.1.1 Abordagens para a otimização do problema com ciclo limite

A fim de comparar a metodologia proposta com as metodologias para estimação de parâmetros previamente discutidas, diferentes abordagens foram consideradas nos estudos de caso, as quais serão discutidas a seguir.

- Abordagem 1. Método dos mínimos quadrados clássico sem restrições:

O problema de otimização não possui nenhuma restrição, possuindo apenas o termo de mínimos quadrados:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}_i(\theta))^2 \quad (4.1)$$

- Abordagem 2. Inclusão do fator de amortecimento (ζ) como penalidade na função objetivo (metodologia proposta)

O problema de otimização possui uma função de penalidade ζ adicionada ao termo de mínimos quadrados, resultando na função objetivo da Equação 4.2, conforme descrito no item 3.4.

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}_i(\theta))^2 + \varphi \sqrt{\frac{1}{1 + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2}} \quad (4.2)$$

- Abordagem 3. Com o valor real do autovalor (α) como penalidade

Considerando os autovalores do modelo linearizado

$$\mu = \alpha \pm j\beta \quad (4.3)$$

onde α é contribuição real e β é a porção imaginária dos autovalores. O comportamento do ciclo limite requer autovalores complexos conjugados, conforme estudado no item 2.4, com a parte real igual a zero. Portanto, a penalidade advém da restrição de igualdade

$$c_i = \alpha \quad (4.4)$$

a qual é incorporada na função objetivo:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}_i(\theta))^2 + \varphi \cdot \alpha \quad (4.5)$$

- **Abordagem 4.** Inclusão do fator de amortecimento (ζ) como restrição

O problema de otimização possui uma restrição de igualdade (Equação 4.7) associada ao fator de amortecimento:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}_i(\theta))^2 \quad (4.6)$$

$$s. t. \sqrt{\frac{1}{1 + \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^2}} = 0 \quad (4.7)$$

- **Abordagem 5.** Método de Govaerts (2000). Este método foi previamente apresentado na seção 2.4. Neste caso, o problema de otimização é dado por:

$$\min_{\theta} \sum_{i=1}^{ns} (y_i - \widehat{y}_i(\theta))^2 \quad (4.8)$$

$$s. t. G_{bor}(2J \odot I_n) \quad (4.9)$$

onde G_{bor} é o método de matrizes delimitadas (WERNER, 1996), utilizado para evitar o determinante de matrizes singulares; \odot é o produto bialternado (GOVAERTS; SIJNAVE, 1999), que multiplica as matrizes quando elas possuem autovalores complexos; J é a Jacobiana no ponto de equilíbrio e I_n é a matriz identidade com tamanho n .

4.1.2 Avaliação numérica dos resultados

A avaliação numérica dos resultados da otimização pode ser realizada através do erro quadrático e da variância.

O erro quadrático médio (*Mean Squared Error*) da estimação de parâmetros é calculado utilizando as saídas medidas que aparecem na função objetivo, conforme demonstrado na Equação 4.10.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{exp} - y_{sim}(\theta))^2 \quad (4.10)$$

onde n é o número de pontos.

Já o cálculo da variância é dado por

$$V = \sum_{i=0}^n \frac{(y_i - \bar{y})^2}{n-1} \quad (4.11)$$

onde y_i é o cálculo da variável de saída no ponto i , \bar{y} é a média da variável de saída e n é o número de pontos. Além do erro, foi escolhida a análise da variância, pois com seu resultado é possível verificar se o conjunto de dados possui oscilações ou não. Por exemplo, para casos com oscilações, a variância tende a ser elevada uma vez que o somatório da diferença entre os picos (ou vales) em relação à média é alto. Se o conjunto de dados não for oscilatório, a diferença entre a média e o ponto atual é baixa, então a variância é pequena.

Portanto, é avaliada a relação entre a variância simulada e a variância experimental para apenas uma das variáveis de saída:

$$r_x = \frac{V_{sim}}{V_{exp}} \quad (4.12)$$

O objetivo de r_x é relacionar o valor da variância simulada e experimental, de modo que, como os dados de V_{exp} são oscilatórios eles tendem a apresentar variância elevada. Dessa forma, a medida que V_{sim} e V_{exp} se tornam similares, é provável que o modelo tenha capturado de forma satisfatória o comportamento oscilatório dos dados. Sendo assim, valores de $r_x = 1$ indicam que tais variâncias são iguais (Figura 4.1b). Para os estudos de caso deste trabalho, valores muito pequenos indicam baixa aderência ao comportamento oscilatório (Figura 4.1a) e valores muito elevados denotam que o comportamento oscilatório detectado é demasiadamente elevado (Figura 4.1c).

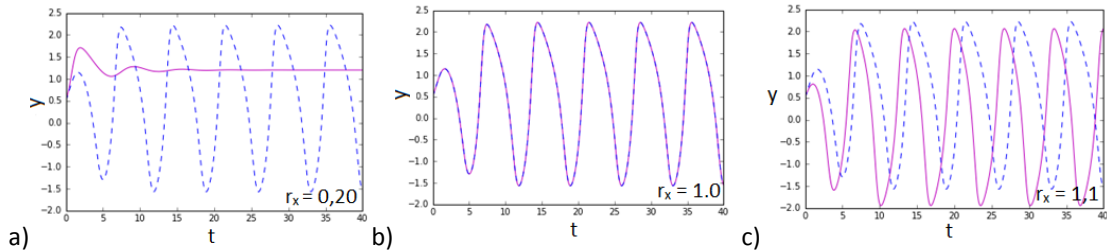


Figura 4.1: Relação de variâncias entre os dados simulados e experimentais.

4.1.3 Intervalo de confiança dos parâmetros

O intervalo de χ % de confiança ao conjunto de resultados, segundo a curva de distribuição de probabilidades, concentra χ % dos resultados admissíveis. Portanto, são descartados os $(100 - \chi)$ % resultados menos prováveis (SCHWAAB; PINTO, 2007). Para calcular o intervalo de confiança dos parâmetros estimados é calculada a matriz de covariância:

$$V_{\theta} = \begin{bmatrix} v_{\theta_1}^2 & v_{\theta_2\theta_1} & v_{\theta_1\theta_{NP}} \\ v_{\theta_1\theta_2} & v_{\theta_2}^2 & v_{\theta_2\theta_{NP}} \\ v_{\theta_{NP}\theta_1} & v_{\theta_{NP}\theta_2} & v_{\theta_{NP}}^2 \end{bmatrix} \quad (4.13)$$

onde NP é o número de parâmetros do modelo e θ_i são os parâmetros do modelo. Os elementos da diagonal são as variâncias de cada parâmetro i , enquanto que os demais elementos são as covariâncias dos parâmetros ij .

Para modelos não-lineares a matriz covariância é obtida, de forma aproximada, da seguinte forma:

$$V_{\theta} = (B^T V_y^{-1} B)^{-1} \quad (4.14)$$

onde B é a matriz de sensibilidade dada por:

$$B = \begin{bmatrix} \left. \frac{\partial y_1}{\partial \theta_1} \right|_{t_0} & \cdots & \left. \frac{\partial y_1}{\partial \theta_{NP}} \right|_{t_0} \\ \left. \frac{\partial y_{NE}}{\partial \theta_1} \right|_{t_0} & \cdots & \left. \frac{\partial y_{NE}}{\partial \theta_{NP}} \right|_{t_0} \\ \left. \frac{\partial y_1}{\partial \theta_1} \right|_{t_n} & \cdots & \left. \frac{\partial y_1}{\partial \theta_{NP}} \right|_{t_n} \\ \left. \frac{\partial y_{NE}}{\partial \theta_1} \right|_{t_n} & \cdots & \left. \frac{\partial y_{NE}}{\partial \theta_{NP}} \right|_{t_n} \end{bmatrix} \quad (4.15)$$

e NE é o número de experimentos (número de saídas \times número de pontos), t_0 é o tempo inicial, e t_n é o tempo final. Por não se conhecer a variância V_y , então considera-se a estimativa da variância experimental:

$$V_y \approx s^2 = \frac{F_{obj}}{NE - NP} \quad (4.16)$$

onde F_{obj} é o valor da função objetivo de mínimos quadrados.

Assim, o intervalo de confiança é dado por

$$\theta_i = \hat{\theta}_i \pm V_{\theta_i} t_{NE-NP}^{1-\chi} \quad (4.17)$$

no qual $\hat{\theta}_i$ é o valor estimado, s_{θ_i} é o desvio padrão do parâmetro obtido através da matriz de covariância e tS é a distribuição t-Student com $NE - NP$ graus de liberdade e um nível de confiança igual a $1 - \chi$. Para todos os estudos de caso é utilizado o intervalo de confiança de 95%.

4.2 Modelo de Jöbses et al. (1986)

O sistema proposto por Jöbses et al. (1986) representa a fermentação contínua da glicose com a bactéria *Zymomonas mobilis*, o qual é um modelo não-segregado e estruturado que divide a biomassa em dois compartimentos e introduz uma nova variável, o componente chave, que leva em consideração a influência da concentração de produto no meio reativo. Este modelo é caracterizado pela existência de multiplicidade de equilíbrios, bifurcação Hopf e mudança de estabilidade do sistema.

4.2.1 Modelagem matemática

O modelo dinâmico definido em Jöbses et al. (1986) é constituído por quatro estados: substrato (S), biomassa (X), produto (P) e o componente chave (e), os quais são dados pelas equações do balanço material (4.18) a (4.21):

$$\frac{dC_S}{dt} = \mu_{max} \left(-\frac{1}{Y_{SX}} \right) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) - m_S C_X + D_f (C_{S0} - C_S) \quad (4.18)$$

$$\frac{dC_X}{dt} = \mu_{max} \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + D_f (C_{X0} - C_X) \quad (4.19)$$

$$\frac{dC_e}{dt} = \mu_{max} (k_1 - k_2 C_P + k_3 C_P^2) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + D_f (C_{e0} - C_e) \quad (4.20)$$

$$\frac{dC_P}{dt} = \mu_{max} \left(\frac{1}{Y_{PX}} \right) \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + m_P C_X + D_f (C_{P0} - C_P) \quad (4.21)$$

onde C_e é a concentração do componente chave E (kg/m³), C_P é a concentração de produto (kg/m³), C_S é a produção de substrato (kg/m³) e C_X é a concentração de biomassa X (kg/m³). C_{S0} é a concentração de substrato de alimentação (kg/m³) e D_f (h⁻¹) é a taxa de diluição. Os demais termos referem-se aos parâmetros do modelo conforme descrito na Tabela 4.11.

O consumo de substrato por microorganismos e a taxa de crescimento de biomassa podem ser respectivamente expressos por:

$$r_s = \left(\frac{1}{Y_{SX}} \right) r_x + m_S C_X \quad (4.22)$$

$$r_x = \mu_m C_X \quad (4.23)$$

A taxa de formação de e leva em consideração a concentração de substrato, produto e do componente chave “ e ”:

$$r_e = f(C_S) f(C_P) C_e \quad (4.24)$$

A relação entre a concentração de substrato e a taxa de crescimento específico é dada pela equação de Monod, onde K_S é a constante de Monod e μ_{max} é a taxa específica de crescimento máxima.

$$f(C_S) = \mu_{max} \left(\frac{C_S}{K_S + C_S} \right) \quad (4.25)$$

A função $f(C_P)$ é dada pela relação de Monod e $f(C_P)$ é um polinômio que advém dos dados experimentais, fornecido por:

$$f(C_P) = k_1 - k_2 C_P + k_3 (C_P)^2 \quad (4.26)$$

Na Tabela 4.1 são mostrados os parâmetros do modelo Jöbses *et al.* (1986), seus valores e suas respectivas unidades.

Tabela 4.1: Valores originais para os parâmetros do modelo de Jöbbses et al. (1986).

Parâmetro	Valor	Unidade
C_{e0} - Concentração de alimentação da biomassa E	0	kg/m ³
C_{p0} - Concentração de alimentação do produto	0	kg/m ³
C_{x0} - Concentração de alimentação de biomassa	0	kg/m ³
D_f – Taxa de diluição	0,07	h ⁻¹
K_S – Constante de Monod	0,5	kg/m ³
k_1 – Constante da taxa de reação	16,0	h ⁻¹
k_2 – Constante da taxa de reação	0,497	m ³ /kg h
k_3 – Constante da taxa de reação	0,00383	m ⁶ /kg ² h
m_s – Fator de manutenção baseado na formação de substrato	2,16	kg/kg h
μ_{max} – taxa específica de crescimento máxima	1	h ⁻¹
m_p – Fator de manutenção baseado na formação de produto	-	kg/kg h
Y_{SX} – Fator de rendimento da conversão de substrato em biomassa	-	kg/kg
Y_{PX} – Fator de rendimento da conversão de biomassa em produto	-	kg/kg

Sendo que as condições iniciais da simulação são $C_S = 80,67$ kg/m³, $C_X = 1,47$ kg/m³, $C_e = 0,08$ kg/m³ e $C_p = 58,08$ kg/m³.

4.2.2 Cenários

Para avaliar as metodologias apresentadas neste trabalho, simulações do modelo de Jöbbses et al. (1986) foram realizadas considerando uma série de cenários previamente definidos. Para isso, inicialmente os parâmetros m_p , Y_{SX} e Y_{PX} foram selecionados para serem estimados, a partir do método de análise de identificabilidade proposto por Botelho et al. (2012).

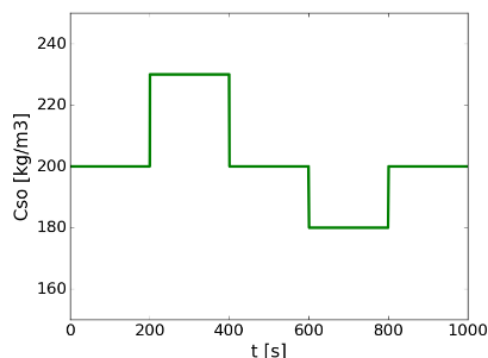
Modificações nos valores originais dos parâmetros selecionados foram realizadas a fim de que o comportamento de bifurcação Hopf fosse atingido. Para isso os cenários foram estruturados considerando os diagramas de bifurcação do fator de manutenção baseado na formação de produto (m_p) e no fator de rendimento da conversão de biomassa em produto (Y_{PX}), enquanto o fator de rendimento da conversão de substrato em biomassa (Y_{SX}) foi mantido constante em 0,02339905. Dados “experimentais” foram gerados considerando estes valores de parâmetros (sendo os demais mantidos de acordo com a Tabela 4.1). Em seguida, desvios nos seus valores foram realizados, sendo estes usados como chutes iniciais na etapa de estimação. A Tabela 4.2 apresenta os valores dos parâmetros usados para a geração dos dados bem como os chutes iniciais para a estimação.

Tabela 4.2: Cenários para a simulação do modelo de Jöbses et al. (1986).

Cenário	Valores para geração dos dados	Chute inicial para a estimação*
A	$m_p = 1,3$ $Y_{Px} = 0,06$	85%
B	$m_p = 1,4$ $Y_{Px} = 0,05$	60%
C	$m_p = 1,7$ $Y_{Px} = 0,045$	40%
D	$m_p = 1,55$ $Y_{Px} = 0,05$	60%

* Em relação aos valores usados para a geração dos dados.

Para a geração dos dados “experimentais” simulações do modelo foram realizadas considerando a configuração para os parâmetros previamente discutida. Além disso, a concentração de alimentação de substrato (C_{So}) foi perturbada conforme ilustrado na Figura 4.2.

**Figura 4.2:** Perturbação na concentração de alimentação de substrato.

Distúrbios não-medidos, i.e., que não foram levados em conta como entrada para a estimação dos parâmetros, foram adicionados à taxa de diluição em dois dos cenários propostos. Foi considerado um distúrbio no cenário B de acordo com a Figura 4.3a e um distúrbio no cenário C, conforme apresentado nas Figura 4.3b.

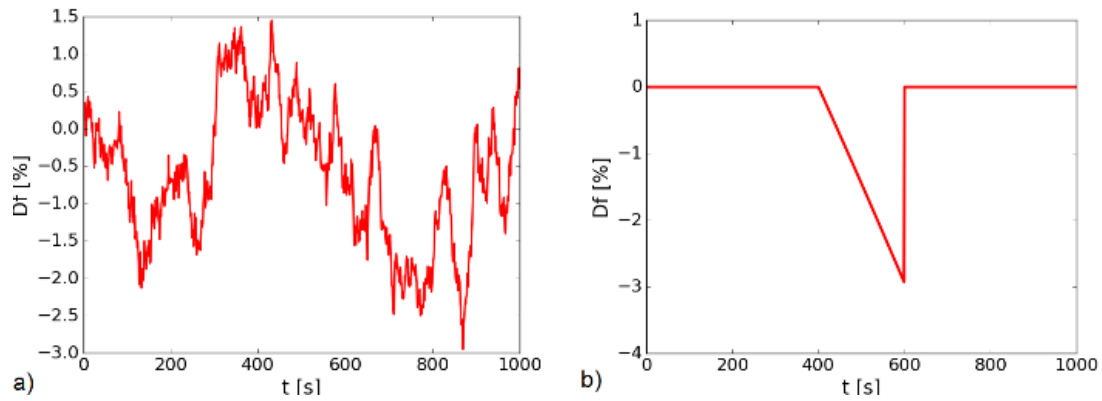


Figura 4.3: Distúrbios na taxa de diluição para o (a) cenário B e o (b) cenário C.

Para a geração do cenário D, um erro estrutural no modelo foi adicionado. Neste caso a Equação 4.20 do modelo de Jöbses et al. (1986) é substituída pela Equação 4.27. Cabe salientar que esta modificação foi realizada apenas para a geração de dados considerados como sendo experimentais:

$$\frac{dC_e}{dt} = \frac{\mu_{max}C_p(k_1 - k_2C_p + k_3C_p^2)}{(C_p + 1)} \left(\frac{C_S C_e}{K_S + C_S} \right) + D_f(C_{e0} - C_e) \quad (4.27)$$

Embora o modelo de Jöbses et al. (1986) tenha quatro variáveis de estado (C_e, C_p, C_S, C_x) , apenas duas variáveis de saída são consideradas medidas (C_p, C_S) no problema de mínimos quadrados, uma vez que essas são as medidas mais factíveis de serem medidas em um processo de fermentação real. A estas saídas um ruído branco com magnitude de 5% em relação aos estados foi adicionado em todos os cenários na geração dos dados experimentais.

Utilizando os dados gerados em cada cenário, os parâmetros m_p , Y_{SX} e Y_{PX} foram estimados de acordo com as abordagens descritas na seção 4.1. Em cada caso o chute inicial para os parâmetros foi conforme a Tabela 4.2.

