UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Seminário do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

X OKTOBERFÓRUM – PPGEQ

04 A 07 DE OUTUBRO DE 2011

ANÁLISE DE IDENTIFICABILIDADE PRÁTICA APLICADA A MODELOS DINÂMICOS FENOMENOLÓGICOS

Viviane Rodrigues Botelho[1], Jorge Otávio Trierweiler[1]

[1] Grupo de Intensificação Modelagem Simulação Controle e Otimização de Processos – GIMSCOP
Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
R. Eng. Luis Englert, s/n. Campus Central. CEP: 90040-040 - Porto Alegre - RS - BRASIL,
E-MAIL: {vivirb, jorge}@enq.ufrgs.br

Resumo: *A análise de identificabilidade é uma ferramenta fundamental para a estimação dos parâmetros de modelos dinâmicos. Seu objetivo é verificar, a partir de uma estrutura e de dados experimentais quais parâmetros de um modelo podem ser identificados. Este trabalho propõe uma nova metodologia, baseada na análise de sensibilidade local do sistema. Tal metodologia é fundamentada em conceitos de teoria de controle. Primeiramente a matriz de sensibilidade é escalonada através de um problema de otimização que busca o condicionamento mínimo do sistema, de modo que todos os parâmetros e saídas sejam levados a mesma ordem de magnitude. Em seguida, os parâmetros a serem estimados são selecionados através da matriz de RGA deste sistema. Dois estudos de caso foram propostos com o objetivo de elucidar a metodologia, os quais viabilizaram constatar a eficiência do método proposto que, de uma forma geral, mostruo-se equivalente ou mais eficiente que a metodologia mais utilizada tradicionalmente.*

Palavras-chave: *identificabilidade, estimação de parâmetros, modelo dinâmico.*

1. Introdução

De uma forma geral, os avanços tecnológicos viabilizaram maior aprofundamento e entendimento dos fenômenos físicos associados aos mais diversos tipos de processos. Com isso, os modelos fenomenológicos característicos destes tornaram-se cada vez mais detalhados e consequentemente mais complexos, com alto grau de não linearidade e envolvendo elevado número de parâmetros e variáveis de estados (DOCHAIN, 2001), tornando fundamental o desenvolvimento de ferramentas auxiliares na modelagem de sistemas.

É neste contexto que surge a importância da análise de identificabilidade, sendo esta etapa imprescindível antes da estimação dos parâmetros de qualquer modelo. Seu principal objetivo consiste em verificar quais os parâmetros de um modelo ou combinações destes são possíveis de serem estimados.

A análise de identificabilidade pode ser estrutural ou prática. A identificabilidade estrutural está exclusivamente concentrada na estrutura do modelo, não levando em conta nenhuma restrição às condições operacionais empregadas, as quais podem ser inviáveis de serem aplicadas em termos práticos. A identificabilidade prática avalia o conteúdo de informação contido nos dados experimentais disponíveis, verificando se estes são adequados e suficientes para a estimação dos parâmetros do modelo de maneira confiável.

Para ilustrar este conceito, dois modelos simples podem ser comparados:

(1) **(2)**

Observando o primeiro modelo, é possível constatar que os parâmetros a e b estão diretamente relacionados e não podem ser estimados individualmente. Sendo assim, estes parâmetros não são identificáveis estruturalmente. Já o segundo modelo possui os parâmetros c e d estruturalmente identificáveis. Porém eles não poderão ser identificados se os estados x_1 e x_2 forem proporcionais (DOCHAIN, 2001). Isso significa que os parâmetros c e d são estruturalmente identificáveis, porém não podem ser identificados na prática, nestas condições.

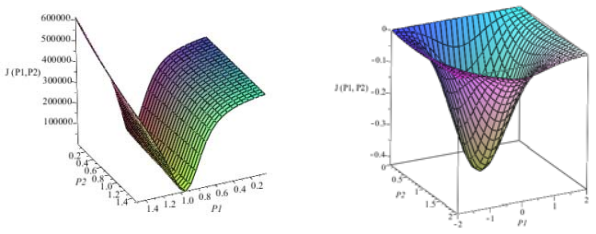
Diversas técnicas estão disponíveis para a análise de identificabilidade. As técnicas mais tradicionais de análise estrutural são bem desenvolvidas para modelos lineares, porém, à medida que o grau de não linearidade se eleva, estas geram sistemas inviáveis de serem solucionados.

Já as técnicas de identificabilidade prática, em geral, não apresentam restrições quanto ao grau de não linearidade do sistema. As principais adversidades pertinentes a estas metodologias estão associadas à necessidade de conhecimento prévio da variabilidade dos parâmetros do sistema bem como ao elevado número de análises necessárias a fim de se definir quais parâmetros devem ser estimados.

O presente trabalho propõe uma nova metodologia para a análise de identificabilidade prática, baseada em conceitos de teoria de controle, a qual é capaz de solucionar as adversidades descritas anteriormente. Primeiramente serão abordados de maneira mais detalhada os conceitos e técnicas existentes associados à identificabilidade prática. Em seguida a técnica proposta é descrita. Por fim, dois estudos de caso são apresentados e discutidos.

2. Identificabilidade Prática

Um conjunto de parâmetros é considerado não identificável quando existe uma forte correlação entre os mesmos. A estimação de um conjunto desta natureza conduzirá a um elevado grau de incerteza no modelo, uma vez que diferentes combinações valores para os parâmetros levam a mesma resposta, conforme mostra a Figura 1a, a qual representa um modelo genérico.



(a) **(b)**

Figura 1. Resultado da Estimação dos Parâmetros P1 e P2: (a) par não identificável e (b) par identificável

A análise de identificabilidade visa evitar que este tipo de problema ocorra, indicando quais parâmetros devem ser estimados a partir de determinado conjunto de dados experimentais.

