

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

**TAMARA SALVATORI**

**MODELAGEM CAIXA-PRETA DE  
BIORREATORES EM MODO  
DESCONTÍNUO UTILIZANDO  
MODELOS POLINOMIAIS DO TIPO  
NAR E NARMA**

Porto Alegre  
2016



**TAMARA SALVATORI**

**MODELAGEM CAIXA-PRETA DE  
BIORREATORES EM MODO  
DESCONTÍNUO UTILIZANDO  
MODELOS POLINOMIAIS DO TIPO  
NAR E NARMA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Área de concentração: Controle e Automação

ORIENTADOR: Prof. Dr. Alexandre Sanfelice  
Bazanella

Porto Alegre  
2016



**TAMARA SALVATORI**

**MODELAGEM CAIXA-PRETA DE  
BIORREATORES EM MODO  
DESCONTÍNUO UTILIZANDO  
MODELOS POLINOMIAIS DO TIPO  
NAR E NARMA**

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora.

Orientador: \_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Alexandre Sanfelice Bazanella, UFRGS  
Doutor pela Universidade Federal de Santa Catarina – Florianópolis, Brasil

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Pedro Rafael Bolognese Fernandes, UFRGS  
Doutor pela Universidade de Dortmund – Dortmund, Alemanha

Prof. Dr. Jeferson Vieira Flores, UFRGS  
Doutor pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Porto Alegre, Brasil

Prof. Dr. Diego Eckhard, UFRGS  
Doutor pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Porto Alegre, Brasil

Coordenador do PPGEE: \_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Luís Fernando Alves Pereira

Porto Alegre, maio de 2016.



*“O Universo, apesar de não-linear, é  
quase sempre bem comportado”.*  
*Pena & Aguirre, 1994*



## AGRADECIMENTOS

Aos professores Alexandre Bazanella, pela orientação e auxílio, Renato Henriques, pelo incentivo, Lucíola Campestrini e Diego Eckhard pelos ensinamentos e compartilhamento de dados que foram essenciais para a efetivação deste trabalho.

Aos colegas Israel de Oliveira, Douglas Tesch e Diego Pedroso, por toda a amizade, parceria, compreensão, auxílio nas temidas disciplinas e pela companhia no RU nosso de cada dia.

Aos demais colegas, Raphael Neves, Charles Lorenzini, Gustavo Rodrigues, Karina Alves, Omar Sánchez, Juliet Galego, Rafael Rui, Greyce Schroeder, Felipe Tondo, Marcelo Ourique, Maurício Vargas, Luciano Moreira, Maurício Longhi, Thiago Michelin, que me acolheram como um dos seus, pela parceria nas mais diversas atividades, desde um café até o compartilhamento de materiais e conhecimentos.

Ao colega Guilherme Pimentel, que chegou aos 45 do segundo tempo, mas que foi essencial pelo incentivo, atenção, paciência, amizade e coorientação.

Aos colegas que conheci no PPGMat, Simone Ossani, Aline Parigi, Otonio Dutra e Daniela Schultz, por serem tão solícitos e afetuosos.

Aos funcionários Janice Oliveira, Alessandra Lanius, Miriam Rosek e Marcos Vizotto, que me auxiliaram desde o primeiro dia com absoluta presteza.

Às minhas queridas e fiéis escudeiras, Marina Dal Ponte e Marina Dall' Onder, que compreenderam minha ausência, pela paciência, incentivo e apoio.

Aos meus sogros, Rita e Sebastião Heidemann, que me acolheram como integrante da família, por todo o apoio.

Aos meus queridos pais, Iva e Arlindo Salvatori, meus grandes exemplos de persistência, pelo amor incomensurável e apoio incondicional e às minhas irmãs, Giorgia e Mel, por me proporcionarem distrações necessárias.

Ao meu namorado, Leonardo Heidemann, por todo o incentivo em absolutamente todas as etapas, pela cumplicidade, cuidado, paciência e carinho que foram essenciais para minha sobrevivência e conclusão do mestrado.

À CAPES e à sociedade brasileira, por terem me proporcionado um curso de mestrado gratuito e de qualidade.

A todas as pessoas que tiveram alguma participação nesta fase da minha carreira acadêmica.

Muito obrigada, vocês foram fundamentais!



## RESUMO

Biorreatores, que são explorados desde a antiguidade, são sistemas capazes de realizar a fermentação de compostos orgânicos, continuam sendo amplamente utilizados atualmente devido à diversidade de aplicações. Esses sistemas podem operar em diferentes modos de fermentação, entretanto, os mais utilizados são: fermentação contínua, semicontínua e descontínua. Esse último, juntamente com o processo de digestão anaeróbia (ausência de oxigênio), permitem que uma determinada matéria orgânica seja degradada e transformada em biogás, um dos fatores chave para geração de energia limpa. Percebe-se, portanto, que o estudo de biorreatores em modo de operação descontínuo e em processo de digestão anaeróbia é fundamental para o desenvolvimento de pesquisas relacionadas à geração de energia renovável. Para facilitar o entendimento desse processo, alguns autores propuseram estudos baseados na identificação de parâmetros em modelos não-lineares descritivos, do tipo caixa-branca, que hoje são vastamente utilizados na modelagem de biorreatores. A grande limitação dessa abordagem é que o processo de identificação de sistemas utilizando esses modelos pode ser complexo e demorado, ou, ainda, os parâmetros dos sistemas representados podem não ser identificáveis, inviabilizando o procedimento. Tentando amenizar essas dificuldades, propomos neste trabalho a utilização de modelos polinomiais NAR e NARMA do tipo caixa-preta para a modelagem de biorreatores em modo de fermentação descontínua. Modelos caixa-preta representam sistemas reais por meio de sua saída, sem informação sobre os mecanismos internos desse sistema, simplificando a identificação. Frente a esse contexto, o objetivo deste estudo é investigar a predição e, por consequência, realizar o monitoramento da produção de metano utilizando os modelos caixa-preta propostos em sistemas de biorreatores em modo descontínuo e em processo de digestão anaeróbia. Realizamos estudos que abarcam a investigação de dados simulados e de dados reais. Num primeiro momento são propostos modelos polinomiais dos tipos NAR e NARMA. A partir desses modelos são estimados os parâmetros dos sistemas simulados, com e sem ruído na saída, baseados em condições iniciais propostas na literatura, que denominamos Grupo de Controle. Posteriormente realizamos as validações desses modelos. Em seguida, passamos à etapa de investigação do domínio de validade dos modelos caixa-preta propostos, realizando um estudo em que modificamos as condições iniciais do sistema que representa biorreatores em modo de fermentação descontínua. Por fim, utilizamos dados de um experimento real para realizar o processo de estimação de parâmetros e de validação dos modelos. Os resultados mostraram que os modelos polinomiais NAR e NARMA são bastante adequados para predição de metano em biorreatores em modo de fermentação descontínua em processo de digestão anaeróbia, tanto para os dados simulados quanto para os dados reais.

**Palavras-chave:** Modelagem caixa-preta, identificação de sistemas, biorreatores.



## ABSTRACT

Bioreactors, which are explored since antiquity, are systems that are capable of performing the fermentation of organic compounds. Nowadays, they are widely applied due to its diversity of applications. These systems can operate in different fermentation modes: continuous, fed-batch and batch. This last fermentation method along with the process of anaerobic digestion allow organic matter to be degraded and converted into biogas, which is a key factor for clean energy generation. It is thus realized that the study of bioreactors in batch mode and anaerobic digestion process is crucial to the development of research related to renewable energy generation. For a better understanding of the process, some authors have proposed studies based on parameters identification in descriptive nonlinear models, white-box models, which are widely used in bioreactors modeling. The main limitation of this approach is that the system identification procedure using these models can be complex and time-consuming, or even the parameters of the systems may not be identifiable. In order to overcome these difficulties, we propose in this work the use of black-box polynomial models for bioreactor modeling in batch mode, with NAR and NARMA model structures. Black-box models represent real systems using its output, without explicitly considering the inner mechanisms of the system, simplifying the identification procedure. Thus, the aim of this work is to investigate the prediction and monitoring methane production using the black-box models proposed using bioreactor systems in batch and anaerobic digestion process. The investigation uses numerical simulation and experimental data. At first, polynomial models of the types NAR and NARMA are proposed. The parameters from these models using simulation data with and without noise at the output, based on initial conditions proposed in the literature, are estimated. Subsequently we perform validations of these models. The next step is the study of the validity domain of the proposed black-box models, which is performed by testing many different initial conditions of the system that represents bioreactors in batch fermentation mode. Finally, we used real experimental data to perform the estimation of the parameters from the process and validation of models. The results, both simulated and experimental, indicate that the polynomial models NAR and NARMA are appropriate for prediction of methane fermentation in batch bioreactors.

**Keywords:** black-box modeling, system identification, biorreactors.



## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1:	Quadro que compreende as características dos modelos caixa-branca, caixa-cinza e caixa-preta. O bloco com duas molduras finas representa a modelagem caixa-branca; blocos com molduras escuras e quinas agudas a modelagem caixa-preta; e o bloco com três molduras finas modelos caixa-cinza. Fonte: AGUIRRE (2007). . . . .	26
Figura 2:	A representação de um modelo ARX é equivalente à Equação (8). Adaptado de AGUIRRE (2007). . . . .	28
Figura 3:	A representação de um modelo ARMAX é equivalente à Equação (10). Adaptado de AGUIRRE (2007). . . . .	29
Figura 4:	Algoritmo para identificação de sistemas. Adaptado de SÖDERS-TRÖM; STOICA (1988). . . . .	32
Figura 5:	Biorreator industrial fabricado pela <i>New Brunswick Scientific</i> . Fonte: HENSON (2006). . . . .	40
Figura 6:	Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação descontínua. Não há alimentação de substrato durante o processo fermentativo. Adaptado de DOCHAIN (2008). . . . .	42
Figura 7:	Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação semicontínua, com alimentação de substrato. Adaptado de DOCHAIN (2008). . . . .	43
Figura 8:	Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação contínua, tendo alimentação de substrato e coleta de produto fermentado. Adaptado de DOCHAIN (2008). . . . .	45
Figura 9:	Representação esquemática de um processo de digestão anaeróbia. Adaptado de BASTIN; DOCHAIN (1990). . . . .	46
Figura 10:	Biorreatores utilizados na investigação. Fonte: CAMPESTRINI et al. (2014). . . . .	51
Figura 11:	Equipamento para coleta dos dados experimentais. Fonte: CAMPESTRINI et al. (2014). . . . .	52
Figura 12:	Na parte superior, as concentrações de bactéria acidogênica ( $x_1$ ), em círculos, e de bactéria metanogênica ( $x_2$ ), em asteriscos, ao longo do tempo; em seguida, a demanda de oxigênio ( $s_1$ ), em círculos, e a concentração de ácidos graxos voláteis ( $s_2$ ), em asteriscos, ao longo do tempo. . . . .	59
Figura 13:	Saída do sistema, ou seja, taxa de fluxo de metano ( $q_M$ ). . . . .	59
Figura 14:	Produção de metano para o modelo simulado . . . . .	60

Figura 15:	Parâmetros 1 e 2 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle . . . . .	62
Figura 16:	Parâmetros 3 e 4 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle . . . . .	63
Figura 17:	Parâmetros 5 e 6 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle . . . . .	63
Figura 18:	Parâmetros 7 e 8 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle . . . . .	64
Figura 19:	Parâmetros 8 e 9 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle . . . . .	64
Figura 20:	Histograma dos erros relativos da saída para o modelo NAR . . . . .	65
Figura 21:	Parâmetros 1 e 2 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	67
Figura 22:	Parâmetros 3 e 4 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	68
Figura 23:	Parâmetros 5 e 6 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	68
Figura 24:	Parâmetros 7 e 8 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	69
Figura 25:	Parâmetros 9 e 10 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	69
Figura 26:	Parâmetros 11 e 12 estimados pelo o modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle . . . . .	70
Figura 27:	Histograma dos erros relativos da saída para o modelo NARMA . . . . .	70
Figura 28:	Dinâmica de saída do sistema para diferentes condições iniciais e para o Grupo de Controle. O marcador quadrado é a saída para $x_1 = 0,0005 \text{ mg/L}$ , o marcador positivo é a saída para $x_2 = 1,5 \text{ mg/L}$ , o marcador estrela é a saída para $s_1 = 210 \text{ mg/L}$ , o marcador X é a saída para $s_2 = 190 \text{ mmol/L}$ e o marcador de círculo é a saída para GC. . . . .	71
Figura 29:	Erro Relativo a cada $0,15 \text{ mg/L}$ para a condição inicial $x_1(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara) . . . . .	72
Figura 30:	Erro Relativo a cada $0,10 \text{ mg/L}$ para a condição inicial $x_2(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara) . . . . .	73
Figura 31:	Erro Relativo a cada $0,10 \text{ mg/L}$ para a condição inicial $s_1(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara) . . . . .	73

Figura 32:	Erro Relativo a cada $10 \text{ mmol/L}$ para a condição inicial $s_2(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara) . . . . .	74
Figura 33:	Medidas da saída do sistema real (linha contínua) e medidas estimadas pelo modelo NAR (pontos) e pelo modelo NARMA (losangos). .	77



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1:	Valores das condições iniciais utilizadas no Grupo do Controle . . . .	50
Tabela 2:	Valores dos Coeficientes utilizados na simulação Grupo do Controle .	50
Tabela 3:	Valores dos parâmetros e de $P$ do Grupo de Controle, sem ruído, calculados a partir do modelo NAR . . . . .	61
Tabela 4:	Média dos parâmetros estimados utilizando 5% de ruído na saída e valor de $P$ para o modelo NAR . . . . .	62
Tabela 5:	Valores dos parâmetros e de $P$ do Grupo de Controle, sem ruído, calculados a partir do modelo NARMA . . . . .	66
Tabela 6:	Média dos parâmetros estimados utilizando 5% de ruído na saída e valor de $P$ para o modelo NARMA . . . . .	67
Tabela 7:	Domínio de validade dos modelos NAR e NARMA para erros relativos abaixo de 1% . . . . .	75
Tabela 8:	Valores das condições iniciais em que foram obtidos os menores ER para o modelo NAR . . . . .	75
Tabela 9:	Valores das condições iniciais em que foram obtidos os menores ER para o modelo NARMA . . . . .	75
Tabela 10:	Produção de metano (em $mL$ ) para as condições iniciais com menor ER e para o Grupo de Controle para os modelos NAR e NARMA . .	76
Tabela 11:	Produção de metano (em $mL$ ) para as condições iniciais com menor ER e para o Grupo de Controle para o macro modelo balanço de massa	76
Tabela 12:	Valores dos parâmetros estimados e de $P$ para os dados experimentais com os modelos NAR e NARMA. . . . .	77



## LISTA DE ABREVIATURAS

ADM1	Anaerobic Digestion Model No. 1
AR	AutoRegressive
ARMA	AutoRegressive Moving Average
ARMAX	AutoRegressive Moving Average with eXogenous inputs
ARX	AutoRegressive with eXogenous inputs
COD	Demanda química de oxigênio
CR	Combinação com Repetição
EFB	European Federation of Biotechnology
ER	Erro Relativo
GC	Grupo de Controle
MA	Moving Average
MC runs	Monte Carlo runs
MQ	Mínimos Quadrados
MQE	Mínimos Quadrados Estendido
NAR	Nonlinear AutoRegressive
NARMA	Nonlinear AutoRegressive Moving Average
NARMAX	Nonlinear AutoRegressive Moving Average with eXogenous inputs
NARX	Nonlinear AutoRegressive with eXogenous inputs
OHPA	Obligate Hydrogen Producing Acetogens
VFA	Concentração de ácidos graxos voláteis



# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	23
<b>2</b>	<b>MODELAGEM MATEMÁTICA</b>	25
<b>2.1</b>	<b>Representações de modelos em tempo discreto</b>	27
2.1.1	Modelos Lineares	28
2.1.1.1	Modelos ARX	28
2.1.1.2	Modelos AR	28
2.1.1.3	Modelos ARMAX	29
2.1.1.4	Modelos ARMA	29
2.1.2	Modelos Não-Lineares	30
2.1.2.1	Modelos NARX	30
2.1.2.2	Modelos NAR	30
2.1.2.3	Modelos NARMAX	30
2.1.2.4	Modelos NARMA	31
<b>2.2</b>	<b>Identificação de Sistemas</b>	31
<b>2.3</b>	<b>Método de Mínimos Quadrados</b>	33
2.3.1	Método de Mínimos Quadrados Estendido	35
<b>2.4</b>	<b>Erro Relativo da Saída</b>	37
<b>3</b>	<b>BIORREADORES</b>	39
<b>3.1</b>	<b>Processos Fermentativos</b>	40
3.1.1	Fermentação descontínua	41
3.1.2	Fermentação semicontínua	42
3.1.3	Fermentação contínua	43
<b>3.2</b>	<b>Processo de Digestão Anaeróbia</b>	45
3.2.1	Modelos de Processo de Digestão Anaeróbia	47
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA DE PESQUISA</b>	49
<b>4.1</b>	<b>Simulação de biorreator em regime de fermentação descontínua</b>	49
4.1.1	Grupo de Controle	50
4.1.2	Diferentes condições iniciais	50
<b>4.2</b>	<b>Obtenção de dados experimentais</b>	51
<b>4.3</b>	<b>Construção dos Modelos</b>	52
<b>4.4</b>	<b>Processo de Identificação de Biorreatores</b>	55

<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b>	57
5.1	Modelos NAR e NARMA	57
5.2	Resultados das simulações	58
5.2.1	Grupo de Controle	58
	5.2.1.1 Estimação de parâmetros - modelo NAR	60
	5.2.1.2 Estimação de parâmetros - modelo NARMA	65
5.2.2	Diferentes condições iniciais - domínio de validade	71
5.2.3	Produção de Metano	75
5.3	Resultados do Experimento	76
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES</b>	79
	<b>REFERÊNCIAS</b>	81
	<b>APÊNDICE A PARÂMETROS DOS MODELOS NAR E NARMA</b>	85
	<b>APÊNDICE B SIMULAÇÃO DE BIORREATORES EM MODO DESCONTÍNUO EM PROCESSO DE DIGESTÃO ANAERÓBIA</b>	87
	<b>APÊNDICE C ROTINAS UTILIZANDO O MODELO NAR</b>	89
C.1	Rotina para casos experimentais	89
C.2	Rotina para casos simulados sem ruído	92
C.3	Rotina para casos simulados com ruído	94
	<b>APÊNDICE D ROTINAS UTILIZANDO O MODELO NARMA</b>	101
D.1	Rotina para casos experimentais	101
D.2	Rotina para casos simulados sem ruído	105
D.3	Rotina para casos simulados com ruído	110

# 1 INTRODUÇÃO

Um fator chave para o crescimento econômico e social é o desenvolvimento de pesquisas em monitoramento e controle de fontes renováveis de energia. Isso se deve ao constante aumento na demanda do setor de energia elétrica, que é de suma importância para a continuidade da expansão industrial e o desenvolvimento de infraestrutura básica (KIM, 2015; KASPEROWICZ, 2014; FERGUNSON; WILKINSON; HILL, 2000). Para fins de exemplificação, no Brasil, o consumo de energia elétrica em 2014 foi 3,8% superior ao do ano anterior (EPE, 2015).

Essa informação abre precedentes para outra questão importante. Sabe-se que a matriz energética brasileira é fornecida principalmente por usinas termo e hidrelétricas (ANEEL, 2015; EGRÉ; MILEWSKI, 2002). O grande inconveniente é que usinas dessa natureza podem causar graves impactos ambientais tais como a poluição produzida pela queima de combustíveis fósseis, a perda de minerais e a diminuição de espécies de plantas e de animais devido às inundações. Tais transformações podem acarretar a transferência de animais para áreas já ocupadas, causando superpopulação das espécies, estimulando desequilíbrio ecológico. Além disso, as modificações na hidráulica dos rios podem resultar em mudanças hidrológicas, hidroquímicas e hidrobiológicas (JUNK; MELLO, 1990).

Assim, com o intuito de amenizar esses impactos ambientais, e, ao mesmo tempo, possibilitar a continuidade da ampliação da produção de energia elétrica, são necessárias fontes alternativas de geração de energia elétrica. Uma dessas fontes alternativas é baseada nos conceitos de biorrefinaria integrada, que, além de não poluir, possibilita a redução da poluição já existente. Isso acontece porque são utilizados resíduos orgânicos industriais, lodo gerado a partir de processos de tratamento de águas residuais ou ainda estrume, para citar alguns, como parte de substrato para a produção de biogás (em sua maioria composto de metano), possibilitando, a partir de sua utilização adequada, a geração de energia a partir de fontes renováveis.

O processo de biorrefinaria ocorre em tanques denominados biorreatores, recipientes em que se adiciona a matéria-prima (substrato) que sofrerá fermentação. Existem diversos modos de fermentação, os três principais são: modo de fermentação contínua, descontínua e semicontínua. De acordo com cada substrato e com cada objetivo, utiliza-se uma forma ou outra. Além disso, essa fermentação pode ocorrer utilizando processos de digestão aeróbica ou anaeróbia. No caso de produção de metano, convém que sejam utilizados biorreatores em modo de fermentação descontínua e sem a presença de oxigênio, ou seja, em processo de digestão anaeróbia.

Nossa pesquisa tem como objetivo a modelagem de biorreatores em modo de fermentação descontínua e em processo de digestão anaeróbia para avaliação da produção de metano. Para isso, definimos que o modelo proposto será do tipo caixa-preta. Esses modelos são assim chamados já que para utilizá-los não é necessário conhecimento

sobre as relações internas do sistema (SJÖBERG et al., 1995), como realizado em BERNARD et al. (2001), CAMPESTRINI et al. (2014), ANTONELLI et al. (2003), HAAG; WOUWER; QUEINNEC (2003), entre outros, mas apenas sobre seus dados de entrada (ou condições iniciais) e de saída. Essa flexibilidade proporciona a construção de modelos de complexidade relativamente moderada em relação àqueles comumente encontrados na literatura, do tipo caixa-branca ou caixa-cinza, que, por vezes, apresentam parâmetros não identificáveis.

Delimitamos ainda que o modelo será não-linear (devido ao crescimento de bactérias, o sistema se comporta de forma não-linear) e polinomial. Como o biorreator atua em modo de fermentação descontínua (ou seja, não apresenta dados de entrada), construímos modelos do tipo NAR e NARMA. Utilizando ainda a teoria de Identificação de Sistemas, depois da construção dos modelos polinomiais caixa-preta de forma a descrever o sistema investigado de modo simplificado, realizamos a estimação dos parâmetros do sistema e a validação dos modelos. Por fim, além de realizar a predição da produção de metano, avaliamos ainda o domínio de validade desses modelos caixa-preta para verificar o quão amplos são os modelos que propusemos.

A fim de proporcionar ao leitor a compreensão dos procedimentos envolvidos nesta investigação, neste trabalho abordaremos, primeiramente, a modelagem matemática, no Capítulo 2, utilizada para conduzir esta pesquisa. Este capítulo conta com a elucidação dos conceitos de modelagem, modelos e, principalmente, da teoria de identificação de sistemas, fundamental para a efetivação de nosso estudo, juntamente com os métodos de mínimos quadrados e mínimos quadrados estendido.

Em seguida, no Capítulo 3, denominado Biorreatores, trataremos sobre assuntos mais específicos relacionados aos modos de fermentação de biorreatores, incluindo as vantagens e desvantagens de se utilizar um ou outro tipo de fermentação. Ainda, esclareceremos as etapas envolvidas no processo de fermentação anaeróbia, fundamental para a produção de metano.

Finalmente, nos Capítulos 4 e 5, Metodologia de Pesquisa e Resultados, respectivamente, descreveremos os procedimentos realizados para o desenvolvimento de nosso estudo, envolvendo a elaboração de modelos caixa-preta, simulações computacionais de biorreatores e a análise de dados obtidos de um experimento real. Por fim, os resultados obtidos para cada uma dessas etapas.

Ao final deste trabalho, no capítulo de Conclusões, realizaremos um apanhado geral do que consideramos relevante em nossa pesquisa e exporemos outras possibilidades para dar continuidade a esse trabalho.

## 2 MODELAGEM MATEMÁTICA

Quando precisamos explicar eventos reais percebemos a necessidade de realizar idealizações, simplificações e aproximações de fatores envolvidos nesses sistemas conservando suas principais características, o que resulta no que chamamos de *modelos*. Esse processo de partir de um sistema real e obter um modelo é denominado *modelagem*. A técnica da modelagem envolve a realização da simplificação de algumas das características do sistema, transformando-o em uma representação esquemática, denominada objeto-modelo. Por fim, este objeto-modelo combinado a uma teoria geral compõe um modelo matemático, concluindo o processo de *modelagem matemática* (BUNGE, 1974).

A modelagem matemática utiliza, então, os objetos-modelo e os modelos matemáticos, que podem ser baseados em teoremas, em leis e em princípios que regem um determinado sistema. Portanto, essa é a área do conhecimento que estuda maneiras de desenvolver e de implementar modelos matemáticos de sistemas reais (AGUIRRE, 2007). Para facilitar o entendimento de um sistema utilizamos modelos matemáticos já que esses possibilitam que os fatores não fundamentais para o entendimento do processo sejam simplificados, facilitando, conseqüentemente, seu estudo.

Os modelos matemáticos podem ser classificados em três categorias. São elas:

1. *Modelos caixa-branca*, são também chamados de modelos caixa-translúcida (BUNGE, 1974), ou ainda cuja modelagem é realizada pelas leis físicas ou pela natureza do processo (AGUIRRE, 2007). São assim chamados já que abordam detalhes do interior do sistema, podendo acarretar em modelos relativamente completos, já que sua construção é baseada no funcionamento interno do sistema, como as relações químicas, físicas e biológicas envolvidas nesse sistema. Porém, dependendo da complexidade do sistema, apesar de completo, pode também acarretar em um modelo complexo, sendo assim de difícil manipulação matemática e análise. Uma das grandes vantagens de modelos caixa-branca é que os parâmetros envolvidos têm relação direta com as características internas do sistema, sendo bastante úteis quando a natureza da investigação assim o exige.

Neste contexto, a *identificação de sistemas*, que será abordada ainda neste capítulo, busca técnicas alternativas aos modelos caixa-branca, como os modelos caixa-cinza e caixa-preta (AGUIRRE, 2007) para tentar amenizar essas dificuldades.

2. *Modelos caixa-preta*, também chamados de modelos caixa-negra (BUNGE, 1974), são modelos construídos sem base na dinâmica interna do sistema (por isso caixa-preta, algo que, para o modelo, é oculto no interior do sistema). Para realizar essa modelagem é necessário conhecer apenas os sinais de entrada e de saída do sistema.

Devido a isso, essa modelagem possibilita que escolhamos modelos de menor complexidade para representar um sistema em relação aos modelos anteriores, o que permite a aplicação de algoritmos de identificação de sistemas quase que diretamente. Como não há preocupação com o funcionamento interno do sistema, nesses modelos os parâmetros envolvidos na modelagem não têm relação direta com as características do sistema real.

3. *Modelos caixa-cinza* são modelos intermediários entre os modelos caixa-branca e caixa-preta em que apenas algumas das características internas são apreendidas, podendo resultar em modelos de menor complexidade em relação aos caixa-branca para a implementação de algoritmos de identificação de sistemas.

A fim de ilustrar esses três tipos de modelos, apresentamos na Figura 1, de AGUIRRE (2007), um quadro que busca elucidar as vantagens, as dificuldades e a estrutura de cada um desses tipos de modelos.

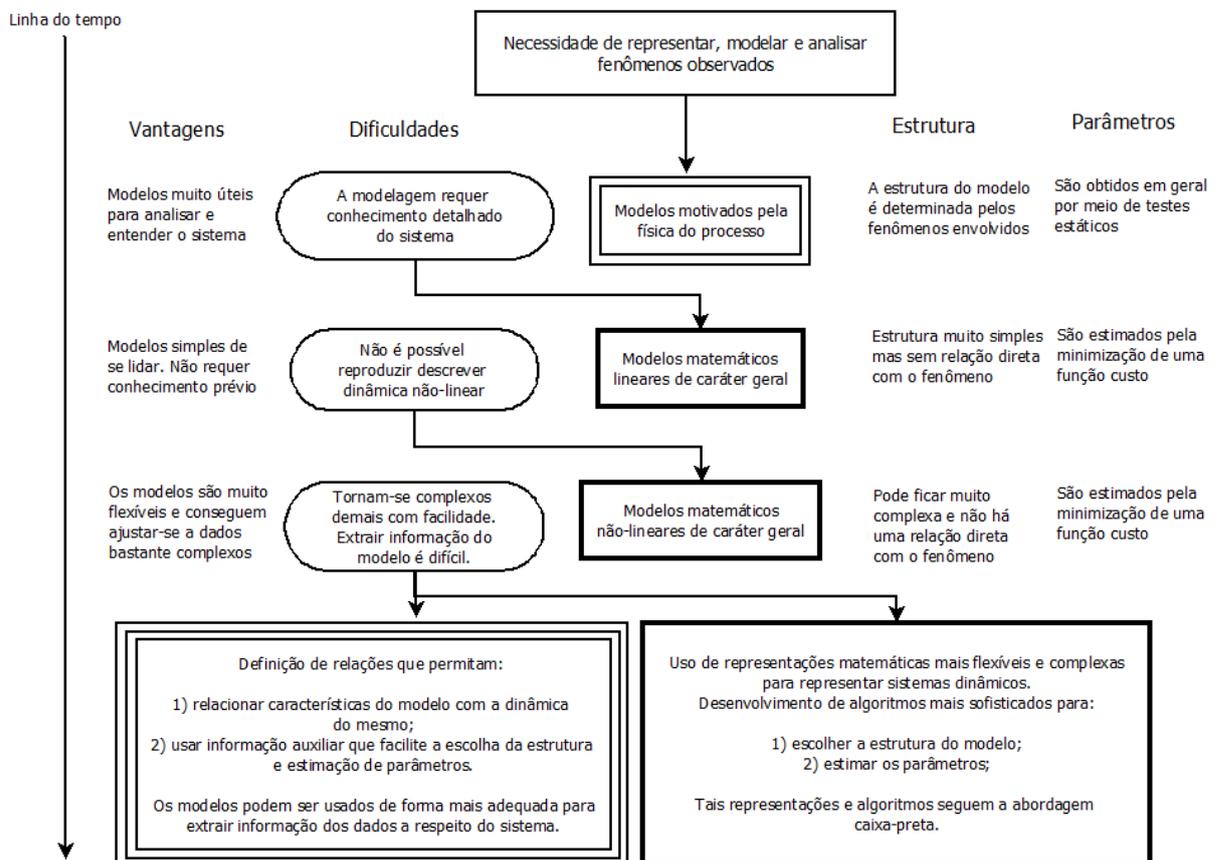


Figura 1: Quadro que compreende as características dos modelos caixa-branca, caixa-cinza e caixa-preta. O bloco com duas molduras finas representa a modelagem caixa-branca; blocos com molduras escuras e quinas agudas a modelagem caixa-preta; e o bloco com três molduras finas modelos caixa-cinza. Fonte: AGUIRRE (2007).

