

IDENTIFICAÇÃO EMPÍRICA DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO METANOL-ÁGUA VIA REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA) E MODELOS PARAMÉTRICOS

A. F. R. Teixeira^a, R. R. C. Santos^b, C. H. Sodré^a and F. O. Carvalho^a

^a*Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas, Brazil, arjir@bol.com.br, <http://www.ctec.ufal.br/posgraduacao/ppgeq/>*

^b*Curso de Engenharia Química, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, Alagoas, Brazil, rrcs.al@gmail.com, www.ctec.ufal.br/deq*

Palavra-chave: Redes Neurais Artificiais, Sinais Binários Pseudo-Aleatório e Modelos Paramétricos.

Resumo. A proposta deste trabalho é realizar identificação caixa preta do processo Coluna de Destilação Metanol-Água em malha aberta, utilizando perturbação degrau e Sinal Binário Pseudo-Aleatório (PRBS) para excitar a planta. Os modelos candidatos à identificação do sistema foram as Redes Neurais Artificiais (RNA) e modelos paramétricos. Espera-se obter a minimização do erro entre modelo matemático de identificação e a dinâmica real dos sistemas, para através deste conhecimento, tornar possível incremento na eficiência dos controles e elaboração de ferramentas computacionais que simulem a dinâmica do objeto em estudo.

1 INTRODUÇÃO

Devido a complexidade da dinâmica dos sistemas de produção industrial, os riscos potenciais relacionados à segurança do trabalho, por não haver capacidade de prever a consequência de ações e perda financeira no desperdício de produtos fora de especificação, sugere uma viabilidade em investir na área de identificação e controle de sistemas.

Com a crescente disponibilidade de computadores de alto desempenho, o uso de modelos matemáticos tem aumentado em praticamente todas as áreas do conhecimento humano. Apesar de bem desenvolvidos em muitas áreas, os modelos fenomenológicos advindos de balanço de massa, energia e quantidade de movimento, apresentam relativa complexidade para serem utilizados em tempo real.

A identificação de sistemas é uma área que estuda técnicas alternativas para modelagem de sistemas e apresenta como característica principal apenas a necessidade de dados experimentais da planta do processo. Os métodos conhecidos para isso são também referidos como “modelagem caixa preta” ou modelagem empírica. Esses modelos fornecem apenas a relação entre as variáveis de entrada e saída do processo, não evidenciam os fenômenos envolvidos no processo. Obviamente, pode ser feita também a identificação do sistema utilizando, quando disponível, um modelo fenomenológico validado para gerar os dados do processo. Vale salientar que de uma forma ou de outra, o sistema identificado é utilizado no desenvolvimento de estratégias avançadas de controle.

2 OBJETIVO

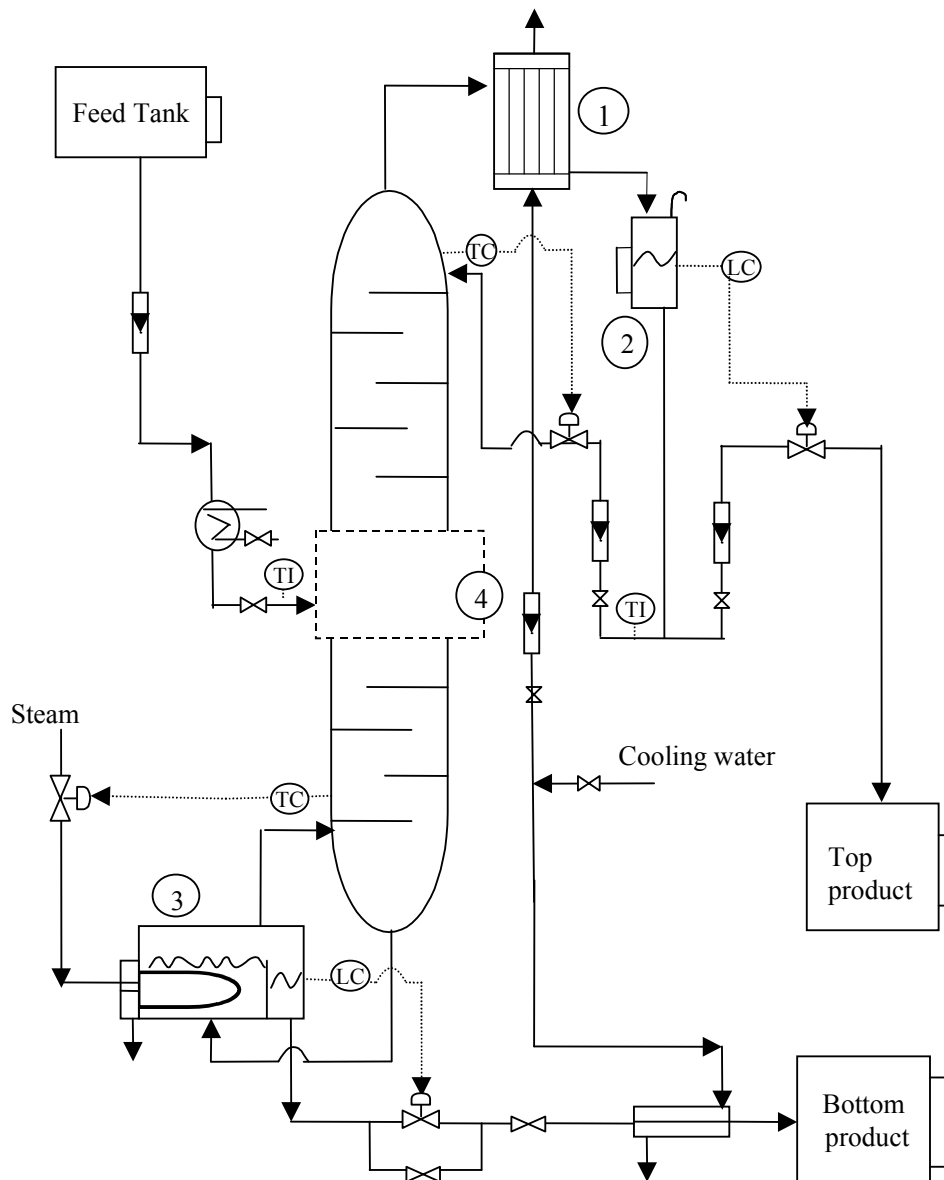
A proposta deste trabalho é realizar identificação caixa preta do processo Coluna de Destilação Metanol-Água em malha aberta, utilizando perturbação degrau e Sinal Binário Pseudo-Aleatório (PRBS) para excitar a planta. Os modelos candidatos à identificação do sistema foram as Redes Neurais Artificiais (RNA) e modelos paramétricos. Espera-se obter a minimização do erro entre modelo matemático de identificação e a dinâmica real dos sistemas, para através deste conhecimento, tornar possível incremento na eficiência dos controles e elaboração de ferramentas computacionais que simulem a dinâmica do objeto em estudo.

3 OBJETO DE ESTUDO:

Os estudos apresentados neste artigo foram realizados utilizando uma unidade de destilação da Escola de Química Ambiental e Engenharia de Minas da Universidade de Nottingham.

Esta coluna de destilação é feita de cobre, possui 10 bandejas, contendo dois borbulhadores cada uma, exceto a bandeja de alimentação que possui quatro borbulhadores. A coluna também é equipada com pontos de amostras de líquido, rotômetros e termopares para controle de temperatura nas bandejas de base e de topo. A alimentação da coluna é feita em um único ponto, na sexta bandeja. Possui também um condensador total, um tambor de refluxo e um refeedor parcial e é isolada termicamente.

O fluxograma na figura 1 ilustra de forma simplificada o objeto em estudo.



1-Condenser; 2- Reflux drum
3-Reboiler; 4- Feed tray envelop

Figura1: Fluxograma da coluna de destilação Metanol-Água

A coluna em estudo tem a finalidade de separar o Metanol (produto de topo) da Água (Produto de base). Devido a dificuldades em sua medição, a concentração de metanol é controlada indiretamente através do controle das temperaturas de base e de topo, sendo as vazões de vapor e de refluxo as respectivas variáveis manipuladas.

Sodré (2001) em sua tese de Doutorado desenvolveu um modelo fenomenológico escrito no programa computacional FORTRAN e o validou utilizando dados reais da planta, que permite, através de simulação, gerar dados de forma mais ágil, segura e econômica.

Devido a dificuldades como localização da planta, tempo de acomodação do sistema, custo e segurança, optou-se neste artigo em assumir os dados gerados através de simulação como sendo os experimentais.