2.1. Análise de Sensibilidade

Todas as técnicas de análise de identificabilidade prática são baseadas na investigação das funções de sensibilidade local (REICHER, 2001). Estas quantificam a dependência das saídas do modelo em relação aos parâmetros. Dado o sistema dinâmico genérico:

$$\dot{x} = f(x, u, \theta) \qquad \textbf{(3)} \qquad\qquad y = g(x, \theta) \qquad \textbf{(4)}$$

onde y corresponde ao vetor das saídas, u ao vetor das entradas, x ao vetor dos estados e θ ao vetor dos parâmetros. A sensibilidade das saídas pode ser matematicamente definida por:

$$s_{ij} = \left.\frac{\partial y_i}{\partial \theta_j}\right|_{\theta=\theta_0} \qquad \textbf{(5)}$$

onde θ_0 é uma estimativa inicial para os parâmetros.

Uma questão fundamental nesta etapa é o escalonamento destas funções. De uma forma geral, os parâmetros e estados de um modelo possuem magnitudes diferentes, o que influencia diretamente o resultado da análise de sensibilidade. Sendo assim, é necessário levar as funções de sensibilidade à mesma ordem de grandeza, evitando assim que resultados enganosos sejam obtidos. Tradicionalmente, isto é feito da seguinte forma:

$$s_{ij} = \left.\frac{\Delta\theta_j}{ys_i}\frac{\partial y_i}{\partial \theta_j}\right|_{\theta=\theta_0} \qquad \textbf{(6)}$$

onde $\Delta\theta_j$ corresponde à faixa de variabilidade do parâmetro θ_j e ys_i é um valor de referência para a saída y_i. BRUN *et. al.* (2001) estabelece algumas considerações práticas para a seleção adequada destes, porém, todas elas são baseadas em informações prévias do sistema, as quais, em muitos casos, não estão disponíveis de antemão.

A partir das funções de sensibilidade, estrutura-se a matriz de sensibilidade. Para sistemas dinâmicos esta pode ser obtida a partir da aplicação da regra da cadeia na equação 5:

$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x}.S(t) + \frac{\partial f}{\partial \theta} \qquad \textbf{(7)}$$

onde $S(t)$ corresponde a matriz de sensibilidade para determinado instante de tempo. Esta matriz contempla as funções de sensibilidade de todas as saídas (linhas da matriz) em relação a todos os parâmetros (colunas da matriz).

A matriz de sensibilidade média ($\bar{S}$) é definida como:

$$\bar{S} = \frac{\sum_{m=0}^{p} S(m.t_s)}{n_s} \qquad \textbf{(8)}$$

onde t_s é o tempo de amostragem e ns é o número de amostras.

2.2. Métodos de Análise de Identificabilidade Prática

Definidos os conceitos referentes à análise de sensibilidade, os principais métodos para verificar a identificabilidade do sistema podem ser descritos.

2.2.1. Análise de Matriz de Covariância

É a técnica mais simples para análise de identificabilidade. Segundo BALSA-CANTO (2007), ela pode ser realizada partindo-se, primeiramente da determinação da Matriz de Informação de Fisher (FIM) :

$$FIM = \bar{S}^T \bar{S} \qquad \textbf{(9)}$$

A partir da Matriz de Informação de Fischer, determinar a Matriz de Covariância e, por fim, a Matriz de Correlação é efetivamente determinada.

$$CV = FIM^{-1} \qquad \textbf{(10)} \qquad\qquad Cr_{ij} = \frac{Cv_{ij}}{\sqrt{Cv_{ii}Cv_{jj}}} \qquad \textbf{(11)}$$

Este índice pode variar entre 0 e ± 1, sendo que valores de $Cr_{ij} = \pm 1$, caracterizam parâmetros totalmente correlacionados e $Cr_{ij} = 0$ caracterizam parâmetros sem correlação. A principal adversidade associada a este método é a possibilidade de analisar os parâmetros apenas aos pares.

2.2.2. Método de WEIJERS & VANROLLEGHEM (1997)

Neste método, primeiramente deve-se determinar a Matriz de Informação de Fisher (FIM), conforme a equação 9. Baseado nesta, o número de condicionamento (CN) e o determinante (DET) podem ser avaliados.

$$CN = \sqrt{\frac{\lambda_{max}^{FIM}}{\lambda_{min}^{FIM}}} \quad \textbf{(12)} \qquad DET = \sqrt[2m]{\det(FIM)} \quad \textbf{(13)}$$

onde λ_{max}^{FIM} e λ_{min}^{FIM} representam, respectivamente, o maior e o menor autovalor da Matriz de Informação de Fisher e *m* é o número de parâmetros considerados no conjunto.

O número de condicionamento fornece uma medida da forma e o determinante uma medida do tamanho da região de confiança. O melhor subconjunto de parâmetros é definido segundo o maior valor de determinante e menor número de condicionamento. Não existem informações na literatura a respeito dos limites de DET e CN. O melhor grupo de parâmetros pode ser escolhido considerando *n* parâmetros mais frequentes nos 5% melhores subconjuntos avaliados (FRENI, 2009).

2.2.3. Método de BRUN *et. al.* (2001)

Neste método, primeiramente o índice de importância dos parâmetros (δ) é determinado, conforme a equação 14. Este é um indicador da influência de cada parâmetro nas saídas do processo.

$$\delta_j = \sqrt{\frac{1}{n_y}\sum_{i=1}^{n_y} \bar{s}_{ij}^2} \qquad \textbf{(14)}$$

onde ny é o número de saídas.Definidos os parâmetros mais importantes, deve-se normalizar as colunas da matriz de sensibilidade e selecionar um subconjunto de parâmetros (k), dando prioridade aqueles com maiores índices de importância. Em seguida, a matriz de sensibilidade normalizada é reestruturada, mantendo as colunas referentes ao subconjunto selecionado. Por fim, deve-se calcular o índice de colinearidade do subconjunto, dado por:

$$\gamma_k = \frac{1}{\sqrt{\lambda k_{min}}} \qquad \textbf{(15)}$$

onde λ_{kmin} é o menor autovalor da matriz de sensibilidade. Altos índices de colinearidade indicam que os parâmetros estão correlacionados. Considera-se ideal um conjunto de parâmetros com índice de colinearidade inferior a 5. Valores superiores a 20 já são críticos (BRUN *et. al.*, 2001).

