



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE
PROEE- PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA ELÉTRICA

MONITORAMENTO E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE
SISTEMAS MPC UTILIZANDO MÉTODOS ESTATÍSTICOS
MULTIVARIADOS

Nayanne Maria Garcia Rego Fontes

São Cristóvão - SE, Brasil

Janeiro de 2017



MONITORAMENTO E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE SISTEMAS MPC UTILIZANDO MÉTODOS ESTATÍSTICOS MULTIVARIADOS

Nayanne Maria Garcia Rego Fontes

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica – PROEE, da Universidade Federal de Sergipe, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Elétrica.

Orientador: Prof. Dr. Oscar Alberto Zanabria Sotomayor

São Cristóvão - SE, Brasil

Janeiro de 2017

MONITORAMENTO E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE SISTEMAS MPC
UTILIZANDO MÉTODOS ESTATÍSTICOS MULTIVARIADOS

Nayanne Maria Garcia Rego Fontes

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA – PROEE, DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SERGIPE COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA ELÉTRICA.

Examinada por:

Prof. Marcus Vinicius Americano da Costa Filho, Dr.
Examinador Externo – UFBA

Prof. Douglas Bressan Riffel, Dr.
Examinador Interno – PROEE/UFS

Prof. Carlos Alberto Villacorta Cardoso, Dr.
Examinador Interno – PROEE/UFS

São Cristóvão - SE, Brasil
Janeiro de 2017

*Ao meu marido, Abrahão, aos meus
pais, Anchieta e Nerione, e aos
meus irmãos.*

Agradecimentos

À Deus, pelas bênçãos concebidas durante toda a minha vida.

Ao meu marido, Abrahão, pelo apoio incondicional e amor de sempre.

Aos meus pais, Anchieta e Nerione, por todo amor e incentivo.

Aos meus irmãos, Arthur e Alexandre, e toda minha família pela fraterna amizade e incentivo constante.

À minha amiga Duda e esposo, pelo cuidado, incentivo e ensinamentos.

Ao Professor Dr. Oscar A. Z. Sotomayor, pelas valiosas orientações e contribuições no desenvolvimento deste trabalho.

Aos colegas de curso, Guilherme e Diego, pela amizade e incentivo.

À CAPES, pelo auxílio financeiro.

A todos que contribuíram direta e indiretamente para a realização deste trabalho.

Resumo da Dissertação apresentada ao PROEE/UFS como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre (Me.)

MONITORAMENTO E AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE SISTEMAS MPC UTILIZANDO MÉTODOS ESTATÍSTICOS MULTIVARIADOS

Nayanne Maria Garcia Rego Fontes

Janeiro/2017

Orientador: Prof. Dr. Oscar Alberto Zanabria Sotomayor

Programa: Engenharia Elétrica

O monitoramento de sistemas de controle de processos é extremamente importante no que diz respeito às indústrias, para garantir a qualidade do que é produzido e a segurança do processo. Os controladores preditivos, também conhecidos pela sigla em inglês MPC (*Model Predictive Control*), costumam ter um bom desempenho inicialmente. Entretanto, após um certo período, muitos fatores contribuem para a deterioração de seu desempenho. Isto evidencia a importância do monitoramento dos sistemas de controle MPC. Neste trabalho aborda-se ferramentas, baseada em métodos estatísticos multivariados, aplicados ao problema de monitoramento e avaliação de desempenho de controladores preditivos. Os métodos aqui apresentados são: o PCA (Análise por componentes principais) e o ICA (Análise por componentes independentes). Ambas são técnicas que utilizam dados coletados diretamente do processo. O primeiro é largamente utilizado na avaliação de desempenho de controladores preditivos. Já o segundo, é uma técnica mais recente que surgiu, principalmente, com o intuito de ser utilizado em sistemas de detecção de falhas. As análises são feitas quando aplicadas em processos simulados característicos da indústria petroquímica operando sob controle MPC.

Palavras Chaves: Monitoramento, MPC, PCA, ICA.

Abstract of Dissertation presented to PROEE/UFS as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master

MONITORING AND PERFORMANCE ASSESSMENT OF MPC SYSTEM USING MULTIVARIATE STATISTICAL METHODS

Nayanne Maria Garcia Rego Fontes

January/2017

Advisors: Prof. Dr. Oscar Alberto Zanabria Sotomayor

Department: Electrical Engineering

Monitoring of process control systems is extremely important for industries to ensure the quality of the product and the safety of the process. Predictive controllers, also known by MPC (Model Predictive Control), usually has a well performance initially. However, after a period, many factors contribute to the deterioration of its performance. This highlights the importance of monitoring the MPC control systems. In this work, tools based on multivariate statistical methods are discussed and applied to the problem of monitoring and Performance Assessment of predictive controllers. The methods presented here are: PCA (Principal Component Analysis) and ICA (Independent Component Analysis). Both are techniques that use data collected directly from the process. The first is widely used in Performance Assessment of predictive controllers. The second is a more recent technique that has arisen, mainly in order to be used in fault detection systems. The analyzes are made when applied in simulated processes characteristic of the petrochemical industry operating under MPC control.

Keywords: Monitoring, MPC, PCA, ICA.

Sumário

SUMÁRIO.....	IX
LISTA DE FIGURAS	XI
LISTA DE TABELAS.....	XV
CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO	1
1.1 PRELIMINARES.....	1
1.2 MOTIVAÇÃO	2
1.3 OBJETIVOS.....	5
1.4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	6
1.5 ESTRUTURA DO TRABALHO.....	12
1.6 PUBLICAÇÕES	13
CAPÍTULO 2 AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE CONTROLADORES	14
2.1 INTRODUÇÃO	14
2.2 METODOLOGIAS DE AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE CONTROLADORES	16
2.3 MSPC APLICADAS A AVALIAÇÃO DE DESEMPENHO DE MPC	18
CAPÍTULO 3 ESTUDOS DE CASO.....	20
3.1 COLUNA DE DESTILAÇÃO WOOD-BERRY	20
3.1.1. Controle MPC da coluna Wood-Berry.....	22
3.2 UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO (FCC)	27
3.2.1. Controle MPC da unidade FCC.....	30
CAPÍTULO 4 TÉCNICAS ESTATÍSTICAS MULTIVARIADAS.....	34
4.1 ANÁLISE POR COMPONENTES PRINCIPAIS (PCA).....	34
4.1.1. Organização dos dados.....	35
4.1.2. Decomposição em componentes principais.....	37
4.1.3. Redução da dimensão das componentes principais	40
4.2 ANÁLISE POR COMPONENTES INDEPENDENTES (ICA)	41
4.2.1. Representação de Dados Multivariados	42
4.2.2. O Problema BSS.....	43
4.2.3. Definição do ICA.....	45
4.2.4. Principais estimações do ICA	49
CAPÍTULO 5 METODOLOGIA DE MONITORAMENTO E APLICAÇÕES	52
5.1 METODOLOGIA DE MONITORAMENTO UTILIZANDO MÉTODOS ESTATÍSTICOS MULTIVARIADOS	52
5.1.1. Construção do Benchmark	53
5.1.2. Cálculo dos índices de monitoramento	57
5.2 APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DE MONITORAMENTO	60
5.2.1. Aplicação no processo Wood-Berry.....	61
5.2.2. Aplicação no processo FCC.....	85
CAPÍTULO 6 MÉTODO DE DIAGNÓSTICO	110
6.1 DIAGNÓSTICO DO PROCESSO WOOD-BERRY	111
6.2 DIAGNÓSTICO DO PROCESSO FCC.....	115

CAPÍTULO 7 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	121
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	124
APÊNDICE A - FUNDAMENTOS TEÓRICOS RELATIVOS AO MÉTODO ICA	131
APÊNDICE B – ALGORITMO FASTICA	143

Lista de Figuras

Figura 1.1 - Principais causas da taxa de degradação no desempenho de MPC (adaptada de Tian, 2011a).....	4
Figura 2.1 - Esquemático de monitoramento dos métodos CPMA	15
Figura 3.1 - Coluna de destilação Wood-Berry	21
Figura 3.2 - Estrutura do controlador MPC	23
Figura 3.3 - Layout do simulador da coluna de destilação Wood-Berry.....	26
Figura 3.4 - Variáveis controladas para coluna Wood-Berry	26
Figura 3.5 - Variáveis manipuladas para coluna Wood-Berry	27
Figura 3.6 – Entradas e saídas do FCC (adaptada de Quelhas et al. 2012)	28
Figura 3.7 - Diagrama esquemático da unidade FCC (adaptada de Sotomayor et al. 2006)	30
Figura 3.8 – Layout do simulador da unidade FCC	32
Figura 3.9 - Variáveis controladas para unidade FCC.....	33
Figura 3.10 - Variáveis manipuladas para unidade FCC.....	33
Figura 4.1 – Exemplo de dados: (a) conjunto de dados aleatórios originais contendo duas variáveis (b) conjunto de dados centrado pela média (c) conjunto de dados re-escalado e (d) conjunto de dados normalizado	36
Figura 5.1. Metodologia de monitoramento de desempenho de controladores MPC	53
Figura 5.2 - Dados das variáveis manipuladas para o processo Wood-Berry	62
Figura 5.3 - Dados dos erros de predição para o processo Wood-Berry	62
Figura 5.4 - Dados das variáveis controladas para o processo Wood-Berry	63
Figura 5.5 - Variância percentual e variância percentual acumulada das componentes principais para o processo Wood-Berry	65
Figura 5.6 – Estatísticas de monitoramento do DPCA em condições de operação adequadas para o processo Wood-Berry	71
Figura 5.7 - Estatísticas de monitoramento do DICA em condições de operação adequadas para o processo Wood-Berry	72
Figura 5.8 – Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência $F1$ no processo Wood-Berry	74

Figura 5.9 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência <i>F1</i> no processo Wood-Berry	75
Figura 5.10 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F1</i> no processo Wood-Berry	76
Figura 5.11 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência <i>F2</i> no processo Wood-Berry	77
Figura 5.12 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência <i>F2</i> no processo Wood-Berry	78
Figura 5.13 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F2</i> no processo Wood-Berry	79
Figura 5.14 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência <i>F3</i> no processo Wood-Berry	80
Figura 5.15 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência <i>F3</i> no processo Wood-Berry	81
Figura 5.16 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F3</i> no processo Wood-Berry	82
Figura 5.17 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência <i>F4</i> no processo Wood-Berry	83
Figura 5.18 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência <i>F4</i> no processo Wood-Berry	84
Figura 5.19 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F4</i> no processo Wood-Berry	85
Figura 5.20 - Dados das variáveis manipuladas para a unidade FCC	86
Figura 5.21 - Dados dos erros de predição para a unidade FCC	87
Figura 5.22 - Dados das variáveis controladas para a unidade FCC	87
Figura 5.23 - Variância percentual e variância percentual acumulada das componentes principais para a unidade FCC.....	89
Figura 5.24 – Estatísticas de monitoramento do DPCA em condições de operação adequadas para a unidade FCC	95
Figura 5.25 - Estatísticas de monitoramento do DICA em condições de operação adequadas para a unidade FCC	96

Figura 5.26 – Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência <i>F1</i> na unidade FCC	98
Figura 5.27 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência <i>F1</i> na unidade FCC.....	99
Figura 5.28 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F1</i> na unidade FCC.....	100
Figura 5.29 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência <i>F2</i> na unidade FCC	101
Figura 5.30 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência <i>F2</i> na unidade FCC.....	102
Figura 5.31 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F2</i> na unidade FCC.....	103
Figura 5.32 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência <i>F3</i> na unidade FCC	104
Figura 5.33 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência <i>F3</i> na unidade FCC.....	105
Figura 5.34 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F3</i> na unidade FCC.....	106
Figura 5.35 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência <i>F4</i> na unidade FCC	107
Figura 5.36 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência <i>F4</i> na unidade FCC.....	108
Figura 5.37 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência <i>F4</i> na unidade FCC.....	109
Figura 6.1 – Dados de treinamento das variáveis manipuladas para o processo Wood-Berry	112
Figura 6.2 - Dados de treinamento dos erros de predição para o processo Wood-Berry ...	113
Figura 6.3 - Dados de treinamento das variáveis controladas para o processo Wood-Berry	113
Figura 6.4 – Ângulos entre os subespaços dos dados monitorados e treinados para o processo Wood-Berry	115

Figura 6.5 – Dados de treinamento das variáveis manipuladas para a unidade FCC.....	117
Figura 6.6 - Dados de treinamento dos erros de predição para a unidade FCC	117
Figura 6.7 - Dados de treinamento das variáveis controladas para a unidade FCC	118
Figura 6.8 – Ângulos entre os subespaços dos dados monitorados e treinados para a unidade FCC.....	119

Lista de Tabelas

Tabela 1.1 - Ferramentas comerciais de monitoramento de MPC (adaptada de Alghazzawi e Lennox, 2009).....	5
Tabela 3.1 - Parâmetros de sintonia do controlador QDMC para coluna Wood-Berry	24
Tabela 3.2 - Parâmetros de sintonia do controlador QDMC para unidade FCC	31
Tabela 5.1 - Autovalores de cada componente principal para o processo Wood-Berry	64
Tabela 5.2 - Autovetores de cada componente principal para o processo Wood-Berry	64
Tabela 5.3 - Matriz de branqueamento Q para o processo Wood-Berry	66
Tabela 5.4 - Matriz de mistura A para o processo Wood-Berry	66
Tabela 5.5 - Matriz de separação W para o processo Wood-Berry.....	67
Tabela 5.6 - Normas euclidianas das linhas da matriz de separação W para o processo Wood-Berry	68
Tabela 5.7 - Matriz de separação da parte dominante Wd para o processo Wood-Berry....	68
Tabela 5.8 - Matriz de separação da parte excluída We para o processo Wood-Berry	68
Tabela 5.9 - Matriz de mistura da parte dominante Ad para o processo Wood-Berry	69
Tabela 5.10 - Matriz de mistura da parte excluída Ae para o processo Wood-Berry	69
Tabela 5.11 - Ocorrências inseridas no processo Wood-Berry	72
Tabela 5.12 - Autovalores de cada componente principal para a unidade FCC.....	88
Tabela 5.13 - Autovetores de cada componente principal para a unidade FCC.....	88
Tabela 5.14 - Matriz de branqueamento Q para a unidade FCC	90
Tabela 5.15 - Matriz de mistura A para a unidade FCC	91
Tabela 5.16 - Matriz de separação W para a unidade FCC	91
Tabela 5.17 - Normas euclidianas das linhas da matriz de separação para a unidade FCC .	92
Tabela 5.18 - Matriz de separação da parte dominante Wd para a unidade FCC	92
Tabela 5.19 - Matriz de separação da parte excluída We para a unidade FCC.....	92
Tabela 5.20 - Matriz de mistura da parte dominante Ad para a unidade FCC	93
Tabela 5.21 - Matriz de mistura da parte excluída Ae para a unidade FCC.....	93
Tabela 5.22 - Ocorrências inseridas na unidade FCC	96
Tabela 6.1 - Causas e seus parâmetros de degradação de desempenho para o processo Wood-Berry	111

Tabela 6.2 - Principais autovetores de cada causa de degradação para o processo Wood-Berry	114
Tabela 6.3 - Principais autovetores dos dados monitorados para o processo Wood-Berry	114
Tabela 6.4 - Causas e seus parâmetros de degradação de desempenho para a unidade FCC	116
Tabela 6.5 - Principais autovetores de cada causa de degradação para a unidade FCC.....	118
Tabela 6.6 - Principais autovetores dos dados monitorados para a unidade FCC.....	119

Capítulo 1

Introdução

1.1 Preliminares

Nos processos industriais modernos, os requisitos mais importantes são a qualidade do que é produzido e a segurança do processo. Visando atender estes requisitos, métodos de monitoramento, tanto de processos quanto de sistemas de controle de processos, são usados. Quando uma falha no desempenho do controlador é detectada e corrigida em uma fase precoce, reduz significativamente a perda de qualidade do que é produzido. Sabe-se que os controladores costumam ter um bom desempenho inicialmente e que, após um certo período, muitos fatores contribuem para a deterioração de seu desempenho. Convém salientar que existem falhas na operação de processo, que influenciam a qualidade do que é produzido e a segurança deste, que não estão relacionadas com o sistema de controle. Estas, evidentemente, não serão neste trabalho abordadas.

Em geral, os métodos para monitoramento e avaliação de desempenho de sistemas de controle são divididos em: métodos baseado em dados e métodos baseado em modelos. Os métodos baseado em modelo dependem, evidentemente, do modelo exato do processo a ser monitorado, o que os tornam mais precisos no monitoramento, quando comparado ao método baseado em dados. Esta é a principal vantagem dos métodos baseado em modelos. No entanto, a complexidade dos processos industriais torna difícil a tarefa de obtenção de um modelo preciso destes. Assim, os métodos baseado em dados, que independem de modelos e utilizam apenas os dados de processo para avaliar o desempenho de controladores, tornam-se mais “realizáveis” na prática. Deve-se observar que estes podem apresentar algumas dificuldades, com relação a precisão, no diagnóstico apresentado no monitoramento.

Os métodos baseado em dados, conhecidos como métodos de controle de processos estatísticos multivariados, e em inglês como *Multivariate Statistical Process Control* (MSPC), têm sido intensamente pesquisados. As pesquisas da última década mostraram que estes métodos constituem ferramentas eficazes na área de monitoramento (AlGhazzawi e Lennox, 2008). Neste trabalho, desenvolveu-se, por meio dos métodos MSPC, ferramentas para fins de avaliação de desempenho de sistemas de controle que utilizam controladores preditivos. Estes controladores são conhecidos em inglês como *Model Predictive Control* (MPC).

1.2 Motivação

Como já mencionado anteriormente, o monitoramento do sistema de controle de processos é extremamente importante no que diz respeito às indústrias, para garantir a qualidade do que é produzido e a segurança do processo. Além disso, a competitividade entre os setores produtivos faz com que as indústrias sejam obrigadas a gerar produtos de melhor qualidade com custos cada vez mais reduzidos, satisfazendo as exigências das regulamentações de segurança e meio ambiente. Isto evidencia a importância do monitoramento do sistema de controle, visto que a qualidade e o custo de produção dependem fortemente do sistema de controle.

No presente trabalho, abordam-se métodos de monitoramento e avaliação de desempenho de sistemas de controle que utilizam controladores preditivos. Estes métodos baseiam-se em um modelo de referência (*benchmark*) e utilizam estatísticas multivariadas.

A expressão monitorar desempenho de controladores, aqui utilizada, significa verificar se o desempenho do controlador encontra-se em nível desejável, nível este previamente especificado, e, em caso negativo, diagnosticar as causas que levaram este a apresentar baixa qualidade. Tendo em vista que os controladores preditivos atendem o desempenho especificado na fase inicial de sua implementação, e que estes deterioram-se após um período de operação por diversos fatores, faz-se necessário a utilização de monitoramento do controlador.

Com relação ao aparecimento de falhas referentes ao sistema de controle que utilizam MPC, Mitchell e Shook (2003) fazem a estimativa a seguir apresentada:

- 25% das aplicações de controle MPC falham com seus objetivos alguns meses depois de entrarem em operação;
- 40% das aplicações falham depois de três anos de funcionamento, devido a assistência inadequada. Por exemplo, por falta de manutenção na instrumentação e falta de monitoramento;
- 25% apresentam benefícios, embora reduzidos, com boa assistência, porém sem monitoramento;
- 10% apenas, dão grandes benefícios ao longo do tempo, devido a assistência adequada e a implementação de um monitoramento contínuo no controle MPC.

Segundo Tian (2011b), em geral, monitorar desempenho de controladores preditivos requer três passos:

- 1- O desempenho do sistema de controle MPC é avaliado definindo-se um “*benchmark*” apropriado, com o qual o desempenho do sistema de controle MPC será comparado;
- 2- Estatísticas de monitoramento ou índices de desempenho adequados são construídos para avaliar o controlador, a fim de certificar se o controlador MPC está operando de forma satisfatória;
- 3- Métodos são estabelecidos para o diagnóstico da causa da degradação do desempenho, quando o mau desempenho do controlador MPC for detectado.

Existem várias causas que podem levar o desempenho dos controladores MPC a uma degradação. As principais causas estão relacionadas a fatores internos e externos. Dentre os fatores internos, pode-se citar: mudanças na dinâmica do processo, que leva a erros de modelagem; má sintonia do controlador; estrutura de controle inadequada; etc. Os fatores externos estão associados a: falhas na instrumentação, especificamente os atuadores e os sensores; problemas com perturbações; etc. Estas causas, são resumidamente mostradas na Figura 1.1 a seguir, baseada na apresentada em Tian (2011a).

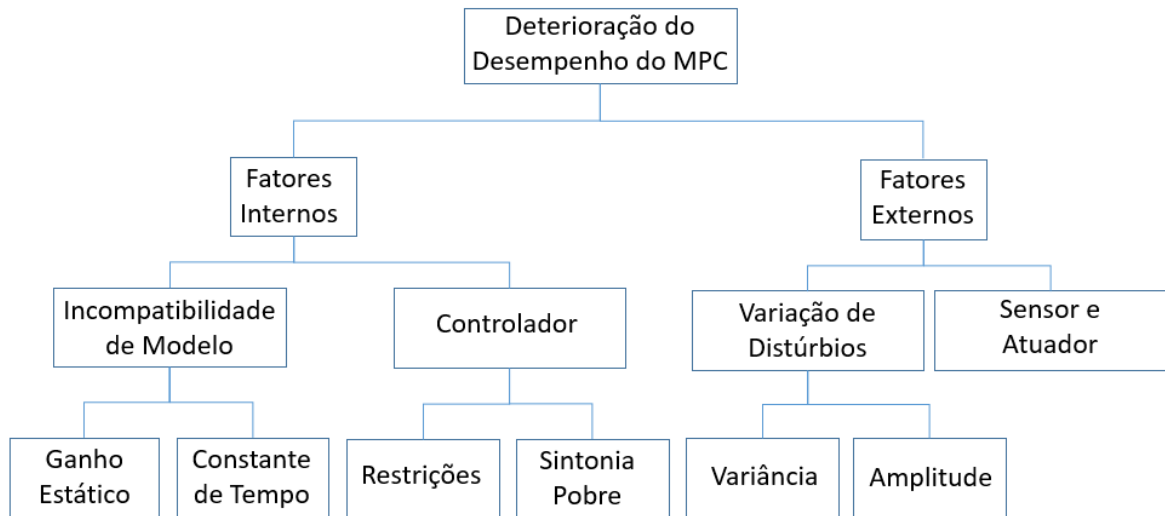


Figura 1.1 - Principais causas da taxa de degradação no desempenho de MPC (adaptada de Tian, 2011a)

Quando o monitoramento detectar que o desempenho atual do controlador não é satisfatório, deve-se diagnosticar a causa raiz dessa degradação. Assim, técnicas de monitoramento devem contemplar um procedimento para avaliar o sistema de controle. Em Jelali (2006) encontra-se a proposta das seguintes etapas de um procedimento:

- Determinar a capacidade de controle do sistema;
- Selecionar e projetar um benchmark para avaliar o desempenho do controlador;
- Avaliar e detectar as malhas de controle que apresentam baixo desempenho;
- Sugerir medidas de melhoria após diagnóstico das causas.

Este monitoramento, que visa garantir a eficácia do sistema de controle, aumenta a confiabilidade de operação da planta, para que esta opere, de forma contínua, próxima dos pontos ótimos, ou aceitáveis. Isto gera benefícios, como por exemplo: o aumento da produtividade e da qualidade do produto; o aumento da vida útil dos equipamentos; redução de custos tanto na manutenção quanto na operação, o que atende as exigências de segurança e meio ambiente. O que foi exposto até o momento mostra a importância do monitoramento de controladores industriais, em especial do controle MPC que vem sendo largamente utilizado. Justifica ainda o grande interesse do meio acadêmico e industrial pelo desenvolvimento de técnicas de monitoramento.

1.3 Objetivos

É fato que existe, devido a vasta importância das técnicas de monitoramento e avaliação de desempenho de controladores industriais, várias ferramentas comerciais de monitoramento de MPC. Dentre estas, destacam-se as apresentadas a seguir na Tabela 1.1 (Alghazzawi e Lennox, 2009). No entanto, apesar destas ferramentas fornecerem informações completas sobre o desempenho dos controladores, por serem destinadas à usuários com experiência considerável em tecnologia MPC, estas não são o objetivo de análise do presente trabalho.

Tabela 1.1 - Ferramentas comerciais de monitoramento de MPC (adaptada de Alghazzawi e Lennox, 2009)

Empresa	Ferramenta	Tecnologia MPC suportada	Endereço eletrônico
Honeywell	APC Scout®	RMPCT®	www.hps.honeywell.com
Aspen Tech	Aspen Watch®	DMCplus®	www.aspentech.com
Matrikon	Process Doctor®	RMPCT® DMCplus®	www.matrikon.com
Shell –Yokogawa	MDpro®	SMOC®	www.yokogawa.com

O objetivo principal deste trabalho é a implementação de ferramentas, que utilizem análise estatística multivariada, para monitoramento e avaliação de desempenho de controladores preditivos multivariáveis. Especificamente, utiliza-se a análise de componentes principais (*Principal Component Analysis*, PCA) e a análise de componentes independentes (*Independent Component Analysis*, ICA). A técnica PCA já é consagrada para a avaliação de desempenho de controladores (Alghazzawi e Lennox, 2009), enquanto que a técnica ICA, é consagrada para o monitoramento de processos e detecção de falhas. Assim, neste trabalho, objetivou-se também adequar esta técnica ao monitoramento de controladores, especificamente os MPC.

Os métodos estáticos multivariados são métodos baseado em dados que se beneficiam da vantagem de centrar-se diretamente sobre os dados, evitando a complexidade do modelo, o que os tornam mais práticos. Além disso, os métodos usam gráficos de fácil interpretação que permitem que usuários da linha de frente, como operadores, tenham informações sobre o comportamento anormal no desempenho do controlador. Isto permite que se identifique possíveis causas para esse comportamento.

As ferramentas foram aplicadas em dois estudos de caso, um linear, baseado na coluna de destilação Wood-Berry e outro não-linear, baseado em um processo de craqueamento catalítico, em inglês denominado *Fluid Catalytic Cracking* (FCC). Ambos foram implementados em um simulador utilizando um sistema de controle MPC.

Vale salientar que este trabalho não tem como objetivo apresentar um sistema de monitoramento pronto para instalação em um processo de campo. Isto significa que este estudo proporciona um melhor entendimento do problema com o objetivo de fornecer contribuições para uma possível implementação em um sistema real.

1.4 Revisão Bibliográfica

Apesar das técnicas estatísticas multivariadas serem bastante estudadas e consagradas na literatura, e ainda utilizadas com bastante frequência para detecção de falhas e estudos de condições anormais em processos industriais, o uso destes métodos para monitorar MPC baseado em dados coletados do processo industrial é considerado recente. Por isso, os trabalhos relacionados ao tema são em número reduzido. Análises sucintas sobre os principais trabalhos nesta área são apresentados a seguir:

Bakshi (1998) utiliza o *Multiscale PCA* (MSPCA) aplicado às técnicas MSPC (*Multivariate statistical process control*). O MSPCA combina a capacidade do PCA em descorrelacionar as variáveis com a análise de *Wavelet*. Assim, o MSPCA é apropriado para a modelagem de dados contendo contribuições de eventos cujo comportamento muda ao longo do tempo e frequência.

Harris *et al.* (1999) fizeram uma revisão sobre técnicas de monitoramento e avaliação de desempenho para sistemas de controle mono e multivariáveis. Para os autores, avaliar a essência do sistema de controle requer:

- 1- Determinação da capacidade do sistema;
- 2- Desenvolvimento de estatísticas adequadas para monitorar o desempenho do sistema existente;
- 3- Desenvolvimento de métodos para diagnosticar as causas das mudanças no desempenho do sistema de controle;
- 4- Incorporação destes métodos no ambiente industrial.

Pranatyasto e Qin (2001) aplicam o PCA para detectar, identificar e reconstruir sensores com defeito em uma unidade FCC simulada. Gera-se um modelo de referência baseado em PCA perturbando o processo em toda a região de operação. Se uma falha no sensor é detectada, a validação de dados reconstrói os dados do sensor. Estes dados reconstruídos são então utilizados pelo controlador, evitando uma ação de controle excessiva que pode levar o sistema a uma região operacional indesejável. A ferramenta mostra-se eficiente já que o desempenho do MPC com validação de dados é superior ao sem a validação.

Loquast III e Seborg (2003) sugerem um monitoramento de sistemas MPC baseado em reconhecimento de padrões e PCA. O principal objetivo da pesquisa foi desenvolver um monitoramento de sistemas MPC capaz de responder as seguintes perguntas:

- 1- O sistema MPC está operando normalmente?
- 2- Se não, o baixo desempenho é devido alguma perturbação anormal ou modelo do processo indevido?

A metodologia é aplicada com sucesso para estudo de caso em um modelo de coluna de destilação *Wood Berry*.

Lee *et al.* (2004a), propuseram um novo método estatístico de monitoramento de processos que se baseia na análise de componentes independentes (ICA). A abordagem fornece uma nova estatística, a estatística I^2 , para monitoramento on-line. Esta é uma alternativa à estatística de T^2 de Hotelling, utilizada no PCA. Além disso, os autores descreveram métodos para o cálculo dos limites de confiança e da ordem e redução das componentes independentes. Aplicou-se o método de monitoramento proposto à detecção e identificação de falhas em um processo multivariado simples e em um processo biológico de tratamento de esgoto. Este último é caracterizado por uma variedade de fontes de falha com características não gaussianas. Os resultados da simulação mostraram claramente as vantagens do monitoramento baseado no ICA, quando comparado com o monitoramento baseado no PCA. A estratégia proposta mostrou-se capaz de detectar e isolar o efeito de distúrbios multivariados.

Já em Lee *et al.* (2004b), os autores propõem um método de monitoramento de processo estatístico utilizando análise de componentes independentes dinâmicos (DICA). A maioria dos métodos de monitoramento estatístico multivariados assumem implicitamente que as observações atuais são estatisticamente independentes das observações no passado. Entretanto, em processos dinâmicos, essas premissas são inválidas por causa de suas características dinâmicas e não lineares. O método de monitoramento DICA proposto é a aplicação do ICA à matriz aumentada dos dados, defasadas no tempo. Os autores mostraram que o resultado é um desempenho de monitoramento mais “poderoso” no caso de um processo dinâmico. Aplicou-se o método proposto à detecção de falhas em um processo dinâmico multivariável simples e no processo Tennessee Eastman. Em ambos os estudos de caso, o método de monitoramento proposto detecta eficientemente falhas.

Lee *et al.* (2006) propõem um novo método de monitoramento estatístico multivariado (MSPM) baseado em análise de componentes independentes (ICA). Este novo método aborda alguns problemas no algoritmo ICA original. O resultado é um algoritmo ICA modificado, desenvolvido com a finalidade de MSPM. A ideia básica da abordagem usa o ICA modificado para extrair alguns componentes independentes dominantes dos dados do processo em operação normal e combiná-los com técnicas estatísticas de monitoramento de processos. O método de monitoramento proposto é aplicado para detecção e diagnóstico de

falhas em três processos distintos. Este ainda é comparado com métodos convencionais de monitoramento baseado no PCA.

Jelali (2006) faz uma revisão geral sobre técnicas de avaliação de desempenho de controle e as aplicações na indústria. O autor mostra as vantagens e desvantagens de cada método, avalia publicações da época e dá uma visão geral do que há disponível comercialmente. Além disso, o autor faz uma combinação de diferentes métricas de desempenho de controle e métodos de avaliação para sugerir um procedimento sistemático para monitoramento de desempenho e otimização de controle contínuo.

Qiang e Shaoyuan (2006) propõem um “*benchmark*”, desenvolvido a partir de um conjunto de dados de saída quando o desempenho do controle era considerado satisfatório, baseado em técnicas estatísticas para monitorar e avaliar desempenho de MPC. Os autores utilizaram a técnica PCA para construção de um modelo de componentes principais. O monitoramento e avaliação de desempenho da malha de controle foram realizados comparando-se os dados on-line com o modelo de componentes principais. Nesta comparação, utiliza-se a medida estatística T^2 de Hotelling como índice de desempenho. Para resolver o problema de limitação da análise PCA, em que ela não trata variáveis auto-correlacionadas, criou-se um filtro móvel auto-regressivo de média.

Xiong *et al.* (2007) estendem o uso do PCA e do ICA, utilizando a estimativa da densidade kernel (KDE). Embora o ICA baseie-se em informações de distribuição não gaussianas, o KDE pôde ajudar no monitoramento dos dados. Assim, aplicou-se os métodos PCA, ICA, PCA com KDE (KPCA) e ICA com KDE (KICA). Todos estes métodos foram demonstrados e comparados. Além disso, todos eles são apropriados para fins de monitoramento. O resultado da utilização do KDE mostrou melhorias na precisão do monitoramento. Para estudo de caso, recolheu-se amostras de dados de um reator de catalisador de polipropileno. Os métodos PCA, KPCA, ICA e KICA foram aplicados às variáveis e os resultados de desempenho foram comparados.

Cui *et al.* (2008) abordam melhorias na análise de componentes principais kernel (KPCA), a partir de dois aspectos, aplicada para detecção de falhas. No primeiro aspecto, para reduzir a complexidade computacional do KPCA, quando se tem um grande número de

amostras, utilizou-se um esquema de seleção de vetores característicos (FSV). No segundo aspecto, para melhorar o desempenho da detecção de falhas, adota-se um esquema de análise discriminante de Fisher (FDA). Os resultados são apresentados por meio de simulação para mostrar a eficácia destas melhorias para o desempenho de detecção de falhas em termos de baixo custo computacional e taxa de detecção de falhas elevada.

AlGhazzawi e Lennox (2009) apresentam uma ferramenta, para monitorar MPC, baseada em técnicas MSPC (*Multivariate statistical process control*). Essas técnicas são capazes de identificar variáveis artificiais que são combinações lineares ou não lineares das variáveis originais. Assim, em situações com grande quantidade de correlação, elas podem descrever a maioria das informações em um número reduzido de variáveis artificiais. Os autores utilizam duas técnicas MSPC que são: a análise por componentes principais (PCA) e a Análise de Projeções em Estruturas Latentes (PLS). Com estas, desenvolveu-se um modelo objetivando compará-lo com o desempenho atual do controlador. Obtém-se o modelo a partir de um conjunto de dados do processo que representa o desempenho ideal do controlador. Essa ferramenta foi capaz de identificar anormalidades tais como baixo desempenho do sistema de controle e perturbações não medidas, mostrando oferecer grande potencial para monitoramento de MPC.

Stefatos e Hamza (2010) introduziram um novo método de detecção e diagnóstico de falhas utilizando uma abordagem baseada em análise dinâmica de componentes independentes (DICA). Além disso, apresentou, também, uma estratégia para detectar e diagnosticar falhas. O método proposto foi aplicado em um processo Tennessee Eastman. Os autores demonstraram, nos resultados experimentais, que modelar o processo dinamicamente e aplicar a técnica DICA proposta supera muitos dos métodos de monitoramento de processos atualmente existentes. Além disso, o algoritmo de diagnóstico proposto foi capaz de detectar com precisão e isolar as causas de cada falha individual.

Hsu *et al.* (2010) propõem um novo esquema de monitoramento de processo baseado em ICA. Este esquema, além de utilizar a matriz de dados aumentada, para considerar a dinâmica do processo, utiliza também uma regra de rejeição de pontos fora da curva, estes denominados “*outliers*”. Além disso, os autores também propõem uma medida retangular para ser usada como estatística de monitoramento. A eficiência do método é demonstrada por

meio da aplicação em três casos: um exemplo de simulação; o processo Tennessee Eastman e um caso industrial real.

Zhang *et al.* (2010) propõem um algoritmo ICA modificado, denominado PSO-ICA, para monitoramento de processos baseado em métodos estatísticos multivariados. Esta abordagem, baseada na técnica proposta, resolve o problema da ordem das componentes independentes, que o algoritmo ICA original não determina. A ideia básica desta abordagem é usar o algoritmo PSO-ICA para extrair as componentes independentes dominantes dos dados do processo em operação normal.

Tian *et al.* (2011b) propõem utilizar o PCA para monitorar o desempenho de controladores MPC. Os autores sugerem um *framework* unificado baseado na dinâmica do PCA. Um *benchmark* é adotado para avaliação de desempenho. Já para diagnóstico, utiliza-se um sistema unificado e ponderado de medida de similaridade da dinâmica PCA. Como estudo de caso, utilizou-se o processo *Shell*. A partir desta aplicação, os autores comprovam que o uso do PCA dinâmico pode detectar a deterioração do desempenho com mais rapidez quando comparado com o método PCA tradicional, e ainda pode detectar a causa raiz do fraco desempenho do controlador MPC.

Slišković *et al.* (2012) utilizam os métodos estatísticos multivariados para modelar as relações entre as variáveis dos processos. Os autores constroem modelos, baseado nestes métodos, para verificar as novas medições que são adquiridas e para julgar se uma situação anormal do processo ocorreu ou não. Assim, quando detectada e identificada uma falha, pode-se realizar ações adicionais apropriadas. Os métodos estatísticos utilizados pelos autores baseiam-se nas técnicas PCA e ICA. As estatísticas T^2 de Hotelling, I^2 e SPE, são utilizadas para detecção de falhas de sensores. Os algoritmos propostos são aplicados em dois processos simulados. Além disso, faz-se uma comparação entre a capacidade de detecção de falhas de cada método estatístico. Como resultado, os autores apresentaram que o monitoramento baseado em ICA é mais sensível do que o método baseado em PCA, isto é, o ICA revelou mais falhas de sensor.

Xu *et al.* (2014) abordam a avaliação de desempenho de sistemas MPC baseado em dados sobre várias condições de operação. Os autores propõem um índice global para

classificar diferentes condições de operação do conjunto de dados, em tempo real. Este índice torna a avaliação de desempenho mais precisa, pois identifica a condição de operação que os dados, em tempo real, pertencem. Além disso, é baseado em dois fatores de similaridade: o fator de similaridade PCA e a distância de *Bhattacharyya*.

Gao *et al.* (2016) fornecem uma ampla revisão das metodologias típicas de monitoramento e diagnóstico de controladores. Além disso, discute-se também os problemas existentes nas amplas aplicações das técnicas de avaliação de desempenho de controladores (CPA) em empresas industriais. Os autores concluem que, de um ponto de vista prático, há uma demanda urgente para que as CPA possam operar automaticamente com eficácia a longo prazo. Assim, para alcançar este objetivo final, é necessário integrar o conhecimento do processo. Além disso, os autores propõem também uma nova estrutura de monitoramento, diagnóstico e manutenção de controladores, que fornece soluções de grande potencial para aplicações industriais das CPA.

1.5 Estrutura do trabalho

Este trabalho será apresentado da seguinte forma:

- **Capítulo 1:** Apresentam-se as preliminares do trabalho. Além disso, apresenta-se também a motivação e os objetivos deste trabalho, assim como uma revisão bibliográfica sobre os métodos estatísticos multivariados e suas aplicações. Dentre estas, o problema de avaliação de desempenho de controladores MPC.
- **Capítulo 2:** No segundo capítulo apresenta-se o conceito de monitoramento e avaliação de desempenho de controladores e ainda, por meio de uma breve revisão, apresenta-se um histórico evolutivo. Neste histórico, esclarece-se como surgiu e evoluiu a análise estatística aplicada ao monitoramento e avaliação de desempenho de MPC.
- **Capítulo 3:** Neste capítulo, apresentam-se as informações inerentes aos processos escolhidos como estudos de caso. Os processos escolhidos foram: uma coluna de destilação, especificamente a de Wood-Berry e uma unidade de craqueamento catalítico (FCC). As

estratégias de controle aplicadas aos processos citados também são apresentadas neste capítulo.

- **Capítulo 4:** No quarto capítulo, apresenta-se a teoria da estatística multivariada PCA, além da metodologia de monitoramento baseada nessa técnica e sua aplicação nos processos escolhidos como estudo de caso. Os resultados obtidos são apresentados e discutidos.
- **Capítulo 5:** No capítulo, apresenta-se a teoria da estatística multivariada ICA e a metodologia de monitoramento baseada nessa técnica. Além disso, apresenta-se também a aplicação do método nos processos escolhidos como estudo de caso. Os resultados obtidos são apresentados e discutidos.
- **Capítulo 6:** No sexto capítulo, apresenta-se o método de diagnóstico utilizado para detectar a causa do mau desempenho do sistema de controle. Aplica-se este método nos dois estudos de caso.
- **Capítulo 7:** Finalmente, no último capítulo discutem-se as principais conclusões com relação aos resultados obtidos nas aplicações das técnicas baseadas em PCA e em ICA, nos já citados processos, e ainda, perspectivas de trabalhos futuros.

1.6 Publicações

Dentre os resultados obtidos durante a elaboração desta dissertação de mestrado, alguns deles deram origem a um artigo que foi aceito em um importante congresso na área, conforme apresentado a seguir:

“Monitoramento e Avaliação de Desempenho de Sistemas MPC Utilizando Métodos Estatísticos Multivariados”, dos autores Nyanne M. G. Rego Fontes e Oscar A. Z. Sotomayor. Este artigo foi publicado na XVII CLCA Conferência Latino-americana de Controle Automático, realizado na cidade de Medellín na Colômbia entre os dias 13 a 15 de outubro de 2016.

Capítulo 2

Avaliação de Desempenho de Controladores

2.1 Introdução

A indústria de processos vem investindo fortemente na aplicação de controle avançado, como os controladores preditivos MPC (*Model Predictive Control*). Estes controladores têm a vantagem de atender o desempenho especificado na fase inicial de operação da planta, mantendo-a operando dentro de suas restrições de forma lucrativa. Entretanto, seu desempenho necessita ser monitorado e avaliado durante sua operação, pois, como todo algoritmo de controle, depois de algum tempo, dificilmente o controlador funciona como foi sintonizado inicialmente. Isto acontece, principalmente, devido à perda de representatividade do modelo do processo inicialmente utilizado. Assim, faz-se necessário utilizar métodos de monitoramento e avaliação de desempenho de controladores, que em inglês é conhecido como *Controller Performance Monitoring and Assessment* (CPMA). Os métodos CPMA têm como objetivo avaliar se o sistema de controle mantém o desempenho desejado, verificando se as especificações de projeto do sistema de controle estão sendo executadas de forma satisfatória. Deve-se observar que estes métodos são aplicados não somente a sistemas de controle que utilizam estratégias de controle avançado. De acordo com Sotomayor *et al.* (2006a) quando se quer ter o conhecimento sobre o desempenho do sistema de controle utilizando-se os métodos CPMA, quer-se responder as perguntas explanadas na Figura 2.1 a seguir:

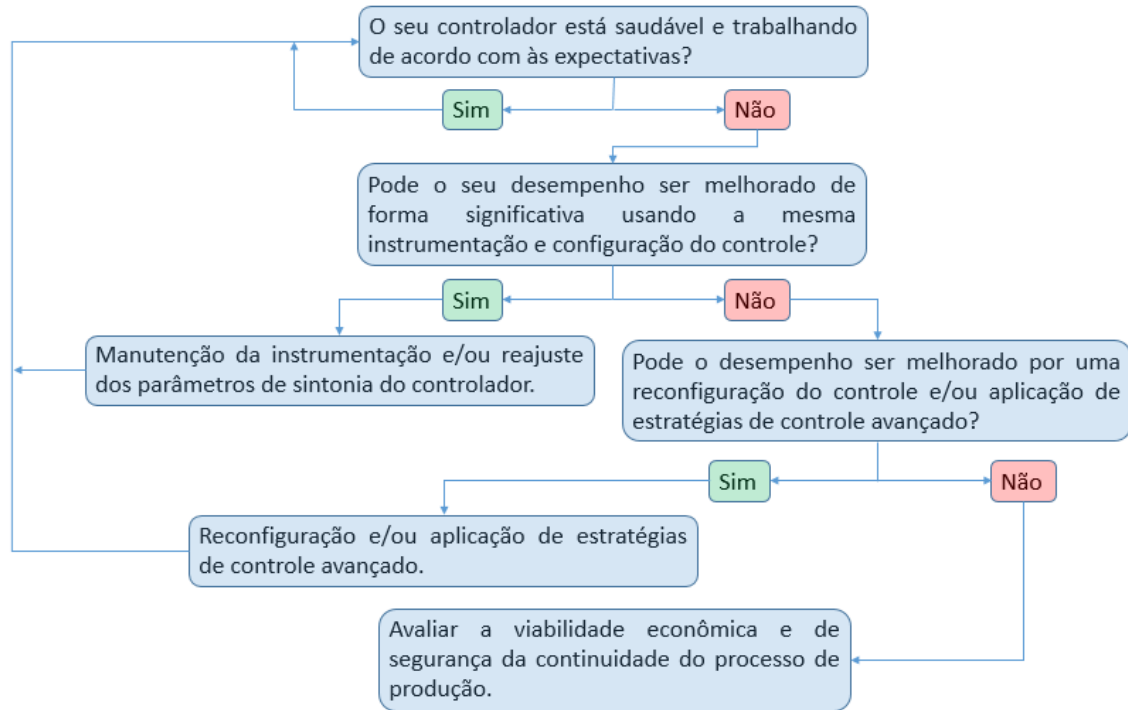


Figura 2.1 - Esquemático de monitoramento dos métodos CPMA

Embora vários métodos CPMA tenham sido propostos na literatura, todos compartilham de uma mesma característica, qual seja, a comparação da qualidade do controlador atual com a qualidade de um modelo de referência (*benchmark*). Este traz o desempenho de um controlador considerado o mais próximo do desejado. Geralmente, usa-se como métrica, para avaliação de desempenho, um índice comparativo dado por (Santos, 2013):

$$\eta = \frac{J_{desejado}}{J_{real}} \quad (2.1)$$

Em que: $J_{desejado}$ é o valor de referência do índice de desempenho desejado e J_{real} é o valor real medido do desempenho do processo.