Segundo a Figura 1, a modelagem caixa-preta, que é o foco deste trabalho, tem como vantagem a flexibilidade dos modelos e possibilidade de ajustar-se aos dados, mas não apresenta relação conceitual com o fenômeno estudado. A modelagem caixa-preta surgiu como alternativa às dificuldades enfrentadas ao realizar a modelagem caixa-branca, já que essa última exige bastante conhecimento sobre o sistema, apesar de o modelo resultante ser muito útil para a compreensão e análise do processo.

Portanto, quanto mais informação tivermos sobre o sistema, mais completo poderá ser o modelo que o representa. Em contrapartida, é importante analisar a necessidade dessas informações, pois o processo de identificação de sistemas desse modelo pode se tornar demasiadamente demorado e/ou complicado, ou ainda fornecer informações insuficientes sobre o sistema. Sendo assim, tanto as características do sistema quanto a quantidade de informação disponível sobre ele podem nortear a escolha do tipo de modelo, mas é fundamental ter em mente a finalidade da investigação, para que não seja utilizado um modelo demasiadamente complexo sem necessidade, fazendo com que o processo de identificação de sistemas possa se tornar excessivamente complicado, bem como a análise do modelo matemático.

A seguir abordaremos uma forma bastante comum de representar modelos matemáticos em tempo discreto e descreveremos modelos polinomiais lineares e não-lineares de acordo com essa notação.

## 2.1 Representações de modelos em tempo discreto

Assim como há diferentes tipos de modelos matemáticos, há também diversas formas de descrevê-los de acordo com cada sistema investigado e com cada objetivo. Podemos utilizar, por exemplo, representações modeladas a partir da resposta temporal ou da resposta em frequência, da representação em espaço de estados, da função de transferência ou ainda da representação em tempo discreto. Abordaremos nesse trabalho esta última forma, a qual utilizamos nesta pesquisa, indicada por AGUIRRE (2007), para a implementação de algoritmos de identificação de sistemas devido a adequação e simplicidade da notação. Nas seções 2.1.1 e 2.1.2, apresentaremos os modelos lineares e não-lineares estudados no decorrer de nossa busca por modelos que se encaixassem em nossas necessidades.

Considerando o modelo linear geral descrito por AGUIRRE (2007):

$$A[q]y[k] = \frac{B[q]}{F[q]}u[k] + \frac{C[q]}{D[q]}\nu[k], \quad (1)$$

em que  $y[k]$  e  $u[k]$  são, respectivamente, os sinais de saída e de entrada do sistema,  $k$  é a variável de tempo discreto,  $\nu[k]$  é um ruído branco e  $q^{-1}$  é o operador de atraso, definido por  $q^{-1}y[k] = y[k - 1]$ .

Se reorganizarmos os termos da Equação (1), teremos:

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

Os termos  $A[q]$ ,  $B[q]$ ,  $C[q]$ ,  $D[q]$  e  $F[q]$  correspondem aos seguintes polinômios:

$$A[q] = 1 - a_1q^{-1} - \dots - a_{n_y}q^{-n_y}, \quad (3)$$

$$B[q] = b_1q^{-1} + \dots + b_{n_u}q^{-n_u}, \quad (4)$$

$$C[q] = 1 + c_1q^{-1} + \dots + c_{n_\nu}q^{-n_\nu}, \quad (5)$$

$$D[q] = 1 + d_1q^{-1} + \dots + d_{n_d}q^{-n_d}, \quad (6)$$

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

em que  $n_y, n_u, n_v, n_d$  e  $n_f$  são números inteiros.

A seguir descreveremos alguns modelos lineares utilizando essa notação.

### 2.1.1 Modelos Lineares

Modelos lineares são frequentemente utilizados para representar sistemas cuja estrutura intrínseca é linear por natureza, ou seja, quando o sistema obedece ao princípio da superposição, cujo comportamento inerente pode ser caracterizado por uma aproximação linear perto de um ponto de operação do sistema (BILLINGS, 2013). Um circuito elétrico ou o posicionamento de juntas de um robô, por exemplo, podem ser representados por modelos lineares. Esses modelos podem ser classificados em ARX, AR, ARMAX e ARMA. Abordaremos cada um desses modelos a seguir.

#### 2.1.1.1 Modelos ARX

A Figura 2 representa esquematicamente o modelo autorregressivo com entradas externas (*AutoRegressive with eXogenous inputs - ARX*). Se, a partir da Equação (2), assumirmos que  $C[q] = D[q] = F[q] = 1$ , então:

$$y[k] = \frac{B[q]}{A[q]}u[k] + \frac{1}{A[q]}\nu[k]. \quad (8)$$

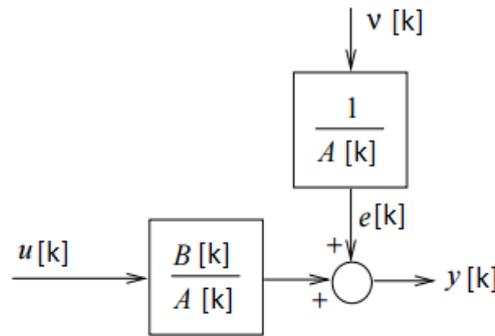


Figura 2: A representação de um modelo ARX é equivalente à Equação (8). Adaptado de AGUIRRE (2007).

#### 2.1.1.2 Modelos AR

Modelos autorregressivos (*AutoRegressive - AR*) são análogos aos modelos ARX, com a diferença de que consideram apenas os sinais de saída do sistema. São bastante úteis quando estudamos sistemas que não possuem entrada, mas apenas condições iniciais e sinais de saída. Então, a partir da Equação (2), tomando  $u[k] = 0$  e  $C[q] = D[q] = F[q] = 1$ , obteremos:

$$y[k] = \frac{1}{A[q]}\nu[k]. \quad (9)$$

### 2.1.1.3 Modelos ARMAX

Além de ser um modelo autorregressivo com entradas externas, o modelo ARMAX, Figura 3, possui o termo da média móvel (*AutoRegressive Moving Average with exogenous inputs - ARMAX*) que, no caso dos modelos, é onde pode-se modelar o ruído do sistema (será abordado na seção 2.3.1). Aqui consideramos  $D[q] = F[q] = 1$ , então, a Equação (2) torna-se:

$$y[k] = \frac{B[q]}{A[q]}u[k] + \frac{C[q]}{A[q]}\nu[k]. \quad (10)$$

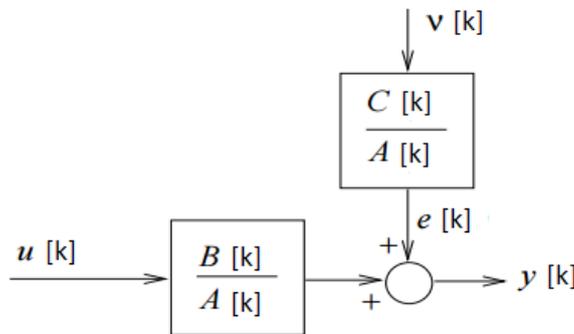


Figura 3: A representação de um modelo ARMAX é equivalente à Equação (10). Adaptado de AGUIRRE (2007).

Em modelos ARMAX o erro é modelado como um processo de média móvel (termo *MA*), e o ruído adicionado à saída,  $e[k]$ , é modelado como um ruído branco filtrado por um filtro ARMA (*AutoRegressive Moving Average*),  $C[q]/A[q]$  (AGUIRRE, 2007). Abordaremos os modelos ARMA a seguir.

### 2.1.1.4 Modelos ARMA

Quando não há sinais externos sendo aplicados no sistema, podemos utilizar um caso particular do modelo ARMAX, o modelo ARMA. Modelos desse tipo são amplamente utilizados nas ciências econômicas, na previsão de taxa de câmbio, por exemplo (SANTOS COELHO; SANTOS; COSTA JR., 2008). Modelos ARMA podem ser descritos conforme:

$$y[k] = \frac{C[q]}{A[q]}\nu[k]. \quad (11)$$

Como a entrada é  $u[k] = 0$  e lembrando que  $D[q] = F[q] = 1$ , podemos considerar a saída ( $y[k]$ ) uma versão filtrada do ruído  $\nu[k]$  usando o filtro  $C[q]/A[q]$ . Modelos ARMA são amplamente utilizados como modelos de séries temporais, portanto, quando há disponibilidade apenas de um sinal (a saída) e temos informação sobre suas condições iniciais, é bastante comum utilizá-los (AGUIRRE, 2007).

### 2.1.2 Modelos Não-Lineares

Sistemas físicos são inerentemente não-lineares (SLOTINE; LI, 1991). No entanto, se as não-linearidades envolvidas são suaves, o sistema pode ser aproximado por um sistema linear. Porém, quando representações lineares não são suficientes para modelar um sistema, convém utilizarmos representações não-lineares, que apresentam uma complexidade maior na sua modelagem.

Existem várias formas comuns de representar sistemas não-lineares (SJÖBERG et al., 1995). Neste trabalho apresentaremos modelos representados por *Funções polinomiais e racionais* em que os modelos abordados anteriormente, ARX, AR, ARMAX e ARMA são estendidos, tornando-se modelos NARX, NAR, NARMAX e NARMA. A esses novos modelos aplica-se o mesmo fundamento daqueles já abordados, a única diferença é a não-linearidade, que permite que sejam aplicados a diferentes sistemas (AGUIRRE, 2007).

#### 2.1.2.1 Modelos NARX

Modelos do tipo NARX (*Nonlinear AutoRegressive model with eXogenous inputs*, que, numa tradução livre, significa modelo não-linear autorregressivo com entradas externas) são discretos no tempo e, com eles, pretende-se explicar o valor da saída ( $y[k]$ ) em função de valores prévios dos sinais de saída e de entrada ( $u[k]$ ).

Os modelos NARX representados por funções polinomiais são construídos a partir de termos que consideram valores atrasados da saída e da entrada. A ordem desse polinômio é um número inteiro e a potência deve ser escolhida de acordo com o sistema. Para melhores resultados, pode-se também realizar a combinação dos termos de entrada e de saída; os coeficientes que acompanham cada um desses regressores são os parâmetros do sistema. O exemplo a seguir traz uma função polinomial típica de um modelo NARX:

$$y[k] = 1, 2y[k - 1] - 0, 1y[k - 2]^2 - 0, 5y[k - 1]y[k - 2] + 2, 0y[k - 2]u[k - 1] + 0, 3u[k - 1]^2 + 2, 5u[k - 2] \quad (12)$$

#### 2.1.2.2 Modelos NAR

Modelos NAR, modelos não-lineares autorregressivos (*Nonlinear AutoRegressive*), são análogos aos modelos NARX, com a diferença de que não consideram sinais externos (sinais de entrada) em sua modelagem. São bastante úteis quando o sistema estudado possui apenas dados de saída e informação sobre a condição inicial.

Podemos tomar como exemplo a seguinte função polinomial para um modelo NAR:

$$y[k] = 1, 2y[k - 1] - 0, 1y[k - 2]^2 - 0, 5y[k - 1]y[k - 2] \quad (13)$$

#### 2.1.2.3 Modelos NARMAX

Modelos NARMAX são modelos não-lineares autorregressivos de média móvel com entradas externas (*Nonlinear AutoRegressive Moving Average with eXogenous inputs*), análogos aos modelos ARMAX. Esses modelos consideram, portanto, os sinais de entrada e de saída do sistema, além do ruído identificado (termo média móvel).

A saída desse modelo polinomial pode ser exemplificada pelo polinômio:

$$y[k] = 1, 2y[k-1] - 0, 1y[k-2]^2 - 0, 5y[k-1]y[k-2] + 2, 0y[k-2]u[k-1] + 0, 3u[k-1]^2 + 2, 5u[k-2] + 1, 5e[k-1] - 0, 5e[k-2] \quad (14)$$

#### 2.1.2.4 Modelos NARMA

Modelos NARMA, modelos não-lineares autorregressivos de média-móvel (*Nonlinear AutoRegressive Moving Average*), são análogos aos modelos NARMAX, mas não consideram o sinal de entrada em sua modelagem.

Podemos tomar como exemplo de polinômio de um modelo NARMA a seguinte função:

$$y[k] = 1, 2y[k-1] - 0, 1y[k-2]^2 - 0, 5y[k-1]y[k-2] + 1, 5e[k-1] - 0, 5e[k-2] \quad (15)$$

Percebemos, portanto, que modelos matemáticos permitem que qualquer sistema, do mais simples ao mais complexo, seja descrito de forma simplificada. Para isso, é importante o conhecimento de cada classe de modelos e suas características para avaliar o tipo de modelo adequado para cada finalidade de modelagem.

## 2.2 Identificação de Sistemas

O processo de identificação de sistemas é caracterizado por interpretar a relação entre causa e efeito de dados de um sistema. Esses dados são a entrada (e/ou condições iniciais) e a saída de um sistema ao longo de um intervalo de tempo. A partir do procedimento já descrito, delimita-se um modelo matemático que possa representá-los e é realizada a identificação deste sistema (AGUIRRE, 2007; LJUNG, 1999; BILLINGS, 2013; SÖDERSTRÖM; STOICA, 1988).

Para esse procedimento podemos seguir algumas etapas (LJUNG, 1999):

1. Obtenção de dados experimentais do sistema que se deseja modelar;
2. Aplicação de testes aos dados obtidos para detecção de possíveis não-linearidades;
3. Escolha da estrutura que será utilizada para representar o modelo;
4. Estimação dos parâmetros do modelo;
5. Validação do modelo obtido.

O algoritmo ilustrado na Figura 4, proposto por SÖDERSTRÖM; STOICA (1988), busca elucidar um método iterativo para a realização dessas etapas para a identificação de sistemas. Assim, baseado no conhecimento *a priori* do sistema, é construído um experimento de acordo com o sistema estudado. Esse experimento pode ser tanto um experimento físico como uma simulação que permita descrever o processo e realizar a coleta de dados para o estudo. Depois disso, é definida a estrutura de um primeiro modelo e é escolhido um método para a realização da estimação dos parâmetros. Com um outro conjunto de dados, com as mesmas características daqueles que foram utilizados para a estimação, é realizada a validação desse modelo. Caso, a partir desta etapa, tenha sido constatado

que o modelo não é suficientemente adequado para descrever o sistema, passa-se a estudar um modelo de maior complexidade, repetindo todo o procedimento anterior. Portanto, é bastante plausível que mais de um modelo possa descrever um determinado sistema com maior ou menor riqueza de detalhes.

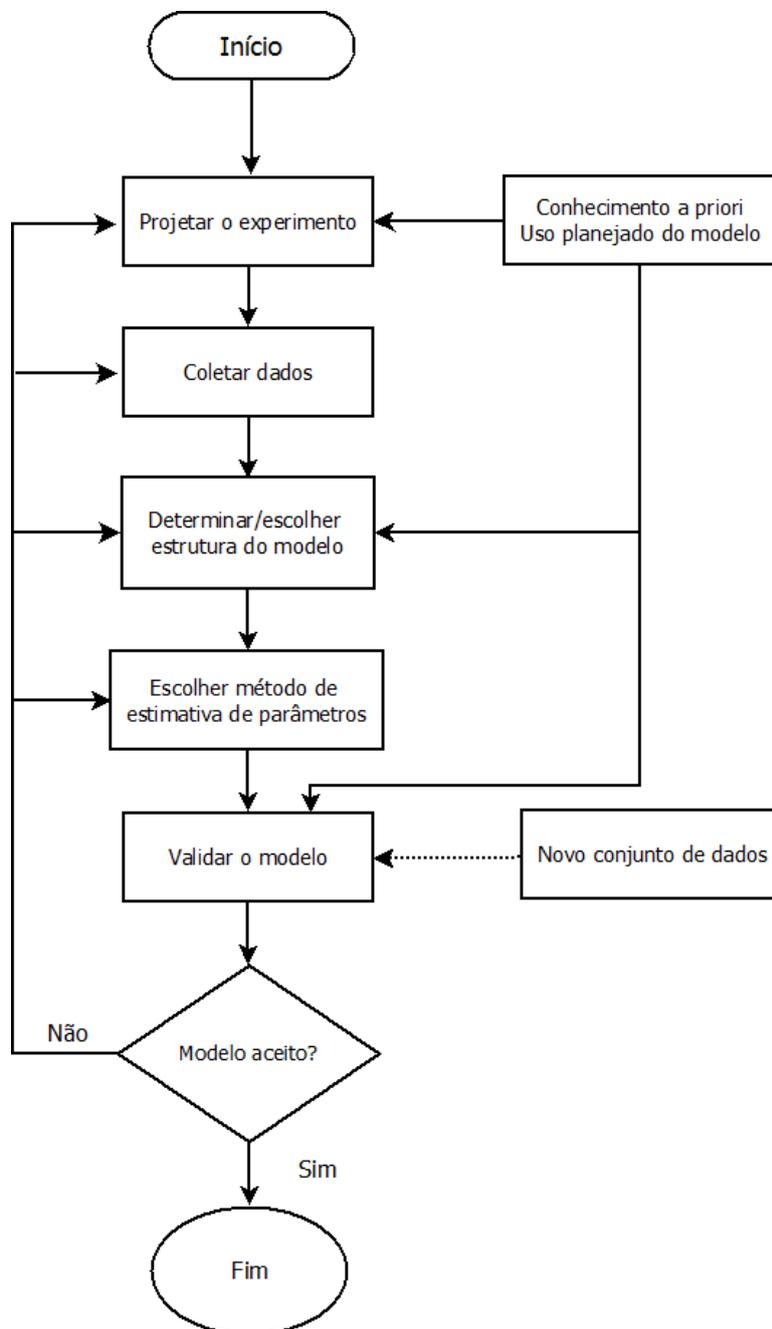


Figura 4: Algoritmo para identificação de sistemas. Adaptado de SÖDERSTRÖM; STOICA (1988).

Existem diversos métodos para realizar a identificação de sistemas (etapas de estimação dos parâmetros e validação do modelo), como, por exemplo, os estimadores mínimos quadrados: método de mínimos quadrados e mínimos quadrados recursivo; e os estimadores não-polarizados: método de variáveis instrumentais. A escolha desses algoritmos depende do modelo que está sendo utilizado.

Devido à simplicidade matemática e por se enquadrarem aos modelos que foram utilizados nessa pesquisa, abordaremos em detalhes os algoritmos de Mínimos Quadrados e de Mínimos Quadrados Estendidos a seguir.

### 2.3 Método de Mínimos Quadrados

O método de Mínimos Quadrados (MQ), proposto por Karl Friederich Gauss no século XVIII, é utilizado nas mais diversas áreas do conhecimento, já que possibilita que sejam calculados valores que procuram prever o comportamento de um sistema. Gauss desenvolveu seu método durante um estudo de astronomia, em que buscava prever o caminho que os corpos celestes percorreriam (SORENSEN, 1970).

Podemos fazer as seguintes considerações sobre o método de MQ (AGUIRRE, 2007):

- Gauss se refere a um número de observações estritamente necessário à determinação das grandezas desconhecidas, dessa forma, o número mínimo de observações deve ser o mesmo do número de parâmetros do sistema;
- Gauss deixa claro que, por causa dos erros de medição, mais observações do que o número mínimo devem ser utilizadas a fim de obter uma precisão adequada. O uso dessas observações “redundantes” resultará na redução dos efeitos dos erros;
- os parâmetros estimados devem explicar as observações da forma mais exata possível. A diferença entre observação e cálculo (usando os parâmetros estimados) deve ser mínima.

Como o próprio nome sugere, o método de Mínimos Quadrados busca minimizar a soma dos quadrados da diferença entre os dados do sistema real e os dados estimados a partir do modelo. Esse método é bastante versátil, já que pode ser aplicado em modelos lineares e não-lineares, desde que esses sejam lineares em seus respectivos parâmetros, como acontece no caso dos modelos AR, ARX, NAR e NARX.

Para descrever o método de MQ, podemos reorganizar os termos da Equação (8) do modelo ARX na forma:

$$A[q]y[k] = B[q]u[k] + \nu[k], \quad (16)$$

e reescrevê-la utilizando os polinômios definidos nas Equações (3) e (4):

$$(1 - a_1q^{-1} - \dots - a_{n_y}q^{-n_y})y[k] = (b_1q^{-1} + \dots + b_{n_u}q^{-n_u})u[k] + \nu[k], \quad (17)$$

realizando as substituições e reorganizando os termos:

$$y[k] - a_{n_1}y[k-1] - \dots - a_{n_y}y[k-n_y] = b_1u[k-1] + \dots + b_{n_u}u[k-n_u] + \nu[k], \quad (18)$$

$$y[k] = a_{n_1}y[k-1] + \dots + a_{n_y}y[k-n_y] + b_1u[k-1] + \dots + b_{n_u}u[k-n_u] + \nu[k]. \quad (19)$$

Podemos ainda reorganizar os parâmetros da equação em um vetor e os regressores em outro, conforme:

$$\Theta = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{n_y} \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n_u} \end{bmatrix} \quad (20)$$

e

$$\phi[k] = \begin{bmatrix} y[k-1] \\ \vdots \\ y[k-n_y] \\ u[k-1] \\ \vdots \\ u[k-n_u] \end{bmatrix}. \quad (21)$$

A partir desses vetores, e lembrando que  $\nu[k]$  é um ruído branco, é possível reescrever a Equação (19) conforme:

$$y[k] = \phi[k]^T \Theta, \quad (22)$$

ou ainda, na forma matricial:

$$Y = \Phi \Theta, \quad (23)$$

em que  $Y$  é o vetor de agrupamento das saídas:

$$Y = \begin{bmatrix} y[1] \\ y[2] \\ y[3] \\ \vdots \\ y[N] \end{bmatrix} \quad (24)$$

e  $\Phi$  é o vetor de agrupamento dos regressores:

$$\Phi = \begin{bmatrix} \phi^T[1] \\ \phi^T[2] \\ \phi^T[3] \\ \vdots \\ \phi^T[N] \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Nossa busca consiste em escolher o melhor modelo dentro da família de modelos representada pela Equação (22). Assim, podemos calcular a saída estimada ( $\hat{Y}$ ) de um sistema a partir dos seus parâmetros estimados ( $\hat{\Theta}$ ), de acordo com:

$$\hat{Y} = \Phi \hat{\Theta}. \quad (26)$$

O método de MQ prevê que os parâmetros estimados devem ser selecionados de tal forma que a soma dos quadrados da diferença entre os valores medidos e os valores calculados seja mínima (AGUIRRE, 2007). Assim, o critério que deve ser minimizado é:

$$J = \sum_{i=1}^N \varepsilon(i)^2 = \varepsilon^T \varepsilon = \|\varepsilon\|^2, \quad (27)$$

em que  $\|\cdot\|$  é a norma do vetor e  $\varepsilon$  é a diferença entre as saídas real ( $Y$ ) e estimada ( $\hat{Y}$ ), dada por:

$$\varepsilon = Y - \hat{Y}. \quad (28)$$

Portanto, como  $\hat{Y}$  depende de  $\hat{\Theta}$  (Equação (26)), nossa busca é por um  $\hat{\Theta}$  que minimize  $J$ .

De posse dessas informações, podemos reescrever a Equação (27) como:

$$J = (Y - \Phi\hat{\Theta})^T (Y - \Phi\hat{\Theta}) = Y^T Y - Y^T \Phi\hat{\Theta} - \hat{\Theta}^T \Phi^T Y + \hat{\Theta}^T \Phi^T \Phi\hat{\Theta}, \quad (29)$$

e considerando  $\partial J / \partial \hat{\Theta} = 0$  com a finalidade de minimizar  $J$ , teremos:

$$\frac{\partial J}{\partial \hat{\Theta}} = -(Y^T \Phi)^T - \Phi^T Y + (\Phi^T \Phi + \Phi^T \Phi)\hat{\Theta},$$

reorganizando os termos, teremos:

$$-\Phi^T Y - \Phi^T Y + 2\Phi^T \Phi\hat{\Theta} = 0,$$

e ainda:

$$-\Phi^T \Phi\hat{\Theta} = \Phi^T Y,$$

chegando, por fim, em:

$$\hat{\Theta} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T Y, \quad (30)$$

denominada *Equação Normal*.

O termo  $(\Phi^T \Phi)^{-1}$  é denominado matriz de covariância. Existirá solução para a Equação (30) quando a matriz de covariância for não-singular (AGUIRRE; RODRIGUES; JACÓME, 1998). Além disso, os autovalores dessa matriz fornecem a variância dos parâmetros. Para fins de simplificação, como forma de obtermos apenas o maior valor dos autovalores, que tomaremos como a variância dos parâmetros, calculamos:

$$P = E[\|diag(\Phi^T \Phi)^{-1}\|_{\infty}], \quad (31)$$

em que  $E$  é a esperança e  $diag$  é a diagonal da matriz de covariância.

Assim, realizaremos uma modificação de nomenclatura, utilizando a matriz de covariância apenas como  $P$ , já que, a partir da Equação (31), torna-se um escalar.

### 2.3.1 Método de Mínimos Quadrados Estendido

Quando utilizamos modelos do tipo ARMA, ARMAX, NARMA e NARMAX, por exemplo, devido ao termo MA, necessitamos utilizar um método iterativo que consiste em realizar a estimação, e a partir dela, calcular qual é a diferença entre as saídas real e estimada para então estimar novamente os parâmetros, já que não possuímos informação sobre o ruído, e assim sucessivamente, até que o algoritmo seja capaz de convergir. A implicação disso é que, a partir dos parâmetros estimados pela segunda vez, eles carregam informação sobre os parâmetros estimados anteriormente. Assim, o modelo de

MQ, que antes era entendido como linear, passa a ser interpretado como pseudo-linear (LJUNG, 1999). Nesse caso devemos aplicar uma variação do método de MQ, o método de Mínimos Quadrados Estendido (MQE), um método iterativo, para podermos realizar a identificação de um sistema descrito por esses modelos.

Para ilustrar o método de MQE, podemos reorganizar os termos da Equação (10) do modelo ARMAX na forma:

$$A[q]y[k] = B[q]u[k] + C[q]\nu_e[k] \quad (32)$$

anteriormente definimos  $\nu[k]$  como ruído branco. No entanto, ao aplicarmos o método de MQE utilizamos a notação  $\nu_e[k]$  já que a informação utilizada aqui é a diferença entre as saídas real e estimada pelo modelo, conforme a Equação (33):

$$\nu_e = Y - \hat{Y}. \quad (33)$$

Podemos ainda reescrever a Equação (32) utilizando os polinômios definidos nas Equações (3), (4) e (5):

$$(1 - a_1q^{-1} - \dots - a_{n_y}q^{-n_y})y[k] = (b_1q^{-1} + \dots + b_{n_u}q^{-n_u})u[k] + (1 - c_1q^{-1} - \dots - c_{n_y}q^{-n_y})\nu_e[k], \quad (34)$$

realizando as substituições e reorganizando os termos:

$$y[k] - a_{n_1}y[k-1] - \dots - a_{n_y}y[k-n_y] = b_1u[k-1] + \dots + b_{n_u}u[k-n_u] + \nu_e[k] - c_1\nu_e[k-1] - \dots - c_{n_y}\nu_e[k-n_{\nu_e}], \quad (35)$$

$$y[k] = a_{n_1}y[k-1] + \dots + a_{n_y}y[k-n_y] + b_1u[k-1] + \dots + b_{n_u}u[k-n_u] + \nu_e[k] - c_1\nu_e[k-1] - \dots - c_{n_y}\nu_e[k-n_{\nu_e}]. \quad (36)$$

Podemos ainda agrupar os parâmetros da equação em um vetor e os regressores em outro, conforme:

$$\phi_{MQE}[k] = \begin{bmatrix} y[k-1] \\ \vdots \\ y[k-n_y] \\ u[k-1] \\ \vdots \\ u[k-n_u] \\ \nu_e[k-1] \\ \vdots \\ \nu_e[k-n_{\nu_e}] \end{bmatrix} \quad (37)$$

e

$$\eta = \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_{n_y} \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n_u} \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n_v} \end{bmatrix}. \quad (38)$$

A partir desses vetores, é possível reescrever a Equação (36) conforme:

$$y[k] = \phi_{MQE}[k]^T \eta, \quad (39)$$

ou ainda, na forma matricial:

$$Y = \Phi_{MQE} \eta, \quad (40)$$

em que  $Y$  é o vetor de agrupamento das saídas (Equação (24)) e  $\Phi_{MQE}$  é o vetor de agrupamento dos regressores:

$$\Phi_{MQE} = \begin{bmatrix} \phi_{MQE}^T[1] \\ \phi_{MQE}^T[2] \\ \phi_{MQE}^T[3] \\ \vdots \\ \phi_{MQE}^T[N] \end{bmatrix}. \quad (41)$$

Assim, ao tentarmos aplicar o método de MQE percebemos a falta de informação sobre o ruído do sistema ( $\nu_e[k]$ ). Para contornar esse obstáculo, primeiramente precisamos aplicar o método de MQ dado pela Equação (30) (relembrando):

$$\hat{\Theta} = (\Phi^T \Phi)^{-1} \Phi^T Y,$$

para obtermos os parâmetros estimados referentes às saídas e às entradas do sistema. A partir disso é possível calcular a saída estimada de acordo com parâmetros estimados pela Equação (26), anteriormente definida:

$$\hat{Y} = \Phi \hat{\Theta}.$$

Finalmente, podemos aplicar o método de MQE, já que agora possuímos todos os termos, realizando as iterações necessárias para convergência. A grande diferença, portanto, entre os métodos de MQ e MQE é que nesse último o ruído é identificado a cada nova iteração.