4 METODOLOGIA

O procedimento de identificação da coluna de Destilação Metanol-Água utilizado neste artigo foi:

- Identificação de sistemas em malha aberta
- Planejamento experimental
 - Perturbação degrau
 - Perturbação através do PRBS
- Análise dos dados
- Seleção dos modelos candidatos à identificação
- Determinação dos parâmetros
- Validação dos modelos

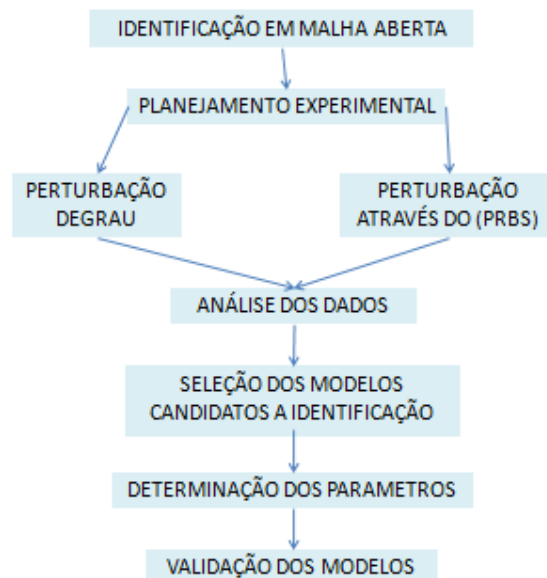


Figura2: Diagrama de blocos da metodologia

4.1 PLANEJAMENTO EXPERIMENTAL

Como a coluna em estudo tem a finalidade de separar o Metanol da Água, e devido a dificuldades em sua medição, a concentração de metanol é controlada indiretamente através do controle das temperaturas de base e de topo. Optou-se neste trabalho em interpretar este problema como dois sistemas “Single Input and Single Output” (SISO), sendo a “Temperatura de Base” e “Vazão de Vapor”, respectivamente, as variáveis de saída e entrada da malha 1, e “Temperatura de Topo” e “Vazão de Refluxo”, respectivamente, as variáveis de saída e entrada da malha 2, conforme é mostrado na figura 3:

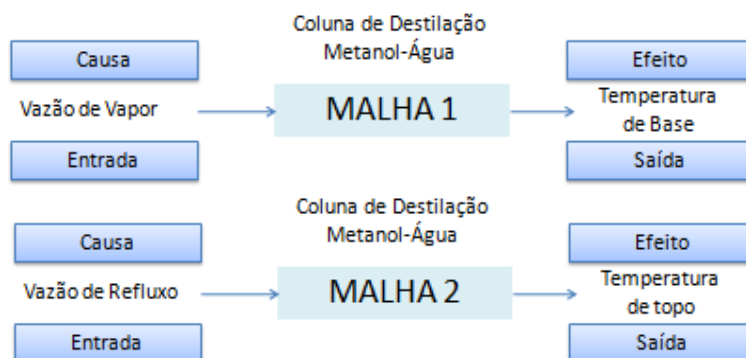


Figura 3: Diagrama de blocos das malhas de controle 1 e 2 da coluna de Destilação Metanol-Água.

Como o objeto em estudo foi interpretado como duas malhas SISO, entende-se que o problema de identificação resume-se em encontrar os modelos matemáticos capaz de descrever a relação causa/efeito das malhas 1 e 2.

Segundo Machado (2004), as principais metodologias de projeto de perturbações estabelecidas na literatura aplicam usualmente os sinais do tipo degrau, PRBS, relé ideal e relé com saturação. Cada sinal apresenta aspectos peculiares e excita o sistema de maneira diferente, podendo proporcionar diferentes modelos a depender da riqueza da resposta do sistema frente a cada perturbação. Estas perturbações podem ser executadas em dois modos de operação: em malha aberta ou malha fechada.

Machado (2004), relata também que a grande vantagem da estratégia de identificação em malha aberta consiste na facilidade de realização dos ensaios com aplicação dos sinais para obtenção dos dados, geralmente utiliza-se perturbações degrau e PRBS.

Neste trabalho optou-se em excitar as malhas 1 e 2 através de perturbação degrau e PRBS.

4.1.1 PERTURBAÇÃO DEGRAU

Nestes ensaios de identificação utilizou-se tempo de amostragem de 60 segundos. O sinal de excitação foi aplicado nas variáveis de entrada das malhas 1 e 2 com amplitude de 7% positivo e negativo em relação ao ponto operacional. As respostas coletadas nestes ensaios são mostradas nas figuras 4, 5, 6 e 7:

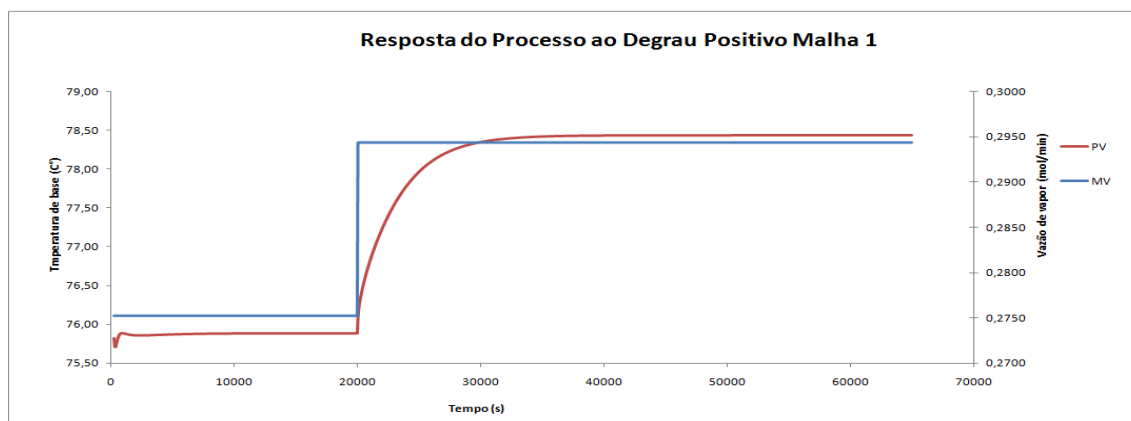


Figura 4: Resposta da malha 1 à perturbação degrau positiva de 7% na vazão de vapor.

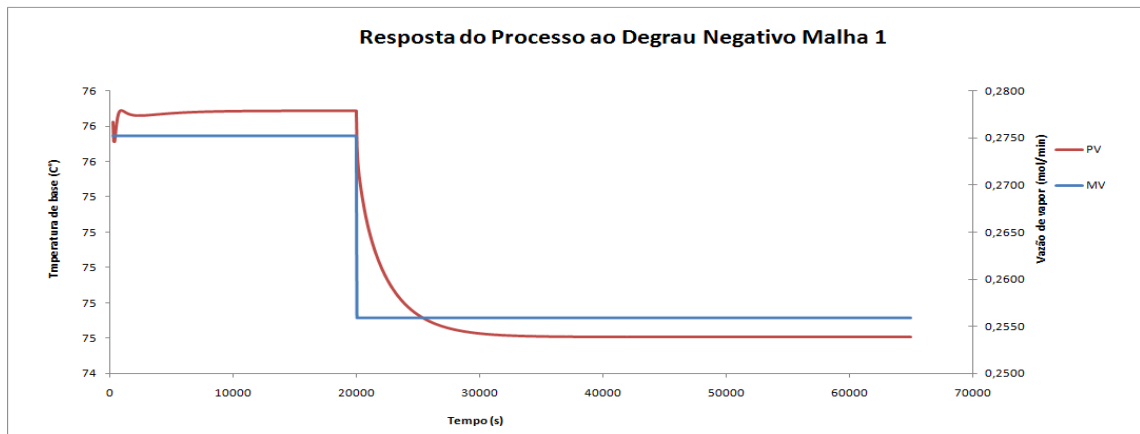


Figura 5: Resposta da malha 1 à perturbação degrau negativa de 7% na vazão de vapor.

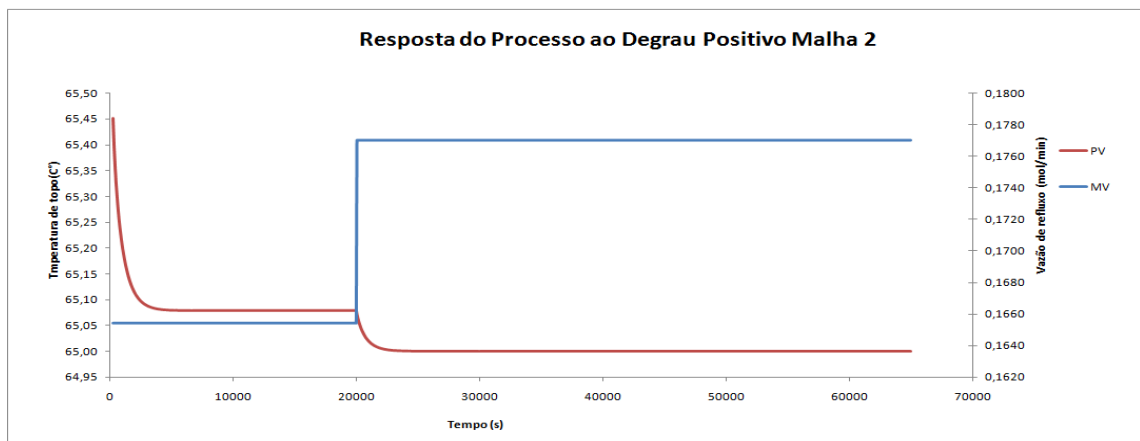


Figura 6: Resposta da malha 2 à perturbação degrau positiva de 7% na vazão de refluxo.

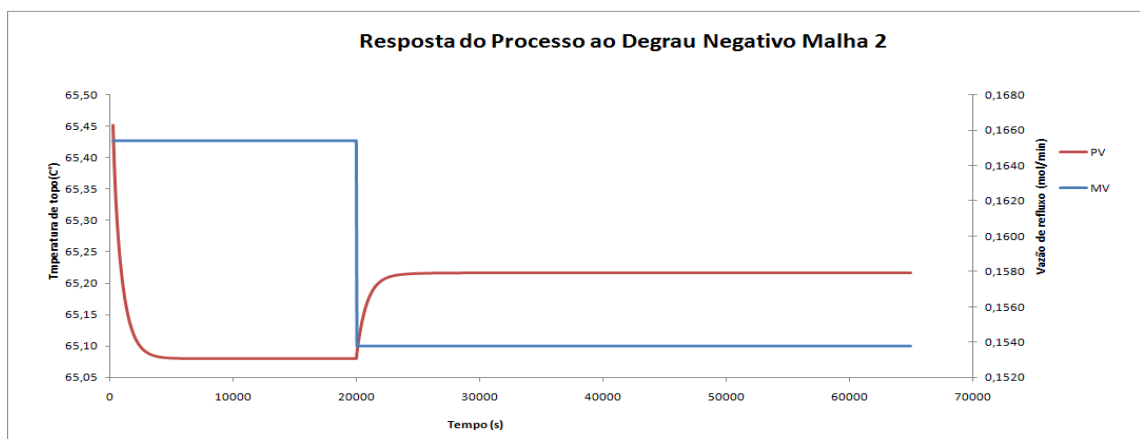


Figura 7: Resposta da malha 2 à perturbação degrau negativa de 7% na vazão de refluxo.