4.2.3 Análise da função objetivo

Uma análise preliminar considerando os valores da função objetivo em função dos parâmetros Y_{PX} e m_p , que são os mais sensíveis em relação ao ciclo limite, para as abordagens 1 e 2 e cenário A (i.e., mínimos quadrados clássicos e fator de amortecimento como penalidade) foi realizada. Os resultados são ilustrados na Figura 4.4:

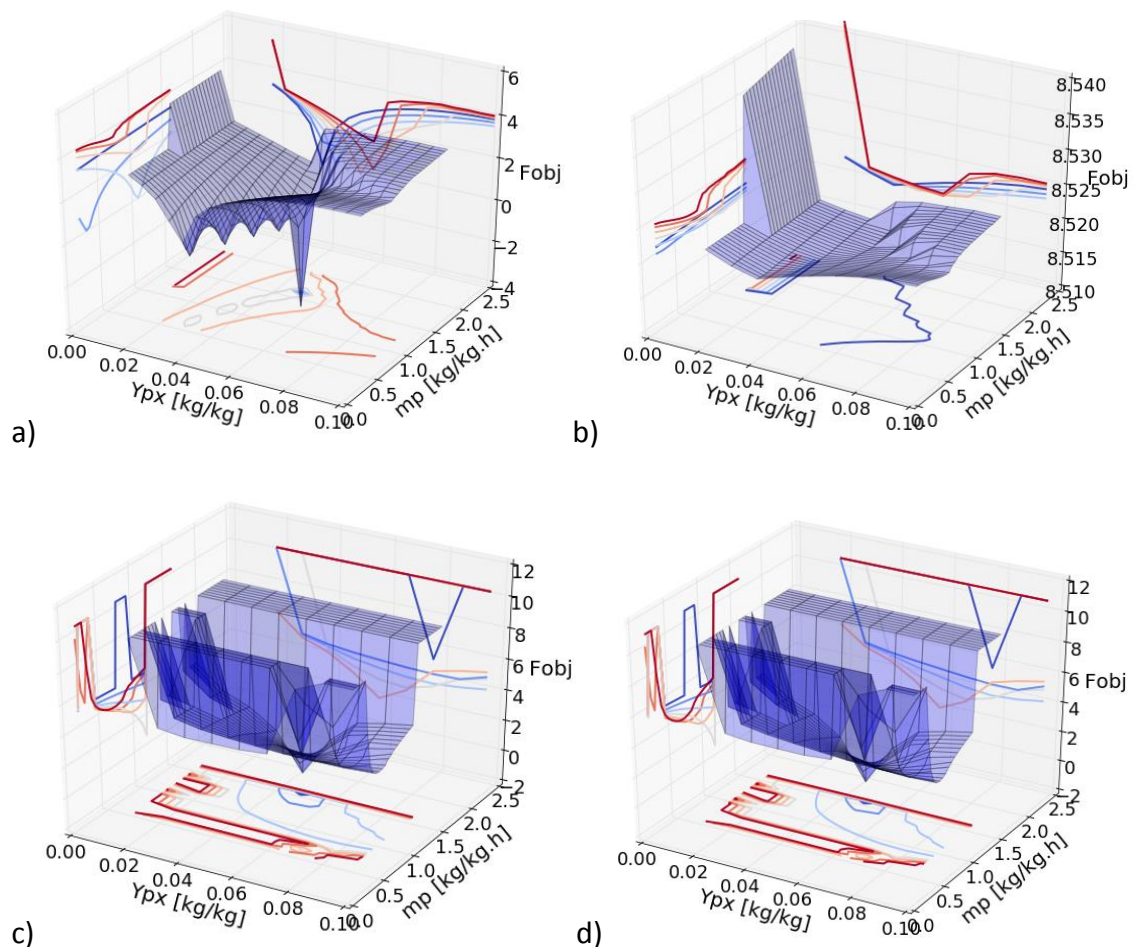


Figura 4.4: Gráfico da função objetivo do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 5e3$, (c) $\varphi = 1e4$ e (d) $\varphi = 1,5e4$.

A Figura 4.4a mostra que, quando a estimação de parâmetros é realizada considerando apenas o método de mínimos quadrados, o problema é altamente não-convexo, de modo que existem vários mínimos locais próximos ao mínimo global. Isto implica que um chute inicial distante do valor correto para os parâmetros pode levar a uma solução distante do ótimo global. No entanto, quando a metodologia sugerida neste trabalho é utilizada (Figura 4.4c) com um valor de parâmetro de penalidade suficientemente alto a não-convexidade do problema, dependendo do valor de φ , é eliminada ou pelo menos reduzida. É importante destacar que o parâmetro de penalidade após um certo valor não influencia mais na convexidade da função objetivo.

Dessa forma a vantagem da metodologia proposta é que mesmo para um chute inicial distante, o conjunto de parâmetros converge para valores que levam a simulação para próximo da região com ciclo limite ($\zeta \rightarrow 0$) e enquanto ζ está próximo de zero, a atualização do parâmetro de penalidade φ resulta em um valor muito pequeno, praticamente desconsiderando a penalidade. Então, com os próximos passos iniciando apenas com o termo de mínimos quadrados na função objetivo, e com um bom chute inicial para o comportamento de ciclo limite, o *solver* pode ajustar o modelo aos dados experimentais mais adequadamente.

4.2.4 Resultados e discussão

Os resultados para a estimação de parâmetros do modelo de Jöbses et al. (1986) para os cenários A, B, C e D são mostrados na Tabela 4.3 como o erro quadrático médio (MSE) das variáveis de estado C_P e C_S , variância (r_x) da variável C_P e tempo de otimização (T_{opt}) dado em minutos.

Tabela 4.3: Resultados dos erros quadráticos do modelo de Jöbses et al. (1986) para todos os cenários e seus respectivos casos.

Abor	Cenário											
	A			B			C			D		
	MSE	r_x	T_{opt}	MSE	r_x	T_{opt}	MSE	r_x	T_{opt}	MSE	r_x	T_{opt}
1	2,08	0,11	0,8	0,45	0,09	1,0	0,66	0,12	1,7	0,67	0,08	1,6
2	0,38	1,00	11	0,05	1,00	3,0	0,07	1,03	28	0,35	1,10	24
3	1,93	0,77	32	0,51	1,78	73	0,71	0,40	51	0,34	1,04	73
4	2,58	0,82	1,3	1,70	4,48	1,5	0,78	1,44	3,4	0,80	0,64	1,8
5	2,02	0,31	1,7	1897	514	1,6	12,0	0,37	1,5	1300	204	1,5

Conforme apresentado na Tabela 4.3, os melhores resultados para os erros quadráticos, ou seja, os valores mais baixos são dados pela abordagem 2, seguido da abordagem 1. Em relação à variância, as abordagens 2, 3 e 4 e são as que indicam numericamente a presença de oscilações (ou seja, valores próximos ou maiores do que um), enquanto a abordagem 1 é a que possui valores mais próximo de zero, indicando que essa pode ser incapaz de representar o comportamento oscilatório de forma similar aos dados. Já a abordagem 5 foi a que apresentou valores da variância muito pequenos ou muito grandes (dados muito defasados em relação a sua média). Ademais, destaca-se que a abordagem 2 possui valores da variância muito próximos a um, o que pode indicar que além dos dados serem oscilatórios, eles podem ter aderência aos dados experimentais.

A fim de analisar o comportamento do modelo utilizando o conjunto de parâmetros obtidos através das abordagens 1 e 2, são apresentados os resultados da simulação do modelo com os parâmetros estimados para o modelo de Jöbses *et al.* (1986) para os cenários A, B, C e D, nas Figuras 4.5, 4.6, 4.7 e 4.8, respectivamente.

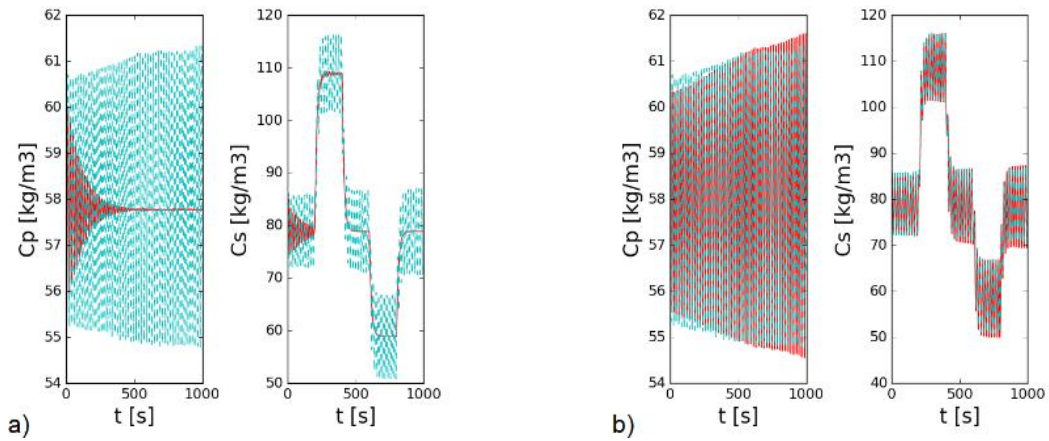


Figura 4.5: Cenário A do modelo de Jöbjes et al. (1986) (a) abordagem 1: sem penalidade e b) abordagem 2: com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

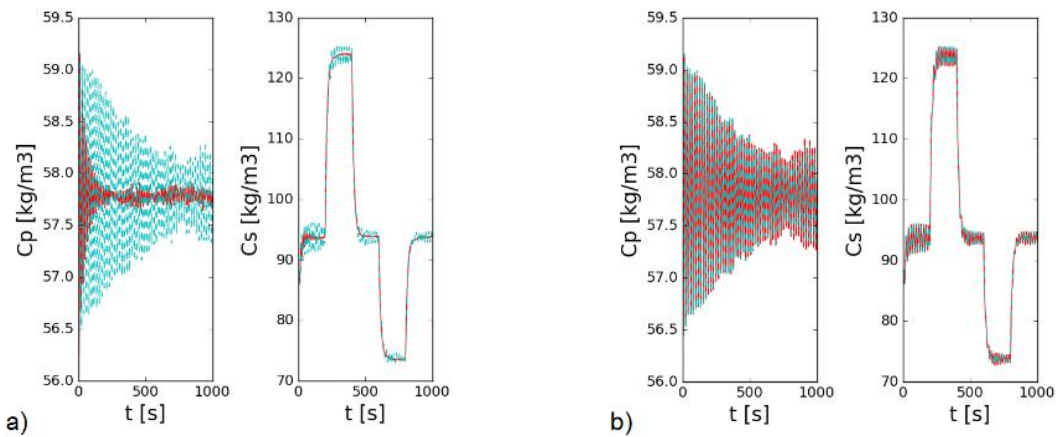


Figura 4.6: Cenário B do modelo de Jöbjes et al. (1986) (a) abordagem 1: sem penalidade e b) abordagem 2: com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

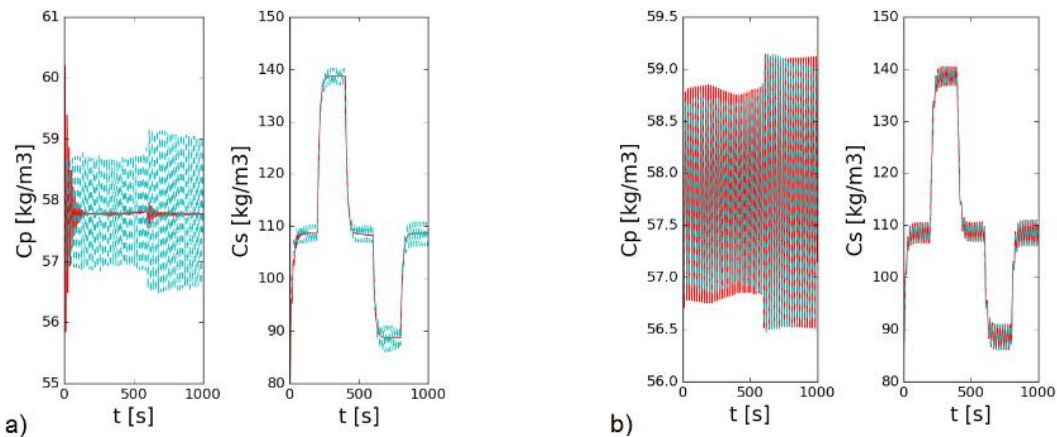


Figura 4.7: Cenário C do modelo de Jöbjes et al. (1986) (a) abordagem 1: sem penalidade e b) abordagem 2: com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

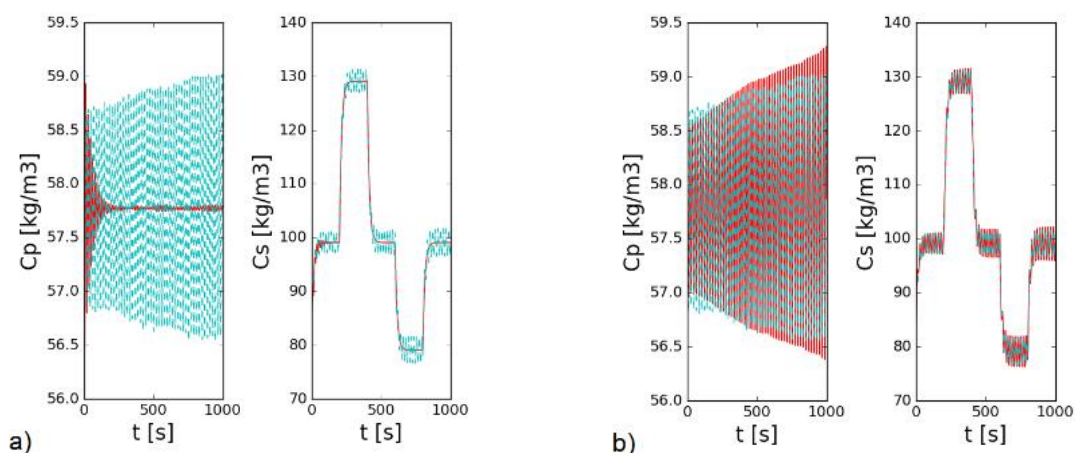


Figura 4.8: Cenário D do modelo de Jöbses et al. (1986) (a) sem penalidade e (b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

Para o caso sem penalidade (abordagem 1), o resultado alcança um conjunto de parâmetros que levam o sistema a um comportamento sem ciclo limite, visto que os estados simulados pelo modelo convergem para um valor estacionário. No entanto, para casos onde a penalidade ζ é adicionada ao termo de mínimos quadrados, os resultados mostram o comportamento típico do ciclo limite. Mesmo para chutes iniciais relativamente ruins, como 40% do valor original, e com distúrbios na taxa de alimentação, a otimização alcança um bom conjunto de parâmetros.

O tempo de otimização (T_{opt}), dado em minutos na Tabela 4.3, mostra que as abordagens que utilizam penalidade são as que demandam mais tempo de otimização. Isso acontece pois são necessárias várias iterações do método *single-shooting*, conforme o método de penalidade exata, para finalizar a estimação. Enquanto isso, os outros métodos (incluindo com a presença das restrições) demoram muito menos tempo. Apesar da abordagem 2 demorar em média 16,5 minutos para otimizar, enquanto a abordagem 1 demora apenas 1,3 minuto em média, ela é a que retorna os melhores resultados.

Os valores dos parâmetros estimados e seus respectivos intervalos de confiança para cada cenário, utilizando a abordagem 2, são mostrados na Tabela 4.4.

Tabela 4.4: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do modelo de Jöbses et al. (1986) utilizando a abordagem 2.

Parâmetros	Cenário			
	A	B	C	D
m_p (kg/kg h)	1,3413±0,000136	1,4037±0,000006	1,7220±0,002031	1.6870±0,000108
Y_{Px} (kg/kg)	0,0585±0,000182	0,0500±0,000007	0,0443±0,002672	0,0463±0,000179
Y_{Sx} (kg/kg)	0,0222±0,005203	0,0233±0,002082	0,0228±0,075816	0,0204±0,004484

Apesar de a abordagem 2 ter obtido o melhor resultado dentre as demais, ela ainda não foi capaz de alcançar o valor exato dos parâmetros que geraram os dados simulados. Essas pequenas diferenças podem ser justificadas pelos ruídos e distúrbios não-medidos aplicados no modelo para a geração dos dados.

Na Figura 4.9 são mostrados os planos de fase para os cenários A, B, C e D considerando os parâmetros ótimos determinados pela estimação de parâmetros.

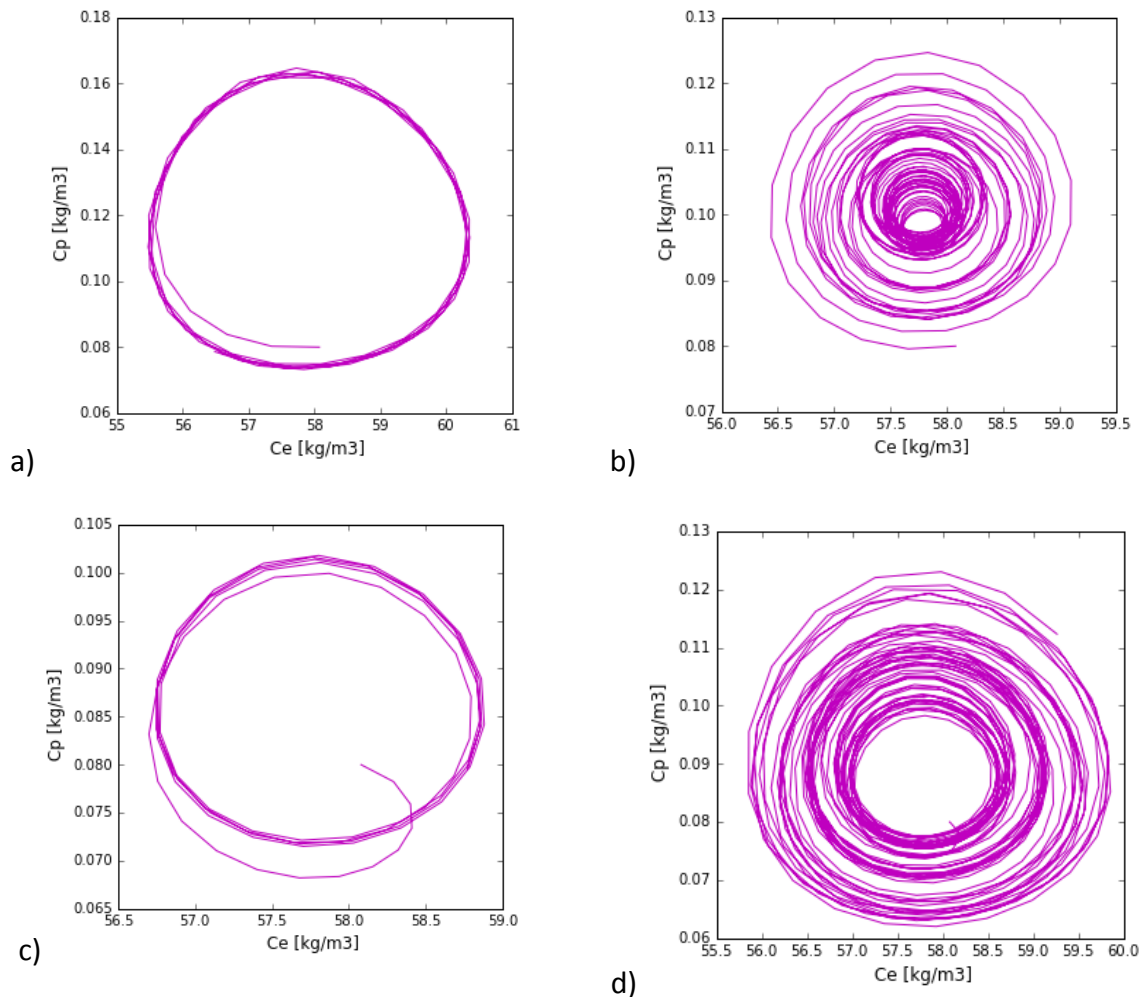


Figura 4.9: Planos de fase para os cenários A, B, C e D do modelo de Jöbses et al. (1986).