3. Metodologia Proposta

A metodologia desenvolvida neste trabalho para a análise de identificabilidade é baseada em conceitos de teoria de controle, onde as entradas do processo são substituídas pelos parâmetros.

Primeiramente, propõe-se um procedimento de escalonamento da matriz de sensibilidade sem a necessidade do conhecimento da possível variabilidade dos parâmetros $(\Delta\boldsymbol{\theta_j})$, bem como de valores de referência para as saídas $(\boldsymbol{ys_i})$. Tal proposta é baseada no condicionamento mínimo da matriz de sensibilidade.

O número de condicionamento de uma matriz $\boldsymbol{M^{P\,X\,Q}}$ de posto cheio é definido como a razão entre o maior e o menor valor singular da mesma (BOYD *et. al.*, 1994), isto é:

$$\boldsymbol{\kappa(M)} = \left(\frac{\boldsymbol{\lambda_{max}(M^TM)}}{\boldsymbol{\lambda_{min}(M^TM)}}\right)^{\mathbf{1/2}} \qquad \textbf{(16)}$$

Uma matriz com um elevado número de condicionamento é considerada mal condicionada, indicando alta sensibilidade a incertezas. Este indicador depende fortemente do escalonamento das entradas e saídas (SKOGESTAD,2005).Sendo assim, é necessário escalonar adequadamente o sistema para evitar que resultados equivocados sejam obtidos. BOYD *et. al.* (1994) sugerem uma metodologia que busca encontrar o melhor escalonamento da matriz M através do seguinte problema de otimização:

$$\begin{aligned} &\min_{L,R}\ \boldsymbol{\kappa(LMR)} \\ &\boldsymbol{s.t.}\quad \boldsymbol{L} \in \mathfrak{R}^{p\,X\,p}, \boldsymbol{diagonal\ e\ não\ singular} \quad \textbf{(17)} \\ &\qquad\ \boldsymbol{R} \in \mathfrak{R}^{q\,X\,q}, \boldsymbol{diagonal\ e\ não\ singular} \end{aligned}$$

onde L e R são as matrizes de escalonamento da matriz M. Dessa forma, é possível aplicar o conceito de determinação do condicionamento mínimo a matriz de sensibilidade do sistema, solucionando assim o problema do escalonamento.

De posse da matriz de sensibilidade adequadamente escalonada, seleciona-se o melhor conjunto de parâmetros a serem estimados. Neste trabalho, sugere-se a utilização da Matriz de RGA para sistemas não quadrados.

Em teoria de controle, a Matriz de RGA (*Relative Gain Array*) é um indicador capaz de estimar o grau de interação entre as variáveis, isto é, a influência que cada variável manipulada (ou parâmetro, neste caso) possui sobre cada saída. Normalmente ela é atribuída para sistemas quadrados, onde o grau de interação é indicado pelos valores da sua diagonal principal. Tais valores podem variar em uma ampla faixa de magnitude. Se o RGA é próximo de 1, a variável manipulada terá pouco efeito sobre as demais saídas. Números menores que 0,5 ou muito elevados indicam interação. (LUYBEN, 1997).

Para o estudo de identificabilidade, a utilização de sistemas quadrados não é conveniente, uma vez que, em geral, um modelo possui mais parâmetros do que estados medidos. Sendo assim, considera-se a Matriz de RGA para sistemas não quadrados (RGA parcial), apresentada por SKOGESTAD(2005). Ela pode ser matematicamente definida como:

$$\boldsymbol{RGA = S\ x\ S^{+^T}} \quad \textbf{(18)}$$

onde $\boldsymbol{S^+}$ é a pseudo-inversa da matriz de sensibilidade e *x* indica multiplicação termo a termo. Neste caso, a interação entre os parâmetros é constatada através do somatório das colunas da Matriz de RGA, podendo este variar entre 0 e 1. Considerando que cada coluna da matriz de RGA representa um parâmetro, quando uma coluna apresentar valores de somatório próximos de 1, o parâmetro correspondente está pouco correlacionado com os demais parâmetros do modelo.

Considerando o conceito previamente descrito, o seguinte procedimento pode ser adotado para a seleção do subconjunto de parâmetros a serem estimados:

a) Determinar a matriz de RGA conforme a equação 18.
b) Somar os elementos de cada coluna desta matriz.
c) Selecionar os parâmetros cujas colunas apresentam valores maiores ou iguais a um fator de corte, previamente definido para o sistema.

4. Resultados e Discussões

4.1. Estudo de Caso I – Modelo de Aiba

4.1.1. Descrição do Modelo

O problema em estudo trata de um processo fermentativo contínuo para a produção de etanol a partir da levedura *Saccharomyces cerevisiae* em um reator CSTR. O balanço material do processo é dado pelas seguintes equações:

$$\frac{dCs}{dt} = (Cs_0 - Cs).D - \frac{Cx.\mu}{Y_{X/S}} \quad \textbf{(19)}$$

$$\frac{dCp}{dt} = (Cp_0 - Cp).D + \frac{Y_{P/S}}{Y_{X/S}}.X.\mu \quad \textbf{(20)}$$

$$\frac{dCx}{dt} = (Cx_0 - Cx).D + Cx.\mu \quad \textbf{(21)}$$

onde D representa a taxa de diluição, Cp, Cs e Cx representam respectivamente as concentrações de produto, substrato e biomassa no reator, $Y_{P/S}$ e $Y_{X/S}$ são os rendimentos teóricos em etanol e em células e μ é a velocidade específica da reação.