Uma prática comum na engenharia é aproximar através de funções lineares sistemas não-lineares. Sendo assim, após a realização destes ensaios de identificação, foram modeladas

as malhas 1 e 2 através de aproximação de suas dinâmicas às funções de transferência de 1ª ordem.

Quando uma função descreve a relação entre saída (variável de processo ou variável controlada) e entrada (variável manipulada) de um determinado sistema dinâmico, denominamo-la de função de transferência. Para processos físico-químicos é comum que a função de transferência seja uma equação diferencial, cuja solução torna-se mais simplificada caso seja trabalhado no domínio de Laplace ao invés do domínio do tempo.

A função de transferência de um sistema de 1ª ordem no domínio de Laplace pode ser expressa basicamente de duas maneiras, utilizando tempo morto ou sem tempo morto. Na equação 1 é mostrado o caso sem tempo morto, e na equação 2 com tempo morto:

$$G(S) = \frac{K}{\tau.S + 1} = \frac{Y(S)}{X(S)} \quad (\text{Equação 1})$$

$$G(S) = \frac{K.e^{-\theta.S}}{\tau.S + 1} = \frac{Y(S)}{X(S)} \quad (\text{Equação 2})$$

Onde:

G(S) é a função de transferência do processo;

Y(S) é a variável de processo (output, efeito);

X(S) é a variável manipulada (input, causa);

K é o ganho do processo;

τ é a constante de tempo do processo;

θ é o tempo morto do processo.

Através dos dados plotados nas figuras 4, 5, 6 e 7 foram determinados os parâmetros das funções de transferência de 1ª ordem com tempo morto. As equações 3, 4, 5 e 6 foram obtidas através dos ensaios mostrados respectivamente pelas figuras 4, 5, 6 e 7.

$$G(s) = \frac{132,48.e^{-1.s}}{48.s + 1} \quad (\text{Equação 3})$$

$$G(s) = \frac{66,44.e^{-1.s}}{48.s + 1} \quad (\text{Equação 4})$$

$$G(s) = \frac{-6,79.e^{-1.s}}{12.s + 1} \quad (\text{Equação 5})$$

$$G(s) = \frac{-11,79.e^{-1.s}}{14.s + 1} \quad (\text{Equação 6})$$

As respostas simuladas pelas equações 3, 4, 5 e 6 são mostradas respectivamente pelas figuras 8, 9, 10 e 11.

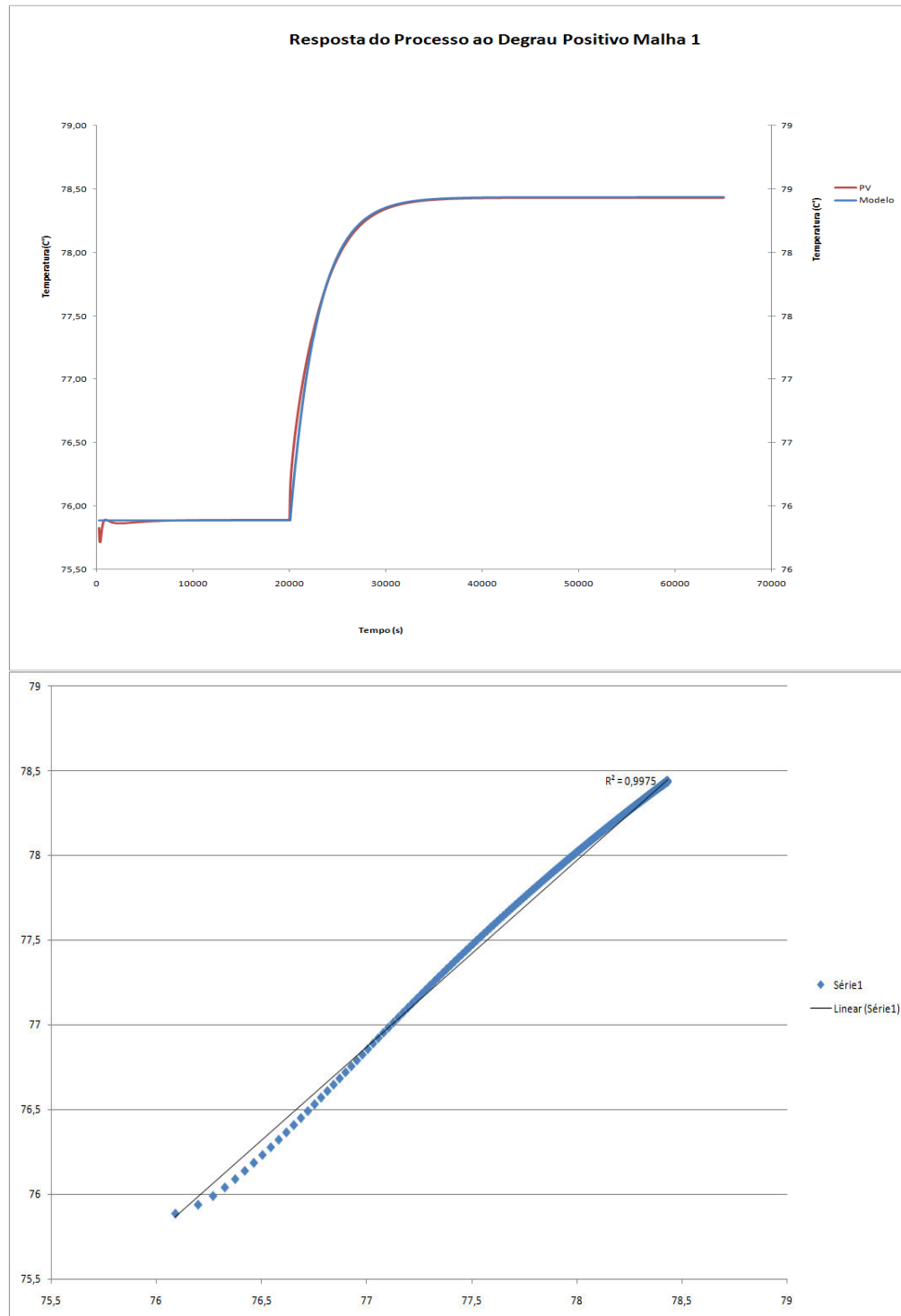


Figura 8: Comparação entre dados experimentais e simulados pela equação 3.

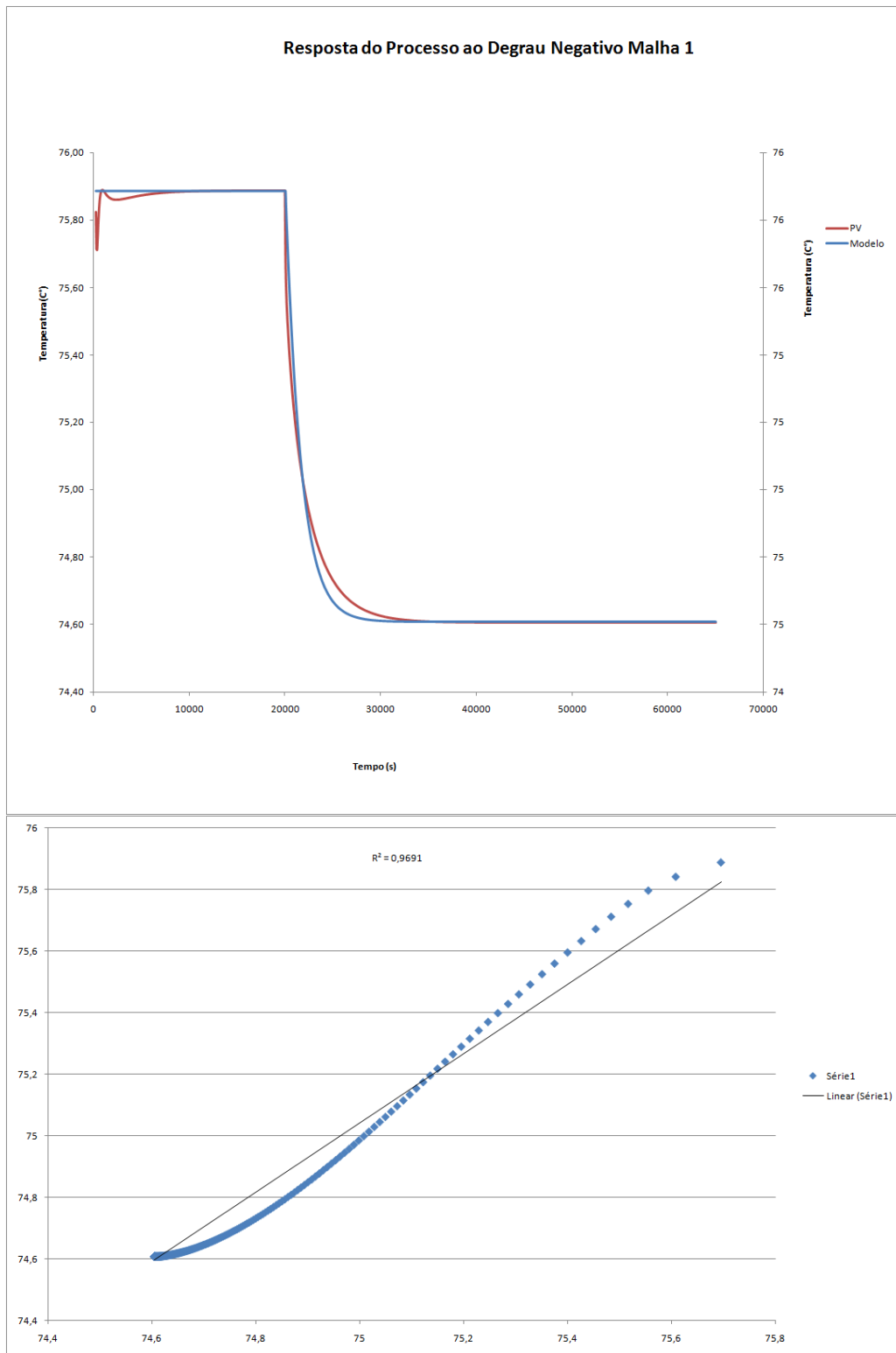


Figura 9: Comparação entre dados experimentais e simulados pela equação 4.