4.2.5 Validação

Com os modelos já identificados, é realizada uma etapa de validação, a qual consiste em verificar a capacidade de predição dos modelos obtidos considerando um novo conjunto de dados experimentais. Portanto, a qualidade do modelo pode ser verificada através da sua simulação, onde são obtidos dados sob diferentes condições operacionais com os parâmetros estimados através da etapa de estimação e esses são comparados com os dados obtidos através dos parâmetros originais.

O modelo foi simulado para os cenários A, B, C e D utilizando a abordagem 2 com um distúrbio na taxa de diluição D_f conforme a Figura 4.10.

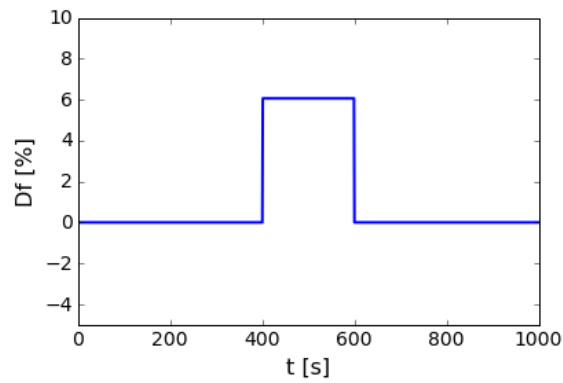


Figura 4.10: Distúrbio na taxa de diluição para a etapa de validação para o modelo de Jöbses et al. (1986).

A Tabela 4.5 apresenta os resultados destas simulações para os subconjuntos de parâmetros estimados na etapa anterior sob condições experimentais diferentes, onde o erro quadrático médio das variáveis de estado C_P e C_S é dado por MSE , e a variância da variável C_P é dada por r_x .

Tabela 4.5: Resultados dos erros quadráticos e variâncias do modelo de Jöbses et al. (1986) para todos os cenários e abordagem 2.

Cenário	MSE	r_x
A	0,92	0,98
B	0,12	0,86
C	1,16	1,11
D	2,31	2,07

Através da Tabela 4.5 analisa-se que os maiores erros são dados pelos cenários C e D, enquanto que os valores de variância mais distantes de 1 são os dos cenários B e D. Com o objetivo de verificar o comportamento do modelo sob as condições de validação, são apresentadas as Figuras 4.11 e 4.12.

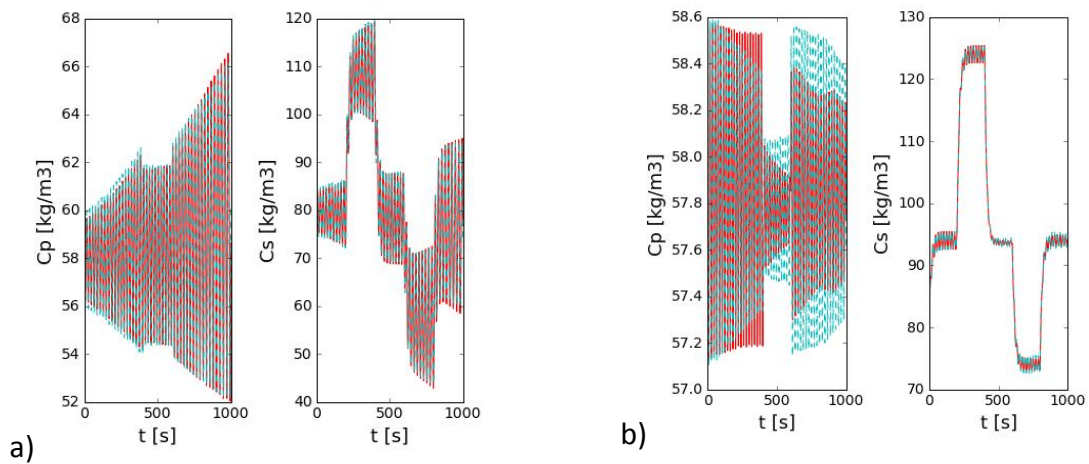


Figura 4.11: Validação do modelo de Jöbses et al. (1986) para o (a) cenário A e (b) cenário B. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

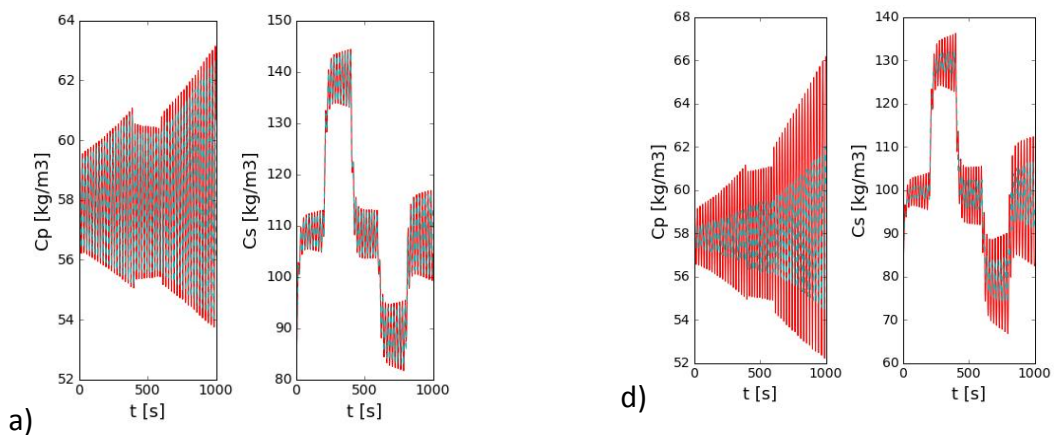


Figura 4.12: Validação do modelo de Jöbses et al. (1986) para o (a) cenário C e (b) cenário D. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

Os cenários B e D mostram uma maior diferença modelo/experimental, pois possuem os chutes iniciais mais distantes do valor original, além da presença da discrepância paramétrica no último cenário. Apesar disso, constata-se que, de uma forma geral, o padrão de qualidade dos resultados se manteve em relação à etapa de estimação.

Capítulo 5 – Aplicação na produção de petróleo *offshore*

Neste capítulo é estudada a aplicação da metodologia proposta na produção de petróleo *offshore*, uma vez que essa foi a principal motivação deste estudo. Existem vários trabalhos que abordam a modelagem dinâmica simplificada do fenômeno da golfada na produção de petróleo. Primeiramente é considerado o modelo simplificado de Meglio *et al.* (2009), que possui apenas três estados dinâmicos e representa apenas a região do sistema *pipeline/riser*. Em sequência, é abordado o modelo estendido de Diehl *et al.* (2017), com seis estados dinâmicos, que representa a dinâmica das regiões *anular/tubing* e *pipeline/riser*. Por fim se tem a aplicação no modelo FOWM, onde é realizada a estimação de parâmetros nesse modelo com os dados de planta de produção *offshore* de uma plataforma de petróleo nacional.

5.1 Modelo de Meglio *et al.* (2009)

Meglio *et al.* (2009) propuseram um modelo simples para representar o regime de fluxo das golfadas em tubos verticais, onde é considerado um fluxo unidimensional composto de uma fase líquida e uma fase gasosa compressível. Esse modelo pode ser aplicado a uma grande classe de sistemas, indo desde tubos verticais puros até geometrias mais complexas, como aquelas encontradas nas instalações de extração de petróleo submarinas reais. A fim de reproduzir os regimes periódicos característicos deste tipo de escoamento, foi introduzida uma válvula virtual localizada no fundo do tubo, o qual também traz conhecimento da física associada ao fenômeno das golfadas.

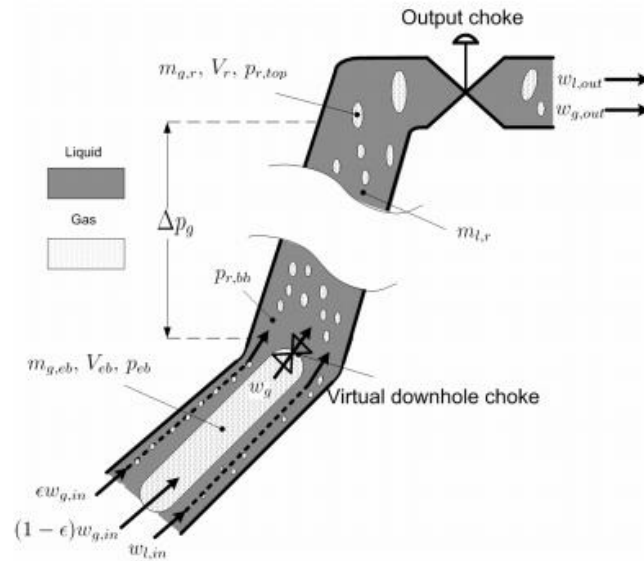


Figura 5.1: Diagrama esquemático do sistema. Fonte: Meglio *et al.* (2009).

5.1.1 Modelagem matemática

O modelo é proposto considerando os princípios de balanço de massa, segundo a Figura 5.1. Considera-se que o tubo contém três distintos volumes, dois deles são preenchidos com gás, e separados por uma válvula virtual horizontal, enquanto o último volume é preenchido com líquido. Esse esquema salienta a possível existência de uma interface de obstrução de líquido em um certo local no *riser* (tubo longo que conecta o reservatório às instalações da superfície para a produção de óleo), o qual é modelado por uma válvula virtual, impedindo o gás de fluir normalmente. Isso produz a formação de uma grande e alongada bolha atrás dessa interface. Nesta bolha alongada, a pressão acumulada ocorre e eventualmente gera instabilidades associadas às oscilações. As variáveis de estado são as massas de gás na bolha alongada ($m_{g,eb}$), no *riser* ($m_{g,r}$), e da massa do líquido no *riser* ($m_{l,r}$). A conservação de massa leva a:

$$\frac{dm_{gb}}{dt} = (1 - \epsilon)w_{gin} - w_g(t) \quad (5.1)$$

$$\frac{dm_{gr}}{dt} = \epsilon w_{gin} + w_g(t) - w_{gout}(t) \quad (5.2)$$

$$\frac{dm_{lr}}{dt} = w_{lin} - w_{lout}(t) \quad (5.3)$$

onde w_{gin} e w_{gout} são as vazões mássicas de gás na entrada e na saída do *riser*, respectivamente; w_{lin} e w_{lout} são as vazões mássicas de líquido na entrada e na saída do *riser*, respectivamente e w_g é a vazão mássica de gás através do orifício da válvula virtual *choke*. O fluido petrolífero ao ser extraído alcança a cabeça do poço produtor com um elevado valor de pressão em função das características do reservatório ou do método de elevação artificial; neste ponto utiliza-se a válvula *choke* para quebrar a pressão do escoamento produzido e permitir o controle da vazão do poço produtor, harmonizando-a à pressão de trabalho dos equipamentos a jusante ("Escoamento em tubulações horizontais", [s.d.]). Neste modelo, uma fração da vazão de gás flui diretamente até a parte superior do tubo, e o gás remanescente acumula na parte inferior do volume V_{eb} , causando o acúmulo da pressão.

Conforme mencionado anteriormente, os fluxos de gás (w_{gin}) e líquido (w_{lin}) são assumidos constantes. A massa de gás no *riser* é negligenciada, visto que representa uma quantidade muito pequena quando comparada à massa de líquido no tubo. No entanto, se w_{out} é a massa total da vazão mássica através da produção da válvula *choke* então:

$$w_{g,out} = \frac{m_{gr}}{m_{gr}+m_{lr}} w_{out} \approx \frac{m_{gr}}{m_{lr}} w_{out} \quad (5.4)$$

$$w_{l,out} = \frac{m_{lr}}{m_{gr}+m_{lr}} w_{out} \approx w_{out} \quad (5.5)$$

As únicas modificações feitas no modelo de Meglio *et al.* (2009) foram as suavizações das equações de válvulas; elas são funções da queda de pressão sobre a válvula *choke* em consideração (real ou virtual). Meglio *et al.* (2009) também assumem que não há nenhum fluxo de volta através dessas válvulas, levando às seguintes expressões para os fluxos não-constantas:

$$w_g = C_g \frac{(p_{eb}-p_{rb})+\sqrt{(p_{eb}-p_{rb})^2+\varepsilon}}{2} \quad (5.6)$$

$$w_{out} = C_{out} u \sqrt{\rho_l \frac{(p_{rt}-p_s)+\sqrt{(p_{rt}-p_s)^2+\varepsilon}}{2}} \quad (5.7)$$

onde p_{eb} é a pressão de gás na bolha alongada, p_{rb} é a pressão do gás corrente abaixo da válvula *choke*, p_{rt} é a pressão acima da *choke* de produção, e p_s é a pressão de separação. C_g e C_{out} são constantes positivas.

As pressões no *riser* são dadas pela lei de gases ideais. O volume na bolha alongada V_{eb} é assumido constante, onde o gás corrente abaixo da *choke* virtual é assumido como compressível. O seu volume V_{gr} depende da massa do líquido nesta parte:

$$V_{gr} = V_r - \frac{m_{lr}}{\rho_l} \quad (5.8)$$

onde V_r é o volume do tubo. Além disso, supõe-se que a queda de pressão sobre o *riser* é dominada pela gravidade (fricção sendo negligenciada).

$$p_{eb} = \frac{RT}{MV_{eb}} m_{gb} \quad (5.9)$$

$$p_{rb} = p_{rt} + \frac{g \sin \theta}{A} (m_{lr} + m_{lstill}) \quad (5.10)$$

$$p_{rt} = \frac{RT}{M \left(V_r - \frac{m_{lr} + m_{lstill}}{\rho_l} \right)} m_{gr} \quad (5.11)$$

onde p_{eb} é a pressão na bolha acumulada, p_{rb} é a pressão à montante da válvula virtual, p_{rt} é a pressão no topo do *riser*, θ é a inclinação do *riser*, e A é a área do corte transversal.

Na Tabela 5.1 são mostrados os parâmetros do modelo de Meglio *et al.* (2009), seus valores e suas respectivas unidades.

Tabela 5.1: Parâmetros do modelo de Meglio *et al.* (2009).

Parâmetro	Valor	Unidade
ρ_l – Densidade do líquido	900	kg/m ³
p_s – Pressão de separação	6,6e5	Pa
T – Temperatura	363	K
M – Massa molar do gás de elevação	0,022	kg/mol
θ – Inclinação do <i>riser</i>	$\pi/4$	rad
A – Área do corte transversal	0,0177	m ²
D – Diâmetro do <i>riser</i>	0,15	m
L – Comprimento do <i>riser</i>	5200	m
$m_{l,still}$ – Massa mínima de líquido no <i>riser</i>	37300	kg
w_{gin} – Vazão mássica de gás entrando no <i>riser</i>	0,82	kg/s
w_{lin} – Vazão mássica de líquido entrando no <i>riser</i>	11,75	kg/s
C_g – Coeficiente de fluxo da bolha alongada	1e-4	m ⁻¹
ϵ – Fração de vazão de gás	0,78	-
V_{eb} – Volume da bolha alongada	48,0	m ³
C_{out} – Coeficiente de fluxo da <i>choke</i>	2.8e-3	m ⁻¹

Onde as condições iniciais da simulação são $m_{gb} = 5413,2$ kg, $m_{gr} = 270,4$ kg e $m_{lr} = 4967$ kg.

5.1.2 Cenários

Alguns dos parâmetros do modelo de Meglio *et al.* (2009) foram selecionados para serem estimados, sendo eles o C_g , ϵ , V_{eb} e C_{out} . Essa seleção foi feita de acordo com um método de identificabilidade prática de Botelho *et al.* (2012). Os cenários foram estruturados mantendo os mesmos valores para os parâmetros conforme Tabela 5.1, modificando apenas o chute inicial de todos os parâmetros para a otimização.

Tabela 5.2: Cenários para a simulação do modelo de Meglio *et al.* (2009).

Cenário	Chute inicial*
A	50%
B	40%
C	110%
D	50%

* Relativo aos valores originais.

O cenário D contém uma discrepância estrutural no modelo, onde as Equações (5.6) e (5.7) são substituídas pelas Equações (5.12) e (5.13) para a geração de dados experimentais, que são as versões não suavizadas dessas funções, originais do modelo de Meglio *et al.* (2009).

$$w_g = C_g \max(0, (p_{eb} - p_{rb})) \quad (5.12)$$

$$w_{out} = C_{out} u \sqrt{\rho_l (p_{rt} - p_s)} \quad (5.13)$$

Dados experimentais foram gerados a partir da simulação do modelo, considerando os valores originais apresentados na Tabela 5.1, considerando a abertura da *choke* constante e igual a 0,3%. Além disso, um ruído branco com magnitude de aproximada 5% dos valores de saída foi adicionado aos estados na geração dos dados experimentais. A partir dos dados gerados, a estimação dos parâmetros selecionados foi realizada considerando como chute inicial para otimização os valores descritos na Tabela 4.6.

O modelo de Meglio et al. (2009) possui três variáveis de estado (m_{geb}, m_{gr}, m_{lr}), que não possuem possibilidade de serem medidas na prática. Portanto, no problema de mínimos quadrados são consideradas apenas as medições das variáveis p_{rt} e p_{rb} , uma vez que essas são medidas reais no processo.

5.1.3 Análise da função objetivo

Uma análise preliminar considerando os valores da função objetivo em função dos parâmetros ϵ, V_{eb} para as abordagens 1 e 2 (i.e., mínimos quadrados clássicos e fator de amortecimento como penalidade) foi realizada. Os resultados são ilustrados na Figura 4.9. Dentre os parâmetros selecionados para a estimação, optou-se por estes para a realização da análise da função objetivo devido a maior incidência de mínimos locais gerada para este caso.