Apresenta-se a seguir, resumidamente, um quadro evolutivo dos métodos de avaliação de desempenho de controladores, do clássico ao avançado, desde o controlador de variância mínima até os métodos baseados em estatísticas multivariadas.

2.2 Metodologias de avaliação de desempenho de controladores

Dentre os primeiros trabalhos na área de monitoramento e avaliação de desempenho de controladores, o mais significativo é o trabalho de Harris (1989). Nesse, o autor explica como o desempenho de um sistema de controle monovariável, conhecido do inglês como *single-input/single-output* (SISO), pode ser comparado com o que seria alcançado se um controlador de variância mínima fosse aplicado. Como modelo de referência, Harris utilizou o chamado *minimum variance controller* (MVC) e ainda propôs uma estatística conhecida como índice de Harris. Esta é definida como a razão entre a variância atingida quando se utiliza o controle MVC e a variância medida sob a lei de controle atual. Esta métrica indica o desempenho do controlador da seguinte forma: quando o valor desta estatística diminui, o desempenho medido do sistema de controle também diminui. Uma das vantagens desta abordagem para monitoramento é que são necessários apenas dados operacionais de rotina para determinar o desempenho do sistema de controle. Este fato resultou em muitas aplicações na indústria e é utilizado por muitas empresas, em pacotes comerciais de avaliação de controladores SISO.

Argumentando que o desempenho do MVC não é um objetivo realista para um sistema de controle industrial, fato indubitavelmente reconhecido, muitos pesquisadores propuseram outros índices de desempenho (Ko e Edgar, 1998; Horch e Isaksson, 1999). Entretanto, as técnicas MVC são as mais utilizadas e foram aprimoradas ao longo do tempo. Os pesquisadores Desborough e Harris (1993), por exemplo, estenderam a citada técnica para avaliação de desempenho de controladores *feedforward/feedback* SISO, enquanto que Harris et al. (1996) a adaptaram para controladores *feedback multiple-input/multiple-output* (MIMO). Já os pesquisadores Ko e Edgar (2000) a adaptaram para controladores em cascata.

Sabe-se que o uso do *benchmark* MVC para avaliação de desempenho de MPC é inadequado, mesmo no caso de avaliação de desempenho de controladores SISO. Isto porque as restrições, o forte acoplamento entre as variáveis e as não-linearidades presentes em processos que utilizam algoritmo de controle MPC faz o desempenho de variância mínima

ser inatingível para o MPC. Desta forma, outras abordagens têm sido adotadas para avaliar controladores MPC. Nas últimas décadas, a avaliação de desempenho de MPC tem sido um tema de vasto interesse. Neste período, dois grandes grupos de métodos CPMA destacam-se (Huang e Kadali, 2008): abordagens baseada em modelo e abordagens baseada em dados. Apesar dos métodos baseados em modelos serem mais realistas, estes possuem a grande desvantagem de necessitar do modelo do processo. Isto porque, na prática, em muitos casos, não se consegue obter um modelo dinâmico do processo que o represente adequadamente. Deve-se isto, na maioria dos casos, a natureza não-linear da dinâmica do processo. Neste grupo de métodos baseado em modelos, o maior destaque dá-se ao *Linear Quadratic Gaussian* (LQG) *benchmark*, que é uma abordagem alternativa ao *MVC benchmark*, proposta por Huang (1997). Este método considera a variância da variável de controle no sistema e foi utilizado por Shah *et al.* (2002) para avaliação de desempenho de MPC. A desvantagem deste método é que, para calcular a curva de desempenho, são necessários os modelos completos do processo e as perturbações dinâmicas. Além disso, o desempenho do LQG representa um padrão inatingível para algoritmos MPC comerciais derivados de modelos de perturbação simplificados (Qiang, 2006).

Para avaliação de desempenho de controladores MPC, no caso MIMO, que apresentam fortes interações entre as variáveis, métodos de monitoramento conhecidos como *multivariate statistical process control* (MSPC) foram propostos. Neste contexto, Loquist III e Seborg (2003) utilizou a técnica de análise de componentes principais, ou ainda do inglês *principal component analysis* (PCA) e fatores de distância de similaridade. Enquanto que Zhang (2004) introduz os mínimos quadrados parciais, conhecidos como *partial least squares* (PLS). Estes métodos de análise estatística multivariada são abordagens baseada em dados. Diferentemente do *MVC benchmark* e do *LQG benchmark*, estes utilizam, como valor de referência, um conjunto de dados do sistema durante um período de tempo. Este conjunto de dados é obtido quando se inicia o MPC e seu comportamento é considerado próximo dos valores desejados. Uma vez que a abordagem baseada em dados não é limitada pelo modelo, esta pode ser aplicada usando apenas os dados de entrada e saída do sistema, tornando o *benchmark* simples e realizável.

2.3 MSPC aplicadas a avaliação de desempenho de MPC

Métodos conhecidos como “*Statistical Process Control*” (SPC) constituem a base do monitoramento de desempenho de processos e de detecção de falhas. Estes, têm como objetivo monitorar o desempenho de processos, ou de controladores, ao longo do tempo para verificar se os mesmos permanecem com o desempenho desejável. Entretanto, estes métodos, por serem métodos univariados, não são adequados para a análise de dados de processo em que há interações entre as variáveis monitoradas. Isto porque, neste caso, as interações entre as variáveis monitoradas podem levar a resultados enganosos no monitoramento (Martin *et al.*, 1996). Estas limitações são abordadas pelos métodos de controle de processos estatísticos multivariados (MSPC). Neste caso, estes métodos consideram todos os dados a serem monitorados, simultaneamente, levando-se em conta a influência no comportamento de uma variável sobre as outras. Os autores Venkatsubramanian *et al.* (2003) apresentaram em seu trabalho uma revisão sobre as diversas técnicas que têm sido propostas para analisar as grandes quantidades de dados disponíveis sobre as plantas de processo, dentre estas, os métodos MSPC.

Para fins de monitoramento, os métodos MSPC começaram a ganhar atenção a partir dos anos 1990 em diante. Um dos primeiros trabalhos foi escrito por Kresta *et al.* (1991), que descreveram uma metodologia utilizando os métodos MSPC para detectar condições anormais em processos contínuos. A ideia principal destes métodos é reduzir a dimensão dos dados e extrair as principais características destes dados. Por meio destas informações úteis, estatísticas são construídas para monitoramento.

Os métodos MSPC mais utilizados para monitoramento são aqueles que utilizam a técnica PCA e aqueles que utilizam os Mínimos Quadrados Parciais, do inglês “*Partial Least Squares*” (PLS). A primeira explica a estrutura de variância e covariância dos dados por meio de combinações lineares das variáveis originais. Estas combinações, em geral, trazem informações úteis dos dados. Com abordagem diferente, a segunda é uma técnica de decomposição de dados que consiste em tratar os dados para relacionar variáveis dependentes

com variáveis independentes ou preditoras. Isto permite ajustar um modelo que quando obtido é utilizado para predição das variáveis dependentes. Nas últimas décadas, diversas melhorias e modificações foram realizadas nestes métodos (Ge e Song, 2007). Além disso, novas técnicas também foram introduzidas na área de monitoramento, tais como a Análise de Componentes Independentes (ICA), que também faz parte do escopo desse trabalho.

Os métodos MSPC também se mostraram uma ferramenta bastante poderosa no monitoramento e avaliação de desempenho de controladores MPC (AlGhazzawi e Lennox, 2009). Convém observar que, devido ao tamanho e a complexidade dos sistemas MPC, identificar e diagnosticar problemas com o seu funcionamento tornou-se um grande desafio. No entanto, estes desafios são recompensados uma vez que, estes métodos, quando aplicados ao problema de monitoramento e avaliação de desempenho de MPC, são capazes de determinar as variáveis do processo que são fontes de degradação do desempenho. Assim, as aplicações destes métodos fornecem informações de monitoramento mais completas. AlGhazzawi e Lennox (2009) aplicaram com sucesso os métodos de monitoramento baseados em PCA e PLS.

Atualmente, a importância do monitoramento do desempenho de controladores em geral e, especificamente, de controladores MPC, é um fato consagrado por questões de segurança e economia. Neste contexto, pesquisadores acadêmicos, profissionais, e fornecedores de tecnologia têm demonstrado um grande interesse em desenvolver ferramentas capazes de atender essa demanda. Este esforço resultou em várias publicações bem como no desenvolvimento de várias ferramentas comerciais (AlGhazzawi e Lennox, 2009).

Dentro desse contexto, neste trabalho, realiza-se o monitoramento e avaliação de desempenho do controle MPC baseado nas técnicas PCA e ICA. Convém observar que, a técnica PCA já é consagrada para avaliação de desempenho de controladores, enquanto que a técnica ICA é bastante utilizada em sistemas de detecção de falhas e foi adaptada para o monitoramento de MPC, que faz parte do objetivo desse trabalho.

Capítulo 3

Estudos de Caso

Apresentam-se, neste capítulo, os sistemas que serão utilizados como estudos de caso para monitorar e avaliar desempenho dos controladores preditivos multivariáveis, utilizando as ferramentas implementadas neste trabalho, quais sejam: PCA e ICA. Vale salientar que o projeto dos controladores de ambos os processos não fizeram parte do escopo deste trabalho. Isto é, os sistemas de controlador MPC já operavam em ambientes computacionais com sintonias feitas, e consideradas adequadas, em etapas anteriores. Sendo assim, este capítulo tem por objetivo apenas apresentar informações, dos processos e dos controladores já sintonizados, que foram utilizadas para o desenvolvimento das ferramentas de monitoramento e avaliação de desempenho dos MPC's.

3.1 Coluna de destilação Wood-Berry

O processo de destilação consiste, em linhas gerais, em um processo no qual uma mistura de duas ou mais substâncias, no estado líquido ou vapor, são separadas em frações com composições diferentes da mistura original. Estas substâncias, por sua vez, devem ter volatilidades diferentes entre si. A separação se dá por meio da transferência simultânea de massa do líquido pela vaporização e do vapor pela condensação. O resultado é o aumento da concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido. Este processo acontece visando atender as exigências estabelecidas para controle de qualidade.

Um modelo de coluna de destilação para separação de uma mistura de metanol e água desenvolvido em escala piloto, foi proposto por Wood e Berry (1973). Este processo

vem sendo usado em muitos trabalhos de controle de processos e monitoramento (Tian, 2011a).

O processo é composto por vários equipamentos, sendo o mais importante deles a coluna, que é responsável pela separação da mistura. Na Figura 3.1 ilustra-se um esquemático básico de uma coluna de destilação Wood-Berry. Observa-se que a mistura de metanol e água flui para a parte inferior da coluna de destilação. Quando essa mistura chega ao fundo da coluna, parte dessa é retirada e passa por um trocador de calor, em que é vaporizado. A mistura agora na forma de vapor é reinjetada no fundo da coluna e forma a corrente ascendente de vapor no interior desta. Esta corrente carrega o elemento leve e deixa o pesado. Este processo é um dos princípios básicos da separação. O líquido não vaporizado no trocador de calor é removido como produto de fundo, quando atende as especificações de controle de qualidade. O vapor ascendente que chega ao topo da coluna tem concentração elevada do produto leve, que é o metanol, e é resfriado por um condensador. O líquido condensado é o produto de topo, ou destilado. Parte do líquido formado é reciclado de volta ao topo da coluna como refluxo e outra parte é retirada quando atende as especificações de controle de qualidade.

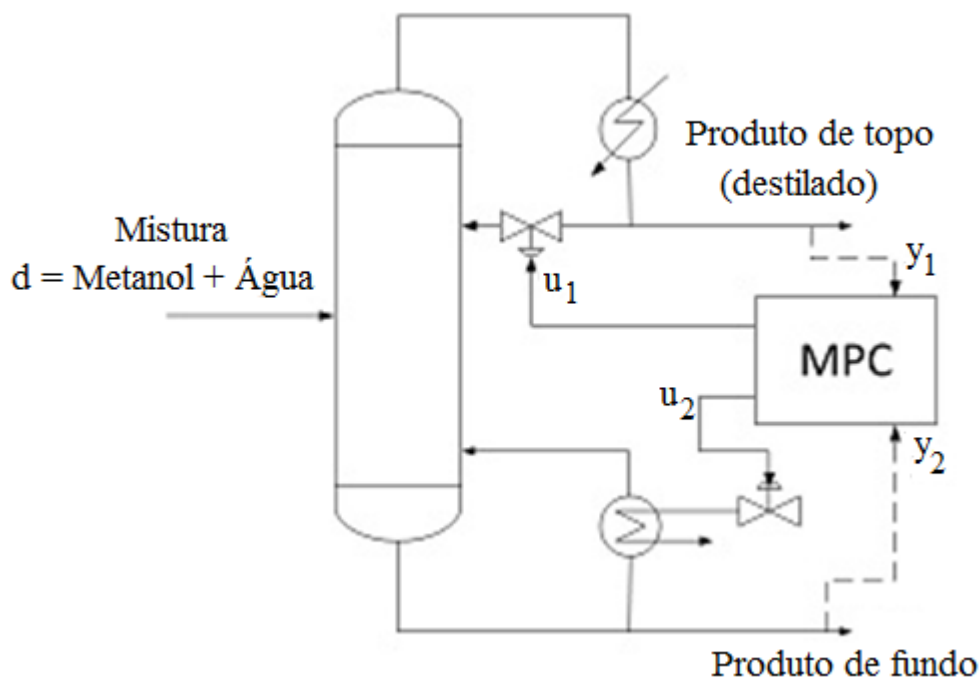


Figura 3.1 - Coluna de destilação Wood-Berry

A coluna de destilação Wood-Berry é um modelo multivariável com duas entradas (variáveis manipuladas) e duas saídas (variáveis controladas), quais sejam:

Variáveis manipuladas:

- Vazão mássica de refluxo $u_1(s)$ expresso em lb/min;
- Vazão mássica de vapor $u_2(s)$ expresso em lb/min.

Variáveis controladas:

- Porcentagem mássica de metanol no topo $y_1(s)$;
- Porcentagem mássica de metanol no fundo $y_2(s)$.

O modelo desta coluna de destilação é representado pelas seguintes equações de transferência (Wood e Berry, 1973):

$$\begin{bmatrix} y_1(s) \\ y_2(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{12,8e^{-s}}{16,7s + 1} & \frac{-18,9e^{-3s}}{21,0s + 1} \\ \frac{6,6e^{-7s}}{10,9s + 1} & \frac{-19,4e^{-3s}}{14,4s + 1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(s) \\ u_2(s) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{3,8e^{-8s}}{10,9s + 1} \\ \frac{4,9e^{-3s}}{13,2s + 1} \end{bmatrix} d(s) \quad (3.1)$$

Neste modelo, a unidade de tempo padrão é o minuto. $d(s)$ é uma variável de distúrbio não mensurada que representa a influência da variação na vazão de alimentação sobre as variáveis controladas. Na simulação de controle em malha fechada utilizou-se a estratégia de controle MPC.

3.1.1. Controle MPC da coluna Wood-Berry

Sabe-se que a coluna de destilação Wood-Berry é um processo de baixa complexidade e que, portanto, um sistema de controle clássico atenderia as condições de controle de qualidade. No entanto, para os objetivos do presente trabalho, utilizou-se nesta coluna um sistema de controle MPC, explorando desta forma as metodologias de

monitoramento aqui estudadas, para posterior aplicação em processos com maior grau de complexidade, operando sob controle MPC.

Com relação ao controlador preditivo, sabe-se que este tem sua ação de controle determinada com base na predição do comportamento futuro do processo, por meio de um modelo de predição. A cada período de amostragem, realiza-se a predição do comportamento futuro do processo, dentro de um horizonte de predição pré-estabelecido. Esta predição é função de uma sequência de ações de controle aplicadas na entrada. Convém observar que somente o primeiro valor da sequência de ações calculadas é aplicado ao processo, e o cálculo de uma nova sequência é repetido no instante seguinte. Um diagrama esquemático da estrutura do controlador MPC é mostrado na Figura 3.2.

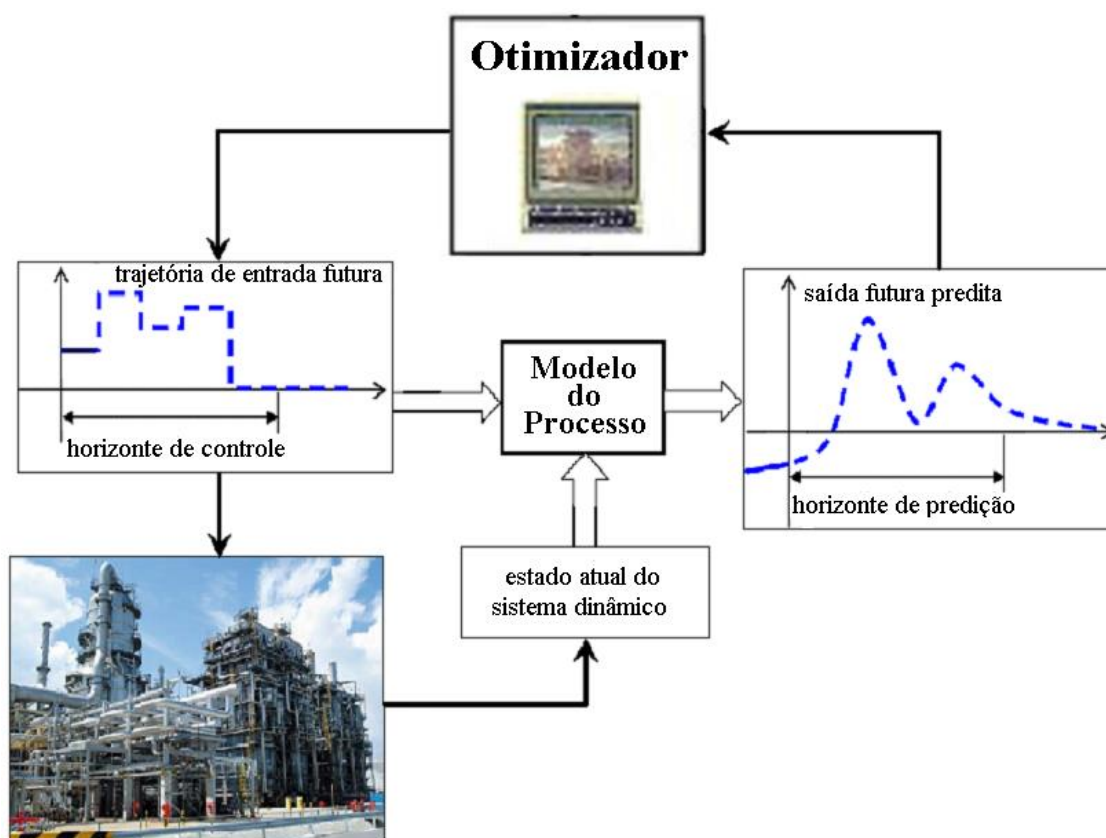


Figura 3.2 - Estrutura do controlador MPC

O MPC utilizado neste trabalho é o *Quadratic Dynamic Matrix Control* (QDMC) de García e Morshedi (1986). O QDMC é um controlador preditivo, capaz de tratar restrições, que utiliza programação quadrática (QP). Neste caso, para evitar violações das restrições,

calculam-se a sequência de ações de controle respeitando as restrições impostas. Na prática, processos reais estão sujeitos a restrições exigidas pelos equipamentos, por conta das condições de operação, de segurança, etc. Os algoritmos de controle que tratam as restrições, procuram, iterativamente, soluções que não violem estas restrições. Normalmente, o QDMC minimiza uma função objetivo quadrática como a apresentada na Equação (3.2), sujeito às restrições das Equações (3.3) e (3.4).

$$\begin{aligned} \min_{\Delta u} J = & \sum_{i=1}^{h_p} (\hat{y}(k+i) - y_{sp})^T Q (\hat{y}(k+i) - y_{sp}) \\ & + \sum_{j=1}^{h_c} \Delta u(k+j-1)^T R \Delta u(k+j-1) \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$-\Delta u_{max} \leq \Delta u(k+j-1) \leq \Delta u_{max}, j = 1, \dots, h_c \quad (3.3)$$

$$u_{min} \leq u(k+j-1) \leq u_{max}, j = 1, \dots, h_c \quad (3.4)$$

Em que: $\hat{y}(k+i)$ é o valor predito da saída; y_{sp} é o valor da referência; $\Delta u(k+j-1)$ é o incremento nas entradas; k é o instante atual de amostragem; h_p é o horizonte de predição; h_c é o horizonte de controle; u_{max} e u_{min} são os limites máximos e mínimos das entradas; Δu_{max} é o limite máximo do incremento nas entradas; R é a matriz diagonal de ponderação das variações das ações de controle e Q é a matriz diagonal de ponderação das variáveis controladas.

Os parâmetros de sintonia do controlador QDMC foram ajustados de acordo com os valores propostos no trabalho de Tian (2011a), os quais são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Parâmetros de sintonia do controlador QDMC para coluna Wood-Berry

Parâmetro	Descrição	Valor
n_y	Número de saídas	2
n_u	Número de entradas	2

T_s	Tempo de amostragem (min)	1
N	Horizonte do modelo	80
h_p	Horizonte de predição	10
h_c	Horizonte de controle	1
u_{min}	Limite mínimo das entradas	$[-0,2, -0,2]^T$
u_{max}	Limite máximo das entradas	$[0,2, 0,2]^T$
Δu_{max}	Limite máximo de incremento nas entradas	$[0,05, 0,05]^T$
Q	Fator de ponderação das saídas	Diag([1 1])
R	Fator de supressão das entradas	Diag([1 1])

Com estes parâmetros de sintonia, obtiveram-se os resultados das variáveis controladas e manipuladas. A variável de distúrbio não mensurada $d(s)$ foi adicionada na simulação com variância de 0,01. As trajetórias de referência das variáveis controladas, y_1 e y_2 , foram definidas em 1 e 0,8, respectivamente. O simulador do processo foi implementado em ambiente computacional, apresentado na Figura 3.3. A Figura 3.4 e Figura 3.5 mostram estes os resultados.

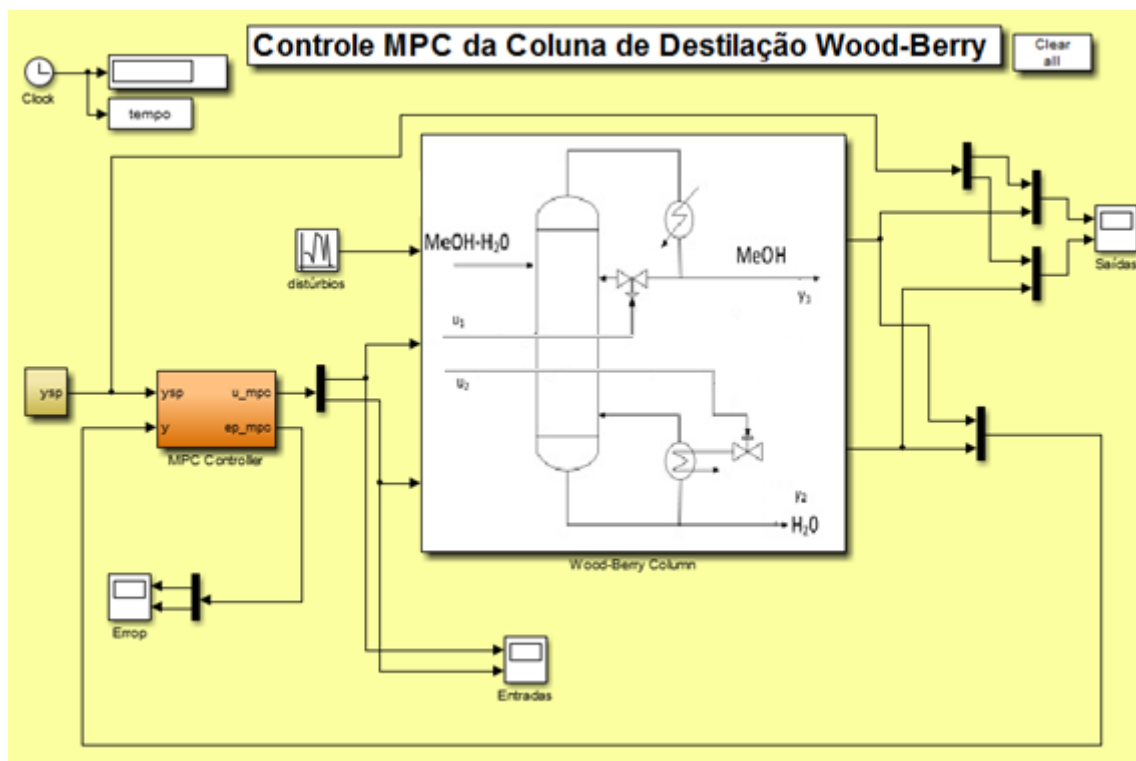


Figura 3.3 - Layout do simulador da coluna de destilação Wood-Berry

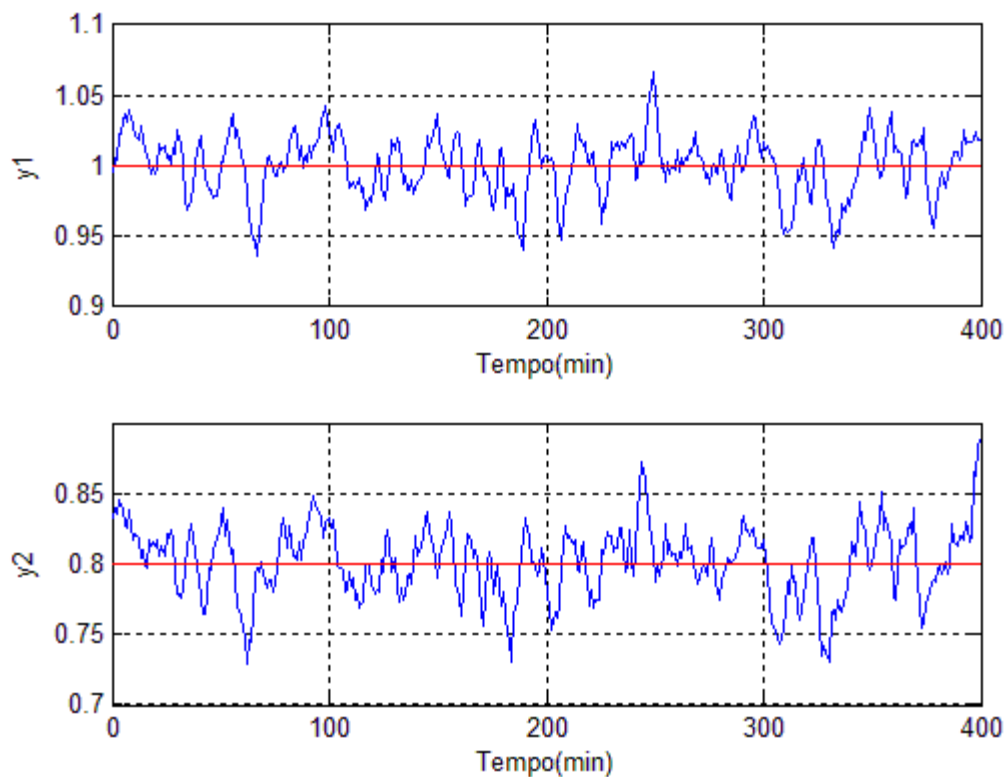


Figura 3.4 - Variáveis controladas para coluna Wood-Berry

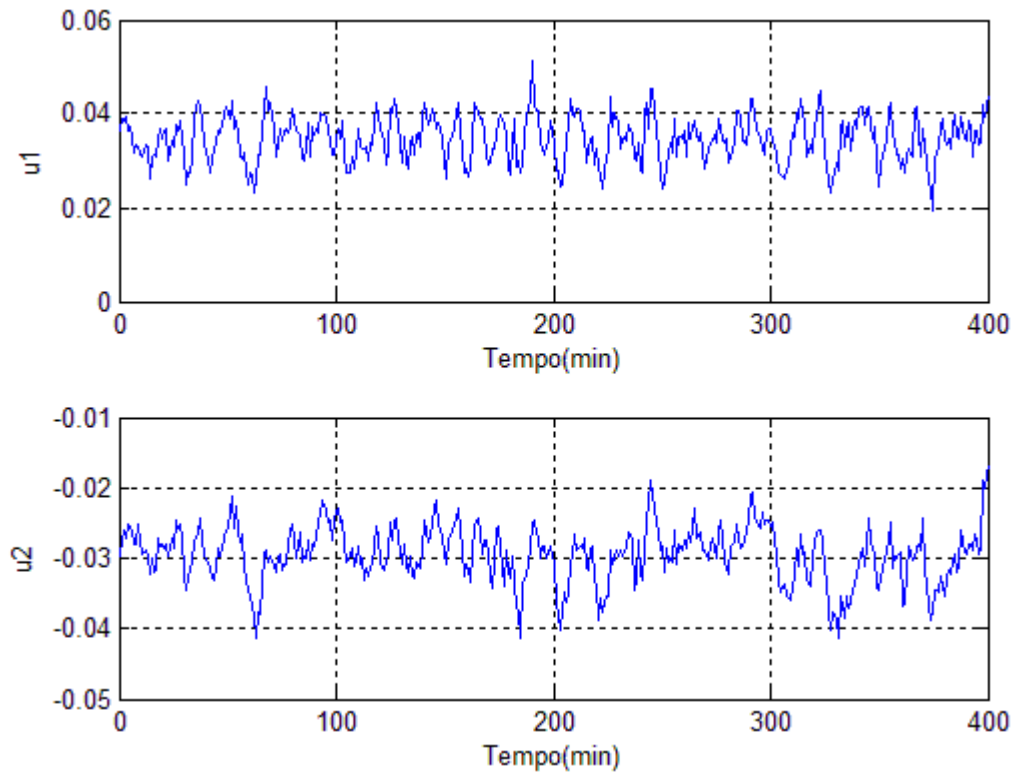


Figura 3.5 - Variáveis manipuladas para coluna Wood-Berry

3.2 Unidade de craqueamento catalítico (FCC)

O craqueamento catalítico é o processo de refino que predomina nas refinarias atuais (Gary e Handwerk, 2001). Este, por sua vez, é responsável por converter frações pesadas de petróleo bruto em derivados mais nobres, quais sejam: gasolina e o gás liquefeito de petróleo (GLP). O petróleo bruto, quando em contato com o catalisador em temperatura elevada, vaporiza-se e sofre decomposição. Esta reação gera uma mistura rica em componentes leves. Além da formação de gasolina e GLP, formam-se também outros produtos, que são: gás combustível; óleo leve de reciclo (LCO) e óleo decantado (OD). Mostra-se, na Figura 3.6 a seguir, um esquemático simplificado adaptado de Quelhas *et al.*, 2012, contendo as entradas e saídas da referida unidade.

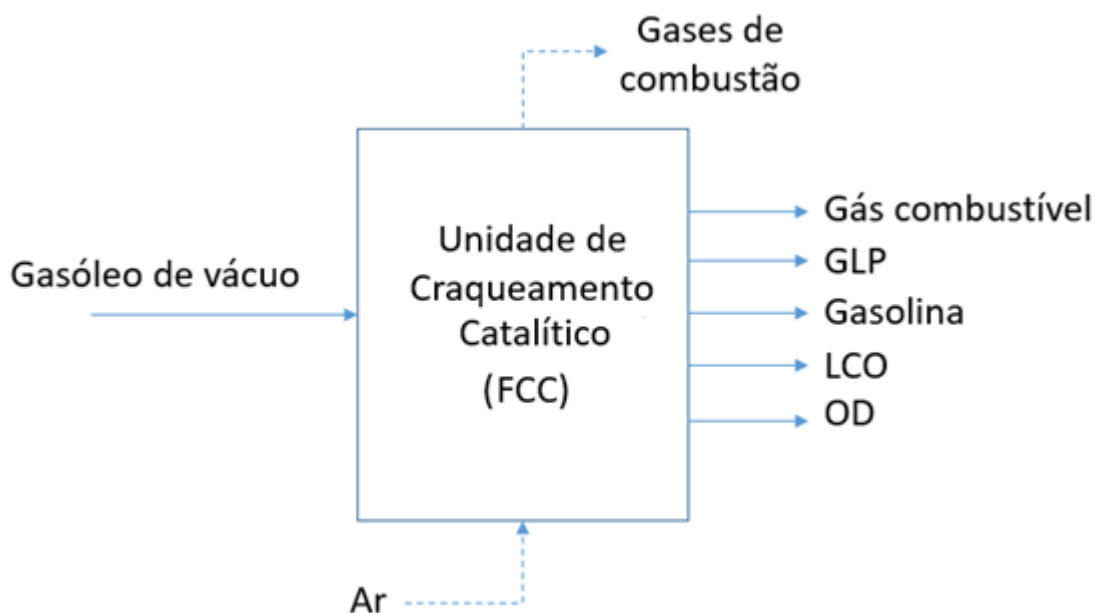


Figura 3.6 – Entradas e saídas do FCC (adaptada de Quelhas et al. 2012)

A unidade FCC caracteriza-se por ser um processo altamente não-linear e multivariável, com dinâmicas rígidas, sujeito a várias restrições operacionais. Além disso, esta unidade trabalha a altas temperaturas e pressões e, falhas em seu funcionamento, pode decorrer em possíveis incêndios e explosões.

Na Figura 3.7, apresenta-se um diagrama esquemático simplificado da unidade de FCC Kellogg Orthoflow modelo F similar à unidade atualmente em operação na refinaria Henrique Lages (REVAP) da PETROBRAS em São José dos Campos (Sotomayor, 2006).

Neste trabalho, para simular o processo FCC, adotou-se o modelo fenomenológico desenvolvido por Moro e Odloak (1995). Este modelo foi validado com dados industriais da unidade FCC da REVAP. O modelo contém 9 entradas e 9 saídas, constituído por 26 equações diferenciais e 74 equações algébricas lineares e não-lineares. Por não fazer parte do escopo deste trabalho o levantamento do modelo, as equações do modelo e os parâmetros do processo são aqui omitidos. Estas informações podem ser vistas em Moro e Odloak (1995).

A operação da unidade de FCC é altamente complexa. A carga de alimentação da unidade é o gasóleo pesado, da destilação a vácuo, e o óleo desasfaltado, que é uma corrente mais pesada que o gasóleo. Estas misturas, antes de alimentar a seção de reação, passa por

um sistema de preaquecimento, sendo em seguida introduzida no *riser*. Este corresponde ao equipamento onde ocorrem as reações de craqueamento. O catalisador proveniente do regenerador também é introduzido no *riser*. A carga do processo, quando em contato com o catalisador em temperatura elevada, vaporiza-se e sofre decomposição, gerando uma mistura mais rica em componentes leves. Além disso, ocorre também a formação e a deposição de coque sobre o catalisador, devido as reações de craqueamento. Esta deposição do coque leva à desativação do catalisador, sendo assim necessário à sua remoção. Em seguida, os produtos provenientes da reação e o catalisador deixam o *riser* em direção ao vaso separador, também, neste caso, denominado reator. No vaso separador ocorre a separação entre o catalisador, já desativado, e os gases produzidos pelas reações de craqueamento. Assim, o catalisador é lançado para baixo, enquanto os gases craqueados sobem e são conduzidos à etapa de recuperação na fracionadora principal. Para que a ação catalítica seja restaurada, o catalisador deve ser regenerado. Isto ocorre no regenerador, onde acontece a queima do coque depositado no catalisador, transformando-o em gases de combustão. Para esta queima, requer-se ar, que é suprido por um soprador de grande capacidade. Neste caso, o regenerador possui dois estágios, permitindo assim o aumento da eficácia de regeneração. Cada um desses estágios é composto de duas fases, de acordo com a densidade de partículas sólidas. As fases são: a fase densa, onde predomina a massa de sólidos e onde o catalisador absorve a carga térmica proveniente da combustão, e a fase diluída, que é a região acima da fase densa, onde predominam os gases de combustão e uma certa quantidade de finos de catalisador.

Para a operação estável do FCC, o simulador inclui, necessariamente, controladores convencionais PI. Estes controladores convencionais fazem parte do sistema de controle regulatório, visando manter a pressão diferencial entre o regenerador e o reator, o nível de catalisador no reator e a pressão de sucção do compressor, em valores pré-estabelecidos.

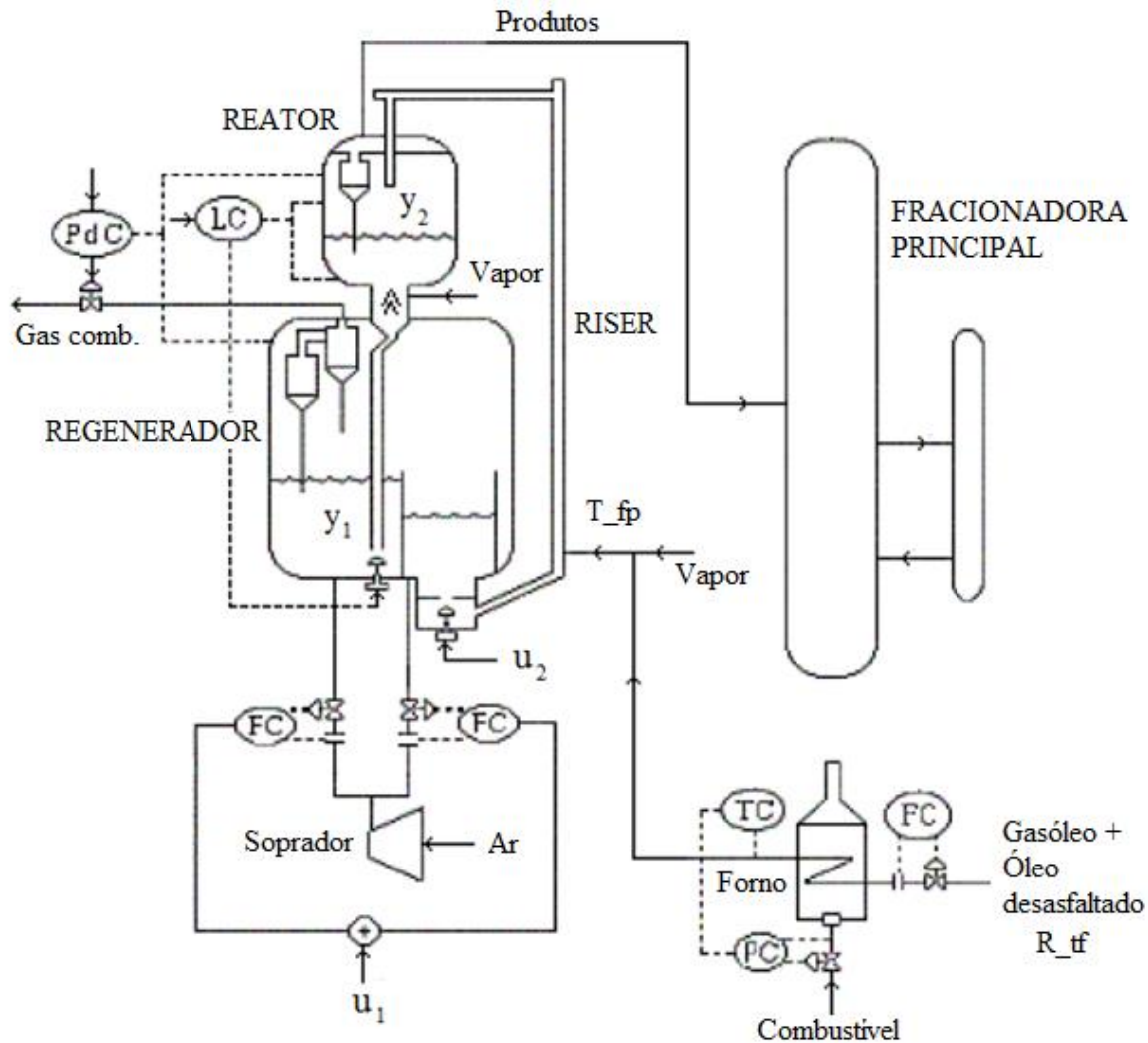


Figura 3.7 - Diagrama esquemático da unidade FCC (adaptada de Sotomayor et al. 2006)

3.2.1. Controle MPC da unidade FCC

Por se tratar de um processo complexo multivariável, o MPC apresenta-se como a melhor escolha para a estrutura de controle a unidade FCC. Para simplificar a análise, neste trabalho, considera-se, sob controle MPC, apenas um sub-sistema 2x2, em que as variáveis controladas, y_1 e y_2 , representam a temperatura da fase densa no primeiro estágio do regenerador (°C) e a temperatura na saída do riser (°C), respectivamente. As variáveis

manipuladas, u_1 e u_2 , representam a vazão de ar total introduzida no regenerador (ton/h) e a abertura da válvula de catalisador regenerado, respectivamente.

Neste processo, utiliza-se também o QDMC, que minimiza uma função objetivo quadrática como a apresentada na Equação (3.2), sujeito às restrições das Equações (3.3) e (3.4). Este controlador MPC utiliza, neste trabalho, um modelo linearizado do processo. Representa-se este modelo pelas funções de transferências definidas na Equação (3.5) (Sotomayor et al. 2006).

$$G_m(s) = \begin{bmatrix} \frac{0,0409s + 4,847 \times 10^{-4}}{s^2 + 0,0253s + 0,0017} & \frac{-3,1701s - 0,0458}{s^2 + 0,0293s + 8,547 \times 10^{-4}} \\ \frac{0,0226s + 8,9445 \times 10^{-4}}{s^2 + 0,0567s + 0,0023} & \frac{3,7692s^2 + 0,0914s + 0,003}{s^3 + 0,0738s^2 + 0,002s + 4,82 \times 10^{-5}} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Considerou-se, na implementação do controlador MPC, os parâmetros de sintonia expostos na Tabela 3.2, a seguir:

Tabela 3.2 - Parâmetros de sintonia do controlador QDMC para unidade FCC

Parâmetro	Descrição	Valor
n_y	Número de saídas	2
n_u	Número de entradas	2
T_s	Tempo de amostragem (min)	1
N	Horizonte do modelo	300
h_p	Horizonte de predição	10
h_c	Horizonte de controle	2
u_{min}	Limite mínimo das entradas	$[210 \ 0,45]^T$

u_{max}	Limite máximo das entradas	$[240 \ 0,95]^T$
Δu_{max}	Limite máximo de incremento nas entradas	$[1 \ 0,015]^T$
Q	Matriz de fatores de ponderação das saídas	Diag([1 1])
R	Matriz de fatores de supressão das entradas	Diag([0,2 2])

Com estes parâmetros de sintonia, obtiveram-se os resultados das variáveis controladas e manipuladas. Para variabilidade dos dados, foi adicionado, na simulação, perturbações as variáveis R_{tf} e T_{fp} em torno do seu valor de operação nominal. Estas variáveis correspondem, respectivamente, a taxa de fluxo de alimentação total dos óleos, dado em m^3/d , e a temperatura de alimentação na entrada do *riser*, dados em $^{\circ}C$. As trajetórias de referência das variáveis controladas, y_1 e y_2 , foram definidas em 670,14 e 542,20, respectivamente. O simulador do processo foi implementado em ambiente computacional, conforme Figura 3.8. A Figura 3.9 e Figura 3.10 mostram os resultados das variáveis.