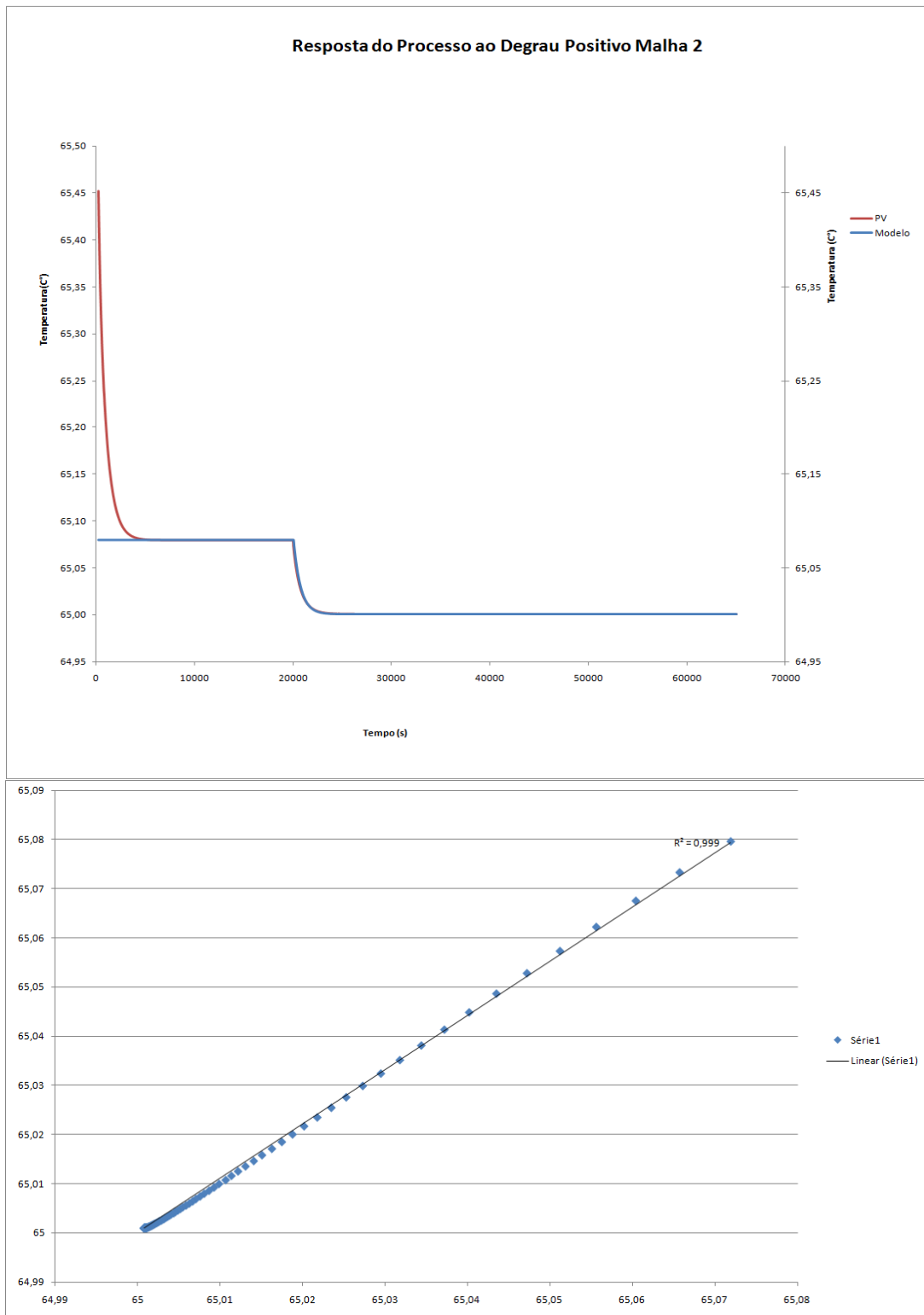


Figura 10: Comparação entre dados experimentais e simulados pela equação 5.

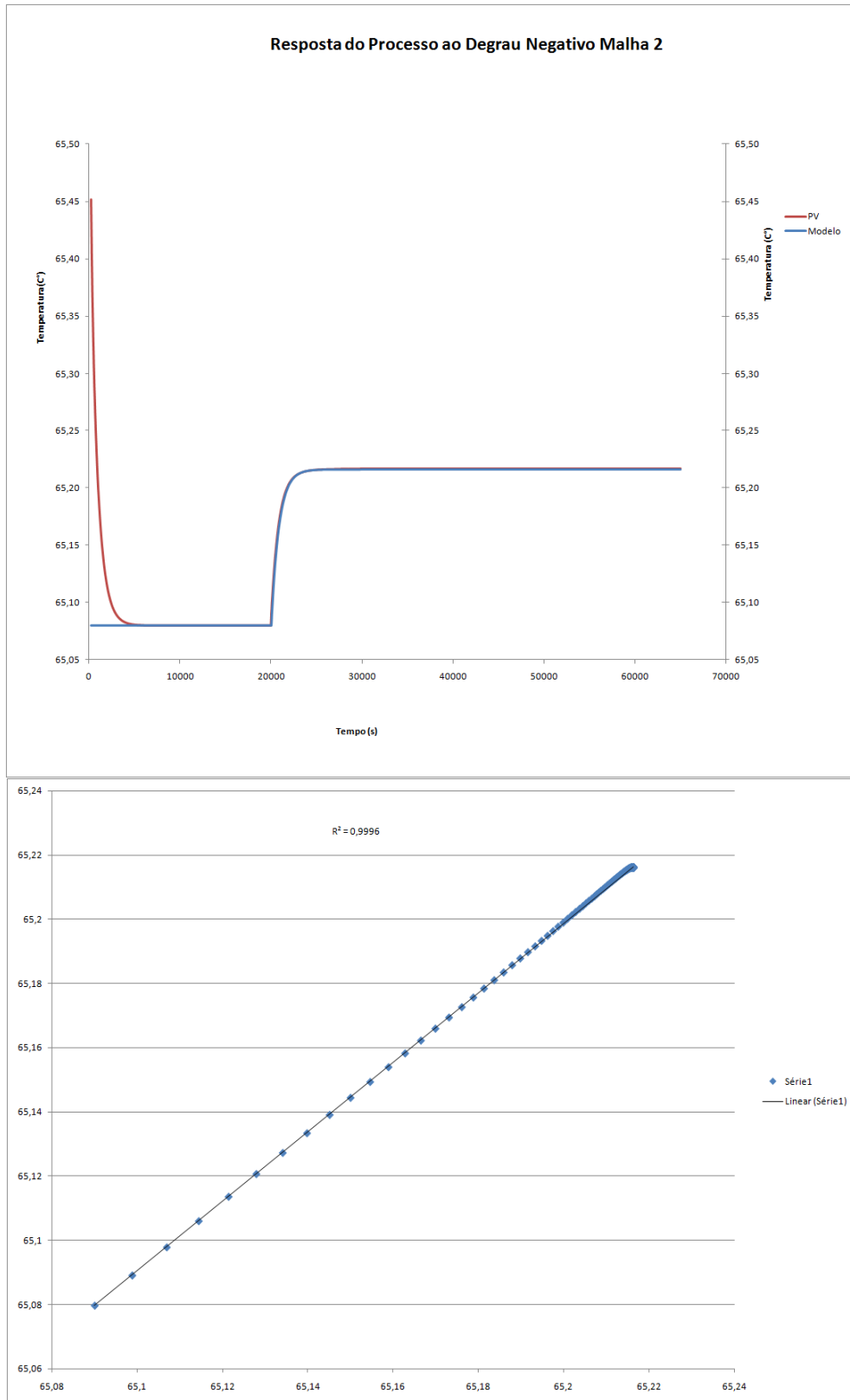


Figura 11: Comparação entre dados experimentais e simulados pela equação 6.

4.1.2 PRBS

O Sinal Binário Pseudo-Aleatório é um sinal com dois níveis lógicos (valor maior e valor menor, ex.: 80 °C e 75 °C), no qual estes serão alternados em tempos aleatórios, porém, com limitação na largura de pulso mínimo e máximo.

Na identificação de modelos para o controle do processo é interessante conhecer bem o sistema na chamada frequência de corte, que corresponde à frequência em que o módulo da resposta em frequência de malha fechada é 3 dB abaixo de seu valor na frequência zero, no qual o processo atinge sua largura de faixa. É nesta frequência que os controladores trabalham, desta forma, sinais que excitam razoavelmente a zona de frequência que contenha a frequência de corte trarão maiores informações para um bom projeto de controladores.

A largura de faixa do PRBS é calculada segundo a largura de faixa para controle, e é dada pela equação 7:

$$w_{inf} = \frac{1}{\beta_s \tau_{dom}^l} \leq w_s \leq \frac{\alpha_s}{\tau_{dom}^c} = w_{sup} \tag{Equação 7}$$

Onde β_s é o fator relacionado ao tempo de acomodação do processo e especifica quanta informação de baixa frequência estará presente no sinal. Valores de β_s iguais a 3, 4 ou 5 correspondem a 95%, 98% ou 99% do tempo de acomodação, respectivamente. Por exemplo, um valor de $\beta_s = 5$ enfatizará informação de frequência mais baixa. α_s determina o conteúdo em alta frequência do sinal e é uma medida de quão rápida é a velocidade de resposta em malha fechada em relação à resposta em malha aberta. Por exemplo, um valor de $\alpha_s = 2$ implica que a velocidade de resposta em malha fechada é duas vezes mais rápida que a de malha aberta. Valores típicos destes parâmetros são $\alpha_s = 2$ ou 3 e $\beta_s = 5$.