Muitos modelos estão disponíveis para representar a velocidade específica de reação. BORGES (2008) reuniu mais de 35 destes modelos. A partir destes, foi selecionado o modelo de AIBA (1968) acoplado ao modelo de EDWARD (1987) apud BORGES (2008):

$$\mu = \mu_{max} \frac{Cs}{K_s + Cs} e^{-(K_1 Cs + K_2 Cp)} \quad \textbf{(22)}$$

A Tabela 1 apresenta os valores originais dos parâmetros do modelo.

Tabela 1. Valores originais dos Parâmetros.

μ_{max}	K_2	K_1	$Y_{P/S}$	$Y_{X/S}$	K_S
0,3052	2,316	0,008	0,028	0,445	0,026
h^{-1}	g/L	L/g	L/g	---	---

FONTE: BORGES(2008)

Perturbações foram criteriosamente selecionadas e realizadas sobre taxa de diluição D, conforme demonstra a Figura 2.

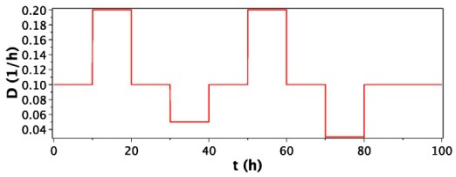


Figura 2. Perturbações Aplicadas na Taxa de Diluição.

As demais variáveis de entrada foram mantidas constantes, sendo Cs_0 = 100g/L, Cp_0 = 0 g/L, e Cx_0 = 0 g/L. Todos os estados foram considerados medidos. As condições iniciais correspondem a solução estacionária em t=0.

Dados foram gerados a partir da simulação do modelo nas condições consideradas utilizando-se os valores originais apresentados na Tabela 1. Posteriormente, uma variação de -5% nos valores originais dos parâmetros foi realizada, e estes valores foram utilizados como estimativa inicial (θ_0) nas análises posteriores.

4.1.2. Análise de Sensibilidade

A partir do modelo proposto e das metodologias descritas, foi realizada a análise de identificabilidade do sistema. Todo o estudo foi desenvolvido através do software *Maple 14,* exceto o escalonamento através do condicionamento mínimo, o qual foi realizado através de uma subrotina previamente implementada em *Matlab 5.3*.

Primeiramente, procedeu-se com a análise da sensibilidade. As sensibilidades iniciais $s_{ij}(0)$ foram consideradas nulas, uma vez que os estados iniciais não são necessariamente dependentes dos parâmetros, visto que são provenientes de informações externas (SCHWEINBERGER, 2009).

A partir das sensibilidades determinadas, é realizado o escalonamento. Para a metodologia sugerida por BRUN *et. al*. (2001), $\Delta\theta$ foi considerado igual à estimativa inicial θ_0 e ys_i igual a média das saídas simuladas. A Figura 3 apresenta o resultado das sensibilidades ao longo do tempo, $s_{ij}(t)$, exemplificada para o estado P, considerando as possíveis hipóteses de escalonamento.

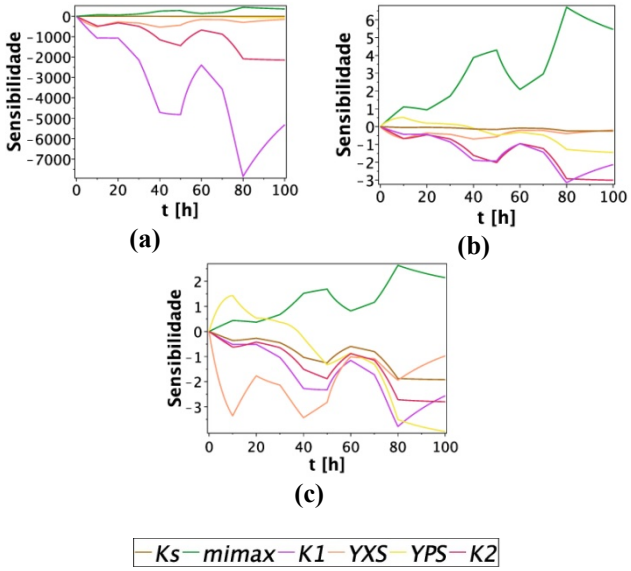


Figura 3. Sensibilidades Dinâmica para o estado P (a) sem Escalonamento, (b) com Escalonamento sugerido por BRUN *et al*. (2001) e (c) com Escalonamento através do condicionamento mínimo.

Através da comparação das Figuras 3(a) e 3(b) é possível verificar uma considerável redução na variabilidade das sensibilidades após o escalonamento. Já comparando as Figuras 3(b) e 3(c) a alteração na variabilidade pode ser verificada, porém é menos intensa.

4.1.3. Análise de Identificabilidade

Para fins comparativos, esta etapa foi realizada de duas formas: através da nova metologia proposta, utilizando a matriz de RGA e através do método proposto por BRUN *et. al.* (2001), uma vez que, atualmente, este é o método mais aplicado e considerado o mais eficiente.

Primeiramente, aplicando-se o método de BRUN *et. al.* (2001) os parâmetros foram ordenados de acordo com sua importância no modelo, conforme apresentado na Tabela 2. Em seguida, a seleção do melhor subconjunto de parâmetros foi realizada conforme a metodologia apresentada na Figura 4, adaptada de FRENI et. al. (2001). A Tabela 3 apresenta estes resultados.

Tabela 2. Índices de Importância dos Parâmetros Determinado Segundo a Equação 14.