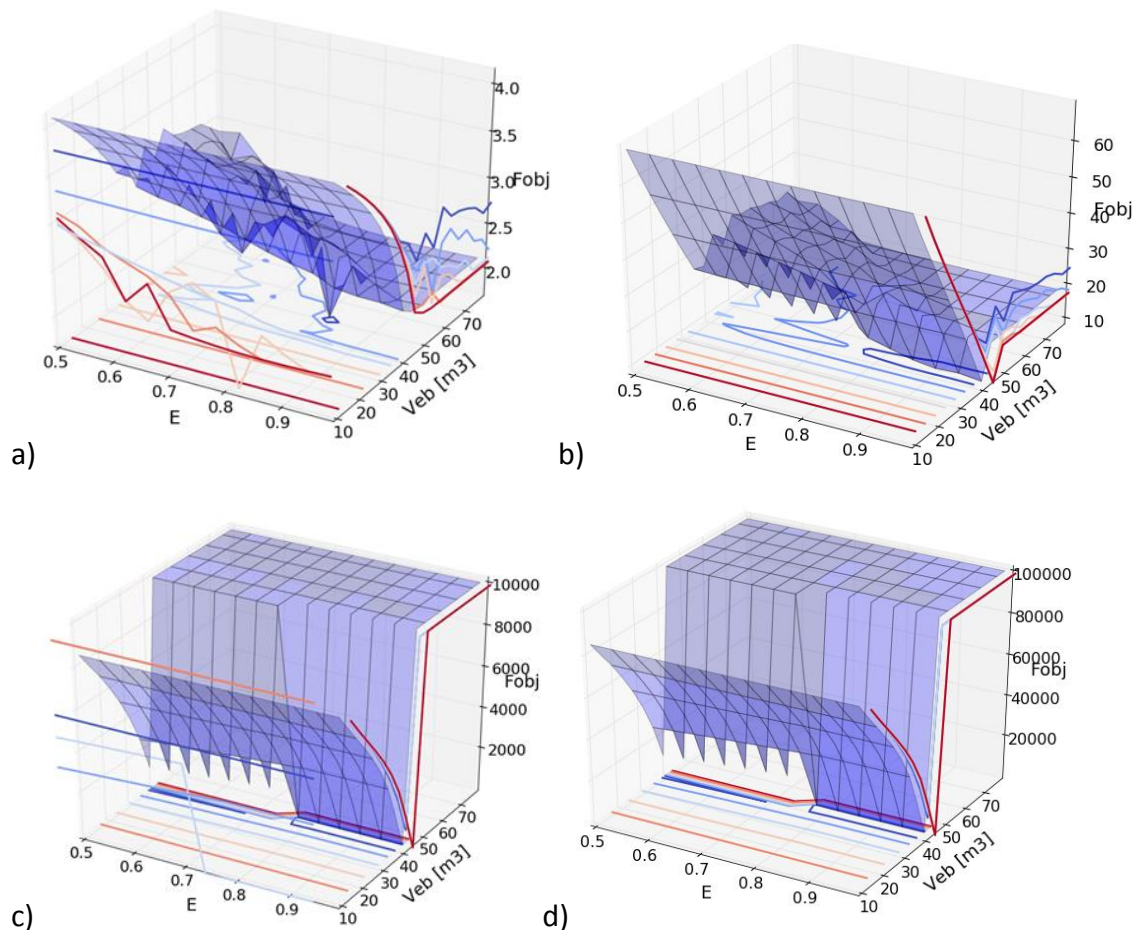


Figura 5.2: Gráfico da função objetivo do modelo de Meglio *et al.* (2009) (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 10$, (c) $\varphi = 1e4$ e (d) $\varphi = 1e5$.

Conforme ilustrado na Figura 5.2a, utilizando apenas a função objetivo de mínimos quadrados, é possível verificar vários mínimos locais próximos do mínimo global. Dessa forma, qualquer chute distante do valor original para o problema de otimização pode levar a solução para um mínimo local. Já na Figura 5.2c, para a função objetivo com penalidade, observa-se que a função objetivo é não-convexa, pois apresenta um conjunto de mínimos locais para o parâmetro V_{eb} no valor fixo de 48 m^3 . Isso acontece, pois no intervalo de ϵ entre 0,5 e 1,0, para V_{eb} fixo em 48 m^3 o valor de ζ está próximo de zero, significando que para todo esse segmento de ϵ o sistema oscila. Assim, apesar de não existir exatamente um mínimo local na função objetivo, o termo de mínimos quadrados pode compensar essa possível dificuldade através da aderência do modelo aos dados experimentais. Neste caso também se observa que o parâmetro de penalidade, após um certo valor, não influencia mais na convexidade da função objetivo.

5.1.4 Resultados e discussão

Os resultados do erro quadrático médio (MSE) das variáveis p_{rt} e p_{rb} , e da variância da variável p_{rt} (r_x) da estimação de parâmetros do modelo de Meglio *et al.* (2009) para os cenários A, B, C e D são apresentados para as três abordagens que obtiveram os melhores resultados para o estudo de caso de Jöbses *et al.* (1986), conforme Tabela 5.3.

Tabela 5.3: Resultados dos erros quadráticos do modelo de Meglio *et al.* (2009) para os cenários e seus respectivos casos.

Abordagem	Cenário							
	A		B		C		D	
	MSE	r_x	MSE	r_x	MSE	r_x	MSE	r_x
1	8,81	0,04	20,23	2,71	8,87	0,07	8,81	0,04
2	4,81	1,08	7,47	0,83	7,61	0,56	4,75	0,55
3	7,20	0,25	7,28	0,28	5,38	0,50	NO	NO

Conforme apresentado na Tabela 4.7, os erros quadráticos são significativamente menores para todos os cenários quando a penalidade ζ é utilizada (abordagem 2). Numericamente, através da análise das variâncias, a abordagem 1 não possui comportamento oscilatório, com exceção do cenário B, enquanto que para a abordagem 2 os resultados ficam mais próximos de 1, exceto para o cenário D. A abordagem 3 obteve resultados piores para o erro comparado à abordagem 2, enquanto que em relação à variância, ela também não foi capaz de representar o comportamento oscilatório do sistema. Além disso, para esa mesma abordagem, para o cenário D não foi possível realizar a otimização (NO).

A fim de ratificar essa constatação, são analisados os resultados da estimação de parâmetros do modelo de Meglio *et al.* (2009) para os cenários A, B, C e D nas Figuras 5.3, 5.4, 5.5 e 5.6, respectivamente, onde são mostrados graficamente apenas os resultados das abordagens 1 e 2.

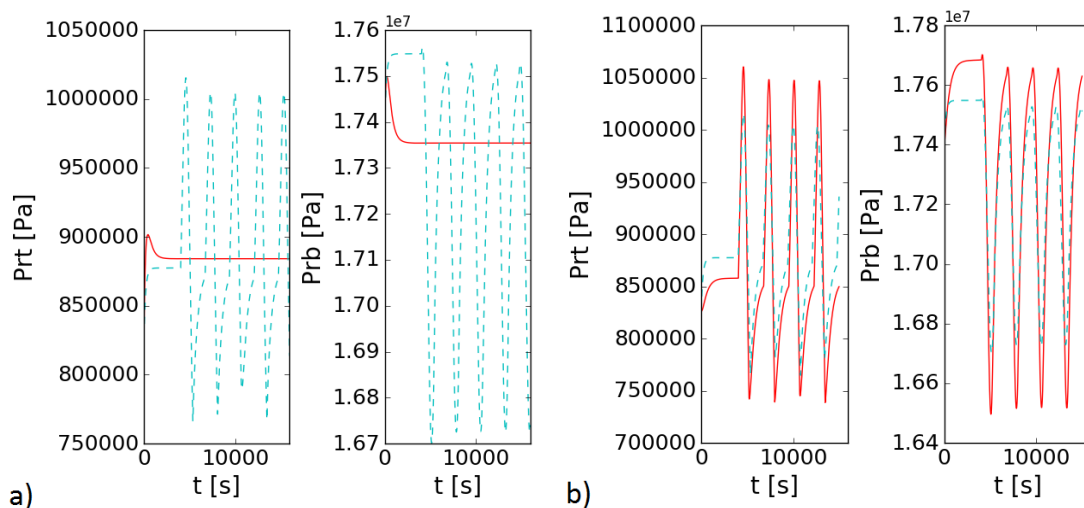


Figura 5.3: Cenário A do modelo de Meglio *et al.* (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

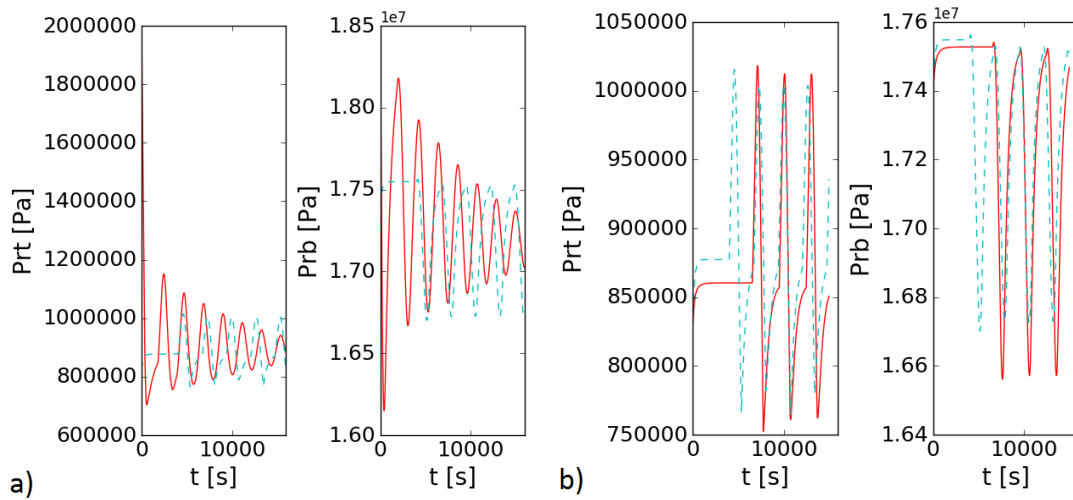


Figura 5.4: Cenário B do modelo de Meglio *et al.* (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os “dados experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

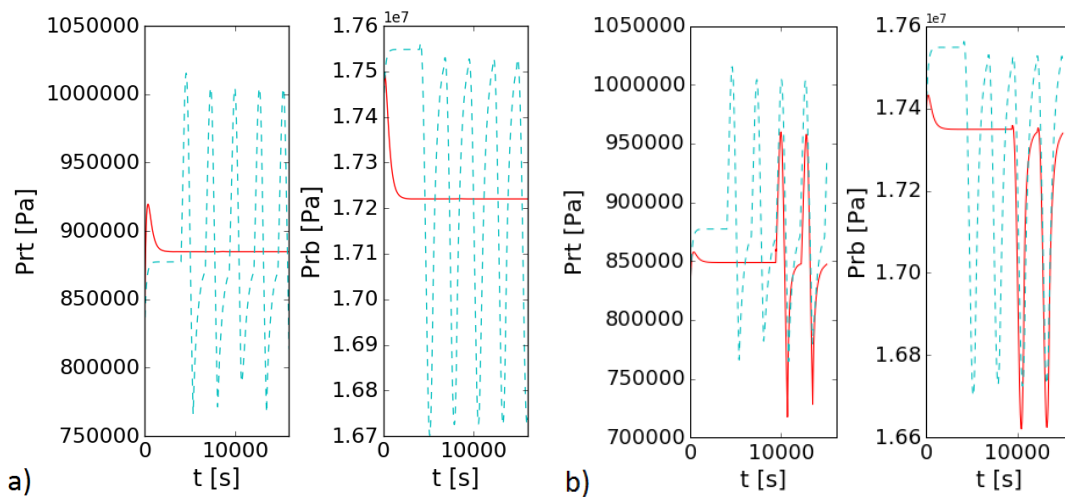


Figura 5.5: Cenário C do modelo de Meglio *et al.* (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados experimentais são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

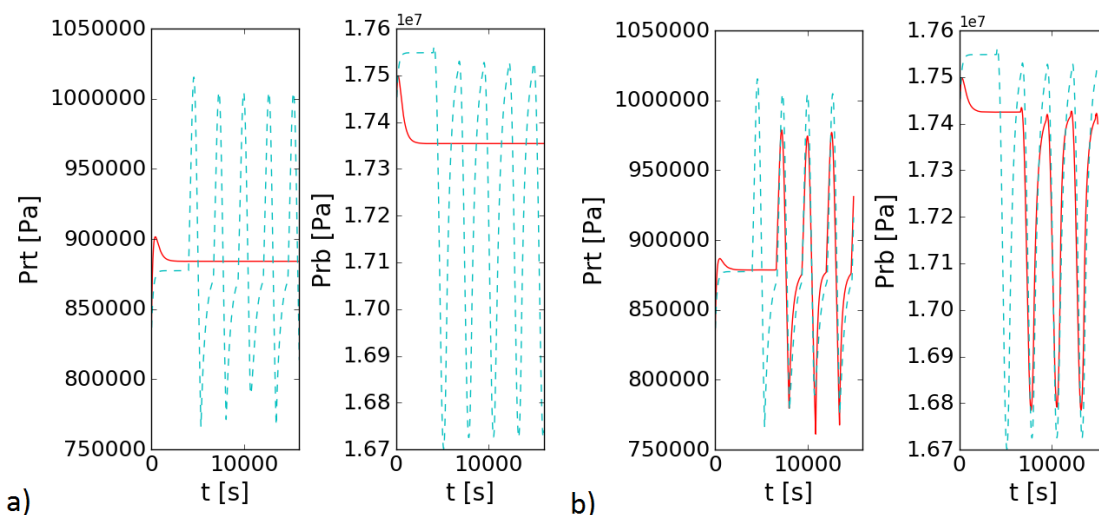


Figura 5.6: Cenário D do modelo de Meglio *et al.* (2009) (a) sem penalidade e b) com penalidade ζ . Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

De forma similar ao estudo de caso anterior, as figuras deixam evidente que para o modelo de Meglio *et al.* (2009) a formulação da função objetivo com penalidade gera resultados superiores quando comparadas ao método de mínimos quadrados.

Utilizando a abordagem 1 os parâmetros estimados são incapazes de capturar o comportamento oscilatório característico do sistema, exceto do cenário B. Além disso, apesar de se dispor de chutes iniciais distantes do valor original, a abordagem 2 consegue alcançar um comportamento oscilatório nas variáveis de saída observadas. Entretanto, uma discrepância é observada nos instantes iniciais da simulação em todos os casos, as quais podem ser atribuídas a inicialização do modelo. Entretanto, após transcorrido o período de inicialização dos modelos, a tendência dos dados experimentais foi capturada. No cenário B, a abordagem sem penalidade resultou em um comportamento oscilatório, mas apenas quando foi adicionada a penalidade na função objetivo é que se obteve um comportamento similar aos dados experimentais (aderência aos dados).

Os valores dos parâmetros estimados a partir da abordagem 2 e seus respectivos intervalos de confiança, para cada cenário, são apresentados na Tabela 5.4.

Tabela 5.4: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do modelo de Meglio *et al.* (2009) utilizando a abordagem 2.

Parâmetros	Cenário			
	A	B	C	D
C_g (m^{-1})	$1,02e-4 \pm 1,39e-5$	$8,94e-5 \pm 7,34e-5$	$1,15e-4 \pm 1,78e-4$	$1,81e-4 \pm 5,2e-4$
ϵ	$0,7600 \pm 0,0004$	$0,7664 \pm 0,0018$	$0,8243 \pm 0,0017$	$0,8610 \pm 0,0017$
V_{eb} (m^{-1})	$48,4481 \pm 0,0094$	$52,2164 \pm 0,0741$	$50,6012 \pm 0,0709$	$48,1205 \pm 0,0624$
C_{out} (m^{-1})	$0,0029 \pm 1,60e-6$	$0,0029 \pm 9,18e-6$	$0,0031 \pm 9,25e-6$	$0,0028 \pm 6,63e-6$

Pode-se observar através da Tabela 5.4, que apesar de a abordagem 2 ter obtido o melhor resultado dentre as demais, ela ainda não foi capaz de alcançar o valor exato dos parâmetros da Tabela 5.1, sendo que o parâmetro C_g é o menos preciso deles segundo os intervalos de confiança. Apesar disso, o comportamento do modelo com os parâmetros estimados foi satisfatório, sendo capaz de capturar a tendência dos dados experimentais.

Na Figura 5.7 são apresentados os planos de fase para os cenários A, B, C e D, considerando os parâmetros ótimos determinados pela estimação de parâmetros.

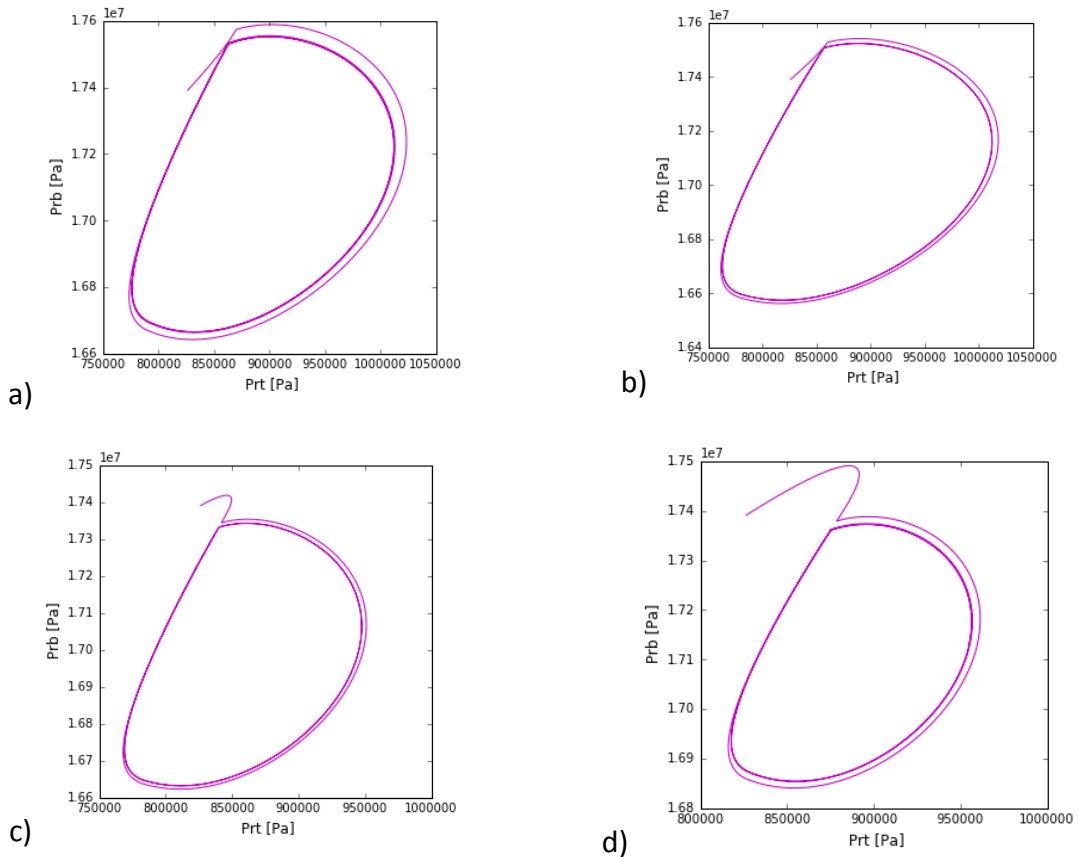


Figura 5.7: Planos de fase para os cenários A, B, C e D do modelo de Meglio *et al.* (2009).