## 2.4 Erro Relativo da Saída

Os métodos de MQ e MQE têm por objetivo minimizar o quadrado da diferença entre a saída real ( $Y$ ) e a saída estimada ( $\hat{Y}$ ) de um sistema a partir de um modelo. Após a etapa de estimação de parâmetros, a identificação de sistemas prevê que seja realizada

a validação do modelo estudado. Assim, para avaliar o modelo estudado, é necessário analisar a diferença entre as saídas real e estimada. Uma das formas de realizar este procedimento é utilizando como referência o valor do Erro Relativo (ER).

Podemos calcular o ER em percentual da seguinte forma:

$$ER = \frac{\|Y - \hat{Y}\|_2}{\|Y\|_2} \cdot 100. \quad (42)$$

Assim, consideramos que o modelo mais adequado ao sistema é aquele que resulta no menor ER possível, uma vez que implica a diferença entre a saída real e a saída estimada ser igualmente pequena, tal como previsto nos métodos de MQ e MQE. Caso o valor calculado pela Equação (42) resulte em valores muito altos e/ou insatisfatórios é indicado que sejam realizados testes utilizando modelos diferentes e/ou de maior complexidade.

### 3 BIORREATORES

Em pouco mais de um século, o mundo industrializado têm aumentado a dependência de combustíveis fósseis (como petróleo, gás e carvão) devido a grande demanda de energia elétrica para a atividade industrial e expansão de infraestrutura básica de desenvolvimento (KIM, 2015; KASPEROWICZ, 2014; FERGUNSON; WILKINSON; HILL, 2000; SMITH, 2009). A fim de viabilizar a continuação do avanço industrial e tecnológico e, ao mesmo tempo, amenizar os possíveis efeitos negativos causados pela utilização desses combustíveis não-renováveis, são necessárias fontes alternativas para geração de energia elétrica. Uma dessas fontes é baseada em biotecnologia, que é caracterizada pelo processo que envolve a preparação de pães, vinhos e laticínios (BORÉM, 2005), mas que também possibilita a geração de produtos que envolvem a energia. A Federação Europeia de Biotecnologia (*European Federation of Biotechnology* - EFB) considera a biotecnologia como "a integração das ciências naturais e organismos, células, partes, e análogos moleculares para produtos e serviços"(SMITH, 2009).

A tecnologia de bioprocessos é cada vez mais utilizada para produzir muitos produtos importantes a partir de células derivadas de plantas e de animais. A cultura de células vegetais está amplamente destinada a formações de produtos secundários, tais como essências, perfumes e fármacos, enquanto que a cultura de células de animais tem se preocupado com vacinas e com a formação de anticorpos e a produção recombinante de moléculas de proteínas que limitam a propagação de determinadas infecções virais (SMITH, 2009). A biotecnologia rege também o funcionamento de processos baseados em biorrefinaria integrada. Esse processo permite a utilização de resíduos orgânicos industriais, lodo (gerado a partir de processos de tratamento de águas residuais) ou ainda estrume, por exemplo, como uma fonte de substrato para a produção de energia renovável.

Os estágios de formação do produto a partir de bioprocessos são muito semelhantes, independentemente do microorganismo selecionado, do meio utilizado ou do produto formado. Assim, um grande número de células são cultivadas sob condições controladas definidas, em um sistema físico também controlado, chamado de biorreator. Um exemplo disso é o processo de transformação de substrato (como matéria orgânica) em biogás (por exemplo, metano) para geração de energia.

A Figura 5 ilustra o sistema de um biorreator industrial na íntegra. Em (a) temos uma visão completa do biorreator. Ele inclui um tanque de 1.500 l volume, tubos de aço inoxidável, válvulas e instrumentos eletrônicos para a manipulação da taxa de vazão e monitoramento contínuo de condições de crescimento. A placa frontal do biorreator visualizada em (b) fornece aberturas para a inserção de tubos de alimentação e de recolhimento, bem como sensores submersos para medição (HENSON, 2006).



Figura 5: Biorreator industrial fabricado pela *New Brunswick Scientific*. Fonte: HENSON (2006).

A principal função de um biorreator é permitir que seja realizada uma biorreação (fermentação de um substrato) minimizando o custo de produção de um produto ou serviço (SMITH, 2009). O elemento central de qualquer processo biotecnológico industrial é, portanto, o biorreator, já que nele são desenvolvidas e controladas as transformações de interesse (BORZANI, 2001a). Por isso, é de grande importância que seja esclarecido o funcionamento desses sistemas.

### 3.1 Processos Fermentativos

Biorreatores (ou reatores) são utilizados para realizar processos biotecnológicos fermentativos, também denominados bioprocessos, nas mais diferentes áreas, como em indústrias farmacêuticas e alimentícias, em tratamento de águas residuais, na fabricação de bebidas e até mesmo na geração de biogás (metano, por exemplo). Devido à ampla gama de aplicações, existem diferentes tipos de biorreatores adequados para cada finalidade. São três as principais formas de cultivo de microorganismos em biorreatores: modo de fermentação descontínua (*batch*), modo de fermentação semicontínua (*fed-batch*) e modo de fermentação contínua (SMITH, 2009; SCHMIDELL; FACCIOTTI, 2001).

Antes de abordar as principais características e os diferentes modos de fermentação dos biorreatores, é importante salientar algumas características em comum entre eles (SMITH, 2009):

- o biorreator deve ser projetado para impedir a entrada de microorganismos indesejados;
- o volume do meio de cultura deve permanecer constante, ou seja, não deve haver vazamentos ou evaporação;

- o nível de oxigênio dissolvido deve ser mantido acima dos níveis críticos de aeração e agitação de cultura por organismos aeróbios;
- parâmetros ambientais, tais como temperatura e pH devem ser controlados e o volume de cultura deve ser bem misturado para garantir a homogeneidade da solução.

### 3.1.1 Fermentação descontínua

O processo de fermentação descontínua, também conhecida como fermentação em batelada (*batch*), foi uma das primeiras formas de bioprocessos e ainda é amplamente empregada para a obtenção de produtos fermentados como iogurte, cerveja, vinho, e, além da fabricação de produtos alimentícios, também possibilita a geração de biogás.

Nesse modo de fermentação, o biorreator é alimentado com uma pequena quantidade de bactérias que realizarão a fermentação, denominada *biomassa*, e com uma grande quantidade de *substrato* ou de *inóculo*, que é a fonte de energia para estas bactérias (como, por exemplo, águas residuais e dejetos animais). Nenhum substrato é introduzido durante a fermentação, a qual é parada quando o substrato tiver sido suficientemente consumido (BASTIN; DOCHAIN, 1990). Ao longo do processo fermentativo, nada é adicionado à mistura, além do oxigênio (no caso de processos aeróbios), de antiespumante e de ácido ou base (com a finalidade de manter o pH do composto).

Além de o processo ser bastante simples, apresenta algumas vantagens como (CARVALHO; SATO, 2001):

- menores riscos de contaminação em relação à fermentação contínua;
- flexibilidade de operação, devido a possibilidade de fermentar substratos de diferentes naturezas;
- possibilidade de realizar diferentes fases sucessivas no mesmo recipiente;
- condições de controle mais simples; capacidade de identificar todos os materiais relacionados ao processo.

Em contrapartida, esse modo de fermentação apresenta as seguintes desvantagens:

- efeitos de inibição ou de desvio do metabolismo celular, causados devido ao substrato ser adicionado de uma só vez no início da fermentação;
- apresenta “tempos mortos”, momentos em que a fermentação não está ocorrendo, como tempo de carga e de descarga, lavagens e esterilização dos equipamentos.

A Figura 6 exemplifica a simplicidade de biorreatores operando em modo de fermentação descontínua.

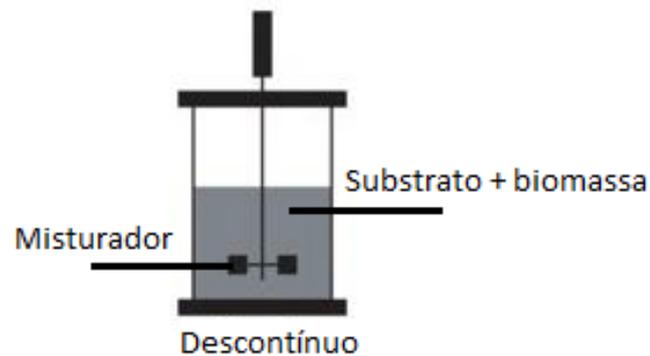


Figura 6: Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação descontínua. Não há alimentação de substrato durante o processo fermentativo. Adaptado de DOCHAIN (2008).

### 3.1.2 Fermentação semicontínua

Um processo é caracterizado como fermentação semicontínua quando, após serem inseridos no biorreator uma pequena quantidade de substrato e de biomassa, são realizadas as seguintes operações (BORZANI, 2001b; BASTIN; DOCHAIN, 1990):

- Operação 1 - Aguarda-se o término da fermentação.
- Operação 2 - Retira-se parte do substrato, mantendo-se, no biorreator o restante da biomassa.
- Operação 3 - Adiciona-se ao biorreator um volume de substrato igual ao volume de substrato retirado na Operação 2.

Essas operações serão repetidas enquanto não houver queda de produtividade do processo (Figura 7).

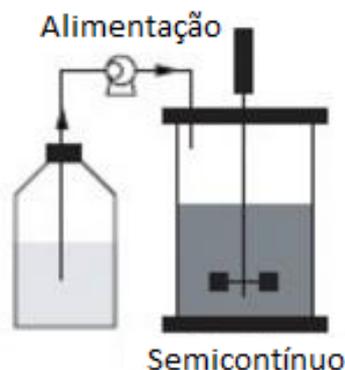


Figura 7: Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação semicontínua, com alimentação de substrato. Adaptado de DOCHAIN (2008).

As vantagens que esse modo de fermentação proporciona são (BORZANI, 2001a):

- a possibilidade de operar o biorreator por longos períodos sem preparar um novo substrato;
- aumento da produtividade modificando apenas o cronograma de trabalho;
- maior produtividade do que em biorreatores de fermentação em batelada, a partir do momento que se conhece seu ponto de operação ótimo.

As desvantagens que esse modo de fermentação apresenta são:

- dificuldade em encontrar o ponto de operação ótimo;
- altos riscos de contaminação e de mutações devido aos longos períodos de fermentação.

### 3.1.3 Fermentação contínua

Biorreatores em regime de fermentação contínua (Figura 8) são caracterizados por terem alimentação contínua de substrato. O volume da reação é mantido constante a partir da retirada contínua do produto fermentado (FACCIOTTI, 2001).

Esse modo de fermentação possibilita a utilização do biorreator por longos períodos de tempo, porém a implementação é delicada, já que a vazão de entrada deve ser igual à vazão de saída. Para contornar este problema, em geral, são utilizados métodos de retirada de líquido por transbordamento.

As principais vantagens apresentadas pelo processo contínuo de fermentação, em relação ao descontínuo tradicional, são decorrentes da operação em estado estacionário, podendo-se destacar (FACCIOTTI, 2001):

- o aumento da produtividade do processo, em virtude de uma redução dos tempos mortos ou não-produtivos;

- a obtenção de produto fermentado uniforme, o que facilita o projeto das operações de recuperação do produto de interesse;
- a manutenção das células em um mesmo estado fisiológico, o que torna o processo contínuo uma excelente ferramenta para estudos de mecanismos de regulação metabólica, ou, ainda, para estudos de otimização da composição de substrato;
- a possibilidade de associação com outras operações contínuas na linha de produção;
- a maior facilidade no emprego de controles avançados;
- a menor necessidade de mão-de-obra.

Em contrapartida, ao lado das inúmeras vantagens apontadas, o processo contínuo de fermentação apresenta também algumas desvantagens ou problemas práticos em relação à fermentação descontínua. Esses fatores podem limitar o emprego deste tipo de sistema em escala industrial para alguns processos fermentativos. Assim, pode-se destacar (FACCIOTTI, 2001):

- o maior investimento inicial na planta;
- a possibilidade de ocorrência de mutações genéticas espontâneas, resultando na seleção de mutantes menos produtivos;
- a maior possibilidade de ocorrência de contaminações, por se tratar de um sistema essencialmente aberto, necessitando então, de manutenção de condições de assepsia nos sistemas de alimentação e retirada de meio, desde que o processo assim o exija;
- as dificuldades de manutenção de homogeneidade no biorreator, quando se trabalha com baixas vazões, ou quando o produto fermentado adquire comportamento pseudoplástico, como é o caso do cultivo de fungos filamentosos;
- as dificuldades de operação em estado estacionário em determinadas situações (formação de espuma, crescimento do microrganismo nas paredes do biorreator, ou ainda, nos sistemas de entrada e de saída de líquido).

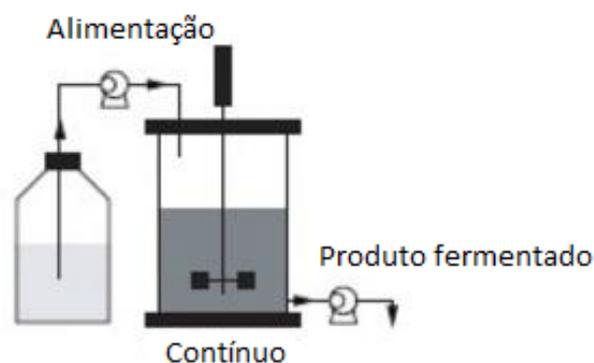


Figura 8: Representação esquemática de biorreatores em modo de fermentação contínua, tendo alimentação de substrato e coleta de produto fermentado. Adaptado de DOCHAIN (2008).

Percebe-se, portanto, que a escolha da utilização de biorreatores em regime de fermentação descontínua, semicontínua ou contínua perpassa pelo objetivo da produção e pelos recursos disponíveis para sua construção. Neste trabalho, abordaremos a produção de biogás (que é composto, em sua maioria, por metano), em fermentação descontínua, a partir de um processo de digestão anaeróbia, que será abordado a seguir.

### 3.2 Processo de Digestão Anaeróbia

Biorreatores em processo de Digestão Anaeróbia (DA) são frequentemente utilizados para discutir questões relacionadas a tratamento de águas residuais utilizando modos de fermentação descontínua ou semicontínua. Esse tipo de processo permite que, devido à ausência de oxigênio livre, alguns tipos de micróbios degradem material orgânico, transformando em metano, em dióxido de carbono e em uma nova biomassa microbiana.

Biorreatores em processo de digestão anaeróbia realizam a degradação de dejetos orgânicos, transformando-os em biogás, que pode ser utilizado como gás de cozinha ou, ainda, na geração de energia elétrica. A biomassa restante desse processo pode ser utilizada como fertilizante, permitindo aproveitamento máximo dos dejetos (SMITH, 2009). Um excelente exemplo de geração de metano é o programa de biogás na China (CHEN et al., 2012), onde milhões de biorreatores anaeróbios de uso doméstico estão em operação.

A utilização de processos anaeróbios é bastante conveniente já que têm maior capacidade para degradar substratos concentrados e complexos, produzindo pouco resíduo. Isso acarreta em menor utilização de energia, e, ainda, têm capacidade de recuperar a energia utilizada por meio da combustão do próprio metano que produz (BERNARD et al., 2001).

No entanto, as considerações energéticas de produção de metano a partir desses resíduos complexos apresentam algumas limitações. Como, por exemplo, utilizando resíduos urbanos é possível converter de 30 a 50% da energia em metano, enquanto que com a utilização de outros materiais vegetais é possível alcançar aproximadamente 70% de conversão (SMITH, 2009).

Apesar das limitações apresentadas, é conveniente que sejam estudadas formas de implementação desses sistemas para que seja possível conhecê-los com profundidade de-

vido à importância para a sociedade de processos relacionados a geração de biogás. Por consequência, a partir destas informações, é possível realizar a predição da quantidade de metano que pode ser produzida a partir de uma determinada quantidade de material biodegradável.

O diagrama apresentado na Figura 9 engloba os processos envolvidos na digestão anaeróbia de resíduos orgânicos com produção de metano. Quatro vias metabólicas podem ser identificadas nesse processo, duas para acidogênese e duas para metanogênese. No primeiro caminho acidogênico (caminho 1), a glicose é decomposta em ácidos graxos voláteis (acetato e propionato), hidrogênio e carbono inorgânico por bactérias acidogênicas. No segundo caminho acidogênico, OHPA (*Obligate Hydrogen Producing Acetogens*) decompõe propionato acetato em hidrogênio e carbono inorgânico. Em um primeiro percurso de metanização (caminho 3), acetato é transformado em metano e carbono inorgânico por bactérias metanogênicas acetoclásticas. Por sua vez, no segundo caminho de metanização (caminho 4), o hidrogênio é combinado com carbono inorgânico para produzir metano sob a ação de bactérias metanogênicas hidrogenofíticas (BASTIN; DOCHAIN, 1990).

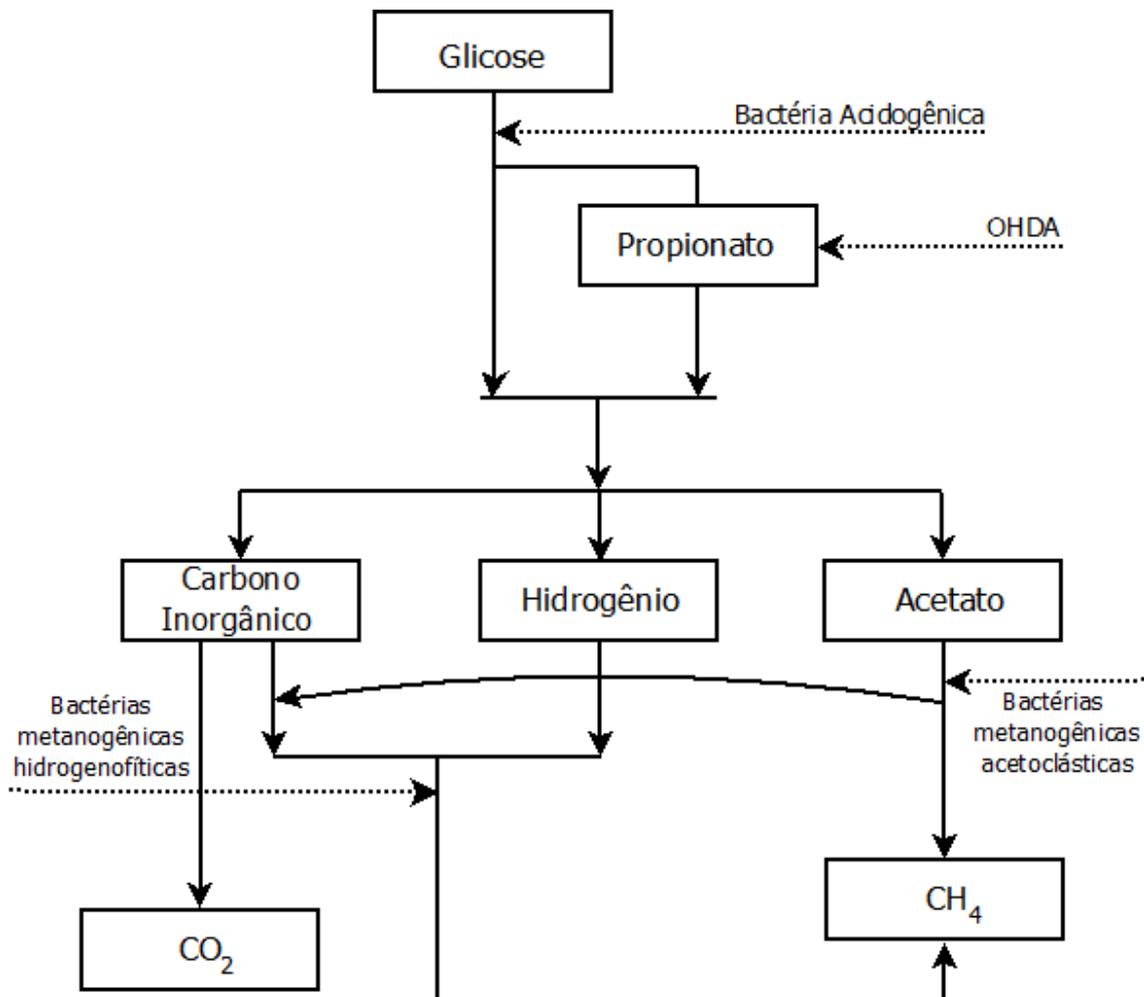


Figura 9: Representação esquemática de um processo de digestão anaeróbia. Adaptado de BASTIN; DOCHAIN (1990).

Devido à complexidade deste processo é importante investigar modelos matemáticos que possam prever e monitorar as dinâmicas envolvidas. Como já foi discutido anteri-

ormente, é bastante comum que versões simplificadas dos sistemas sejam utilizadas para descrever um processo real. Esses modelos serão abordados a seguir.

### 3.2.1 Modelos de Processo de Digestão Anaeróbia

Muitos são os modelos de DA propostos na literatura. O modelo de Digestão Anaeróbia número 1 (*Anaerobic Digestion Model No. 1 - AMDI*), do tipo caixa-branca, foi apresentado no 8º Congresso Mundial de Digestão Anaeróbia, ocorrido em Sendai - Japão, em 1997, pelo Grupo de Trabalho IWA em Modelagem de Digestão Anaeróbia (uma tradução livre para *IWA Anaerobic Digestion Modelling Task Group*) com o objetivo de desenvolver um modelo para esse processo (BATSTONE et al., 2002). Devido à complexidade desse modelo, BERNARD et al. (2001) propõem um macro modelo baseado no balanço de massa (*Mass Balance Model*), do tipo caixa-cinza. Nesse modelo todas as cinéticas são baseadas na concentração inicial do biorreator no tempo zero até as reações terminarem e o processo estabilizar.

Nesse trabalho, utilizamos o macro modelo de balanço de massa, Equação (43), já amplamente utilizado na literatura (ANTONELLI et al., 2003; CAMPESTRINI et al., 2014):

$$\begin{cases} \dot{x}_1(t) = \mu_1(s_1(t))x_1(t) \\ \dot{x}_2(t) = \mu_2(s_2(t))x_2(t) \\ \dot{s}_1(t) = -k_1\mu_1(s_1(t))x_1(t) \\ \dot{s}_2(t) = -k_2\mu_1(s_1(t))x_1(t) - k_3\mu_2(s_2(t))x_2(t) \end{cases} \quad (43)$$

em que  $x_1(t)$  e  $x_2(t)$  são as concentrações de bactéria acidogênica e de bactéria metanogênica em  $mg/L$ , respectivamente;  $s_1(t)$  e  $s_2(t)$  representam a demanda de oxigênio (COD) em  $mg/L$  e a concentração de ácidos graxos voláteis (VFA) em  $mmol/L$ , respectivamente. Essas são as variáveis de estado do sistema, assim, quando  $t = 0$ , temos os valores das condições iniciais do modelo. Como visto, esse sistema não possui entradas, já que descreve um biorreator em regime de fermentação descontínua. As variáveis  $k_1$  ( $mg\ COD/mg\ x_1$ ) e  $k_2$  ( $mmol\ VFA/mg\ x_1$ ) são os coeficientes de rendimento de degradação e produção de COD e  $k_3$  ( $VFA\ mmol/mg\ x_2$ ) é o coeficiente de rendimento do consumo de ácidos graxos voláteis;  $\mu_1$  e  $\mu_2$  são as taxas específicas de crescimento microbiano dadas pelas Equações (44) e (45).

Normalmente a Equação (45) é expressa pela lei de Haldane, mas, como apresentado em CAMPESTRINI et al. (2014), em processo em que a concentração de substrato é baixa, como nos casos abordados neste trabalho, e não havendo observação de inibição por ácidos graxos voláteis, por questão de simplificação do modelo, é mais conveniente que utilizemos a lei de Monod para representá-la.

$$\mu_1(s_1(t)) = \mu_{m1} \frac{s_1(t)}{K_{s1} + s_1(t)}, \quad (44)$$

$$\mu_2(s_2(t)) = \mu_{m2} \frac{s_2(t)}{K_{s2} + s_2(t)}, \quad (45)$$

em que  $K_{s1}$  ( $mg/L$ ) e  $K_{s2}$  ( $mmol/L$ ) são os parâmetros associados aos meios de saturação com  $s_1$  e  $s_2$  e  $\mu_{m1}$  e  $\mu_{m2}$  são, respectivamente, as taxas máximas de crescimento de biomassa acidogênica e metanogênica ( $dia^{-1}$ ).

Além disso, a saída do processo (Equação (24)) é representada por  $q_M(t)$ , que é a taxa de produção de metano dada por:

$$q_M = k_6 \mu_2(s_2(t)) x_2(t), \quad (46)$$

em que  $k_6$  ( $mmol/g$ ) é o coeficiente de rendimento para a produção de metano. A fim de obter a quantidade total de metano produzido, a Equação (46) é integrada desde o início do processo até o final.

## 4 METODOLOGIA DE PESQUISA

A partir dos conceitos que foram abordados nos capítulos anteriores, podemos apresentar em detalhes os procedimentos realizados para concretizar nosso estudo. Antes de iniciarmos a explanação desses processos, é necessário lembrar que o objetivo deste trabalho é prever os valores de saída de biorreatores em regime de fermentação descontínua em processo de digestão anaeróbia, utilizando modelos não-lineares polinomiais do tipo caixa-preta. De forma mais sucinta, podemos dizer que temos como finalidade a modelagem de biorreatores descontínuos com modelos não-lineares caixa-preta.

Como forma de realizar testes sob condições controladas, inicialmente elaboramos uma simulação computacional, que foi desenvolvida apoiada no macro modelo de balanço de massa de BERNARD et al. (2001). Além de permitir que os dados fossem gerados em condições ótimas, essa simulação auxiliou na obtenção de dados de processos bastante próximos aos reais. Como foi mencionado, experimentos envolvendo regimes fermentativos apresentam uma demora inerente ao processo para obtenção do produto. Assim, utilizando este artifício, foi possível coletar dados de forma ágil.

Posteriormente obtivemos dados experimentais provenientes do Laboratório de Biorreatores do Centro Universitário UNIVATES. A análise de tais dados, coletados a partir de biorreatores reais, possibilitou uma pesquisa mais ampla e transparente.

Assim, dispondo de dados simulados e experimentais, e após elaborarmos modelos caixa-preta que se enquadrassem nas características do processo, foi possível realizar a estimação dos parâmetros e a validação desses modelos, verificando a adequação ao sistema avaliado. Essas etapas de construção da simulação, do experimento, dos modelos e do processo de identificação de sistemas serão detalhadas a seguir.

### 4.1 Simulação de biorreator em regime de fermentação descontínua

Geralmente existem dois grandes obstáculos ao se trabalhar com biorreatores: i) a demora, inerente ao processo de fermentação, necessária para obter dados de saída; e ii) a dificuldade para realizar a coleta desses dados.

Para auxiliar nosso estudo, construímos uma simulação computacional utilizando o recurso *Simulink* do *software* Matlab (versão R2014b) que busca descrever fidedignamente o comportamento de biorreatores em modo de fermentação descontínua em digestão anaeróbia a partir do macro modelo de balanço de massa, apresentado anteriormente e expresso na Equação (43). A simulação possibilita que sejam inseridos valores das quatro condições iniciais ( $x_1(0)$ ,  $x_2(0)$ ,  $s_1(0)$  e  $s_2(0)$ ) e dos demais coeficientes do sistema, permitindo a análise de  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ ,  $s_1(t)$  e  $s_2(t)$ , da saída do sistema e da produção de metano ao longo do tempo.

É importante salientar e diferenciar os dois estudos que realizamos a partir da simu-

lação. Num primeiro momento, utilizamos o macro modelo de balanço de massa juntamente com condições iniciais bem definidas e geramos dados que denominamos de *Grupo de Controle*. Num segundo momento, ainda utilizando essa simulação e o macro modelo de balanço de massa, realizamos diversos testes com diferentes condições iniciais. Abordaremos esses dois estudos a seguir.

#### 4.1.1 Grupo de Controle

Quando um estudo é realizado, é de suma importância que haja dados confiáveis com os quais possamos realizar comparações para averiguar a veracidade dos resultados encontrados na pesquisa. Assim, focamos primeiramente em realizar uma simulação que pudesse fornecer dados que servissem como referência para contrastarmos os dados que serão estimados posteriormente. Essa simulação referência foi denominada de Grupo de Controle (GC) e tem como condições iniciais:

Tabela 1: Valores das condições iniciais utilizadas no Grupo do Controle

Condição inicial	Valores
$x_1(0)$	0,2 (mg/L)
$x_2(0)$	0,8 (mg/L)
$s_1(0)$	74 (mg/L)
$s_2(0)$	93 (mmol/L)

e como coeficientes:

Tabela 2: Valores dos Coeficientes utilizados na simulação Grupo do Controle

Coeficientes	Valores
$\mu_{m1}$	$4,2912 \times 10^1$ (dia <sup>-1</sup> )
$\mu_{m2}$	$2,6493 \times 10^0$ (dia <sup>-1</sup> )
$K_{s1}$	$1,3065 \times 10^1$ (mg/L)
$K_{s2}$	$5,7127 \times 10^2$ (mmol/L)
$k_1$	$3,1204 \times 10^{-1}$ (mg COD/mg $x_1$ )
$k_2$	$6,2776 \times 10^{-2}$ (mmol VFA/mg $x_1$ )
$k_3$	$3,1473 \times 10^0$ (VFA mmol/mg $x_2$ )
$k_6$	$2,7862 \times 10^2$ (mmol/g)

Tanto os valores das condições iniciais (Tabela 1) como os valores dos coeficientes (Tabela 2) foram arbitrados e sugeridos em CAMPESTRINI et al. (2014), com exceção da condição inicial  $s_1(0)$ , de  $74 \text{ mg/L}$ , que era conhecida pelos autores.

Como não há entradas em biorreatores em regime de fermentação descontínua, as condições iniciais influenciam diretamente no comportamento do sistema (DONOSO-BRAVO et al., 2011).

#### 4.1.2 Diferentes condições iniciais

Tendo os dados de referência da simulação Grupo de Controle, que tem condições iniciais bem definidas, passamos a um segundo estudo. A fim de obter diversos conjuntos

de dados, iniciamos o processo de alteração de cada uma das condições iniciais. Além de proporcionar diferentes comportamentos, isso também permite verificar a implicação dessas modificações das condições iniciais na saída do sistema, ou seja, na produção de metano.