Sem Escalonamento		Escalonamento sugerido por BRUN *et. al.* (2001)		Escalonamento através do Condicionamento Mínimo	
θ_i	δ_i	θ_i	δ_i	θ_i	δ_i
K_1	5375,5	μ_{max}	3,01	$Y_{P/S}$	2,02
K_2	1569,1	K_2	1,39	$Y_{X/S}$	1,63
$Y_{X/S}$	447,1	K_1	1,36	K_1	1,39
μ_{max}	310,95	$Y_{P/S}$	0,97	K_2	1,10
$Y_{P/S}$	78,73	$Y_{X/S}$	0,41	μ_{max}	1,00
K_S	1,53	K_S	0,11	K_S	0,75

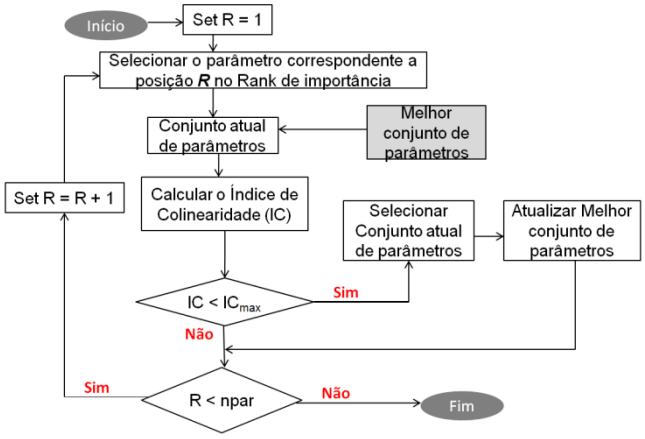


Figura 4. Critério para seleção do melhor subconjunto de parâmetros pelo método de BRUN *et. al.* (2001).

Tabela 3. Melhores Subconjuntos – Método de BRUN.

Matriz de Sensibilidade	Melhor Subconjunto	Índice de Colinearidade
Sem Escalonamento	K_1, $Y_{P/S}$	5,14
BRUN et. al. (2001)	μ_{max}, $Y_{P/S}$, $Y_{X/S}$	4,22
Condicionamento Mínimo	$Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$,K_1	3,57

Através da Tabela 2 observa-se que a importância de cada parâmetro é significativamente diferente em cada um dos escalonamentos propostos, enfatizando a influência que tal tratamento matemático proporciona no resultado da análise.

Os resultados obtidos a partir da metodologia de análise de identificabilidade com a matriz de RGA para sistemas não quadrados são apresentados na Tabela 4. Considerou-se, neste caso, o valor do fator de corte igual a 0,4. É importante ressaltar que tal indicador deve ser analisado e selecionado de acordo com o sistema em estudo. Neste trabalho, para fins comparativos, o critério utilizado para esta seleção foi baseado no número de parâmetros estimáveis, obtido pelo método de Brun *et. al.* (2001), ou seja, priorizou-se os três parâmetros com maior somatório das colunas da Matriz de RGA.

Tabela 4. Melhores Subconjuntos – Matriz de RGA

	Melhor Subconjunto
Sem Escalonamento	K_1, $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$
BRUN et. al. (2001)	μ_{max}, $Y_{P/S}$, $Y_{X/S}$
Condicionamento Mínimo	K_1, $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$

De posse dos melhores subconjuntos propostos por cada metodologia e dos dados experimentais previamente gerados, a estimação dos parâmetros foi realizada de acordo com um problema de otimização utilizando o método dos mínimos quadrados, conforme a equação 23 e 24. O objetivo desta etapa é comparar os erros quadráticos obtidos com a estimação de cada subconjunto, verificando a eficiência de cada metodologia.

$$J = \min_{M} \sum_{i=1}^{ny} \sum_{j=1}^{t_{sample}} (y_i - \hat{y}_i)_j^2 \quad (23)$$

$$M_i = \frac{\theta_i}{\theta o_i} \quad (24)$$

Antes da estimação ser efetivamente realizada, isto é, quando todos os parâmetros do modelo são iguais a θ_0, o erro quadrático (J) obtido é igual a 3363,67. Após a estimação de cada um dos subconjuntos, foram obtidos os erros quadráticos apresentados na Tabela 5.

Tabela 5. Estimação dos Parâmetros.

Método	Matriz de Sensibilidade	Parâmetros	Erro (J)
BRUN et. al. (2001)	**Sem Escalonamento**	K_1, $Y_{P/S}$	79,58
	BRUN et. al. (2001)	μ_{max}, $Y_{P/S}$, $Y_{X/S}$	3,60
	Cond. Mínimo	$Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$,K_1	2,70
Matriz de RGA	**Sem escalonamento**	K_1, $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$	2,70
	BRUN et. al. (2001)	μ_{max}, $Y_{P/S}$, $Y_{X/S}$	3,60
	Cond. Mínimo	K_1, $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$	2,70

Comparando os resultados da Tabela 5, constata-se que independente da metodologia utilizada, a aderência do modelo melhorou consideravelmente após a estimação. O Método de BRUN et. al. (2001) sem escalonamento apresentou o pior resultado. Já o método da Matriz de RGA mostrou-se menos sensível ao problema do escalonamento. Considerando os sistemas escalonados, ambos os métodos conduziram aos mesmos resultados, ressaltando que a análise da Matriz RGA é realizada de maneira simples e rápida, em apenas uma etapa. O escalonamento através do condicionamento mínimo conduziu aos melhores resultados, com a vantagem que não foram necessárias informações prévias do sistema, tais como a variabilidade dos parâmetros ($\Delta\boldsymbol{\theta_j}$) e os valores de referência para as saídas ($\boldsymbol{ys_i}$).

Com o objetivo de verificar a confiabilidade dos resultados obtidos, a estimação de todos os possíveis subconjuntos de três parâmetros também foi realizada,

conforme demonstra a Figura 5.

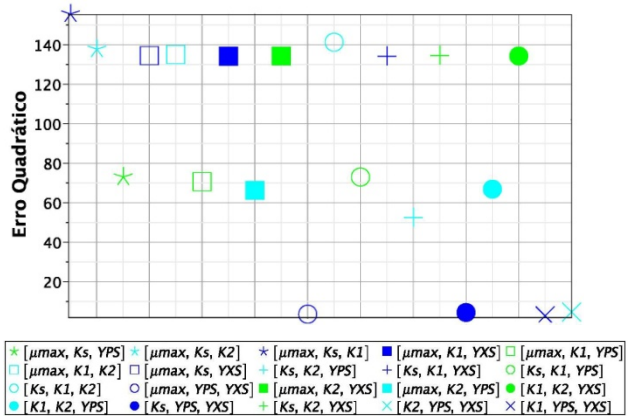


Figura 5. Mapa de Erros: Estimação de subconjuntos com três Parâmetros

A Figura 5 permite constatar que o melhor subconjunto foi K_1, $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$, sendo o mesmo proposto por ambas as metodologias, quando utilizado o escalonamento através do condicionamento mínimo. Observa-se ainda que os subconjuntos que contém os pares $Y_{P/S}$,$Y_{X/S}$, de uma forma geral são os que apresentam o menor erro, o que denota a ifluência que tais parâmetros tem no modelo. Tal constatação é coerente com os índices de importância obtidos para o escalonamento através do condicionamento mínimo (Tabela 2).