5.2 Fast Offshore Well Model (FOWM)

O modelo proposto por Diehl *et al.* (2017), denominado FOWM, é baseado no modelo de Meglio *et al.* (2009) e Jahanshahi *et al.* (2012). Esse modelo foi desenvolvido através do balanço de massa do sistema ilustrado na Figura 5.8, que é dividido em quatro subsistemas: *anular*, *tubing*, *flowline* e *riser*.

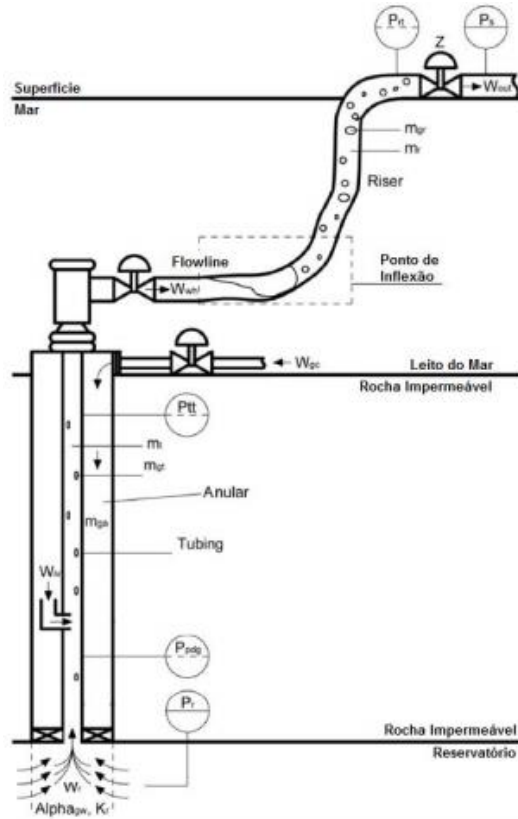


Figura 5.8: Sistema da produção de óleo e gás no mar modelado pelo FOWM. Retirado de Diehl *et al.* (2017).

5.2.1 Modelagem matemática

Ao todo, o FOWM descreve o sistema de produção de petróleo com elevação tipo *gas-lift* através de 6 EDOs e 25 EAs.

O *anular* é o compartimento vertical da entrada e acúmulo de gás natural, que envolve a coluna de produção, conectada ao *tubing* pela válvula de injeção de gás natural. Neste há presença somente de gás e o balanço mássico é descrito por:

$$\frac{dm_{ga}}{dt} = w_{gc} - w_{iv} \quad (5.14)$$

onde m_{ga} é a massa de gás no anular, w_{gc} é a vazão mássica de gás natural entrando no *anular* e w_{iv} é a vazão mássica de gás natural através da válvula de injeção na tubulação chamada normalmente de *tubing*. O *tubing* é o compartimento vertical que conecta o reservatório ao leito do mar, através da rocha impermeável onde ocorre a mistura do gás natural ao óleo. Neste subsistema há duas fases: a gasosa (*g*) e a líquida (*l*) formada por óleo e água do mar, sendo o balanço dado por:

$$\frac{dm_{gt}}{dt} = w_r \alpha_{gw} + w_{iv} - w_{whg} \quad (5.15)$$

$$\frac{dm_{lt}}{dt} = w_r (1 - \alpha_{gw}) - w_{whl} \quad (5.16)$$

onde m_{gt} e m_{lt} são, respectivamente, a massa de gás e líquido no *tubing*, w_r é a vazão mássica total proveniente do reservatório, w_{whg} e w_{whl} são, respectivamente, as vazões mássicas de gás e líquido saindo do *tubing*, e α_{gw} é a fração mássica de gás presente no *tubing* dada por $m_{gt}/(m_{lt} + m_{gt})$. O *flowline* e o *riser* são compartimentos de encaminhamento da mistura gás/óleo do leito do mar à superfície. O *flowline* é a região junto ao leito do mar e o *riser* é a região vertical até o *mainfold* de produção, localizado na superfície. No FOWM as regiões do *flowline* e do *riser* são consideradas apenas um subsistema e a dinâmica de golfadas causada pelo acúmulo no ponto baixo é abstraída pela presença de uma bolha alongada e válvula virtual no ponto de inflexão, proposto por Meglio *et al.* (2009). Assim, o balanço no *flowline/riser* é dado por:

$$\frac{dm_{gb}}{dt} = (1 - \epsilon)w_{whg} - w_g \quad (5.17)$$

$$\frac{dm_{gr}}{dt} = \epsilon w_{whg} + w_g - w_{gout} \quad (5.18)$$

$$\frac{dm_{lr}}{dt} = w_{whl} - w_{lout} \quad (5.19)$$

onde m_{gb} é a massa de gás acumulada na bolha à jusante da válvula virtual, m_{gr} e m_{lr} são, respectivamente, as massas de gás e líquido no *riser*, w_g é a vazão mássica de gás através da válvula virtual, w_{gout} e w_{lout} são as vazões mássicas de gás e líquido através da válvula de produção, respectivamente, e ϵ é a fração de gás que é desviada pela válvula virtual.

As vazões mássicas já suavizadas, em kg/s, são dadas por:

$$w_{out} = C_{out} u \sqrt{\rho_l \frac{(p_{rt} - p_s) + \sqrt{(p_{rt} - p_s)^2 + \epsilon}}{2}} \quad (5.20)$$

$$w_g = C_g \frac{(p_{eb} - p_{rb}) + \sqrt{(p_{eb} - p_{rb})^2 + \epsilon}}{2} \quad (5.21)$$

$$w_{wh} = K_w \sqrt{\rho_l \frac{(p_{tt} - p_{rb}) + \sqrt{(p_{tt} - p_{rb})^2 + \epsilon}}{2}} \quad (5.22)$$

$$w_{iv} = K_a \sqrt{\rho_{ai} \frac{(p_{ai} - p_{tb}) + \sqrt{(p_{ai} - p_{tb})^2 + \epsilon}}{2}} \quad (5.23)$$

$$w_{lout} = \alpha_l w_{out} \quad (5.24)$$

$$w_{gout} = \alpha_g w_{out} \quad (5.25)$$

$$w_{whg} = \alpha_{gt} w_{wh} \quad (5.26)$$

$$w_{whl} = (1 - \alpha_{gt}) w_{wh} \quad (5.27)$$

$$w_r = K_r \left(1 - 0,2 \left(\frac{p_{bh}}{p_r} \right) - 0,8 \left(\frac{p_{bh}}{p_r} \right)^2 \right) \quad (5.28)$$

onde p_{ai} é a pressão no ponto de injeção de gás de elevação no anular, p_{tb} é a pressão no ponto de injeção de gás de elevação no *tubing*, p_{tt} é a pressão no topo do *tubing*, p_{rb} é a pressão à montante da válvula virtual, p_{bh} é a pressão no ponto de injeção de gás de elevação no *tubing*, p_r é a pressão no reservatório, p_{rt} é a pressão no topo do *riser*, p_s é a

pressão no separador e p_{eb} é a pressão na bolha acumulada; ρ_{ai} é a massa específica do gás no anular, ρ_l é a massa específica do óleo; α_{gt} é a fração mássica de gás no *tubing*, α_l é a fração mássica de líquido no *flowline/riser*, α_g é a fração mássica de gás no *pipeline/riser*; K_a é o coeficiente de fluxo da válvula de injeção, K_w é o coeficiente de fluxo da árvore de Natal, K_r é o coeficiente de fluxo do reservatório; C_{out} é o coeficiente da válvula de produção (*choke*) e u é a abertura da *choke*.

As pressões são calculadas por:

$$p_{eb} = \frac{RT}{MV_{eb}} m_{gb} \quad (5.29)$$

$$p_{rb} = p_{rt} + \frac{g \sin \theta}{A} (m_{lr} + m_{lstill}) \quad (5.30)$$

$$p_{rt} = \frac{RT}{M \left(V_r - \frac{m_{lr} + m_{lstill}}{\rho_l} \right)} m_{gr} \quad (5.31)$$

$$p_{tt} = \frac{\rho_{gt} RT}{M} \quad (5.32)$$

$$p_{tb} = p_{tt} + \rho_{mt} g H_{vgl} \quad (5.33)$$

$$p_{pdg} = p_{tb} + \rho_{mres} g (H_{pdg} - H_{vgl}) \quad (5.34)$$

$$p_{bh} = p_{pdg} + \rho_{mres} g (H_t - H_{pdg}) \quad (5.35)$$

$$p_{ai} = \left(\frac{RT}{V_a M} + g \frac{L_a}{V_a} \right) m_{ga} \quad (5.36)$$

onde V_a é o volume do anular, V_{eb} é o volume da bolha acumulado à jusante da válvula virtual, V_r é o volume do *riser*, ρ_{mr} é a massa específica do líquido no *riser*, ρ_{mres} é a massa específica do líquido no reservatório, ρ_{mt} é a massa específica do líquido no *tubing*, ρ_{gt} é a massa específica do gás no *tubing*; m_{lstill} é a massa mínima de líquido no *riser*, M é a massa molar do gás de elevação; g é a constante gravitacional, T é a temperatura do sistema, R é a constante dos gases; H_a é o comprimento do anular, H_t é o comprimento do *tubing*, H_{pdg} é a distância até o medidor de pressão no *tubing*, H_{vgl} é a distância até o ponto de injeção de gás de elevação no *tubing* e θ é a inclinação do ponto de inflexão do *riser*.

As massas específicas, expressas em kg/m^3 , são calculadas considerando gás ideal, ou seja:

$$\rho_{gt} = \frac{m_{gt}}{V_{gt}} \quad (5.37)$$

$$\rho_{mt} = \frac{m_{gt} + m_{lt}}{V_t} \quad (5.38)$$

$$\rho_{ai} = \frac{M p_{ai}}{RT} \quad (5.39)$$

onde V_{gt} é o volume de gás no *tubing* e V_t é o volume do *tubing*.

As frações mássicas são calculadas por:

$$\alpha_g = \frac{m_{gr}}{m_{gr} + m_{lr}} \quad (5.40)$$

$$\alpha_l = 1 - \alpha_g \quad (5.41)$$

$$\alpha_{gt} = \frac{m_{gt}}{m_{gt} + m_{lt}} \quad (5.42)$$

Os cálculos geométricos são dados por:

$$V_{gt} = V_t - \frac{m_{lt}}{\rho_l} \quad (5.43)$$

$$V_a = \frac{L_a \pi D_a^2}{4} \quad (5.44)$$

$$V_t = \frac{L_t \pi D_t^2}{4} \quad (5.45)$$

$$A = \frac{\pi D^2}{4} \quad (5.46)$$

onde D é o diâmetro do *riser*, D_a é o diâmetro equivalente do anular e D_t é o diâmetro do *tubing*.

O modelo possui ao todo 27 parâmetros, sendo 18 desses relacionados diretamente às características físicas do sistema, conforme descrito na Tabela 5.5.

Tabela 5.5: Parâmetros do *Fast Offshore Well Model*.

Parâmetro	Valor	Unidade
α_{gw} – Fração de gás no reservatório	0,0188	-
D_a – Diâmetro equivalente do anular	0,140	m
D – Diâmetro do <i>riser</i>	0,152	m
D_t – Diâmetro do poço	0,150	m
g – Constante de gravidade	9,81	m/s ²
H_{pdg} – Distância vertical entre a árvore de natal e o ponto de medição de PDG	916	m
H_t – Distância vertical entre a árvore de natal e o fundo do poço	1279	m
H_{vgl} – Distância vertical entre a árvore de natal e o ponto de injeção de gás <i>lift</i>	1117	m
L_a – Comprimento do anular	1118	m
L_t – Comprimento do poço	1639	m
M – Massa molar do gás	18	kg/kmol
p_r – Pressão no reservatório	2,25e6	Pa
p_s – Pressão no separador	1013250	Pa
R – Constante dos gases	8314	m ³ Pa/kmol.K
p_l – Massa específica do óleo	987,45	kg/m ³
p_{mres} – Massa específica da mistura no reservatório	891,9523	kg/m ³
T – Temperatura	298	K
θ – Inclinação do <i>riser</i>	$\pi/4$	rad
m_{lstill} – Massa mínima de líquido no <i>riser</i>	-	kg
C_g – Coeficiente de fluxo da bolha alongada	-	m ⁻¹
C_{out} – Coeficiente de fluxo da <i>choke</i>	-	m ⁻¹
V_{eb} – Volume da bolha alongada	-	m ³
ϵ – Fração de gás preso na bolha alongada	-	-
K_w – Coeficiente de fluxo do topo do poço	-	m ⁻¹
K_a – Coeficiente de fluxo do anular para o poço	-	m ⁻¹
V_r – Volume à montante da válvula virtual	-	m ³
K_r – Vazão mássica estimada para o poço	-	m ⁻¹

Onde as condições iniciais da simulação são $m_{ga} = 9347,55$ kg, $m_{gt} = 5347,54$ kg, $m_{lt} = 35014,12$ kg, $m_{gb} = 2395,94$ kg, $m_{gr} = 1788,01$ kg e $m_{lr} = 11725,32$ kg.

5.2.2 Cenários

Nove parâmetros do modelo de Diehl *et al.* (2017) foram selecionados para serem estimados, sendo eles o m_{lstill} , C_g , C_{out} , V_{eb} , ϵ , K_w , K_a , V_r e K_r . Essa seleção foi feita de acordo com um método de identificabilidade prática de Botelho *et al.* (2012). Dois únicos cenários para este modelo utilizando dados “experimentais” simulados foram estabelecidos mantendo o mesmo conjunto de parâmetros, modificando apenas o chute inicial, conforme mostrado na Tabela 5.7.

Tabela 5.6: Cenários para os dados experimentais provenientes da simulação do FOWM.

Cenário	Valores originais simulação	Chute inicial*
A	$m_{lstill} = 1957,03$ $C_g = 2,05e-4$, $C_{out} = 1,97e-2$, $V_{eb} = 83,5091$ $\epsilon = 0,57$	20%
B	$K_w = 8,68e-4$ $K_a = 1,59e-4$ $V_r = 630,36$ $K_r = 131,31$	140%

* Relativo aos valores originais.

As entradas referente à válvula *choke* e à vazão de gás *lift* foram mantidas constantes e iguais a 5,0% e 0,69 kg/s, respectivamente. Um ruído branco nas variáveis de saída p_{pdg} , p_{rt} e p_{tt} .

O FOWM possui seis variáveis de estado (m_{ga} , m_{gt} , m_{lt} , m_{gb} , m_{gr} e m_{lr}), que não possuem possibilidade de serem medidas na prática. Portanto, no problema de mínimos quadrados são consideradas apenas as medições das variáveis p_{pdg} , p_{rt} e p_{tt} , uma vez que essas são medidas reais no processo.

5.2.3 Análise da função objetivo

A análise da função objetivo para o FOWM é realizada confrontando os valores dos dados experimentais (simulados) com os dados advindos da estimação de parâmetros. Optou-se por utilizar os dados simulados, uma vez que a visualização da função objetivo tridimensional fica mais compreensível. Foram selecionados os parâmetros m_{lstill} e C_g , pois eles se mostram os mais sensíveis em relação aos demais para a análise do mínimo global, conforme Figura 5.9.

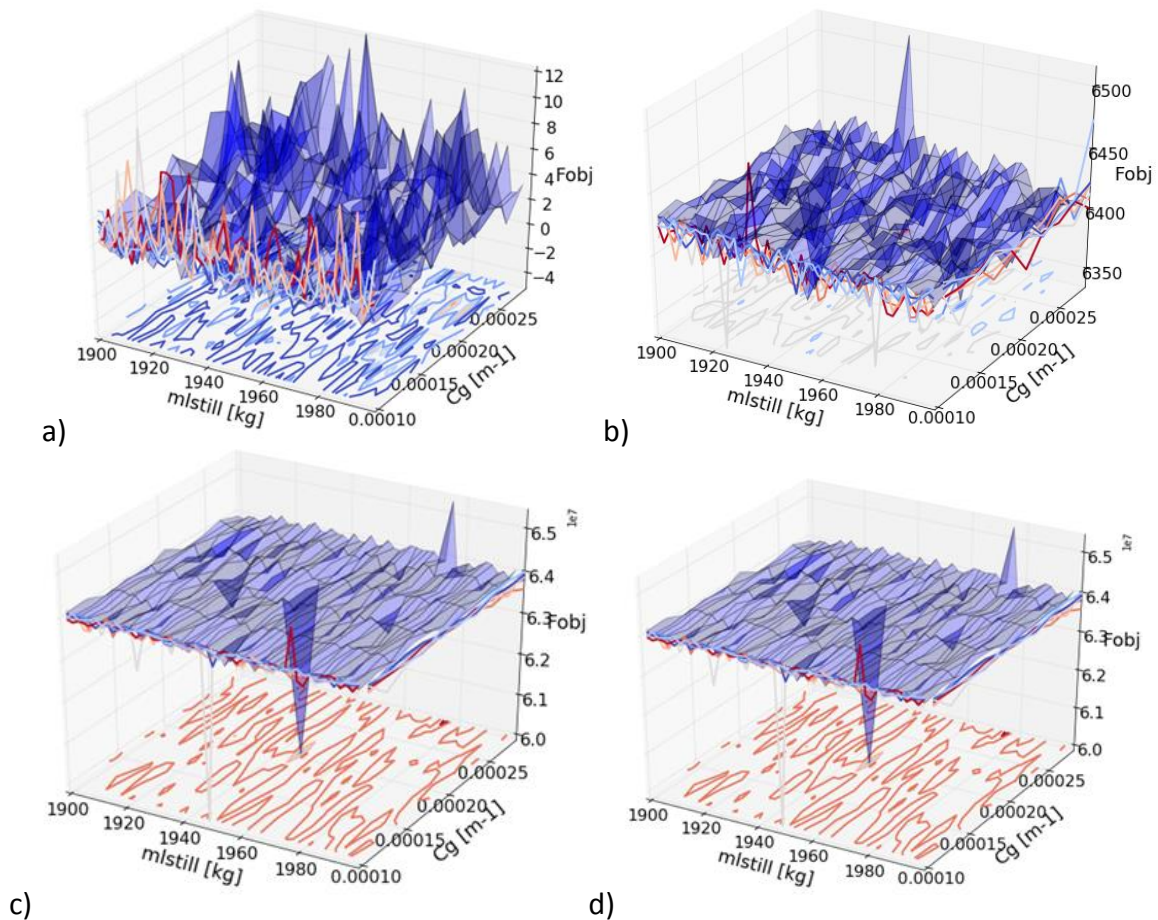


Figura 5.9: Gráfico da função objetivo do FOWM para a (a) abordagem 1: mínimos quadrados clássicos ($\varphi = 0$) e abordagem 2: com o parâmetro de penalidade para (b) $\varphi = 1e4$, (c) $\varphi = 1e8$ e (d) $\varphi = 1e12$.