Os seguintes passos foram realizados: primeiramente variamos o valor de uma condição inicial, por exemplo,  $x_1(0)$ , mantendo os valores das demais condições iniciais ( $x_2(0)$ ,  $s_1(0)$ ,  $s_2(0)$ ) constantes, de acordo com os valores já mencionados na Tabela 1. Em seguida um outro valor de condição inicial é alterado, por exemplo,  $x_2(0)$ , e os valores das condições iniciais restantes permanecem fixas ( $x_1(0)$ ,  $s_1(0)$ ,  $s_2(0)$ ), e assim sucessivamente, até que fossem alterados os valores das quatro condições iniciais. Ao todo, possuímos 64 simulações com condições iniciais diferentes para podermos analisar o comportamento do sistema em diversas situações e verificar como essas concentrações iniciais diferentes poderiam implicar na produção de metano.

## 4.2 Obtenção de dados experimentais

Além da análise de dados gerados via simulações computacionais é importante também que sejam analisados dados de experimentos reais. Os procedimentos realizados para a obtenção desses dados foram descritos em CAMPESTRINI et al. (2014).

O experimento foi conduzido a partir de uma planta em escala laboratorial localizado no Centro Universitário UNIVATES, Lajeado - Rio Grande do Sul. Essa planta contém uma incubadora com vários biorreatores (garrafas de vidro), conforme a Figura 10, com capacidade de um litro cada.



Figura 10: Biorreatores utilizados na investigação. Fonte: CAMPESTRINI et al. (2014).

A produção de biogás foi medida por um aparelho (Figura 11) que compreende um coletor de gases (em formato de U), um sensor ótico, uma esfera de isopor, e um circuito eletrônico, que registra o fluxo de metano e é capaz de calcular o volume de gás gerado pelo biorreator.



Figura 11: Equipamento para coleta dos dados experimentais. Fonte: CAMPESTRINI et al. (2014).

O funcionamento desse dispositivo é baseado no deslocamento de fluido, ou seja, quando o biogás enche o tubo em formato de U ele movimenta o líquido (no caso, a água) para baixo em um dos lados, aumentando o nível de fluido no lado oposto, sendo detectado pelo sensor. Essas informações coletadas são então enviadas ao circuito eletrônico.

A fim de manter uma temperatura constante (35°C, temperatura adequada para a produção de metano, (BERNARD et al., 2001)), a experiência foi realizada em uma estufa bacteriológica. Cada garrafa possui volume máximo de 420 mL de substrato (formado por lodo da Cooperativa de Tratamento de Águas Residuais da Estação Ecológica do Vale do Caí - Ecocitrus, no Rio Grande do Sul, Brasil) e 180 mL de inóculo, que são obtidos a partir de um biodigestor em larga escala, e são misturados e homogeneizados.

A concentração do biogás produzido, medido em porcentagem de metano, foi realizada a partir da injeção do biogás em um sensor específico para a medição da concentração de metano, chamado *Advanced Gasmitter*. Essas medições foram realizadas quatro vezes ao dia (a cada 6 horas), e foram utilizadas medidas de apenas dois dos vários biorreatores apresentados na Figura 10, durante um período de 37 dias, totalizando, portanto, 148 amostras de cada biorreator. O volume de biogás gerado é determinado pela Lei dos Gases Ideais em relação a um recipiente lacrado, que indica que a razão do produto entre a pressão ( $P$ ), o volume ( $V$ ) e a temperatura ( $T$ ) de um sistema permanece constante do tempo inicial até o tempo final (KNIGHT, 2009). A Equação (47) ilustra esse raciocínio:

$$\frac{P_f V_f}{T_f} = \frac{P_i V_i}{T_i}, \quad (47)$$

em que  $f$  e  $i$  indicam os valores finais e iniciais, respectivamente.

### 4.3 Construção dos Modelos

Depois da obtenção dos dados simulados e experimentais foi possível iniciar o processo de construção de modelos caixa-preta que pudessem representar os sistemas inves-

tigados. Nossa intenção é propor modelos que possibilitem a descrição desses processos sem informações sobre as relações internas dos biorreatores. Portanto, os modelos que propusemos são de menor complexidade em relação ao macro modelo de balanço de massa (Equação (43)) que foi utilizado para a geração dos dados simulados. O macro modelo pode ser entendido como sendo do tipo caixa-cinza, já que considera algumas das relações internas do sistema na sua modelagem. Como a nossa preocupação é com o resultado final do processo, a produção de metano, não é necessária a utilização de modelos mais elaborados, do tipo caixa-branca ou caixa-cinza, o que possibilita a simplificação da modelagem a partir de modelos do tipo caixa-preta. Esses modelos caixa-preta permitem ainda que a identificação de seus parâmetros seja realizada a partir de procedimentos e métodos amplamente conhecidos, como o de Mínimos Quadrados. Considerando que o sistema no qual estamos trabalhando é um biorreator em regime de fermentação descontínua, que não possui entradas, é necessário considerar essa característica na escolha de modelos que possam representá-lo da forma mais apropriada possível. Após o estudo dos modelos descritos no Capítulo 2, constatamos que é bastante conveniente que escolhamos modelos não-lineares para descrever o comportamento de compostos orgânicos. Além disso, os modelos devem considerar apenas informação sobre os dados de saída e sobre as condições iniciais de acordo com as características do sistema investigado. Portanto, levando em consideração todos esses fatores, percebemos que os modelos que condizem com essas condições são os modelos do tipo NAR e do tipo NARMA, que, lembrando, possuem como diferença entre si apenas o termo de Média Movel (*Moving Average - MA*).

Tendo estipulado a estrutura do modelo, a próxima etapa é selecionar os regressores cuja função pode ser aproximada por uma função polinomial a partir de uma série de Taylor truncada (DONOSO-BRAVO et al., 2011).

Essa é uma etapa de extrema importância para captar as principais características do processo e deve ser realizada com parcimônia, já que o truncamento da série pode acontecer antes (ou depois) da ordem do polinômio necessária para descrever o sistema. Estipulamos regressores a partir de todas as combinações possíveis de ordem 3 e de potência 3 de forma arbitrária. O número de regressores desses modelos pode ser definido a partir da análise combinatória, com a Equação de Combinação com Repetição (CR), dada por (MORGADO et al., 1991):

$$CR_{n+p-1}^p = \frac{(n+p-1)!}{p!(n-1)!}, \quad (48)$$

em que  $p$  é a classe dos elementos e  $n$  é o número de elementos do conjunto.

Então, para o caso NAR, realizamos o cálculo da combinação com repetição para a classe 2, ou seja, para quando multiplicamos dois elementos (por exemplo,  $y(k-1)y(k-2)$ ), e o cálculo da combinação com repetição para a classe 3 (por exemplo,  $y(k-1)y(k-2)y(k-3)$ ), para quando multiplicamos três elementos. Por fim, a esses resultados é necessário somar os termos de potência 1. Esse cálculo resultou em 19 regressores para o modelo NAR, apresentados na Equação (49) e em 22 regressores para o modelo NARMA, mostrados na Equação (50), devido ao termo  $MA$ , que identifica o ruído e o utiliza como informação:

$$\phi_{NAR}[k] = \begin{bmatrix} -(y[k-1]) \\ -(y[k-1]^2) \\ -(y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-3]) \\ -(y[k-2]^2) \\ -(y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-3]) \\ -(y[k-3]^2) \\ -(y[k-1]^3) \\ -(y[k-1]^2y[k-2]) \\ -(y[k-1]^2y[k-3]) \\ -(y[k-1]y[k-2]^2) \\ -(y[k-1]y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-1]y[k-2]^3) \\ -(y[k-2]^3) \\ -(y[k-2]^2y[k-3]) \\ -(y[k-2]y[k-3]^2) \\ -(y[k-3]^3) \end{bmatrix} \quad (49)$$

e

$$\phi_{NARMA}[k] = \begin{bmatrix} -(y[k-1]) \\ -(y[k-1]^2) \\ -(y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-3]) \\ -(y[k-2]^2) \\ -(y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-3]) \\ -(y[k-3]^2) \\ -(y[k-1]^3) \\ -(y[k-1]^2y[k-2]) \\ -(y[k-1]^2y[k-3]) \\ -(y[k-1]y[k-2]^2) \\ -(y[k-1]y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-1]y[k-2]^3) \\ -(y[k-2]^3) \\ -(y[k-2]^2y[k-3]) \\ -(y[k-2]y[k-3]^2) \\ -(y[k-3]^3) \\ e[k-1] \\ e[k-2] \\ e[k-3] \end{bmatrix} \quad (50)$$

em que  $\phi_{NAR}[k]$  e  $\phi_{NARMA}[k]$  são os equivalentes aos termos  $\phi_{MQ}[k]$  e  $\phi_{MQE}[k]$ , das Equações (22) e (39), respectivamente.

Para avaliar a necessidade de cada um desses regressores realizamos alguns testes. Tanto no caso NAR quanto no caso NARMA o procedimento realizado foi o mesmo: uti-

lizando os dados obtidos a partir da simulação do Grupo de Controle, realizamos a estimação dos parâmetros para os modelos NAR e NARMA completos, com todos os 19 e 22 termos de regressores, respectivamente. A partir dos valores que obtivemos para cada parâmetro foram selecionados os regressores que deveriam continuar efetivamente fazendo parte de cada modelo a partir da avaliação do Erro Relativo obtido em cada estimação. Se a exclusão de um dos regressores implicasse no aumento do erro relativo, o regressor era reintegrado ao modelo, mesmo que seu parâmetro associado fosse próximo a zero. Isso significa que, a partir da etapa de estimação, os parâmetros que não promoveram alguma contribuição ao modelo, tiveram seus respectivos regressores associados eliminados do modelo, já que esses não impactariam na saída do processo. Com isso, o tamanho do vetor de regressores de cada modelo pôde ser reduzido e apenas os regressores relevantes para descrever o processo continuaram no modelo. O resultado desses exaustivos testes foi a redução de 10 regressores para cada modelo, ou seja, para o modelo NAR obtivemos 9 regressores e para o modelo NARMA obtivemos 12 regressores. Esses modelos serão apresentados no Capítulo Resultados.

#### 4.4 Processo de Identificação de Biorreatores

De posse de dados simulados a partir de diversas condições iniciais diferentes, dos dados experimentais e dos modelos, foi possível dar prosseguimento ao processo de identificação de sistemas, já descrito pelo algoritmo da Figura 4. Como foi mencionado no Capítulo 2, o método adequado para realizar o procedimento de identificação de sistemas para quando um modelo NAR é utilizado é o de MQ (Equação (23)) e para quando utilizamos um modelo NARMA o de MQE (Equação (40)). Por isso, construímos duas rotinas diferentes no *software* Matlab, que podem ser consultadas nos Apêndices C e D, uma para avaliar esses dados com o modelo NAR e outra para avaliá-los a partir do modelo NARMA.

Primeiramente, arbitramos que os dados obtidos para a simulação Grupo de Controle seriam utilizados para a estimação dos parâmetros e, que, para a validação dos modelos seriam utilizados os demais dados simulados (aqueles gerados com diferentes condições iniciais). Além disso, como obtivemos dados experimentais de dois biorreatores (com 148 amostras cada um), utilizamos os dados de um biorreator para a estimação dos parâmetros e os dados do outro biorreator para a validação dos modelos NAR e NARMA. Esses procedimentos permitiram, além da estimação dos parâmetros e da validação dos modelos, a investigação sobre o domínio de validade dos modelos polinomiais caixa-preta que propusemos e o cálculo da produção de metano para cada caso. Os resultados desses testes serão apresentados no Capítulo 5.



## 5 RESULTADOS

Apresentaremos a seguir os resultados que obtivemos a partir da implementação das etapas apresentadas no capítulo anterior. Primeiramente, mostraremos quais foram os regressores selecionados para integrar os modelos NAR e NARMA. Em seguida será exposto o comportamento da simulação Grupo de Controle e, posteriormente, os resultados para as demais simulações quando implementado o processo de identificação de sistemas a partir dos modelos caixa-preta propostos. A produção de metano será detalhada posteriormente. Por fim, serão expostos os resultados para quando utilizados esses mesmos modelos testados com dados experimentais.

### 5.1 Modelos NAR e NARMA

Sabemos que para cada regressor há um parâmetro associado, tanto para o método de MQ quanto para o método de MQE, conforme as Equações (22) e (39). Como nossa pesquisa é baseada em modelos polinomiais caixa-preta NAR e NARMA, e esses modelos são extensos, como apresentados em (49) e (50), convém que sejam avaliados cada um desses regressores a partir dos procedimentos explicados anteriormente. Os regressores obtidos a partir dessa avaliação são apresentados na Equação (51). Para o modelo NARMA o procedimento foi o mesmo, e obtivemos como regressores para o modelo NARMA aqueles apresentados na Equação (52). Todos os valores dos parâmetros encontrados com seus respectivos regressores são apresentados no Apêndice A.

$$\phi_{NAR}[k] = \begin{bmatrix} -(y[k-1]) \\ -(y[k-1]^2) \\ -(y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-3]) \\ -(y[k-2]^2) \\ -(y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-3]) \\ -(y[k-3]^2) \end{bmatrix} \quad (51)$$

$$\phi_{NARMA}[k] = \begin{bmatrix} -(y[k-1]) \\ -(y[k-1]^2) \\ -(y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-2]) \\ -(y[k-1]y[k-3]) \\ -(y[k-2]^2) \\ -(y[k-2]y[k-3]) \\ -(y[k-3]) \\ -(y[k-3]^2) \\ e[k-1] \\ e[k-2] \\ e[k-3] \end{bmatrix} \quad (52)$$

Então, os modelos polinomiais caixa-preta que propusemos neste trabalho são compostos por esses regressores. Esses modelos serão utilizados em todas as outras etapas que serão descritas a partir de agora.

## 5.2 Resultados das simulações

Como realizamos diversas simulações, é importante saber diferenciá-las para discutir cada resultado. Nesta seção serão apresentados os resultados para dados do Grupo de Controle e em seguida para as simulações em que modificamos os valores das condições iniciais.

### 5.2.1 Grupo de Controle

A simulação (cuja rotina pode ser conferida no Apêndice B) foi construída de forma que permitisse a inserção de valores de condições iniciais sugeridas na literatura para que o processo simulado fosse o mais realístico possível. Com essa simulação também verificamos o comportamento de cada processo.

Os estudos das condições iniciais, com o objetivo de investigar o comportamento da saída do sistema, são apresentadas na Figura 12, em que é possível visualizar a evolução temporal das concentrações de bactéria acidogênica  $x_1$  e metanogênica  $x_2$ , em  $mg/L$ ; e a demanda de oxigênio (COD),  $s_1$ , em  $mg/L$ , e a concentração de ácidos graxos voláteis (VFA),  $s_2$ , em  $mmol/L$  ao longo do tempo.

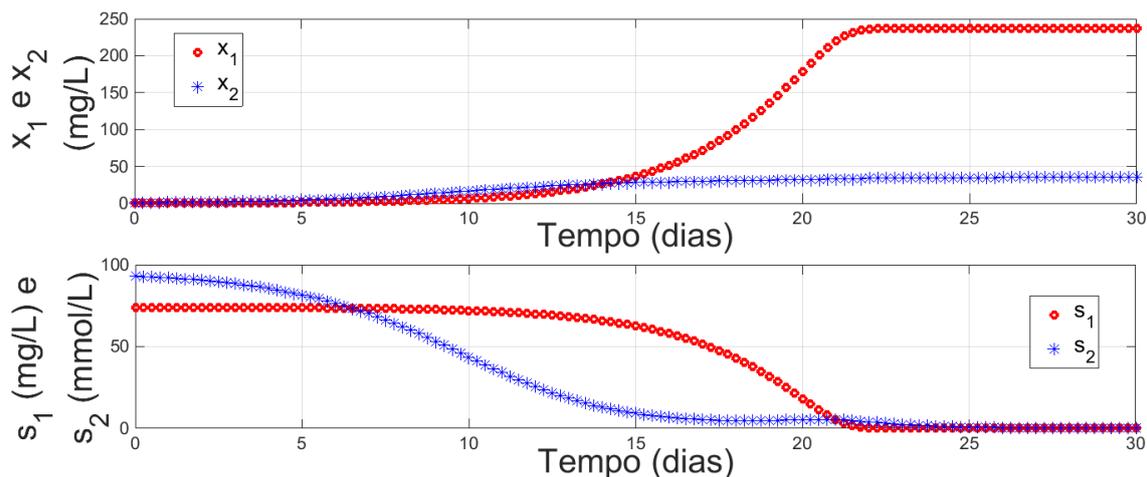


Figura 12: Na parte superior, as concentrações de bactéria acidogênica ( $x_1$ ), em círculos, e de bactéria metanogênica ( $x_2$ ), em asteriscos, ao longo do tempo; em seguida, a demanda de oxigênio ( $s_1$ ), em círculos, e a concentração de ácidos graxos voláteis ( $s_2$ ), em asteriscos, ao longo do tempo.

A Figura 13 mostra a saída do sistema, a taxa de produção de metano, que denominamos anteriormente  $q_M$ . Essa saída é a curva de crescimento microbiano calculada a partir da Equação (46).

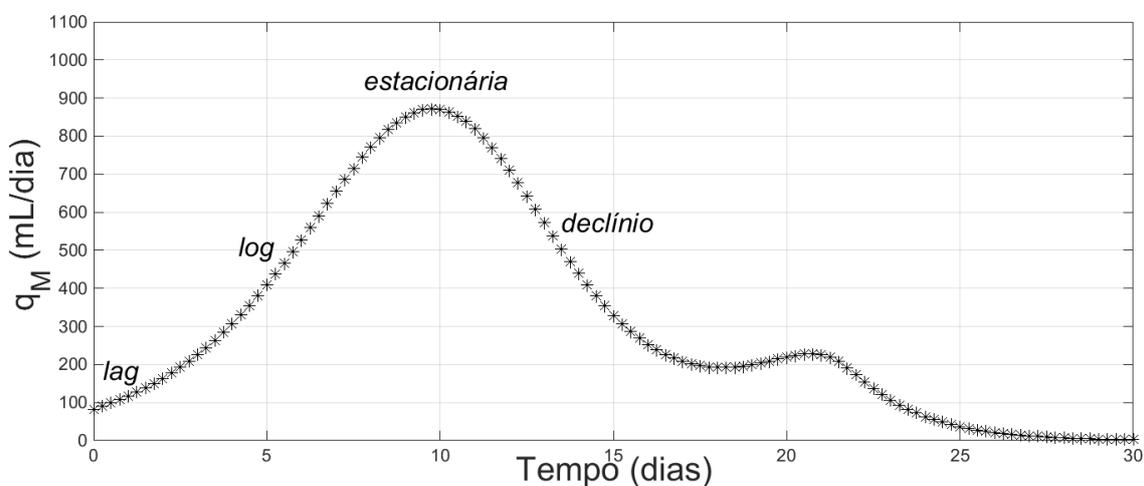


Figura 13: Saída do sistema, ou seja, taxa de fluxo de metano ( $q_M$ ).

Curvas de crescimento microbiano são compostas por quatro fases, que podemos identificar facilmente a partir da Figura 13: *lag*, *log* ou *exponencial*, *estacionária* e *declínio*. No início da curva é observada a fase *lag*, em que o número de microorganismos permanece praticamente inalterado; posteriormente, na fase *log*, considerada a etapa mais importante do crescimento microbiano, as células estão adaptadas, absorvendo nutrientes, sintetizando seus constituintes, crescendo e duplicando-se (aproximadamente entre os dias 2 e 8), mas a quantidade de produto final é ainda pequena (vide Figura 14); a característica da fase seguinte, a *estacionária*, é que os nutrientes começam a escassear e alguns produtos tóxicos começam a tornar-se abundantes. O número de células que se dividem é equivalente ao número de células que morrem, chegando ao ápice da curva. Por fim, na fase de *declínio*, a maioria das células está em processo de morte (ALVES, 2010).

Perceba que, aproximadamente no dia 20, na Figura 13, há uma interrupção da fase de declínio, havendo um sensível aumento na curva. Uma possibilidade para esse pequeno crescimento microbiano em meio a essa etapa é a neutralização de produtos tóxicos, a aeração, ou ambos. Esses processos podem promover um novo surto de crescimento mostrando que ainda havia uma quantidade suficiente de substrato a ser sintetizada (AL-TERTHUMM, 2001).

Por fim, a Figura 14 ilustra a produção acumulada de metano, ou seja, a integral da concentração de saída  $q_M$  ao longo de 30 dias.

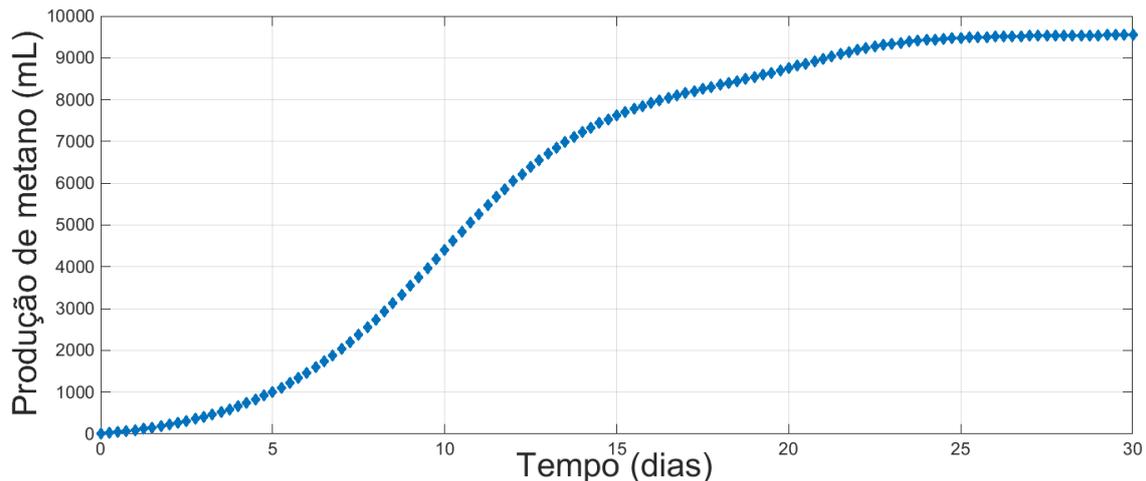


Figura 14: Produção de metano para o modelo simulado

Notamos, portanto, que a partir das condições iniciais do Grupo de Controle é possível produzir entre 9.000 e 10.000  $mL$  de metano em 30 dias. A produção de metano será abordada com mais detalhes ao longo deste capítulo.

Depois do procedimento realizado para verificarmos o comportamento das condições iniciais do Grupo de Controle, iniciamos o processo de estimação de parâmetros propriamente dito, a partir dos modelos NAR e NARMA, detalhados a seguir.

#### 5.2.1.1 Estimação de parâmetros - modelo NAR

Sendo a estimação de parâmetros uma das etapas do processo de identificação de sistemas, detalharemos essa estimação para o Grupo de Controle em duas situações: i) sem ruído na medida, extraída diretamente da simulação e; ii) com ruído na saída, com o objetivo de avaliar e contrastar os valores de parâmetros obtidos realizando a estimação com ruído.

##### 1. Parâmetros estimados para a simulação sem ruído

De posse dos dados da simulação do Grupo de Controle sem ruído foi possível realizar investigações acerca dos parâmetros do sistema. A Tabela 3 apresenta os parâmetros estimados, juntamente com o valor da  $P$ , calculado conforme a Equação (31), para quando realizamos a estimação dos parâmetros utilizando o modelo NAR.

Tabela 3: Valores dos parâmetros e de  $P$  do Grupo de Controle, sem ruído, calculados a partir do modelo NAR

$\theta$	Parâmetros - NAR
$\theta_1$	-1,9137
$\theta_2$	0,0107
$\theta_3$	0,8265
$\theta_4$	-0,0381
$\theta_5$	0,0149
$\theta_6$	0,0336
$\theta_7$	-0,0258
$\theta_8$	0,0841
$\theta_9$	0,0045
$P$	0,0091

Para modelos lineares os autovalores da matriz de covariância fornecem os valores das variâncias dos parâmetros. Apesar de estarmos trabalhando com modelos não-lineares, é possível extrapolar essa regra e realizar aproximações no sentido de tomar o valor de  $P$  como uma das formas de avaliar os parâmetros estimados. Nesse caso, essa comparação é realizada em relação aos dados do modelo caixa-cinza.

A seguir abordaremos outra forma de avaliar os parâmetros estimados realizando diferentes simulações e calculando o desvio padrão desses parâmetros a partir deste procedimento.

## 2. Parâmetros estimados para a simulação com ruído

Ao contaminarmos a saída com ruído branco a Equação (46) torna-se

$$q_M = k_6 \mu_2(s_2(t))x_2(t) + \nu. \quad (53)$$

Realizando várias simulações (denominadas *Monte Carlo runs* ou apenas *MC runs*), obteremos para cada uma delas valores de parâmetros diferentes. Assim será possível calcular o desvio padrão desses parâmetros, bem como o valor de  $P$ .

Portanto, para essa análise, aplicamos na saída um ruído branco, que corresponde a 5% do valor da norma infinito da própria saída do sistema para cada uma das 100 *MC runs* (valor arbitrado).

Na Tabela 4 são mostrados os valores médios dos parâmetros estimados a partir da simulação contaminada com ruído e o valor de  $P$ , juntamente com seus respectivos desvios padrão para quando utilizamos o modelo NAR na estimação.

Tabela 4: Média dos parâmetros estimados utilizando 5% de ruído na saída e valor de  $P$  para o modelo NAR

$\theta$	Médias dos parâmetros - NAR $\pm$ desvio padrão
$\theta_1$	$-0,6406 \pm 0,0645$
$\theta_2$	$-0,0019 \pm 0,0009$
$\theta_3$	$-0,3086 \pm 0,0832$
$\theta_4$	$0,0010 \pm 0,0026$
$\theta_5$	$0,0017 \pm 0,0019$
$\theta_6$	$0,0001 \pm 0,0023$
$\theta_7$	$-0,0011 \pm 0,0031$
$\theta_8$	$-0,0424 \pm 0,0648$
$\theta_9$	$0,0002 \pm 0,0012$
$P$	$1,3454 \times 10^{-5} \pm 2,0379 \times 10^{-6}$

O valor de  $P$  neste caso é bastante pequeno em relação ao obtido anteriormente. Ainda, percebemos algumas discrepâncias entre os valores médios dos parâmetros estimados com ruído e os valores dos parâmetros estimados sem ruído.

Como forma de comparar cada um desses parâmetros separadamente, achamos conveniente apresentá-los em gráficos, agrupados de dois a dois. Assim, nas Figuras 15, 16, 17, 18 e 19 são expostos os parâmetros estimados sem ruído (Tabela 3) e os parâmetros estimados com ruído, dando ênfase à média de cada um deles, já expostas na Tabela 4.