Para determinação destes parâmetros, além dos ensaios já mencionados, foi necessário também realizar um ensaio em malha fechada, que foi executado conforme figura 12:

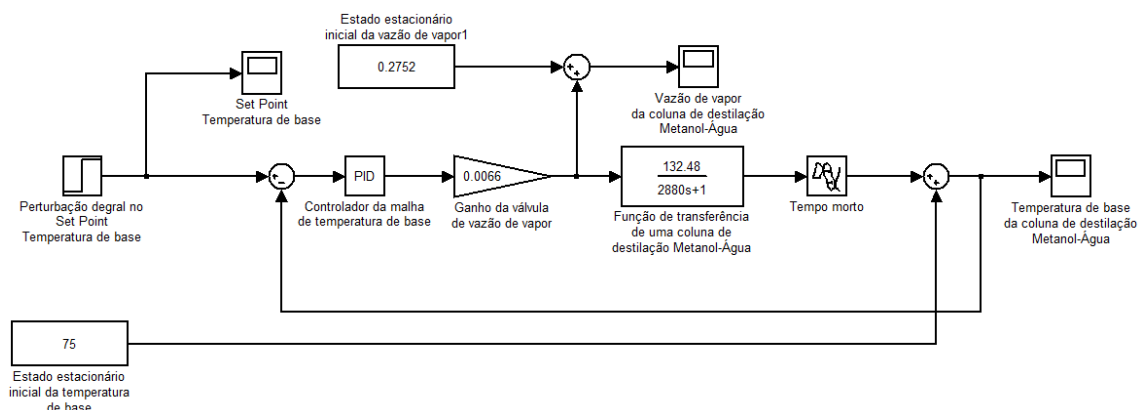


Figura 12: Diagrama de blocos elaborado no aplicativo Simulink do software MatLab® para ensaio em malha fechada.

O ensaio em malha fechada foi realizado aplicando uma perturbação degrau no valor desejado (SET POINT) das malhas 1 e 2. A figura 13 mostra o resultado deste ensaio.

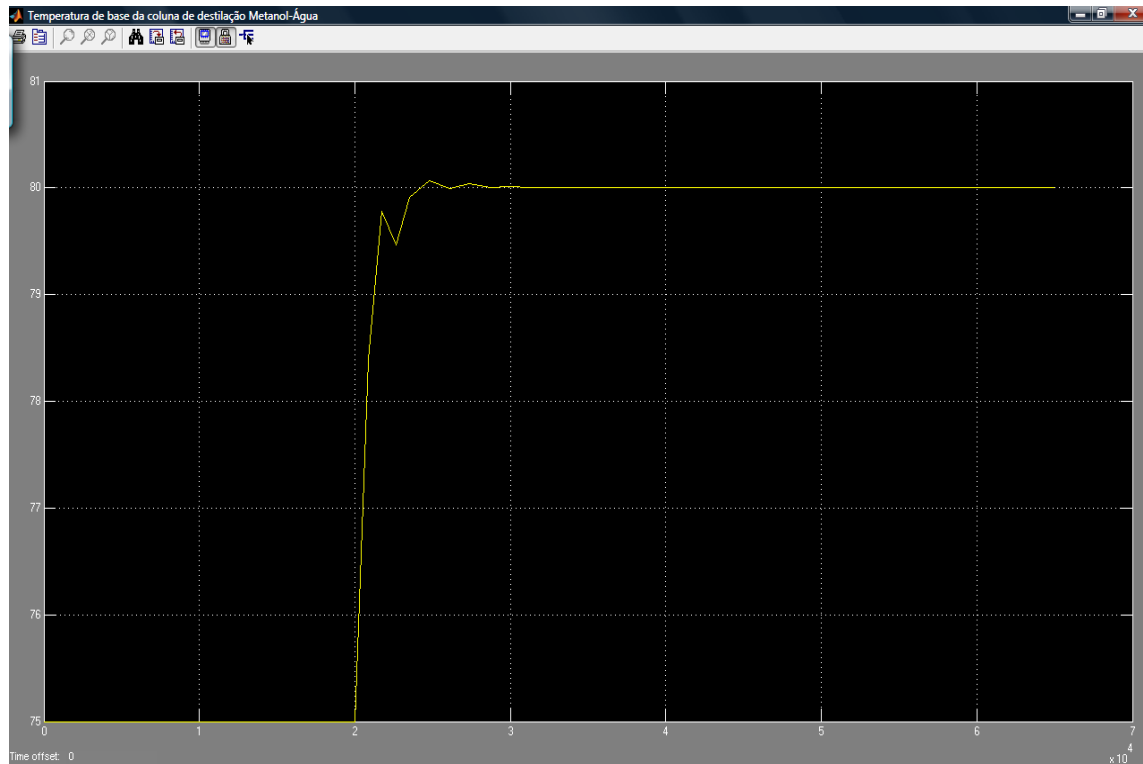


Figura 13: Resposta do ensaio em malha fecha descrito pela figura 12.

Com os conjuntos de dados obtidos nos ensaios em malha aberta e fechada foi possível determinar o intervalo de frequência para o PRBS, 1/80 hertz a 1/800 hertz, e o tempo estimado para realização do ensaio de identificação através do PRBS de forma a gerar uma quantidade mínima suficiente de dados foi de 25137 segundos. Como a proposta deste trabalho foi de utilizar Redes Neurais Artificiais, optou-se em aumentar o tempo de ensaio para 44000 segundos, podendo assim dividir os dados entre treinamento e validação do modelo.

Foi elaborado neste trabalho uma sub-rotina no software FORTRAN para geração do PRBS, dada a necessidade de implementar tal sinal ao modelo fenomenológico de Sodré (2001).

Então foram realizados ensaios com PRBS devidamente projetado nas malhas 1 e 2, os resultados destes são mostrados nas figuras 14 e 15 respectivamente.

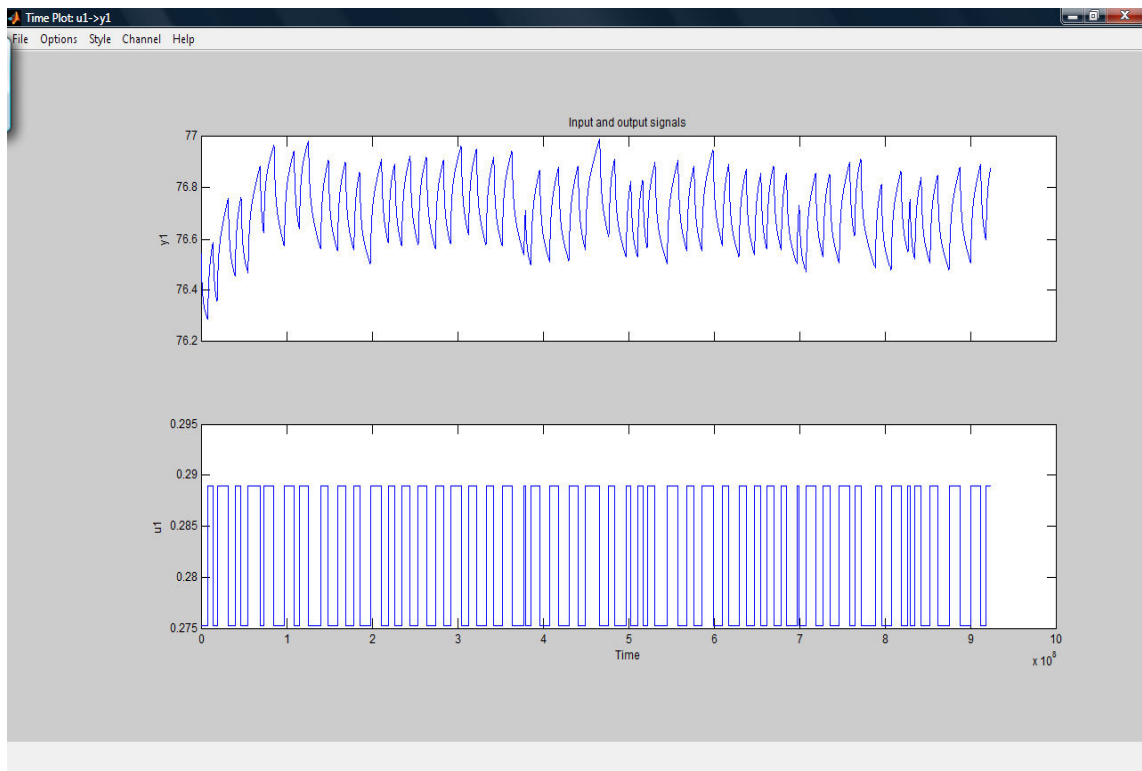


Figura 14: Ensaio de identificação através PRBS na malha 1, sendo $u1$ sua entrada e $y1$ a saída.