4.2. Estudo de Caso II – Reator de Williams-Otto

4.2.1. Descrição do Modelo

Este problema foi originalmente proposto por Williams e Otto em 1960, como ferramenta para o estudo de estratégias de controle. Desde então, vem sendo amplamente utilizado em trabalhos relacionados a controle e otimização, considerando as mais diversificadas alterações no modelo e no processo (FORBES,1994). Trata-se de um reator semi-batelada, onde ocorrem as seguintes reações:

$$A + B \overset{k_1}{\rightarrow} C \qquad C + B \overset{k_2}{\rightarrow} P + E \qquad P + C \overset{k_3}{\rightarrow} G$$

O reagente B é continuamente alimentado ao reator, e reage com A, já presente no mesmo. Formam-se os produtos P e E bem como o subproduto G. As reações são exotérmicas, onde o calor gerado é removido através de uma jaqueta de resfriamento. As equações de 25 a 37 descrevem o processo:

$$\frac{dV}{dt} = \frac{FB}{\rho} \quad (25) \qquad \frac{dnA}{dt} = -r_1 V \quad (26)$$

$$\frac{dnB}{dt} = FB - \frac{MB\, r_1\, V}{MA} + r_2 V \quad (27)$$

$$\frac{dnC}{dt} = \frac{MC\, r_1\, V}{MA} - \frac{MC\, r_2\, V}{MB} - r_3 V \quad (28)$$

$$\frac{dnE}{dt} = \frac{ME\, r_2\, V}{MB} \quad (29) \qquad \frac{dnG}{dt} = \frac{MG\, r_3\, V}{MC} \quad (30)$$

$$\frac{dnP}{dt} = \frac{MP\, r_2\, V}{MB} - \frac{MP\, r_3\, V}{MC} \quad (31)$$

$$\frac{dTR}{dt} = \frac{H}{\rho V cp} - \frac{FB\, TR}{\rho V} \quad (32)$$

$$r_1 = \frac{k_1 nAnB}{V^2} \quad (33) \qquad r_2 = \frac{k_2 nBnC}{V^2} \quad (34)$$

$$r_3 = \frac{k_3 nCnP}{V^2} \quad (35) \qquad k_i = a_i \exp\left(-\frac{b_i}{TR + T_{ref}}\right), \quad i = 1,2,3 \quad (36)$$

$$H = FBcpT_{in} - (\Delta H_1 r_1 + \Delta H_2 r_2 + \Delta H_2 r_2)V - V\frac{A_0}{V_0}U(TR - TW) \quad (37)$$

onde V [m^3] é volume do Reator, nA,nB,nE,nP,nG [kg] são as massas das espécies no reator, TR [K] é temperatura do reator, TW [K] é temperatura da água de resfriamento, Tin é a temperatura de entrada no reator e FB [m^3/s] é vazão de entrada do reagente B.

Na Tabela 6, podem ser vistos os valores originais dos parâmetros do modelo.

Tabela 6. Valores Originais dos Parâmetros

MA	100	kg/kmol	b_2	8333,3	K
MB	200	kg/kmol	b_3	11111,1	K
MC	200	kg/kmol	**cp**	4,184	kJ/kg.ºC
MP	100	kg/kmol	**ρ**	1000	kg/m^3
ME	200	kg/kmol	ΔH_1	-263,8	kJ/kg
MG	300	kg/kmol	ΔH_2	-158,3	kJ/kg
a_1	1,6599E3	m^3/kg.s	ΔH_3	-226,3	kJ/kg
a_2	7,2117E5	m^3/kg.s	A_0	9,2903	m^2
a_3	2,6745E9	m^3/kg.s	V_0	2,1052	m^3
b_1	6666,7	K	**U**	0,23082	kJ/(m2.s.ºC)

FONTE: WÜRTH *et. al.* (2009)

Perturbações foram realizadas sobre FB, conforme demonstra a Figura 6. As demais variáveis de entrada foram mantidas constantes, sendo T_{in} = 35ºC, T_W = 50ºC. Todos os estados foram considerados medidos. As condições iniciais são apresentadas na Tabela 7.

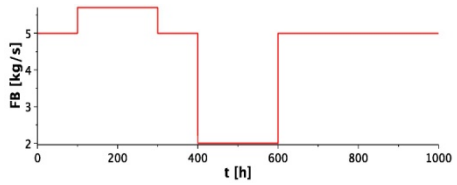


Figura 6. Perturbações Aplicadas a Vazão de Entrada de Reagente B.

Tabela 7. Condições Iniciais.

nA(0) = 2000 kg	nB(0) = 0	nC(0) = 0	nP(0) = 0
nE(0) = 0	nG(0) = 0	V(0) = 2m^3	TR(0)=65ºC

Dados foram gerados a partir da simulação do modelo nas condições consideradas utilizando-se os valores originais apresentados na Tabela 6. Posteriormente, uma variação de -5% nos valores originais dos parâmetros foi realizada, e estes valores foram utilizados como estimativa inicial (θ_0) nas análises posteriores.

4.2.2. Análise de Sensibilidade

A análise de Sensibilidade foi realizada de maneira análoga ao Estudo de Caso I, conforme descrito no item 4.1.2. As Figuras 7, 8 e 9 apresentam o resultado das sensibilidades ao longo do tempo, $s_{ij}(t)$,exemplificada para

os estados nP e TR.