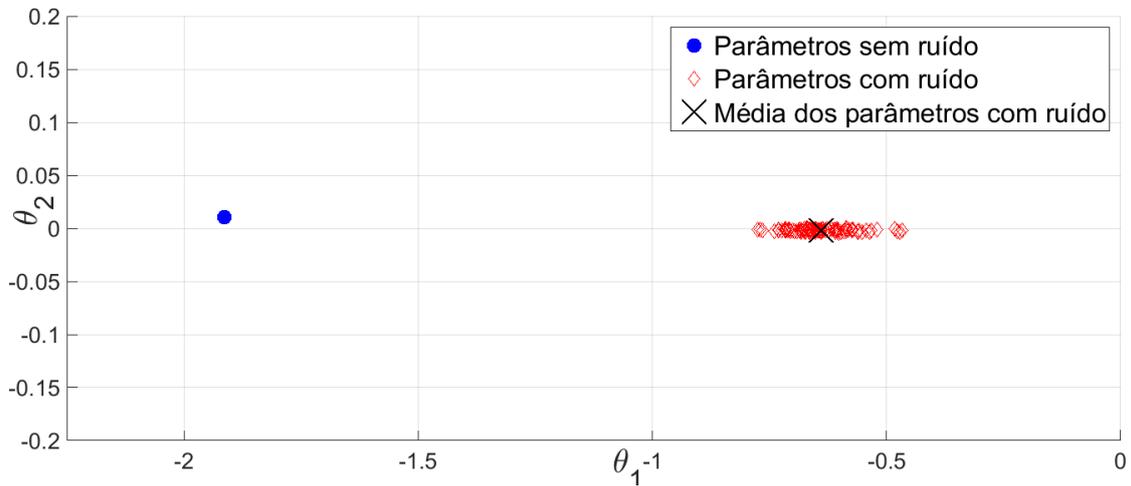


Figura 15: Parâmetros 1 e 2 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle

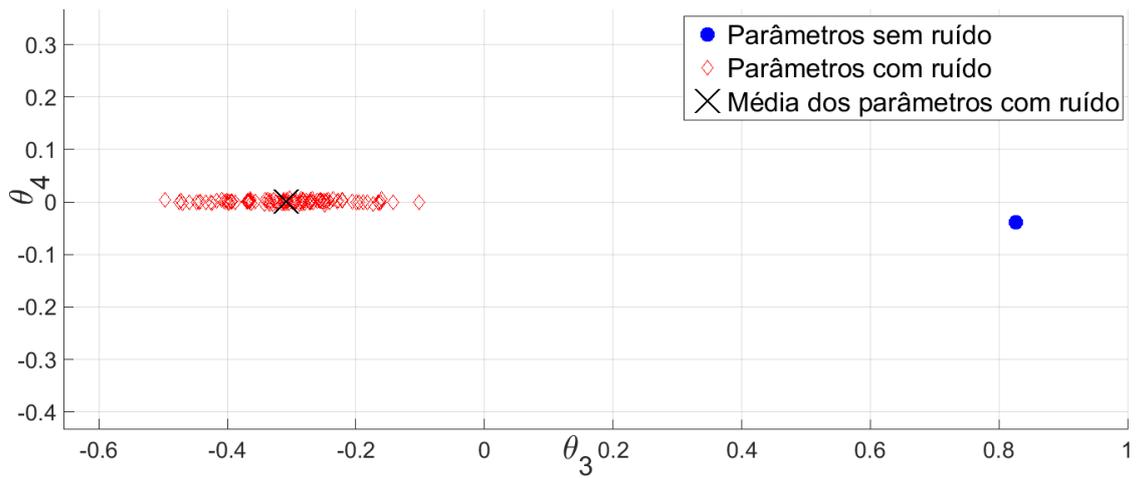


Figura 16: Parâmetros 3 e 4 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle

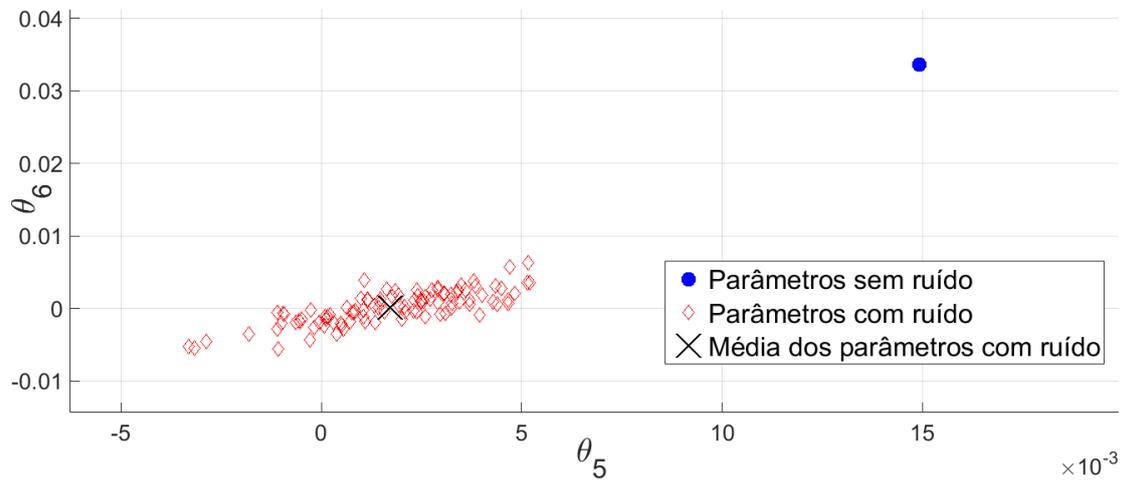


Figura 17: Parâmetros 5 e 6 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle

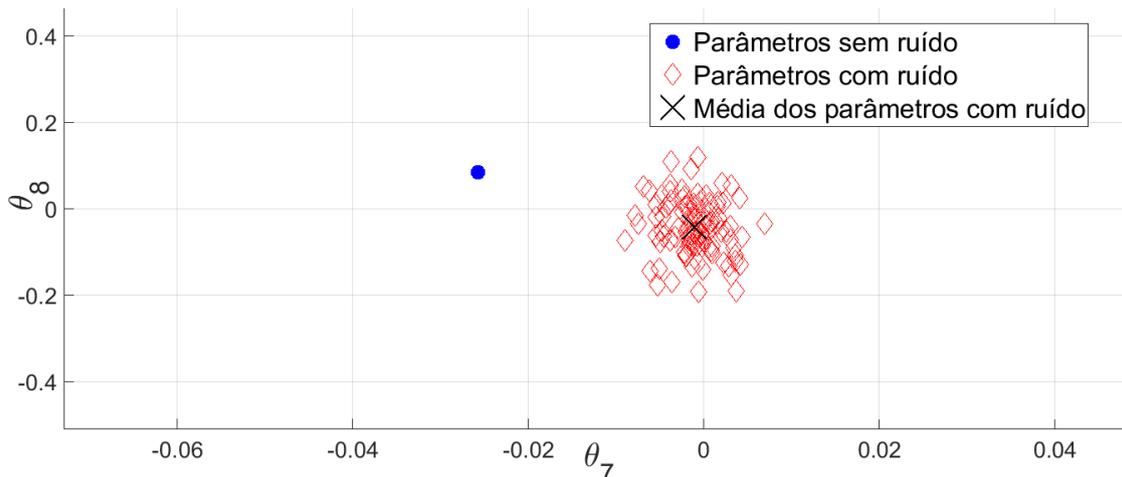


Figura 18: Parâmetros 7 e 8 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle

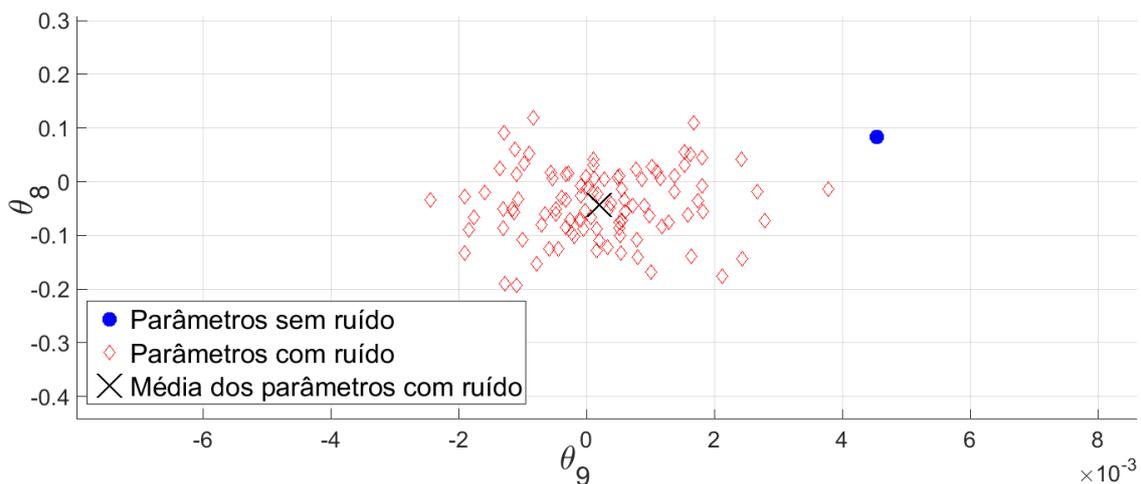


Figura 19: Parâmetros 8 e 9 estimados pelo modelo NAR, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NAR para a simulação Grupo de Controle

Percebemos, a partir das Figuras 15 e 16, que os parâmetros  $\theta_1$  e  $\theta_3$  apresentam polarização, que é o desvio entre o valor dos parâmetros estimados com ruído e os estimados sem ruído. A polarização é mais leve nos parâmetros  $\theta_2$  e  $\theta_4$ , presentes nas mesmas figuras, em que as médias dos parâmetros estimados com ruído estão bastante próximas aos valores dos parâmetros estimados sem ruído (que denominamos simulados).

Já os parâmetros das Figuras 17, 18 e 19 apresentam uma boa proximidade entre os parâmetros estimados sem ruído e a média dos parâmetros estimados com ruído. Esse aspecto fica mais evidente nos parâmetros  $\theta_5$  e  $\theta_9$ , que apresentam diferenças de apenas  $10^{-3}$ . Os parâmetros  $\theta_6$  e  $\theta_8$  também são bastante próximos, tendo diferenças por volta de 0,0350 e 0,100, respectivamente, entre a média dos parâmetros com ruído e os sem ruído.

Por fim, na Figura 20, percebemos que em pouco mais da metade das *MC runs* obtivemos erros relativos menores, entre 19 e 22%, sugerindo que a adequação do modelo NAR não é tão satisfatória para a predição do sistema, se o ruído aplicado

é de aproximadamente 5%.

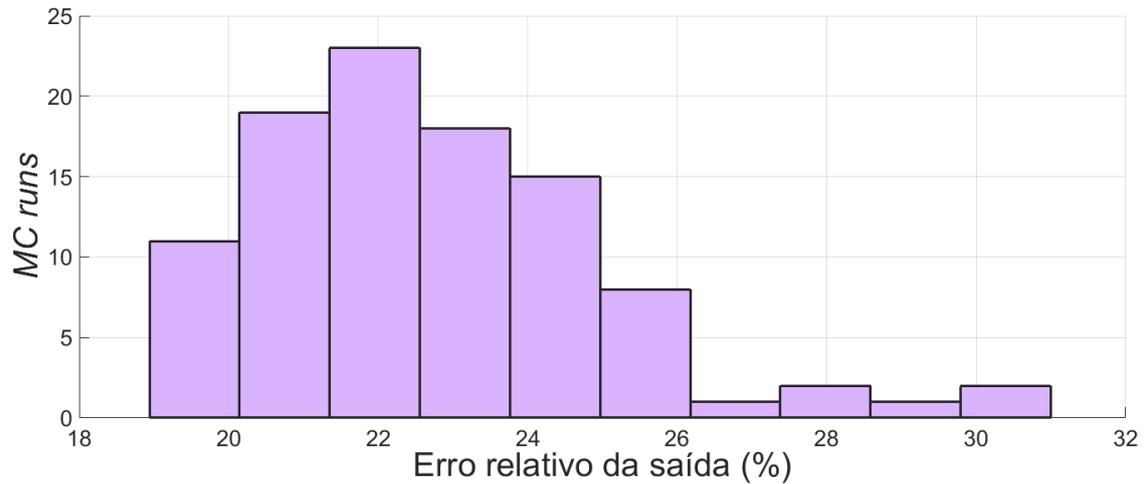


Figura 20: Histograma dos erros relativos da saída para o modelo NAR

### 5.2.1.2 Estimação de parâmetros - modelo NARMA

Apresentaremos a estimação de parâmetros para quando utilizamos o modelo NARMA novamente em duas etapas: a primeira sem ruído e a segunda com ruído para que novamente possamos avaliar e contrastar esses parâmetros estimados em cada caso.

#### 1. Parâmetros estimados para a simulação sem ruído

Os parâmetros estimados a partir do modelo NARMA para o Grupo de Controle sem ruído na medida são expostos na Tabela 5, juntamente com o valor de  $P$ . Nesse caso não há ruído sendo adicionado à saída, porém convém que seja realizada a identificação do ruído pelo termo  $MA$  já que estamos trabalhando com um erro inerente ao modelo, devido ao sistema real não pertencer à classe de modelos estudada.

Tabela 5: Valores dos parâmetros e de  $P$  do Grupo de Controle, sem ruído, calculados a partir do modelo NARMA

$\theta$	Parâmetros - NARMA
$\theta_1$	-1,9737
$\theta_2$	0,0115
$\theta_3$	0,9511
$\theta_4$	-0,0406
$\theta_5$	0,0169
$\theta_6$	0,0348
$\theta_7$	-0,0274
$\theta_8$	0,0135
$\theta_9$	0,0048
$\theta_{10}$	0,8044
$\theta_{11}$	0,2323
$\theta_{12}$	-0,0771
<b>P</b>	0,0092

O valor de  $P$  para o caso NARMA sem ruído é levemente maior do que o para o caso NAR sem ruído. Faremos a seguir uma nova comparação com os parâmetros estimados com ruído quando utilizamos o modelo NARMA.

## 2. Parâmetros estimados para a simulação com ruído

Utilizamos os dados de saída com ruído branco já explanados anteriormente para realizar a estimação dos parâmetros a partir do modelo NARMA. Na Tabela 5 são mostrados os valores médios dos parâmetros estimados para este caso, juntamente com o valor de  $P$  e seus respectivos desvios padrão.

Tabela 6: Média dos parâmetros estimados utilizando 5% de ruído na saída e valor de  $P$  para o modelo NARMA

$\theta$	Média dos parâmetros - NARMA $\pm$ desvio padrão
$\theta_1$	$-0,5290 \pm 0,0067$
$\theta_2$	$-0,0019 \pm 0,0000$
$\theta_3$	$-0,2978 \pm 0,0013$
$\theta_4$	$0,0017 \pm 0,0001$
$\theta_5$	$0,0009 \pm 0,0001$
$\theta_6$	$-0,0010 \pm 0,0001$
$\theta_7$	$0,0004 \pm 0,0001$
$\theta_8$	$-0,1199 \pm 0,0042$
$\theta_9$	$-0,0001 \pm 0,0000$
$\theta_{10}$	$0,3597 \pm 0,0217$
$\theta_{11}$	$0,1688 \pm 0,0121$
$\theta_{12}$	$0,2320 \pm 0,0136$
$P$	$2,7316 \times 10^{-5} \pm 3,0131 \times 10^{-6}$

Novamente obtivemos valores de  $P$  bastante baixos em relação ao caso estimado sem ruído com o modelo NARMA. Como forma de visualizar da melhor maneira possível as diferenças entre os parâmetros, expusemos novamente os valores dos parâmetros estimados com e sem ruído pelo modelo NARMA em gráficos, agrupados de dois a dois nas Figuras 21, 22, 23, 24, 25 e 26.

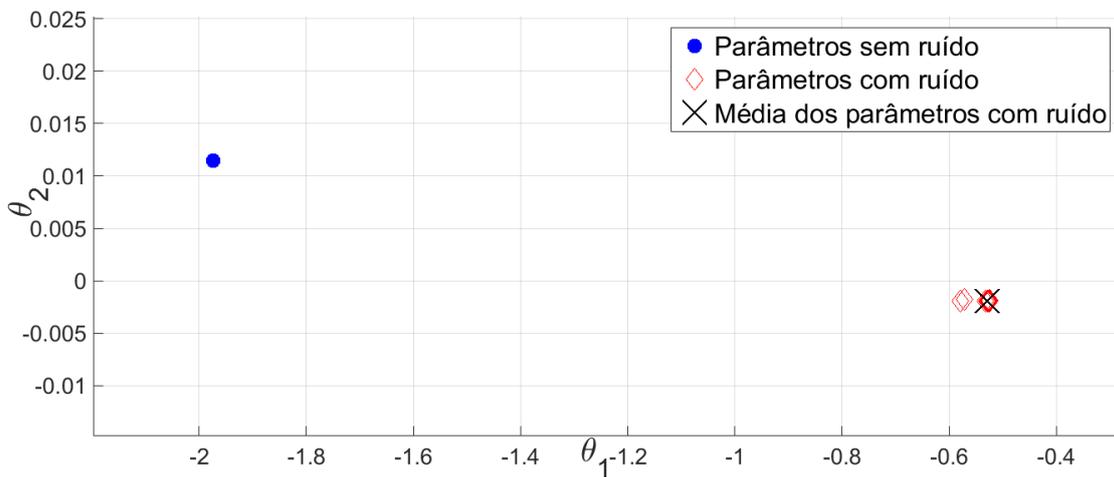


Figura 21: Parâmetros 1 e 2 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

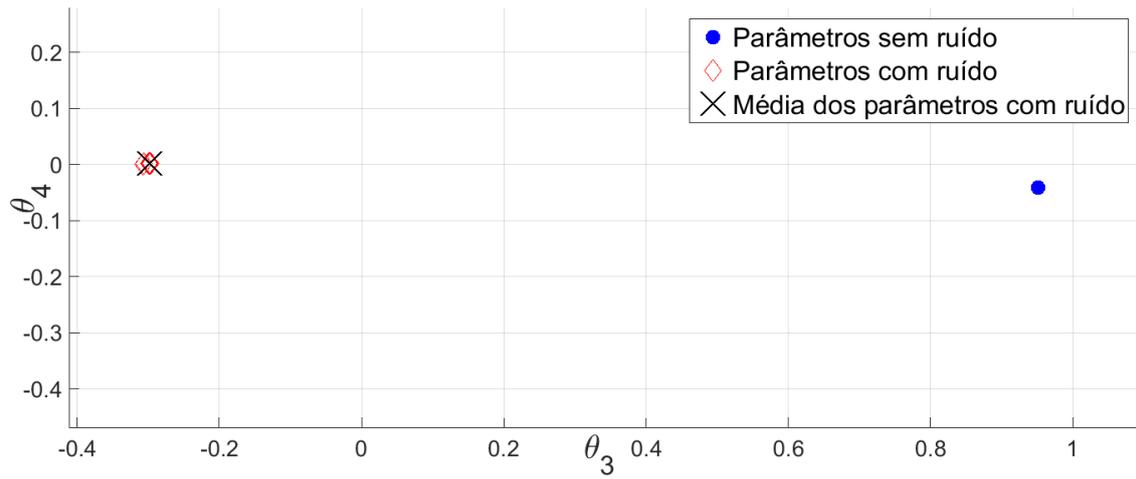


Figura 22: Parâmetros 3 e 4 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

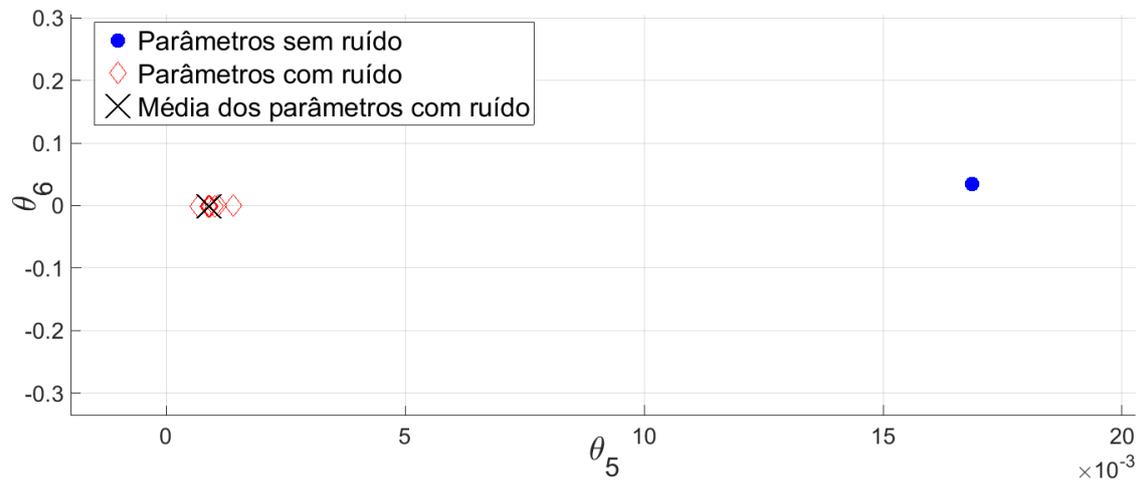


Figura 23: Parâmetros 5 e 6 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

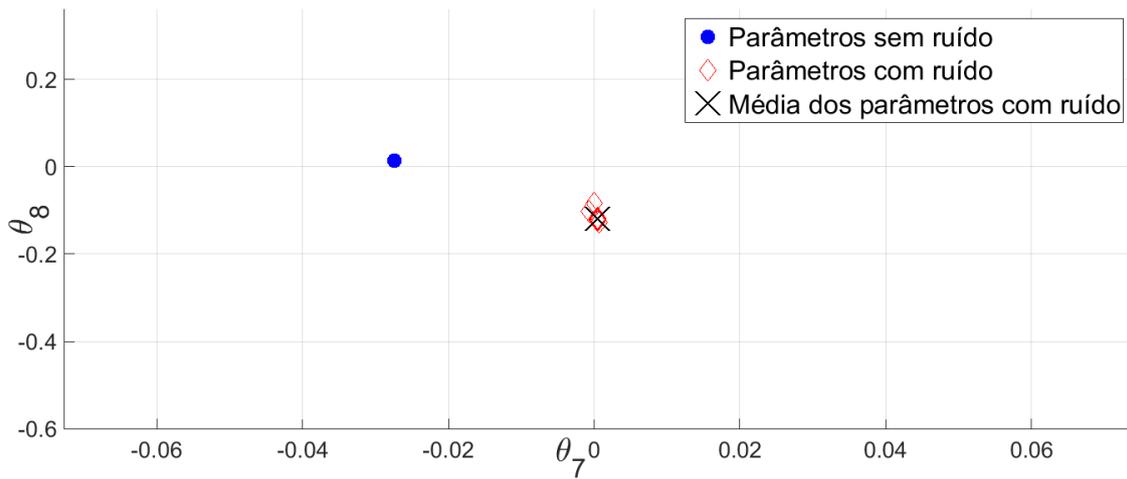


Figura 24: Parâmetros 7 e 8 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

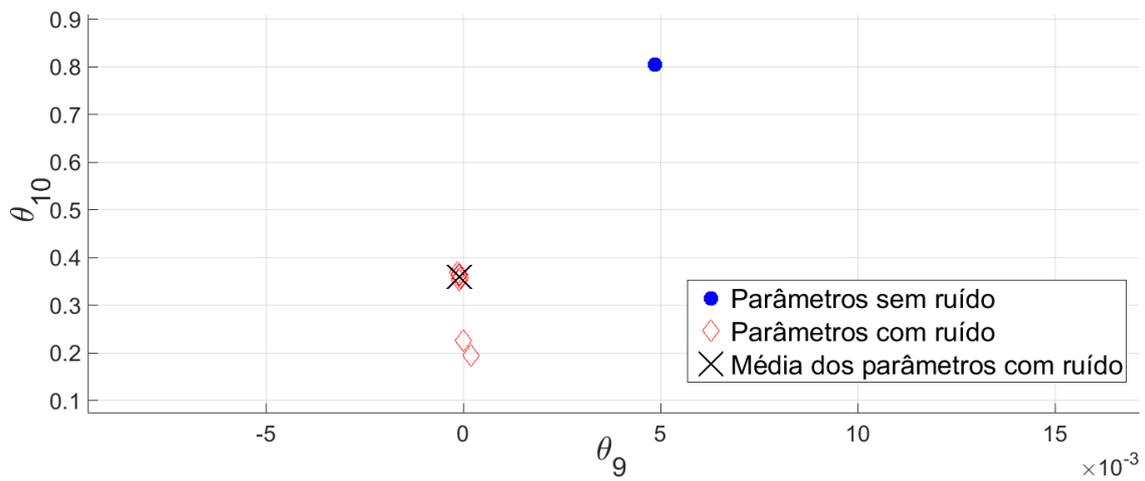


Figura 25: Parâmetros 9 e 10 estimados pelo modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

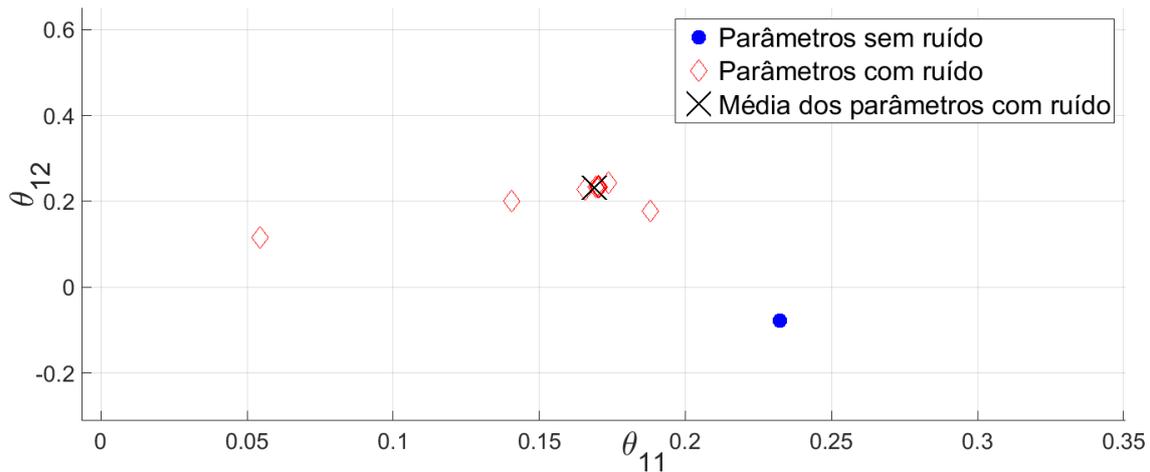


Figura 26: Parâmetros 11 e 12 estimados pelo o modelo NARMA, a média desses parâmetros e os parâmetros estimados pelo modelo NARMA para a simulação Grupo de Controle

Assim como nos resultados para o modelo anterior, obtivemos polarização nos parâmetros  $\theta_1$  e  $\theta_3$ , como pode ser conferido nas Figuras 21 e 22. Além desses, os parâmetros  $\theta_{10}$  e  $\theta_{12}$  também apresentaram polarização, evidenciada nas Figuras 25 e 26.

Os parâmetros  $\theta_2$  (Figura 21),  $\theta_4$  (Figura 22),  $\theta_6$  (Figura 23),  $\theta_7$  e  $\theta_8$  (Figura 24) e  $\theta_{11}$  (Figura 26) apresentam pequenas diferenças entre os parâmetros estimados sem ruído e a média dos parâmetros estimados com ruído. Novamente, os parâmetros  $\theta_5$  (Figura 23) e  $\theta_9$  (Figura 25) são os que apresentam diferenças de apenas  $10^{-3}$ , assim como na análise realizada no modelo NAR. Destacamos ainda que, em todos os parâmetros estimados, obtivemos desvios padrão mais bastante baixos, o que é perceptível nos gráficos das Figuras que estamos analisando. Isso se deve à utilização do modelo NARMA, que exige a implementação do método de mínimos quadrados estendido, que proporcionando a convergência dos parâmetros a cada iteração.

A partir da Figura 27, pode-se visualizar que em pouco mais de 50% das *MC runs* foram obtidos erros relativos entre 7,5 e 8,5%, sugerindo boa adequação do modelo NARMA ao sistema investigado, considerando o ruído adicionado de 5%.

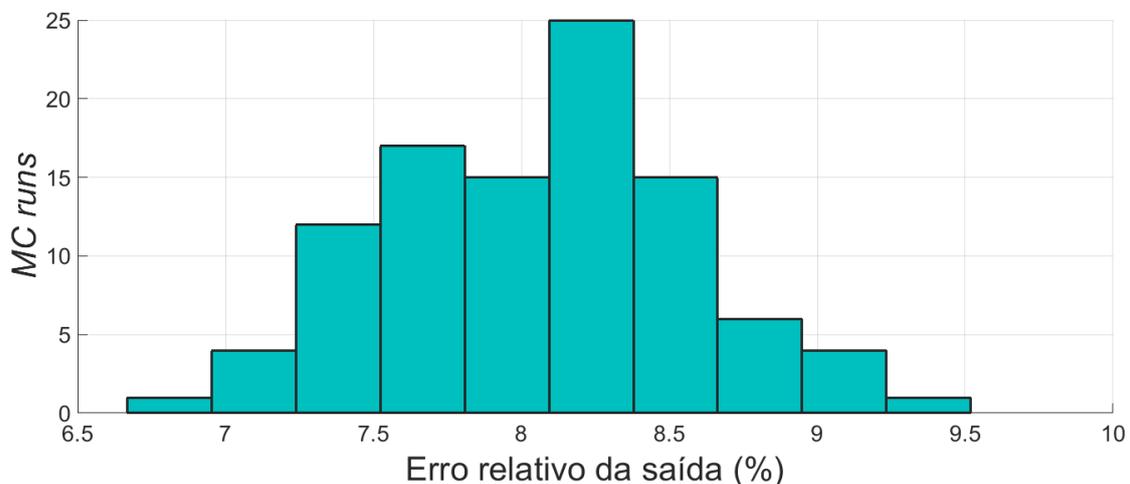


Figura 27: Histograma dos erros relativos da saída para o modelo NARMA

Em problemas lineares, quando um ruído branco é adicionado à saída é esperado que não haja polarização dos parâmetros. Em nosso estudo, como o sistema é não-linear, a polarização de alguns dos parâmetros pode sugerir que nosso experimento não é suficientemente rico em informação. Também pode sugerir que não são necessários tantos regressores e, conseqüentemente, tanto parâmetros nesses modelos. Apesar disso, alguns dos parâmetros não apresentaram essa polarização o que, juntamente com a análise que será abordada a seguir, pode sugerir que os modelos são razoavelmente adequados para a descrição desses sistemas.

Tendo finalizado essa etapa de investigação dos parâmetros relacionados ao sistema de biorreatores utilizando modelos polinomiais caixa-preta do tipo NAR e NARMA passamos a uma nova fase: a investigação sobre o domínio de validade desses modelos.

### 5.2.2 Diferentes condições iniciais - domínio de validade

Depois de realizarmos a estimação dos parâmetros utilizando os dados do Grupo de Controle com e sem ruído na saída, iniciamos o processo de alteração das condições iniciais com a finalidade de validar os modelos NAR e NARMA e de avaliar o domínio de validade desses modelos. Além disso, esse procedimento possibilitou a análise da influência das condições iniciais na produção de metano. Ressaltamos que as simulações apresentadas nesta seção foram realizadas sem adição de ruído na saída do sistema com o objetivo de que apenas o efeito das diferentes condições iniciais fosse observado, sem maiores interferências.

A partir da aplicação do procedimento detalhado no Capítulo 4 sobre a modificação de cada condição inicial, obtivemos 64 simulações diferentes e, por consequência, 64 saídas diferentes. Para ilustrar o efeito que algumas condições iniciais provocam sobre a saída do sistema, na Figura 28 são expostos diferentes comportamentos que a saída ( $q_M$ ) do sistema pode assumir quando são aplicadas diferentes condições iniciais no sistema simulado em comparação com a saída da simulação do Grupo de Controle.

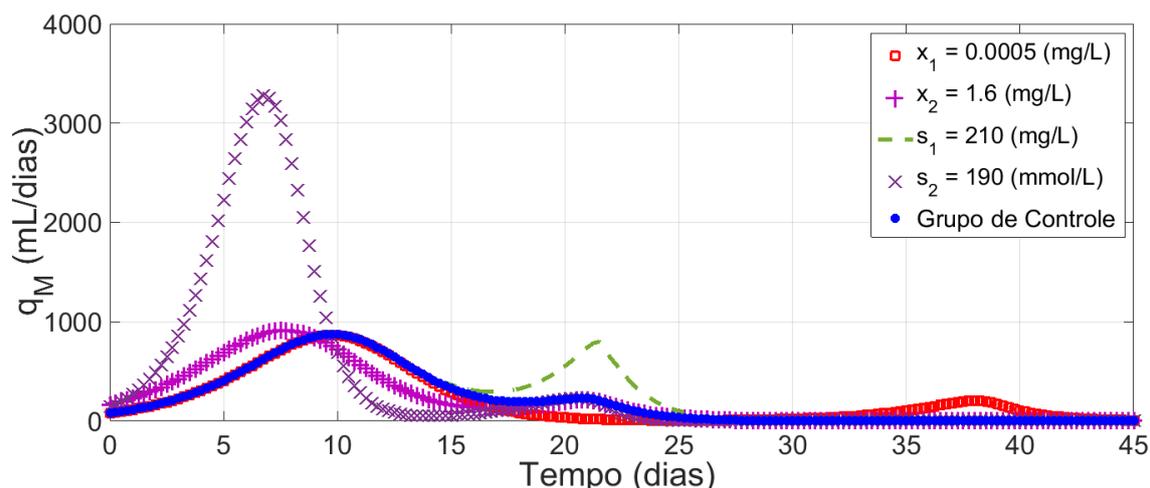


Figura 28: Dinâmica de saída do sistema para diferentes condições iniciais e para o Grupo de Controle. O marcador quadrado é a saída para  $x_1 = 0,0005 \text{ mg/L}$ , o marcador positivo é a saída para  $x_2 = 1,5 \text{ mg/L}$ , o marcador estrela é a saída para  $s_1 = 210 \text{ mg/L}$ , o marcador X é a saída para  $s_2 = 190 \text{ mmol/L}$  e o marcador de círculo é a saída para GC.