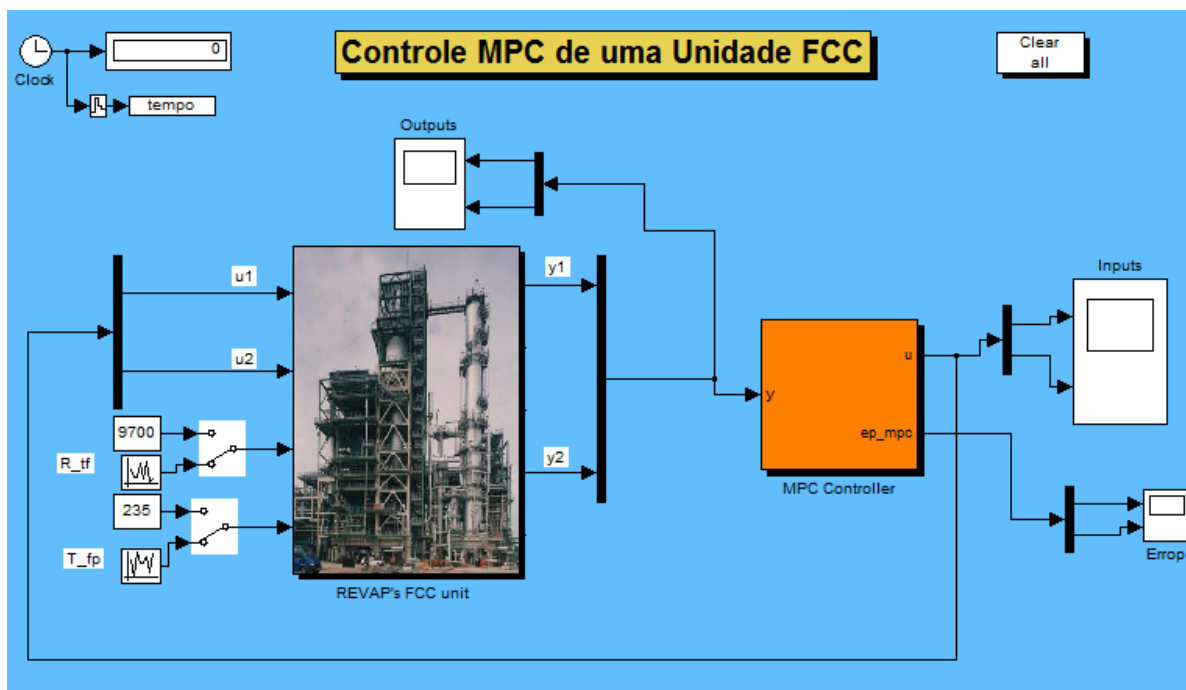


Figura 3.8 – Layout do simulador da unidade FCC

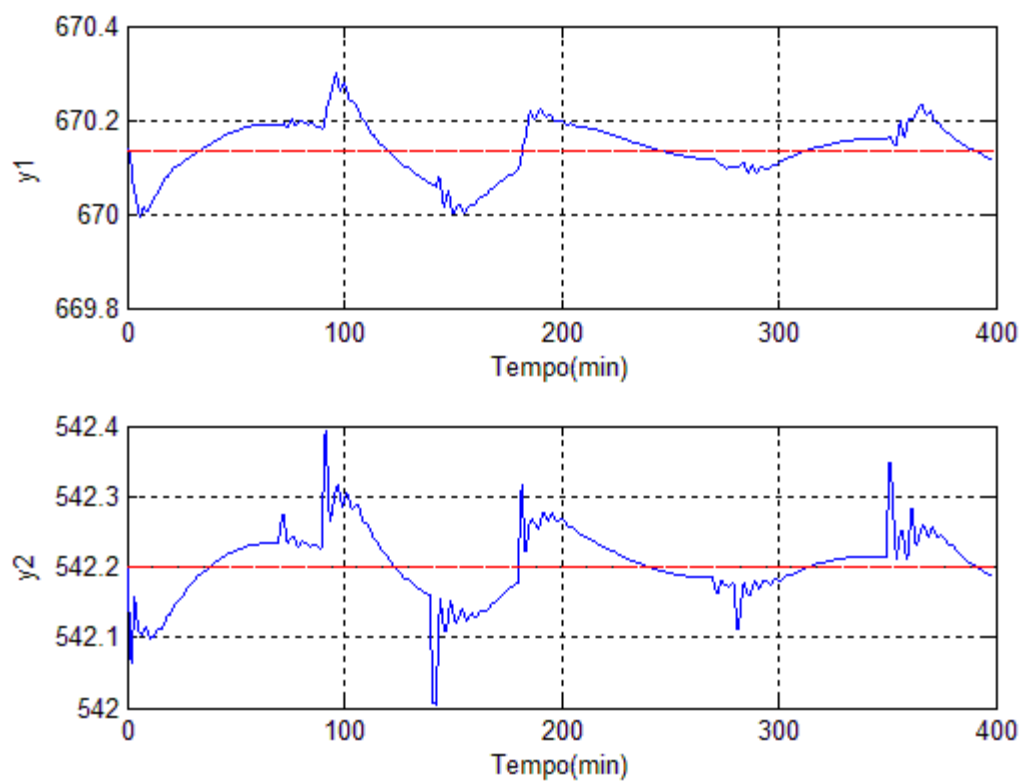


Figura 3.9 - Variáveis controladas para unidade FCC

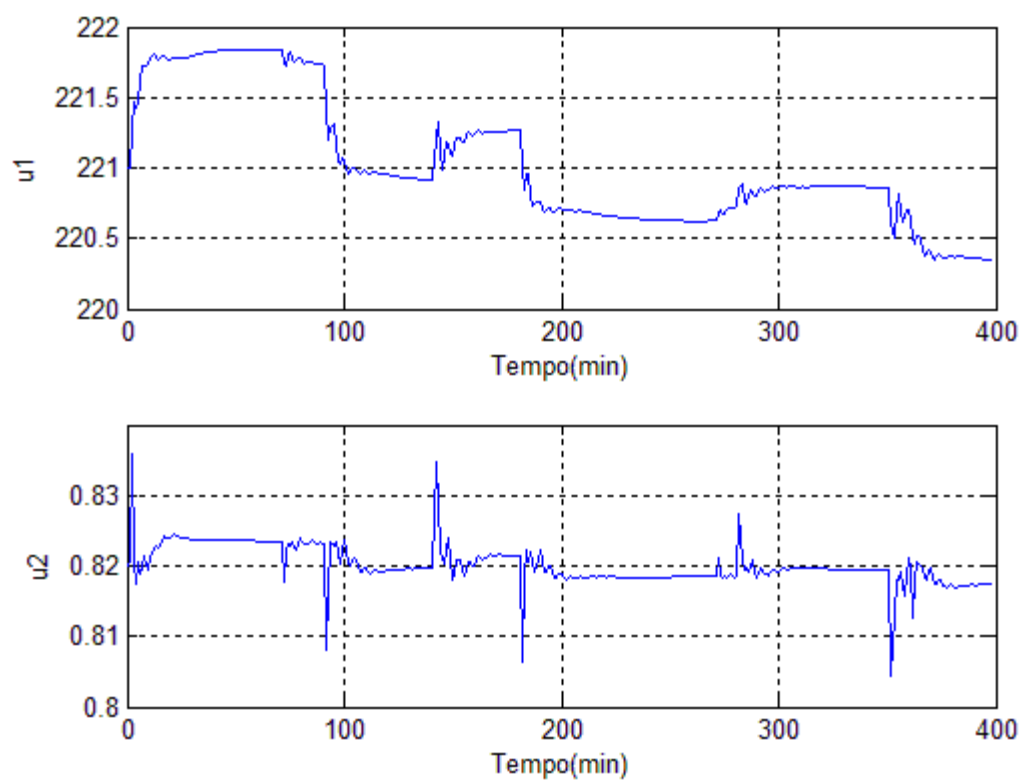


Figura 3.10 - Variáveis manipuladas para unidade FCC

Capítulo 4

Técnicas Estatísticas Multivariadas

O monitoramento de processos utiliza-se de uma grande quantidade de dados. Estes dados são processados por meio de ferramentas estatísticas que são frequentemente utilizadas em aplicações industriais. Dentre estas, as técnicas de estatísticas multivariadas compõem a metodologia mais adequada para entender a influência de várias variáveis em um processo. Estas técnicas são capazes de extrair informações de grandes conjuntos de dados multivariados. No entanto, apesar de vários métodos diferentes, todos compartilham da semelhança de identificar variáveis “artificiais”, que são combinações lineares ou não-lineares das variáveis originais.

Neste capítulo, faz-se uma apresentação prévia das teorias das técnicas PCA e ICA, que foram aplicadas em dois estudos de caso, neste trabalho.

4.1 Análise por Componentes Principais (PCA)

Uma das técnicas multivariadas mais usada e conhecida é a Análise por Componentes Principais (PCA). A ideia central do PCA é reduzir a dimensionalidade de um conjunto de dados, que consiste de um grande número de variáveis correlacionadas, com a perda mínima de informação. Isto é possível por meio da transformação dos dados em um novo conjunto de variáveis, ditas componentes principais (PCs). Estas são não correlacionadas e ordenadas de modo que as primeiras componentes contêm a maior parte da variação presente em todas as variáveis originais. Sendo assim, pode-se reduzir a dimensão do conjunto de componentes principais, descartando as componentes com menor variabilidade. Isto é realizado por meio da transformação da matriz de dados originais, que

são correlacionados, na matriz de dados dos componentes principais, os quais são não correlacionados, e de dimensão menor, facilitando o processo de análise dos dados.

De acordo com o autor Jolliffe (2002) as primeiras descrições da técnica PCA foram apresentadas por K. Pearson em 1901 e, em seguida, por H. Hotelling em 1933. Desde então, ocorreram uma explosão de novas aplicações. Para estudos mais aprofundados sobre a técnica, consultar Jackson (1991).

4.1.1. Organização dos dados

O PCA envolve a decomposição ortogonal de um conjunto de medições de variáveis ao longo das direções que explicam a máxima variação destas. Esse conjunto de medições, também denominado de “dados”, pode ser organizado na forma matricial com m linhas e p colunas, nomeada matriz de dados $X_{m \times p}$. Assim, tem-se uma notação sucinta dos dados, em que um elemento genérico dessa matriz representado por x_{jk} , com $j = 1, \dots, m$, sendo que m é o número de medições (observações) e $k = 1, \dots, p$, em que p é o número de variáveis. Geometricamente, cada medição pode ser considerada um ponto no espaço p -dimensional, com os eixos das coordenadas dados pelas p variáveis.

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} & \dots & x_{1p} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{j1} & x_{j2} & \dots & x_{jk} & \dots & x_{jp} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m1} & x_{m2} & \dots & x_{mk} & \dots & x_{mp} \end{bmatrix} = [x_1 \quad x_2 \quad \dots \quad x_k \quad \dots \quad x_p] \quad (4.1)$$

A aplicação da técnica exige que a matriz de dados originais coletada seja centralizada e re-escalada pela variância. A centralização torna zero a média dos dados em cada coluna. Usando a definição de média de amostras, tem-se:

$$\bar{x}_k = \frac{\sum_{j=1}^m x_{jk}}{m}, k = 1, 2, \dots, p \quad (4.2)$$

Ou ainda, arranjando as médias em notação matricial, tem-se o vetor de médias dado por:

$$\bar{\mathbf{x}} = [\bar{x}_1 \quad \bar{x}_2 \quad \dots \quad \bar{x}_p] \quad (4.3)$$

Centralizar significa subtrair os dados de cada medição da média de cada uma das variáveis. Isto resulta em um conjunto de dados cuja média é zero e os dados são deslocados pela média. Assim, o centro dos dados se torna a nova origem, sem alterar as distâncias entre os pontos dos dados.

Re-escalar os dados padroniza cada variável pelo seu desvio padrão. Isto torna a variância de cada variável unitária. Além disso, muda a escala dos eixos, tal que as distâncias relativas entre os pontos de dados são alteradas. Assim, dada uma matriz $X_{m \times p}$ de dados coletados, a normalização da matriz de dados é dada por:

$$Z = (X - \mathbf{1}\bar{\mathbf{x}})D^{-1} \quad (4.4)$$

Em que: $\mathbf{1}$ é um vetor de 1's $m \times 1$; $\bar{\mathbf{x}}$ é o vetor de médias $1 \times p$ e D é a matriz $p \times p$ dos desvios padrão. A Figura 4.1 ilustra um exemplo de um conjunto de dados aleatórios originais contendo duas variáveis em (a), em (b) o conjunto de dados centrado pela média, em (c) o conjunto de dados re-escalado e em (d) o conjunto de dados normalizado, ou seja, centrado pela média e re-escalado pela variância.

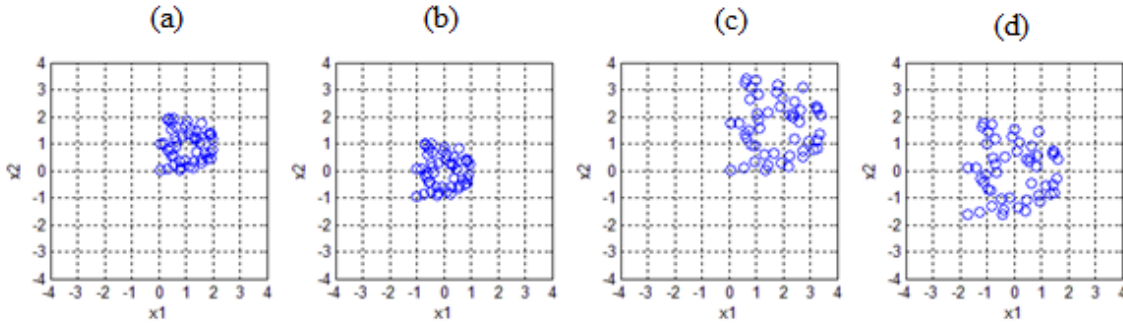


Figura 4.1 – Exemplo de dados: (a) conjunto de dados aleatórios originais contendo duas variáveis (b) conjunto de dados centrado pela média (c) conjunto de dados re-escalado e (d) conjunto de dados normalizado

A média de toda e qualquer coluna da matriz $Z_{m \times p}$ de dados normalizados é nula, tal que o vetor linha $\bar{\mathbf{x}}$ é nulo. Além disso, a matriz de covariância dessa matriz é igual à sua matriz de correlação. Uma característica desta matriz de correlação é que os elementos da

sua diagonal principal são iguais e de valor unitário e os demais elementos são menores do que a unidade. Isto significa que existe uma correlação entre as variáveis envolvidas.

4.1.2. Decomposição em componentes principais

A técnica PCA pode ser vista como um método para calcular um novo sistema de coordenadas. Neste caso os novos eixos de coordenadas serão ortogonais. Em outras palavras, para a análise por componentes principais efetua-se uma transformação linear e, como toda transformação linear, resulta em mudanças de coordenadas. Além disso, o PCA também “explica” a estrutura da covariância do conjunto de dados por meio de combinações lineares das variáveis originais (Jackson, 1991). As novas variáveis “artificiais”, também nomeadas componentes principais, são não-correlacionadas entre si. Deve salientar, no entanto que, a variabilidade dos dados se mantém e estas variáveis são ordenadas da maior para a menor variância. Estes conceitos serão compreendidos ao longo do presente texto.

A partir da matriz normalizada de dados $Z_{m \times p}$, no cálculo das componentes principais, utiliza-se a matriz de covariância que é dada por:

$$S = \frac{1}{m-1} (Z - \mathbf{1}\bar{z})^t (Z - \mathbf{1}\bar{z}) = \begin{bmatrix} S_{Z_1 Z_1} & S_{Z_1 Z_2} & \cdots & S_{Z_1 Z_p} \\ S_{Z_2 Z_1} & S_{Z_2 Z_2} & \cdots & S_{Z_2 Z_p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{Z_p Z_1} & S_{Z_p Z_2} & \cdots & S_{Z_p Z_p} \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Em que: $\mathbf{1}$ é um vetor de 1's $m \times 1$; $\bar{z}$ é o vetor de médias $1 \times p$ das variáveis normalizadas; S é a matriz de covariância $p \times p$ e Z é a matriz de dados normalizada.

Sabe-se que a covariância mede a relação entre duas variáveis. Se esta é diferente de zero, existe uma relação linear entre as variáveis envolvidas. Quando esta relação é feita entre uma variável e ela mesma, a covariância é denominada de variância ou auto-covariância. Assim, a diagonal principal da matriz de covariância é composta pelas variâncias das variáveis. Além disso, a matriz de covariância é uma matriz quadrada e simétrica em

relação a sua diagonal principal, fato que pode ser verificado observando-se a estrutura da equação (4.5) e sabendo-se que $s_{z_i z_j} = s_{z_j z_i}$.

Sendo a matriz de covariância S uma matriz quadrada e simétrica, esta é diagonalizável. Assim, efetuando-se sua diagonalização tem-se que:

$$S = E\Lambda E^T \quad (4.6)$$

Em que: E é uma matriz $p \times p$ ortogonal chamada de matriz de autovetores e Λ é uma matriz diagonal $p \times p$ chamada matriz de autovalores e os elementos de sua diagonal principal representados por $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ são os autovalores correspondentes aos respectivos autovetores $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_p$.

Utilizando-se os autovetores de S , transforma-se as p variáveis, que são correlacionadas, em outras p variáveis, não-correlacionadas. Isto acontece pelo fato que as p variáveis serão representadas em uma nova base cujos vetores dessa são ortogonais. Tem-se ainda que essas novas variáveis corresponderão a combinações lineares das p variáveis originais. Essas novas variáveis, agora denominadas componentes principais, são então calculadas da seguinte forma:

$$\mathbf{p}_{c_k} = [\mathbf{z}_1 \quad \mathbf{z}_2 \quad \dots \quad \mathbf{z}_p] \mathbf{e}_k = \mathbf{z}_1 e_{1k} + \mathbf{z}_2 e_{2k} + \dots + \mathbf{z}_p e_{pk} \quad (4.7)$$

Em que: $\mathbf{e}_k$ representa o k -ésimo autovetor, sendo $k = 1, 2, \dots, p$ e $\mathbf{p}_{c_k}$ representa o vetor da k -ésima componente principal. Ou ainda, na forma matricial:

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{Z}\mathbf{E} \quad (4.8)$$

Cada componente principal possui média zero e estas formam uma matriz $\mathbf{P}_c$ de dimensão $m \times p$. Sabe-se ainda que as componentes principais são uma combinação linear de todas as medições das variáveis normalizadas originais. Além disso, estas são não correlacionadas entre si, como já mencionado, devido à ortogonalidade da matriz dos autovetores. Esta característica resulta em covariância nula entre elas, observando-se que a variância é igual aos autovalores da matriz de covariância dos dados normalizados. Assim, conclui-se que a variabilidade dos dados das variáveis originais mantém-se nestas novas variáveis denominadas componentes principais. Desta forma, a matriz de covariância destas

componentes resulta em uma matriz diagonal $p \times p$, formada pelos autovalores da matriz de covariância dos dados normalizados:

$$S_{p_c} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_p \end{bmatrix}_{p \times p} \quad (4.9)$$

Além disso, a matriz de correlação das componentes principais é dada por uma matriz identidade, o que significa que essa matriz contém variáveis não correlacionadas, que caracteriza um dos principais objetivos do PCA.

Os autovalores são dispostos na matriz de autovalores em ordem decrescente e assim pode-se ordenar as componentes principais da maior variância para menor. Como cada autovalor expressa uma porcentagem da variância total dos dados, pode-se concluir que a primeira componente principal é a que tem a maior variância e assim sucessivamente. A variância total dos dados mantém-se nas componentes principais e é dada por:

$$\sum_{i=1}^p Var(\mathbf{p}_{c_i}) = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p \quad (4.10)$$

Em relação a variância total dos dados, a expressão a seguir define a contribuição em porcentagem da k -ésima variável:

$$\mu_k(\%) = \frac{\lambda_k}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p} \times 100 \quad (4.11)$$

Dessa forma, pode-se escolher ou definir quantas componentes principais podem representar todas as p variáveis originais sem muita perda de informação. Isto, evidentemente, a depender de quantos por cento da variância total aceita-se como representação da variabilidade do conjunto de variáveis. Supondo-se que seja α o número de variáveis que se supõe representar a variância total, tem-se que:

$$\mu_\alpha(\%) = \sum_{k=1}^{\alpha} \mu_k(\%) \quad (4.12)$$

Geometricamente, as componentes principais representam, como já mencionado, um novo sistema de coordenadas obtidas pela rotação do sistema original, já que as componentes principais são uma combinação linear do sistema original e são linearmente independentes entre si. Enquanto que os ângulos formados entre as coordenadas originais e o novo sistema de coordenadas, que são os ângulos de rotação, são dados pelos autovetores da matriz de covariância. E ainda, estes novos eixos representam a direção de máxima variabilidade.

4.1.3. Redução da dimensão das componentes principais

Como já mencionado na seção anterior, a decomposição dos dados resulta em p componentes principais. Estas explicam a variância total dos dados. Na maioria dos casos, as α primeiras componentes principais podem representar todas as p variáveis originais sem muita perda de informação. Dessa forma, pode-se reduzir a dimensão do conjunto de componentes P_c . Para determinar o valor adequado de α , sendo $\alpha < p$, existem alguns critérios a serem empregados.

Apesar da técnica PCA ser amplamente utilizada, selecionar o número de componentes principais ainda é uma tarefa bastante subjetiva. Uma abordagem simples, bastante utilizada e de fácil entendimento é o da porcentagem cumulativa da variabilidade total. Ou seja, o número de componentes principais é escolhido ao atingir uma porcentagem pré-determinada da variabilidade total. Esta porcentagem é calculada de acordo com a equação (4.12). Normalmente, determina-se previamente uma variabilidade total maior ou igual a 90%. Neste trabalho, utilizou-se desta abordagem para a redução da dimensão das componentes principais.

Uma abordagem proposta por Wold (1978) chamado de validação cruzada, consiste em calcular a soma quadrática dos erros de predição, também conhecidos como “*Prediction Error Sum of Squares*” (PRESS). A PRESS é calculada para cada grupo de amostra das observações. Amostras estas que são divididas randomicamente. Este método mostra-se bastante trabalhoso, já que deve ser construído um modelo PCA para cada grupo de amostras.

Uma abordagem, chamada de teste SCREE, é baseada no gráfico dos autovalores da matriz de covariância dos dados originais normalizados. Como os últimos autovalores são muito menores que os primeiros, estes podem ser aproximados por uma reta. Assim, o número de componentes principais é então escolhido de acordo com o número de pontos no qual “fogem” da reta formada pelos últimos autovalores, no gráfico. Esta reta possui declive muito menor quando comparado aos primeiros autovalores, onde estes caem acentuadamente.

Um novo critério para determinar o número de componentes principais é abordado por Qin e Durnia (2000) baseado na melhor reconstrução das variáveis. Os autores propõem um índice, que possui um valor mínimo correspondente a melhor reconstrução. Este índice, conhecido como *Variance of Reconstruction Error* (VRE), tem sempre um mínimo que aponta para um número ideal de componentes principais.

4.2 Análise por Componentes Independentes (ICA)

A técnica conhecida como análise por componentes independentes, ou do inglês *independent component analysis* (ICA), é uma ferramenta estatística e computacional de grande destaque na teoria de processamento não-supervisionado de sinais.

Embora ela tenha sido desenvolvida inicialmente para atender o problema conhecido como separação às cegas de fontes, do inglês *blind source separation* (BSS), pelo fato de ter como princípio a independência estatística, seu interesse tem aumentado em um grande número de aplicações das mais diversas áreas.

A grande diferença entre PCA e ICA está no princípio utilizado para o tratamento dos dados. Enquanto as componentes principais baseiam-se na descorrelação, obtendo sinais ou dados não correlacionados, gaussianos ou não, as componentes independentes baseiam-se no princípio de independência estatística, obtendo sinais ou dados não gaussianos independentes.

Variáveis independentes implicam em variáveis descorrelacionadas. Porém, em caso destas serem descorrelacionadas, não podemos afirmar nada quanto a independência entre elas. Isto significa que, a independência estatística é uma propriedade mais “forte” que a descorrelação.

Para uma melhor compreensão da técnica ICA, recomenda-se, antes de iniciar o estudo nas próximas seções, rever alguns conceitos importantes que são essenciais para um melhor entendimento da técnica. Estes conceitos estão expostos no Apêndice A, deste trabalho.

4.2.1. Representação de Dados Multivariados

Para uma boa compreensão e interpretação de dados multivariados, faz-se necessário uma representação adequada dos mesmos. Esta representação adequada é obtida por meio da transformação dos dados. Deve-se lembrar que, quando se faz uma transformação de similaridade, faz-se uma transformação em espaço de estados. Estas transformações podem ser lineares e não-lineares. Neste trabalho, serão consideradas apenas transformações lineares.

Na forma matricial, representa-se uma transformação linear por uma matriz de transformação, ou operador linear. Esta matriz, aqui representada por W , atua sobre uma matriz de dados X . Na matriz de dados X suas linhas são as medidas das observações e as colunas são as variáveis. Desta forma, pode-se escrever que (Brown, 2009):

$$U = WX + E \quad (4.13)$$

Em que: U representa os dados no espaço transformado, representados na nova base, e E representa o erro, ou resíduo.

No geral, as transformações lineares podem ser classificadas em transformações com métodos estatísticos de segunda ordem e transformações com métodos estatísticos de alta ordem. As transformações de segunda ordem exploram a estrutura da variância dos dados, usando apenas a média e a variância para descrever a função densidade de

probabilidade. Já as transformações de alta ordem, faz uso das informações contidas nas estatísticas de alta ordem, como o terceiro momento central, também chamado de *skewness* e o quarto cumulate, também chamado de curtose.

Um exemplo clássico de transformações de segunda ordem é o PCA, que é uma estatística multivariada em que se analisa variações dentro de um conjunto de dados. Listam-se, para dados centrados na média, os principais critérios atendidos do PCA, para uma transformação linear na forma da equação (4.13) (Brown, 2009):

- 1) Os vetores de saída U são descorrelacionados e ortogonais;
- 2) Os vetores de W são ortogonais;
- 3) Os autovalores de X são ordenados de forma decrescente.

Já as transformações de alta ordem, tem como principal exemplo o ICA. Estas transformações buscam a independência estatística entre as componentes, que é um critério “mais forte” que a descorrelação. Para rever os conceitos de independência estatística e descorrelação, consultar Apêndice A.

Para tornar mais claro o conceito de independência estatística e os métodos de alta ordem, analisa-se um ambiente com várias pessoas falando ao mesmo tempo. Neste, o observador é confrontado com uma mistura de sinais. O objetivo é extrair “fontes puras” de um conjunto de misturas, ou seja, utilizar o conceito de independência estatística na análise dos sinais de modo a separar os sinais independentes uns dos outros. Este problema é clássico na análise de sinais e é também conhecido como “*cocktail party*”.

4.2.2. O Problema BSS

O problema BSS, que significa separação às cegas de fontes, é clássico dentro da análise de sinais. Este tem como objetivo recuperar os sinais de “fonte limpa” a partir de uma mistura de sinais.

Para tratar o problema BSS, assume-se que M fontes geram sinais independentes $s_m(t)$, onde $m = 1, \dots, M$. Os sinais são medidos N vezes, $x_n(t)$, em que $n = 1, \dots, N$. Estes sinais medidos relacionam-se com os sinais gerados pelas fontes por meio de uma função f_n e da adição de um ruído de medição v_n . A função f_n descreve a mistura das fontes. Com isso, representam-se os sinais medidos segundo equação (Brown, 2009):

$$x_n(t) = f_n(s_1(t), s_2(t), \dots, s_M(t)) + v_n \quad (4.14)$$

Como, neste trabalho, utilizam-se apenas transformações lineares, pode-se reescrever a equação (4.14) na forma matricial:

$$x(t) = As(t) + v \quad (4.15)$$

Em que: A é uma matriz de posto completo $N \times M$, também chamada matriz de mistura.

Deve-se enfatizar que, por hipótese, assume-se, na equação anterior, que a mistura é instantânea, ou sem memória, e quase estacionária. Ao assumir que a mistura é sem memória, pressupõe-se que não há convolução no processo de mistura. Isto corresponde a afirmar que os sinais misturados não passam por nenhum sistema dinâmico e que são simplesmente misturados em sua forma pura. Como consequência, garante-se que existe, entre os sinais misturados e os sinais originais, uma relação determinada por números fixos ou constantes.

Para resolução do problema da equação (4.15), deve-se criar um sistema capaz de recuperar os sinais $s(t)$ e a matriz de mistura A , dado apenas os sinais medidos $x(t)$, que é o que se conhece. Este procedimento é conhecido como um sistema de “desmistura” W , considerando-se uma situação sem ruído e uma mistura linear. Sua representação é como segue:

$$u(t) = Wx(t) + e \quad (4.16)$$

Em que: $u(t)$ é uma estimativa de $s(t)$.

Convém observar que quando $W = A^{-1}$ tem-se uma recuperação exata das fontes puras, isto é, $u(t) = s(t)$ e $e = 0$.

4.2.3. Definição do ICA

Como mencionado anteriormente, o ICA é uma ferramenta estatística que foi desenvolvida, inicialmente, para resolver o problema BSS. Em geral, o ICA é capaz de revelar componentes independentes a partir de um conjunto de variáveis aleatórias medidas. Além disso, restringe-se apenas a misturas em que houveram transformações lineares.

A. O modelo do ICA

Para definir um modelo ICA, considera-se um conjunto de n variáveis aleatórias $x_1, \dots, x_n$, que foram observadas e medidas. Escrevem-se estas variáveis como uma combinação linear de n variáveis, estatisticamente independentes $s_1, \dots, s_n$, como segue (Hyvärinen, 1999):

$$x_i = a_{i1}s_1 + a_{i2}s_2 + \dots + a_{in}s_n \quad (4.17)$$

Em que: $i = 1, \dots, n$, e a_{ij} são coeficientes escalares reais com $i, j = 1, \dots, n$.

Considera-se este o modelo básico do ICA. Este modelo descreve a forma como os dados observados são gerados a partir de um processo de mistura dos componentes independentes s_j . Deve-se observar, no entanto, que os coeficientes da mistura a_{ij} são desconhecidos. Além disso, tanto as componentes da mistura como os componentes independentes são estimados a partir de x_i . Realizam-se essas estimativas assumindo-se algumas hipóteses que são apresentadas na seção B.

Utilizando-se a representação matricial da equação (4.17), tem-se que (Hyvärinen, 2001):

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{s} \quad (4.18)$$

Em que: $\mathbf{x}$ é o vetor coluna de variáveis aleatórias cujos elementos são as misturas; $\mathbf{s}$ é o vetor coluna de componentes independentes e $\mathbf{A}$ é a matriz de mistura formada pelos coeficientes a_{ij} .

Entretanto, deve-se enfatizar que tanto a matriz de mistura $\mathbf{A}$ quanto os sinais de componentes independentes $\mathbf{s}$ são desconhecidos. Isto torna a resolução mais difícil. Assim,

faz-se necessário a utilização de um algoritmo de aproximação para se obter uma boa estimativa da inversa da matriz de mistura. Como, por hipótese, assumiu-se que as componentes de $\mathbf{s}$ são estatisticamente independentes, pode-se achar um sistema de “desmistura” ou separação W , em que W seja uma aproximação da matriz inversa de A . Neste caso, os componentes reconstruídos, definidos por $\hat{\mathbf{s}}$, devem ser o mais independente possível e regidos pela equação a seguir:

$$\hat{\mathbf{s}} = W\mathbf{x} \quad (4.19)$$

Observa-se assim que o objetivo do ICA é obter as componentes independentes $\mathbf{s}$ a partir, apenas, dos dados coletados $\mathbf{x}$. Discutem-se na seção 4.2.4 algumas das maneiras mais eficientes de resolver este problema.

B. Restrições do ICA

Para que possamos construir um sistema capaz de separar a mistura em componentes independentes, deve-se adotar algumas restrições e impor algumas pressuposições. Apresentam-se, a seguir, estas suposições:

1. Assume-se que as componentes independentes são estatisticamente independentes:

Este é o princípio básico em que se baseia o ICA. Esta restrição é necessária para que haja garantia que o modelo pode ser estimado. Diz-se que variáveis aleatórias são estatisticamente independentes quando a informação que uma variável carrega não contém nenhuma informação de qualquer outra. Para mais detalhes sobre independência estatística, consultar Apêndice A;

2. As componentes independentes devem ter distribuições não-gaussianas:

Devido as características das variáveis que tem distribuição gaussiana, pode-se afirmar, antecipadamente, que duas ou mais variáveis gaussianas são inseparáveis. Do ponto de vista estatístico, sabe-se que as distribuições gaussianas têm cumulantes de alta ordem nulos. Estes cumulantes são essenciais para estimar o modelo ICA. Isto equivale a dizer que a falta deste

torna o problema mal posto. Pelo exposto, afirma-se que, no conjunto de componentes, apenas uma poderá ter distribuição gaussiana;

3. Assume-se que a matriz de mistura desconhecida é quadrada, para fins de simplificação:

Neste caso, presume-se que o número de componentes independentes é igual ao número de variáveis misturadas. Isto corresponde a afirmar que a matriz de mistura A é quadrada e inversível, podendo, portanto, a matriz de desmistura W ser calculada. Observe que esta hipótese torna o sistema determinado. No entanto, existem casos em que o número de variáveis de mistura é diferente do número de componentes independentes. Para este caso, pode-se utilizar a redução de variáveis usando o PCA, descartando-se as últimas componentes principais, que contém os menores autovalores da matriz de correlação. Nestes casos, o sistema será determinado quando o número de variáveis misturadas for maior ou igual ao número de componentes independentes. Esta hipótese torna o sistema determinado.

Seguindo estas três hipóteses, o modelo ICA torna-se identificável. Isto significa que será possível estimar a matriz de mistura e as componentes independentes.

C. Ambiguidades do ICA

Existem algumas indefinições ou indeterminações no modelo ICA descrito pela equação (4.18), que serão listadas abaixo (Hyvärinen, 1999):

1. As variâncias das componentes independentes são indetermináveis:

A variância, ou contribuição energética na mistura, de cada componente independente é indeterminada. Isto porque, o algoritmo ICA, em seu procedimento de cálculo, determina um conjunto de variáveis desconhecidas, correspondentes às componentes independentes e aos elementos da matriz A , e neste caso, é possível que haja cancelamento entre determinados fatores. Isto leva a alguma ambiguidade, sendo, no entanto, insignificante em muitas aplicações.

2. Não podemos determinar a ordem das componentes independentes:

Usando-se o método do PCA, obtêm-se as componentes ordenadas de acordo com a variância que cada componente principal explica. Estas são calculadas a partir de seu respectivo autovalor. Isto não é possível com os componentes independentes. A razão é também explicada pelo desconhecimento das componentes independentes e da matriz de mistura, e, portanto, suas posições relativas na transformação são arbitrárias.

D. Pré-processamento

A aplicação do ICA requer uma etapa de pré-processamento. Esta etapa é conhecida como branqueamento, ou em inglês ‘*whitening*’. Esta é importante para facilitar a análise e o desenvolvimento teórico, tornando as misturas melhor condicionadas e, conseqüentemente, deixando o modelo de estimação mais simples.

Sabe-se que um vetor de variáveis aleatórias, de média nula, é dito branco se os seus elementos forem não-correlacionados e estes possuírem a mesma variância. Assim, um método utilizado, frequentemente, para o branqueamento é o PCA. A transformação de branqueamento é dada por:

$$\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{x} \quad (4.20)$$

Em que: $\mathbf{Q}$ é a matriz de branqueamento dado por $\mathbf{Q} = \Lambda^{-1/2}\mathbf{E}^T$ e Λ e $\mathbf{E}$ são as matrizes de autovalores e autovetores da matriz de covariância dos dados, respectivamente. Calculam-se estas matrizes de acordo com a equação (4.6).

Substituindo a equação (4.18) na equação (4.20), tem-se:

$$\mathbf{z} = \mathbf{Q}\mathbf{A}\mathbf{s} \quad (4.21)$$

Ou ainda:

$$\mathbf{z} = \mathbf{B}\mathbf{s} \quad (4.22)$$

Em que $\mathbf{B}$ deve ser uma matriz ortogonal.

4.2.4. Principais estimações do ICA

Problemas de otimização ocorrem quando existe a necessidade de minimizar ou maximizar algum resultado requerido. A estimativa de componentes independentes de um sistema de mistura, em geral, realiza-se a partir da minimização ou maximização de uma função objetivo. Esta função objetivo, a ser otimizada, depende de um conjunto de variáveis de decisão que estão sujeitas a restrições. Além disso, esta função está relacionada com a independência das variáveis. Assim, o modelo ICA depende de um algoritmo de otimização, que tem como objetivo buscar a matriz de separação W por meio de um processo iterativo.

Dentre as funções objetivos para estimar as componentes independentes, as principais baseiam-se na maximização da não-gaussianidade das saídas ou minimização da informação mútua. Estas, são descritas nas seções seguintes. Para uma melhor compreensão das estratégias utilizadas, recomenda-se ter conhecimento sobre a teoria da informação, explicada no Apêndice A deste trabalho.

A. Maximização da não- gaussianidade

Sabe-se que a não-gaussianidade é uma medida de independência estatística, de forma que quanto mais distante da gaussianidade, mais independente serão as componentes. Assim, a maximização de uma medida da não-gaussianidade é uma das principais formas de estimar as componentes independentes de uma mistura. Neste trabalho, abordam-se duas das formas de se medir a não-gaussianidade, quais sejam: a curtose e a negentropia. Explicam-se estas a seguir.

- Curtose

A curtose corresponde a cumulante de quarta ordem de uma variável aleatória. Esta é uma forma clássica de medir a gaussianidade, ou, como consequência, a não-gaussianidade. Isto se justifica pelo fato de que, para uma variável com distribuição gaussiana, a curtose é nula. Assim, a maximização da não gaussianidade pode ser obtida por meio da maximização do valor absoluto da curtose. Para uma variável aleatória x de média zero, a curtose é definida como:

$$curt(x) = E\{x^4\} - 3[E\{x^2\}]^2 \quad (4.23)$$

Em que: $E\{ \}$ é a esperança matemática de uma variável aleatória.

Neste caso, para estimar as componentes independentes, o algoritmo de otimização deve buscar uma matriz de separação W , por meio da maximização do valor da curtose. Para isso, o algoritmo deve inicializar W com valores aleatórios e medir a direção do crescimento da curtose. Com os dados obtidos, recalcula-se a matriz W . O processo deve ser repetido até que as componentes obtidas sejam mais independentes possíveis.

- Negentropia

Sabe-se que, de acordo com a teoria da informação, dado um conjunto de variáveis aleatórias de mesma variância, a variável gaussiana é aquela que possui a maior entropia. Sabe-se também que, a negentropia é nula para variáveis gaussianas. Esta é definida como:

$$J(x) = H(x_{Gauss}) - H(x) \quad (4.24)$$

Em que: $H(x_{Gauss})$ é a entropia do vetor gaussiano aleatório x_{Gauss} , que tem mesma média e variância que o vetor x , e $H(x)$ é a entropia de x .

Assim, a maximização da não-gaussianidade é alcançada por meio da maximização da negentropia. Entretanto, seu cálculo torna-se relativamente difícil, pelo fato deste requerer uma estimativa da função densidade de probabilidade. Neste caso, utilizam-se técnicas que calculam seu valor aproximado. Uma aproximação para a negentropia, utilizando uma função de não-linearidade, é dada por (Hyvärinen, 2001):

$$J(x) \approx \alpha (E\{G(x)\} - E\{G(v)\})^2 \quad (4.25)$$

Em que: $G(.)$ é uma função não-linear e não-quadrática, v é uma variável aleatória gaussiana de média zero e variância unitária e α é uma constante, geralmente de valor unitário. Os algoritmos que utilizam o cálculo aproximado da negentropia diferenciam-se pela escolha da função $G(.)$.

B. Minimização da informação mútua

Esta abordagem, inspirada na teoria da informação, usa o conceito de informação mútua, que é a dependência entre variáveis aleatórias. Do ponto de vista matemático, a informação mútua de duas variáveis aleatórias é dada por:

$$I(X, Y) = \sum_x \sum_y p(x, y) \cdot \log_2 \left[\frac{p(x, y)}{p(x) \cdot p(y)} \right] \quad (4.26)$$

Em que: $p(x)$ e $p(y)$ são as funções de densidade de probabilidade das variáveis x e y , respectivamente, e $p(x, y)$ é a distribuição de probabilidade conjunta.

Assim, quando se tem informação mútua nula entre variáveis aleatórias, estas variáveis são ditas independentes. Neste caso, para estimar as componentes independentes, o algoritmo de otimização deve buscar uma matriz de separação W , por meio da minimização da informação mútua.

Tendo por base estas considerações, neste trabalho utilizou-se o algoritmo denominado FastICA para estimação das componentes independentes. Este é um dos algoritmos mais utilizados para estimar o modelo ICA e foi proposto por Hyvärinen (1997). Trata-se de uma abordagem que utiliza a maximização da não-gaussianidade como função objetivo. Neste trabalho, o algoritmo FastICA utiliza a negentropia, aproximada pela equação (4.25), como medida de não-gaussianidade, ortogonalização deflacionária e função cúbica para a não-linearidade. Para mais informações sobre o FastICA utilizado neste trabalho, deve-se consultar o Apêndice B.

Capítulo 5

Metodologia de Monitoramento e Aplicações

Como mencionado anteriormente, o mau desempenho de um controlador MPC depende de vários fatores. Por isso, existe grande interesse em se desenvolver ferramentas de monitoramento que garantam avaliar o desempenho das aplicações de controle. Estas ferramentas, além de detectar mau desempenho de um controlador, devem ser capazes de diagnosticar as causas da baixa qualidade do sistema de controle. Isto permite definir se há ou não necessidade de uma re-sintonia do controlador.

Neste capítulo, apresentam-se as metodologias de monitoramento utilizadas para aplicação nos controladores MPC. Além disso, para demonstrar a efetividade das ferramentas desenvolvidas, aplicaram-se estas nos dois estudos de caso já apresentados no Capítulo 03.

5.1 Metodologia de Monitoramento Utilizando Métodos Estatísticos Multivariados

Quando se fala em monitorar desempenho de controladores MPC, pode-se dividir em três etapas:

- i. Define-se um modelo de referência apropriado, também conhecido como *benchmark*, a partir dos dados coletados do controlador;
- ii. Calculam-se estatísticas de monitoramento adequadas para avaliar o desempenho do controlador e compará-las com o modelo de referência;

- iii. Por fim, em caso de detecção de degradação, ou seja, quando as estatísticas estão acima dos limites de referência desejáveis, estabelecem-se métodos de diagnósticos.

Nesta seção, apresenta-se com detalhes a metodologia de monitoramento utilizada neste trabalho. Esta metodologia pode ser resumida no fluxograma da Figura 5.1.

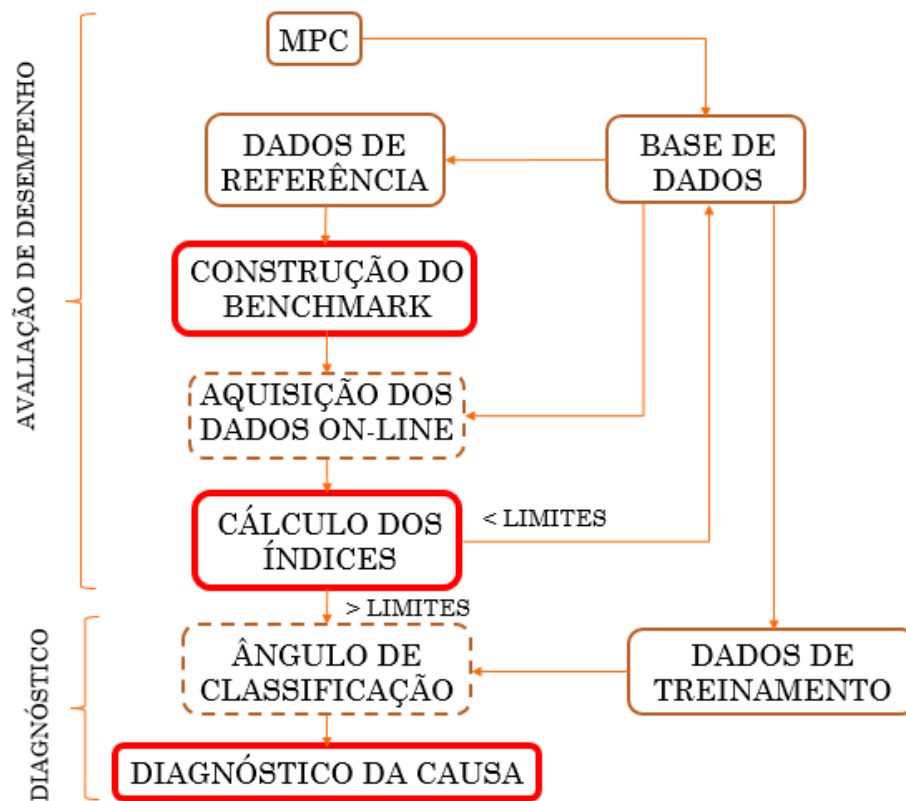


Figura 5.1. Metodologia de monitoramento de desempenho de controladores MPC

5.1.1. Construção do *Benchmark*

Para desenvolver o modelo de referência baseado em dados, para avaliação de desempenho do MPC, deve-se escolher um período de dados de referência. Este deve ser um período considerado bom para os dados de operação, a partir do processo funcionando com o desempenho satisfatório do controlador. Em algumas literaturas, estes dados são

denominados “dados de ouro”. Em processos reais, estes dados devem ser selecionados de acordo com a experiência ou conhecimentos prévios, para que representem fielmente os dados de desempenho satisfatório.