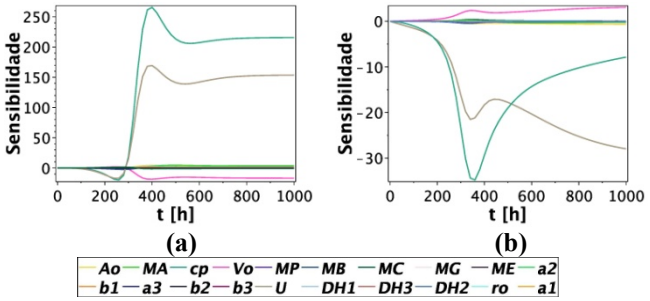


Figura 7. Sensibilidades Dinânimas sem Escalonamento para os estados (a) nP e (b) TR.

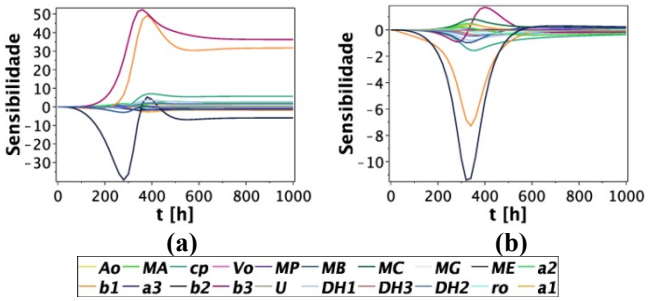


Figura 8. Sensibilidades Dinânimas com Escalonamento sugerido por BRUN *et al*. (2001) para os estados (a) nP e (b) TR.

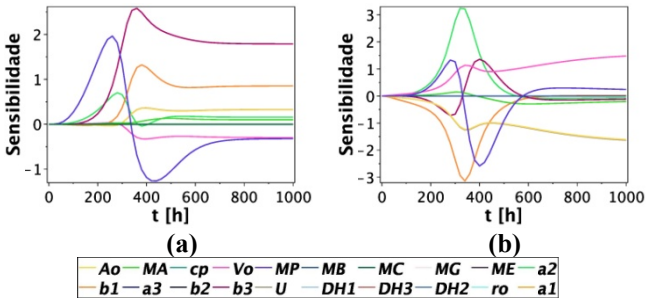


Figura 9. Análise de Sensibilidade com Escalonamento através do condicionamento mínimo para os estados (a) nP e (b) TR.

Neste estudo de caso, fica ainda mais evidente o efeito do escalonamento na análise de sensibilidade, pois, através da comparação das Figuras 7 e 8 constata-se que a amplitude das sensibilidades é reduzida. Essa redução torna-se ainda mais evidente quando se observa as Figuras 7 e 9, o que denota a eficiência do método.

4.2.3. Análise de Identificabilidade

Analogamente ao estudo de caso anterior, para fins comparativos, esta etapa foi realizada considerando método proposto por BRUN *et. al.* (2001) e a nova metodologia proposta (utilizando a matriz de RGA).

Primeiramente, aplicando-se o método de *BRUN et. al.* (2001) os parâmetros foram ordenados de acordo com sua importância no modelo, conforme apresentado na Tabela 8. Em seguida, a seleção do melhor subconjunto de parâmetros foi realizada conforme a metodologia apresentada na Figura 4 , adaptada de FRENI *et. al*. (2001). A Tabela 9 apresenta estes resultados.

Tabela 8. Índices de Importância dos Parâmetros, Determinado Segundo a Equação 14.

Sem Escalonamento		Escalonamento sugerido por BRUN et. al. (2001)		Escalonamento através do Condicionamento Mínimo	
θ_i	δ_i	θ_i	δ_i	θ_i	δ_i
cp	161,56	b_3	13,27	MG	1,00
U	108,71	b_2	9,91	ME	0,99
V_0	11,91	b_1	9,39	b_2	0,91
MA	10,95	cp	1,44	ρ	0,72
MB	3,01	MA	1,21	b_3	0,71
ME	2,81	MB	1,02	b_1	0,62
A_0	2,70	ΔH_1	0,72	MA	,061
MG	2,22	a_1	0,53	MP	0,55
MP	1,52	a_2	0,47	A_0	0,46
ΔH_1	1,30	a_3	0,45	U	0,44
ΔH_2	1,28	ΔH_2	0,44	V_0	0,43
MC	1,04	ME	0,35	MC	0,22
b_1	0,74	MG	0,35	a_2	0,0022
ΔH_3	0,68	ΔH_3	0,34	a_1	8,14E-4
b_3	0,43	ρ	0,22	a_3	6,81E-4
b_2	0,38	MC	0,21	MB	4,13E-4
a_1	0,16	MP	0,15	ΔH_3	2,11E-4
ρ	0,03	U	0,054	ΔH_2	1,78E-4
a_2	0,002	A_0	0,054	cp	1,78E-4
a_3	6,33E-8	V_0	0,054	ΔH_1	1,78E-4

Tabela 9. Melhores Subconjuntos – Método de BRUN

Matriz de Sensibilidade	Melhor Subconjunto	Índice de Colinearidade
Sem Escalonamento	cp, MA, MB, ME,b_2	4,95
BRUN et. al. (2001)	b_3, b_2, b_1, MA, ME, MG, ρ	4,49
Condicionamento Mínimo	MG, ME, b_2, ρ, b_3, b_1, MA, A_0	2,51

Os resultados obtidos a partir da metodologia baseada na matriz de RGA para sistemas não quadrados são apresentados na Tabela 10. Selecionou-se um fator de corte igual a 0,34, de modo a permitir que as metodologias possam ser comparadas de maneira equivalente.