Percebe-se, portanto, a partir da Figura 28, que a alteração das condições iniciais acarreta a modificação da saída do sistema e que essa saída pode ser bastante diferente

daquela provocada pelas condições iniciais do GC. Dependendo do caso, há modificações nas fases *lag*, *log*, *estacionária* ou ainda um leve crescimento quando já se está na fase de *declínio*.

A partir da demonstração de que a modificação das condições iniciais implica diretamente na saída do sistema, realizamos uma investigação a partir de cada uma das 64 simulações para verificar o domínio de validade dos modelos polinomiais caixa-preta do tipo NAR e NARMA que propusemos. Essa análise foi baseada no valor do Erro Relativo da saída que, juntamente com o valor de  $P$  e dos desvios padrão dos parâmetros apresentados anteriormente, possibilita a avaliação dos modelos. Apresentaremos a seguir os Erros Relativos que obtivemos para esses dois modelos. Limitamos o valor do Erro Relativo em 6%, dessa forma, as condições iniciais demonstradas proporcionaram erros abaixo desse valor. Os sistemas cujas condições iniciais propiciaram erros acima desse valor foram desconsiderados.

- Condição inicial  $x_1(0)$  - Concentração de bactéria acidogênica

Os valores da concentração de bactéria acidogênica em que obtivemos ER abaixo de 6% foram de 0,0005 a 2,2505 com um passo de 0,15  $mg/L$ , apresentados na Figura 29. É importante lembrar que o valor dessa condição inicial utilizada no Grupo de Controle é de 0,2  $mg/L$ .

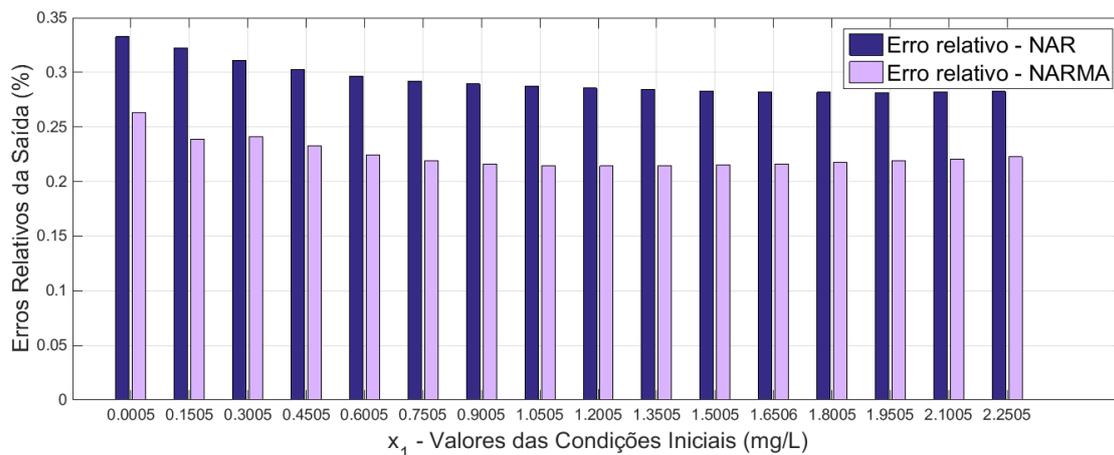


Figura 29: Erro Relativo a cada 0,15  $mg/L$  para a condição inicial  $x_1(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara)

Percebe-se que o Erro Relativo de saída desse processo permanece praticamente constante, o que sugere que tanto o modelo NAR quanto o modelo NARMA são válidos para todas as condições iniciais demonstradas na Figura 29. Além disso, fica evidente que o menor ER do modelo NAR para  $x_1(0)$  corresponde à condição inicial 1,9505  $mg/L$ , 0,28%, e 1,2005  $mg/L$ , com ER de 0,21%, para o modelo NARMA. Esse resultado sugere que há uma ampla gama de valores para a condição inicial  $x_1(0)$  em que esses modelos são válidos.

- Condição inicial  $x_2(0)$  - Concentração de bactéria metanogênica

Alteramos  $x_2(0)$  de 0,2 a 1,6 a cada 0,1  $mg/L$ , novamente limitando o ER dos modelos NAR e NARMA em 6%. A condição inicial correspondente à concentração de bactéria metanogênica utilizada no Grupo de Controle foi de 0,8  $mg/L$ , por

isso esse valor não foi avaliado novamente e não é apresentado no gráfico da Figura 30.

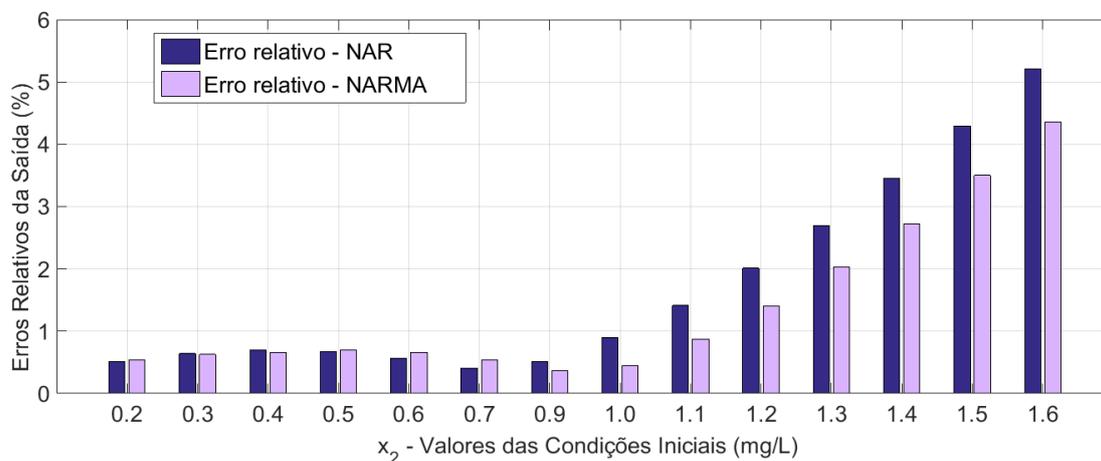


Figura 30: Erro Relativo a cada 0, 10  $mg/L$  para a condição inicial  $x_2(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara)

O menor ER é encontrado quando  $x_2(0) = 0,7 \text{ mg/L}$ , para o modelo NAR, com 0,41%, e 0,9  $mg/L$ , com ER de 0,35%, para o NARMA, como podemos perceber na Figura 30. Observamos ainda que os ER aumentam rapidamente até atingir valores próximos a 6%. Assim, percebe-se que os modelos são válidos, principalmente, entre o intervalo de valores de 0,2 a 1,0  $mg/L$ .

- Condição inicial  $s_1(0)$  - Demanda química de oxigênio

A Figura 31 demonstra os Erros Relativos para quando aplicamos os modelos NAR e NARMA a saídas provocadas por valores da condição inicial  $s_1(0)$  modificados de 50 a 210  $mg/L$ , a cada 10  $mg/L$ . A condição inicial utilizada no Grupo de Controle era de 74  $mg/L$ .

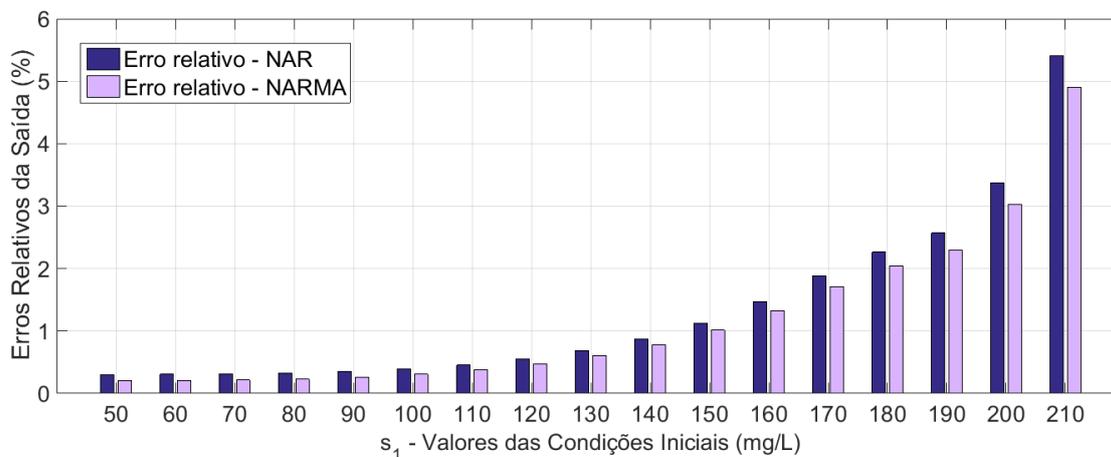


Figura 31: Erro Relativo a cada 0, 10  $mg/L$  para a condição inicial  $s_1(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara)

Os ER representados pelas barras na Figura 31 mostram que o erro cresce com o aumento de  $s_1(0)$ . O menor ER corresponde ao valor de 50  $mg/L$  com 0,30% para

o modelo NAR e de  $60 \text{ mg/L}$  com  $0,20\%$  para o modelo NARMA. Além disso, é bastante evidente que o domínio de validade dos modelos NAR e NARMA para esta condição inicial vai de  $50$  a  $140 \text{ mg/L}$ , que são os valores em que obtivemos os menores ER.

- Condição inicial  $s_2(0)$  - Concentração de ácidos graxos voláteis

Foram modificados, os valores dessa condição inicial a partir de  $30$  até  $190 \text{ mmol/L}$ , a cada  $10 \text{ mmol/L}$ ; sendo a condição inicial utilizada no Grupo de Controle  $93 \text{ mmol/L}$ .

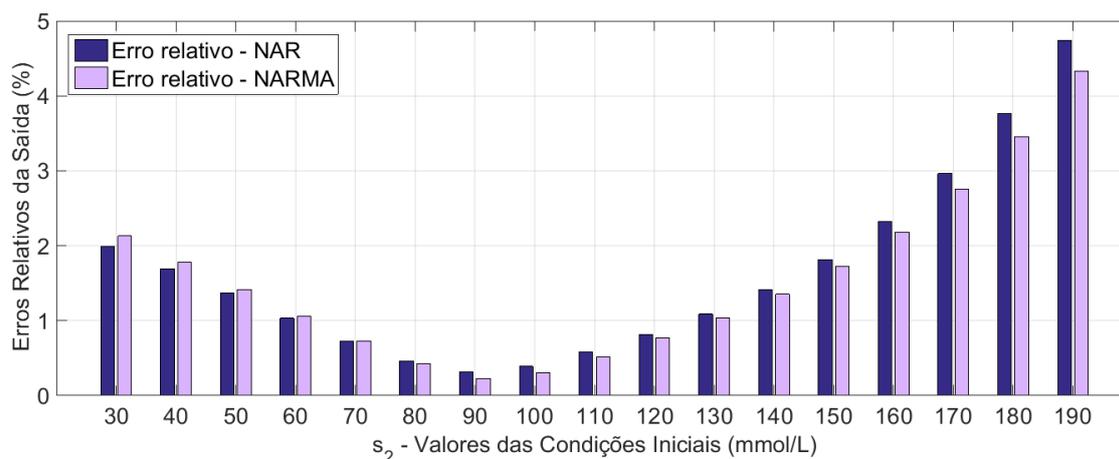


Figura 32: Erro Relativo a cada  $10 \text{ mmol/L}$  para a condição inicial  $s_2(0)$ , com os modelos NAR (barra escura) e NARMA (barra clara)

O perfil do gráfico apresentado na Figura 32 é bastante semelhante ao anterior se considerarmos apenas os valores a partir de  $90 \text{ mmol/L}$ . Os menores erros são  $0,31\%$  e  $0,22\%$  para o valor de  $90 \text{ mmol/L}$  para os modelos NAR e NARMA, respectivamente. Valores baixos do ER para as condições iniciais de  $70$  a  $120 \text{ mmol/L}$  sugerem que este é o melhor intervalo em que os modelos NAR e NARMA são mais adequados.

Com a exceção de  $x_1(0)$ , como o aumento do valor das condições iniciais ( $x_2(0)$ ,  $s_1(0)$  e  $s_2(0)$ ) o ER também aumenta. Outro fato que chama a atenção é que os menores ER encontrados para as condições iniciais  $x_1(0)$ ,  $s_1(0)$  e  $s_2(0)$  para o modelo NAR são menores do que o ER encontrado para o Grupo de Controle. O mesmo vale para a condição inicial  $s_1(0)$  em relação ao modelo NARMA em comparação com a condição inicial utilizada no Grupo de Controle.

A partir da avaliação dos nossos resultados obtidos, é possível observar que os modelos NAR e NARMA são bastante robustos, principalmente no que diz respeito à saída proporcionada pela condição inicial  $x_1(0)$ , já que a variação dessa condição inicial têm pouco efeito no ER desses modelos. Condensamos as informações sobre o domínio de validade dos modelos na Tabela 7, em que apresentamos o intervalo de concentração em que obtivemos erros menores de  $1\%$ .

Tabela 7: Domínio de validade dos modelos NAR e NARMA para erros relativos abaixo de 1%

Condição inicial	Intervalo para os modelos NAR e NARMA
$x_1(0)$	0,0005 – 2,2505 (mg/L)
$x_2(0)$	0,2 – 1,0 (mg/L)
$s_1(0)$	50 – 140 (mg/L)
$s_2(0)$	70 – 120 (mmol/l)

Reagrupamos as informações sobre as condições iniciais que resultaram em menores erros relativos para o modelo NAR na Tabela 8 e para o modelo NARMA na Tabela 9:

Tabela 8: Valores das condições iniciais em que foram obtidos os menores ER para o modelo NAR

Condição inicial	Valores
$x_1(0)$	1,9505 (mg/L)
$x_2(0)$	0,70 (mg/L)
$s_1(0)$	50 (mg/L)
$s_2(0)$	90 (mmol/L)

Tabela 9: Valores das condições iniciais em que foram obtidos os menores ER para o modelo NARMA

Condição inicial	Valores
$x_1(0)$	1,2005 (mg/L)
$x_2(0)$	0,90 (mg/L)
$s_1(0)$	60 (mg/L)
$s_2(0)$	90 (mmol/L)

Apesar de essas serem as condições iniciais cuja saída proporcionou o menor erro relativo para os modelos caixa-preta que propusemos, nada indica que se utilizarmos esse conjunto de valores haverá uma melhora e/ou aumento na produção de metano. Trataremos deste assunto a seguir.

### 5.2.3 Produção de Metano

A partir das condições iniciais apresentadas nas Tabelas 8 e 9, calculamos a produção de metano para cada uma das saídas proporcionadas por esses casos. Nas Tabelas 10 e 11 apresentamos esses resultados a fim de realizar comparações entre as produções de metano previstas por cada modelo.

A Tabela 10 mostra os resultados da simulação para o total de metano produzido utilizando os modelos caixa-preta NAR e NARMA propostos nesse trabalho a partir das condições iniciais para as quais obtivemos os menores ER. Os valores de metano produzido apresentados na Tabela 11 foram calculados com base nas mesmas condições iniciais

Tabela 10: Produção de metano (em  $mL$ ) para as condições iniciais com menor ER e para o Grupo de Controle para os modelos NAR e NARMA

$CI$	Produção total de metano	
	NAR	NARMA
$x_1(0)$	$9,5400 \times 10^3$	$9,5408 \times 10^3$
$x_2(0)$	$1,0585 \times 10^4$	$9,5408 \times 10^3$
$s_1(0)$	$9,1136 \times 10^3$	$9,5408 \times 10^3$
$s_2(0)$	$9,2755 \times 10^3$	$9,5408 \times 10^3$
CG	$9,5407 \times 10^3$	$9,5408 \times 10^3$

Tabela 11: Produção de metano (em  $mL$ ) para as condições iniciais com menor ER e para o Grupo de Controle para o macro modelo balanço de massa

$CI$	Produção total de metano	
	Balanço de massa CI - Tabela (8)	Balanço de massa CI - Tabela (9)
$x_1(0)$	$9,5509 \times 10^3$	$9,5509 \times 10^3$
$x_2(0)$	$9,5509 \times 10^3$	$9,5509 \times 10^3$
$s_1(0)$	$9,1235 \times 10^3$	$9,3016 \times 10^3$
$s_2(0)$	$9,2853 \times 10^3$	$9,2853 \times 10^3$
CG	$9,5509 \times 10^3$	$9,5509 \times 10^3$

da tabela anterior, utilizando o modelo caixa-cinza, macro modelo de balanço de massa (Equação (43)), para fins de comparação.

Analisando os resultados dos valores da produção de metano obtidos para cada condição inicial para os casos NAR e NARMA, a partir da Tabela 10, percebemos a diferença máxima de 10,95% para  $x_2(0)$  e a mínima de 4,48% para  $s_1(0)$  para o caso NAR em relação ao Grupo de Controle. Para o modelo NARMA não há diferença significativa entre as produções de metano para valores de condições iniciais diferentes em relação ao Grupo de Controle. Para o macro modelo de balanço de massa, Tabela 11, comparado aos modelos NAR e NARMA, essas diferenças são muito menores em relação ao modelo NAR: com diferença máxima de 4,47% e mínima de 2,78%. Observe que mesmo modificando as condições iniciais  $x_1(0)$  e  $x_2(0)$  a mesma produção de metano do Grupo de Controle é obtida.

### 5.3 Resultados do Experimento

Da mesma maneira como nas seções anteriores, os métodos de MQ e MQE para os modelos NAR e NARMA foram utilizados para estimação dos parâmetros do sistema experimental e validação dos modelos. Apresentamos na Tabela 12 esses parâmetros para os modelos caixa-preta propostos.

Comparando os valores dos parâmetros estimados entre os modelos NAR e NARMA percebemos grandes semelhanças entre os parâmetros  $\theta_2, \theta_4, \theta_5, \theta_6, \theta_7$  e  $\theta_9$ . Além disso, o valor obtido para  $P$  é menor do que os que obtivemos utilizando dados simulados com

Tabela 12: Valores dos parâmetros estimados e de  $P$  para os dados experimentais com os modelos NAR e NARMA.

$\theta$	Parâmetros - NAR	Parâmetros - NARMA
$\theta_1$	-0,1209	-0,2228
$\theta_2$	-0,0005	-0,0005
$\theta_3$	-0,4840	-0,6127
$\theta_4$	0,0014	0,0013
$\theta_5$	-0,0008	-0,0006
$\theta_6$	0,0006	0,0007
$\theta_7$	-0,0026	-0,0027
$\theta_8$	-0,4594	-0,2349
$\theta_9$	0,0019	0,0019
$\theta_{10}$	-	-0,1161
$\theta_{11}$	-	-0,1565
$\theta_{12}$	-	0,1912
$P$	$2,7928 \times 10^{-6}$	$1,6953 \times 10^{-5}$

ruído e o modelo NAR. Já para o modelo NARMA, o valor de  $P$  é bastante semelhante ao caso simulado com ruído.

Os dados experimentais obtidos a partir do processo em escala de laboratório, mencionados na seção 4.2, também foram utilizados para validar os modelos NAR e NARMA. As saídas estimadas para esses modelos e a saída real (dados experimentais) são apresentadas na Figura 33.

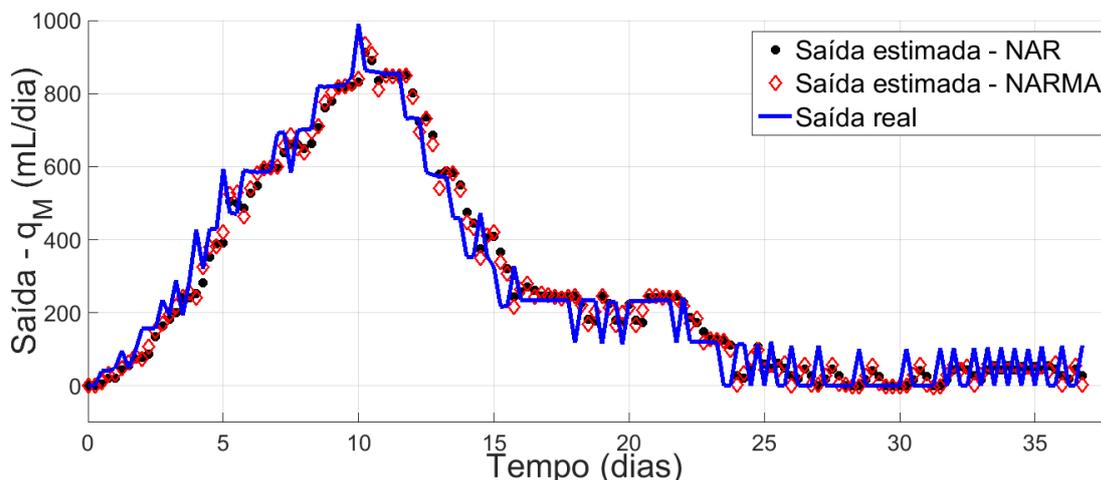


Figura 33: Medidas da saída do sistema real (linha contínua) e medidas estimadas pelo modelo NAR (pontos) e pelo modelo NARMA (losangos).

O Erro Relativo da saída dos dados experimentais para os modelos NAR e NARMA são 17,74% e 17,01%, respectivamente. A Figura 33 destaca as diferenças entre as saídas estimadas e a saída do processo real. Embora o Erro Relativo seja relativamente elevado, é importante destacar que os dados experimentais possuem bastante ruído devido ao método de medição e à precisão dos sensores, que podem levar a grandes discrepâncias entre os valores reais e os estimados a partir dos modelos.



## 6 CONCLUSÕES

A modelagem de sistemas reais é realizada para obter como resultado uma representação simplificada, possibilitando o estudo destes processos. Apesar disso, ao realizarmos o processo de modelagem, podemos utilizar modelos que apresentam de alta a moderada complexidade, dependendo da finalidade da investigação. Um modelo bastante difundido na literatura para representar biorreatores em modo de fermentação descontínua em processo de digestão anaeróbia é o macro modelo de balanço de massa de BERNARD et al. (2001). Devido à complexidade, à demora no quesito implementação matemática e computacional e à possibilidade de não identificação dos parâmetros, esse modelo caixa-cinza nos motivou a buscar modelos alternativos mais simples. Como nosso objetivo é realizar a predição da produção de metano em biorreatores descontínuos, convém utilizar modelos do tipo caixa-preta, que, além de não depender dos fatores internos envolvidos no sistema, ainda permite a identificação dos parâmetros utilizando métodos vastamente utilizados.

Estudamos diversos tipos de modelos para avaliar qual seria o mais adequado para descrever um sistema que não possui entradas, mas apenas condições iniciais e saída. A partir de nossas investigações, concluímos que os modelos AR, ARMA, NAR e NARMA possuem essas características. De forma a tentar descrever o sistema satisfatoriamente, como estamos trabalhando com crescimento de organismos vivos, é importante considerar a não-linearidade desses processos. Dessa forma, nossa proposta foi utilizar modelos polinomiais caixa-preta dos tipos NAR e NARMA para descrever esse tipo de sistema e realizar a predição da produção metano.

Também realizamos estudos no âmbito da teoria da identificação de sistemas para avaliar como seriam realizadas as estimações de parâmetros e validações do modelo. Concluímos que, para os modelos caixa-preta com os quais optamos por trabalhar, que têm como vantagem a garantia a identificação dos parâmetros do sistema, seria conveniente utilizar os métodos de Mínimos Quadrados e de Mínimos Quadrados Estendido, amplamente difundidos. Por isso, elaboramos rotinas no *software* Matlab com o intuito de realizar o processo de identificação de sistemas.

Além de dados experimentais reais, achamos conveniente desenvolver simulações computacionais para que pudéssemos analisar uma quantidade maior, diversificada e controlada de dados, a partir da modificação das condições iniciais do sistema. Baseados em nossos experimentos, observamos que os resultados obtidos a partir da teoria de identificação de sistemas apontam que os modelos polinomiais caixa-preta NAR e NARMA são bastante adequados para descrever os processos, apesar de os dados que obtivemos não serem completamente ricos em informação, acarretando em algumas polarizações de parâmetros. Além disso, nossos resultados indicam que os modelos caixa-preta têm amplo domínio de validade.

Ainda, com as condições iniciais que julgamos as mais adequadas para cada um dos

modelos, obtivemos valores de produção de metano bastante semelhantes aos calculados para o modelo caixa-cinza com nossos modelos caixa-preta.

Por fim, salientamos que nossa pesquisa abre precedentes para que seja realizada a implementação das condições iniciais em que foram obtidos os menores erros relativos em biorreatores reais, para corroborarmos o domínio de validade dos modelos. Além disso, pretendemos realizar novas simulações para outras modalidades de biorreatores e implementar todas as etapas mencionadas na Metodologia novamente para outros modelos caixa-preta, do tipo racional, por exemplo, e/ou ampliar a ordem e a potência dos modelos que propusemos.

## REFERÊNCIAS

- AGUIRRE, L. A. **Introdução à identificação de sistemas**. 4. ed. Belo Horizonte: Editora da UFMG, 2007.
- AGUIRRE, L. A.; RODRIGUES, G.; JACÓME, C. R. F. Identificação de sistemas não-lineares utilizando modelos NARMAX polinomiais - uma revisão e novos resultados. **SBA Controle e Automação**, Campinas, v. 9, n. 2, p. 90-106, Ago. 2008.
- ALTERTHUMM, F. Elementos de microbiologia. In: BORZANI, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 1, cap. 1, p. 1.
- ALVES, F. **Modelagem e simulação de biorreator operando com fungos trametes versicolor para produção de enzima lacase**. 2010. 91 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos) - Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos Químicos e Bioquímicos, Instituto Mauá de Tecnologia, São Caetano do Sul, 2010.
- ANEEL. **Relatório Agência Nacional de Energia Elétrica - ANEEL**. Disponível em: <<http://aneel.gov.br/arquivos/pdf/>>. Acesso em: 01 set. 2015.
- ANTONELLI, R. et al. Set-Point Regulation of an Anaerobic Digestion Process with Bounded Output Feedback. **IEEE Transactions on Control Systems Technology**, [S. l.], v. 11, n. 4, p. 495-504, Jul. 2003.
- BASTIN, G.; DOCHAIN, D. **On-line estimation and adaptative control of bioreactors**. [S. l.], Elsevier, 1990.
- BATSTONE, D. et al. The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). **Water Science and Technology**, Londres, v. 45, n. 10, p.65–73, Jan. 2002.
- BERNARD, O. et al. Dynamical Model Development and Parameter Identification for an Anaerobic Wastewater Treatment Process. **Biotechnology and Bioengineering**, Nova Iorque, v. 75, n. 4, p. 424-438, Nov. 2001.
- BILLINGS, S. A. **Nonlinear System Identification**. Chichester: Wiley, 2013.

- BORÉM, A. A História da Biotecnologia. **Biotecnologia Ciência e Desenvolvimento**, [S. l.], n. 34, p. 10-12, Jun. 2005.
- BORZANI, W. Processo Biotecnológico Industrial Genérico. In: BORZANI, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v.1 cap. 9, p. 249-252.
- BORZANI, W. Fermentação semi-contínua. In: SCHMIDELL, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 2, cap. 11, p. 219-222.
- BUNGE, M. **Teoria e Realidade**. São Paulo: Perspectiva, 1974.
- CAMPESTRINI, L. et al. Identifiability Analysis and Prediction Error Identification of Anaerobic Batch Bioreactors. **Journal of Control, Automation and Electrical Systems**, Campinas, v. 25, n. 4, p. 438-447, Apr. 2014.
- CARVALHO, J. C. M. de; SATO, S. Fermentação descontínua. In: SCHMIDELL, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 2, cap. 9, p. 193-204.
- CHEN, L. et al. The progress and prospects of rural biogas production in China. **Energy Policy**, [S. l.], v. 51, p. 58–63, Dec. 2012.
- DOCHAIN, D. **Automatic Control of Bioprocesses**. Chichester: Wiley, 2008.
- DONOSO-BRAVO, A. et al. Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: a review. **Water Research**, [S. l.], v. 45, n. 17, p. 5347-5364, Sept. 2011.
- EGRÉ, D.; MILEWSKI, J. C. The diversity of hydropower projects. **Energy Policy**, [S. l.], v. 30, n. 14, p. 1225–1230, Nov. 2002.
- EPE. **Relatório da Empresa de Pesquisa Energética - EPE**. Disponível em: <<http://www.epe.gov.br/Paginas/default.aspx>>. Acesso em: 01 set. 2015.
- FACCIOTTI, M. C. R. Fermentação contínua. In: SCHMIDELL, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 2, cap. 12, p. 223-245.
- FERGUNSON, R.; WILKINSON, W.; HILL, R. Electricity use and economic development. **Energy Policy**, v. 28, n. 13, p. 923–934, Nov. 2000.
- HAAG, J. E.; WOUWER, A. V.; QUEINNEC, I. Macroscopic modelling and identification of an anaerobic waste treatment process. **Chemical Engineering Science**, [S. l.], v.58, p.4307–4316, May 2003.
- HENSON, M. A. Biochemical reactor modeling and control. **IEEE Control System Magazine**, [S. l.], v. 26, n. 4, p.54–62, Aug. 2006.

JUNK, W. J.; MELLO, J. A. S. N. de. Impactos ecológicos das represas hidrelétricas na bacia amazônica brasileira. **Estudos Avançados**, São Paulo, v. 4, n. 8, p. 126-143, Abr. 1990.

KASPEROWICZ, R. Economic growth and energy consumption in 12 European countries: a panel data approach. **Journal of International Studies**, [S. l.], v. 7, n. 3, p. 112-122, Oct. 2014.

KIM, Y. S. Electricity consumption and economic development: are countries converging to a common trend? **Energy Economics**, v. 49, p. 192-202, May 2015.

KNIGHT, R. D. **Física: uma abordagem estratégica**. Porto Alegre: Bookman, 2009. v.2.

LJUNG, L. **System Identification: theory for the user**. 2nd. ed. Nova Jersey: Prentice Hall PTR, 1999.

MORGADO, A. C. et al. **Análise Combinatória e Probabilidade**. Rio de Janeiro: SBM, 1991.