A Figura 5.9a mostra que o gráfico da função objetivo sem penalidade possui inúmeros mínimos, o que dificulta muito a busca do *solver* pela melhor solução para o conjunto de parâmetros estimados. Por conseguinte, a Figura 5.8c, no qual a penalidade é adicionada à função objetivo, exibe um mínimo local bastante visível, possuindo uma geometria totalmente diferente do que da Figura 5.9a. A função objetivo da abordagem 2 para um valor de φ suficientemente alto (Figura 5.8c), baseando-se apenas nos gráficos, é muito mais adequada para a estimação de parâmetros do que a abordagem 1 (Figura 5.8a). Da mesma forma que para os outros estudos de caso, após certo valor do parâmetro de penalidade, a convexidade da função objetivo não muda.

5.2.4 Resultados e discussão

Os resultados do erro quadrático médio (MSE) das variáveis p_{pdg} , p_{rt} e p_{tt} , e variância da variável p_{pdg} (r_x) da estimação de parâmetros do *Fast Offshore Well Model* utilizando dados experimentais simulados para os cenários A, B, C e D para as abordagens 1 e 2 são mostrados na Tabela 5.7.

Tabela 5.7: Resultados dos erros quadráticos do FOWM com dados experimentais simulados para os cenários e seus respectivos casos.

Abordagem	Cenário			
	A		B	
	MSE	r_x	MSE	r_x
1	18,87	0,21	13,16	0,12
2	5,46	1,31	3,27	0,82

Conforme observado, o erro quadrático para a abordagem 2 chega a ser mais do que três vezes menor do que o erro da abordagem 1. Em relação à variância, a abordagem 1 possui valores próximos a zero indicando que o sistema não está oscilando, enquanto que na abordagem 2 o comportamento é oscilatório, pois os valores da variância estão maiores ou próximos de um.

Nas Figuras 5.10, 5.11, 5.12 e 5.13 são mostrados os resultados gráficos dos cenários A, B, C e D para as abordagens 1 e 2, respectivamente.

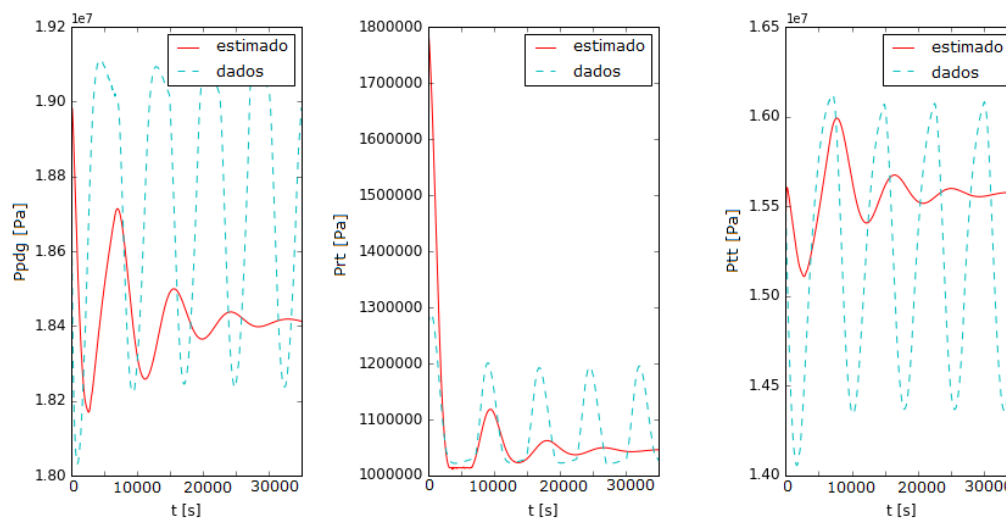


Figura 5.10: Cenário A do FOWM sem penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

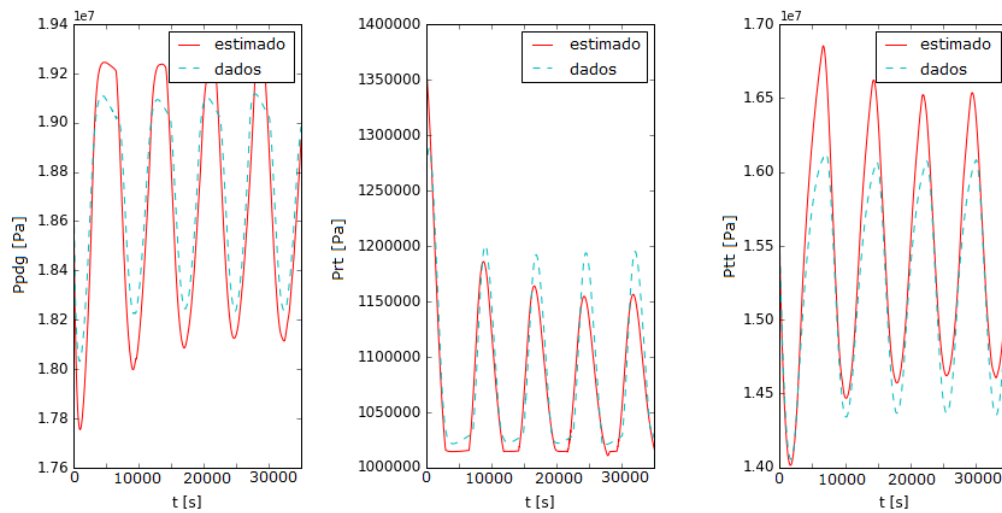


Figura 5.11: Cenário A do FOWM com penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

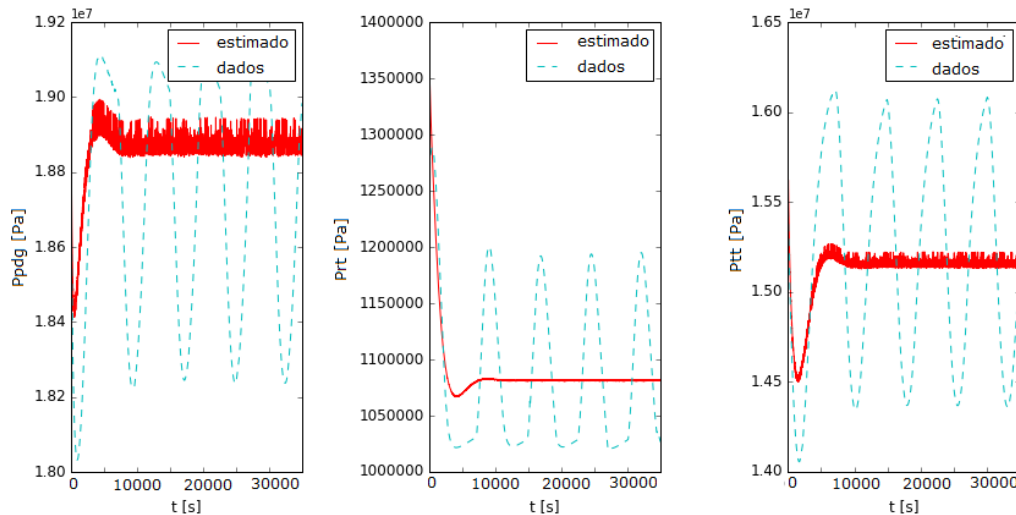


Figura 5.12: Cenário B do FOWM sem penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

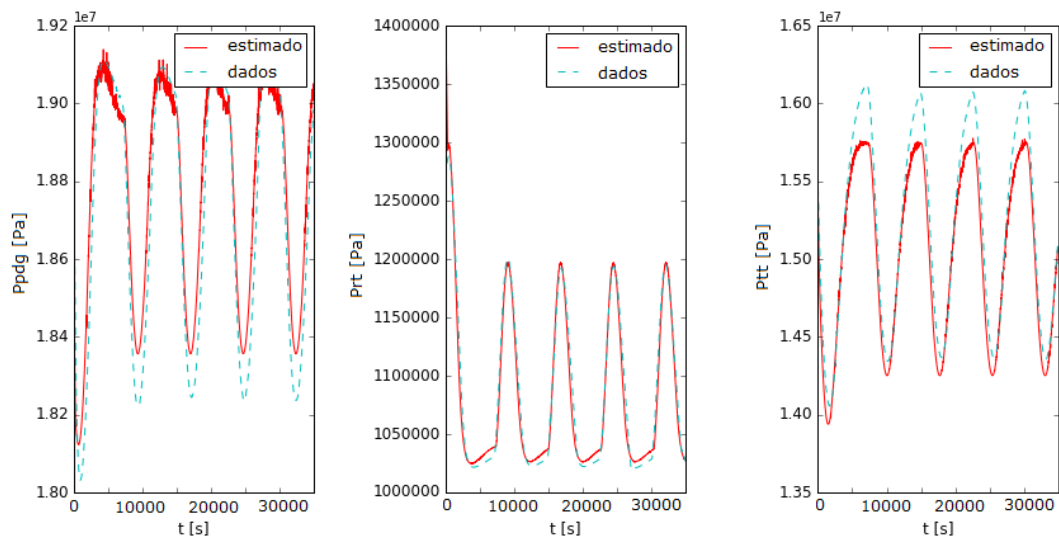


Figura 5.13: Cenário B do FOWM com penalidade utilizando dados experimentais simulados. Os dados “experimentais” são representados pela linha pontilhada azul e os dados estimados pela linha sólida vermelha.

A partir das figuras observa-se que os resultados utilizando a penalidade adicionada à função objetivo (Figuras 5.11 e 5.13) são os que possuem maior aderência aos dados experimentais, além de possuírem o comportamento oscilatório característico do ciclo limite, conforme esperado. Enquanto isso, utilizando a função objetivo sem a penalidade, obtêm-se resultados que convergem um resultado não-oscilatório (Figuras 5.10 e 5.12).

Os valores dos parâmetros estimados a partir da abordagem 2 e seus respectivos intervalos de confiança, para cada cenário, são apresentados na Tabela 5.8.

Tabela 5.8: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do FOWM utilizando dados experimentais simulados utilizando a abordagem 2.

Parâmetro	Cenário	
	A	B
m_{lstill} (kg)	1398,5±82,5281	1135,4±72,3007
C_g (m ⁻¹)	1,35e-4±1,3e-4	2,15e-4±4,90e-4
C_{out} (m ⁻¹)	1,84e-2±6,41e-5	2,20e-2±8,41e-5
V_{eb} (m ³)	68,479±0,1459	89,740±0,1431
ϵ	0,2621±0,0046	0,6582±0,0015
K_w (m ⁻¹)	4,99e-4±8,95e-6	9,74e-4±2,80e-5
K_a (m ⁻¹)	9,47e-5±1,36e-5	2,14e-4±3,68e-5
V_r (m ³)	753,74±3,0440	567,80±1,4145
K_r (m ⁻¹)	95,348±0,4104	167,334±0,6534

Apesar de os resultados dos parâmetros da Tabela 5.8 serem semelhantes aos valores da Tabela 5.3, as pequenas discrepâncias podem ser justificadas pela presença do ruído e

pela não-linearidade do modelo (observado principalmente no cenário B). Além disso, os valores menos precisos, segundo os intervalos de confiança, foram para o parâmetro C_g . Assim, estimar os parâmetros do modelo para o caso em que os dados experimentais são simulados foi importante para testar se a metodologia era capaz de obter um bom resultado para um modelo tão complexo e extenso. A partir disso, é possível partir para o caso em que os dados experimentais são reais, conforme a sub-seção a seguir.

Na Figura 5.14 são apresentados os planos de fase para os cenários A e B considerando os parâmetros ótimos determinados pela estimação de parâmetros.

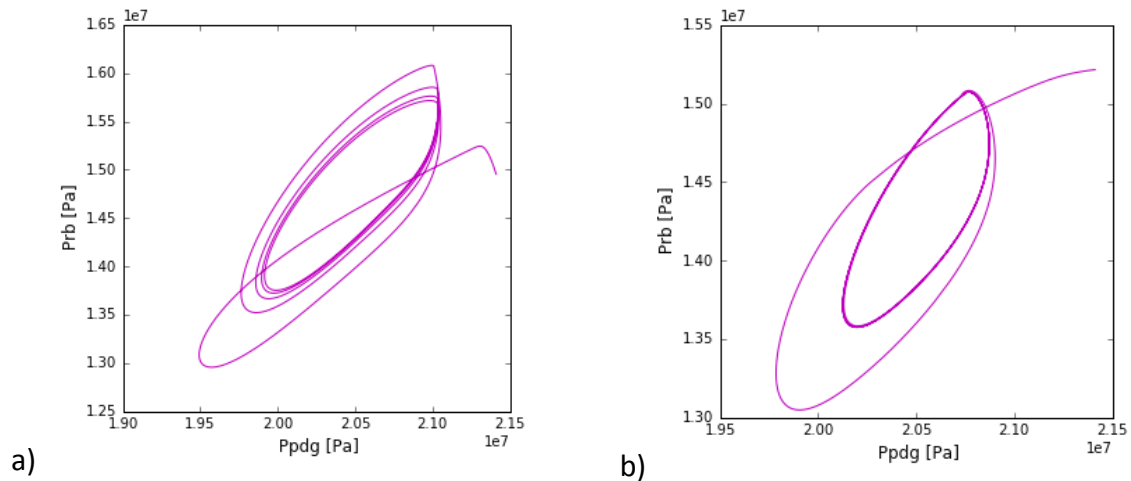


Figura 5.14: Planos de fase para os cenários A e B do modelo FOWM.

5.3 Aplicação do modelo FOWM utilizando dados reais

Nesta seção é realizado o ajuste do *Fast Offshore Well Model* utilizando os dados advindos dos sistemas de produção *offshore* de uma plataforma de petróleo nacional.

5.3.1 Cenários

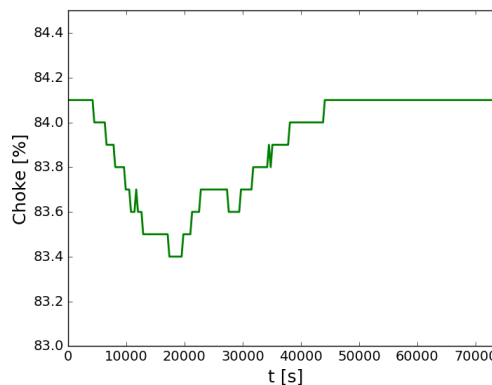
Na aplicação real é estimado o mesmo conjunto de parâmetros da seção 5.2, sendo eles o m_{lstill} , C_g , C_{out} , V_{eb} , ϵ , K_w , K_a , V_r e K_r . O único cenário formulado para este caso possui o chute inicial para os parâmetros baseados nos valores sugeridos por Diehl *et al.* (2017).

Tabela 5.9: Cenários para os dados experimentais e reais provenientes da simulação do FOWM.

Cenário	Valores originais dados reais**	Chute inicial*
A	$m_{lstill} = 62,22$ $C_g = 1,137e-3$ $C_{out} = 2,039e-3$ $V_{eb} = 60,98$ $\epsilon = 0,1545$ $K_w = 6,876e-4$ $K_a = 2,293e-3$ $V_r = 126,9$ $K_r = 227,1$	120%

* Relativo aos valores originais. **Valores retirados de Diehl *et al.* (2017).

A abertura da válvula *choke* possui comportamento conforme ilustrado na Figura 5.15. Já vazão de gás *lift* é mantida constante e igual a aproximadamente 33,7 kg/s.

**Figura 5.15:** Entradas no modelo real do FOWM da abertura da válvula *choke*.

O FOWM possui seis variáveis de estado (m_{ga} , m_{gt} , m_{lt} , m_{gb} , m_{gr} e m_{lr}), que não possuem possibilidade de serem medidas na prática. Portanto, no problema de mínimos quadrados são consideradas apenas as medições das variáveis p_{pdg} , p_{rt} e p_{tt} , uma vez que essas são medidas reais no processo.

5.3.2 Resultados e discussão

Os resultados do erro quadrático médio (*MSE*) das variáveis p_{pdg} , p_{rt} e p_{tt} , e da variância da variável $p_{pdg}(r_x)$ para a estimação de parâmetros do *Fast Offshore Well Model* utilizando dados reais para os cenários A são apresentados na Tabela 5.10 através dos erros quadráticos (Equação 3.27) para as duas primeiras abordagens.

Tabela 5.10: Resultados dos erros quadráticos do FOWM com dados reais para o cenário A e seus respectivos casos.

Abordagem	MSE	r_x
1	4,77	0,31
2	8,65	1,50

Conforme resultados da Tabela 5.10 o erro quadrático para o caso sem penalidade é menor do que para o caso com penalidade. Essa diferença se deve ao *bias* do modelo obtido em relação aos dados experimentais, o que aumenta consideravelmente o erro quadrático mensurado através do problema de mínimos quadrados. No entanto, observando os resultados da variância, a abordagem 2 foi capaz de capturar de forma mais apropriada o comportamento oscilatório dos dados.

Nas Figuras 5.14 e 5.15 são mostrados graficamente apenas os resultados das abordagens 1 e 2, respectivamente. Já na Figura 5.7 é mostrado o resultado para o mesmo conjunto de dados reais obtido por Diehl *et al.* (2017).

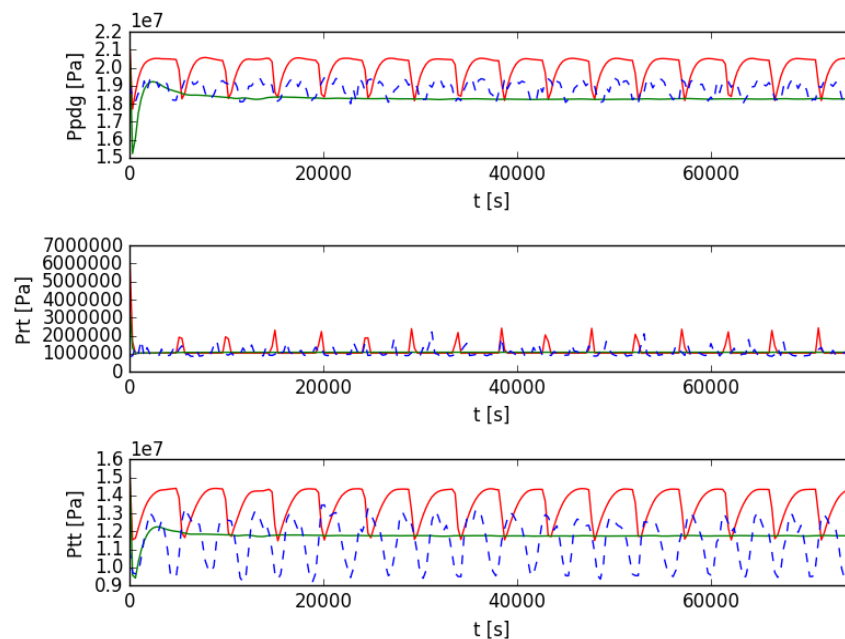


Figura 5.16: Resultados utilizando a metodologia proposta para o cenário A do FOWM sem penalidade (linha verde) e com penalidade (linha vermelha) utilizando dados reais (linha azul).