Sabe-se que os controladores preditivos baseiam-se na predição do comportamento futuro da(s) saída(s) do processo a ser controlado. Esta predição, por sua vez, é obtida por meio de um modelo do processo, o qual supõe-se disponível. Utilizam-se então os valores futuros preditivos da(s) saída(s) para calcular as ações de controle futuras. Estas ações de controle são calculadas minimizando uma função objetivo, em geral, definida pela equação (3.2), sujeito às restrições das equações (3.3) e (3.4). Por sua vez, esta função objetivo está relacionada com as variáveis controladas $y_1, \dots, y_n$ e as variáveis manipuladas $u_1, \dots, u_n$. Assim, estas variáveis devem ser incluídas no conjunto de variáveis a serem monitoradas. Além disso, o erro de predição do modelo é afetado tanto pelas ações de controle, como também por distúrbios e incompatibilidade de modelo do processo. Como consequência, deteriorações no desempenho do controlador MPC, causadas por alterações do processo e/ou perturbações, podem ser detectadas pelos erros de predição do modelo. Isto mostra que os erros de predição devem ser incluídos no conjunto de variáveis monitoradas.

Pelo exposto, fica evidente que, para o monitoramento, deve-se utilizar o conjunto de dados das variáveis manipuladas e controladas, juntamente com o erro de predição do modelo, considerando-se o processo operando em condições normais. Tem-se então que o conjunto de dados das variáveis monitoradas é dado por:

$$X = [\mathbf{u}_1 \quad \dots \quad \mathbf{u}_j \quad \mathbf{ep}_1 \quad \dots \quad \mathbf{ep}_n \quad \mathbf{y}_1 \quad \dots \quad \mathbf{y}_n] \quad (5.1)$$

O método de monitoramento utilizando as técnicas PCA e ICA assumem implicitamente que as observações em um instante de tempo são estatisticamente independentes das observações nos instantes passados. No caso de processos dinâmicos, o monitoramento PCA e ICA deve ser usado levando-se em conta as correlações com os instantes passados, aumentando-se assim cada vetor observação em l observações prévias. Muitos trabalhos, como Tian *et al.* (2011b), Lee *et al.* (2004b) e Stefatos *et al.* (2010) utilizam as técnicas PCA e ICA estendidas para modelagem e monitoramento de sistemas dinâmicos. Estes são chamados DPCA (PCA dinâmico) e DICA (ICA dinâmico), respectivamente, cuja

diferença, na sua aplicação, está no aumento da matriz de dados originais, os quais usa-se l observações prévias de cada variável. Neste caso, a matriz de dados passa a ser da seguinte forma:

$$X(l) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_k & \mathbf{x}_{k-1} & \cdots & \mathbf{x}_{k-l} \\ \mathbf{x}_{k+1} & \mathbf{x}_k & \cdots & \mathbf{x}_{k-l+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{x}_{k+m} & \mathbf{x}_{k+m-1} & \cdots & \mathbf{x}_{k+m-l} \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Em que: $\mathbf{x}_k$ é o vetor linha p -dimensional de observações das variáveis no instante k ; $m + 1$ é o número de observações e l é o número de medições defasadas.

O valor de $l = 1$ ou 2 é apropriado para monitoramento, segundo Chiang *et al.* (2001). Assim, uma auto-regressão multivariada é extraída diretamente dos dados. Para sistemas dinâmicos, não se deve levar em consideração apenas a correlação entre as variáveis. O fato de se introduzir na matriz de dados os valores de auto-regressão das variáveis do processo a ser monitorado, com atrasos que variam de 1 até 2, permite estabelecer correlação entre estas, que são definidas pela física do processo, e, portanto, presentes em sistemas dinâmicos.

Estando os dados das variáveis a serem monitoradas, apresentadas em (5.1), organizadas em uma matriz de acordo com a equação (5.2), e após centralizar e normalizar esta matriz, aplicam-se as técnicas PCA e ICA já conhecidas.

Para aplicação do PCA, calcula-se a matriz de covariância, utilizando-se da equação (4.5). Em seguida, efetua-se a diagonalização desta, conforme equação (4.6), e, por fim, decompõe em componentes principais, pela equação (4.8). Como cada autovalor expressa uma porcentagem da variância total dos dados, pode-se concluir que a primeira componente principal é a que tem a maior variância e assim sucessivamente. Desta forma, tem-se que as α primeiras componentes principais podem representar todas as p variáveis originais sem muita perda de informações. Isto depende, evidentemente, de quantos por cento da variância total representa a soma dos α primeiros autovalores. Assim, a partir das α primeiras componentes principais, a matriz T pode ser calculada utilizando-se apenas os α autovetores associados aos α respectivos primeiros autovalores, ou seja:

$$T = ZP \quad (5.3)$$

Esta matriz de colunas reduzidas dos autovetores $P_{p \times \alpha}$ é denominada, por alguns autores, de “*loading vectors*”. Enquanto que a matriz $T_{m \times \alpha}$, matriz das α primeiras componentes principais, é denominada de matriz “*score*”.

Em consequência, a matriz dos dados estimada, obtida pelo PCA, é dada por:

$$\hat{Z} = TP^T \quad (5.4)$$

A diferença entre Z e $\hat{Z}$ é a matriz residual E , que assimila as variações no espaço observação gerado pelos autovetores associados aos $p - \alpha$ menores autovalores, dada por:

$$E = Z - \hat{Z} \quad (5.5)$$

Em contrapartida, para aplicação do ICA, deve-se efetivar primeiro o branqueamento. Esta etapa é importante para eliminar a relação cruzada entre as variáveis observadas e realiza-se por meio da matriz de branqueamento Q , de acordo com a equação (4.20). Neste trabalho, faz-se uso do algoritmo conhecido como FastICA, proposto por Hyvärinen (1997). Este é um dos algoritmos mais utilizados para estimação do modelo ICA e encontra-se descrito no Apêndice B. Assim, nas condições normais de operação dos dados, utilizando-se o algoritmo FastICA, obtém-se uma estimação de: A , W , Q e S . Sendo S a matriz de componentes independentes formada pelos vetores $\hat{s}$. Para calcular a matriz ortogonal B , a partir da equação (4.22), pode-se estimar o vetor de componentes independentes como segue:

$$\hat{s} = B^T \mathbf{z} \quad (5.6)$$

Ou ainda, substituindo a equação (4.20), tem-se:

$$\hat{s} = B^T Q \mathbf{x} \quad (5.7)$$

Do resultado da equação (5.7) e (4.19), conclui-se que:

$$W = B^T Q \text{ ou } B = (WQ^{-1})^T \quad (5.8)$$

Como acontece no PCA, pode-se reduzir a dimensão dos dados selecionando-se as d linhas de W dominantes que tem o maior efeito na variação dos elementos do vetor de componentes independentes. Isto pode ser feito usando-se a norma euclidiana das linhas da matriz W . Assim, podem-se organizar as linhas de W em ordem decrescente de acordo com o valor de sua norma. As d primeiras linhas de W correspondem a parte dominante. O resultado são duas matrizes reduzidas, W_d correspondente à parte dominante e W_e correspondente à parte excluída.

Da mesma forma, pode-se selecionar as d colunas da matriz de mistura A , resultando nas matrizes A_d e A_e . Em consequência disto, tem-se os seguintes vetores de componentes independentes:

$$\hat{\mathbf{s}}_d = W_d \mathbf{x} \quad (5.9)$$

$$\hat{\mathbf{s}}_e = W_e \mathbf{x} \quad (5.10)$$

5.1.2. Cálculo dos índices de monitoramento

Para detectar anormalidades no desempenho do MPC por meio dos modelos PCA e ICA, utilizaram-se estatísticas de monitoramento como índices de desempenho. Estas estatísticas são independentes uma da outra. As condições anormais são identificadas nos novos dados que são coletados e analisados em tempo real. Estes dados, quando coletados, devem ser centralizados e normalizados. Em seguida, devem ser concatenados com as observações anteriores, para então calcular as estatísticas propostas.

Utilizando o modelo PCA, AlGhazzawi e Lennox (2009) propõem as estatísticas T^2 de Hotelling e SPE (*squared prediction error*). A estatística T^2 de Hotelling detecta variações dentro das variáveis monitoradas no plano das primeiras componentes principais e pode ser calculada por:

$$T^2 = \mathbf{t}(k)^T \Lambda_\alpha^{-1} \mathbf{t}(k) \quad (5.11)$$

Em que: $\mathbf{t}(k) = \mathbf{z}(k)P$ no instante k e Λ_α é a matriz diagonal dos autovalores associados aos α componentes principais, calculados no modelo de referência PCA.

No entanto, a estatística T^2 não é suficiente, o que torna necessário monitorar os resíduos por meio da estatística SPE. Esta mede as variações no plano das últimas componentes principais. Desta forma, pode-se detectar quando o ruído do sistema tem nível semelhante ao que existia durante o desenvolvimento do modelo de referência. A estatística SPE é definida como:

$$SPE = ||\mathbf{e}(k)||_2^2 \quad (5.12)$$

Em que: $\mathbf{e}(k)$ é o vetor residual no instante k calculado de acordo com a equação (5.5).

Por meio do ICA, Lee *et al.* (2004b) propõem três estatísticas, quais sejam: I_d^2 , I_e^2 e SPE (*squared prediction error*). A estatística I_d^2 é usada para monitorar a parte sistemática, ou seja, a parte que corresponde à dinâmica do sistema. Esta estatística é definida como:

$$I_d^2(k) = \hat{\mathbf{s}}_{newd}(k)^T \hat{\mathbf{s}}_{newd}(k) \quad (5.13)$$

Em que: $\hat{\mathbf{s}}_{newd}(k) = W_d \mathbf{x}_{new}(k)$ no instante k .

A estatística I_e^2 corresponde à estatística das componentes independentes excluídas. Esta estatística monitora a parte não-sistemática das medidas do processo e é definida como:

$$I_e^2(k) = \hat{\mathbf{s}}_{newe}(k)^T \hat{\mathbf{s}}_{newe}(k) \quad (5.14)$$

Em que: $\hat{\mathbf{s}}_{newe}(k) = W_e \mathbf{x}_{new}(k)$ no instante k .

Por fim, a estatística SPE é utilizada para monitorar a parte residual da variação do processo e é definida como:

$$SPE(k) = \mathbf{e}(k)^T \mathbf{e}(k) \quad (5.15)$$

Em que: $\mathbf{e}(k) = \mathbf{x}_{new}(k) - \hat{\mathbf{x}}_{new}(k)$ e $\hat{\mathbf{x}}_{new}(k) = A_d \hat{\mathbf{s}}_{newd}(k)$.

Os valores destas estatísticas devem permanecer baixos e inferiores a um limite estatístico de referência pré-estabelecido. Caso contrário, indicam condições anormais. A

estatística T^2 mede a variação dentro dos limites do modelo PCA. Quando a matriz de covariância é estimada a partir da matriz de covariância das observações, o limite de referência de T^2 é calculado pela distribuição-F, como segue (Chiang, 2001):

$$T_a^2 = \frac{\alpha(m-1)(m+1)}{m(m-\alpha)} F_a(\alpha, m-\alpha) \quad (5.16)$$

Em que: m é o número de amostras dos dados usada no modelo PCA; α é o número de componentes principais; a é o nível de significância da distribuição-F e T_a^2 é o limite de T^2 .

No caso da estatística SPE do modelo PCA, que monitora a parte do espaço de medição correspondente aos $p - \alpha$ menores valores singulares, calcula-se seu limite por meio da seguinte aproximação (Chiang, 2001):

$$SPE_a = \theta_1 \left[\frac{h_0 c_a \sqrt{2\theta_2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right]^{1/h_0} \quad (5.17)$$

Em que: $\theta_i = \sum_{j=\alpha+1}^m \lambda_j^i$, λ_j é o autovalor associado ao j -ésimo autovetor, calculados no modelo PCA; $h_0 = 1 - \frac{2\theta_1\theta_3}{3\theta_2^2}$ e c_a é o desvio normal correspondente ao percentual $(1 - a)$, dado um nível de significância a .

Assim, utilizando o modelo PCA, a violação do limite estabelecido pela estatística T^2 indica que variações sistemáticas estão fora de controle. Já a estatística SPE é capaz de medir variações aleatórias do processo, por exemplo, aquelas associadas com medições de ruído.

De acordo com Stefatos (2010), os limites de referência, para cada uma das estatísticas do modelo ICA, podem ser estabelecidos usando-se o estimador de densidade kernel. Este estimador é dado pela seguinte equação:

$$\hat{f}(x) = \frac{1}{m\eta} \sum_{i=1}^m K\left(\frac{x - x_i}{\eta}\right) \quad (5.18)$$

Em que: $K(u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}u^2}$ é a kernel gaussiana; $\eta = \frac{1.06}{m^{1/5}}\sigma$ é a largura de banda; m é o número de observações e σ é o desvio padrão de cada estatística.

Após estimar a função densidade de cada estatística, o limite de controle é o ponto que ocupa 99% da área da função densidade. Deve-se salientar que as funções de densidade calculadas para cada estatística devem utilizar os dados do modelo *benchmark*, para o cálculo dos limites.

O uso do estimador de densidade kernel torna-se adequado para estabelecer os limites de monitoramento do ICA, já que esta técnica não segue uma distribuição gaussiana, ou alguma outra distribuição particular (Stefatos, 2010).

5.2 Aplicação dos métodos de monitoramento

Apresentam-se nesta seção duas aplicações, por meio de simulação, de avaliação de desempenho do controlador MPC, utilizando as técnicas PCA e ICA. A primeira aplicação trata-se do controle de uma coluna de destilação Wood-Berry, enquanto que, a segunda trata-se do controle de uma unidade de craqueamento catalítico (FCC). Estes processos foram descritos com mais detalhes no Capítulo 03. Desenvolveram-se as ferramentas, baseadas na PCA e ICA, utilizando-se dos conceitos teóricos das técnicas apresentados no Capítulo 04 e a metodologia apresentada na seção 5.1.

Para aplicação, como mencionado nas seções anteriores, deve-se ter um histórico de dados do processo. Estes dados são amostrados durante a operação normal do processo, em malha fechada, e ainda, tratados off-line para obtenção de um modelo de referência ou “*benchmark*”. Este *benchmark*, por sua vez, contém importantes informações que são extraídas para auxiliar o monitoramento em questão. Em processos reais, deve-se escolher estes dados com parcimônia, considerando-se a experiência do operador e as especificações do sistema. Além disso, deve-se garantir que estes sejam dados de operação de períodos em que se acredita que o controlador esteja operando o mais próximo do desejado.

Para se obter o modelo PCA e ICA de referência, deve-se perturbar o processo em torno de sua região de operação, excitando assim a dinâmica do sistema. Neste trabalho, a variabilidade dos dados é dada por meio das variáveis de distúrbios. As amplitudes e frequências desses distúrbios foram escolhidos de tal forma que excitam adequadamente o processo, sem desviar muito do seu ponto de operação nominal. Além disso, o conjunto de dados de referência do processo deve ser grande o suficiente para representar adequadamente a variação normal da dinâmica do processo.

5.2.1. Aplicação no processo Wood-Berry

Com o objetivo de demonstrar a efetividade das ferramentas de monitoramento e os conceitos teóricos apresentados, aplicaram-se estas em um sistema de destilação Wood-Berry. Este processo tem sido usado em muitos trabalhos de monitoramento como por exemplo o trabalho sugerido pelo autor Tian *et al.* (2011a).

A. Geração do modelo de referência (*benchmark*)

Para gerar o modelo de referência, usando-se o DPCA e o DICA, simulou-se o sistema em malha fechada com uma janela de 1000 minutos, usando a estratégia de controle MPC e considerando-se as condições de ajustes do controlador descritas no Capítulo 03. Estas são as condições consideradas normais do sistema de controle. Além disso, para variabilidade dos dados, a variância das variáveis de distúrbios foi ajustada em 0,01. Em seguida, os dados do processo foram coletados, com um tempo de amostragem de 1 minuto. As respostas das variáveis manipuladas, dos erros de predição e das variáveis controladas são apresentadas na Figura 5.2, Figura 5.3 e Figura 5.4, respectivamente.

Este conjunto de dados foi organizado na forma matricial. Nesta, cada coluna deve corresponder a uma variável e cada linha aos valores das variáveis selecionadas em determinado tempo de amostragem.

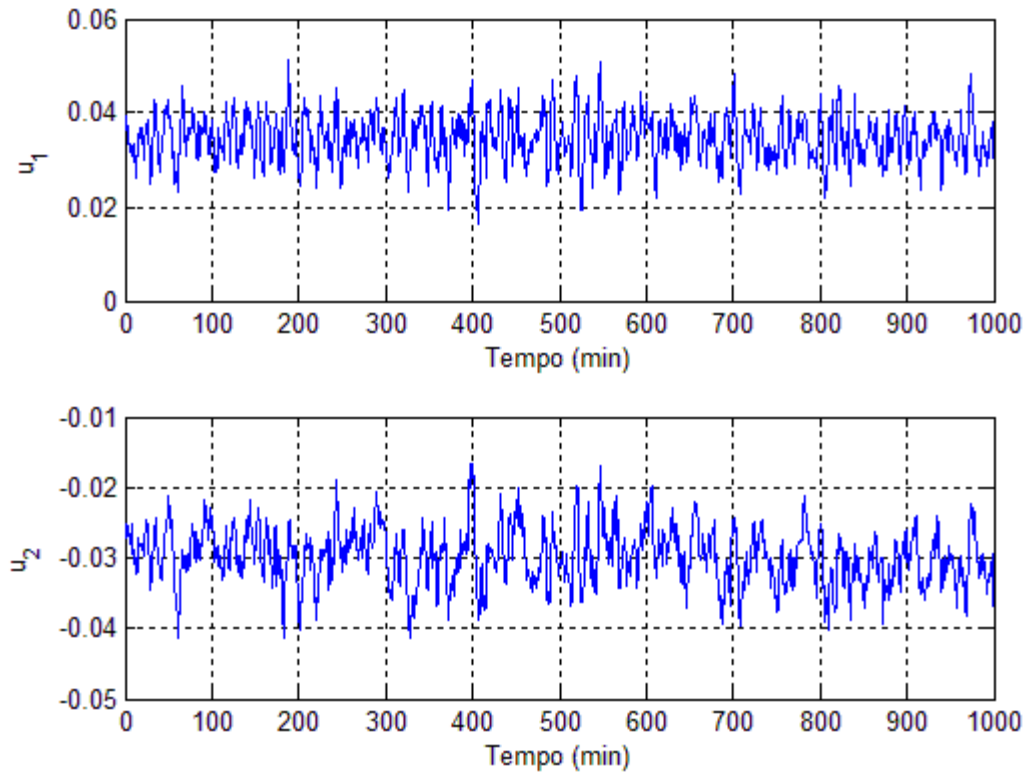


Figura 5.2 - Dados das variáveis manipuladas para o processo Wood-Berry

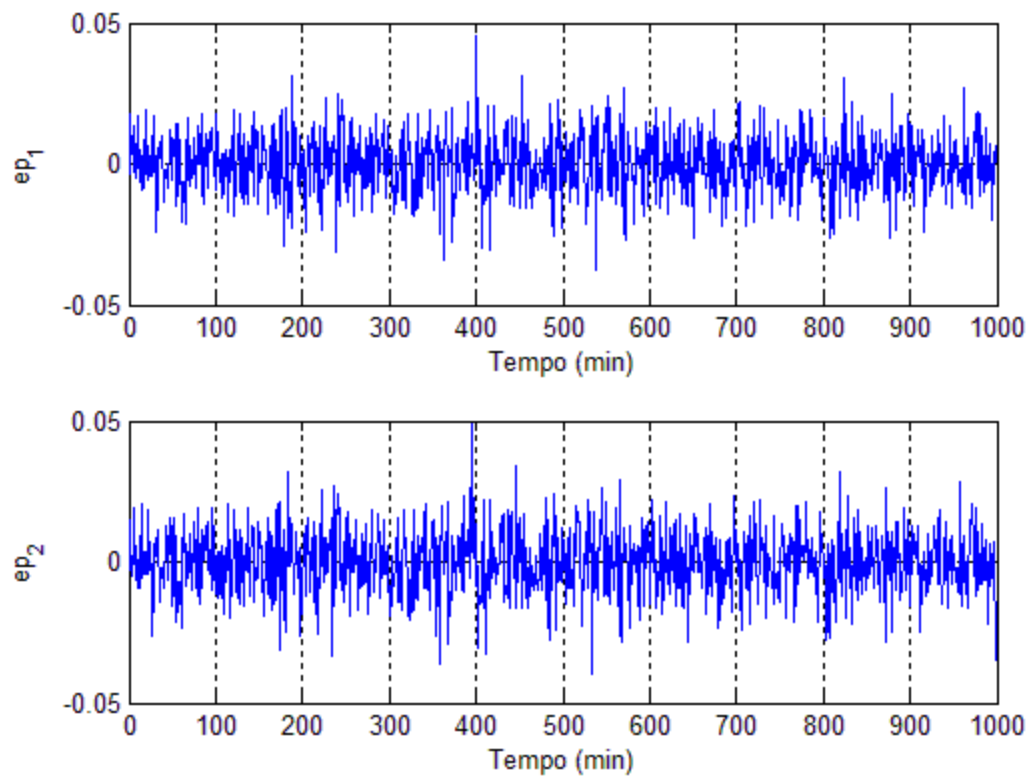


Figura 5.3 - Dados dos erros de predição para o processo Wood-Berry

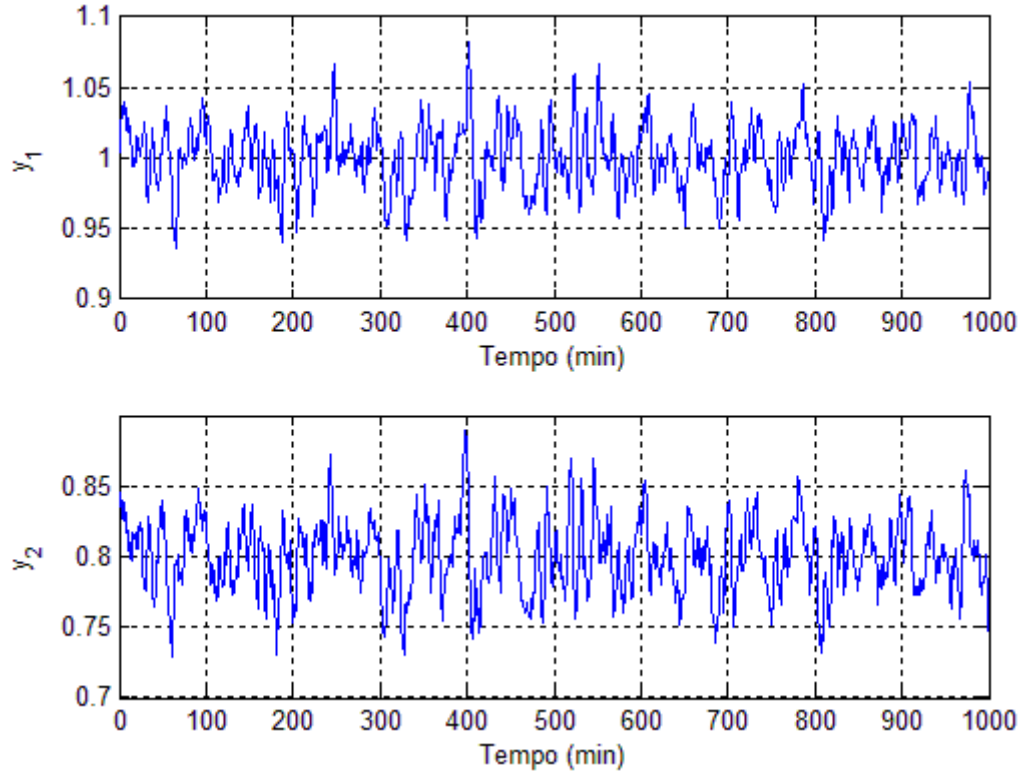


Figura 5.4 - Dados das variáveis controladas para o processo Wood-Berry

Como já mencionado, neste trabalho utilizou-se o monitoramento dinâmico, ou PCA dinâmico (DPCA) e ICA dinâmico (DICA), com o número de medições defasadas de uma amostragem, ou seja, $l = 1$, conforme equação (5.2). O resultado é uma matriz de dados com 1000 linhas e 12 colunas. Em seguida, na aplicação das técnicas, normalizaram-se os dados, por meio da equação (4.4).

Na aplicação do PCA, efetuou-se a decomposição da matriz de covariância dos dados, de acordo com a equação (4.6), obtendo-se as matrizes de autovalores e autovetores, respectivamente. Por meio dos autovetores, de acordo com a equação (4.8), transformou-se as variáveis originais em outras variáveis, chamadas componentes principais (P_c), de modo que estas novas variáveis correspondem a combinações lineares das variáveis originais. A

Tabela 5.1 e Tabela 5.2 apresentam os resultados encontrados dos autovalores e dos respectivos autovetores associados:

Tabela 5.1 - Autovalores de cada componente principal para o processo Wood-Berry

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}
4,8819	2,6632	1,3825	1,1596	1,0336	0,6873	0,1440	0,0366	0,0074	0,0034	0,0004	0,0000

Tabela 5.2 - Autovetores de cada componente principal para o processo Wood-Berry

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}
-0,2985	0,4466	-0,1033	-0,0468	-0,0747	0,0081	0,0094	0,5382	-0,0043	-0,0721	0,0222	-0,6305
-0,4181	0,0642	0,1630	-0,1868	0,0138	-0,1607	0,5179	-0,2028	-0,1168	0,0797	-0,6350	0,0309
-0,2131	-0,0323	-0,3861	0,0927	-0,6155	0,4865	0,1059	-0,2829	0,2840	-0,0893	-0,0134	-0,0185
0,0176	0,0572	0,3151	0,8489	-0,0673	0,0461	0,2653	0,0664	-0,1664	-0,2589	0,0065	0,0177
-0,2176	-0,4977	-0,0105	0,0008	-0,3058	0,0872	-0,0307	0,3297	-0,5779	0,3890	0,0877	0,0329
-0,3870	0,0901	0,2824	0,2947	0,0031	-0,0985	-0,4306	-0,1661	0,3541	0,5706	-0,0188	-0,0393
-0,3319	0,1498	-0,3809	0,1340	0,3733	0,2139	-0,0271	0,3839	0,0735	-0,0101	-0,0798	0,5994
-0,3882	-0,1192	-0,2088	0,0251	0,1051	-0,4398	0,3680	-0,1908	0,0746	-0,0349	0,6383	-0,0179
-0,1235	-0,3731	-0,0100	0,0544	0,5947	0,5168	0,0691	-0,1832	0,0028	0,0056	0,0013	-0,4281
-0,1325	0,2061	0,6211	-0,3385	-0,0597	0,4272	0,1947	0,0811	0,0546	-0,0153	0,3898	0,2320
-0,0992	-0,5635	0,2185	-0,0580	-0,0967	-0,1622	0,0026	0,4094	0,5490	-0,3083	-0,1478	0,0015
-0,4356	-0,0174	0,1108	-0,0856	-0,0201	-0,0541	-0,5337	-0,2386	-0,3215	-0,5830	-0,0193	0,0403

Os autovalores estão dispostos em ordem decrescente e, devido a normalização dos dados, cada autovalor expressa uma porcentagem da variância total dos dados. Assim, calcularam-se as variâncias em porcentagem de cada componente principal, por meio da equação (4.11), e as variâncias percentuais acumuladas, por meio da equação (4.12). Estes resultados são mostrados na Figura 5.5.

Na análise destes resultados, observa-se que mais de 90% da variância total é representada apenas pelas 5 primeiras componentes principais. Assim, percebe-se que as 5 primeiras componentes principais podem representar todas as variáveis originais com perda de informação desprezível. E ainda, estas podem ser calculadas apenas com os autovetores associados aos 5 primeiros autovalores, de acordo com a equação (5.3). Em consequência,

calculou-se a matriz dos dados estimada $\hat{Z}$, por meio da equação (5.4), e a matriz residual E , por meio da equação (5.5).

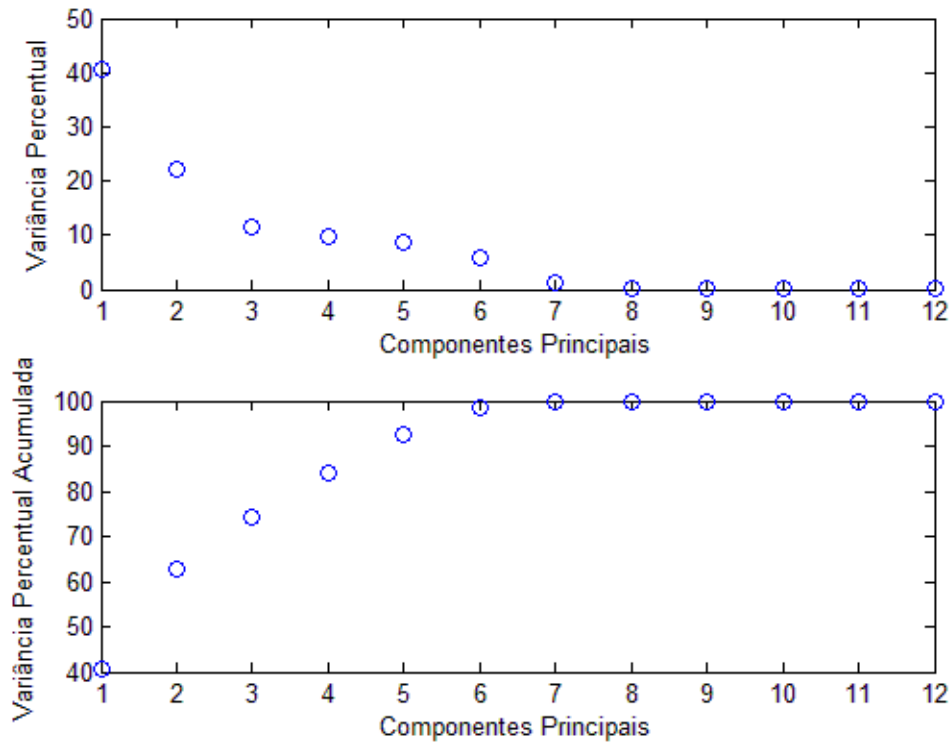


Figura 5.5 - Variância percentual e variância percentual acumulada das componentes principais para o processo Wood-Berry

Finalmente, na construção do modelo utilizando a técnica PCA, os limites de referência das estatísticas devem ser estabelecidos. Por meio das equações (5.16) e (5.17), calculam-se os limites das estatísticas T^2 e SPE, respectivamente. Considerando um nível de significância de 0,01 ou 1%, valor este apropriado para detecção de falhas de acordo com Chiang (2001), tem-se que:

$$T_{0,01}^2 = \frac{5(1000 - 1)(1000 + 1)}{1000(1000 - 5)} F_{0,01}(5, 1000 - 5) \quad (5.19)$$

$$T_{0,01}^2 = 15,2764 \quad (5.20)$$

$$SPE_{0,01} = 0,8792 \left[\frac{0,2146 * c_{0,01} \sqrt{2 * 0,4945}}{0,8792} + 1 + \frac{0,4945 * 0,2146(0,2146 - 1)}{0,8792^2} \right]^{1/0,2146} \quad (5.21)$$

$$SPE_{0,01} = 5,0771 \quad (5.22)$$

Em contrapartida, na aplicação do ICA, para determinar a matriz de componentes independentes S , a matriz de separação W e a matriz de mistura A , aplicou-se o algoritmo FastICA, proposto por Hyvärinen (1999) e descrito no Apêndice B deste trabalho. A Tabela 5.3, a Tabela 5.4 e a Tabela 5.5 apresentam os resultados encontrados pelo algoritmo da matriz de branqueamento, da matriz de mistura e da matriz de separação, respectivamente:

Tabela 5.3 - Matriz de branqueamento Q para o processo Wood-Berry

175,91	-8,63	5,16	-4,94	-9,18	10,96	-167,2	4,99	119,44	-64,73	-0,43	-11,25
-1,05	30,18	0,63	-0,31	-4,17	0,90	3,79	-30,34	-0,06	-18,53	7,02	0,92
-1,23	1,37	-1,53	-4,43	6,66	9,77	-0,17	-0,60	0,10	-0,26	-5,28	-9,98
0,05	1,35	-3,29	1,93	6,70	-4,11	-0,85	-0,87	-0,03	-0,63	-6,37	3,73
2,82	-1,06	-1,48	0,35	1,72	-0,87	2,01	-1,00	-0,96	0,42	2,14	-1,25
-0,02	-1,37	-0,28	-0,70	0,08	1,14	0,07	-0,97	-0,18	-0,51	-0,01	1,41
0,01	-0,19	0,59	0,06	0,11	-0,12	0,26	-0,53	0,62	0,52	-0,20	-0,07
0,07	-0,01	0,61	0,07	0,30	0,00	-0,37	-0,10	-0,59	0,06	0,10	0,02
-0,04	-0,17	0,09	0,79	0,00	0,27	0,12	0,02	0,05	-0,31	-0,05	-0,08
-0,09	0,14	-0,33	0,27	-0,01	0,24	-0,32	-0,18	-0,01	0,53	0,19	0,09
-0,27	-0,04	0,02	-0,04	0,31	-0,06	-0,09	0,07	0,23	-0,13	0,35	0,01
0,14	0,19	0,10	-0,01	0,10	0,18	0,15	0,18	0,06	0,06	0,04	0,20

Tabela 5.4 - Matriz de mistura A para o processo Wood-Berry

0,00	0,01	0,32	0,23	-0,27	-0,08	0,14	0,04	0,11	0,17	0,64	-0,54
------	------	------	------	-------	-------	------	------	------	------	------	-------

0,06	0,26	0,57	0,08	-0,06	0,07	0,45	0,00	-0,06	-0,19	0,20	-0,55
0,30	0,00	-0,20	0,18	-0,03	-0,51	0,08	0,13	-0,40	-0,36	0,38	-0,34
0,06	-0,11	-0,49	0,31	-0,60	0,35	0,26	0,16	0,11	-0,09	-0,22	-0,01
0,39	0,02	0,11	-0,21	0,16	-0,17	0,25	0,15	-0,32	-0,66	-0,29	-0,16
0,15	-0,16	0,34	0,24	-0,35	0,25	0,52	-0,02	0,07	-0,31	0,17	-0,44
0,14	0,05	0,26	0,26	0,09	0,09	0,19	0,37	0,23	-0,27	0,70	-0,19
0,47	0,31	0,49	0,09	0,07	-0,05	0,45	0,14	0,17	-0,31	0,18	-0,23
-0,13	0,02	0,07	-0,02	0,46	0,39	0,18	0,37	-0,05	-0,63	0,00	0,20
-0,61	-0,09	0,25	-0,02	-0,13	0,24	0,13	-0,16	-0,35	0,06	0,00	-0,56
0,21	0,02	0,17	-0,34	0,19	-0,03	0,30	0,07	-0,17	-0,53	-0,60	0,03
0,20	-0,10	0,58	0,06	-0,06	0,07	0,45	-0,02	-0,11	-0,36	0,26	-0,43

Tabela 5.5 - Matriz de separação W para o processo Wood-Berry

36,31	-8,41	-0,48	-0,44	2,46	1,21	-35,97	8,08	24,34	-9,95	-4,89	-1,23
-6,93	11,34	-0,19	0,30	0,19	-0,60	6,17	-8,47	-3,75	-3,45	0,30	-0,64
-80,63	3,88	-3,16	2,62	4,27	-6,77	76,94	-2,30	-55,16	29,70	0,19	7,55
-89,63	-8,24	-1,72	1,92	5,41	-3,62	81,80	11,33	-59,53	40,50	-3,88	3,92
49,72	-16,90	1,85	-2,72	-1,30	4,60	-49,44	16,38	34,55	-9,40	-3,39	-5,46
46,32	-3,45	-0,84	-0,68	1,85	2,36	-45,40	3,05	32,32	-16,16	-4,95	-2,28
63,41	-4,60	4,32	-0,19	-9,93	1,13	-60,31	3,59	43,21	-22,55	4,93	-0,50
-37,54	-6,41	-1,86	3,68	2,46	-7,86	38,48	6,30	-27,35	19,74	0,78	5,45
11,12	0,61	0,24	-2,80	-0,76	6,35	-8,91	-1,19	6,96	-5,02	1,72	-6,74
35,14	-13,68	0,74	1,07	-2,25	-2,70	-33,96	13,15	22,70	-5,20	-1,49	1,49
46,42	7,22	1,80	-1,06	-4,16	1,94	-42,99	-8,55	31,90	-23,30	1,59	-0,92
-38,65	10,53	-0,07	2,60	-2,82	-5,81	36,67	-10,02	-25,30	7,70	3,88	7,54

Diferente do PCA, em que os autovalores estão dispostos em ordem decrescente, no ICA essa ordem não acontece. Assim, calcularam-se as normas euclidianas das linhas da matriz W para organizá-la em ordem decrescente. Apresenta-se o resultado das normas na tabela abaixo:

Tabela 5.6 - Normas euclidianas das linhas da matriz de separação W para o processo Wood-Berry

Linha 1	Linha 2	Linha 3	Linha 4	Linha 5	Linha 6	Linha 7	Linha 8	Linha 9	Linha 10	Linha 11	Linha 12
58,94	17,70	128,47	142,08	82,63	74,66	101,05	64,99	19,38	57,52	75,61	62,21

De acordo com estes resultados, organizaram-se as linhas de W em ordem decrescente de acordo com o valor de sua norma.

Na análise destes resultados, observa-se que as nove (9) maiores normas correspondem a 90% da soma de todas as normas. Assim, as nove (9) primeiras linhas de W organizada em ordem decrescente correspondem a parte dominante. O resultado são duas matrizes reduzidas, W_d correspondente a parte dominante e W_e correspondente a parte excluída, conforme Tabela 5.7 e Tabela 5.8:

Tabela 5.7 - Matriz de separação da parte dominante W_d para o processo Wood-Berry

-89,63	-8,24	-1,72	1,92	5,41	-3,62	81,80	11,33	-59,53	40,50	-3,88	3,92
-80,63	3,88	-3,16	2,62	4,27	-6,77	76,94	-2,30	-55,16	29,70	0,19	7,55
63,41	-4,60	4,32	-0,19	-9,93	1,13	-60,31	3,59	43,21	-22,55	4,93	-0,50
49,72	-16,90	1,85	-2,72	-1,30	4,60	-49,44	16,38	34,55	-9,40	-3,39	-5,46
46,42	7,22	1,80	-1,06	-4,16	1,94	-42,99	-8,55	31,90	-23,30	1,59	-0,92
46,32	-3,45	-0,84	-0,68	1,85	2,36	-45,40	3,05	32,32	-16,16	-4,95	-2,28
-37,54	-6,41	-1,86	3,68	2,46	-7,86	38,48	6,30	-27,35	19,74	0,78	5,45
-38,65	10,53	-0,07	2,60	-2,82	-5,81	36,67	-10,02	-25,30	7,70	3,88	7,54
36,31	-8,41	-0,48	-0,44	2,46	1,21	-35,97	8,08	24,34	-9,95	-4,89	-1,23

Tabela 5.8 - Matriz de separação da parte excluída W_e para o processo Wood-Berry

35,14	-13,68	0,74	1,07	-2,25	-2,70	-33,96	13,15	22,70	-5,20	-1,49	1,49
11,12	0,61	0,24	-2,80	-0,76	6,35	-8,91	-1,19	6,96	-5,02	1,72	-6,74
-6,93	11,34	-0,19	0,30	0,19	-0,60	6,17	-8,47	-3,75	-3,45	0,30	-0,64

Da mesma forma, organizaram-se as colunas da matriz de mistura A de acordo com a ordem proposta pelas normas e a separou nas matrizes A_d e A_e . Em consequência disto, tem-se os seguintes resultados:

Tabela 5.9 - Matriz de mistura da parte dominante A_d para o processo Wood-Berry

0,234	0,320	0,136	-0,270	0,640	-0,079	0,042	-0,542	0,002
0,077	0,569	0,447	-0,062	0,204	0,074	-0,005	-0,555	0,060
0,180	-0,204	0,075	-0,028	0,378	-0,512	0,127	-0,342	0,304
0,312	-0,488	0,263	-0,602	-0,218	0,352	0,158	-0,014	0,060
-0,210	0,109	0,254	0,155	-0,289	-0,175	0,149	-0,161	0,387
0,237	0,340	0,517	-0,353	0,166	0,248	-0,023	-0,441	0,149
0,263	0,264	0,193	0,090	0,699	0,093	0,368	-0,191	0,138
0,090	0,488	0,445	0,068	0,181	-0,047	0,140	-0,230	0,470
-0,019	0,072	0,182	0,465	0,004	0,394	0,371	0,197	-0,128
-0,023	0,249	0,135	-0,128	-0,001	0,242	-0,161	-0,560	-0,609
-0,339	0,166	0,304	0,193	-0,603	-0,031	0,066	0,027	0,215
0,064	0,579	0,449	-0,058	0,264	0,069	-0,022	-0,427	0,203

Tabela 5.10 - Matriz de mistura da parte excluída A_e para o processo Wood-Berry

0,167	0,106	0,005
-0,191	-0,055	0,260

-0,359	-0,399	-0,004
-0,087	0,107	-0,114
-0,661	-0,324	0,016
-0,312	0,068	-0,163
-0,265	0,231	0,052
-0,313	0,174	0,306
-0,627	-0,052	0,025
0,065	-0,346	-0,090
-0,530	-0,172	0,022
-0,365	-0,112	-0,101

Por fim, na construção do modelo utilizando a técnica ICA, os limites de referência das estatísticas devem ser estabelecidos. Para o cálculo destes limites, calcularam-se as estatísticas I_d^2 , I_e^2 e SPE utilizando os dados do modelo, por meio das equações (5.13), (5.14) e (5.15). Em seguida, para estimar a função densidade de cada estatística, usou-se o estimador de densidade kernel, por meio da equação (5.18). Após estimar a função densidade de cada estatística, o limite de controle é o ponto que ocupa 99% da área da função densidade. Assim, tem-se os valores seguintes:

$$I_d^2 = 16,3009 \quad (5.23)$$

$$I_e^2 = 6,4667 \quad (5.24)$$

$$SPE = 5,4818 \quad (5.25)$$

Nesta condição, estando os modelos bem definidos, as ferramentas de monitoramento obtidas por meio da aplicação das técnicas PCA e ICA estão aptas a monitorar o controlador MPC.

B. Detecção de condições anormais de operação

Estando os modelos de referência bem definidos e os limites estatísticos de referência estabelecidos, desenvolveram-se os protótipos para o monitoramento do MPC

utilizando-se o PCA dinâmico e o ICA dinâmico. Após essa etapa, avalia-se a capacidade dos métodos em identificar anomalias no sistema de controle. A cada nova medição, recalculam-se estas estatísticas para o monitoramento on-line.

Em condições de operação consideradas adequadas, com o controlador e processo funcionando como desejado, calcularam-se estas estatísticas, resultando em um monitoramento conforme Figura 5.6 e Figura 5.7.