SANTOS COELHO, L. dos; SANTOS, A. A. P.; COSTA JR., N. C. A. da. Podemos prever a taxa de câmbio brasileira? Evidência empírica utilizando inteligência computacional e modelos econométricos. **Gestão e Produção**, São Carlos, v.15, n. 3, p.635–647, Dez. 2008.

SCHMIDELL, W.; FACCIOTTI, M. C. R. Biorreatores e processos fermentativos. In: SCHMIDELL, W. et al.. **Biotecnologia Industrial: engenharia bioquímica**. São Paulo: Edgard Blücher, 2001. v. 2, cap. 8, p. 179-190.

SJÖBERG, J. et al. Nonlinear black-box modeling in system identification: a unified overview. **Automatica**, [S. l.], v. 31, n. 12, p. 1691-1724, Jun. 1995.

SLOTINE, J.-J. E.; LI, W. **Applied Nonlinear Control**. Nova Jersey: Prentice Hall, 1991.

SMITH, J. E. **Biotechnology**. Cambridge: Cambridge, 2009.

SÖDERSTRÖM, T.; STOICA, P. **System Identification**. Cambridge: Prentice Hall, 1988.

SORENSEN, H. W. Least-squares estimation: from gauss to kalman. **IEEE Spectrum**, v. 7, n. 7, p. 63-68, Jul. 1970.



## APÊNDICE A PARÂMETROS DOS MODELOS NAR E NARMA

Tabela 13: Testes realizados para avaliar a contribuição de cada regressor e cada parâmetro - modelo NAR de terceira ordem com 100 amostras

<i>Regressores</i>	$\theta - T_{19}$	$\theta - T_{18}$	$\theta - T_{17}$	$\theta - T_{16}$	$\theta - T_{15}$	$\theta - T_{14}$	$\theta - T_{13}$	$\theta - T_{12}$	$\theta - T_{11}$
$y[k-1]$	-43,9443	2,2000	7,9470	-2,1525	0,9186	0,9226	-0,4833	-0,4907	-0,4344
$y[k-1]^2$	0,8984	-0,2088	-0,3764	0,0139	-0,0232	-0,0232	-0,0062	-0,0061	-0,0068
$y[k-2]$	83,3655	-7,0566	-18,3192	1,4743	-4,5252	-4,5325	-1,9075	-1,8956	-2,0541
$y[k-1]y[k-2]$	-3,5010	0,8153	1,4844	-0,1026	0,0291	0,0289	0,0014	0,0017	0,0030
$y[k-1]y[k-3]$	1,8821	-0,4238	-0,7822	0,0657	-0,0021	-0,0018	-0,0020	-0,0029	-0,0049
$y[k-2]^2$	3,3824	-0,8000	-1,4674	0,1502	0,0364	0,0372	0,0227	0,0224	0,0237
$y[k-2]y[k-3]$	-3,6098	0,8345	1,5478	-0,1804	-0,0648	-0,0660	-0,0212	-0,0198	-0,0195
$y[k-3]$	-39,8673	3,8232	9,2680	-0,3079	2,5706	2,5738	1,3735	1,3695	1,4766
$y[k-3]^2$	0,9444	-0,2169	-0,4053	0,0530	0,0247	0,0252	0,0053	0,0049	0,0045
$y[k-1]^3$	-0,0045	0,0020	0,0032						
$y[k-1]^2y[k-2]$	0,0137	-0,0059	-0,0094	0,0002					
$y[k-1]^2y[k-3]$	-0,0020								
$y[k-1]y[k-2]^2$	0,0071	0,0008							
$y[k-1]y[k-2]y[k-3]$	-0,0355	0,0096	0,0177	-0,0012	0,0002	0,0002	0,0000	0,0000	0,0000
$y[k-1]y[k-3]^2$	0,0184	-0,0046	-0,0086	0,0008	-0,0001	-0,0002	-0,0000	-0,0000	-0,0000
$y[k-2]^3$	-0,0313	0,0059	0,0118	-0,0009	-0,0001	-0,0001	-0,0000	-0,0000	-0,0000
$y[k-2]^2y[k-3]$	0,0817	-0,0181	-0,0345	0,0035	-0,0000	-0,0000			
$y[k-2]y[k-3]^2$	-0,0622	0,0131	0,0253	-0,0032	0,0002	0,0002	0,0000		
$y[k-3]^3$	0,0144	-0,0027	-0,0055	0,0008	-0,0001	-0,0000			
P	Singular								
Erro Relativo	0,26%	0,25%	0,26%	0,26%	0,26%	0,26%	0,27%	0,27%	0,27%

$\theta - T_{10}$	$\theta - T_9$	$\theta - T_8$	$\theta - T_7$	$\theta - T_6$	$\theta - T_5$	$\theta - T_4$	$\theta - T_3$	$\theta - T_2$
-0,2346	-2,4246	-2,0468	-1,5748	-1,7766	-1,3041	-1,4724	-1,4849	-1,4485
-0,0092	0,0172	0,0126	0,0068	0,0076				
-2,5203	1,8180	1,0767	0,1492	0,7259	0,0359	0,0364	0,0728	
0,0063	-0,0502	-0,0390	-0,0197	-0,0156	-0,0007			
-0,0000	0,0152	0,0117						
0,0245	0,0311	0,0283	0,0190	0,0079	0,0007	0,0000		
-0,0304	-0,0109	-0,0137	-0,0061					
1,7288	-0,3933	-0,0301	0,4256	0,0266	0,2606	0,4272	0,4151	0,4516
0,0091	-0,0024							
-0,0000								
Singular	Não-singular							
0,31%	0,32%	0,35%	0,83%	1,10%	1,35%	1,40%	1,40%	4,32%

Tabela 14: Testes realizados para avaliar a contribuição de cada regressor e cada parâmetro - modelo NARMA de terceira ordem com 100 amostras

Regressores	$\theta - T_{22}$	$\theta - T_{21}$	$\theta - T_{20}$	$\theta - T_{19}$	$\theta - T_{18}$	$\theta - T_{17}$	$\theta - T_{16}$	$\theta - T_{15}$	$\theta - T_{12}$
$y[k-1]$	-3,0909	13,2499	12,6563	-1,9342	0,1516	0,4168	-0,5087	-0,5333	-2,5288
$y[k-1]^2$	-0,0241	-0,8429	0,4583	0,0113	-0,0139	-0,0171	-0,0059	-0,0056	0,0184
$y[k-2]$	3,2907	-28,7503	22,0372	0,9980	-3,1121	-3,6291	-1,8480	-1,8125	2,0219
$y[k-1]y[k-2]$	0,0663	3,2389	-1,7972	-0,0736	0,0181	0,0247	-0,0023	-0,0015	-0,0536
$y[k-1]y[k-3]$	-0,0192	-1,6362	0,9250	0,0417	-0,0088	-0,0106	0,0052	0,0021	0,0169
$y[k-2]^2$	-0,0409	-3,0864	1,7460	0,1028	0,0237	0,0241	0,0246	0,0237	0,0322
$y[k-2]y[k-3]$	0,0172	3,0962	-1,7821	-0,1138	-0,0293	-0,0336	-0,0294	-0,0252	-0,0112
$y[k-3]$	14,3199	3,8232	-10,2425	-0,05799	1,9345	2,1824	1,3343	1,3244	-0,4941
$y[k-3]^2$	0,0006	-0,7685	0,4491	0,0316	0,0103	0,0126	0,0079	0,0065	-0,0027
$y[k-1]^3$	0,0006	0,0081	-0,0038						
$y[k-1]^2y[k-2]$	-0,0021	-0,0356	0,0176	0,0004	0,0000				
$y[k-1]^2y[k-3]$	0,0003	0,0150	-0,0083	-0,0004	0,0000	0,0000			
$y[k-1]y[k-2]^2$	0,0026	0,0402	-0,0195	-0,0009	-0,0000	-0,0000	0,0000	0,0000	
$y[k-1]y[k-2]y[k-3]$	-0,0008	-0,0232	0,0125	0,0009	-0,0000	-0,0001	-0,0000	-0,0000	
$y[k-1]y[k-3]^2$	0,0000								
$y[k-2]^3$	-0,0012	-0,0033							
$y[k-2]^2y[k-3]$	0,0010	-0,0170	0,0114	0,0008	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	
$y[k-2]y[k-3]^2$	-0,0006	0,0222	-0,0138	-0,0012	-0,0002	-0,0000	-0,0000	-0,0000	
$y[k-3]^3$	0,0002	-0,0064	0,0040	0,0004					
$e[k-1]^3$	0,7963	0,6461	0,8057	0,8019	0,8062	0,8059	0,8136	0,8130	0,8804
$e[k-2]^3$	-0,2560	-0,2099	-0,2582	-0,2568	-0,2603	-0,2606	-0,2618	-0,2626	-0,2867
$e[k-3]^3$	0,1157	0,0551	0,1198	0,1198	0,1191	0,1184	0,1263	0,1240	0,1465
P	Singular	Não-singular							
Erro Relativo	0,17%	0,19%	0,29%	0,17%	0,17%	0,17%	0,17%	0,17%	0,19%

$\theta - T_{11}$	$\theta - T_{10}$	$\theta - T_9$	$\theta - T_8$	$\theta - T_7$	$\theta - T_6$	$\theta - T_5$	$\theta - T_4$
-2,1222	-1,5941	-1,1392	-1,3278	-1,4403	-1,4547	-1,4463	-0,9986
0,0135	0,0070						
1,2287	0,1893	-0,5074	0,0364	-0,0204	0,0172		
-0,0417	-0,0199	-0,0066					
0,0134							
0,0294	0,0188	0,0128	-0,0006				
-0,0146	-0,0059	-0,0063	0,0006	0,0000			
-0,1078	0,4032	0,6617	0,2822	0,4501	0,4407	0,4495	
0,0091	-0,0024						
0,8895	0,9200	0,9979	0,9550	0,9453	0,9463	0,9778	1,5206
-0,2891	-0,3004	0,2663	0,1544	0,1222	0,1256	0,0691	-0,2021
0,1617	0,1902	-0,3613	-0,1817	-0,1274	-0,1261	-0,1078	-0,3341
Não-singular	Não-singular	Não-singular	Não-singular	Não-singular	Não-singular	Não-singular	Não-singular
0,19%	0,21%	0,32%	0,28%	0,28%	0,28%	0,25%	0,63%

## APÊNDICE B SIMULAÇÃO DE BIORREATORES EM MODO DESCONTÍNUO EM PROCESSO DE DIGESTÃO ANAERÓBIA

```

function [system,x0] = AD_bioreactor(time,state,input,flag)

%%Condições iniciais

x0 = [ 0.2;          0.8;          74;          93];

switch (flag)

%Initialization, return system sizes in output function system

case 0,

% Configuration
%[NumberStates|NumberDiscreteStates|NumberOutputs|NumberInput|0|0]
system = [4 0 5 0 0 0];

case 1, %Return continuous state derivatives in system
    %Estados
    X1 = state(1); %Acidogenic Bacteria
    X2 = state(2); %Methanogenic Bacteria
    S1 = state(3); %COD
    S2 = state(4); %VFA

%Inputs
%Model Parameters

%Maximum acidogenic biomass growth rate [day-1]
uS1_max = 0.42912;
%Maximum methanogenic biomass growth rate [day-1]
uS2_max = 2.6493;
%Half-saturation constant (Acidogenic growth) [g/L]
K_S1 = 13.065;
%Half-saturation constant (Methanogenic growth) [mmol/L]
K_S2 = 571.27;

%Yield coefficients
k1 = 0.31204; %Yield for COD degradation
k2 = 0.062776; %Yield for VFA degradation [mmol/g]
k3 = 3.1473; %Yield for VFA degradation [mmol/g]

```

```

k6 = 278.62;      %Yield for CH4 degradation [mmol/g]

%Growth Rate
mu1 = uS1_max*(S1/(K_S1+S1));      %AcidogenicBacteria
mu2 = uS2_max*(S2/(K_S2+S2));      %MethanogenicBacteria

% Kinetic Equation
dX1 = mu1*X1;
dX2 = mu2*X2;
dS1 = -k1*mu1*X1;
dS2 = k2*mu1*X1-k3*mu2*X2;

%Update Values
system = [dX1 dX2 dS1 dS2]';

case 3, %return outputs in system

X1 = state(1); %Acidogenic Bacteria
X2 = state(2); %Methanogenic Bacteria
S1 = state(3); %COD
S2 = state(4); %VFA

%para o cálculo de qm (saida):
k6 = 278.62;
uS2_max = 2.6493;
K_S2 = 571.27;

mu2 = uS2_max*(S2/(K_S2+S2));

qm = k6*mu2*X2; %saida

system = [X1 X2 S1 S2 qm]';

case {2 4 9},      % 2:discrete
                  % 4:calcTimeHit
                  % 9:termination

system = [];

otherwise

    error(['unhandled flag =', num2str(flag)])

end
end

```

## APÊNDICE C ROTINAS UTILIZANDO O MODELO NAR

### C.1 Rotina para casos experimentais

```

%Algoritmo MQ adaptado para identificacao dados biorreator
%NAR de ordem 3
%dados reais

clear all
close all
clc

load 'identificacao'
load 'validacao'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 14.7; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
N = 10; %MC run

num_par = 9; %numero de parametros

yId1=identificacao/25;
yId2=validacao/25;

%divide-se por 25 para gerar escala
%parecida com a do artigo Campestrini2014

%%
%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

%%
%primeira etapa :: estimacao dos parametros

%Regressoror modelo NAR :: 9 parametros
Phi(1,:) = [ -(yId1(1))    -(yId1(1).^2)    0    -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0)    0    0
0    0];

```

```

    Phi(2,:) = [ -(yId1(2))  -(yId1(2).^2)  -yId1(1)  -(yId1(2)*yId1(1))
    -(yId1(2)*0)          -(yId1(1).^2)    -(yId1(1)*0)
    0                      0];

    Phi(3,:) = [ -(yId1(3))  -(yId1(3).^2)  -yId1(2)  -(yId1(3)*yId1(2))
    -((yId1(3))*(yId1(1)))  -(yId1(2).^2)    -(yId1(2)*(yId1(1)))  -(yId1(1))
    -(yId1(1).^2)];

    Phi(4,:) = [ -(yId1(4))  -(yId1(4).^2)  -yId1(3)  -(yId1(4)*yId1(3))
    -((yId1(4))*(yId1(2)))  -(yId1(3).^2)    -(yId1(3)*(yId1(2)))  -(yId1(2))
    -(yId1(2).^2)];

    for i=5:1
        Phi(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-2)
    -((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))  -((yId1(i-2).^2))  -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
    -(yId1(i-3))  -(yId1(i-3).^2)];

    end

    for k = 1:N
        theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*yId1;
        P = inv(Phi'*Phi);
        trPd(k) = trace(P)./num_par;
        niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
    end

    fprintf('Parametros estimados:\n')
    theta_est = mean(theta)';

    fprintf('Média do niPd')
    mean(niPd,1)

    %%
    %segunda etapa :: validacao do modelo

    y_est1 = yId2;

    y_est1(1) = [ -(yId2(1))  -(yId2(1).^2)    0  -(yId2(1)*0)
    -(yId2(1)*0)          0          0
    0                      0]*theta_est;

    y_est1(2) = [ -(yId2(2))  -(yId2(2).^2)  -yId2(1)  -(yId2(2)*yId2(1))
    -(yId2(2)*0)          -(yId2(1).^2)    -(yId2(1)*0)
    0                      0]*theta_est;

    y_est1(3) = [ -(yId2(3))  -(yId2(3).^2)  -yId2(2)  -(yId2(3)*yId2(2))
    -((yId2(3))*(yId2(1))))  -(yId2(2).^2)    -(yId2(2)*(yId2(1)))  -(yId2(1))
    -(yId2(1).^2)]*theta_est;

    y_est1(4) = [ -(yId2(4))  -(yId2(4).^2)  -yId2(3)  -(yId2(4)*yId2(3))
    -((yId2(4))*(yId2(2))))  -(yId2(3).^2)    -(yId2(3)*(yId2(2)))  -(yId2(2))

```

```

-(yId2(2).^2)]*theta_est;

    for i=5:1
        y_est1(i) = [-yId2(i-1)  -((yId2(i-1).^2))  -yId2(i-2)  -(yId2(i-1)*(yId2(i-2)-
-((yId2(i-1))*(yId2(i-3))))  -((yId2(i-2).^2))  -(yId2(i-2)*(yId2(i-3))))
-(yId2(i-3))  -(yId2(i-3).^2)]*theta_est;

    end

fprintf('Erro relativo da saída (em porcentagem):\n')
ERE = (norm(yId2 - y_est1)./norm(yId2))*100

fig = 0;

%o tempo e' multiplicado por 2.5 para gerar a
%mesma escala do artigo Campestrini2014

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,((yId2 - y_est1)./yId2))
title('Diferença entre as saídas em %')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Diferença entre saídas')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2,'--', t*2.5,y_est1,'.-','LineWidth',[1.15])
legend('Saída real','Saída estimada')
xlabel ('Time (days)')
ylabel ('Output')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2)
title('Saída Real')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Real')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,y_est1)
title('Saída Estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Estimada')
hold off

```

## C.2 Rotina para casos simulados sem ruído

```

%Algoritmo MQ adaptado para identificacao dados biorreator
%NAR de ordem 3
%dados simulados
%full :: 200 dados - grupo de controle

clear all
close all
clc

load 'qm_full_1'
load 'qm_full_2'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 20; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
N = 2; %MC run

num_par = 9; %numero de parametros

%um conjunto de dados para estimacao
%e outro para validacao

yId1 = qm_full_1;
yId2 = qm_full_2;

%%
%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

%Regressoror modelo NAR :: 9 parametros
Phi(1,:) = [ -(yId1(1))    -(yId1(1).^2)    0    -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0)              0              0
0                          0];

Phi(2,:) = [ -(yId1(2))    -(yId1(2).^2)    -yId1(1)    -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0)              -(yId1(1).^2)    -(yId1(1)*0)
0                          0];

Phi(3,:) = [ -(yId1(3))    -(yId1(3).^2)    -yId1(2)    -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1))))    -(yId1(2).^2)    -(yId1(2)*(yId1(1)))    -(yId1(1))
-(yId1(1).^2)];

Phi(4,:) = [ -(yId1(4))    -(yId1(4).^2)    -yId1(3)    -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2))))    -(yId1(3).^2)    -(yId1(3)*(yId1(2)))    -(yId1(2))
-(yId1(2).^2)];

```

```

    for i=5:1
        Phi(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-2)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))  -((yId1(i-2).^2))  -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3))  -(yId1(i-3).^2)];

    end

    for k = 1:N
        theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*yId1;
        P = inv(Phi'*Phi);
        trPd(k) = trace(P)./num_par;
        niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
    end

    fprintf('Parâmetros estimados:\n')
    theta_est = mean(theta)'

    fprintf('Média do niPd')
    mean(niPd,1)

    %%
    %segunda etapa :: validacao do modelo

    y_est1 = yId2;

    y_est1(1) = [ -(yId2(1))  -(yId2(1).^2)  0  -(yId2(1)*0)
-(yId2(1)*0)  0  0
0  0]*theta_est;

    y_est1(2) = [ -(yId2(2))  -(yId2(2).^2)  -yId2(1)  -(yId2(2)*yId2(1))
-(yId2(2)*0)  -(yId2(1).^2)  -(yId2(1)*0)
0  0]*theta_est;

    y_est1(3) = [ -(yId2(3))  -(yId2(3).^2)  -yId2(2)  -(yId2(3)*yId2(2))
-((yId2(3))*(yId2(1))))  -(yId2(2).^2)  -(yId2(2)*(yId2(1)))  -(yId2(1))
-(yId2(1).^2)]*theta_est;

    y_est1(4) = [ -(yId2(4))  -(yId2(4).^2)  -yId2(3)  -(yId2(4)*yId2(3))
-((yId2(4))*(yId2(2))))  -(yId2(3).^2)  -(yId2(3)*(yId2(2)))  -(yId2(2))
-(yId2(2).^2)]*theta_est;

    for i=5:1
        y_est1(i) = [-yId2(i-1)  -((yId2(i-1).^2))  -yId2(i-2)  -(yId2(i-1)*(yId2(i-2)
-((yId2(i-1))*(yId2(i-3))))  -((yId2(i-2).^2))  -(yId2(i-2)*(yId2(i-3)))
-(yId2(i-3))  -(yId2(i-3).^2)]*theta_est;

    end

    fprintf('Erro relativo da saída (em porcentagem):\n')
    ERE = (norm(yId2 - y_est1)./norm(yId2))*100

```

```

fig = 0;

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,((yId2 - y_est1)./yId2))
title('Diferença entre as saídas em %')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Diferença entre saídas')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2, t*2.5,y_est1)
legend('Saída real','Saída estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saídas')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2)
title('Saída Real')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Real')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,y_est1)
title('Saída Estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Estimada')
hold off

```

### C.3 Rotina para casos simulados com ruído

```

%Algoritmo MQ adaptado para identificacao dados biorreator
%NAR de ordem 3
%dados simulados
%full :: 200 dados - grupo de controle
%aplicando no ruido da medida um ruído branco

clear all
close all
clc

load 'r_branco'
load 'qm_full_1'
load 'qm_full_2'

```

```

load 'theta_est'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 20; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
N = 100; %MC run

num_par = 9; %numero de parametros

%um conjunto de dados para estimacao
%e outro para validacao

yId1 = qm_full_1;
yId2 = qm_full_2;

%%
%e_y = 5; %ruído 2% da saída
e_y = 16; %ruído 5% da saída
%e_y = 30; %ruído 10% da saída

%%
%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

for k = 1:N

%multiplicacao do ruído branco para gerar a porcentagem
%desejada de ruído em relacao ao sinal
wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k)))));

y_semruído = yId1;
y = [y_semruído] + wny; %adicao do ruído a saída

    %Regressoror modelo NAR :: 9 parametros
    Phi(1,:) = [ -(y(1))    -(y(1).^2)    0    -(y(1)*0)    -(y(1)*0)
0                0                0                0];

    Phi(2,:) = [ -(y(2))    -(y(2).^2)    -y(1)    -(y(2)*y(1))    -(y(2)*0)
-(y(1).^2)    -(y(1)*0)    0                0];

    Phi(3,:) = [ -(y(3))    -(y(3).^2)    -y(2)    -(y(3)*y(2))    -((y(3))*(y(1)))
-(y(2).^2)    -(y(2)*(y(1)))    -(y(1))    -(y(1).^2)];

    Phi(4,:) = [ -(y(4))    -(y(4).^2)    -y(3)    -(y(4)*y(3))    -((y(4))*(y(2)))
-(y(3).^2)    -(y(3)*(y(2)))    -(y(2))    -(y(2).^2)];

    for i=5:l

```

```

        Phi(i,:) = [-y(i-1)  -((y(i-1).^2))  -y(i-2)  -(y(i-1)*(y(i-2)))
-((y(i-1))*(y(i-3))))  -((y(i-2).^2))  -(y(i-2)*(y(i-3)))  -(y(i-3))
-(y(i-3).^2)];

    end

    theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*y;
    P = inv(Phi'*Phi);
    trPd(k) = trace(P)./num_par;
    niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
end

fprintf('Média dos parâmetros estimados:\n')
theta_est = mean(theta) '

fprintf('Desvio padrão dos parâmetros estimados:\n')
std(theta)' ./abs(theta_est)

yr_est = Phi*theta_est; %saida estimada

fprintf('Média do niPd')
mean(niPd,1)

fprintf('Desvio Padrão de niPd')
std(niPd)

%guardando os valores de cada parametro
t1 = theta(1,1:N);
t2 = theta(2,1:N);
t3 = theta(3,1:N);
t4 = theta(4,1:N);
t5 = theta(5,1:N);
t6 = theta(6,1:N);
t7 = theta(7,1:N);
t8 = theta(8,1:N);
t9 = theta(9,1:N);

%calculo da media de cada parametro
t1m = mean(t1);
t2m = mean(t2);
t3m = mean(t3);
t4m = mean(t4);
t5m = mean(t5);
t6m = mean(t6);
t7m = mean(t7);
t8m = mean(t8);
t9m = mean(t9);

%parametros com 200 dados - full - sem ruido
%calculado pela rotina 'nar_casosimulado'
tz1 = theta_est(1);
tz2 = theta_est(2);
tz3 = theta_est(3);
tz4 = theta_est(4);
tz5 = theta_est(5);
tz6 = theta_est(6);
tz7 = theta_est(7);

```

```

tz8 = theta_est(8);
tz9 = theta_est(9);

fig = 0;

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz1,tz2,'o')
plot(t1,t2,'rd')
plot(t1m,t2m,'x')
hold off
xlim([-3 0]);
ylim([-3 3]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados',
'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{1}')
ylabel ('\theta_{2}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz3,tz4,'o')
plot(t3,t4,'rd')
plot(t3m,t2m,'x')
hold off
xlim([-3 3]);
ylim([-3 3]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados',
'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{3}')
ylabel ('\theta_{4}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz5,tz6,'o')
plot(t5,t6,'rd')
plot(t5m,t6m,'x')
hold off
xlim([-3 3]);
ylim([-3 3]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados',
'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{5}')
ylabel ('\theta_{6}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz7,tz8,'o')
plot(t7,t8,'rd')
plot(t7m,t8m,'x')
hold off

```

```

xlim([-3 3]);
ylim([-3 3]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados',
'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{7}')
ylabel ('\theta_{8}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz9,tz8,'o')
plot(t9,t8,'rd')
plot(t9m,t8m,'x')
hold off
xlim([-3 3]);
ylim([-3 3]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados',
'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{9}')
ylabel ('\theta_{8}')

%%
%segunda etapa :: validacao do modelo

for k = 1:N
wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k)))));

y_semruído2 = yId2;
y2 = [y_semruído2] + wny;

y_est1(1) = [ -(y2(1))    -(y2(1).^2)    0    -(y2(1)*0)    -(y2(1)*0)
0    0    0    0] * theta_est;

y_est1(2) = [ -(y2(2))    -(y2(2).^2)    -y2(1)    -(y2(2)*y2(1))    -(y2(2)*0)
-(y2(1).^2)    -(y2(1)*0)    0    0] * theta_est;

y_est1(3) = [ -(y2(3))    -(y2(3).^2)    -y2(2)    -(y2(3)*y2(2))    -((y2(3))*(y2(1)))
-(y2(2).^2)    -(y2(2)*(y2(1))))    -(y2(1))    -(y2(1).^2] * theta_est;

y_est1(4) = [ -(y2(4))    -(y2(4).^2)    -y2(3)    -(y2(4)*y2(3))    -((y2(4))*(y2(2)))
-(y2(3).^2)    -(y2(3)*(y2(2))))    -(y2(2))    -(y2(2).^2] * theta_est;

for i=5:1
    y_est1(i) = [-y2(i-1)    -((y2(i-1).^2))    -y2(i-2)    -(y2(i-1)*(y2(i-2)))
-((y2(i-1))*(y2(i-3))))    -((y2(i-2).^2))    -(y2(i-2)*(y2(i-3)))    -(y2(i-3))
-(y2(i-3).^2)] * theta_est;

end

%calcula todos os erros relativos para cada MC run
ERE(:,k) = (norm(yId2 - y_est1') ./ norm(yId2)) * 100;

end

```

```
fprintf('Média do erro relativo (ER) em porcentagem:\n')
mean(ERE)

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(t*2.5,y2, t*2.5,y_est1', t*2.5,yId2)
hold off
grid
legend('Saída com ruído', 'Saída estimada', 'Saída sem ruído')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(t*2.5,y2-y_est1')
hold off
grid
legend('Diferença entre as saídas com ruído e estimada')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
hist(ERE)
hold off
grid
legend('Histograma dos Erros Relativos')
xlabel ('Erro relativo da saída (%)')
ylabel ('Frequência')
```



## APÊNDICE D ROTINAS UTILIZANDO O MODELO NARMA

### D.1 Rotina para casos experimentais

```

%Algoritmo MQE adaptado para identificacao dados biorreator
%NARMA de ordem 3
%dados reais

clear all
close all
clc

load 'identificacao'
load 'validacao'
load 'teste'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 14.7; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
N = 2; %MC run

% yId1=identificacao/25;
% yId2=validacao/25;

yId1=validacao/25;
yId2=identificacao/25;

%divide-se por 25 para gerar escala
%parecida com a do artigo Campestrini2014

%% Primeira etapa
num_par = 9; %numero de parametros

%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

```

```

%Regressor modelo NAR :: 9 parametros
Phi(1,:) = [ -(yId1(1)) -(yId1(1).^2) 0 -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0) 0 0 0
0 0];
Phi(2,:) = [ -(yId1(2)) -(yId1(2).^2) -yId1(1) -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0) -(yId1(1).^2) -(yId1(1)*0)
0 0];
Phi(3,:) = [ -(yId1(3)) -(yId1(3).^2) -yId1(2) -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1))) -(yId1(2).^2) -(yId1(2)*(yId1(1))) -(yId1(1))
-(yId1(1).^2)];
Phi(4,:) = [ -(yId1(4)) -(yId1(4).^2) -yId1(3) -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2))) -(yId1(3).^2) -(yId1(3)*(yId1(2))) -(yId1(2))
-(yId1(2).^2)];
for i=5:1
Phi(i,:) = [-yId1(i-1) -((yId1(i-1).^2)) -yId1(i-2) -(yId1(i-1)*(yId1(i-2)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3)))) -((yId1(i-2).^2)) -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3)) -(yId1(i-3).^2)];
end

for k = 1:N
theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*yId1;
P = inv(Phi'*Phi);
trPd(k) = trace(P)./num_par;
niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
end

fprintf('Parametros estimados - NAR:\n')
theta_est = mean(theta)'

fprintf('Média do niPd - NAR')
mean(niPd,1)

%%
%estimar a saída a partir dos parametros calculados
y_estimado = Phi*theta_est;

%%
%calcular o erro para usar como media movel
erro = yId1 - y_estimado;

%% Parte 2 - MQE
% Utilizando o ruído (erro/media movel) na estimacao

num_par_2 = 12;

%Regressor modelo NARMA :: 12 parametros
Phi_2(1,:) = [ -(yId1(1)) -(yId1(1).^2) 0 -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0) 0 0 0
0 0 erro(1) 0 0];
Phi_2(2,:) = [ -(yId1(2)) -(yId1(2).^2) -yId1(1) -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0) -(yId1(1).^2) -(yId1(1)*0)
0 0 erro(2) erro(1) 0];
Phi_2(3,:) = [ -(yId1(3)) -(yId1(3).^2) -yId1(2) -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1))) -(yId1(2).^2) -(yId1(2)*(yId1(1))) -(yId1(1))
-(yId1(1).^2) erro(3) erro(2) erro(1)];
Phi_2(4,:) = [ -(yId1(4)) -(yId1(4).^2) -yId1(3) -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2))) -(yId1(3).^2) -(yId1(3)*(yId1(2))) -(yId1(2))
-(yId1(2).^2) erro(4) erro(3) erro(2)];