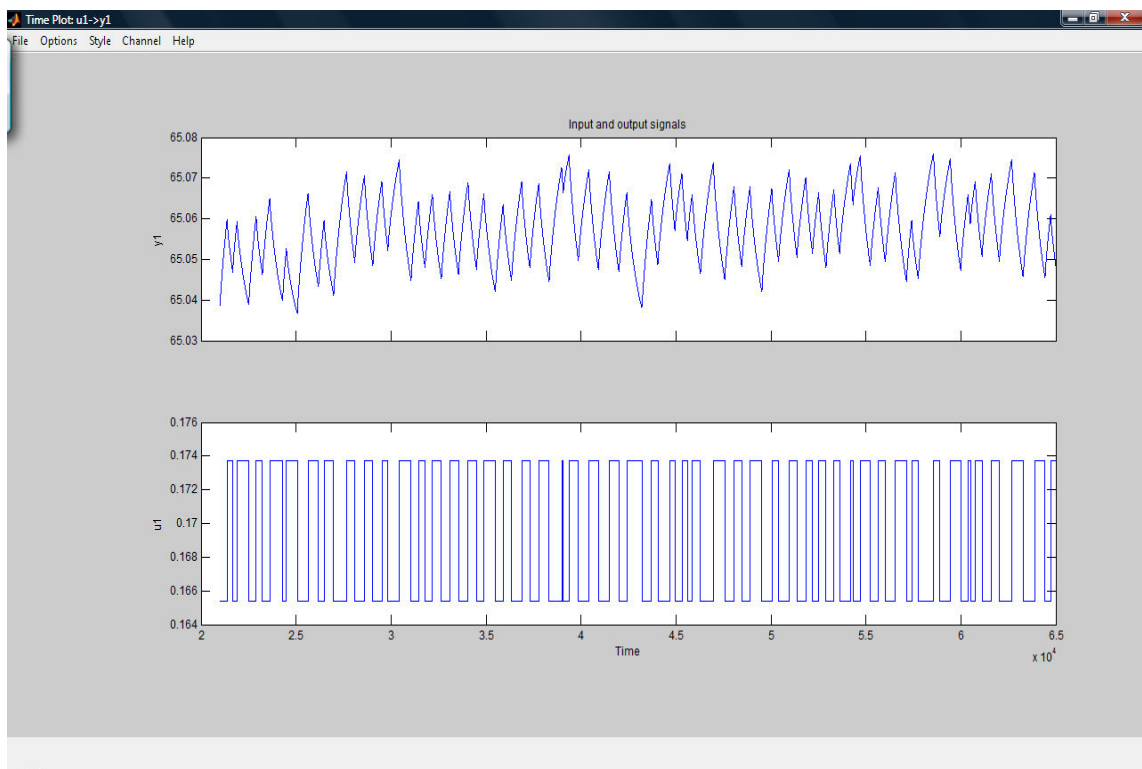


Figura 15: Ensaio de identificação através PRBS na malha 2, sendo $u1$ sua entrada e $y1$ a saída.

5 MÉTODOS DE IDENTIFICAÇÃO

Segundo concebe Assis (2001)

O processo de identificação de sistemas é quase uma arte, sendo um processo iterativo, conforme proposto por Ljung. Segundo esse autor, o procedimento para determinar um modelo de um sistema dinâmico a partir dos dados de entrada-saída de um sistema envolve três ingredientes básicos: os dados de entrada-saída; um conjunto de modelos candidatos (a estrutura do modelo); um critério de seleção de um modelo particular no conjunto, baseado na informação advinda dos dados (método de identificação).

(apud. ASSIS, p. 10)

Ainda para Assis (2001)

O processo de identificação consiste então em se repetir as etapas de seleção da estrutura do modelo, cálculo do melhor modelo na estrutura escolhida e avaliar se as propriedades do modelo são satisfatórias. Este ciclo pode ser melhor descrito como sendo:

- 1- Projetar um experimento e coletar os dados de entrada-saída do processo a ser identificado;
- 2- Examinar os dados; “polir” os dados de tal forma a remover tendências e pontos discrepantes, selecionar porções úteis dos dados originais e filtrar os dados a fim de se melhorar frequências importantes;
- 3- Selecionar e definir uma estrutura de modelo – um conjunto de candidatos à descrição do sistema – dentro da qual um modelo será encontrado;
- 4- Calcular o melhor modelo na estrutura escolhida de acordo com os dados de entrada-saída e um dado critério de ajuste;
- 5- Examinar as propriedades do modelo obtido;
- 6- Se o modelo é bom o suficiente, então parar o processo de identificação; caso contrário, retornar à etapa 3 e tentar outro conjunto de modelos. Pode-se tentar também outro método de estimativa (etapa 4) ou tentar melhorar os dados de entrada-saída (etapa 1 e 2).

(Apud. ASSIS, p.10)

Os modelos que descrevem as dinâmicas dos processos podem ser divididos em 3 classificações: modelos caixa-branca ou fenomenológico, que ocorrem quando o modelo é elaborado a partir das leis da física; modelos caixa-preta ou empírico, quando este é obtido a partir de relações entre causa e efeito, sem exigir conhecimento sobre as leis físicas que rege tal sistema; modelos caixa-cinza ou híbrido, quando há uma associação dos modelos caixa-branca e caixa-preta.

5.1 MODELOS CAIXA-PRETA LINEARES

Para sistemas lineares, o modelo dinâmico mais simples é o modelo resposta a um impulso finito (FIR – Finite Impulse Response):

$$y(t) = B(q)u(t) + \epsilon(t) \quad (\text{Equação 7})$$

$$y(t) = b_1 u(t-1) + \dots + b_n u(t-n) + \epsilon(t) \quad (\text{Equação 8})$$

Onde:

q ... operador deslocamento

$B(q)$... polinômio em q^{-1}

O preditor correspondente $\hat{y}(t|\theta) = B(q)u(t)$ é então baseado no vetor regressor:

$$\varphi(t) = [u(t-1) \ u(t-2) \ \dots \ u(t-n)] \quad (\text{Equação 9})$$

A medida que não tende ao infinito, pode-se descrever a dinâmica de qualquer sistema linear.

Entretanto, o caráter do termo de ruído $e(t)$ não será modelado neste procedimento.

As estruturas paramétricas lineares caixa-preta utilizadas na prática são todas variações da equação 7, usando diferentes maneiras de se alocar os “pólos” do sistema e diferentes maneiras de se descrever as características do ruído. Segundo Assis (2001) todos estes modelos (paramétricos) podem ser resumidos pela família geral Ljung:

$$A(q)y(t) = \frac{B(q)}{F(q)}u(t-nk) + \frac{C(q)}{D(q)}e(t) \quad (\text{Equação 10})$$

Onde:

$$A(q) = 1 + a_1q^{-1} + \dots + a_{na}q^{-na} \quad (\text{Equação 11})$$

$$B(q) = b_1 + b_1q^{-1} + \dots + a_{nb}q^{-nb+1} \quad (\text{Equação 12})$$

$$C(q) = 1 + c_1q^{-1} + \dots + a_{nc}q^{-nc} \quad (\text{Equação 13})$$

$$F(q) = 1 + f_1q^{-1} + \dots + a_{nf}q^{-nf} \quad (\text{Equação 14})$$

$$D(q) = 1 + d_1q^{-1} + \dots + a_{nd}q^{-nd} \quad (\text{Equação 15})$$

$$q^{-1}y(k) = y(k-1) \quad (\text{Equação 17})$$

Os casos especiais da equação 10 são conhecidos como:

Modelo Box-Jenkins(BJ): $A=1$;

Modelo ARMAX (AutoRegressive Moving Average with eXogeneous variable):
 $F=D=1$;

Modelo erro-saída OE (“Output Error”): $A=C=D=1$;

Modelo ARX (AutoRegressive with eXogeneous variable): $F=C=D=1$.

O preditor associado à equação 10 pode ser dado na forma regressão “pseudo-linear” como sendo:

$$\hat{y}(t|\theta) = \theta^T \varphi(t, \theta) \quad (\text{Equação 18})$$

Os regressores, isto é, os componentes de $\varphi(t, \theta)$, são neste caso geral dados por:

$U(t-k)$ (associados com o polinômio B);

$Y(t-k)$ (associados com o polinômio A);

$\hat{y}(t-k|\theta)$, saídas simuladas a partir de u passados somente (associados com o polinômio F);

$\epsilon(t-k) = y(t-k) - \hat{y}(t-k|\theta)$, erro predito (associado com o polinômio C);

$\epsilon_u(t-k) = y(t-k) - \hat{y}_u(t-k|\theta)$, erros de simulação (associados com o polinômio D).

Deve-se notar que no caso de $A \neq 1$ “a saída simulada” refere-se à quantidade $A(q)y(t)$.

5.2 ESTRUTURAS DE MODELOS PARA IDENTIFICAÇÃO NÃO LINEAR

Seguindo a nomenclatura para modelos lineares, é natural nomear os modelos não lineares de modo similar, conforme segue:

Modelos NFIR;

Modelos NARX;

Modelos NOE;

Modelos NARMAX;

Modelos NBJ;

Modelos espaço de estados não lineares, os quais utilizam componentes passados de saídas virtuais, isto é, valores de sinais nos nodos internos da rede (modelo) que não correspondem à variável de saída.

Segundo Assis (2001) as estruturas de modelo NOE, NBJ e NARMAX assim como os modelos na forma espaço não lineares, correspondem às estruturas recorrentes, pois parte do vetor regressor consiste de saídas passadas do próprio modelo. Tal classe de modelos pode apresentar problemas de instabilidade no procedimento de identificação, além do fato de exigirem um esforço maior no cálculo do gradiente na estimativa dos parâmetros.

5.3 ESTIMATIVA DOS PARÂMETROS DO MODELO LINEAR

Os parâmetros de um modelo podem ser determinados via métodos de otimização, sendo um dos mais populares o Método dos Mínimos Quadrados (MMQ). Existem várias alternativas que visam adaptar este método a diversas situações (casos não lineares, ortogonalização, etc.).

Neste artigo foi utilizado o comando “ident” do software MatLab para estimativa dos parâmetros dos modelos.

Dentre os modelos testados, os que apresentaram melhores resultados foram modelo ARX para malha 1 e NARX para malha 2 conforme respectivamente figuras 16 e 17.