Tabela 10. Melhores Subconjuntos – Matriz de RGA

Matriz de Sensibilidade	Melhor Subconjunto
Sem Escalonamento	cp, MA, MB, MC, ME, MG, b_1, b_2, U, ρ
BRUN et. al. (2001)	cp, MA, MB, ME, MG, b_1, b_2, b_3, ρ
Condicionamento Mínimo	MA, MP, ME, MG, b_1, b_2, b_3, ρ, A_0

A partir dos subconjuntos propostos por cada metodologia e dos dados experimentais previamente gerados, a estimação dos parâmetros foi realizada, conforme as equações 23 e 24.

Antes da estimação, isto é, quando todos os parâmetros do modelo são iguais a θ_0, o erro quadrático (J) obtido é 2,158E8. Após a estimação de cada um dos subconjuntos, foram obtidos os erros quadráticos

apresentados na Tabela 11.

Tabela 11. Estimação dos Parâmetros

Método	Matriz de Sensibilidade	Parâmetros	Erro (J)
BRUN et. al. (2001)	Sem Escalonamento	cp, MA, ME, MB, b_2	5,87E7
	BRUN et. al. (2001)	b_3, b_2, b_1, MA, MG, ME, ρ	9,55
	Cond. Mínimo	b_3, b_2, b_1, MA, MG, ME, ρ, A_0	1,04
Matriz de RGA	Sem escalonamento	cp, MA, MB, MC, ME, MG, b_1, b_2, U, ρ	4,52E6
	BRUN et. al. (2001)	cp, MA, MB, ME, MG, b_1, b_2, b_3, ρ	8,91
	Cond. Mínimo	MA, MP, ME, MG, b_1, b_2, b_3, ρ, A_0	0,88

Comparando os resultados da Tabela 11, é possível verificar que os métodos apresentam resultados muito semelhantes, sendo o método da Matriz de RGA ligeiramente superior em todas as análises. Quando nenhum escalonamento é utilizado, o modelo não é capaz de representar os dados experimentais. O escalonamento através do condicionamento mínimo conduziu aos melhores resultados, com a vantagem que não foram necessárias informações prévias do sistema.

Cabe salientar que, em ambos os estudos de caso, considerou-se o chute inicial dos parâmetros com uma alteração de apenas 5% no valor original. A qualidade dos resultados obtidos está diretamente relacionada a este chute. Isso porque todos os métodos são baseados na matriz de sensibilidade, a qual é determinada a partir da simulação do sistema com os parâmetros fornecidos. Sendo assim, valores iniciais para os parâmetros muito equivocados conduzem a sensibilidades distorcidas, e isto irá se refletir ao longo de toda a análise. Porém, este problema é contornado, tendo em vista que a análise de identificabilidade é um processo iterativo que precede a estimação dos parâmetros e a acuracidade dos resultados se eleva a cada nova etapa realizada.

4. Conclusão

A análise de identificabilidade é uma ferramenta fundamental na identificação de modelos dinâmicos de alta complexidade, visto que fornece um panorama das possíveis combinações de parâmetros passíveis de serem estimados.

Levando em conta a identificabilidade prática, diversas técnicas estão disponíveis. Todos eles têm como base a matriz de sensibilidade, por isso, é necessário que tal matriz reflita adequadamente o comportamento das saídas frente aos parâmetros. Dessa forma, é imprescindível que ela seja adequadamente escalonada. A metodologia proposta, que utiliza o condicionamento mínimo para escalonar a matriz de sensibilidade, mostrou-se mais eficiente que aquela mais tradicionalmente utilizada, sugerida por BRUN et. al. (2001), com a vantagem que não exige conhecimento prévio da variabilidade dos parâmetros do sistema.

A técnica proposta para análise de identificabilidade, que utiliza a matriz de RGA, conduziu a resultados satisfatórios, em ambos os casos estudados. A principal vantagem desta metodologia é que ela viabiliza a análise e seleção do melhor subconjunto de parâmetros em apenas uma etapa.

5. Referências

BALSA-CANTO, E.; RODRIGUEZ-FERNANDEZ, M.; BANGA, J. R. Optimal design of dynamic experiments for improved estimation of kinetic parameters of thermal degradation. *Journal of FoodEngineering*, 82, 178-188, 2007.

BORGES, P. *Otimização dinâmica da fermentação alcoólica no processo em batelada alimentada*. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, MG, Brasil, 2008.

BOYD, S. P.; GHAOUI, L.; FERON, E.; BALAKRISHNAN, V. *Linear Matrix Inequalities in System and Control Theory*, SIAM, Philadelphia, PA, 1994.

BRUN, R.; REICHERT, P.; KÜNSCH, H. Practical Identifiability analysis of large environmental simulation models. *Water Resources Research*, v. 37, n. 4, p. 1015-1030, 2001.

DOCHAIN, D., VANROLLEGHEM, P. *Dynamical modelling and estimation in wastewater treatment processes*. London, IWA Publishing, 2001.

FORBES, J. *Model Structure and Adjustable Parameter Selection for Operations Optimizations*. Tese de Doutorado,, McMaster University, Hamilton, Canada, 1994.

FRENI, G., G. MANNINA & G. VIVIANI. Identifiability analysis for receiving water body quality modelling. *Environmental Modelling & Software,* 24, 54-62,2009.

LUYBEN, M. L.; LUYBEN, W. L.. *Essentials of process control*, New York: McGraw-Hill, 1997.

REICHERT, P.; VANROLLEGHEM, P. Identifiability and uncertainty analysis of the river water quality model no. 1 (RWQM1). *Water Sci Technol* 43 7, pp. 329–338,2001.

SKOGESTAD, S.; POSTLETHWAITE, I. *Multivariable Feedback Control: Analysis and Design*. Wiley, 1996.

SCHWEINBERGER, C. *Aplicação do CEKF na estimação de parâmetros em modelo dinâmico.* Dissertação de Mestrado, UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil,2009.

WÜRTH, L.; HANNEMANN R.;MARQUARDT W. Neighboring-extremal updates for nonlinear model-predictive control and dynamic real-time optimization. *Journal of Process Control* v.19 p.1277–1288. 2009