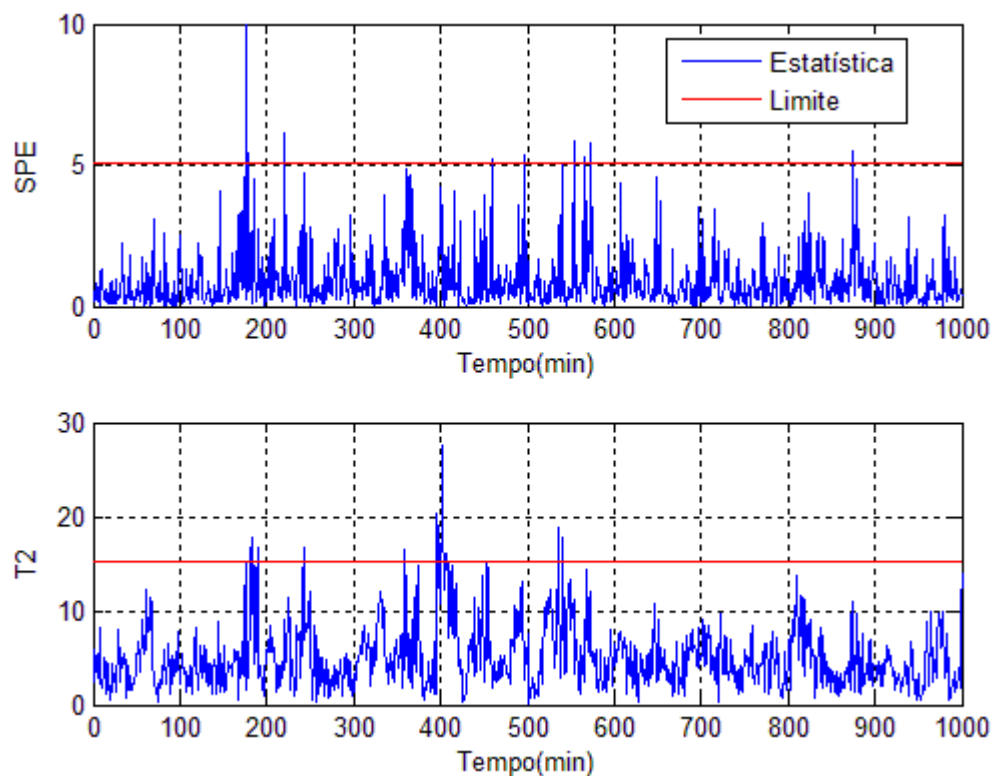


Figura 5.6 – Estatísticas de monitoramento do DPCA em condições de operação adequadas para o processo Wood-Berry

Embora os gráficos de monitoramento do PCA, representados pela Figura 5.6, apresentem valores das estatísticas que ultrapassem o limite desejado, esporadicamente e em curtos intervalos de tempo, deve-se salientar que, nestes casos, estas ultrapassagens não correspondem a um mau desempenho do controlador. Isto porque a indicação de mau desempenho corresponde as ultrapassagens das estatísticas consistentes, ou permanentes, capturadas em intervalos representativos.

Observa-se também que os gráficos de monitoramento do ICA, representados pela Figura 5.7, não apresentam valores das estatísticas que ultrapassem o limite desejado, correspondendo assim a um bom desempenho do controlador.

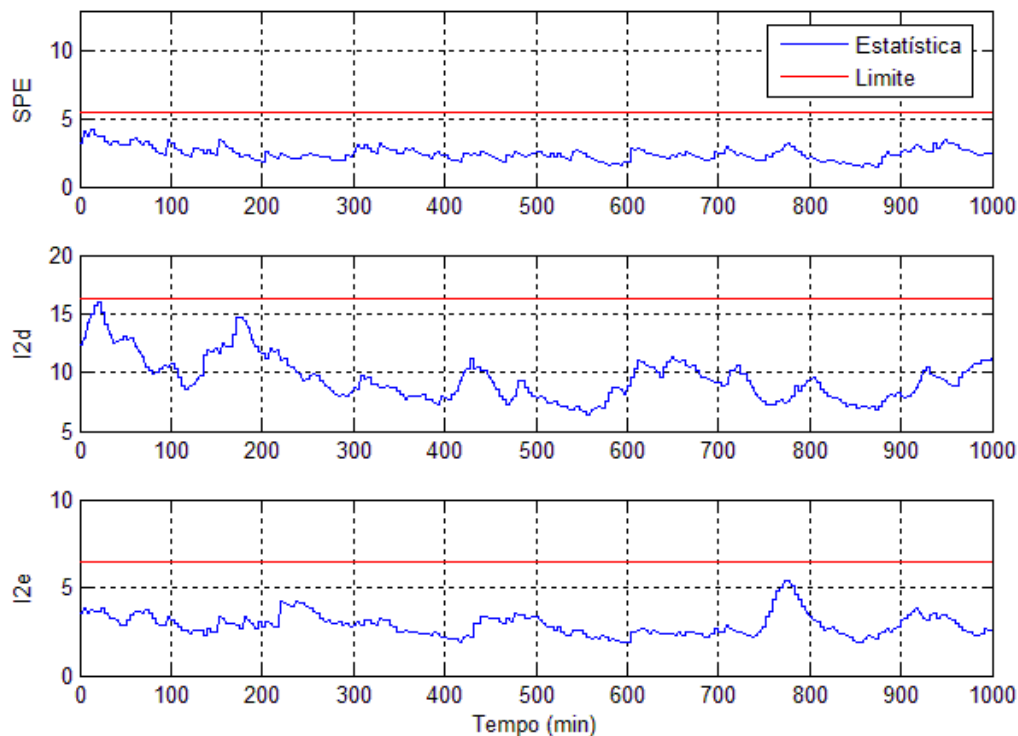


Figura 5.7 - Estatísticas de monitoramento do DICA em condições de operação adequadas para o processo Wood-Berry

Para avaliar o desempenho e eficácia do processo de monitoramento, quatro condições de operação, consideradas anormais, de acordo com a Figura 1.1, estabelecidas no trabalho de Tian (2011a) e seguidas por esse trabalho, foram inseridas no sistema. Estas condições são descritas na Tabela 5.11:

Tabela 5.11 - Ocorrências inseridas no processo Wood-Berry

Ocorrência	Condição de Operação	Parâmetro/Variável	Valor/Intervalo
F_1	Alteração nas condições do distúrbio (Fatores externos)	Variância	0,018

F_2	Saturação nas restrições do controlador (Fatores internos)	Restrições nas saídas	$\pm 0,5$
F_3	Incompatibilidade do modelo do processo (Fatores internos)	Primeiro ganho estático	26,88
F_4	Controlador mau sintonizado (Fatores internos)	Horizonte de Controle	2

Em seguida, aplicaram-se os métodos de avaliação de desempenho, utilizando-se o DPCA e o DICA, propostos neste trabalho, para todas as condições presentes na tabela acima. Estas mudanças de condição de operação foram inseridas a partir do instante correspondente a 500 minutos de operação do processo. Como já mencionado, recalculam-se as estatísticas anteriormente citadas, a cada nova medição. Deve-se enfatizar que os limites de referência destas estatísticas, calculados dentro das condições de normalidade, evidentemente, não são recalculados e permanecem constantes, nos valores previamente calculados.

Os resultados do processo de monitoramento podem ser analisados nas figuras Figura 5.9, Figura 5.12, Figura 5.15 e Figura 5.18, utilizando PCA e nas figuras Figura 5.10, Figura 5.13, Figura 5.16 e Figura 5.19, utilizando o ICA. Além destas, as variáveis monitoradas são desenhadas nas figuras: Figura 5.8; Figura 5.11; Figura 5.14 e Figura 5.17. Deve-se observar que, também nestes casos, há a presença das mudanças de condição de operação que foram inseridas a partir do instante 500 minutos.

Ocorrência 1: Análise da Condição F_1

A mudança F_1 corresponde a uma alteração no valor da variância do distúrbio que acontece na vazão da alimentação da coluna de destilação. O valor da variância foi modificado de 0,01 para 0,018, correspondente a uma variação de 80% do valor inicial. Após a ocorrência da mudança de condição, verifica-se que as variáveis monitoradas aumentam a variância, conforme ilustrado na Figura 5.8.

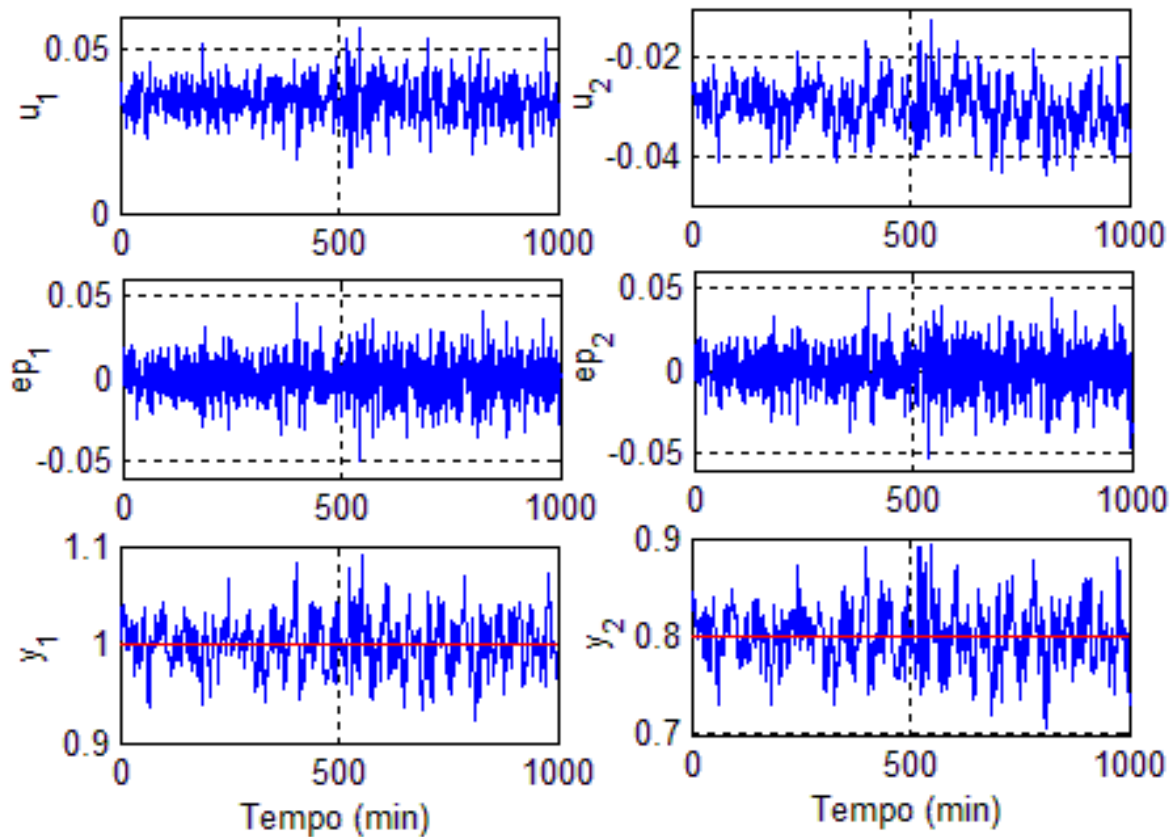


Figura 5.8 – Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência F_1 no processo Wood-Berry

A Figura 5.9 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado nesta condição. De acordo com a metodologia apresentada e os gráficos obtidos, pode-se considerar que a ocorrência está sendo detectada pelas violações dos limites, que ocorrem de forma mais frequente após a ocorrência ser inserida. Observa-se também que houve um atraso em relação a sua detecção de aproximadamente 60 minutos, quando efetivamente começa a aparecer violações mais frequentes do limiar estabelecido.

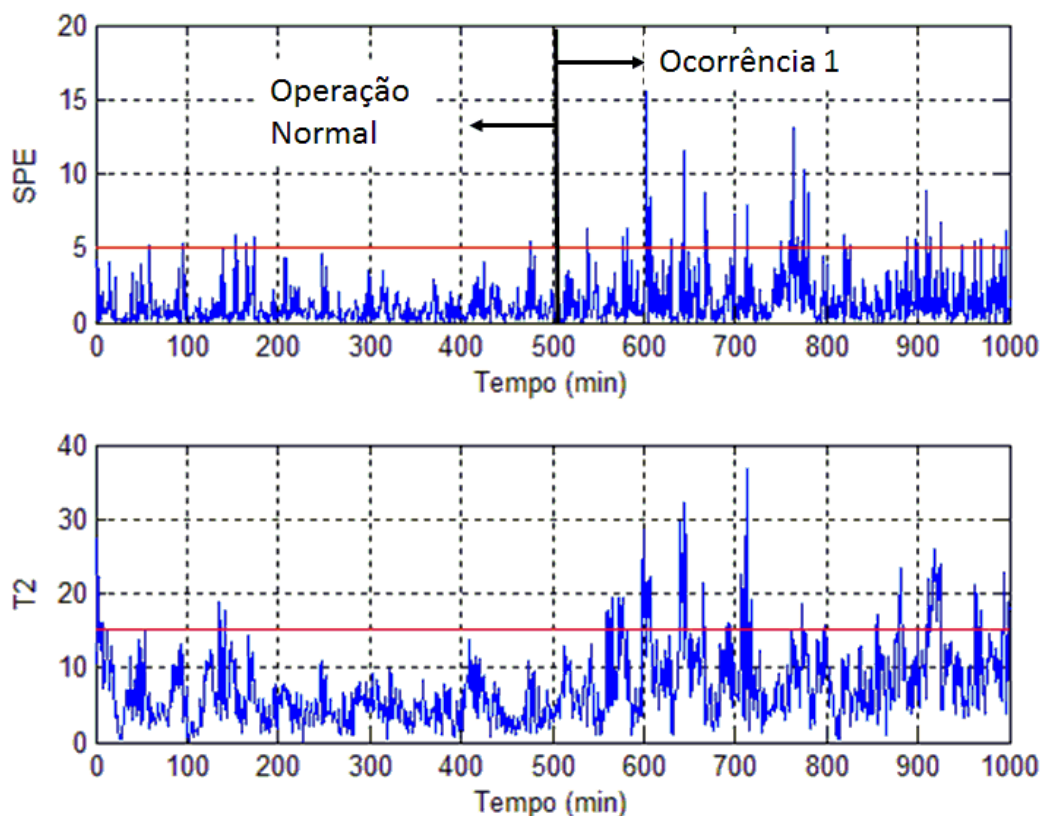


Figura 5.9 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência F_1 no processo Wood-Berry

Em contrapartida, a Figura 5.10 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para o caso estudado na condição F_1 . Todas as três estatísticas mostraram-se eficazes, neste caso, pelas violações dos limites. Observa-se ainda que, na ocorrência da falha, não houve atraso na detecção desta.

Embora as estatísticas de monitoramento utilizando o DPCA tenham detectado esta ocorrência, a ferramenta que utiliza a técnica DICA mostrou-se mais consistente na detecção desta ocorrência. Isto pode ser percebido por meio dos altos valores que as estatísticas de monitoramento via DICA atingem após inserir a ocorrência. Além disso, mesmo estas estatísticas decaindo após um período representativo de tempo (mais de 100 minutos), estas continuam ultrapassando os limites de referência estabelecidos.

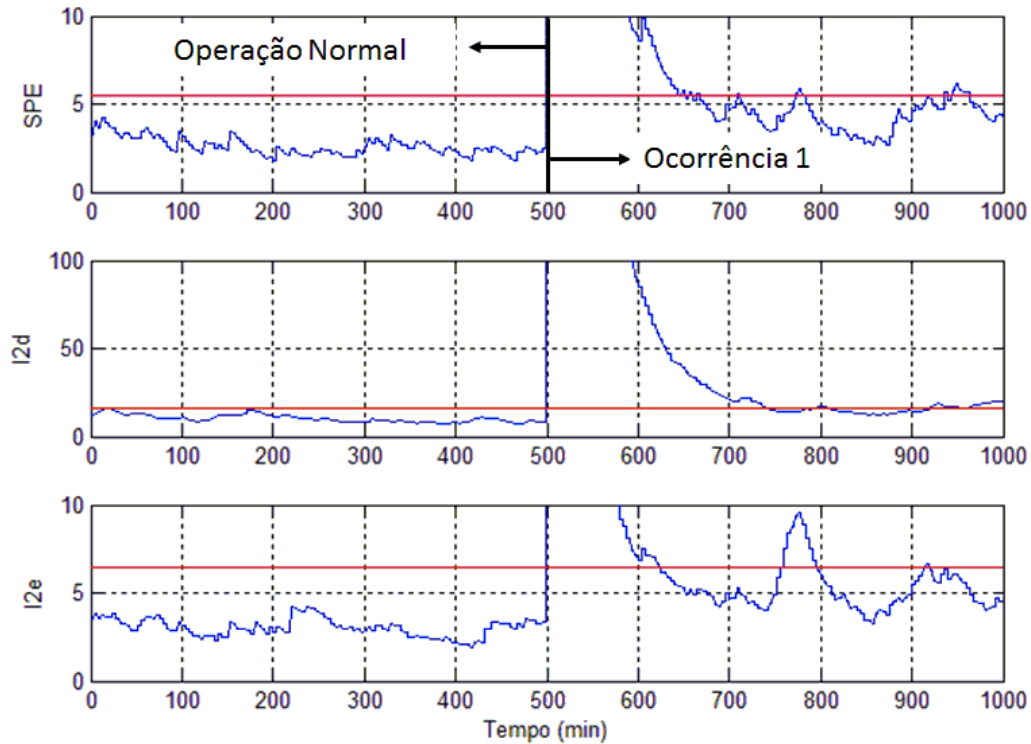


Figura 5.10 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_1 no processo Wood-Berry

Deve-se salientar que esta alteração na condição de operação é devido a fatores externos a montante do processo. A sua detecção, que representa uma mudança na variância do fluxo de alimentação da coluna, pode indicar falha em algum equipamento a montante, por exemplo: mau funcionamento do processo de bombeamento. A detecção precoce desta ocorrência pode ajudar os operadores a providenciar medidas adequadas, tais como: controle manual ou ajustes apropriados no MPC de modo a compensar esse distúrbio.

Ocorrência 2: Análise da Condição F_2

Na condição F_2 , as restrições impostas nas variáveis controladas, que representam a composição do metanol no topo e no fundo, foram de $\pm 0,5$, mantendo-se as referências em 1 e 0,8, respectivamente. Observa-se, como já era esperado, que as respectivas variáveis controladas, mantendo-se as restrições nas variáveis manipuladas em $\pm 0,2$, não alcançaram as referências pré-estabelecidas, como ilustrado na Figura 5.11. Observa-se ainda, na Figura 5.11, que as variáveis manipuladas permanecem nos limites pré-estabelecidos, no entanto, ocorreu um pico no instante inicial e seus respectivos valores médio sofreram alterações. Esta

nova condição causou saturação nas saídas, já que as referências estabelecidas foram inalcançadas.

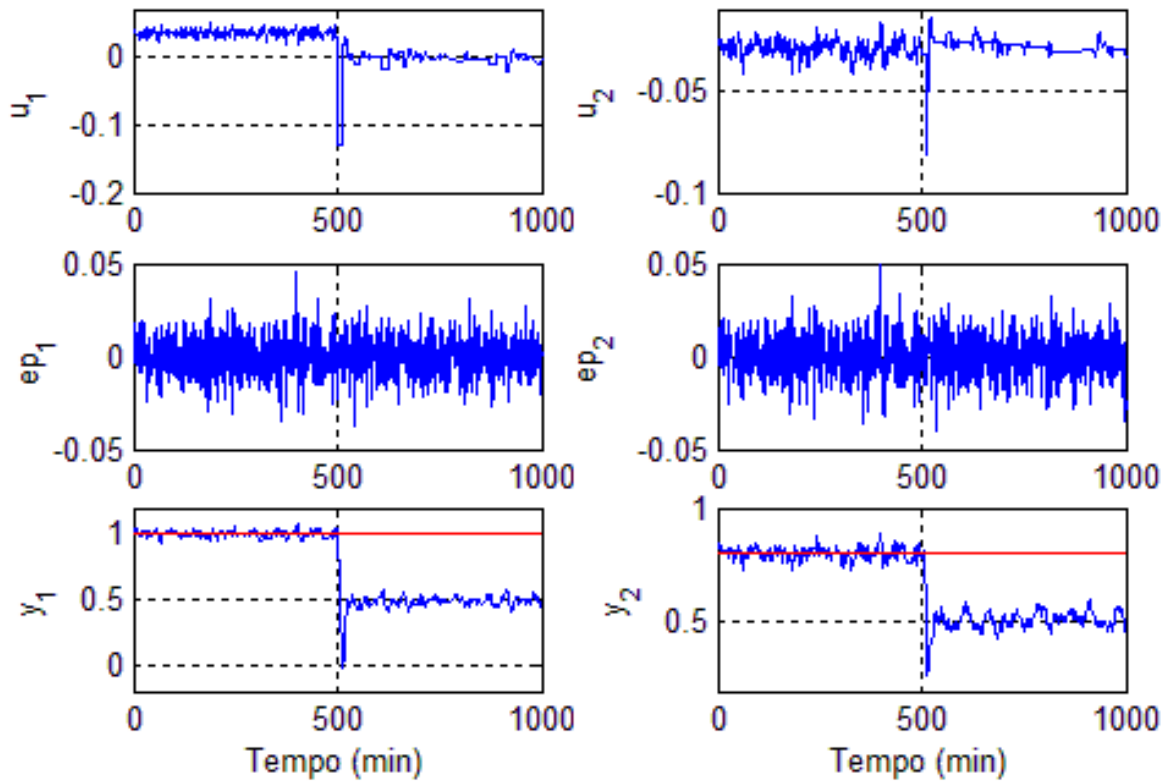


Figura 5.11 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência F_2 no processo Wood-Berry

A Figura 5.12 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_2 . Observa-se que ambas as métricas aqui aplicadas indicaram a ocorrência da alteração da nova condição, pela ultrapassagem dos limites pré-estabelecidos de forma consistente e permanente.

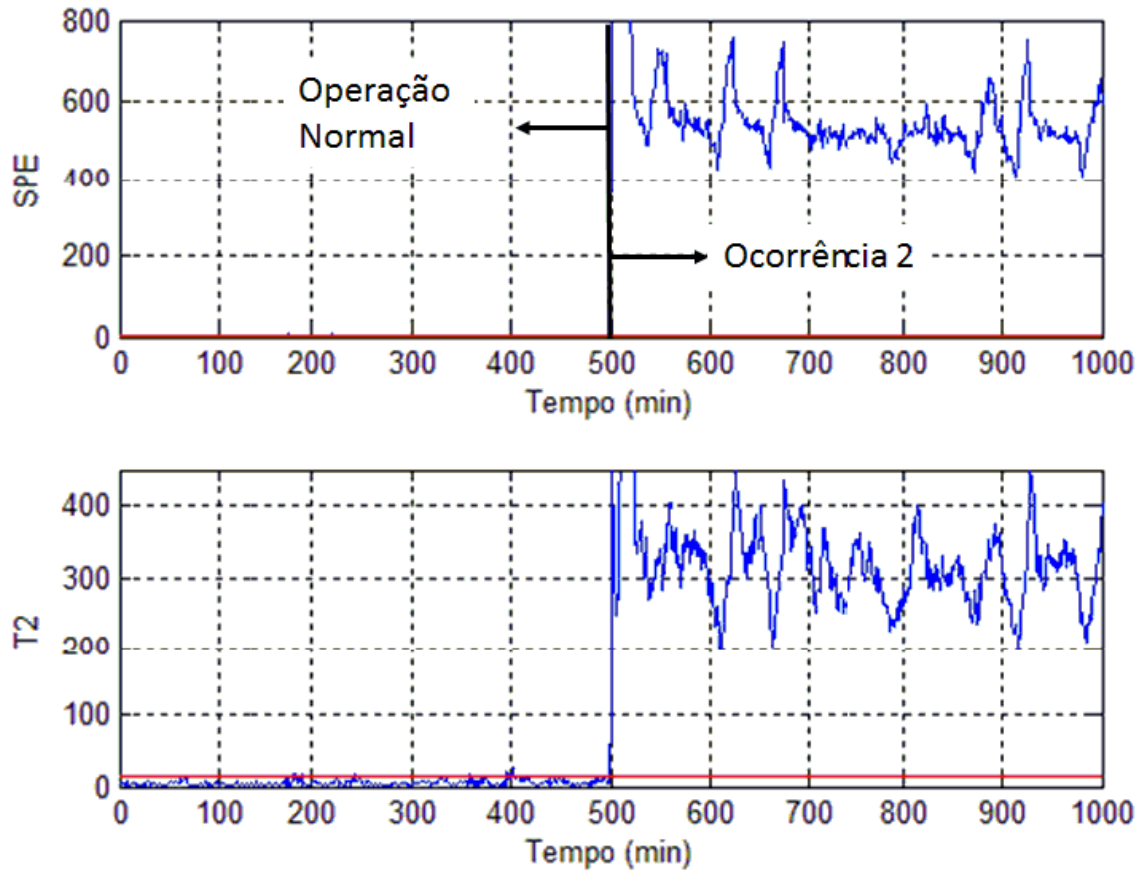


Figura 5.12 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência F_2 no processo Wood-Berry

A Figura 5.13 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para este caso estudado. Observa-se que todas as métricas aqui aplicadas também indicaram a ocorrência da alteração da nova condição, pela ultrapassagem dos limites pré-estabelecidos e também de forma consistente e permanente. Pode-se perceber que a permanência dos valores das estatísticas acima dos limites pré-estabelecidos é apresentada nos detalhes da aproximação dos gráficos, representados na Figura 5.13. Assim, conclui-se que, para esta ocorrência, as estatísticas de monitoramento utilizando o DPCA e o DICA mostraram-se equivalentes na eficiência desta detecção.

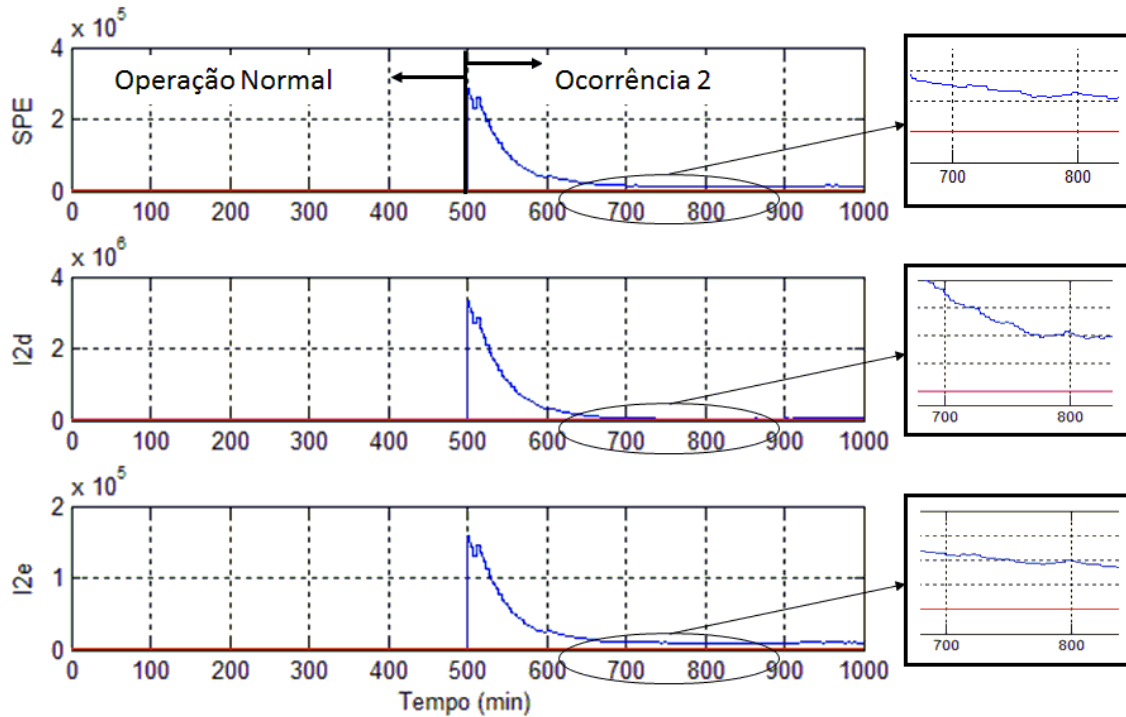


Figura 5.13 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_2 no processo Wood-Berry

Vale salientar que esta alteração na condição de operação representa mau ajuste nas restrições do controlador e a sua detecção requer ajustes nestes parâmetros.

Ocorrência 3: Análise da Condição F_3

O aumento do ganho estático na função de transferência correspondente ao elemento $g_{11}(s)$ da matriz de transferência $G(s)$, que representa o modelo do processo, corresponde a condição F_3 . Este aumento foi de 110%, sendo o valor no *benchmark* de 12,8 e na nova condição de 26,88. Observa-se na Figura 5.14 que, devido a alteração do ganho do processo e a não atualização deste pelo controlador, levou a mudanças nos erros de predição, nas variáveis manipuladas e nos tempos em que as variáveis controladas alcançaram suas respectivas referências.

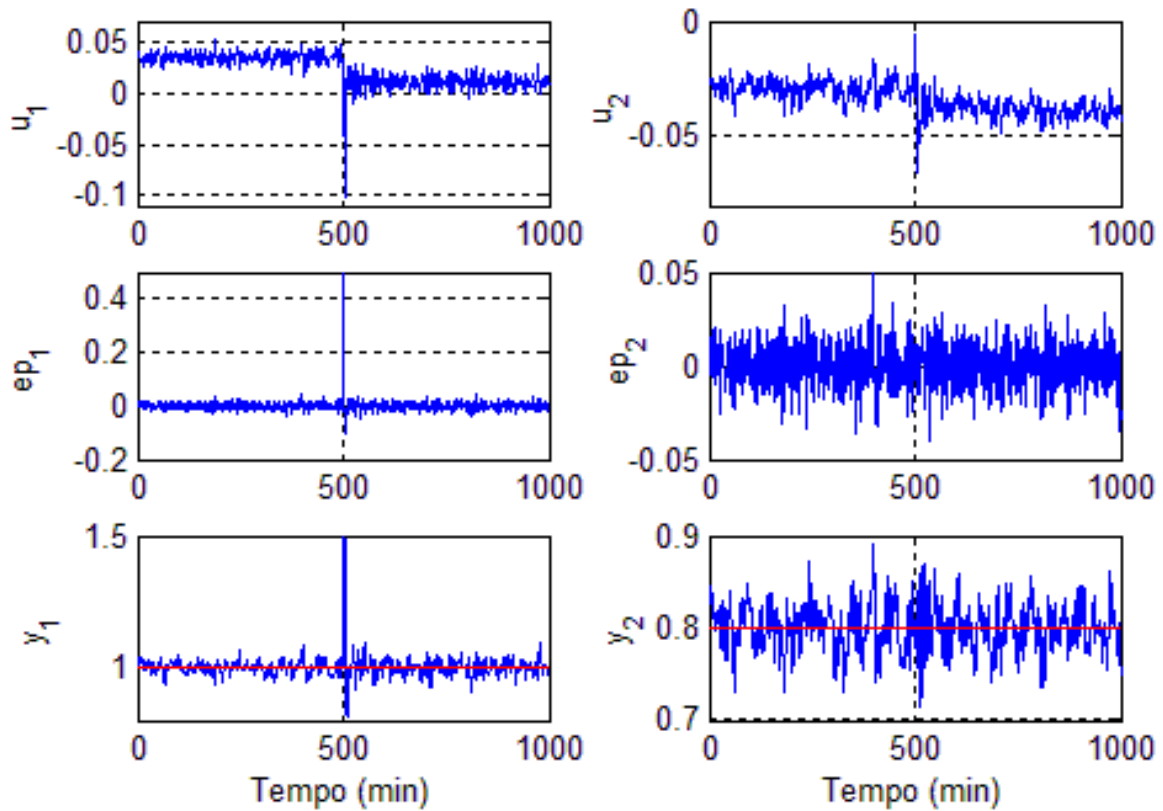


Figura 5.14 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência F_3 no processo Wood-Berry

A Figura 5.15 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_3 . Observa-se que, ambas as métricas, aqui aplicadas, indicaram a ocorrência da alteração da nova condição, pela ultrapassagem dos limites de referência pré-estabelecidos. Embora a estatística T^2 tenha se mostrado eficiente devido as constantes violações dos limites, a estatística SPE mostrou-se mais eficiente e consistente, devido a permanência de seus valores acima destes limites.

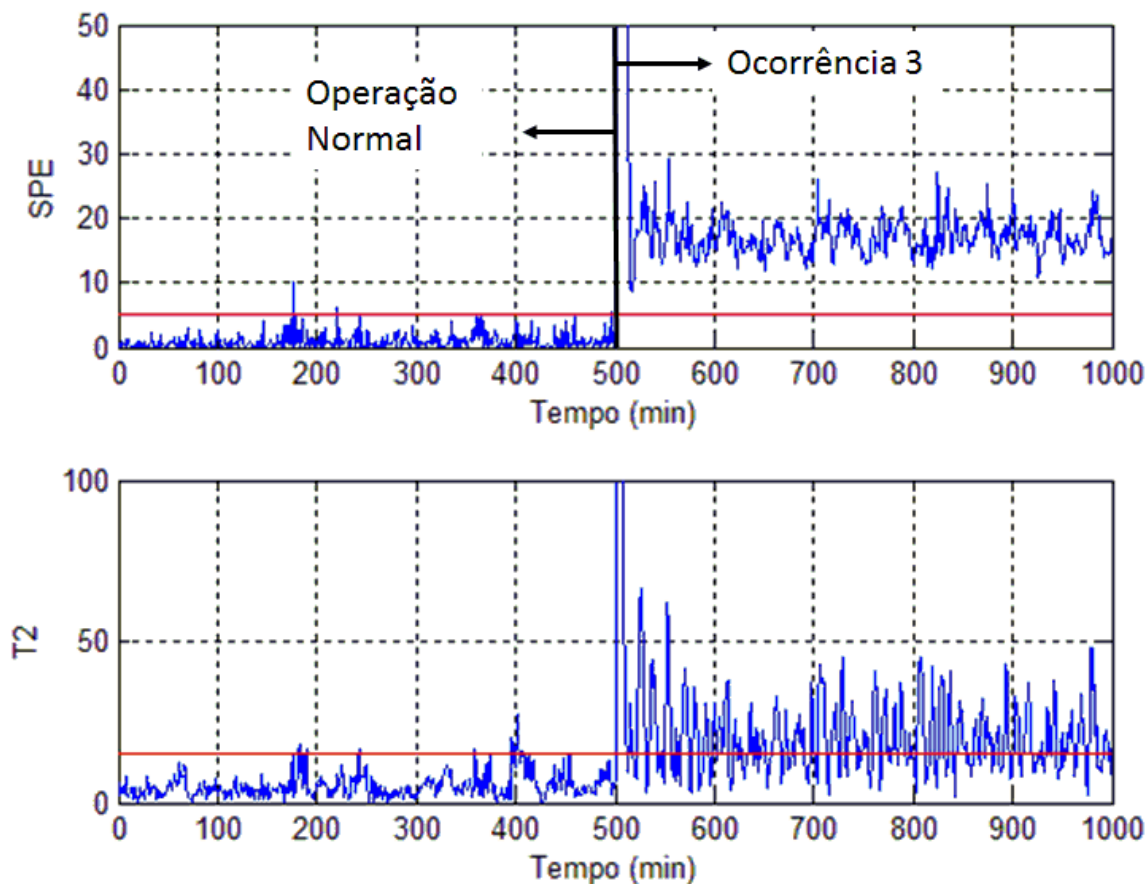


Figura 5.15 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência F_3 no processo Wood-Berry

A Figura 5.16 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para este caso. Observa-se que todas as métricas aqui aplicadas também indicaram a ocorrência da alteração da nova condição, pela ultrapassagem dos limites pré-estabelecidos de forma consistente e permanente. Neste caso, também pode-se perceber a permanência dos valores das estatísticas acima dos limites, apresentada nos detalhes da aproximação dos gráficos, representados na Figura 5.16.

Observa-se ainda que a ferramenta que utiliza a técnica DICA mostrou-se mais consistente na detecção desta ocorrência devido a permanência dos valores das três estatísticas acima dos limites de referência. Embora as estatísticas de monitoramento utilizando o DPCA sejam suficientes para detectar esta ocorrência.

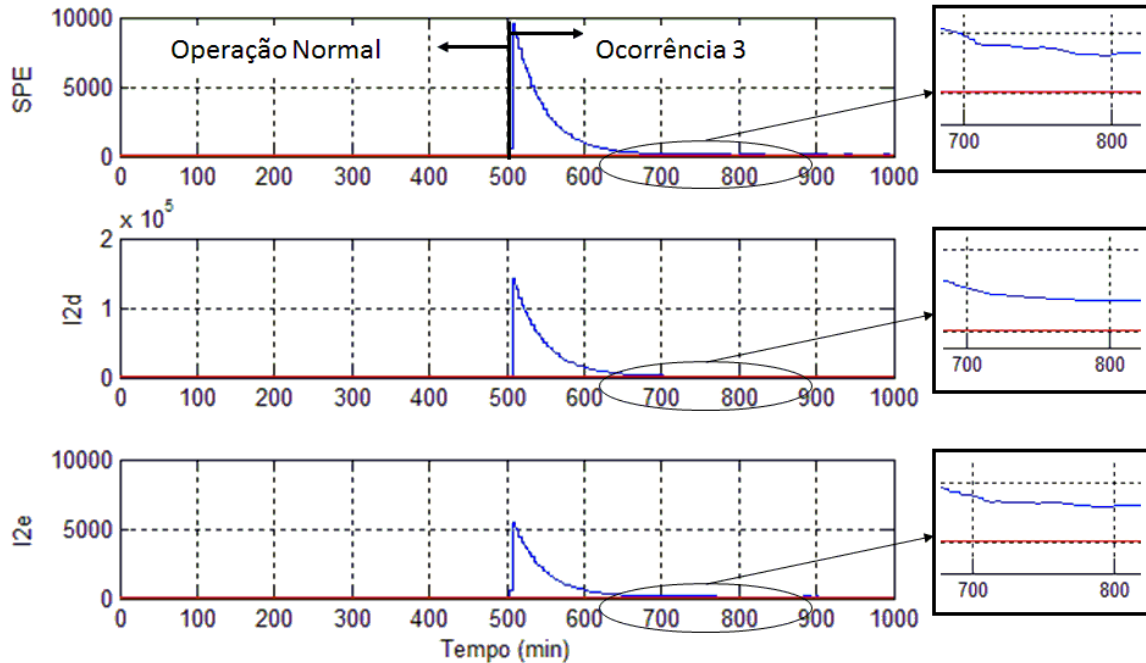


Figura 5.16 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_3 no processo Wood-Berry

Esta nova condição representa uma incompatibilidade entre o modelo utilizado pelo controlador e o modelo do processo. Isto exige uma re-sintonia do controlador, para não se perder o desempenho desejado.

Ocorrência 4: Análise da Condição F_4

Por fim, na condição F_4 , houve uma mudança no horizonte de controle do controlador preditivo. Seu valor foi alterado de 1, valor estabelecido no *benchmark*, para 2. Observa-se que houve alterações nos valores das variáveis manipuladas e, por consequência, nas variáveis controladas, como ilustrado na Figura 5.17. Isto já era esperado, uma vez que, no *benchmark*, com horizonte de controle de 1, calculam-se as ações de controle para um único instante. Enquanto que, para a nova condição, calculam-se as ações de controle para uma sequência de dois instantes. Deve-se observar que, em ambos os casos, pretende-se alcançar os valores de referência das variáveis controladas. Com relação ao erro de predição, observa-se, na mesma figura, que não houve alterações significativas, uma vez que este depende essencialmente de erros de modelagem.

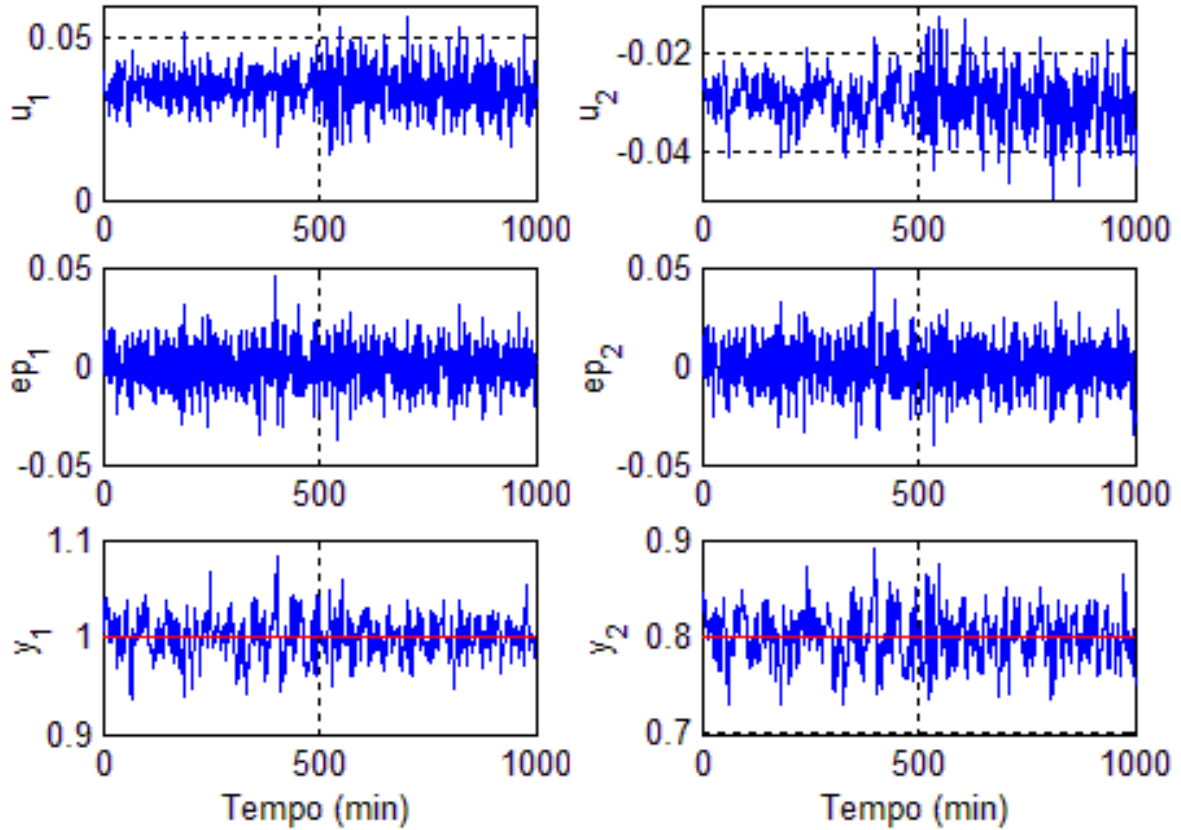


Figura 5.17 - Comportamento das variáveis monitoradas para a ocorrência F_4 no processo Wood-Berry

A Figura 5.18 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_4 . De acordo com os gráficos obtidos, observa-se que a consistência das violações é o que confirma a detecção da ocorrência. Observa-se também que, para esta condição, apenas a métrica SPE foi sensível e indicou a ocorrência da alteração da nova condição.

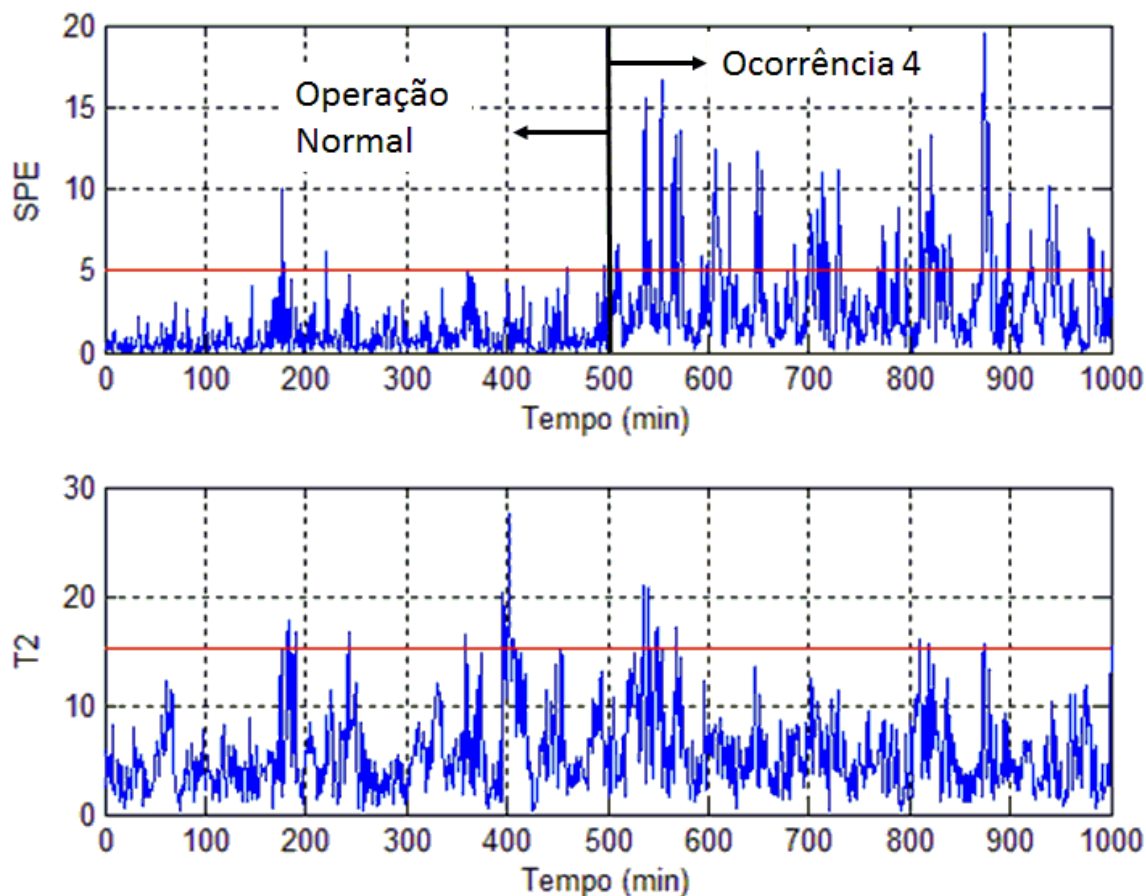


Figura 5.18 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para a ocorrência F_4 no processo Wood-Berry

A Figura 5.19 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para o caso estudado na condição F_4 . Observa-se que, para esta condição, todas as métricas foram sensíveis e indicaram, de forma consistente e permanente, a ocorrência da alteração da nova condição.