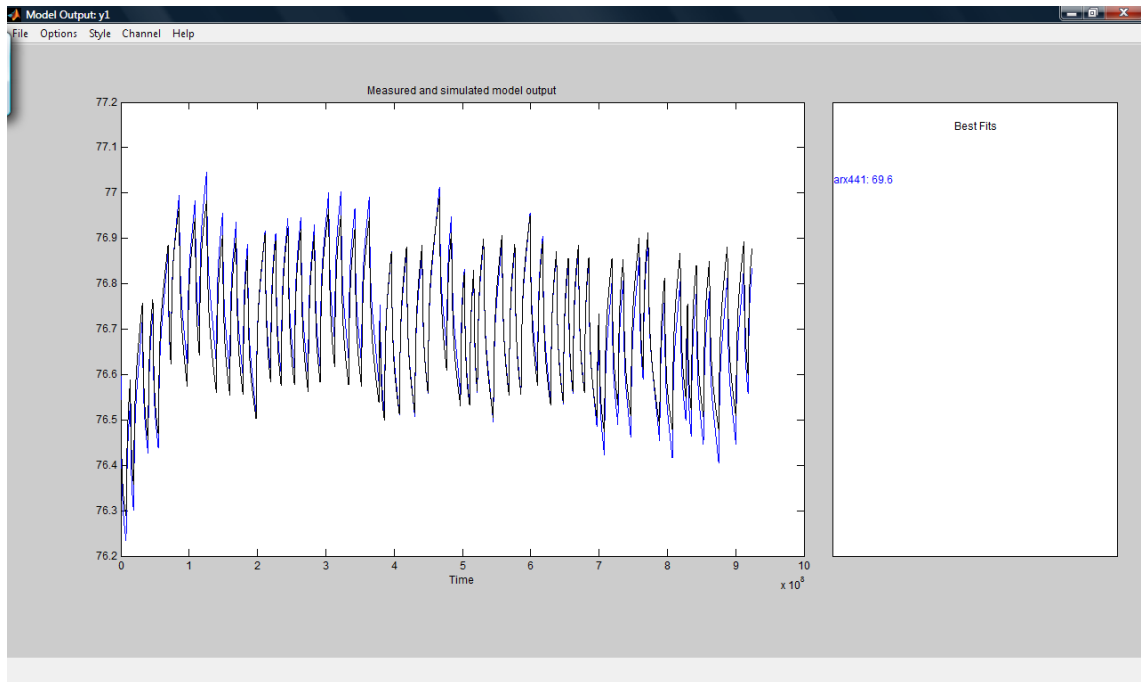


Figura 16: Comparação entre dados experimentais e simulados pelo modelo ARX para malha 1.

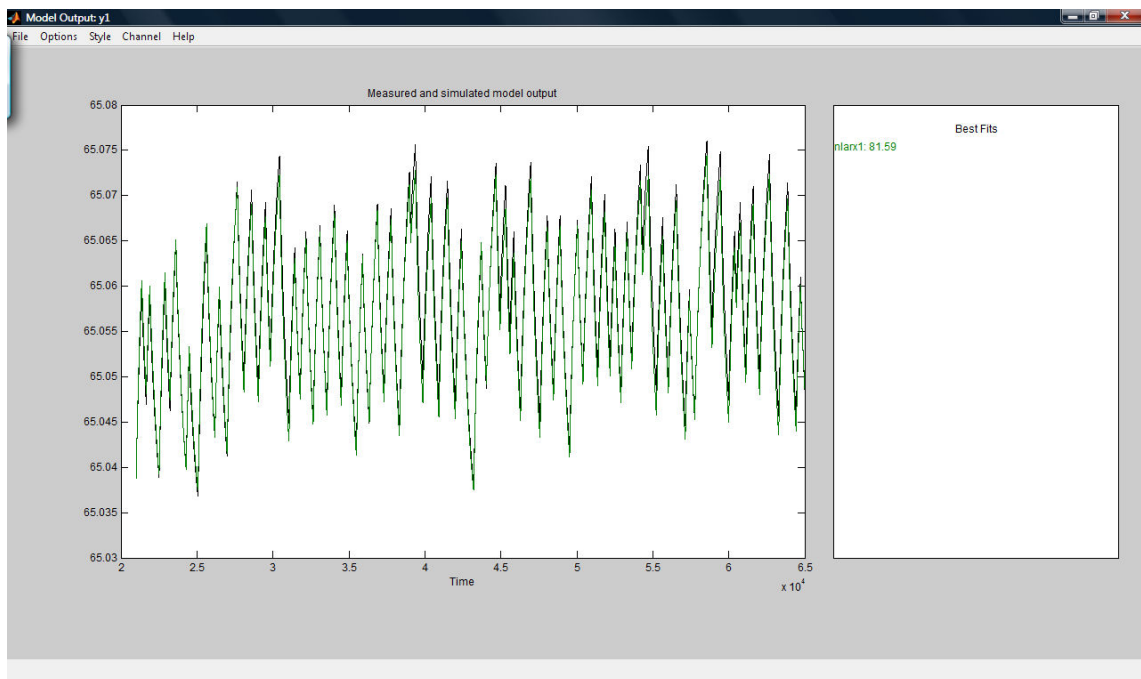


Figura 17: Comparação entre dados experimentais e simulados pelo modelo NARX para malha 2.

5.4 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA)

São sistemas computacionais desenvolvidos com base no estudo do funcionamento do cérebro humano, principalmente, dos neurônios. Nós simples (neurônios, processadores ou unidades) são interligados para formar uma rede de nós.

Redes neurais são “um processador paralelo distribuído, constituído de unidades de processamento simples (neurônios ou nodos), que tem uma capacidade natural para armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para uso”. Assim, as redes neurais se assemelham ao cérebro humano em dois aspectos: o conhecimento adquirido pela rede neural é dado por meio de um processo de aprendizagem e as intensidades das conexões interneurais, conhecidas como pesos sinápticos, são usadas para armazenar o conhecimento adquirido.

Uma característica marcante das redes neurais é a sua total independência do conhecimento da natureza fenomenológica do processo que se vai abordar, de modo que tal abordagem torna-se interessante quando as regras de um determinado processo não são determinísticas ou são muito complexas, como por exemplo, problemas onde ocorrem variáveis não-lineares.

Foi utilizado RNA para identificar as malhas 1 e 2, cuja as configurações, como arquitetura, funções de ativação e algoritmo de treinamento, são mostradas nas figuras 18 e 19.