```

```

    for i=5:1
        Phi_2(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-1)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))  -((yId1(i-2).^2))  -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3))  -(yId1(i-3).^2)  erro(i-1)  erro(i-2)  erro(i-3)];
    end

for k = 1:N
    theta_2(:,k) = (Phi_2'*Phi_2)\Phi_2'*yId1;
    P_2 = inv(Phi_2'*Phi_2);
    trPd_2(k) = trace(P_2)./num_par_2;
    niPd_2(k) = norm(diag(P_2), Inf);
end

fprintf('Parametros estimados - NARMA:\n')
theta_est_2 = mean(theta_2)'

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_2)

%%
%estimar a saída a partir dos parâmetros MQE calculados
y_estimado_2 = Phi_2*theta_est_2;

%%
%calcular o erro para usar como média móvel
erro_3 = yId1 - y_estimado_2;
numIterNARMA = 25;
theta_est=zeros(12,numIterNARMA);

for kk=1:numIterNARMA

%Iniciar as repeticoes

%Regressoror modelo NARMA :: 12 parâmetros
    Phi_3(1,:) = [ -(yId1(1))  -(yId1(1).^2)  0  -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0)  0  0  0];
    Phi_3(2,:) = [ -(yId1(2))  -(yId1(2).^2)  -yId1(1)  -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0)  -(yId1(1).^2)  -(yId1(1)*0)
0  0  erro_3(1)  erro_3(1)  0];
    Phi_3(3,:) = [ -(yId1(3))  -(yId1(3).^2)  -yId1(2)  -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1))))  -(yId1(2).^2)  -(yId1(2)*(yId1(1)))  -(yId1(1))
-(yId1(1).^2)  erro_3(3)  erro_3(2)  erro_3(1)];
    Phi_3(4,:) = [ -(yId1(4))  -(yId1(4).^2)  -yId1(3)  -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2))))  -(yId1(3).^2)  -(yId1(3)*(yId1(2)))  -(yId1(2))
-(yId1(2).^2)  erro_3(4)  erro_3(3)  erro_3(2)];
    for i=5:1
        Phi_3(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-1)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))  -((yId1(i-2).^2))  -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3))  -(yId1(i-3).^2)  erro_3(i-1)  erro_3(i-2)  erro_3(i-3)];
    end

for k = 1:N
    theta_3(:,k) = (Phi_3'*Phi_3)\Phi_3'*yId1;
    P_3 = inv(Phi_3'*Phi_3);
    trPd_3(k) = trace(P_3)./num_par_2;
    niPd_3(k) = norm(diag(P_3), Inf);
end

```

```

end

%fprintf('Parametros estimados - NARMA: %f \n',mean(theta_3)');
fprintf('Parametros estimados - NARMA: %f \n');
theta_est_3 = mean(theta_3)';

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_3);

%estimar a saída a partir dos parametros MQE calculados
y_estimado_3 = Phi_3*theta_est_3;

%Phi(kk)=Phi_3;
theta_est(:,kk)=theta_est_3;

erro_3 = yId1-y_estimado_3;

ERE_3(kk) = (norm(erro_3)./norm(yId1))*100;
end

theta = mean(theta_est)';

%% Constantes

    c1 = theta(10,1);
    c2 = theta(11,1);
    c3 = theta(12,1);

%% Validacao MQE

    %y_est1 = yId2;

    y_est1 = zeros(148,1);

    y_est1(1) = [ -(yId2(1))    -(yId2(1).^2)        0        -(yId2(1)*0)
-(yId2(1)*0)                0                0
0                0        c1*erro_3(1)        c2*0                c3*0]*theta;
    y_est1(2) = [ -(yId2(2))    -(yId2(2).^2)    -yId2(1)    -(yId2(2)*yId2(1))
-(yId2(2)*0)                -(yId2(1).^2)        -(yId2(1)*0)
0                0        c1*erro_3(2)        c2*erro_3(1)        c3*0]*theta;
    y_est1(3) = [ -(yId2(3))    -(yId2(3).^2)    -yId2(2)    -(yId2(3)*yId2(2))
-((yId2(3))*(yId2(1))))    -(yId2(2).^2)        -(yId2(2)*(yId2(1)))    -(yId2(1))
-(yId2(1).^2)    c1*erro_3(3)        c2*erro_3(2)        c3*erro_3(1)]*theta;
    y_est1(4) = [ -(yId2(4))    -(yId2(4).^2)    -yId2(3)    -(yId2(4)*yId2(3))
-((yId2(4))*(yId2(2))))    -(yId2(3).^2)        -(yId2(3)*(yId2(2)))    -(yId2(2))
-(yId2(2).^2)    c1*erro_3(4)        c2*erro_3(3)        c3*erro_3(2)]*theta;
    for i=5:1
        y_est1(i) = [-yId2(i-1)    -((yId2(i-1).^2))    -yId2(i-2)    -(yId2(i-1)*(yId2(i-2)
-((yId2(i-1))*(yId2(i-3))))    -((yId2(i-2).^2))    -(yId2(i-2)*(yId2(i-3)))
-(yId2(i-3))    -(yId2(i-3).^2)    c1*erro_3(i-1)    c2*erro_3(i-2)    c3*erro_3(i-3)]*theta;
    end

%%
fprintf('Erro relativo da saída (em porcentagem):\n')
ERE = (norm(yId2 - y_est1)./norm(yId2))*100

%
```

```

% % fprintf('Erro relativo da saída 2 (em porcentagem):\n')
% % ERE = (norm(yId2 - teste)./norm(yId2))*100
%
% fig = 0;
%
% fig = fig+1;
% figure(fig)
% hold on
% grid
% plot(t*2.5,((yId2 - y_est1)./yId2))
% title('Diferença entre as saídas em %')
% xlabel ('Tempo (dias)')
% ylabel ('Diferença entre saídas')
% hold off
%
% fig = fig+1;
% figure(fig)
% hold on
% grid
% plot(t*2.5,yId2,'--', t*2.5,y_est1,'.-','LineWidth',[1.15])
% legend('Saída real','Saída estimada')
% xlabel ('Tempo (dias)')
% ylabel ('Saída')
% hold off
%
% fig = fig+1;
% figure(fig)
% hold on
% grid
% plot(t*2.5,yId2)
% title('Saída real')
% xlabel ('Tempo (dias)')
% ylabel ('Saída')
% hold off
%
% fig = fig+1;
% figure(fig)
% hold on
% grid
% plot(t*2.5,y_est1)
% title('Saída estimada')
% xlabel ('Tempo (dias)')
% ylabel ('Saída')
% hold off
% %
% % fig = fig+1;
% % figure(fig)
% % hold on
% % grid
% % plot(t*2.5,teste)
% % title('Saída estimada 2')
% % xlabel ('Tempo (dias)')
% % ylabel ('Saída')
% % hold off

```

## D.2 Rotina para casos simulados sem ruído

```

%Algoritmo MQ adaptado para identificacao dados biorreator
%NARMA de ordem 3
%dados simulados
%full :: 200 dados - grupo de controle

clear all
close all
clc

load 'qm_full_1'
load 'qm_full_2'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 20; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
N = 2; %MC run

%um conjunto de dados para estimacao
%e outro para validacao

yId1 = qm_full_1;
yId2 = qm_full_2;

% yId1 = qm_full_2;
% yId2 = qm_full_1;
%% Primeira etapa
num_par = 9; %numero de parametros

%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

%Regressoror modelo NAR :: 9 parametros
Phi(1,:) = [ -(yId1(1))  -(yId1(1).^2)      0      -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0)      0      0
0      0];
Phi(2,:) = [ -(yId1(2))  -(yId1(2).^2)  -yId1(1)  -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0)      -(yId1(1).^2)      -(yId1(1)*0)
0      0];
Phi(3,:) = [ -(yId1(3))  -(yId1(3).^2)  -yId1(2)  -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1)))  -(yId1(2).^2)  -(yId1(2)*(yId1(1)))  -(yId1(1))
-(yId1(1).^2)];
Phi(4,:) = [ -(yId1(4))  -(yId1(4).^2)  -yId1(3)  -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2)))  -(yId1(3).^2)  -(yId1(3)*(yId1(2)))  -(yId1(2))
-(yId1(2).^2)];
    for i=5:l
        Phi(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-2)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))  -((yId1(i-2).^2))  -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3))  -(yId1(i-3).^2)];
    end

for k = 1:N
    theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*yId1;
    P = inv(Phi'*Phi);

```

```

        trPd(k) = trace(P)./num_par;
        niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
    end

fprintf('Parametros estimados - NAR:\n')
theta_est = mean(theta)'

fprintf('Média do niPd - NAR')
mean(niPd,1)

%%
%estimar a saída a partir dos parametros calculados
y_estimado = Phi*theta_est;

%%
%calcular o erro para usar como media movel
erro = yId1 - y_estimado;

%% Parte 2 - MQE
% Utilizando o ruído (erro/media movel) na estimacao

num_par_2 = 12;

%Regressoror modelo NARMA :: 12 parametros
Phi_2(1,:) = [ -(yId1(1))  -(yId1(1).^2)      0      -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0)      0      0      0];
Phi_2(2,:) = [ -(yId1(2))  -(yId1(2).^2)  -yId1(1)  -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0)      -(yId1(1).^2)      -(yId1(1)*0)
0      0      erro(1)      erro(1)      0];
Phi_2(3,:) = [ -(yId1(3))  -(yId1(3).^2)  -yId1(2)  -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1)))      -(yId1(2).^2)      -(yId1(2)*(yId1(1)))      -(yId1(1))
-(yId1(1).^2)      erro(3)      erro(2)      erro(1)];
Phi_2(4,:) = [ -(yId1(4))  -(yId1(4).^2)  -yId1(3)  -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2)))      -(yId1(3).^2)      -(yId1(3)*(yId1(2)))      -(yId1(2))
-(yId1(2).^2)      erro(4)      erro(3)      erro(2)];
    for i=5:1
        Phi_2(i,:) = [-yId1(i-1)  -((yId1(i-1).^2))  -yId1(i-2)  -(yId1(i-1)*(yId1(i-1)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3))))      -((yId1(i-2).^2))      -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3))      -(yId1(i-3).^2)      erro(i-1)      erro(i-2)      erro(i-3)];
    end

for k = 1:N
    theta_2(:,k) = (Phi_2'*Phi_2)\Phi_2'*yId1;
    P_2 = inv(Phi_2'*Phi_2);
    trPd_2(k) = trace(P_2)./num_par_2;
    niPd_2(k) = norm(diag(P_2), Inf);
end

fprintf('Parametros estimados - NARMA:\n')
theta_est_2 = mean(theta_2)'

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_2)

%%
%estimar a saída a partir dos parametros MQE calculados
y_estimado_2 = Phi_2*theta_est_2;

```

```

%%
%calcular o erro para usar como media movel
erro_3 = yId1 - y_estimado_2;
numIterNARMA = 100;
theta_est=zeros(12,numIterNARMA);

for kk=1:numIterNARMA

%Iniciar as repeticoes

%Regressoror modelo NARMA :: 12 parametros
Phi_3(1,:) = [ -(yId1(1)) -(yId1(1).^2) 0 -(yId1(1)*0)
-(yId1(1)*0) 0 0 0];
Phi_3(2,:) = [ -(yId1(2)) -(yId1(2).^2) -yId1(1) -(yId1(2)*yId1(1))
-(yId1(2)*0) -(yId1(1).^2) -(yId1(1)*0)
0 0 erro_3(1) 0 0];
Phi_3(3,:) = [ -(yId1(3)) -(yId1(3).^2) -yId1(2) -(yId1(3)*yId1(2))
-((yId1(3))*(yId1(1)))) -(yId1(2).^2) -(yId1(2)*(yId1(1))) -(yId1(1))
-(yId1(1).^2) erro_3(3) erro_3(2) erro_3(1)];
Phi_3(4,:) = [ -(yId1(4)) -(yId1(4).^2) -yId1(3) -(yId1(4)*yId1(3))
-((yId1(4))*(yId1(2)))) -(yId1(3).^2) -(yId1(3)*(yId1(2))) -(yId1(2))
-(yId1(2).^2) erro_3(4) erro_3(3) erro_3(2)];
for i=5:1
Phi_3(i,:) = [-yId1(i-1) -((yId1(i-1).^2)) -yId1(i-2) -(yId1(i-1)*(yId1(i-1)
-((yId1(i-1))*(yId1(i-3)))) -((yId1(i-2).^2)) -(yId1(i-2)*(yId1(i-3)))
-(yId1(i-3)) -(yId1(i-3).^2) erro_3(i-1) erro_3(i-2) erro_3(i-3)];
end

for k = 1:N
theta_3(:,k) = (Phi_3'*Phi_3)\Phi_3'*yId1;
P_3 = inv(Phi_3'*Phi_3);
trPd_3(k) = trace(P_3)./num_par_2;
niPd_3(k) = norm(diag(P_3), Inf);
end

%fprintf('Parametros estimados - NARMA: %f \n',mean(theta_3)');
fprintf('Parametros estimados - NARMA: %f \n');
theta_est_3 = mean(theta_3)';

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_3);

%estimar a saída a partir dos parâmetros MQE calculados
y_estimado_3 = Phi_3*theta_est_3;

%Phi(kk)=Phi_3;
theta_est(:,kk)=theta_est_3;

erro_3 = yId1-y_estimado_3;

ERE_3(kk) = (norm(erro_3)./norm(yId1))*100;
end

theta = mean(theta_est)';

fprintf('Parametros estimados - NARMA:\n')

```

```

theta_est_3 = mean(theta_3')'

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_3)

%% Constantes

    c1 = theta(10,1);
    c2 = theta(11,1);
    c3 = theta(12,1);

%% Validacao MQE

    y_est1 = zeros(148,1);

    y_est1(1) = [ -(yId2(1))    -(yId2(1).^2)    0    -(yId2(1)*0)
-(yId2(1)*0)    0    0    0
0    0    c1*erro(1)    c2*0    c3*0]*theta;
    y_est1(2) = [ -(yId2(2))    -(yId2(2).^2)    -yId2(1)    -(yId2(2)*yId2(1))
-(yId2(2)*0)    -(yId2(1).^2)    -(yId2(1)*0)
0    0    c1*erro(2)    c2*erro_3(1)    c3*0]*theta;
    y_est1(3) = [ -(yId2(3))    -(yId2(3).^2)    -yId2(2)    -(yId2(3)*yId2(2))
-((yId2(3))*(yId2(1))))    -(yId2(2).^2)    -(yId2(2)*(yId2(1)))    -(yId2(1))
-(yId2(1).^2)    c1*erro(3)    c2*erro_3(2)    c3*erro(1)]*theta;
    y_est1(4) = [ -(yId2(4))    -(yId2(4).^2)    -yId2(3)    -(yId2(4)*yId2(3))
-((yId2(4))*(yId2(2))))    -(yId2(3).^2)    -(yId2(3)*(yId2(2)))    -(yId2(2))
-(yId2(2).^2)    c1*erro(4)    c2*erro_3(3)    c3*erro(2)]*theta;
    for i=5:148
        y_est1(i) = [-yId2(i-1)    -((yId2(i-1).^2))    -yId2(i-2)    -(yId2(i-1)*(yId2(i-3)))
-((yId2(i-1))*(yId2(i-3))))    -((yId2(i-2).^2))    -(yId2(i-2)*(yId2(i-3)))
-(yId2(i-3))    -(yId2(i-3).^2)    c1*erro_3(i-1)    c2*erro_3(i-2)    c3*erro_3(i-3)]*theta;
    end

%%
fprintf('Erro relativo da saída (em porcentagem):\n')
ERE = (norm(yId2 - y_est1)./norm(yId2))*100

fig = 0;

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5, ((yId2 - y_est1)./yId2))
title('Diferença entre as saídas em %')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Diferença entre saídas')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2, t*2.5,y_est1)
legend('Saída real','Saída estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saídas')

```

```

hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2)
title('Saída real')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,y_est1)
title('Saída estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída')
hold off

```

### D.3 Rotina para casos simulados com ruído

```

%Algoritmo MQ adaptado para identificacao dados biorreator
%NARMA de ordem 3
%dados simulados
%full :: 200 dados - grupo de controle
%ruído alterado - 04-03-2016

clear all
close all
clc

load 'qm_full_1'
load 'qm_full_2'
load 'r_branco'
%load 'theta_est_2'
load 'theta_est_3'

%%
Ts = 0.1; %amostragem
tf = 20; %tempo final
t = [0:Ts:tf]'; %discretizacao do tempo
l = size(t,1); %numero de linhas de 't'
%N = 100; %MC run
N = 100;

%um conjunto de dados para estimacao
%e outro para validacao

yId1 = qm_full_1;
yId2 = qm_full_2;

% yId1 = qm_full_2;
% yId2 = qm_full_1;

```

```

%%
e_y = 1; %ruído da saída puro
e_y = 5; %ruído 2% da saída
e_y = 16; %ruído 5% da saída
e_y = 30; %ruído 10% da saída

%% Primeira etapa
num_par = 9; %numero de parametros

%inicializacao de variaveis
theta = zeros(num_par,N);
P = zeros(num_par,num_par);
trPd = zeros(N,1);
niPd = zeros(N,1);

for k = 1:N
    wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k))));
    y_semruído = yId1;
    y = y_semruído + wny;

    %Regressor modelo NAR :: 9 parametros
    Phi(1,:) = [ -(y(1))  -(y(1).^2)  0  -(y(1)*0)  -(y(1)*0)
0  0  0  0];
    Phi(2,:) = [ -(y(2))  -(y(2).^2)  -y(1)  -(y(2)*y(1))  -(y(2)*0)
-(y(1).^2)  -(y(1)*0)  0  0];
    Phi(3,:) = [ -(y(3))  -(y(3).^2)  -y(2)  -(y(3)*y(2))  -((y(3))*(y(1)))
-(y(2).^2)  -(y(2)*(y(1)))  -(y(1))  -(y(1).^2)];
    Phi(4,:) = [ -(y(4))  -(y(4).^2)  -y(3)  -(y(4)*y(3))  -((y(4))*(y(2)))
-(y(3).^2)  -(y(3)*(y(2)))  -(y(2))  -(y(2).^2)];
        for i=5:1
            Phi(i,:) = [-y(i-1)  -((y(i-1).^2))  -y(i-2)  -(y(i-1)*(y(i-2)))
-((y(i-1))*(y(i-3))))  -((y(i-2).^2))  -(y(i-2)*(y(i-3)))  -(y(i-3))
-(y(i-3).^2)];
        end

        theta(:,k) = (Phi'*Phi)\Phi'*y;
        P = inv(Phi'*Phi);
        trPd(k) = trace(P)./num_par;
        niPd(k) = norm(diag(P), Inf);
    end

    %fprintf('Parametros estimados:\n');
    theta_est_ruído = mean(theta)';

    %fprintf('Desvio padrao dos parametros estimados:\n');
    std(theta)'./abs(theta_est_ruído);

    %fprintf('Média do niPd');
    mean(niPd,1);

    %fprintf('Desvio Padrão de niPd');
    std(niPd);

```

```

%%
%estimar a saída a partir dos parâmetros calculados
y_estimado = Phi*theta_est_ruido;

%%
%calcular o erro para usar como media movel
erro = y - y_estimado;

%% Parte 2 - MQE
% Utilizando o ruído (erro/media movel) na estimacao

num_par_2 = 12;

for k = 1:N
    wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k))));
    y = y_semruído + wny;

    Phi_2(1,:) = [ -(y(1))    -(y(1).^2)    0    -(y(1)*0)    -(y(1)*0)
0                0                0                0                erro(1)
0                0];
    Phi_2(2,:) = [ -(y(2))    -(y(2).^2)    -y(1)    -(y(2)*y(1))    -(y(2)*0)
-(y(1).^2)    -(y(1)*0)    0                0                erro(2)    erro(1)
0];
    Phi_2(3,:) = [ -(y(3))    -(y(3).^2)    -y(2)    -(y(3)*y(2))    -(y(3)*y(1))
-(y(2).^2)    -(y(2)*y(1))    -(y(1))    -(y(1).^2)    erro(3)    erro(2)
erro(1)];
    Phi_2(4,:) = [ -(y(4))    -(y(4).^2)    -y(3)    -(y(4)*y(3))    -(y(4)*y(2))
-(y(3).^2)    -(y(3)*y(2))    -(y(2))    -(y(2).^2)    erro(4)    erro(3)
erro(2)];
    for i=5:1
        Phi_2(i,:) = [-y(i-1)    -(y(i-1).^2)    -y(i-2)    -(y(i-1)*y(i-2))
-(y(i-1)*y(i-3))    -(y(i-2).^2)    -(y(i-2)*y(i-3))    -(y(i-3))
-(y(i-3).^2)    erro(i-1)    erro(i-2)    erro(i-3)];
    end

    theta_2(:,k) = (Phi_2'*Phi_2)\Phi_2'*y;
    P_2 = inv(Phi_2'*Phi_2);
    trPd_2(k) = trace(P_2)./num_par_2;
    niPd_2(k) = norm(diag(P_2), Inf);
end

%fprintf('Parâmetros estimados - NARMA:\n');
theta_est_2_ruido = mean(theta_2)';

%fprintf('Coeficiente de variação dos parâmetros estimados - NARMA:\n');
std(theta_2)'./abs(theta_est_2_ruido);

%fprintf('Desvio padrão dos parâmetros estimados - NARMA:\n');
std(theta_2)';

%fprintf('Média do niPd - NARMA');
mean(niPd_2);

%fprintf('Desvio Padrão de niPd - NARMA');
std(niPd_2);

y_estimado_2 = Phi_2*theta_est_2_ruido;

```

```

%%
%calcular o erro para usar como media movel
erro_3 = y - y_estimado_2;
numIterNARMA = 100;
theta_est=zeros(12,numIterNARMA);

for kk=1:numIterNARMA

    for k = 1:N
        wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k))));
        y = y_semruído + wny;

        Phi_3(1,:) = [ -(y(1))    -(y(1).^2)    0    -(y(1)*0)    -(y(1)*0)
0                0                0                0    erro_3(1)
0                0];
        Phi_3(2,:) = [ -(y(2))    -(y(2).^2)    -y(1)    -(y(2)*y(1))    -(y(2)*0)
-(y(1).^2)    -(y(1)*0)    0                0    erro_3(2)
erro_3(1)    0];
        Phi_3(3,:) = [ -(y(3))    -(y(3).^2)    -y(2)    -(y(3)*y(2))    -(y(3)*(y(1)))
-(y(2).^2)    -(y(2)*(y(1)))    -(y(1))    -(y(1).^2)    erro_3(3)
erro_3(2)    erro_3(1)];
        Phi_3(4,:) = [ -(y(4))    -(y(4).^2)    -y(3)    -(y(4)*y(3))    -(y(4)*(y(2)))
-(y(3).^2)    -(y(3)*(y(2)))    -(y(2))    -(y(2).^2)    erro_3(4)
erro_3(3)    erro_3(2)];
        for i=5:1
            Phi_3(i,:) = [-y(i-1)    -(y(i-1).^2)    -y(i-2)    -(y(i-1)*(y(i-2)))
-(y(i-1)*(y(i-3)))    -(y(i-2).^2)    -(y(i-2)*(y(i-3)))    -(y(i-3))
-(y(i-3).^2)    erro_3(i-1)    erro_3(i-2)    erro_3(i-3)];
        end

        theta_3(:,k) = (Phi_3'*Phi_3)\Phi_3'*y;
        P_3 = inv(Phi_3'*Phi_3);
        trPd_3(k) = trace(P_3)./num_par_2;
        niPd_3(k) = norm(diag(P_3), Inf);
    end

    %fprintf('Parametros estimados - NARMA: %f \n');
    theta_est_3_ruido = mean(theta_3)';

    %fprintf('Média do niPd - NARMA');
    mean(niPd_3);

    %estimar a saída a partir dos parâmetros MQE calculados
    y_estimado_3 = Phi_3*theta_est_3_ruido;

    %Phi(kk)=Phi_3;
    theta_est(:,kk)=theta_est_3_ruido;

    erro_3 = yId1-y_estimado_3;

    ERE_3(kk) = (norm(erro_3)./norm(yId1))*100;

end

theta = mean(theta_est)';

fprintf('Desvio padrão dos parâmetros estimados - NARMA:\n')

```

```

std(theta_est')

fprintf('Média do niPd - NARMA')
mean(niPd_3)

fprintf('Desvio Padrão de niPd - NARMA')
std(niPd_3)

%% Constantes

    c1 = theta(10,1);
    c2 = theta(11,1);
    c3 = theta(12,1);

%%
t1 = theta_est(1,1:kk);
t2 = theta_est(2,1:kk);
t3 = theta_est(3,1:kk);
t4 = theta_est(4,1:kk);
t5 = theta_est(5,1:kk);
t6 = theta_est(6,1:kk);
t7 = theta_est(7,1:kk);
t8 = theta_est(8,1:kk);
t9 = theta_est(9,1:kk);
t10 = theta_est(10,1:kk);
t11 = theta_est(11,1:kk);
t12 = theta_est(12,1:kk);

t1m = mean(t1);
t2m = mean(t2);
t3m = mean(t3);
t4m = mean(t4);
t5m = mean(t5);
t6m = mean(t6);
t7m = mean(t7);
t8m = mean(t8);
t9m = mean(t9);
t10m = mean(t10);
t11m = mean(t11);
t12m = mean(t12);

tz1 = theta_est_3(1);
tz2 = theta_est_3(2);
tz3 = theta_est_3(3);
tz4 = theta_est_3(4);
tz5 = theta_est_3(5);
tz6 = theta_est_3(6);
tz7 = theta_est_3(7);
tz8 = theta_est_3(8);
tz9 = theta_est_3(9);
tz10 = theta_est_3(10);
tz11 = theta_est_3(11);
tz12 = theta_est_3(12);

fig = 0;

fig = fig+1;

```

```

figure(fig)
hold on
plot(tz1,tz2,'o')
plot(t1,t2,'rd')
plot(t1m,t2m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{1}')
ylabel ('\theta_{2}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz3,tz4,'o')
plot(t3,t4,'rd')
plot(t3m,t4m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{3}')
ylabel ('\theta_{4}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz5,tz6,'o')
plot(t5,t6,'rd')
plot(t5m,t6m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{5}')
ylabel ('\theta_{6}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz7,tz8,'o')
plot(t7,t8,'rd')
plot(t7m,t8m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{7}')
ylabel ('\theta_{8}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on

```

```

plot(tz9,tz10,'o')
plot(t9,t10,'rd')
plot(t9m,t10m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{9}')
ylabel ('\theta_{10}')

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
plot(tz11,tz12,'o')
plot(t11,t12,'rd')
plot(t11m,t12m,'x')
hold off
xlim([-7 7]);
ylim([-7 7]);
grid
legend('Parâmetros simulados', 'Parâmetros estimados', 'Média dos parâmetros estimados')
xlabel ('\theta_{11}')
ylabel ('\theta_{12}')

%% Validacao MQE

for k = 1:N
    wny = ((e_y*r_branco(:,k))-(mean(e_y*r_branco(:,k))));
    y_semruído2 = yId2;
    y2 = [y_semruído2] + wny;

    y_est1(1) = [ -(y2(1))    -(y2(1).^2)    0    -(y2(1)*0)    -(y2(1)*0)
0                0                0                0                c1*erro(1)
c2*0                c3*0]*theta_est_3_ruído;
    y_est1(2) = [ -(y2(2))    -(y2(2).^2)    -y2(1)    -(y2(2)*y2(1))    -(y2(2)*0)
-(y2(1).^2)    -(y2(1)*0)                0                0                c1*erro(2)
c2*erro(1)                c3*0]*theta_est_3_ruído;
    y_est1(3) = [ -(y2(3))    -(y2(3).^2)    -y2(2)    -(y2(3)*y2(2))    -((y2(3))*(y2(1)))
-(y2(2).^2)    -(y2(2)*(y2(1)))    -(y2(1))    -(y2(1).^2)    c1*erro(3)
c2*erro(2)                c3*erro(1)]*theta_est_3_ruído;
    y_est1(4) = [ -(y2(4))    -(y2(4).^2)    -y2(3)    -(y2(4)*y2(3))    -((y2(4))*(y2(2)))
-(y2(3).^2)    -(y2(3)*(y2(2)))    -(y2(2))    -(y2(2).^2)    c1*erro(4)
c2*erro(3)                c3*erro(2)]*theta_est_3_ruído;
    for i=5:l
        y_est1(i) = [-y2(i-1)    -((y2(i-1).^2))    -y2(i-2)    -(y2(i-1)*(y2(i-2)))
-((y2(i-1))*(y2(i-3))))    -((y2(i-2).^2))    -(y2(i-2)*(y2(i-3)))    -(y2(i-3))
-(y2(i-3).^2)    c1*erro(i-1)    c2*erro(i-2)    c3*erro(i-3)]*theta_est_3_ruído;
    end

    %calcula todos os erros relativos para cada MC run
    ERE(:,k) = (norm(yId2 - y_est1') ./ norm(yId2)) * 100;
end
%%
fprintf('Média do erro relativo (ER) em porcentagem:\n')
mean(ERE)

fig = fig+1;

```

```

figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,((y2 - y_est1')./y2))
title('Diferença entre as saídas em %')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Diferença entre saídas real (com ruído) e estimada')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,yId2, t*2.5,y2, t*2.5,y_est1')
legend('Saída real sem ruído', 'Saída real com ruído','Saída estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saídas')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,y2)
title('Saída real com ruído')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Real')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
grid
plot(t*2.5,y_est1)
title('Saída estimada')
xlabel ('Tempo (dias)')
ylabel ('Saída Estimada')
hold off

fig = fig+1;
figure(fig)
hold on
hist(ERE)
hold off
grid
legend('Histograma dos Erros Relativos')
xlabel ('Erro relativo da saída (%)')
%ylabel ('Frequência')

```