Observa-se ainda que, mesmo sendo esta uma condição que não afeta fortemente o desempenho do controlador, a ferramenta que utiliza a técnica DICA mostrou-se consistente na detecção desta ocorrência e mais eficiente quando comparado ao monitoramento utilizando DPCA, devido a permanência dos valores das três estatísticas acima dos limites de referência.

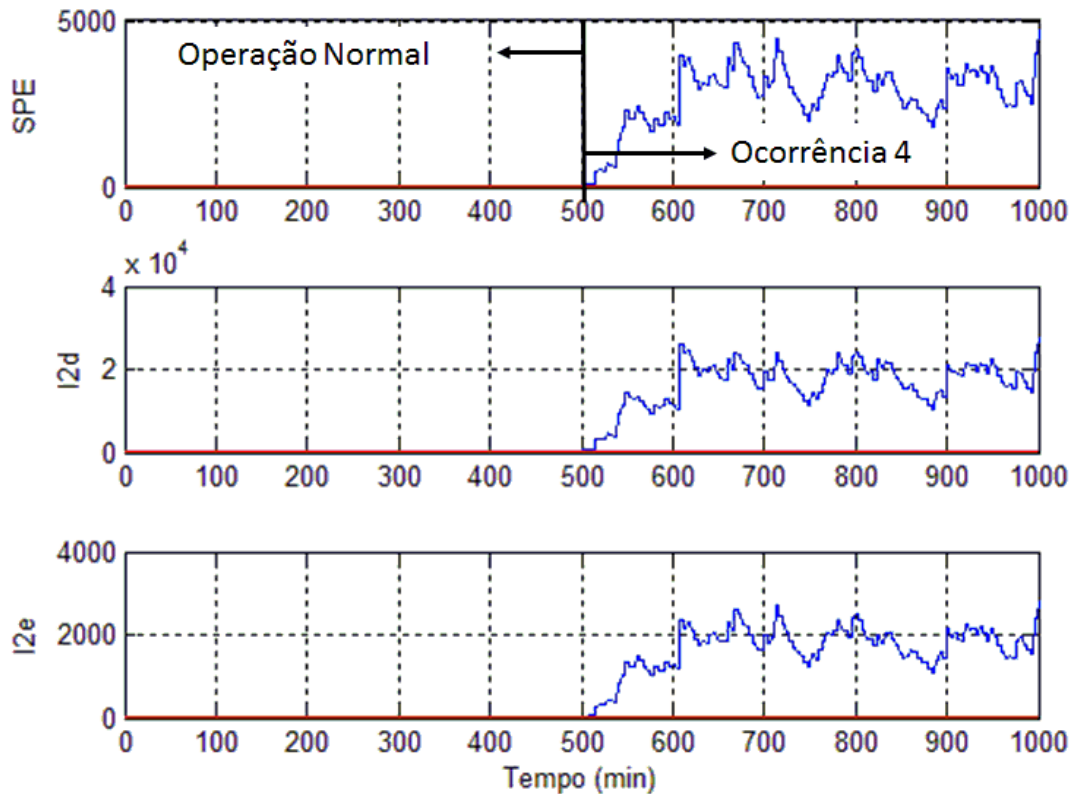


Figura 5.19 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_4 no processo Wood-Berry

Esta mudança de condição representa um mau ajuste nos parâmetros de sintonia do controlador, o que exige uma re-sintonia destes.

5.2.2. Aplicação no processo FCC

Seguindo o mesmo raciocínio do processo Wood-Berry, aplicaram-se as técnicas PCA e ICA ao processo FCC. Este é um processo altamente complexo e não linear e, por isso, tem como objetivo demonstrar a efetividade da ferramenta de monitoramento, e os conceitos teóricos apresentados, em um ambiente mais realístico.

A. Geração do modelo de referência (*benchmark*)

Similar ao que se fez no processo Wood-Berry, para gerar os modelos de referência, usando-se o DPCA e DICA, simulou-se o sistema em malha fechada com uma janela de

1000 minutos, usando-se a estratégia de controle MPC e considerando-se as condições de ajustes do controlador descritas no Capítulo 03, para o processo FCC. Estas são as condições consideradas normais do sistema de controle. Além disso, a variabilidade dos dados deu-se perturbando as variáveis R_{tf} e T_{fp} em torno do seu valor de operação nominal. Estas variáveis correspondem, respectivamente, a taxa de fluxo de alimentação total dos óleos, dado em m^3/d , e a temperatura de alimentação na entrada do “riser”, dados em $^{\circ}C$. Em seguida, os dados do processo foram coletados, com um tempo de amostragem de 1 minuto. As respostas das variáveis manipuladas, dos erros de predição e das variáveis controladas são apresentadas na Figura 5.20, Figura 5.21 e Figura 5.22, a seguir:

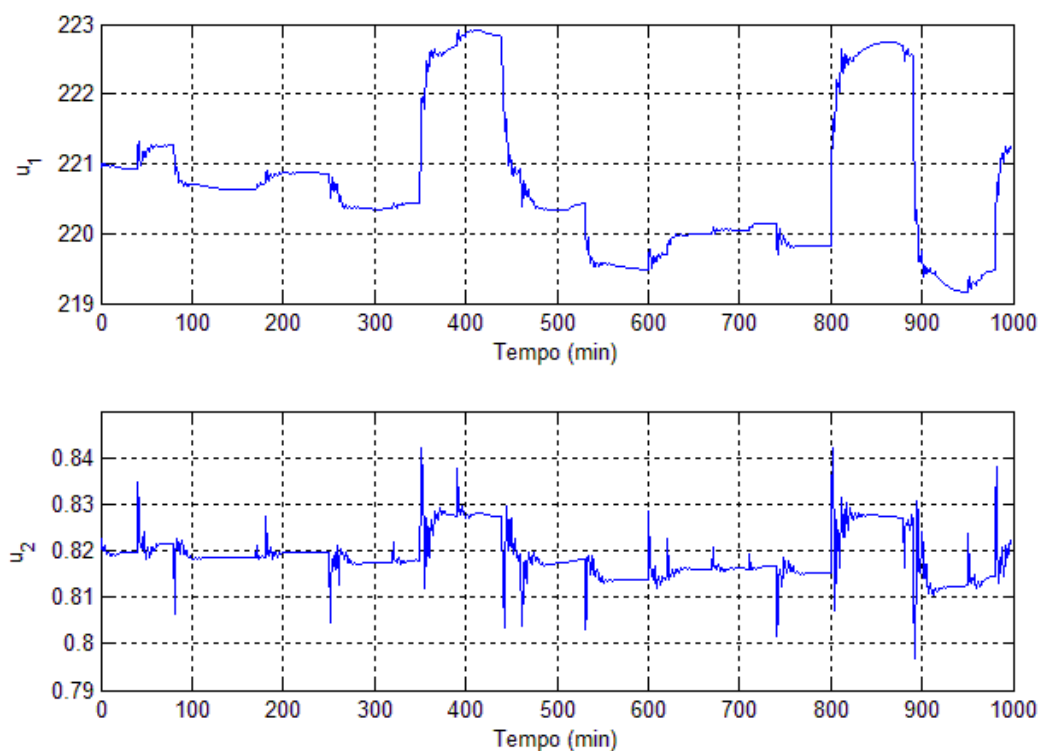


Figura 5.20 - Dados das variáveis manipuladas para a unidade FCC

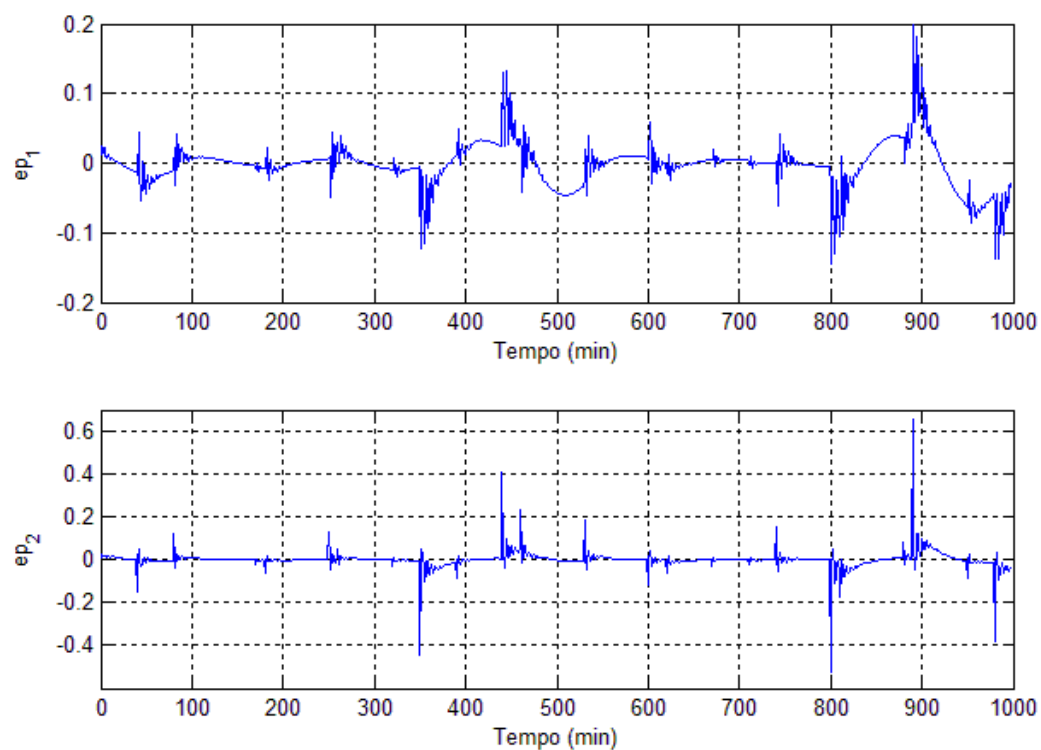


Figura 5.21 - Dados dos erros de predição para a unidade FCC

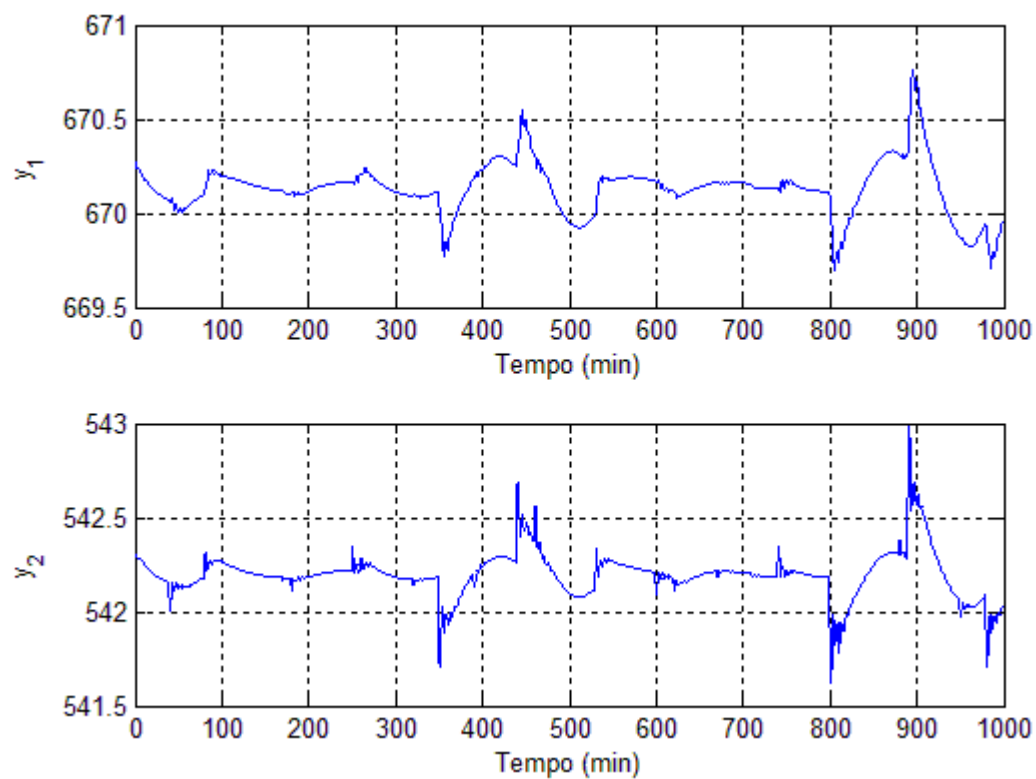


Figura 5.22 - Dados das variáveis controladas para a unidade FCC

Este conjunto de dados foi organizado na forma matricial, com o número de medições defasadas de uma amostragem, ou seja, $l = 1$, conforme equação (5.2). O resultado é uma matriz de dados com 1000 linhas e 12 colunas. Em seguida, normalizaram-se os dados, por meio da equação (4.4).

Aplicou-se a técnica DPCA, seguindo as mesmas etapas da aplicação no processo Wood-Berry. A Tabela 5.12 e a Tabela 5.13 apresentam os resultados encontrados dos autovalores e dos respectivos autovetores associados:

Tabela 5.12 - Autovalores de cada componente principal para a unidade FCC

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}
5,9491	3,6947	0,8677	0,8115	0,3176	0,1861	0,0972	0,0543	0,0194	0,0019	0,0003	0,0001

Tabela 5.13 - Autovetores de cada componente principal para a unidade FCC

λ_1	λ_2	λ_3	λ_4	λ_5	λ_6	λ_7	λ_8	λ_9	λ_{10}	λ_{11}	λ_{12}
-0,0375	0,5003	-0,0421	-0,1005	-0,4085	0,1042	-0,0923	-0,0423	0,2429	-0,1610	-0,1394	-0,6664
-0,0135	0,4880	0,0710	0,2335	0,3059	0,2229	0,2798	0,6465	-0,2349	0,0615	-0,0597	0,0070
-0,3780	0,0585	-0,0240	0,0630	0,3057	0,6645	-0,4024	-0,3223	-0,1297	-0,1007	-0,1355	0,0554
-0,2054	-0,0383	0,8951	0,2281	-0,1251	-0,0523	-0,0518	0,0239	0,1362	-0,2194	0,1131	0,0449
-0,3966	0,0109	-0,1659	0,1981	0,0590	0,0711	0,2061	-0,0731	0,2695	0,3001	0,7279	-0,1643
-0,3931	-0,0859	0,1573	-0,0622	-0,2681	-0,0777	0,0972	-0,0561	-0,3755	0,6717	-0,3313	-0,1304
-0,0554	0,4921	-0,0469	-0,1736	-0,4220	0,0356	-0,1889	-0,0012	0,1218	0,1504	0,1281	0,6735
-0,0517	0,4748	0,1280	-0,2053	0,4053	-0,4106	0,1941	-0,5122	-0,2588	-0,0844	0,0778	-0,0151
-0,3784	0,0360	-0,1769	0,1144	0,1700	-0,5393	-0,6164	0,3216	0,0042	-0,0632	-0,0215	-0,0601
-0,2404	-0,1205	0,1443	-0,8306	0,2271	0,0953	0,0799	0,2901	0,2551	-0,0081	0,0124	-0,0223
-0,3898	0,0023	-0,1795	0,2277	0,0579	-0,1194	0,4191	-0,0969	0,4867	-0,1584	-0,5030	0,2155
-0,3780	-0,1256	-0,1904	-0,0958	-0,3590	0,0051	0,2475	0,0893	-0,5031	-0,5585	0,1739	0,0497

Os autovalores estão dispostos em ordem decrescente e, devido a normalização dos dados, cada autovalor expressa uma porcentagem da variância total dos dados. Assim, calcularam-se as variâncias em porcentagem de cada componente principal, por meio da

equação (4.11), e as variâncias percentuais acumuladas, por meio da equação (4.12). Estes resultados são mostrados na Figura 5.23:

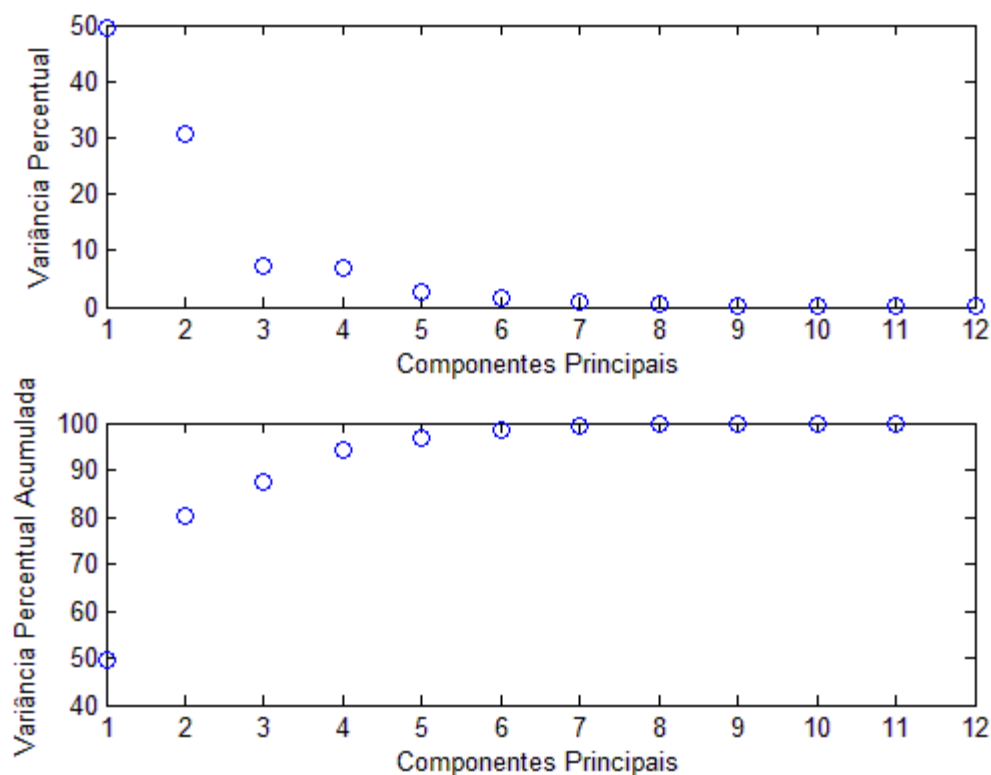


Figura 5.23 - Variância percentual e variância percentual acumulada das componentes principais para a unidade FCC

Na análise destes resultados, observa-se que mais de 90% da variância total é representada apenas pelas 4 primeiras componentes principais. Assim, percebe-se que as 4 primeiras componentes principais podem representar todas as variáveis originais com perda de informação desprezível. E ainda, estas podem ser calculadas apenas com os autovetores associados aos 4 primeiros autovalores, de acordo com a equação (5.3). Em consequência, calculou-se a matriz dos dados estimada $\hat{Z}$, por meio da equação (5.4), e a matriz residual E , por meio da equação (5.5).

Ainda dentro do modelo utilizando a técnica PCA, os limites das estatísticas foram estabelecidos. Dado um nível de significância de 0,01 ou 1%, valor este apropriado para detecção de falhas de acordo com Chiang (2001), tem-se os seguintes resultados:

$$T_{0,01}^2 = \frac{4(1000 - 1)(1000 + 1)}{1000(1000 - 4)} F_{0,01}(4, 1000 - 4) \quad (5.26)$$

$$T_{0,01}^2 = 13,4136 \quad (5.27)$$

$$SPE_{0,01} = 0,6770 \left[\frac{0,1877 * c_{0,01} \sqrt{2 * 0,1483}}{0,6770} + 1 + \frac{0,1483 * 0,1877(0,1877 - 1)}{0,6770^2} \right]^{1/0,1877} \quad (5.28)$$

$$SPE_{0,01} = 2,7606 \quad (5.29)$$

Aplicou-se também a técnica ICA. A Tabela 5.14,

Tabela 5.15 e Tabela 5.16 apresentam os resultados encontrados pelo algoritmo FastICA da matriz de branqueamento, da matriz de mistura e da matriz de separação, respectivamente.

Tabela 5.14 - Matriz de branqueamento Q para a unidade FCC

55,66	-0,65	-4,10	-3,17	11,52	9,45	-56,03	0,99	5,45	1,82	-16,65	-3,17
-6,53	-3,26	-7,25	5,65	39,22	-17,20	6,26	3,75	-1,15	0,76	-26,32	8,29
2,70	-1,41	2,25	4,20	-5,77	-13,57	-2,59	1,82	1,24	-0,03	3,13	11,07
-1,59	1,20	1,29	-0,92	-1,91	2,48	-0,68	1,75	0,31	-1,83	-3,74	3,24
0,21	-2,54	1,01	-0,10	0,46	0,36	-0,04	2,11	-1,78	-1,13	0,68	-0,22
-0,40	1,29	-1,36	-0,26	0,52	0,38	-0,67	0,44	-1,76	0,27	1,10	1,03
0,26	0,58	1,67	-0,11	0,18	-0,20	0,09	-1,05	-1,35	0,25	-0,29	-0,01
0,74	-0,51	-0,58	0,19	-0,11	0,46	0,77	-0,80	-0,28	-0,42	-0,11	0,68
-0,13	0,27	0,06	0,57	0,14	0,00	-0,20	-0,16	0,06	-0,82	0,17	-0,16
-0,01	0,00	0,07	-0,82	0,23	-0,18	-0,03	-0,20	0,23	-0,43	0,25	0,13
-0,26	-0,25	0,00	0,04	0,02	0,08	-0,25	-0,24	0,01	0,09	0,03	0,09

0,05	0,03	0,15	0,08	0,16	0,15	0,05	0,05	0,15	0,09	0,16	0,15
------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------	------

Tabela 5.15 - Matriz de mistura A para a unidade FCC

-0,03	0,09	0,02	0,03	0,01	-0,10	-0,02	0,11	-0,54	0,17	-0,22	-0,77
0,08	0,08	0,23	0,01	-0,14	0,07	0,39	0,19	-0,52	0,13	-0,18	-0,64
-0,27	0,11	-0,07	-0,45	-0,27	0,34	0,00	-0,01	0,23	-0,07	0,28	-0,61
-0,06	0,87	0,09	-0,13	-0,15	0,22	0,04	0,00	0,15	0,18	0,29	-0,03
-0,10	0,06	-0,12	-0,36	-0,05	0,42	0,03	-0,19	0,26	-0,06	0,41	-0,62
-0,29	0,33	-0,21	-0,31	0,01	0,42	-0,14	-0,25	0,25	0,07	0,44	-0,38
-0,08	0,10	-0,02	0,03	0,03	-0,05	-0,07	0,11	-0,53	0,17	-0,23	-0,77
-0,07	0,09	0,11	0,30	-0,29	0,24	0,01	0,17	-0,51	0,13	-0,17	-0,64
-0,09	0,06	-0,28	-0,23	0,05	0,54	-0,01	0,06	0,25	-0,07	0,35	-0,61
-0,73	0,03	0,01	-0,05	-0,03	0,41	-0,44	-0,07	0,19	0,18	0,17	-0,03
-0,05	0,05	-0,11	-0,29	-0,02	0,44	0,05	-0,23	0,28	-0,04	0,43	-0,62
-0,27	0,04	-0,28	-0,38	0,10	0,37	-0,16	-0,33	0,27	0,09	0,44	-0,38

Tabela 5.16 - Matriz de separação W para a unidade FCC

-10,82	-2,36	-1,98	4,09	11,89	-12,17	10,95	2,22	-0,89	-0,90	-5,72	6,40
-5,22	0,16	0,37	-0,03	-2,65	3,56	5,83	-0,87	-0,64	-0,43	2,65	-3,11
3,21	-0,63	-3,37	1,90	14,44	-5,59	-2,58	-0,11	-1,05	2,05	-6,71	-0,29
13,07	0,43	1,12	-3,07	-14,75	9,51	-13,06	-0,44	1,57	0,25	9,75	-5,47
0,32	0,92	-2,76	-0,54	3,16	1,96	0,96	-2,37	0,93	1,10	-0,86	-2,95
-23,88	0,28	-1,65	2,37	8,14	-7,13	22,57	1,27	-1,53	-0,15	-2,48	2,97
2,67	3,85	3,08	-3,37	-18,52	10,20	-3,96	-2,37	0,78	-0,63	11,41	-4,28
15,90	-0,57	-0,89	0,90	5,81	-2,79	-15,70	0,27	3,82	1,02	-7,95	1,44

-9,03	0,10	4,45	0,01	-19,03	-0,02	9,98	-2,16	-0,23	-0,04	16,78	-1,47
-4,04	0,19	2,17	3,40	-9,45	-10,32	4,07	0,77	0,29	0,04	6,38	9,41
43,47	-0,98	-4,30	-1,27	13,64	4,08	-44,33	1,78	4,18	1,33	-16,06	0,24
-2,85	0,15	-1,34	0,78	6,58	-2,02	1,49	0,85	-0,28	-0,10	-5,98	2,04

Calcularam-se também as normas euclidianas das linhas da matriz W para organizá-la em ordem decrescente. Apresenta-se o resultado das normas na tabela abaixo:

Tabela 5.17 - Normas euclidianas das linhas da matriz de separação para a unidade FCC

Linha 1	Linha 2	Linha 3	Linha 4	Linha 5	Linha 6	Linha 7	Linha 8	Linha 9	Linha 10	Linha 11	Linha 12
25,156	9,953	17,955	28,070	6,386	34,985	25,703	24,971	29,182	19,363	66,022	10,047

De acordo com estes resultados, organizaram-se as linhas de W em ordem decrescente de acordo com o valor de sua norma.

Na análise destes resultados, observa-se que as oito (8) maiores normas correspondem a 85% da soma de todas as normas. Assim, as oito (8) primeiras linhas de W , organizada em ordem decrescente, correspondem à parte dominante. O resultado são duas matrizes reduzidas, W_d correspondente a parte dominante e W_e correspondente a parte excluída, conforme Tabela 5.18 e Tabela 5.19:

Tabela 5.18 - Matriz de separação da parte dominante W_d para a unidade FCC

43,47	-0,98	-4,30	-1,27	13,64	4,08	-44,33	1,78	4,18	1,33	-16,06	0,24
-23,88	0,28	-1,65	2,37	8,14	-7,13	22,57	1,27	-1,53	-0,15	-2,48	2,97
-9,03	0,10	4,45	0,01	-19,03	-0,02	9,98	-2,16	-0,23	-0,04	16,78	-1,47
13,07	0,43	1,12	-3,07	-14,75	9,51	-13,06	-0,44	1,57	0,25	9,75	-5,47
2,67	3,85	3,08	-3,37	-18,52	10,20	-3,96	-2,37	0,78	-0,63	11,41	-4,28
-10,82	-2,36	-1,98	4,09	11,89	-12,17	10,95	2,22	-0,89	-0,90	-5,72	6,40
15,90	-0,57	-0,89	0,90	5,81	-2,79	-15,70	0,27	3,82	1,02	-7,95	1,44
-4,04	0,19	2,17	3,40	-9,45	-10,32	4,07	0,77	0,29	0,04	6,38	9,41

Tabela 5.19 - Matriz de separação da parte excluída W_e para a unidade FCC

3,21	-0,63	-3,37	1,90	14,44	-5,59	-2,58	-0,11	-1,05	2,05	-6,71	-0,29
-2,85	0,15	-1,34	0,78	6,58	-2,02	1,49	0,85	-0,28	-0,10	-5,98	2,04
-5,22	0,16	0,37	-0,03	-2,65	3,56	5,83	-0,87	-0,64	-0,43	2,65	-3,11
0,32	0,92	-2,76	-0,54	3,16	1,96	0,96	-2,37	0,93	1,10	-0,86	-2,95

Da mesma forma, organizaram-se as colunas da matriz de mistura A de acordo com a ordem proposta pelas normas e a separou nas matrizes A_d e A_e . Em consequência disto, tem-se os seguintes resultados:

Tabela 5.20 - Matriz de mistura da parte dominante A_d para a unidade FCC

-0,223	-0,098	-0,537	0,033	-0,022	-0,029	0,108	0,168
-0,181	0,071	-0,519	0,014	0,387	0,082	0,186	0,126
0,282	0,342	0,234	-0,451	-0,001	-0,271	-0,010	-0,073
0,287	0,224	0,146	-0,127	0,036	-0,061	0,004	0,181
0,407	0,423	0,257	-0,361	0,031	-0,104	-0,194	-0,062
0,440	0,420	0,247	-0,314	-0,142	-0,288	-0,246	0,069
-0,228	-0,053	-0,533	0,031	-0,066	-0,076	0,114	0,170
-0,170	0,238	-0,511	0,300	0,005	-0,067	0,168	0,126
0,352	0,539	0,248	-0,229	-0,008	-0,088	0,063	-0,068
0,167	0,409	0,187	-0,047	-0,443	-0,728	-0,067	0,183
0,427	0,440	0,283	-0,289	0,046	-0,053	-0,235	-0,039
0,443	0,369	0,274	-0,378	-0,155	-0,270	-0,326	0,085

Tabela 5.21 - Matriz de mistura da parte excluída A_e para a unidade FCC

0,024	-0,774	0,095	0,009
-------	--------	-------	-------

0,233	-0,635	0,078	-0,145
-0,073	-0,612	0,110	-0,271
0,086	-0,035	0,873	-0,145
-0,116	-0,620	0,064	-0,046
-0,213	-0,382	0,332	0,006
-0,017	-0,773	0,097	0,029
0,108	-0,642	0,087	-0,288
-0,276	-0,610	0,057	0,054
0,014	-0,031	0,035	-0,027
-0,105	-0,620	0,052	-0,020
-0,281	-0,383	0,040	0,105

Finalmente, na construção do *benchmark* utilizando a técnica ICA, os limites das estatísticas de referência foram estabelecidos. Após estimar a função densidade de cada estatística, o limite de controle é o ponto que ocupa 99% da área da função densidade. Assim, tem-se os valores seguintes:

$$I_d^2 = 13,3785 \quad (5.30)$$

$$I_e^2 = 7,4918 \quad (5.31)$$

$$SPE = 12,9492 \quad (5.32)$$

Assim, estando os modelos bem definidos, as ferramentas utilizando o PCA e ICA estão aptas a monitorar o controlador.

B. Detecção de condições anormais de operação

Após definir os modelos de referência e os limites estatísticos de referência estabelecidos, desenvolveram-se os protótipos para o monitoramento do MPC do processo FCC utilizando-se o PCA dinâmico e o ICA dinâmico. Vale ressaltar que a cada nova medição, recalculam-se as estatísticas para o monitoramento on-line.

Em condições de operação consideradas adequadas, com o controlador e processo funcionando como desejado, calcularam-se estas estatísticas, resultando em um monitoramento conforme Figura 5.24 e Figura 5.25:

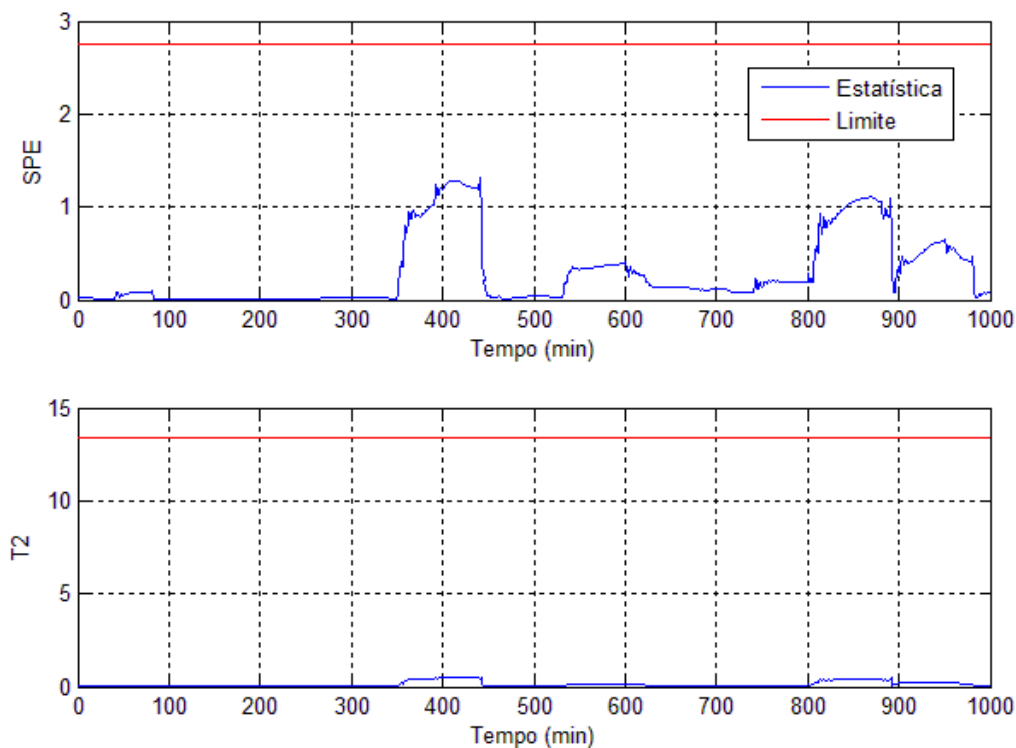


Figura 5.24 – Estatísticas de monitoramento do DPCA em condições de operação adequadas para a unidade FCC

Observa-se que, embora o gráfico de monitoramento da estatística I_d^2 , representado na Figura 5.25, apresente valores que ultrapassem o limite desejado, esporadicamente e em valores pequenos, deve-se salientar que, nestes casos, estas ultrapassagens não correspondem a um mau desempenho do controlador. Isto porque, a indicação de mau desempenho corresponde as ultrapassagens das estatísticas consistentes, ou permanentes, capturadas em intervalos representativos.

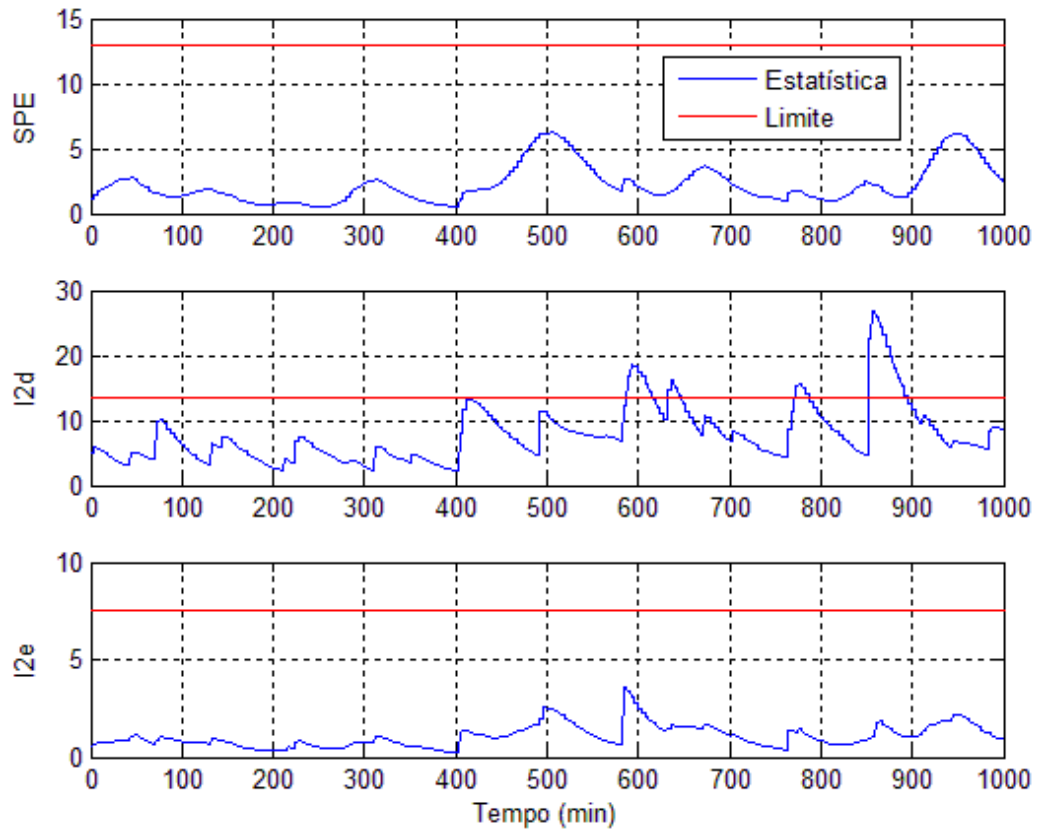


Figura 5.25 - Estatísticas de monitoramento do DICA em condições de operação adequadas para a unidade FCC

Para este processo, quatro condições de operação, consideradas anormais, de acordo com a Figura 1.1, propostas no trabalho de Alghazzawi e Lennox (2009), foram também inseridas no sistema, de acordo com a Tabela 5.22:

Tabela 5.22 - Ocorrências inseridas na unidade FCC

Ocorrência	Condição de Operação	Parâmetro/Variável	Valor/Intervalo
F_1	Perturbação na variável Kcc (Fatores externos)	Kcc	6%
F_2	Controlador mal sintonizado (Fatores internos)	Horizonte de Controle	5

F_3	Mudança nos limites das restrições (Fatores internos)	Restrições da entrada u_1	Máximo 221 Mínimo 220
F_4	Saturação de uma válvula (Fatores externos)	Variável u_1	222

Em seguida, aplicaram-se os métodos de avaliação de desempenho, utilizando-se o DPCA e DICA, propostos neste trabalho, para todas as condições presentes na tabela acima. Estas mudanças de condição de operação foram inseridas a partir do instante correspondente a 500 minutos de operação do processo, com exceção da última ocorrência. Neste último caso, a saturação aconteceu nos períodos em que a variável u_1 ultrapassava o limite de saturação imposto. Como já mencionado, recalculam-se as estatísticas anteriormente citadas, a cada nova medição. Deve-se enfatizar que os limites destas estatísticas, calculados dentro das condições de normalidade, evidentemente, não são recalculados e permanecem constantes.

Os resultados do processo de monitoramento podem ser analisados nas figuras Figura 5.27, Figura 5.30, Figura 5.33 e Figura 5.36, utilizando PCA e Figura 5.28, Figura 5.31, Figura 5.34 e Figura 5.37, utilizando ICA. Além destas, as variáveis monitoradas são desenhadas nas figuras: Figura 5.26; Figura 5.29; Figura 5.32 e Figura 5.35. Deve-se observar que, também nestes casos, há a presença das mudanças de condição de operação que foram inseridas a partir do instante 500 minutos, com exceção da ocorrência F_4 .

Ocorrência 1: Análise da Condição F_1

A mudança F_1 corresponde a uma alteração no valor da variável Kcc. Esta variável corresponde a constante cinética da reação de formação do coque. O valor da variável foi modificado de 4,2 para 4,452, correspondente a uma variação de 6% do valor inicial. Esta perturbação afeta a operação da unidade FCC, e resulta em mais deposição de coque no *riser* e na concentração de coque do catalisador usado. Após a ocorrência da mudança de condição, verifica-se que há uma diminuição na taxa de fluxo total do ar e na quantidade de catalisador

regenerado. Estas consequências, evidentemente, representam a diminuição do valor médio das variáveis manipuladas, conforme ilustrado na Figura 5.26.

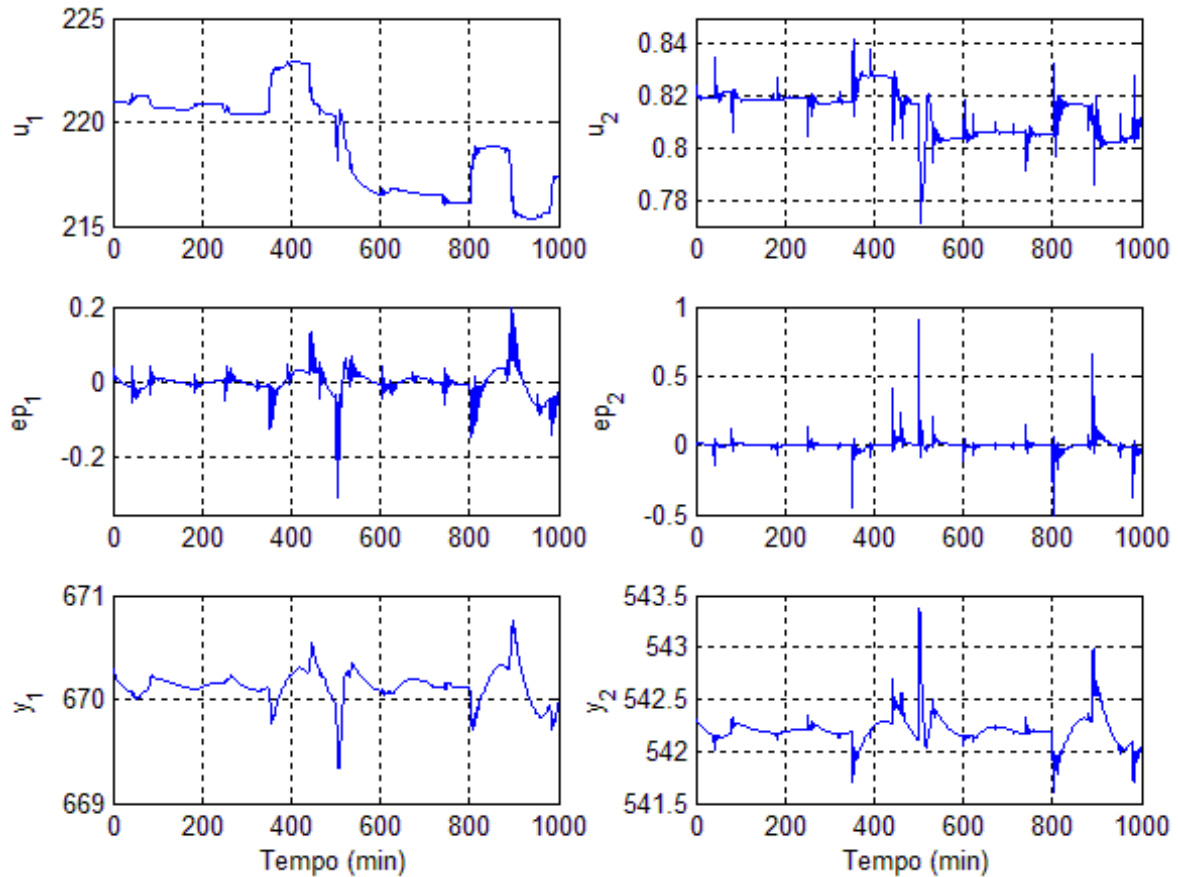


Figura 5.26 – Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência F_1 na unidade FCC

A Figura 5.27 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_1 . Observa-se que houve detecção apenas pela estatística SPE, embora esta detecção tenha ocorrido instantes após a ocorrência da mudança. Isto pode ser justificado, observando que, devido a dinâmica do processo há um intervalo de tempo entre o instante em que Kcc foi modificado e o instante em que o efeito dessa mudança é significativa nas métricas.