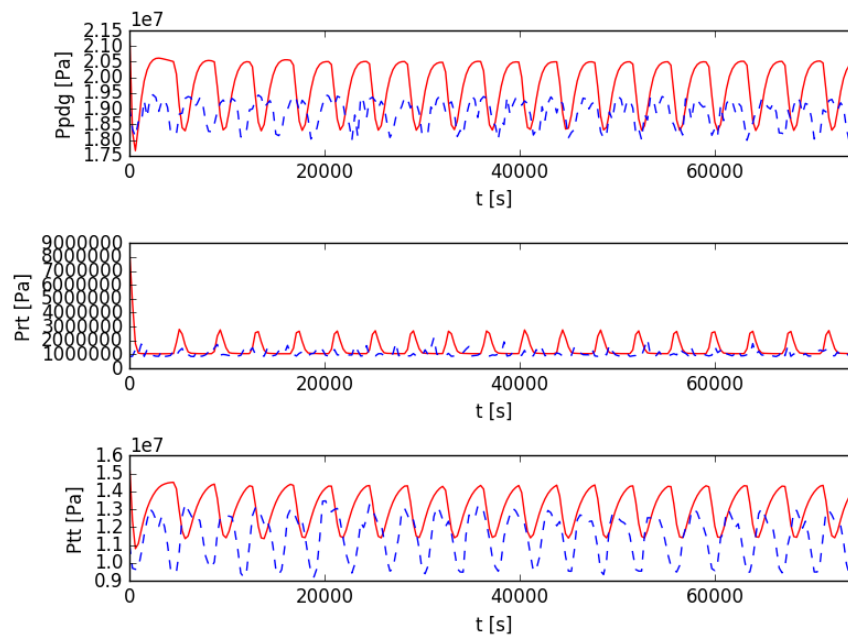


Figura 5.17: Resultados obtidos por Diehl *et al.* (2017) (linha vermelha) para o mesmo conjunto de dados reais (Azul).

Na Figura 5.16, partindo-se da otimização apenas com o termo de mínimos quadrados na função objetivo, da mesma forma que para os estudos de caso do capítulo anterior, foi obtido um conjunto de parâmetros que leva o modelo a convergir para um estado não oscilatório). Já utilizando a penalidade proposta neste trabalho adicionada à função objetivo, o modelo foi capaz de atingir o comportamento oscilatório esperado.

Apesar de o conjunto de parâmetros estimados utilizando a abordagem 2 não mostrar uma aderência maior aos dados experimentais (Figura 5.16), ela ficou semelhante ao resultado obtido por Diehl *et al.* (2017) (Figura 5.17).

Da mesma forma que Diehl *et al.* (2017), embora o comportamento dinâmico do poço estudado seja não-uniforme, o *Fast Offshore Well Model* foi capaz de prever a pressão na PDG com relativa boa performance. Além disso, este modelo proposto pode contribuir para muitos aspectos da produção de petróleo, incluindo o monitoramento em tempo real, controle e otimização. Nesses casos, o *offset* entre o modelo obtido na identificação e os dados reais acaba sendo não muito problemático para o controlador, de forma que esse *bias* pode ser corrigido através da utilização de um estimador de estados durante a estimação de parâmetros.

Na Tabela 5.11 são apresentados os valores dos nove parâmetros simulados na estimação de parâmetros para a abordagem 2, junto a seus respectivos intervalos de confiança.

Tabela 5.11: Valores dos parâmetros estimados para todos os cenários do FOWM utilizando dados reais para a abordagem 2.

Parâmetro	Cenário
	A
m_{lstill} (kg)	71,8293± 12865,15
C_g (m ⁻¹)	1,3290e-3± 0,3442
C_{out} (m ⁻¹)	3,9747e-3± 1,7e-3
V_{eb} (m ³)	70,473± 20,4848
ϵ	0,2095± 0,1772
K_w (m ⁻¹)	5,9363e-4± 2,03e-4
K_a (m ⁻¹)	4,2365e-5± 2,4693e-5
V_r (m ³)	153,1257± 113,4982
K_r (m ⁻¹)	246,9820± 91,9644

Os resultados da Tabela 5.11 mostram uma pequena diferença dos valores da Tabela 5.9, o que pode ser justificada pela utilização de metodologias diferentes na estimação dos parâmetros nos dois casos. Observa-se que os parâmetros m_{lstill} e C_g são menos precisos, uma vez que seus intervalos de confiança são maiores que o valor de seus parâmetros. Já na Figura 5.18 é apresentado o plano de fase para o cenário A considerando os parâmetros ótimos determinados pela estimação de parâmetros.

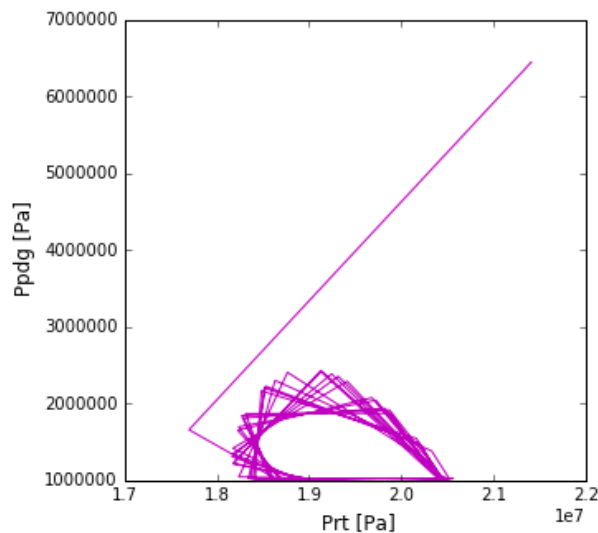


Figura 5.18: Planos de fase para o cenário A do modelo FOWM utilizando dados reais.

Portanto, a vantagem da metodologia proposta em relação ao que foi apresentado no trabalho de Diehl *et al.* (2017) é, além de não ser necessária a utilização de um *solver* global,

que o método *single-shooting* com a penalidade ζ não precisa de nenhuma modificação ou ser aplicado mais de uma vez. Ou seja, o procedimento aplicado por Diehl *et al.* (2017) foi repetido diversas vezes, além de ter sido necessária a modificação manual dos parâmetros para direcionar o problema ao seu ótimo, enquanto isso, para a metodologia proposta fez tudo automaticamente, demorando cerca de 12 horas para encontrar o seu ótimo.

Capítulo 6 – Considerações Finais

6.1 Conclusões

A estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite é relevante para diferentes processos, tais como fermentação, reatores químicos e na produção de petróleo. A estimação de parâmetros nesses modelos dinâmicos não-lineares é complexa devido a não-convexidade da função objetivo, onde se tem a presença de mínimos locais. Dessa forma, o objetivo principal deste trabalho consistiu em elaborar uma metodologia eficiente para estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite, considerando todas as suas possíveis aplicações, tanto em escala laboratorial como industrial. Nela foi possível suavizar a dificuldade mencionada reduzindo o espaço de busca (através da adição de restrições), ou desencorajando a busca em áreas inviáveis do espaço de busca (através da adição de penalidade na função objetivo). Baseado nesta ideia, a proposta de apresentar um método para estimação de parâmetros em sistemas com ciclo limite foi alcançada.

O conhecimento contendo a localização do ciclo limite foi reformulado como uma penalidade adicionada na função objetivo do problema de otimização. Isso foi feito com o auxílio do critério ζ -Hopf adicionado como uma restrição de igualdade na função objetivo, onde o método de penalidade exata foi adaptado a esse problema. Neste caso, depois do primeiro passo do método *single-shooting*, o parâmetro de penalidade decresce enquanto ζ se aproxima de zero (comportamento do ciclo limite). Com a penalidade quase desconsiderada, o modelo pode ser ajustado aos dados experimentais com o termo de mínimos quadrados.

A metodologia proposta neste trabalho foi aplicada a dois estudos de caso que utilizaram dados experimentais simulados, sendo eles o modelo de Jöbses et al. (1986) e o modelo de Meglio *et al.* (2009). Em ambos os casos a adição da penalidade ζ à função objetivo se mostrou mais eficiente do que as demais abordagens, sendo elas: sem penalidade, utilizando a parte real do autovalor como penalidade, incluindo o critério ζ -Hopf como restrição, ou até mesmo considerando a restrição que se baseia no critério Hopf que é empregado por programas de análise de bifurcação, descrito por Govaerts (2000). Desta forma, a utilização da penalidade ζ é a que resulta em comportamentos típicos do ciclo limite, além de ajustar melhor o modelo aos dados através do termo de mínimos quadrados.

Além disso, quando foram observados os gráficos das funções objetivo dos estudos de caso mencionados, foi perceptível que a utilização da penalidade ζ reduziu os mínimos locais próximos ao máximo global. Com a função objetivo mais convexa, foi possibilitada a utilização de chutes iniciais mais distantes do valor original, impedindo respostas indesejadas para o problema de otimização, como a resposta de um modelo resultando em linha reta para dados com característica oscilatória.

A aplicação real deste trabalho, a qual usa dados experimentais advindos dos sistemas de produção *offshore* de uma indústria de extração nacional, também trouxe resultados promissores, considerando a dificuldade do modelo fenomenológico utilizado para estimação dos parâmetros. Os resultados obtidos utilizando a metodologia proposta neste trabalho ficaram muito semelhantes ao que foi apresentado por Diehl *et al.* (2017). Além disso, o modelo proposto pode contribuir para muitos aspectos da produção de petróleo, incluindo na etapa de controle, que já é apresentado por Gerevini *et al.* (2016).

Por fim pode-se concluir que a metodologia para estimação de parâmetros em modelos com ciclo limite possui potencial de utilização prática com sucesso, sendo essa de implementação simples e de fácil compreensão.

6.2 Sugestões para trabalhos futuros

- Adicionar uma etapa de pré-tratamento e seleção de dados experimentais, cujo objetivo é utilizar a menor quantidade de dados possível que traga a maior quantidade de informações sobre o modelo.
- Utilizar estimadores de estado em adição à estimação de parâmetros, de modo que seja reduzido o efeito dos distúrbios desconhecidos. Esses podem comprometer a qualidade da estimação, principalmente para processos reais.

Referências

ÅKESSON, J. et al. Modeling and optimization with Optimica and JModelica.org—Languages and tools for solving large-scale dynamic optimization problems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 34, n. 11, p. 1737–1749, 2010.

BEQUETTE, B. W. **Process Dynamics: Modeling, Analysis and Simulation**. [s.l.] Prentice Hall PTR, 1998.

BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E. Retrospective on optimization. **Computers & Chemical Engineering**, v. 28, n. 8, p. 1169–1192, 15 jul. 2004.

BOTELHO, V. R. **Nova Metodologia para Análise de Identificabilidade e Estimação de Parâmetros de Modelos Fenomenológicos**. [s.l.] Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012.

BOTELHO, V. R.; TRIERWEILER, L. F.; TRIERWEILER, J. O. A New Approach for Practical Identifiability Analysis Applied to Dynamic Phenomenological Models. **IFAC Proceedings Volumes**, v. 45, n. 15, p. 691–696, 2012.

CEDERSUND, G.; KNUDSEN, C. Improved parameter estimation for systems with an experimentally located Hopf bifurcation. **IEE Proceedings - Systems Biology**, v. 2, n. 3, p. 161–168, 2005.

CLEWLEY, R. Hybrid Models and Biological Model Reduction with PyDSTool. **PLoS Comput Biol**, v. 8, n. 8, p. e1002628, 2012.

D'ERRICO, J. **Adaptive Robust Numerical Differentiation**. Disponível em: <<http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/13490-adaptive-robust-numerical-differentiation?requestedDomain=www.mathworks.com>>.

DAUGULIS, A. J.; MCLELLAN, P. J.; LI, J. Experimental investigation and modeling of oscillatory behavior in the continuous culture of *Zymomonas mobilis*. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 56, n. 1, p. 99–105, 1997.

DHOOGHE, A.; GOVAERTS, W.; KUZNETSOV, Y. A. MATCONT: A MATLAB package for

numerical bifurcation analysis of ODEs. **ACM Trans. Math. Softw.**, v. 29, n. 2, p. 141–164, 2003.

DIEHL, F. C. et al. Fast Offshore Wells Model (FOWM): A practical dynamic model for multiphase oil production systems in deepwater and ultra-deepwater scenarios. **Computers & Chemical Engineering**, 2017.

ELMAN, H. et al. Lyapunov Inverse Iteration for Identifying Hopf Bifurcations in Models of Incompressible Flow. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 34, n. 3, p. A1584–A1606, 1 jan. 2012.

ELNASHAIE, S.; UHLIG, F. **Numerical Techniques for Chemical and Biological Engineers Using MATLAB: A Simple Bifurcation Approach**. [s.l.] Springer, 2007.

Escoamento em tubulações horizontais. Disponível em: <<http://www.turbulencia.coppe.ufrj.br/petroleo/>>. Acesso em: 20 fev. 2017.

FILHO, H. DOS S. R. **A otimização de gás lift na produção de petróleo: avaliação da curva de performance do poço**. [s.l.] UFRJ, 2011.

GEREVINI, G. G. et al. **Aumento da Produção de Petróleo em Sistemas de Produção Offshore através de Controle NMPC**. Congresso Brasileiro de Automática. **Anais...Vitória: 2016**

GEREVINI, G. G. **Nova Política de Aumento de Produção para Sistema de Elevação de Petróleo**. [s.l.] Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2017.

GOVAERTS, W. J. F. **Numerical Methods for Bifurcations of Dynamical Equilibria**. [s.l.] Society for Industrial and Applied Mathematics, 2000.

GOVAERTS, W.; SIJNAVE, B. Matrix manifolds and the Jordan structure of the bialternate matrix product. **Linear Algebra and its Applications**, v. 292, n. 1, p. 245–266, 1999.

GUCKENHEIMER, J.; MYERS, M.; STURMFELS, B. Computing Hopf Bifurcations I. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 34, n. 1, p. 1–21, 1 fev. 1997.

HAIRER, E.; WANNER, G. **Solving Ordinary Differential Equations II, Stiff and Differential-Algebraic Problems**. [s.l.] Springer-Verlag, 1987.

HOPF, E. Abzweigung einer periodischen Lösung von einer stationären Lösung eines Differential systems. **Bericht der Math. - Phys. Klasse der Sächsischen Akademie der Wissenschaften zu Leipzig**, v. 92, 1942.

HYNNE, F.; DANØ, S.; SØRENSEN, P. G. Full-scale model of glycolysis in *Saccharomyces cerevisiae*. **Biophysical Chemistry**, v. 94, n. 1–2, p. 121–163, 2001.

HYNNE, F.; SØRENSEN, P. G.; MO/LLER, T. Complete optimization of models of the Belousov–Zhabotinsky reaction at a Hopf bifurcation. **The Journal of Chemical Physics**, v. 98, n. 1, p. 219–230, 1993.

JAHANSHAH, E.; SKOGESTAD, S.; HANSEN, H. Control structure design for stabilizing unstable gas-lift oil wells. **IFAC Proceedings Volumes**, v. 45, n. 15, p. 93–100, 2012.

- JÖBSES, I. M. L. et al. Fermentation kinetics of *Zymomonas mobilis* at high ethanol concentrations: Oscillations in continuous cultures. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 28, n. 6, p. 868–877, 1986.
- JOHNSON, S. G. **The NLOpt nonlinear-optimization package**.
- KHALIL, H. K. **Nonlinear systems**. 3rd. ed. [s.l.] Prentice Hall, 2002.
- KROLL, A. Grey-Box Models: Concepts and Application. **New Frontiers in Computational Intelligence and its Applications**, 2000.
- MCLELLAN, P. J.; DAUGULIS, A. J.; LI, J. The Incidence of Oscillatory Behavior in the Continuous Fermentation of *Zymomonas mobilis*. **Biotechnology Progress**, v. 15, n. 4, p. 667–680, 1999.
- MEERBERGEN, K.; SPENCE, A. Inverse Iteration for Purely Imaginary Eigenvalues with Application to the Detection of Hopf Bifurcations in Large-Scale Problems. **SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications**, v. 31, n. 4, p. 1982–1999, 1 jan. 2010.
- MEGLIO, F. DI; KAASA, G. O.; PETIT, N. **A first principle model for multiphase slugging flow in vertical risers** **Proceedings of the 48h IEEE Conference on Decision and Control (CDC) held jointly with 2009 28th Chinese Control Conference**, 2009.
- NOCEDAL, J.; WRIGHT, S. J. **Numerical Optimization**. Second ed. [s.l.] Springer, 2006.
- OURIQUE, C. O.; BISCAIA, E. C.; PINTO, J. C. The use of particle swarm optimization for dynamical analysis in chemical processes. **Computers & Chemical Engineering**, v. 26, n. 12, p. 1783–1793, 2002.
- POWELL, M. J. D. A Direct Search Optimization Method That Models the Objective and Constraint Functions by Linear Interpolation. In: GOMEZ, S.; HENNART, J.-P. (Eds.). . **Advances in Optimization and Numerical Analysis**. Dordrecht: Springer Netherlands, 1994. p. 51–67.
- QIAO, J.-F.; HAN, H.-G. **Identification and modeling of nonlinear dynamical systems using a novel self-organizing RBF-based approach** **Automatica**. [s.l.: s.n.].
- ROMIJN, R. et al. A grey-box modeling approach for the reduction of nonlinear systems. **Journal of Process Control**, v. 18, n. 9, p. 906–914, 2008.
- SCHWAAB, M.; PINTO, J. C. **Análise de Dados - Volume I: Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros**. [s.l.] Série Piloto de Engenharia Química COPPE-UFRJ, 2007.
- SEYDEL, R. **Practical Bifurcation and Stability Analysis**. London: Springer, 2010. v. 3
- WANG, H. et al. Optimization of a continuous fermentation process producing 1,3-propane diol with Hopf singularity and unstable operating points as constraints. **Chemical Engineering Science**, v. 116, p. 668–681, 2014.

WERNER, B. Computation of Hopf Bifurcation with Bordered Matrices. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 33, n. 2, p. 435–455, 1996.

WILLIAMS, G. P. **Chaos Teory Tamed**. [s.l.] Joseph Henry Press, 1997.

ZAMAMIRI, A.-Q. M.; BIROL, G.; HJORTSØ, M. A. Multiple stable states and hysteresis in continuous, oscillating cultures of budding yeast. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 75, n. 3, p. 305–312, 2001.

ZHANG, Y.; HENSON, M. A. Bifurcation Analysis of Continuous Biochemical Reactor Models. **Biotechnology Progress**, v. 17, n. 4, p. 647–660, 2001.