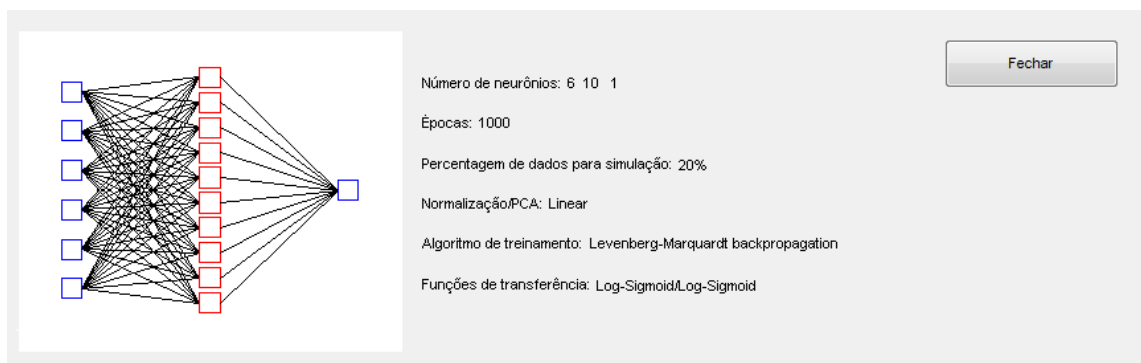


Figura 18: Configuração da RNA da malha 1

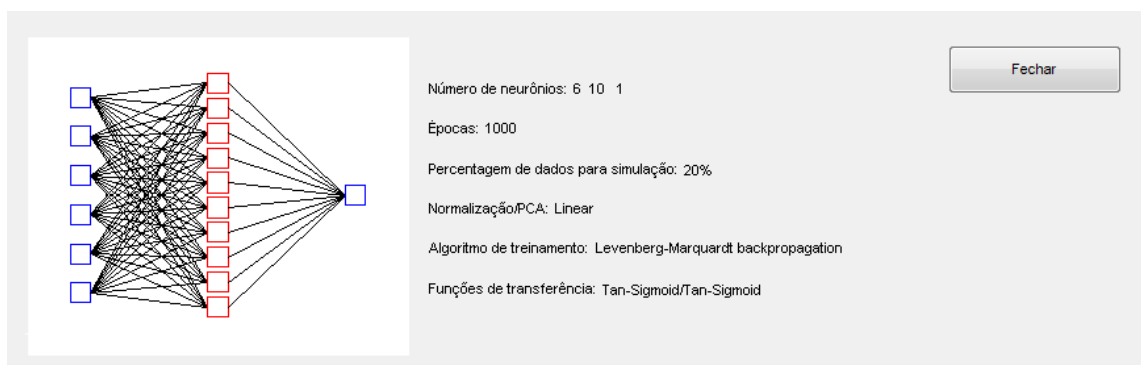


Figura 19: Configuração da RNA da malha 2

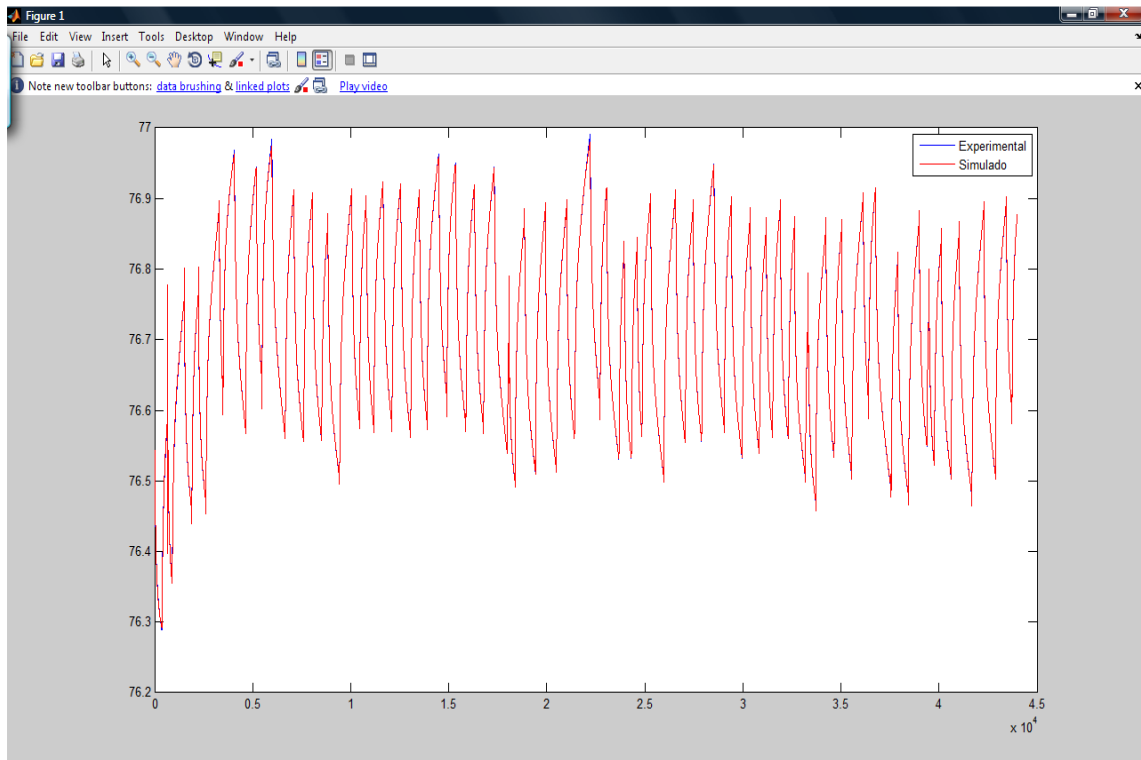


Figura 20: Comparação entre dados experimentais e simulados pela RNA da malha 1

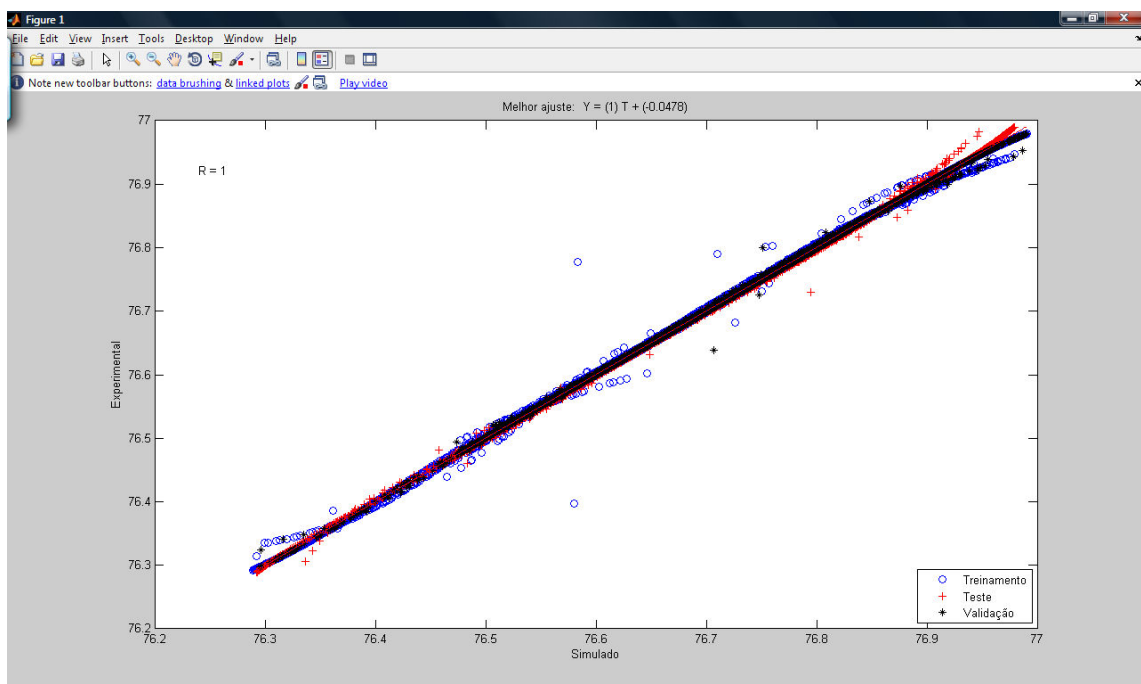


Figura 21: Regressão entre dados experimentais e simulados pela RNA da malha 1.

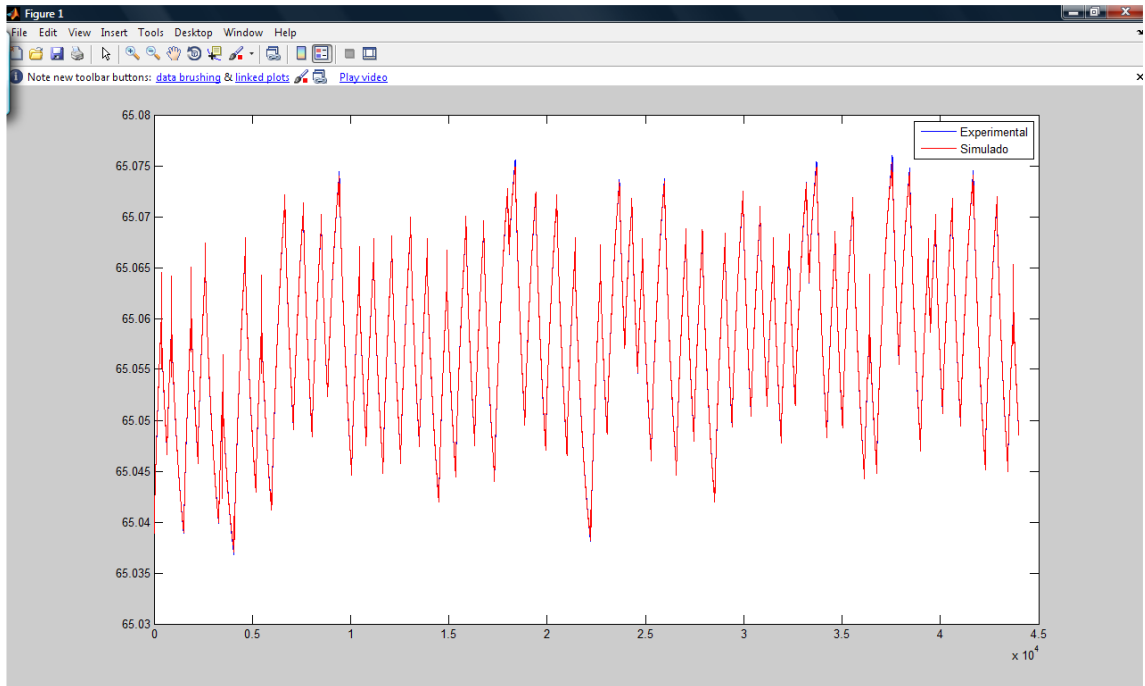


Figura 22: Comparação entre dados experimentais e simulados pela RNA da malha 2

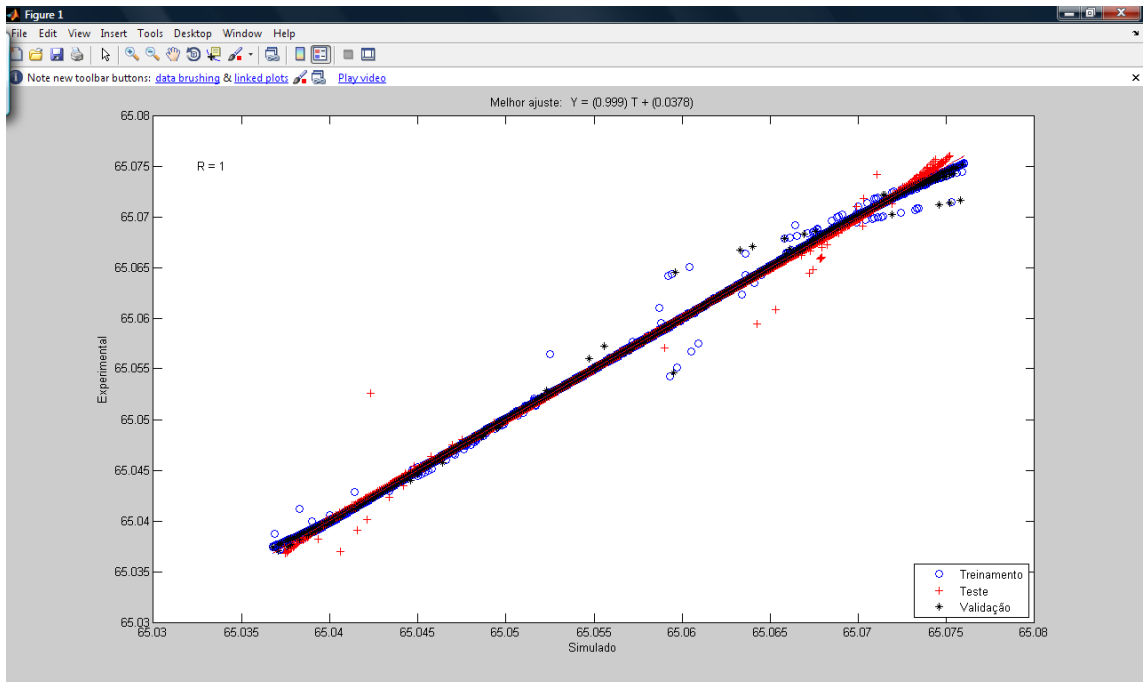


Figura 23: Regressão entre dados experimentais e simulados pela RNA da malha 2.

Nas figuras 20 e 22 são mostrados as respostas das simulações das RNA's das malhas 1 e 2 respectivamente.

CONCLUSÃO

Notou-se que as RNA's apresentou desempenho melhor para os casos das malhas 1 e 2. Os modelos paramétricos lineares mostrou bem poderosos para identificação da malha 1 que de fato apresenta dinâmica não linear.

Os modelos ARX apresentam relativa facilidade em implementação em sistemas digitais de controle industriais, a depender a ordem do mesmo visto tamanho da equação.

REFERÊNCIAS

ASSIS, Adilson José de. **Identificação e controle de processos não lineares utilizando redes neurais artificiais**. Campinas, SP, 2001. (Tese de doutorado)

MACHADO, Vinicius Cunha. Planejamento de perturbações para a identificação de modelos dinâmicos. Porto Alegre, RS, 2004. (Dissertação de mestrado)