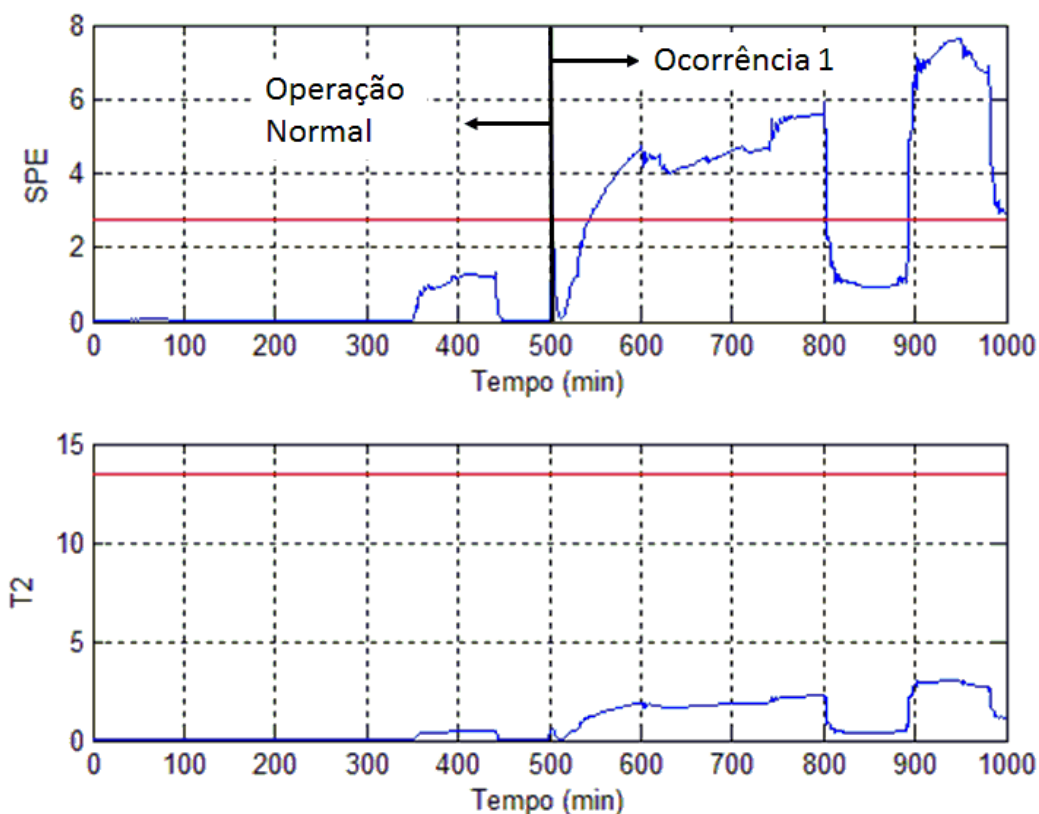


Figura 5.27 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência F_1 na unidade FCC

A Figura 5.28 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para o caso estudado na condição F_1 . Observa-se que houve detecção por todas as três estatísticas, sem atraso na detecção. Isto pode ser justificado, observando que, o efeito dessa mudança é significativo nas métricas. Além disso, a detecção acontece de forma consistente e permanente. Assim, a ferramenta que utiliza a técnica DICA mostrou-se mais eficiente na detecção desta ocorrência. Esta afirmação é comprovada na análise da Figura 5.28 em que as estatísticas de monitoramento atingem altos valores e, após o decaimento, permanecem acima dos limites de referência pré-estabelecidos.

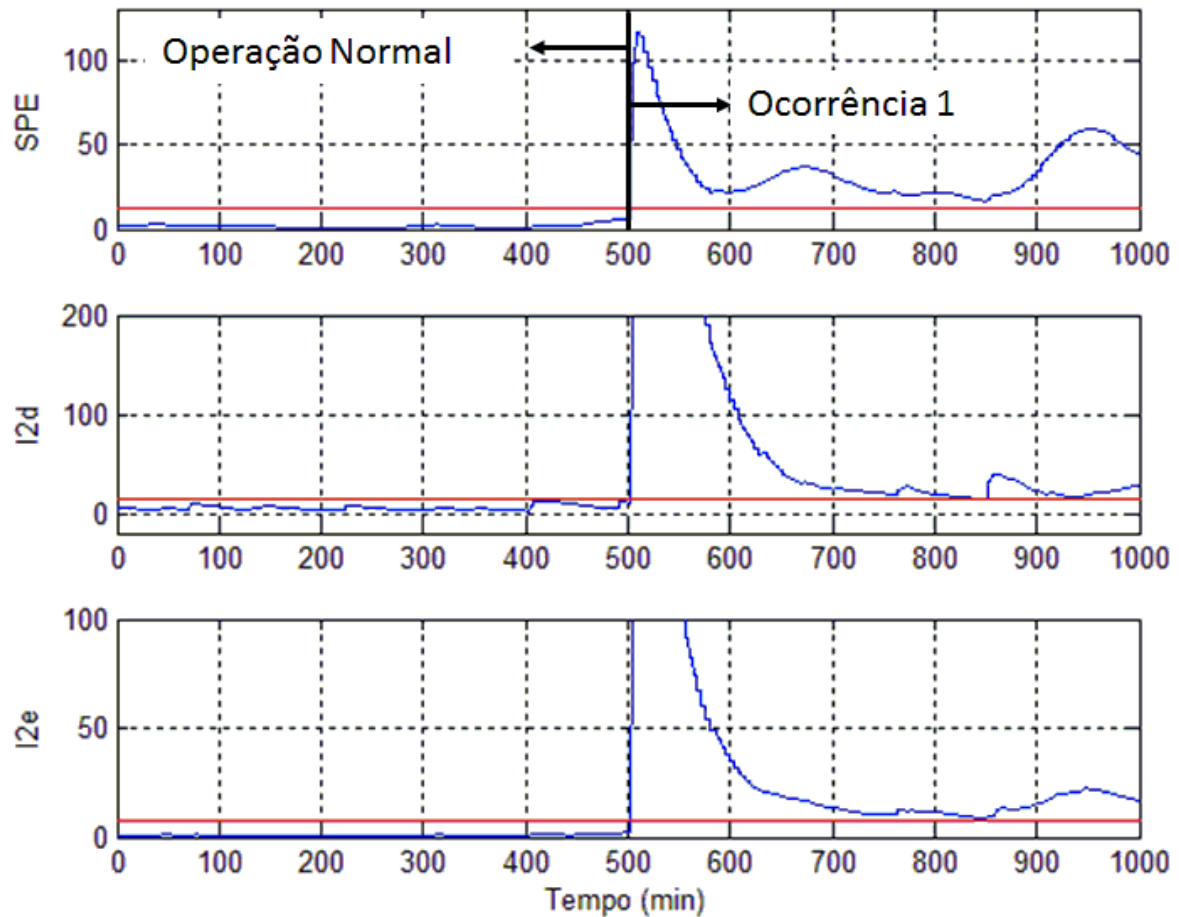


Figura 5.28 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_1 na unidade FCC

Esta alteração na condição de operação do processo representa, por exemplo uma perturbação externa ao processo.

Ocorrência 2: Análise da Condição F_2

Na condição F_2 , houve uma mudança no horizonte de controle do controlador preditivo. Seu valor foi alterado de 2, valor estabelecido no *benchmark*, para 5. Observa-se que houve alterações não significativas nos valores das variáveis manipuladas, como ilustrado na Figura 5.29. Apesar disso, as variáveis controladas permaneceram com seu valor médio praticamente inalterados. Deve-se isso ao fato que a alteração no horizonte de controle não traz consequências significativas no desempenho do controlador.

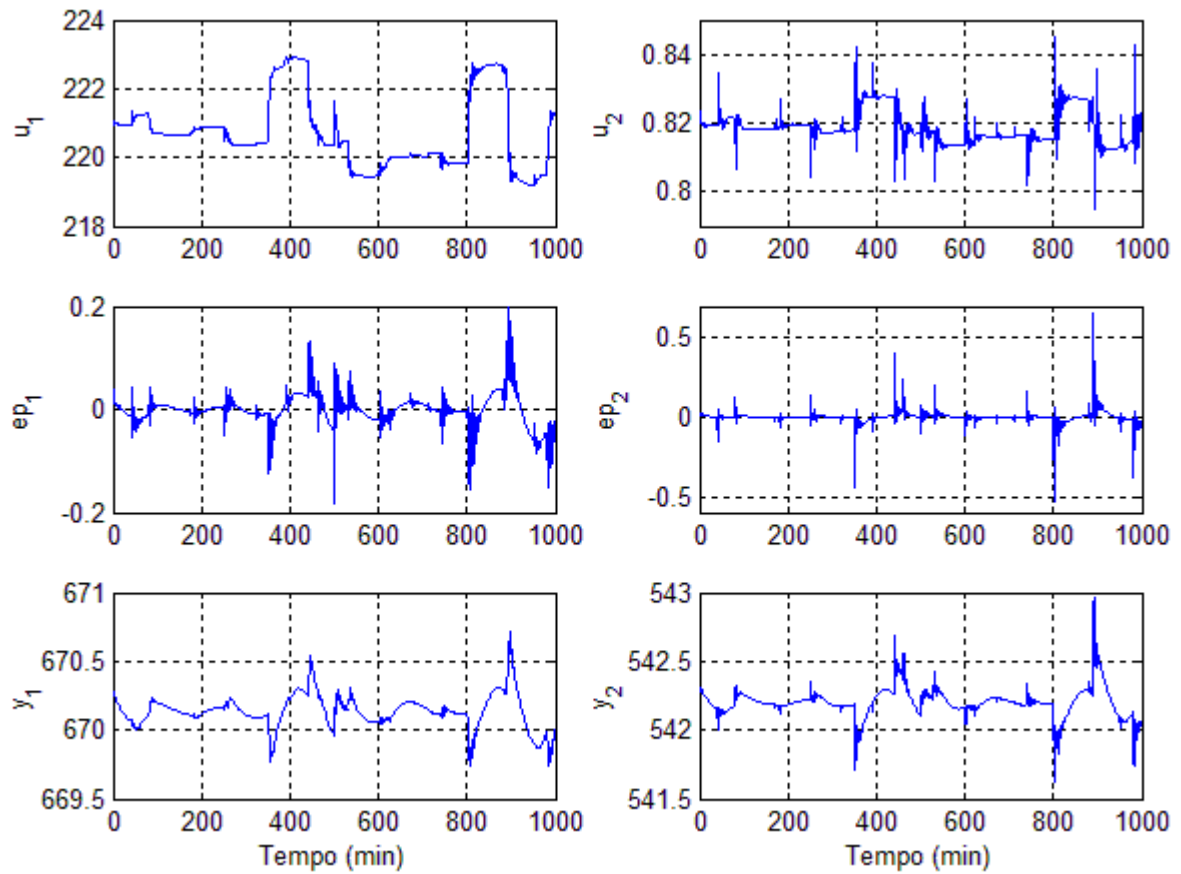


Figura 5.29 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência F_2 na unidade FCC

Estas variações não foram capazes de serem detectadas pelas estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA, embora a métrica SPE tenha sofrido algumas perturbações. Em contrapartida, a estatística T^2 permaneceu praticamente inalterada. Apresentam-se estes resultados na Figura 5.30.

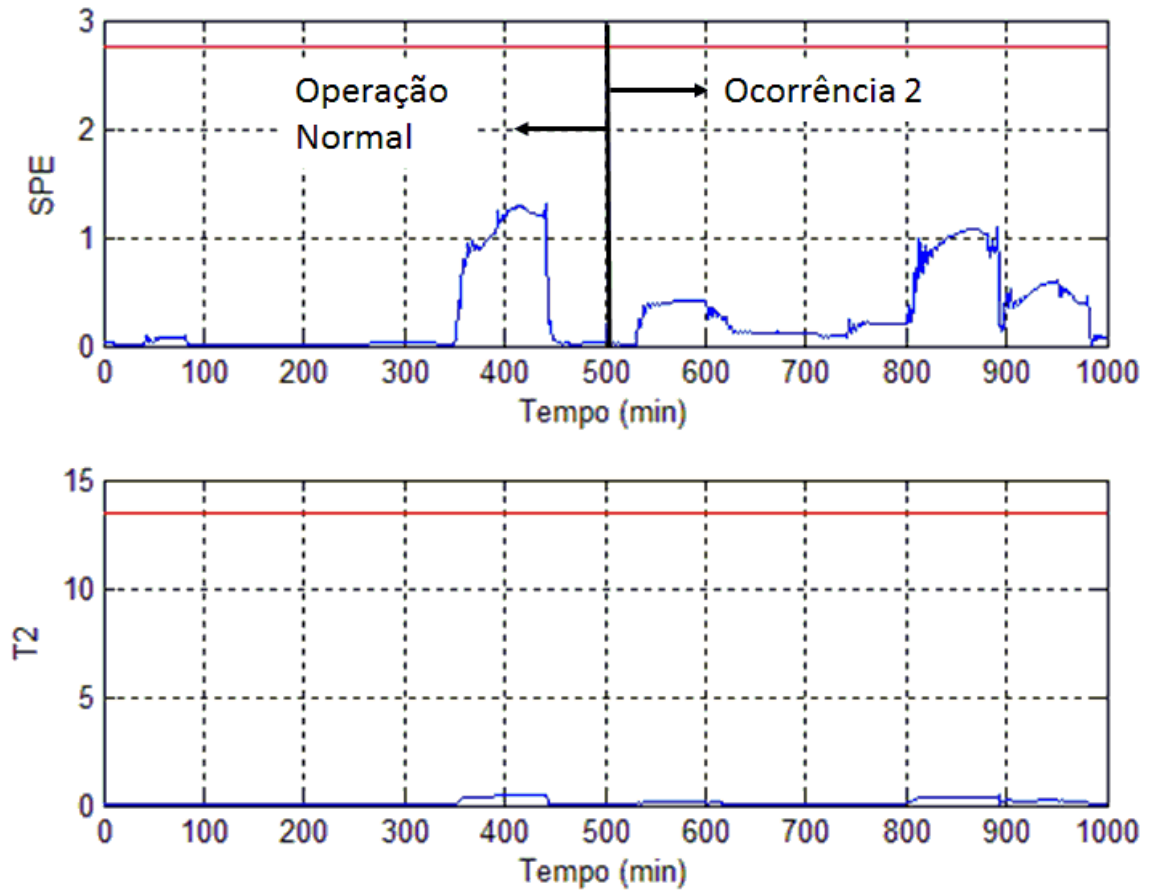


Figura 5.30 – Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência F_2 na unidade FCC

Por meio da Figura 5.31, observa-se que apenas a métrica I_d^2 foi capaz de detectar a ocorrência de forma mais consistente. Deve-se isso ao fato que a mudança no horizonte de controle não traz alterações significativas nas variáveis monitoradas e, como consequência, não afeta fortemente o desempenho do controlador. Entretanto, mesmo tratando-se de uma ocorrência sem grandes deteriorações no desempenho do sistema de controle, a ferramenta que utiliza a técnica DICA foi capaz de detectar, sendo esta mais efetiva para essa ocorrência.

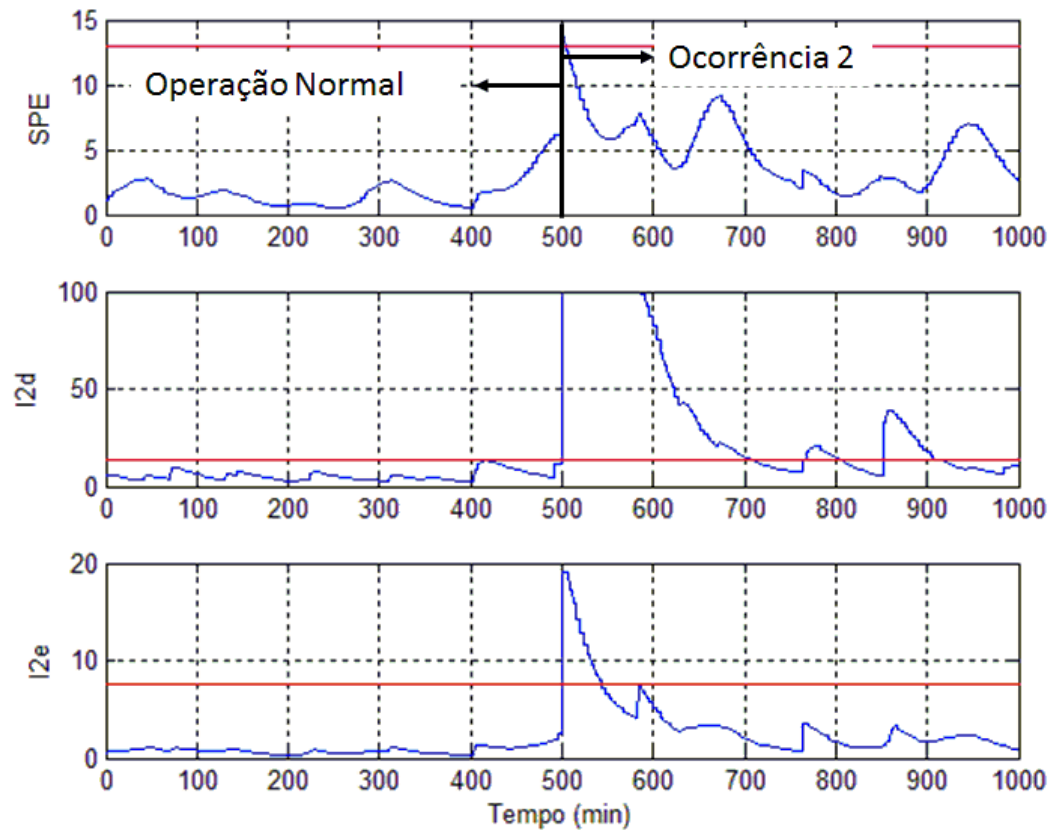


Figura 5.31 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_2 na unidade FCC

Esta mudança de condição pode representar um mau ajuste nos parâmetros de sintonia do controlador. Após a detecção, deve-se avaliar a necessidade de re-sintonia do controlador.

Ocorrência 3: Análise da Condição F_3

Na condição F_3 , as restrições impostas na variável manipulada u_1 , que representa a vazão total de ar que é introduzida no regenerador, foram modificadas para máxima de 221 e mínima de 220. Observa-se, como já era esperado, que o algoritmo de controle do controlador preditivo não violou estas novas restrições impostas, como ilustrado na Figura 5.32. Observa-se ainda, na Figura 5.32, que as variáveis controladas sofreram alterações, como consequência destes limites impostos.

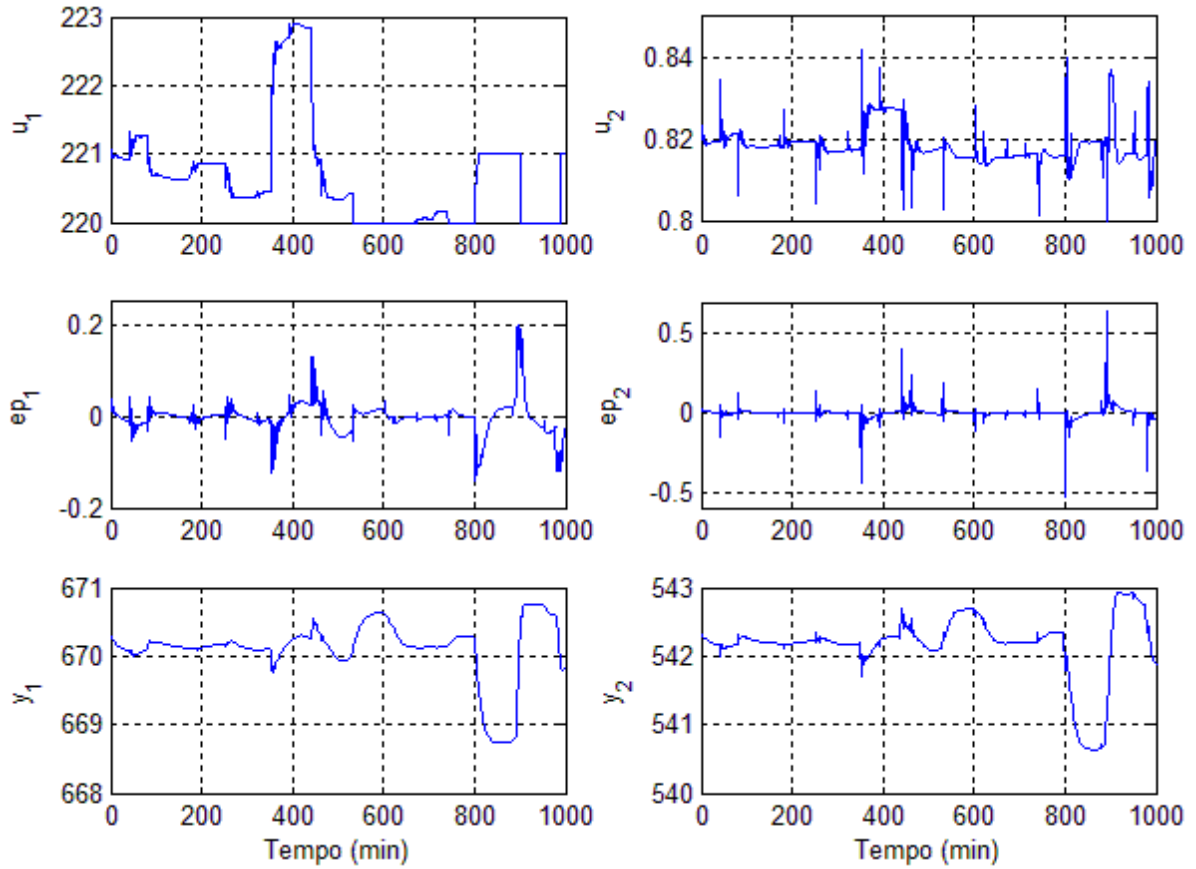


Figura 5.32 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência F_3 na unidade FCC

A Figura 5.33 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_3 . E, apesar das variações nas variáveis manipuladas e controladas, estas não foram capazes de serem detectadas pelas estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA. Como apresentado na Figura 5.33, as estatísticas permanecem praticamente inalteradas, após a ocorrência.

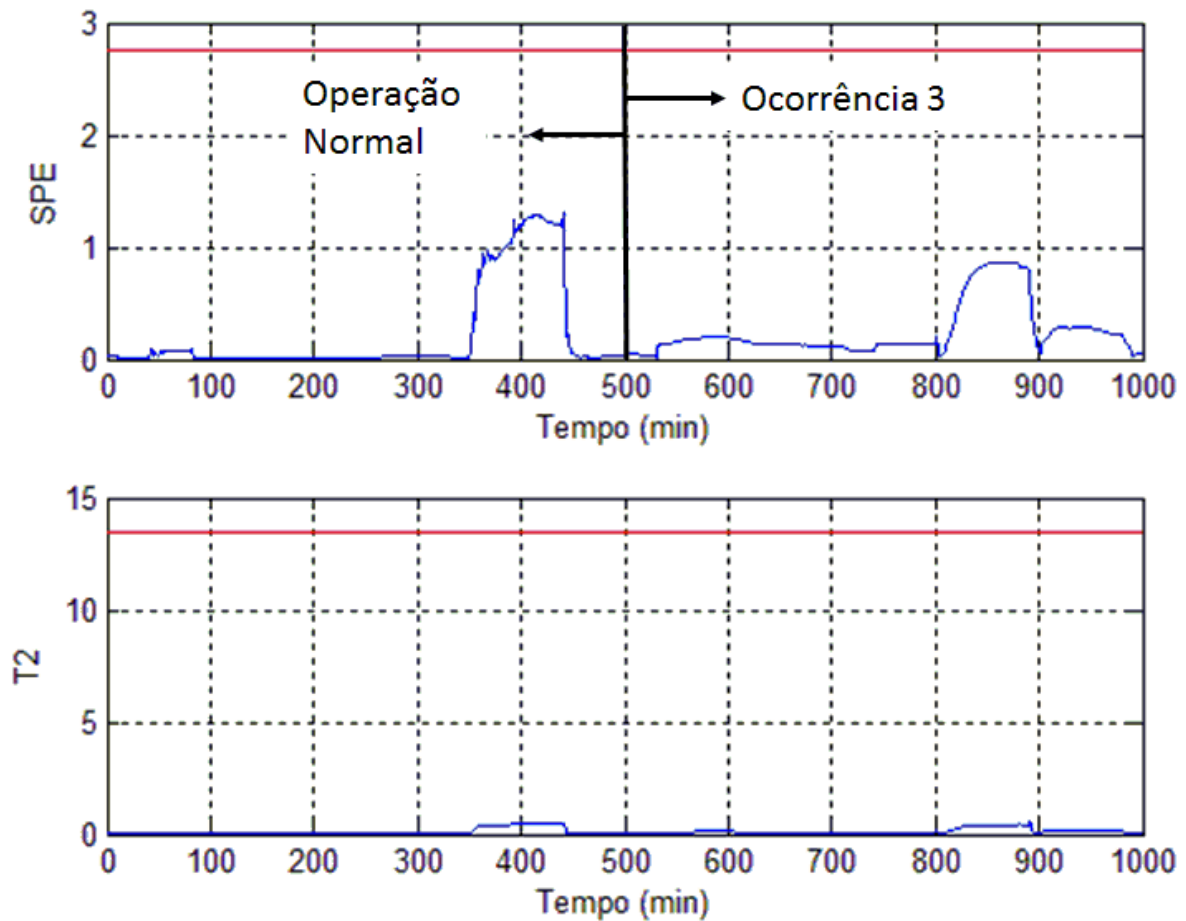


Figura 5.33 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência F_3 na unidade FCC

A Figura 5.34 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para o caso estudado na condição F_3 . Observa-se que, todas as métricas, aqui aplicadas, indicaram a ocorrência da alteração da nova condição, pela ultrapassagem dos limites pré-estabelecidos, nos instantes em que a variável manipulada u_1 tem seus limites impostos pelas novas restrições. Neste caso, apenas a ferramenta que utiliza a técnica DICA mostrou-se consistente e eficiente na detecção.

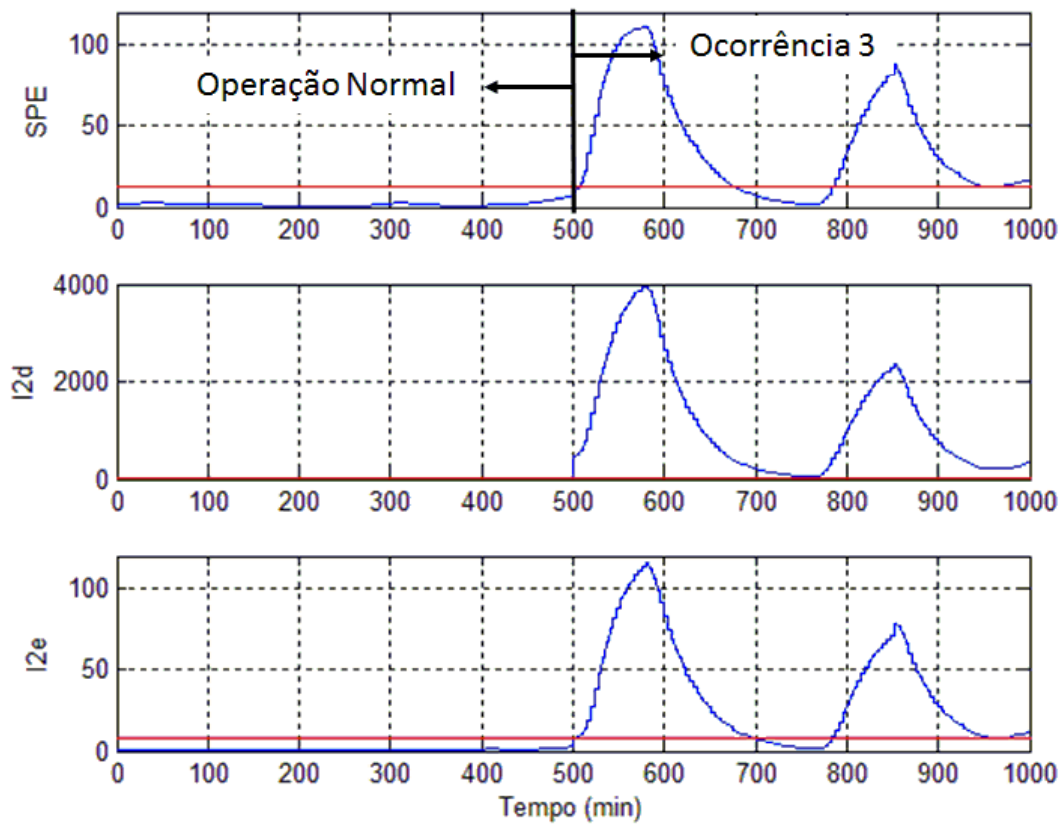


Figura 5.34 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_3 na unidade FCC

Vale salientar que esta nova condição pode ser interpretada também como um mau ajuste nos parâmetros de sintonia do controlador. Assim, deve-se avaliar a necessidade de re-sintonia deste.

Ocorrência 4: Análise da Condição F_4

Por fim, na condição F_4 , inseriu-se uma saturação, com limite superior de saturação de 222, na variável manipulada u_1 . Observa-se que, nos instantes de saturação, houve alterações significativas nos valores das variáveis manipuladas e, por consequência, nas variáveis controladas, como ilustrado na Figura 5.35. Enquanto o controlador calcula valores acima do valor de saturação estabelecido, o que é de fato enviado ao processo é um valor fixo e constante.

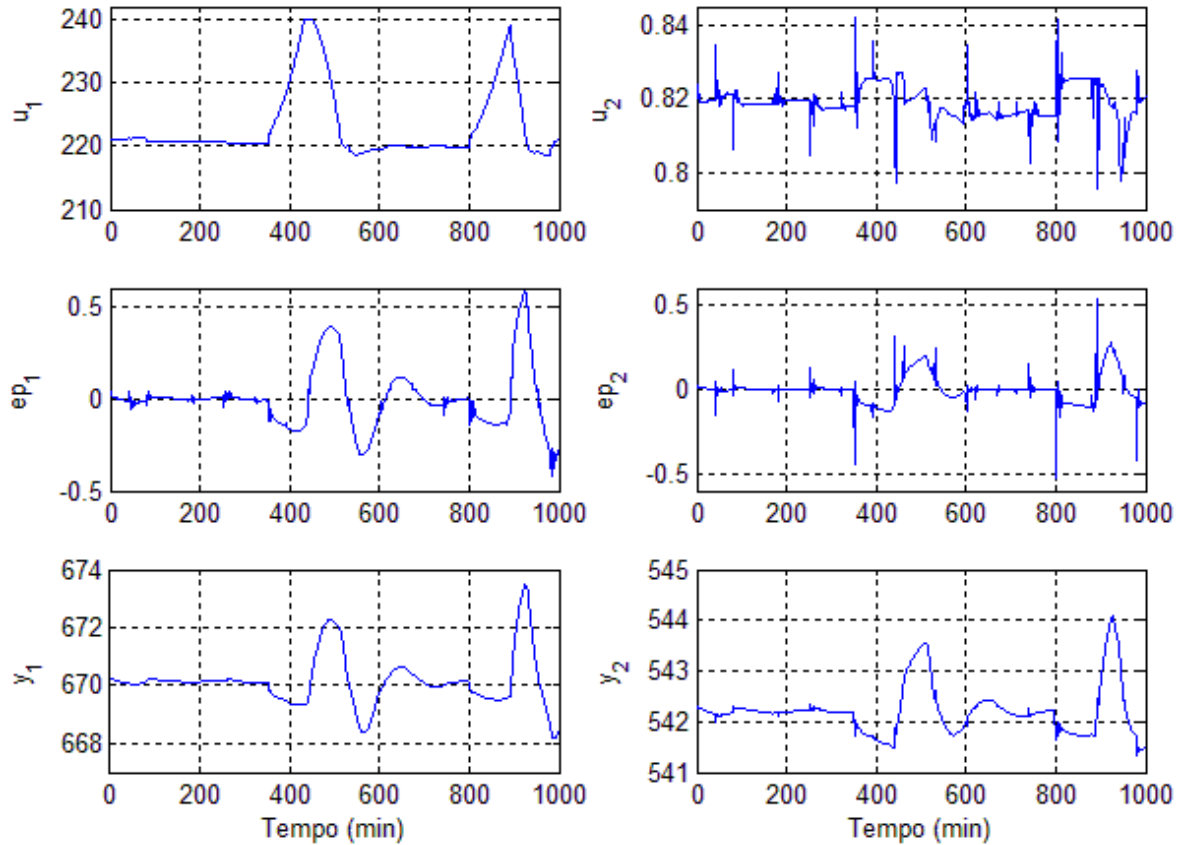


Figura 5.35 - Comportamento das variáveis monitoradas para ocorrência F_4 na unidade FCC

A Figura 5.36 explicita as variações das estatísticas SPE e T^2 aplicadas via DPCA para o caso estudado na condição F_4 . Observa-se que, para esta condição, ambas as métricas foram capazes de indicar a ocorrência da alteração da nova condição com eficiência. Deve-se observar também que esta ocorrência não foi inserida a partir do instante 500 minutos, conforme ocorreram nas demais ocorrências. Neste caso, a saturação aconteceu nos períodos em que a variável u_1 , calculada pelo controlador, ultrapassou o limite de saturação imposto, sendo estes, aproximadamente, 356 a 512 minutos e 807 a 925 minutos.

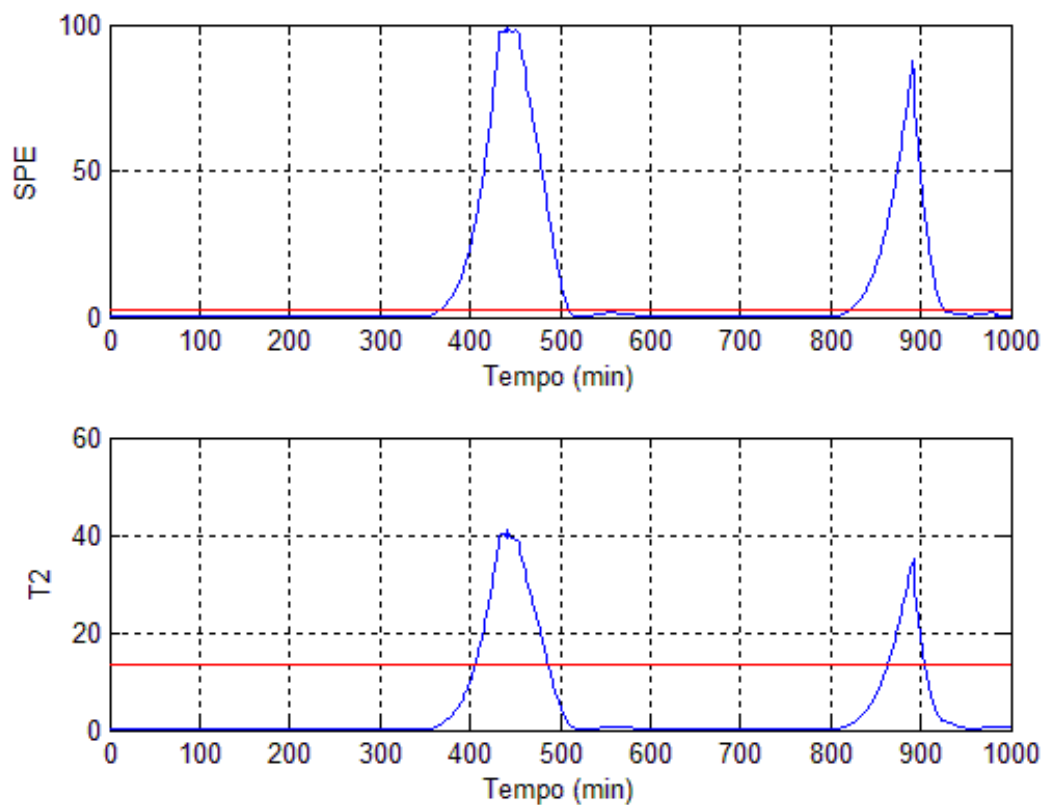


Figura 5.36 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DPCA para ocorrência F_4 na unidade FCC

A Figura 5.37 explicita as variações das estatísticas aplicadas via DICA para o caso estudado na condição F_4 . Observa-se que, para esta condição, todas as métricas também foram sensíveis e indicaram, de forma consistente, a ocorrência da alteração da nova condição. Assim, neste caso, ambas as ferramentas detectaram de forma consistente e eficiente a ocorrência inserida.

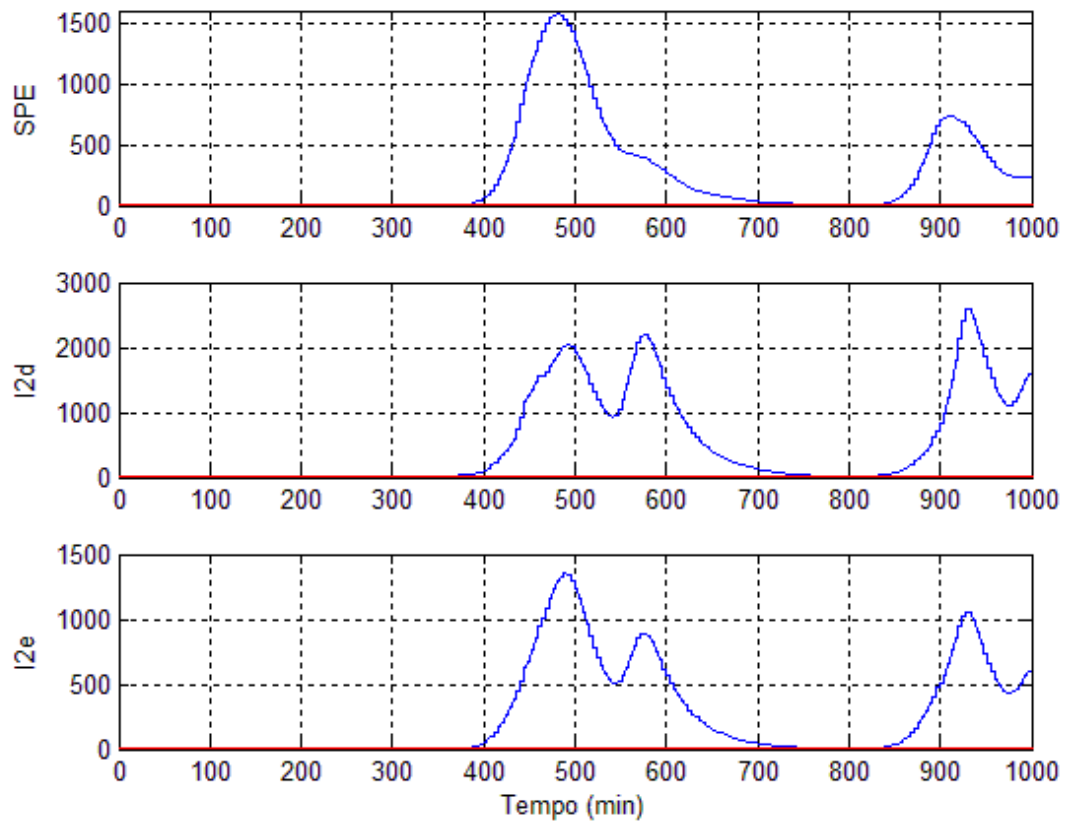


Figura 5.37 - Comportamento das estatísticas de monitoramento via DICA para a ocorrência F_4 na unidade FCC

Deve-se observar que esta mudança de condição representa uma saturação da válvula de vazão do ar que é introduzido no regenerador. E, quando detectada, medidas corretivas devem ser tomadas.

Capítulo 6

Método de Diagnóstico

Após a detecção de um mau desempenho do controlador, é importante diagnosticar a causa desse desempenho inadequado. Geralmente, as causas dessa degradação dos controladores MPC são as especificadas na Figura 1.1. Para localizar a causa raiz, as informações inerentes a esta causa devem estar presentes nos dados do modelo. Assim, um método baseado em dados, para monitoramento, deve ter em seus dados de treinamento esse tipo de informação. Isto quer dizer que amostras de dados devem ser coletadas para cada tipo de degradação. Estes dados devem ser coletados de acordo com o conhecimento prévio e experiência do sistema controlado.

O método utilizado neste trabalho e proposto por Tian (2011a) baseia-se no ângulo formado entre o principal autovetor dos dados detectados com mau desempenho e os principais autovetores dos dados previamente treinados no modelo, com causas de degradação previamente conhecidas. Além disso, este método independe da técnica estatística utilizada para detecção de mau desempenho.

Assumindo-se que se tem g causas $(C_1, C_2, \dots, C_g)$ de deterioração de desempenho do controlador MPC, previamente conhecidas, um conjunto de dados X_i para cada causa C_i deve ser coletado e treinado para gerar um modelo de referência. O modelo destes dados coletados é obtido pela decomposição da matriz de covariância destes dados em autovalores e autovetores, similar ao que é feito na decomposição em componentes principais. Esse modelo é composto pelo principal autovetor ϕ_i , que corresponde ao maior autovalor da matriz de covariância da amostra dos dados. Isto porque este autovetor, correspondente ao maior autovalor, explica a maior parte das informações do subespaço. Assim, cada causa C_i define um subespaço V_i que é representado pelas características do seu autovetor ϕ_i .

Na avaliação de desempenho de um controlador, quando um baixo desempenho é detectado pelo monitoramento, examina-se qual subespaço $\{V_i\}_{i=1}^g$ está mais próximo do

subespaço dos dados monitorados. Para isto, deve-se calcular o subespaço V_u dos atuais dados monitorados, por meio do autovetor ϕ_u correspondente ao maior autovalor da matriz de covariância destes dados.

Para verificar qual subespaço do modelo está mais próximo do subespaço dos dados monitorados, dentre os g subespaços calculados, define-se o ângulo entre os dois subespaços, considerando-se V_i o subespaço dos dados do modelo, sendo $1 \leq i \leq g$ e V_u o subespaço dos dados monitorados:

$$\theta_{u,i} = \cos^{-1} \left(\frac{\phi_u^T \phi_i}{\|\phi_u\| \|\phi_i\|} \right) \quad (6.1)$$

Assim, o subespaço V_i que tiver o menor ângulo $\theta_{u,i}$ é o mais similar ao subespaço V_u e o atual mau desempenho é provavelmente causado pela causa C_i .

6.1 Diagnóstico do processo Wood-Berry

Para cada tipo de degradação previamente conhecidas, coletou-se amostras de dados, para treinamento do diagnóstico. É importante salientar que nestes dados deve haver a ocorrência das causas de degradação. Assim, para a coluna de destilação Wood-Berry, quatro causas foram estabelecidas, de acordo com as ocorrências inseridas no sistema na etapa de detecção. Estas causas são descritas na Tabela 6.1.

Tabela 6.1 - Causas e seus parâmetros de degradação de desempenho para o processo Wood-Berry

Causa	Condição de Operação	Parâmetro/Variável	Valor/Intervalo
C_1	Variação no distúrbio	Variância	0,015
C_2	Saturação nas restrições do controlador	Restrições nas saídas	$\pm 0,7$

C_3	Incompatibilidade do modelo do processo	Primeiro ganho estático	25,6
C_4	Controlador mau sintonizado	Horizonte de Controle	3

A simulação em malha fechada do conjunto das variáveis monitoradas sob sistema de controle MPC referente ao período do *benchmark* e os quatro períodos de treinamento para diagnóstico são apresentados na Figura 6.1, Figura 6.2 e Figura 6.3, em que cada período contém 500 amostras de dados. No período de treinamento C_1 , a variância do distúrbio foi de 0,015, enquanto que no *benchmark* foi de 0,01. No período de treinamento C_2 , as restrições das variáveis controladas foram de $\pm 0,7$, causando saturação nas saídas cujas trajetórias de referência são 1,0 e 0,8, respectivamente. O aumento do primeiro ganho estático no modelo do processo, no período de treinamento C_3 , foi de duas vezes o valor, que no *benchmark* era de 12,8 e no treinamento 25,6. No período de treinamento C_4 , a mudança no horizonte de controle do controlador foi de 1, no *benchmark*, para 3.