Apêndice A

A.1 Análise do plano de fase

Considerando um sistema não-linear, onde μ_1 e μ_2 são os autovalores do problema:

A.1.1 Plano de fase de nós

$$\mu_1, \mu_2 \text{ reais, } \mu_1 \cdot \mu_2 > 0, \mu_1 \neq \mu_2 \quad (\text{A.1})$$

Neste caso, onde ambos os autovalores são reais e possuem o mesmo sinal, o ponto estacionário é denominado um nó. Esse caso se divide em dois subcasos:

- $\mu < 0$: nó estável (*stable node*)
- $\mu > 0$: nó instável (*unstable node*)

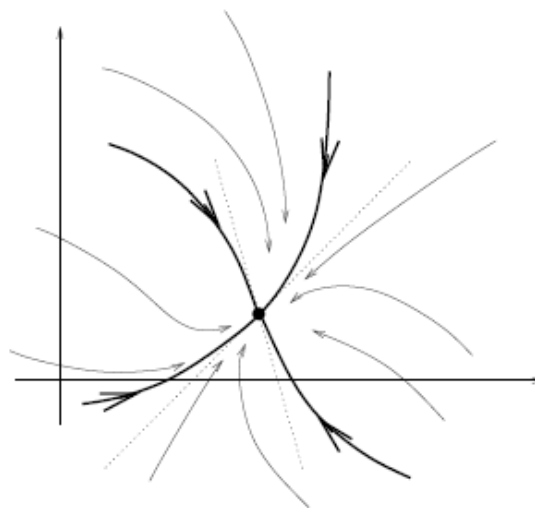


Figura A.1: Nó estável no plano de fase para o caso não-linear (autovalores são pontilhados). Fonte: Seydel (2010).

Na Figura A.1, os eixos são as variáveis de estado do sistema, no qual se tem um nó estável. O autovalor real μ define as quatro linhas sólidas que passam pelo ponto estacionário, e cada uma delas é uma trajetória do sistema de equações lineares do problema. Se $|\mu|$ é grande (pequeno), o movimento correspondente é rápido (lento). Um autovalor negativo μ significa que a trajetória é direcionada em direção ao ponto de equilíbrio, no caso em que o nó é estável, enquanto um nó positivo é associado a um afastamento do ponto de equilíbrio, ou seja, o nó é instável.

A.1.2 Plano de fase de selas

$$\mu_1, \mu_2 \text{ reais, } \mu_1 \cdot \mu_2 < 0 \quad (\text{A.2})$$

Quando os autovalores reais possuem sinais diferentes, o ponto estacionário é denominado ponto de sela. Uma vez que um dos autovalores é positivo, duas das quatro trajetórias associadas com os autovalores deixam o equilíbrio. Um ponto de equilíbrio de sela, portanto, é sempre instável, conforme Figura A.2.

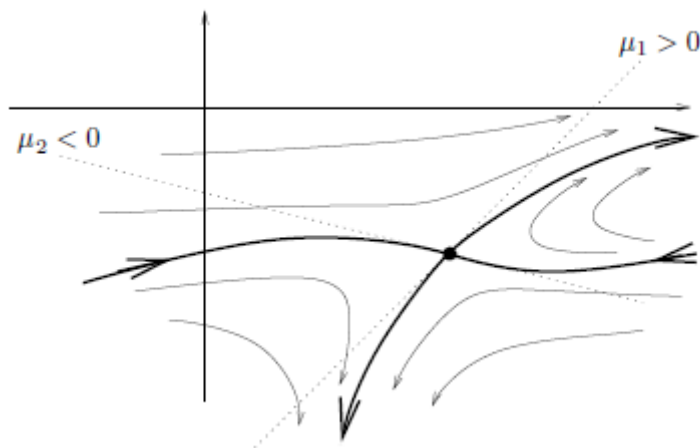


Figura A.2: Sela em um plano de fase (autoespaço é indicado pelo seu autovalor μ).
Fonte: Seydel (2010).

A.1.3 Plano de fase foco

Nesse caso, μ_1, μ_2 são complexos conjugados com parte real diferente de zero. Assim:

$$\mu_1 = \alpha + i\beta, \quad \mu_2 = \alpha - i\beta \quad (\text{A.3})$$

Onde α e $\pm\beta$ denotam as partes reais e imaginárias, respectivamente. Nesse caso, o equilíbrio correspondente é denominado foco estável ($\alpha < 0$), centro ($\alpha = 0$) e foco instável ($\alpha > 0$).

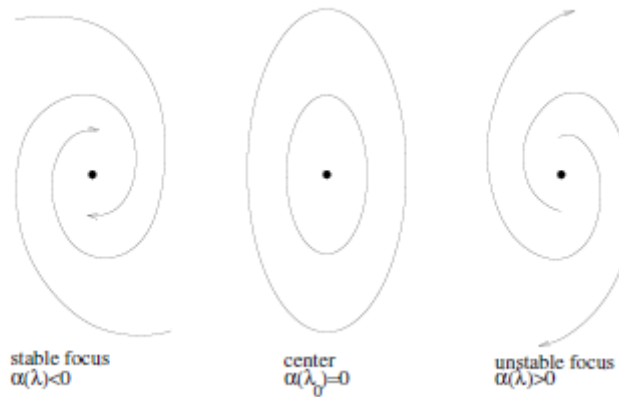


Figura A.3: Mudança de estabilidade do foco em um plano de fase. Fonte: Seydel (2010).

A.2 Análise de bifurcação

A.2.1 Bifurcação ponto limite (turning point)

Também denominado de bifurcação dobra (*fold bifurcation*), nó de sela (saddle node) ou de ponto limite (limit point), pode ser introduzindo usando as seguintes equações escalares:

$$0 = y^2 - \lambda \quad \text{ou} \quad 0 = y^2 + \lambda \quad (\text{A.4})$$

As soluções de $y(\lambda)$ de $0 = y^2 - \lambda$ formam uma parábola que é definida apenas para $\lambda \geq 0$. Em $\lambda = 0$ existe apenas uma solução ($y = 0$), onde para $\lambda > 0$ existem duas soluções $y = +\sqrt{\lambda}$ e $y = -\sqrt{\lambda}$. O ponto onde as soluções começam a existir ($\lambda = 0, y = 0$ nesse exemplo) é um ponto de inflexão. Os pontos de inflexão geralmente surgem em pares, resultando em efeitos de histerese. Na Figura A.4, o ramo vem de um lado (direção de λ) e vira no ponto de inflexão.

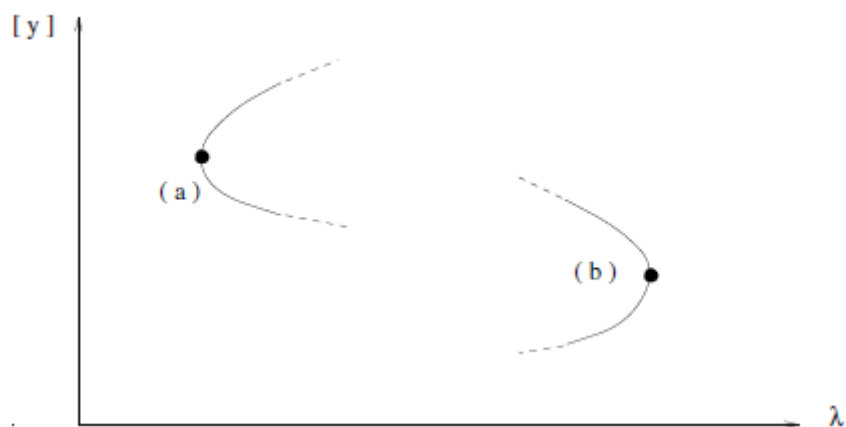


Figura A.4: Bifurcação ponto limite. Fonte: Seydel (2010).

O ponto de inflexão sela (*saddle node*) é motivado pelo comportamento de estabilidade das soluções quando elas são interpretadas como equilíbrio das equações diferenciais. No caso, por exemplo, da equação diferencial abaixo:

$$\dot{y} = y^2 + \lambda \quad (\text{a.5})$$

o equilíbrio $+\sqrt{\lambda}$ é estável, enquanto que $-\sqrt{\lambda}$ é instável. Na Figura A.5 a estabilidade da equação é mostrada graficamente, onde distingue-se o equilíbrio estável e instável pela utilização de uma linha contínua para o primeiro e de uma linha pontilhada para o segundo.

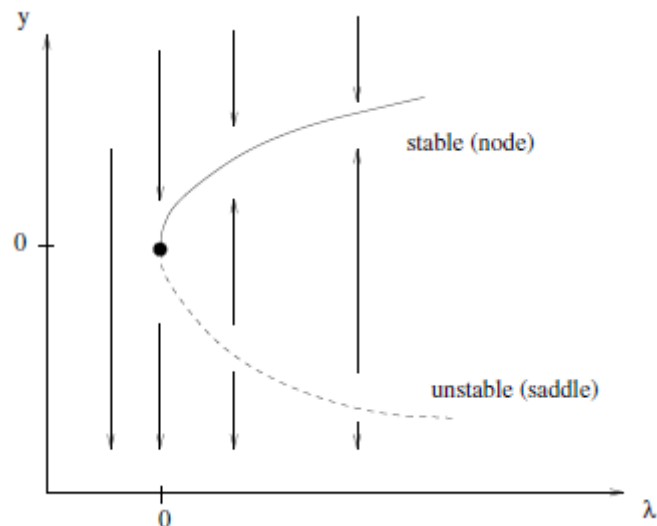


Figura A.5: Estabilidade da bifurcação ponto limite. Fonte: Seydel (2010).

Ou seja, a bifurcação do tipo sela é uma bifurcação descontínua, uma vez que no ponto crítico λ_c se tem o fim de um ramo estável. Se houver um caminho sobre o ramo estável através de λ_c , então a bifurcação é contínua e deixa de ser um ponto limite.

A.2.2 Bifurcação transcritical (*transcritical bifurcation*)

Na bifurcação transcritical ocorre a mudança de estabilidade das soluções. O exemplo mais simples dessa bifurcação é:

$$\dot{y} = \lambda y - y^2 \quad (\text{A.6})$$

O equilíbrio é dado por $y = 0$ e $y = \lambda$. Nesse caso, o ramo trivial $y = 0$ perde estabilidade no ponto de bifurcação $(y, \lambda) = (0,0)$. Simultaneamente há uma troca de estabilidade no outro ramo. A Figura 8 indica os ramos estáveis por linhas contínuas, conforme a seguir:

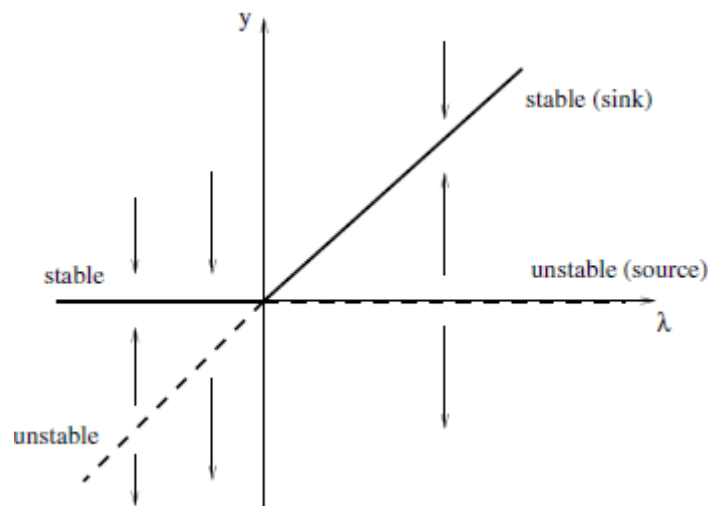


Figura A.6: Bifurcação transcrítica. Fonte: Seydel (2010).

A.2.3 Bifurcação forquilha (pitchfork bifurcation)

O tipo de bifurcação forquilha é caracterizada pelo aparecimento e desaparecimento de equilíbrios e pela ocorrência de mudança de estabilidade. Esse tipo de bifurcação é caracterizado pelo fato de que $x = 0$ é um conjunto de soluções estáticas e existe uma segunda curva que a intercepta $f(x, \lambda_c)$ situada inteiramente em um dos lados de λ_c .

No plano (x, λ) , a segunda curva de equilíbrios fica inteiramente no lado direito de $\lambda = \lambda_c$ se a segunda derivada é positiva, ao passo que se a segunda derivada for negativa, a curva se localiza no lado esquerdo. Assim, quando o equilíbrio não-trivial aparece para $\lambda > \lambda_c$, se diz haver uma bifurcação foquilha supercrítica, já para $\lambda < \lambda_c$ se tem uma bifurcação forquilha subcrítica.

O exemplo mais simples de bifurcação forquilha supercrítica (supercritical pitchfork bifurcation) é:

$$\dot{y} = \lambda y - y^3 \quad (\text{A.7})$$

Para $\lambda > 0$ existem dois equilíbrios não-triviais, $y = \pm\sqrt{\lambda}$. A transição da estabilidade é ilustrada na Figura A.7.

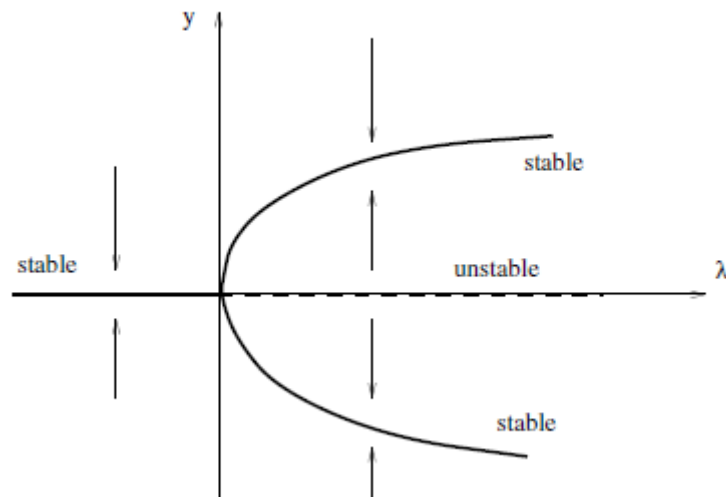


Figura A.7: Bifurcação forquilha supercrítica. Fonte: Seydel (2010).

Existe uma simetria na equação utilizada neste exemplo: ou seja, substituindo $y \rightarrow -y$ tem-se a mesma equação, logo, a equação é invariante em relação a essa transformação. A simetria também é encontrada nas soluções estacionárias. Além da transformação $y \rightarrow -y$, os dois ramos que surgem das condições iniciais $(y_0, \lambda_0) = (0,0)$ são idênticos e assim pode ser identificado.

O exemplo mais simples de bifurcação forquilha subcrítica é:

$$\dot{y} = \lambda y + y^3 \quad (\text{A.8})$$

Neste caso há também perda de estabilidade no ponto de bifurcação $(y_0, \lambda_0) = (0,0)$. Diferente do exemplo da bifurcação forquilha supercrítica, não há mudança de estabilidade. Ao invés disso, a estabilidade é perdida localmente no ponto de bifurcação. A equação diferencial e as soluções estacionárias possuem a mesma simetria como o exemplo anterior.

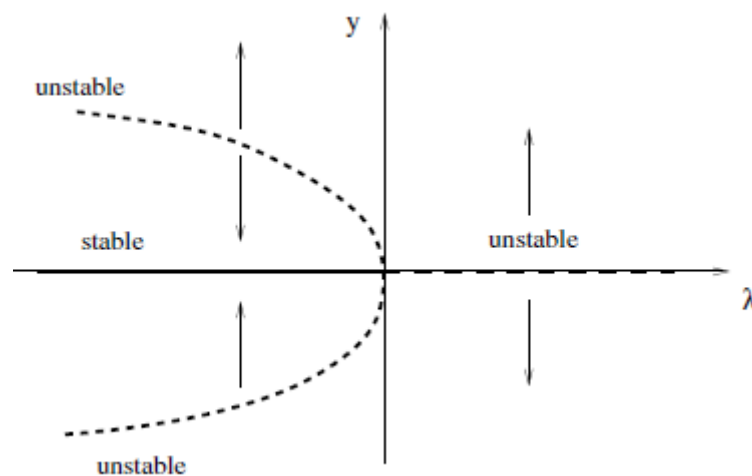


Figura A.8: Bifurcação forquilha subcrítica. Fonte: Seydel (2010).

A.3 Funções teste de bifurcação

Supondo que uma cadeia de soluções

$$(y^1, \lambda_1), (y^2, \lambda_2), \dots \quad (\text{A.9})$$

Para $f(y, \lambda) = 0$ foram aproximadas e que um ponto de bifurcação é dado por (y^{j-1}, λ_{j-1}) e (y^j, λ_j) . Portanto, a partir desses dados das soluções é possível reconhecer se uma bifurcação (y_0, λ_0) está próxima utilizando as funções teste $\tau(y, \lambda)$, as quais são avaliadas durante a varredura dos ramos. Uma bifurcação é indicada por um zero de τ , ou seja, uma função teste da bifurcação que satisfaz a propriedade

$$\tau(y_0, \lambda_0) = 0 \quad (\text{A.10})$$

e é contínua em um intervalo suficiente grande que inclui λ_0 . Uma mudança de sinal de τ em (y_0, λ_0) é conveniente. A aplicação de τ é ilustrada na Figura x. A parte de cima da figura mostra muitas soluções calculadas em um ramo. Durante essas computações, os valores da função teste da bifurcação são monitorados (parte de baixo da figura). Uma vez que é improvável obter-se exatamente o zero (ou a bifurcação, respectivamente), faz sentido checar uma mudança de sinal de τ . Uma bifurcação é mais provável de ocorrer se:

$$\tau(y^{j-1}, \lambda_{j-1})\tau(y^j, \lambda_j) < 0 \quad (\text{A.11})$$

é satisfeito.

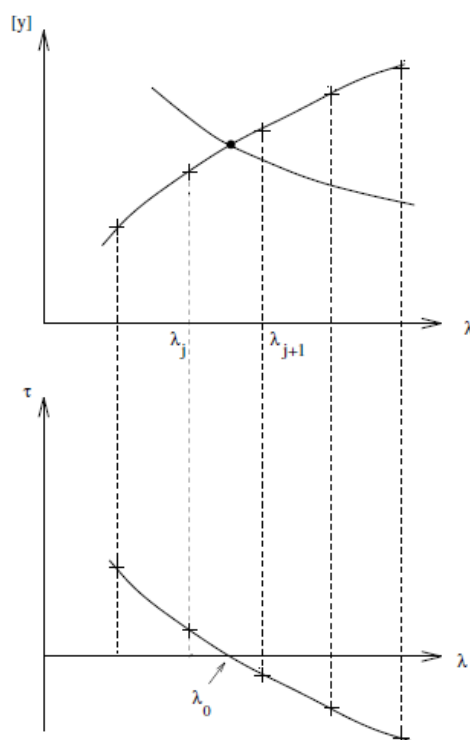


Figura A.9: Valores da função teste abrangendo um zero. Fonte: Seydel (2010).