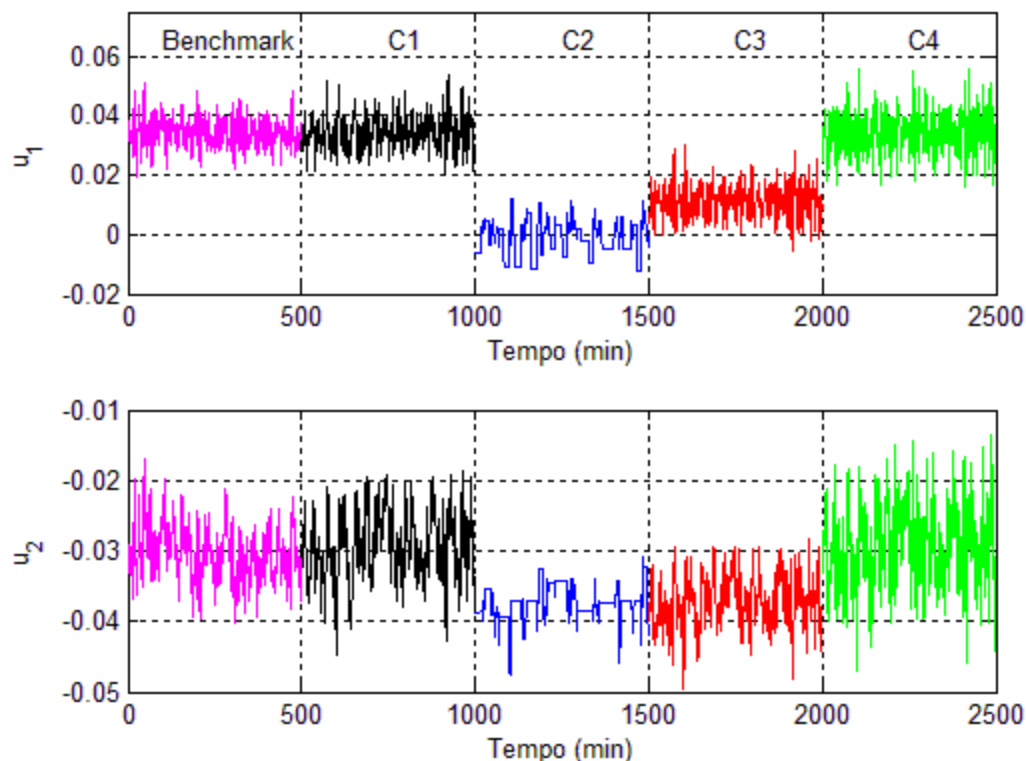


Figura 6.1 – Dados de treinamento das variáveis manipuladas para o processo Wood-Berry

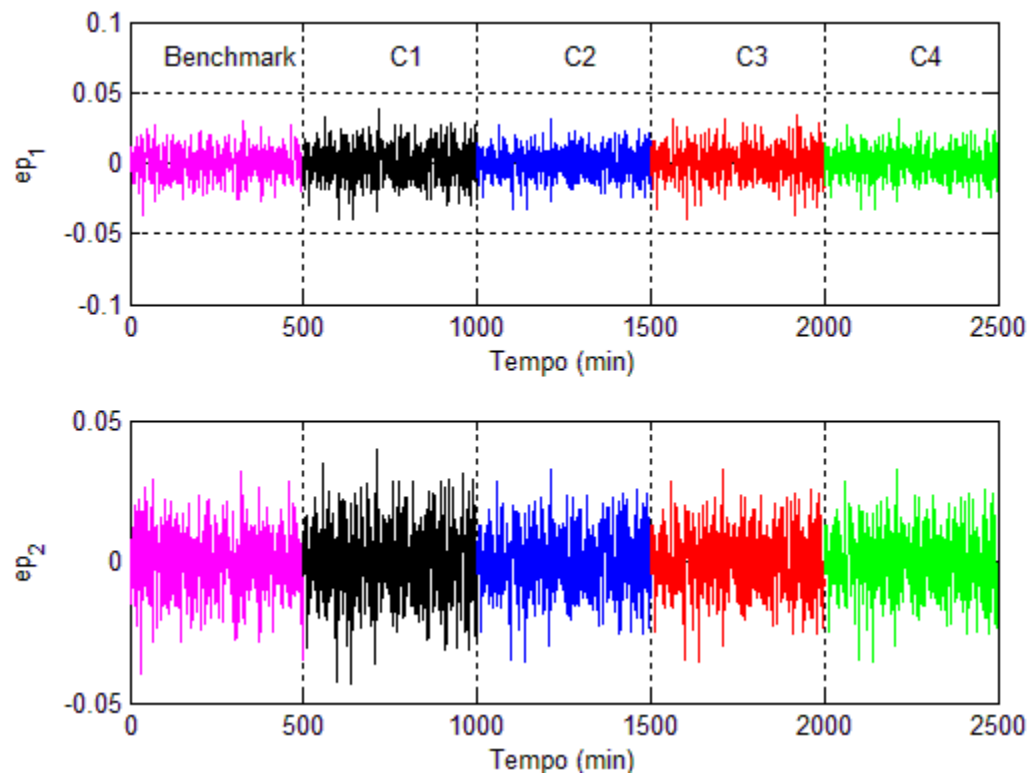


Figura 6.2 - Dados de treinamento dos erros de predição para o processo Wood-Berry

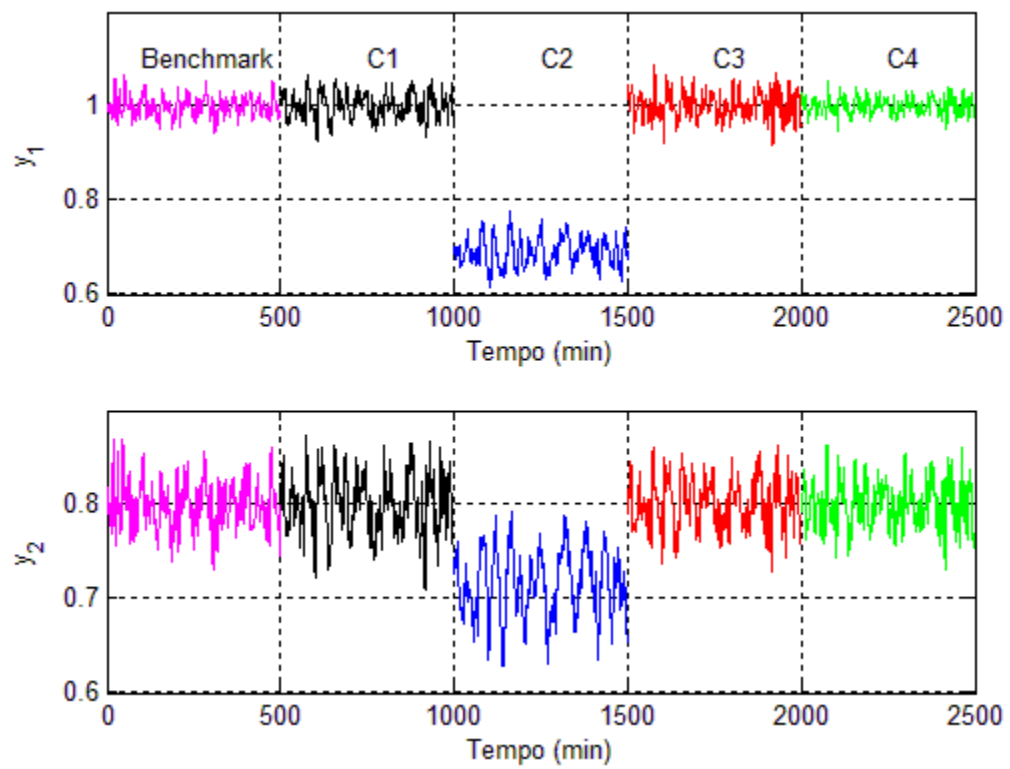


Figura 6.3 - Dados de treinamento das variáveis controladas para o processo Wood-Berry

Após a coleta dos dados de treinamento para diagnóstico, deve-se calcular os principais autovetores, que correspondem aos máximos autovalores, de cada causa de degradação. Sendo $g = 4$ o número de causas, para cada causa tem-se os seguintes principais autovetores:

Tabela 6.2 - Principais autovetores de cada causa de degradação para o processo Wood-Berry

ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4
-0,45139	-0,38101	-0,44235	-0,38633
-0,54866	0,371203	-0,56718	-0,49765
-0,35598	0,267385	-0,41499	-0,37249
-0,06037	0,067877	-0,05619	-0,16592
-0,26992	0,5828	-0,20782	-0,23581
-0,54037	0,54889	-0,51387	-0,61742

Em decorrência da detecção de mau desempenho do controlador, apresentados nos capítulos 4 e 5, faz-se o diagnóstico por meio do ângulo entre os subespaços, calculados pela equação (6.1). Os principais autovetores ϕ_u da matriz de covariância dos dados monitorados foram calculados e são apresentados na Tabela 6.3, para cada tipo de ocorrência.

Tabela 6.3 - Principais autovetores dos dados monitorados para o processo Wood-Berry

ϕ_{u1}	ϕ_{u2}	ϕ_{u3}	ϕ_{u4}
-0,48961	-0,51184	-0,48378	-0,45655
-0,55945	0,113964	-0,59071	-0,49211
-0,33722	0,077518	-0,38861	-0,2979
-0,03166	0,033411	-0,08875	-0,16137
-0,20578	0,53025	-0,04403	-0,10061
-0,53873	0,660865	-0,50615	-0,65152

Os resultados dos ângulos calculados entre os atuais subespaços dos dados monitorados e as causas de previamente treinadas são mostrados na Figura 6.4 abaixo:

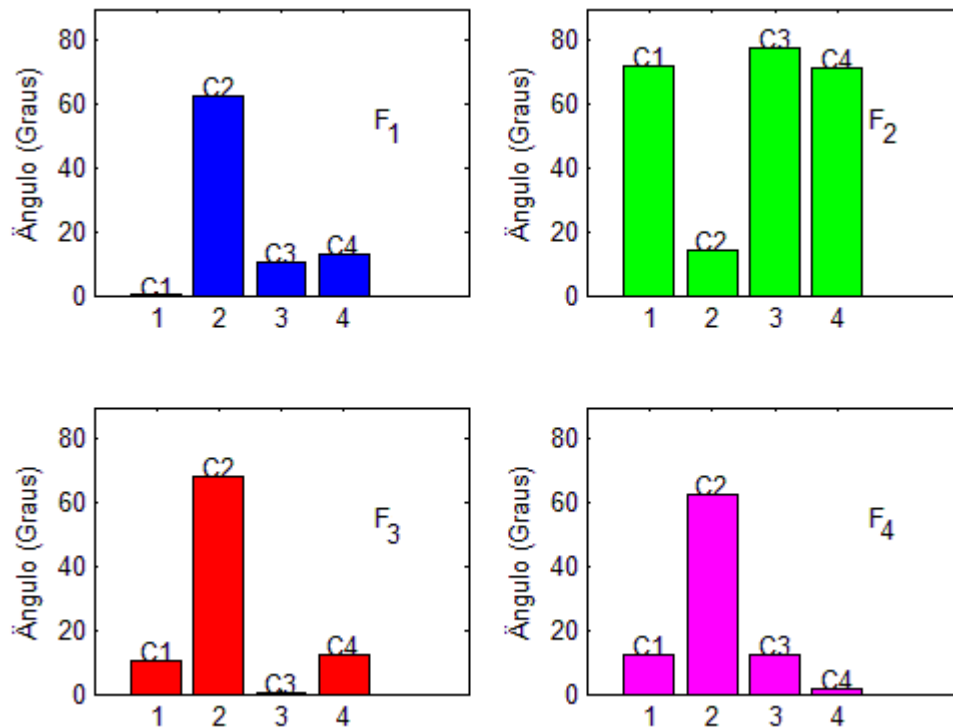


Figura 6.4 – Ângulos entre os subespaços dos dados monitorados e treinados para o processo Wood-Berry

Sabe-se que a causa da degradação do atual mau desempenho é aquela que apresenta o subespaço mais próximo do modelo treinado. Assim, o menor ângulo calculado entre esses subespaços indicará maior similaridade entre estes. Diante dos resultados apresentados na Figura 6.4, conclui-se que o método de diagnóstico proposto demonstra-se eficiente, já que este encontra com sucesso a causa raiz da degradação do desempenho, para todas as condições inseridas.

6.2 Diagnóstico do processo FCC

Similar ao diagnóstico apresentado para a coluna Wood-Berry, para o processo FCC, quatro causas foram estabelecidas, seguindo as ocorrências inseridas no sistema na etapa de detecção, conforme descritas na Tabela 6.4.

Tabela 6.4 - Causas e seus parâmetros de degradação de desempenho para a unidade FCC

Causa	Condição de Operação	Parâmetro/Variável	Valor/Intervalo
C_1	Perturbação na variável Kcc	Kcc	5%
C_2	Controlador mal sintonizado	Horizonte de Controle	6
C_3	Mudança nos limites das restrições	Restrições da entrada u_1	Máximo 222 Mínimo 220
C_4	Saturação de uma entrada	Variável u_1	222

Os resultados de simulação, em malha fechada com MPC, do conjunto das variáveis monitoradas no *benchmark* e nos quatro períodos de treinamento são apresentados na Figura 6.5, na Figura 6.6 e na Figura 6.7. Cada período contém 500 amostras. No período de treinamento C_1 , a variável Kcc foi perturbada em 5% do seu valor nominal, enquanto que no *benchmark* o seu valor era de 4,2. No período de treinamento C_2 , fez-se a mudança no horizonte de controle do controlador para 6, enquanto que no *benchmark* o seu valor era de 2. No período de treinamento C_3 , modificou-se as restrições da variável manipulada u_1 para máxima de 222 e mínima de 220, enquanto que no *benchmark* os valores eram máxima de 240 e mínima de 210. Por fim, no período de treinamento C_4 , inseriu-se uma saturação na variável manipulada u_1 com valor do limite superior de 222.

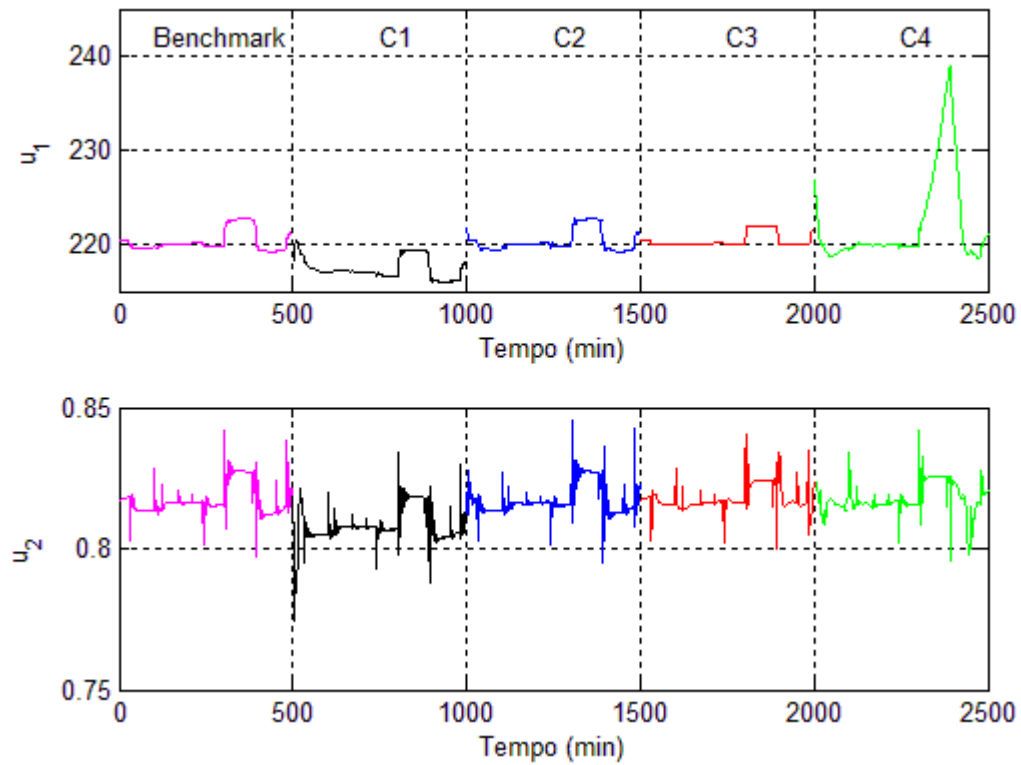


Figura 6.5 – Dados de treinamento das variáveis manipuladas para a unidade FCC

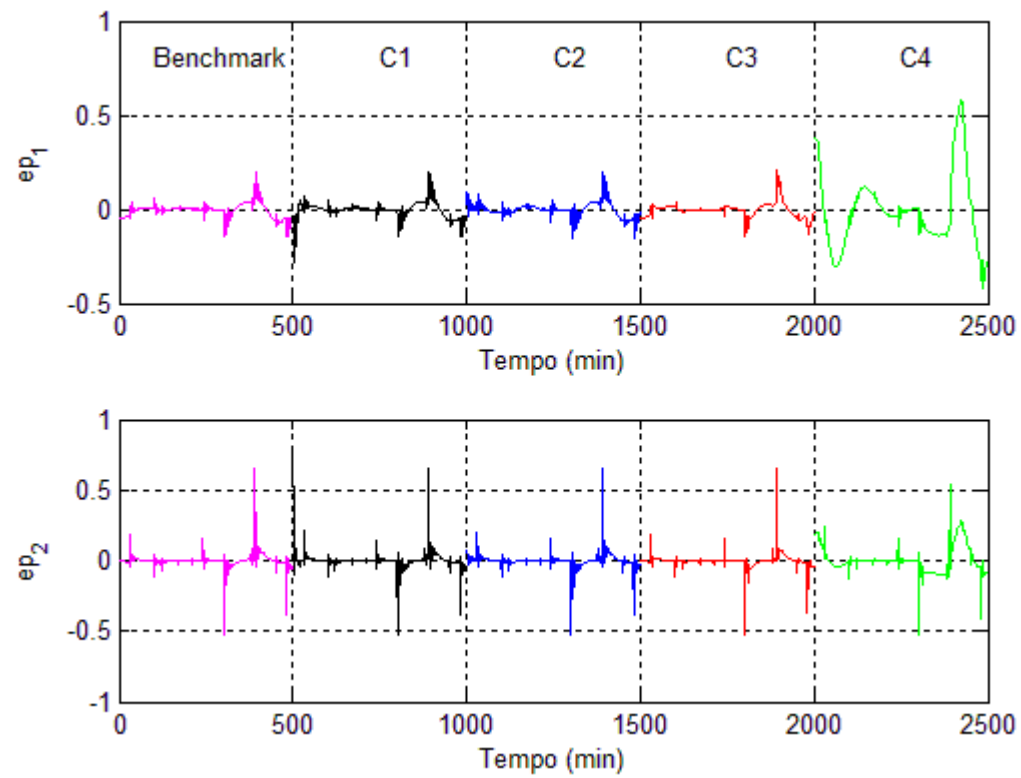


Figura 6.6 - Dados de treinamento dos erros de predição para a unidade FCC

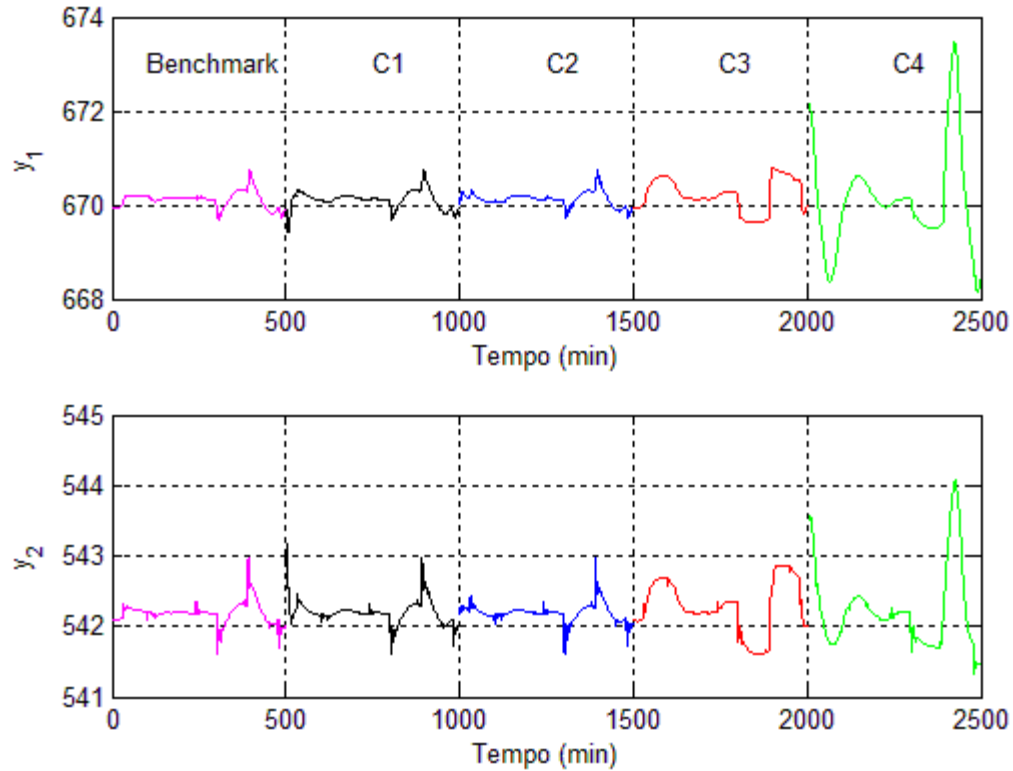


Figura 6.7 - Dados de treinamento das variáveis controladas para a unidade FCC

Sendo $g = 4$ o número de causas, os principais autovetores, que correspondem aos máximos autovalores, calculados para cada causa de degradação, são apresentados a seguir:

Tabela 6.5 - Principais autovetores de cada causa de degradação para a unidade FCC

ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_4
-0,0688	-0,0261	-0,5194	0,0040
-0,1740	-0,0327	-0,3518	0,2230
-0,5510	-0,5259	0,0477	-0,4925
-0,3668	-0,3920	0,1179	-0,4706
-0,5636	-0,5325	0,5365	-0,4911
-0,4575	-0,5334	0,5500	-0,4950

Assim, calculam-se os principais autovetores da matriz de covariância dos dados monitorados. Sendo ϕ_u os autovetores referentes aos dados monitorados, a Tabela 6.6 mostra estes autovetores para cada tipo de ocorrência:

Tabela 6.6 - Principais autovetores dos dados monitorados para a unidade FCC

ϕ_{u1}	ϕ_{u2}	ϕ_{u3}	ϕ_{u4}
-0,08867	-0,0392	-0,55782	0,016907
-0,2352	-0,04213	-0,12739	-0,10874
-0,56602	-0,52847	-0,00165	0,500229
-0,35546	-0,38881	0,066386	0,472163
-0,57657	-0,53189	0,576523	0,503458
-0,39705	-0,53228	0,579499	0,511128

Os resultados dos ângulos calculados entre os atuais subespaços dos dados monitorados e as causas de previamente treinadas, para a unidade FCC, são mostrados na Figura 6.8 abaixo:

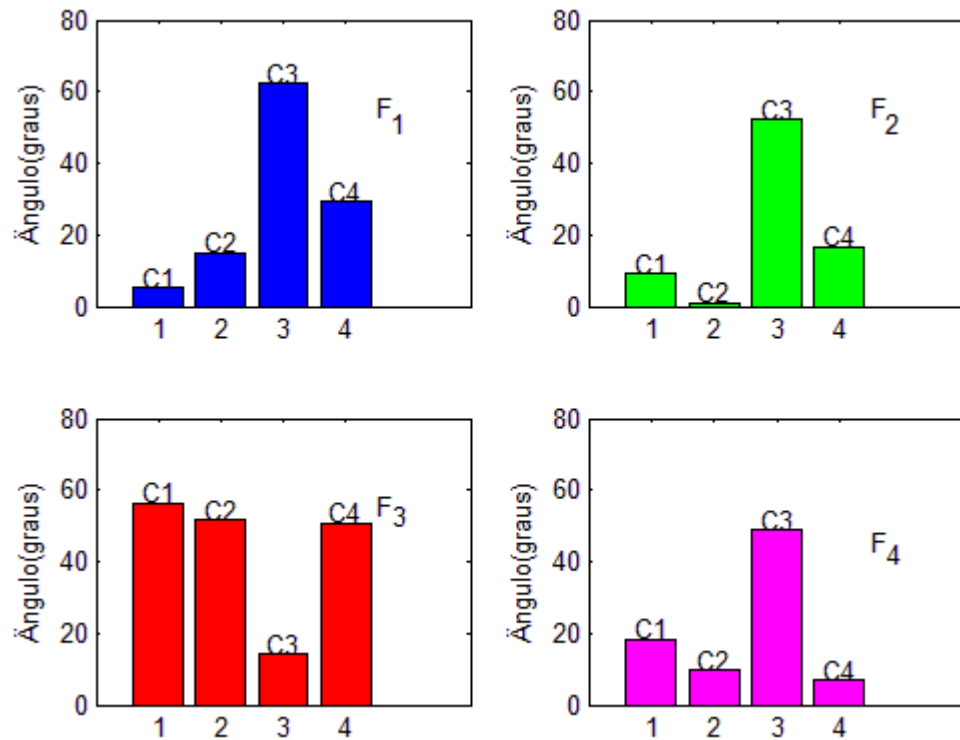


Figura 6.8 – Ângulos entre os subespaços dos dados monitorados e treinados para a unidade FCC

Tendo em vista que o menor ângulo calculado entre esses subespaços indicará maior similaridade entre estes, os resultados apresentados na Figura 6.4, mostram que o método de diagnóstico proposto demonstra-se eficiente, já que este encontra com sucesso a causa raiz da degradação do desempenho, para todas as condições inseridas.

Capítulo 7

Conclusões e Recomendações

Neste trabalho, implementaram-se e avaliaram-se duas ferramentas para monitoramento e avaliação de desempenho de controladores preditivos. Baseiam-se estas ferramentas em duas técnicas estatísticas multivariadas, que são: PCA e ICA. Aplicaram-se estas ferramentas na avaliação do MPC de uma coluna de destilação Wood-Berry e de uma unidade FCC. Índices de monitoramento foram utilizados on-line, tanto para o PCA quanto para o ICA. Os testes da eficácia e viabilidade destas ferramentas deu-se por meio de simulações, quando se introduziram possíveis degradações no sistema de controle MPC.

Os resultados obtidos foram satisfatórios e coerentes com a literatura referente as técnicas aplicadas no desenvolvimento das ferramentas. Verificou-se que a ferramenta baseada na técnica ICA mostrou-se mais eficiente na tarefa proposta. Estes resultados já eram esperados, uma vez que o PCA utiliza apenas informações contidas na matriz de covariância dos dados. Em contrapartida, o ICA baseia-se no princípio de independência estatística, obtendo sinais ou dados não gaussianos independentes.

Para o processo Wood-Berry, constatou-se que, tanto o PCA quanto o ICA mostraram-se capazes de detectar degradações no desempenho do controlador MPC. No caso do PCA, para as ocorrências em que houve saturação nas restrições do controlador (F_2) e incompatibilidade do modelo do processo (F_3), constatou-se que a detecção foi mais concisa, quando comparado com a detecção das outras estudadas. Isto ocorre porque estas ocorrências são condições que influenciam fortemente no desempenho do controlador, enquanto que as outras ocorrências não influenciam tanto. Assim, no caso de “mau ajuste” dos parâmetros do MPC, este é capaz de compensar essas anomalias. Já utilizando o ICA, mesmo com aquelas ocorrências que pouco afetam o desempenho do controlador, todas as ocorrências foram detectadas de forma consistente. Portanto, o ICA mostrou-se mais eficiente, uma vez que suas estatísticas apresentaram índices mais convincentes.

Para a unidade FCC, constatou-se que apenas a estratégia proposta para monitoramento baseada no ICA foi capaz de detectar todas as anormalidades simuladas. Utilizando o PCA, para as ocorrências em que houve mudança no horizonte de controle (F_2) e nos limites das restrições (F_3), constatou-se que não houve detecção. Isto acontece principalmente porque, mesmo o controlador utilizando um modelo linearizado do processo, devido a otimização usada pelo MPC, estas ocorrências tornam as características do controlador não lineares. Assim, tratando-se destas ocorrências, a descorrelação não é suficiente para a análise completa das informações. Já utilizando o ICA, todas as ocorrências foram detectadas de forma consistente. O ICA remove totalmente a dependência estatística presente nos dados e, como consequência, apresenta resultados mais significativos. Esta condição, como já mencionada, é mais forte que a descorrelação.

A partir dos resultados obtidos, conclui-se que o uso do ICA para monitoramento apresentou desempenho mais sofisticado, quando comparado ao PCA.

Em decorrência da detecção de um mau desempenho para cada período dos dados monitorados, fez-se necessário proceder o diagnóstico para localizar a causa raiz da deterioração para cada período de dados monitorados. O método proposto neste trabalho, para diagnóstico, retrata o ângulo entre o autovetor de cada período monitorado e o autovetor de cada período treinado. Este método independe da técnica estatística multivariada utilizada, PCA ou ICA. Os resultados do diagnóstico demonstraram que o método proposto encontra com sucesso a causa raiz da degradação do desempenho, para todas as ocorrências simuladas.

Diante dos resultados obtidos, conclui-se que as ferramentas implementadas e aplicadas obtiveram os resultados esperados. Embora estas ferramentas não sejam produtos prontos para implementação em sistemas reais, enfatiza-se que estas oferecem soluções e subsídios para futuras aplicações.

A seguir, listam-se algumas sugestões de continuação para este estudo:

- Uso de uma janela móvel para o cálculo dos índices estatísticos de monitoramento, com um fator de esquecimento exponencial, para dar mais importância aos dados presentes. Vai permitir mais robustez para detecção,

tratando falsos alarmes e condições de degradação não detectadas. Nesse trabalho, as medições dos índices foram calculadas de forma instantânea;

- Desenvolvimento de ferramentas baseadas na técnica PCA não linear e aplicação em processos não-lineares;
- Desenvolvimento de um método de excitação suficiente para construção do modelo de referência. Nesse trabalho, considerou-se que a excitação natural do processo foi suficiente para representar a operação normal do processo;
- Comparação com técnicas de monitoramento de sistemas MPC baseadas em modelo, como as desenvolvidas no trabalho de Santos (2013).
- Implementação dessas ferramentas em sistemas reais.

Referências Bibliográficas

AlGhazzawi, A.; Lennox, B. “Model predictive control monitoring using multivariate statistics”, *Journal of Process Control*, v.19, pag.314-327, 2009.

AlGhazzawi, A.; Lennox, B. “Monitoring a complex refining process using multivariate statistics”, *Control Engineering Practice*, v.16, pag.294-307, 2008.

Bakshi, B. R. “Multiscale PCA with Application to Multivariate Statistical Process Monitoring”, *AIChE Journal*, v. 44, pag.1596-1610, 1998.

Brown, S. D.; Tauler, R.; Walczak, B. **Comprehensive Chemometrics: Chemical and Biochemical Data Analysis**, Editora: Elsevier B. V., 2009.

Chiang, L. H.; Russell, E. L.; Braatz, R. D. **Fault detection and diagnosis in industrial systems**, Editora: Springer, London, 2001.

Cover, T. M.; Thomas, J. A. **Elements of Information Theory**, Editora: John-Wiley, 2a Edição, 2006.

Cui, P.; Li, J.; Wang, G. “Improved kernel principal component analysis for fault detection”. *Expert Systems with Applications*, v.34, pag.1210-1219, 2008.

Desborough, L.; Harris, T. “Performance assessment measures for univariate feedforward/feedback control”, *Canadian J. of Chemical Eng.*, v.71, pag.605-616, 1993.

Gao, X.; Yang, F.; Shang, C.; Huang, D. "A review of control loop monitoring and diagnosis: Prospects of controller maintenance in big data era". Chinese Journal of Chemical Engineering, v.24, pag.952-962, 2016.

Garcia, C. E.; Morshedi, A. M. "Quadratic programming solution of dynamic matrix control (QDMC)", Chemical Engineering Communications, v.46, pag.73-87, 1986.

Gary, J. H.; Handwerk, G. E. **Petroleum refining: technology and economics**, 4^o edição, Editora: Marcel Dekker, New York, 2001.

Ge, Z.; Song, Z. "Process monitoring based on independent component analysis-principal component analysis (ICA-PCA) and similarity factors," Industrial & Engineering Chemistry Research, v.46 (7), pag.2054-2063, 2007.

Harris, T.J. "Assessment of closed-loop performance", Canadian J. Chemical Eng., v.67(10), pag.856-861, 1989.

Harris, T.J.; Boudreau, F.; Macgregor, J.F. "Performance assessment of multivariable feedback controllers". Automatica, v.32(11), pag.1505-1518, 1996.

Harris, T.J.; Seppala, C.T.; Desborough, D. "A review of performance monitoring and assessment techniques for univariate and multivariate control systems", Journal Process Control, v.9(1), pag.1-17, 1999.

Horch, A.; Isaksson, A. J. "A modified index for control performance assessment", Journal of Process Control, v.9, pag.475-483, 1999.

Hsu, C.; Chen, M.; Chen, L. "A novel process monitoring approach with dynamic independent component analysis". Control Engineering Practice, v.18, pag.242-253, 2010.

Huang, B. Multivariate Statistical Methods for Control Loop Performance Assessment. PhD thesis, Department of Chemical Engineering, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada, 1997.

Huang, Biao; Kadali, Ramesh. **Dynamic Modeling, Predictive Control and Performance Monitoring: A Data-driven Subspace Approach**, Editora: Springer, London-UK, 2008.

Hyvärinen, A. “Fast and robust Fixed-point algorithms for independent component analysis”, IEEE Transactions on Neural Networks, v.10 (3), pag.626-634, 1999.

Hyvärinen, A.; Karhunen, J.; Oja, E. **Independent Component Analysis**, Editora: John Wiley & Sons, Inc, New York, 2001.

Hyvärinen, A.; Oja, E. “Fast Fixed-point algorithms for independent component analysis”, Neural Computation, v.9, pag.1483-1492, 1997.

Jackson, J. E. **A user’s Guide to Principal Components**. Editora: Wiley, New York, 1991.

Jelali, M. “An overview of control performance assessment technology and industrial applications”, Control Engineering Practice, v.14(5), pag.441-466, 2006.

Jolliffe, I. T. **Principal Component Analysis**, 2ª edição, Editora: Springer, New York, 2002.

Ko, B.-S.; Edgar, T. F. “Assessment of achievable PI control performance for linear processes with dead time”, In: Proceedings of the American Control Conference, Philadelphia, USA, 1998.

Ko, B.S.; Edgar, T.F. "Performance assessment of cascade control loops", *AIChE Journal*, v.46, pag.281-291, 2000.

Kresta, J. V.; MacGregor, J. F.; Marlin, T. J. "Multivariate statistical monitoring of processes", *Canadian Journal of Chemical Engineering*, v.69(1), pag.35-47, 1991.

Lee, J. M.; S. Joe Qin, S. J.; Lee, I. B. "Fault Detection and Diagnosis Based on Modified Independent Component Analysis". *AIChE Journal*, v.52, No. 10, pag.3501-3514, 2006.

Lee, Jong-min; Yoo, ChangKyoo; Lee, In-Beum. "Statistical monitoring of dynamic processes based on dynamic independent component analysis". *Chemical Engineering Science*, v.59, pag.2995-3006, 2004b.

Lee, Jong-min; Yoo, ChangKyoo; Lee, In-Beum. "Statistical process monitoring with independent component analysis". *Journal of Process Control*, v.14, pag.467-485, 2004a.

Loquasto, F.; Seborg, D.E. "Model predictive controller monitoring based on pattern classification and PCA", *Proceedings of the American Control Conference Denver, Colorado*, v.3, pag.1968-1973, 2003.

Martin, E. B.; Morris, A. J. "An overview of multivariate statistical process control in continuous and batch process performance monitoring", *Transactions of the Institution of Measurement and Control*, v.18 (1), pag.51-60, 1996.

Mitchell, W.; Shook, D. "Industrial application of multivariable controller analysis and monitoring techniques", *Proceedings of the 8th European Refining Technology Conference (ERTC 2003)*, Milan, Italy, 2003.

Morimitsu, H. “Análise comparativa das abordagens de estimativa do modelo FastICA por maximização da negentropia e da verossimilhança”, USP, 2008.

Moro, L.F.L.; Odloak, D. “Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters”, Journal of Process Control, v.5(1), pag.29-39, 1995.

Papoulis, A. **Probability, Random Variable, and Stochastic Processes**, Editora: McGraw Hill, 3a Edição, 1991.

Pranatyasto, T. N.; Qin, S. J. “Sensor validation and process fault diagnosis for FCC units under MPC feedback”, Control Engineering Practice, v.9, pag.877-888, 2001.

Qiang, Z.; Shaoyuan, L. “Performance Monitoring and Diagnosis of Multivariable Model Predictive Control Using Statistical Analysis”, Chinese J. Chem Eng, v.14(2), pag.207-215, 2006.

Qin, S. J.; Dunia, R. “Determining the number of principal components for best reconstruction”, Journal of Process Control, v.10, pag.245-250, 2000.

Quelhas, A. D.; Passos, C. N.; Lage, D. F. S. et al. **Processamento de Petróleo e Gás: petróleo e seus derivados, processamento primário, processos de refino, petroquímica, meio ambiente**, Editora: LTC, Rio de Janeiro, 2012.

Reza, F. M. **An Introduction to Information Theory**, Editora: Dover, 1994.

Santos, R. R., Avaliação de Desempenho de Controladores Preditivos Multivariáveis. Dissertação de M.Sc., UFS, São Cristóvão, SE, Brasil, 2013.

Shah, S. L.; Patwardhan, R.; Huang, B. “Multivariate controller performance analysis: methods, applications and challenges”, in: AIChE Symposium Series, v.326, 2002, pag. 190-207, 2002.

Slišković, Dražen; Grbić, Ratko; Hocenski, Željko. “Multivariate Statistical Process Monitoring”. Technical Gazette, v.19, pag.33-41, 2012.

Sotomayor, O. A. Z.; Odloak, D.; Alcorta-Garcia, E.; Tisza-Contreras, J. F. “Controle preditivo tolerante a falhas ativo – aplicação a uma unidade industrial de craqueamento catalítico (FCC)” , XII Latin-American Congress on Automatic Control, Salvador-BA, Brasil, pag.139-144, 2006b.

Sotomayor, Oscar A. Z.; Odloak, Darci. “Performance assessment of model predictive control”, International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, Gramado-Brazil, pag.875-880, 2006a.

Stefatos, George; Hamza, A. Ben. “Dynamic independent component analysis approach for fault detection and diagnosis”. Expert Systems with Applications, v.37, pag.8606-8617, 2010.

Tian, X.; Chen, G.; Cao, Y; Chen, S. “Performance monitoring of MPC based on dynamic principal component analysis”, 18th IFAC World Congress, Milano (Italy), pag.13139-13144, 2011b.

Tian, X.; Chen, G.; Chen, S. “A data-based approach for multivariate model predictive control performance monitoring”, Neurocomputing, v.74, pag.588–597, 2011a.

Tomita, R. K. “Monitoramento Estatístico de Sistemas de Tratamento de Efluentes”, Dissertação de M.Sc., Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, São Paulo, Brasil, 1999.

Venkatsubramanian, V.; Rengaswamy, R.; Yin, K.; Kavuri, S. N. “A review of fault detection and diagnosis; part I: Quantitative model-based methods”, *Computers & Chemical Engineering*, v.27, pag.293–231, 2003.

Wold, S. “Cross validatory estimation of the number of components in factor and principal component analysis”, *Technometrics*, v.20, pag.397-405, 1978.

Wood, R. K.; Berry, M. W. “Terminal composition control of a binary distillation column”, *Chemical Engineering Science*, v.28, pag.1707-1717, 1973.

Xiong, Li; Liang, Jun; Qian, Jixin. “Multivariate Statistical Process Monitoring of an Industrial Polypropylene Catalyzer Reactor with Component Analysis and Kernel Density Estimation”. *Chin. J. Chem. Eng.*, v.15(4), pag.524-532, 2007.

Xu, Y.; Li, N.; Li, S. “A Data-driven Performance Assessment Approach for MPC Systems under Multiple Operating Conditions”, 13th International Conference on Control, Automation, Robotics & Vision, Marina Bay Sands, Singapore, pag.919-924, 2014.

Zhang, H.; Lennox, B. “Integrated condition monitoring and control of fed-batch fermentation processes”, *Journal of Process Control*, v.14(1), pag.41-50, 2004.

Zhang, Yingwei; Zhang, Yang. “Fault detection of non-Gaussian processes based on modified independent component analysis”. *Chemical Engineering Science*, v.65, pag.4630-4639, 2010.

Apêndice A - Fundamentos Teóricos relativos ao método ICA

Para a compreensão da análise de componentes independentes, faz-se necessário a revisão de alguns conceitos indispensáveis. Neste contexto, apresentam-se: uma introdução sobre teoria da informação, na qual são expostos alguns dos conceitos mais importantes; os conceitos básicos de momentos estatísticos, já que algoritmos de ICA são baseados em estatísticas de alta ordem; evidencia-se a diferença entre independência estatística e correlação e também uma introdução sobre gaussianidade.

A.1 Teoria da Informação

Alguns conceitos de teoria da informação são relevantes para compreensão do tratamento de sinais, permitindo assim uma análise do conteúdo informacional dos dados. Neste sentido, apresenta-se a seguir alguns conceitos fundamentais.

A.11 Informação

Quando se fala em informação, está-se vinculando a sua definição à ideia de probabilidade, ou seja, o quão é surpreendente ou o quão é incerto. De modo mais claro, se um locutor nos diz a frase: “Ao andar pelas ruas da minha cidade, vi um meteoro cair” e um outro nos diz “Ao lançar uma moeda, obtive cara como resultado”. Percebe-se que a primeira notícia nos traz mais informação que a segunda. Isto porque, trata-se de algo mais incerto que nos surpreende.

Do ponto de vista matemático, pode-se definir a informação, dado um evento A com probabilidade $P(A)$, como sendo (Reza, 1994):

$$I[P(A)] = \log_2 \left[\frac{1}{P(A)} \right] = -\log_2[P(A)] \quad (\text{A.1})$$

Em que: I é medido em bits, devido ao uso do logaritmo na base dois.

Considerando a segunda notícia exemplificada anteriormente, ao lançar uma moeda perfeitamente honesta, tem-se a informação associada à ocorrência do evento dada por:

$$I[P(A)] = \log_2 \left[\frac{1}{0,5} \right] = 1 \text{ bit} \quad (\text{A.2})$$

Ao analisar o que foi exposto, pode-se afirmar que quanto menor a probabilidade de ocorrência de um dado evento, maior é a informação associada à sua ocorrência.

A.1.2 Entropia

O termo entropia, apesar de ser bastante conhecido na química, diz respeito a medida do estado de desordem de um sistema. Em teoria da informação, a entropia nada mais é do que a informação média associada às observações da ocorrência de eventos para uma determinada variável aleatória. Do ponto de vista matemático, para uma determinada variável aleatória X , discreta, e com função de densidade de probabilidade dada por $p(x) = P(X = x)$, tem-se que:

$$H(X) = - \sum_x p(x) \log_2[p(x)] \quad (\text{A.3})$$

Em que: $H(X)$ é a entropia. Pode-se escrevê-la, ainda, como sendo o valor esperado do $\log_2[p(x)]$, isto é:

$$H(X) = -E\{\log_2[p(x)]\} \quad (\text{A.4})$$

Para um caso com i eventos, tem-se:

$$\begin{aligned}
H(X) &= p(x_1)I[P(X = x_1)] + p(x_2)I[P(X = x_2)] + \dots \\
&\quad + p(x_i)I[P(X = x_i)] \\
H(X) &= \sum_i p(x_i)I[P(X = x_i)]
\end{aligned} \tag{A.5}$$

De acordo com a equação (A.5), pode-se observar que a entropia é função das informações associadas às observações relativas à variável aleatória, ou seja, trata-se de uma ponderação das informações. Assim, conclui-se que se a entropia é máxima, tem-se a máxima informação.

Retomando ao exemplo anterior para o caso do lançamento de uma moeda, tem-se que, para uma moeda honesta, os valores são equiprováveis, ou seja, $p = 0,5$. Nesse caso:

$$H(X) = -0,5 \cdot \log_2[0,5] - 0,5 \cdot \log_2[0,5] = 1 \text{ bit} \tag{A.6}$$

Em caso de uma moeda não honesta, em que os valores não são equiprováveis, como por exemplo $p = 0,3$ para o resultado ser cara e $p = 0,7$ para o resultado coroa, tem-se que:

$$H(X) = -0,3 \cdot \log_2[0,3] - 0,7 \cdot \log_2[0,7] = 0,8813 \text{ bit} \tag{A.7}$$

Observa-se um resultado de entropia menor que o caso anterior. Intuitivamente, pode-se perceber coerência no resultado, já que se tem um caso mais provável de acontecer que o outro, ou seja, tem-se uma menor incerteza.

Diante do que foi exposto, pode-se afirmar com ênfase que a entropia será máxima para casos em que a distribuição de probabilidade for uniforme, ou seja, casos equiprováveis, e ainda que a entropia será nula para casos determinísticos ($p = 1$). Estas propriedades são de extrema importância para a compreensão do ICA.

A.1.3 Entropia Conjunta e Entropia Condicional

Considere duas variáveis aleatórias X e Y com distribuição de probabilidade conjunta $p(x, y)$. A entropia conjunta dessas variáveis é dada por:

$$H(X, Y) = - \sum_x \sum_y p(x, y) \log_2 [p(x, y)] = -E\{\log_2 [p(x, y)]\} \quad (\text{A.8})$$

Enquanto que a entropia condicional é dada por:

$$\begin{aligned} H(Y/X) &= - \sum_x \sum_y p(x, y) \log_2 [p(y/x)] \\ &= -E_{p(x, y)}\{\log_2 [p(y/x)]\} \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Da teoria de probabilidade, sabe-se que:

$$p(x, y) = p(y/x) \cdot p(x) \quad (\text{A.10})$$

A partir da equação (A.10), pode-se verificar a seguinte propriedade da entropia conjunta em função da entropia condicional:

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y/X) = H(Y) + H(X/Y) \quad (\text{A.11})$$

Ou ainda: observa-se que se temos uma entropia condicional nula, por exemplo $H(Y/X) = 0$, as variáveis aleatórias são independentes, ou seja, a variável Y não contém informação adicional àquela contida em X .

A.1.4 Informação Mútua

Pelo que já foi exposto, sabe-se que a entropia é a incerteza de uma variável aleatória. Chama-se de informação mútua a redução na incerteza de uma variável aleatória devido ao conhecimento de uma outra variável aleatória. Em outras palavras, a informação mútua é a informação que uma variável aleatória carrega da outra e vice-versa. Esta pode ser quantificada como segue:

$$\begin{aligned} I(X, Y) &= H(X) - H(X/Y) = H(Y) - H(Y/X) \\ I(X, Y) &= \sum_x \sum_y p(x, y) \cdot \log_2 \left[\frac{p(x, y)}{p(x) \cdot p(y)} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Percebe-se que a informação mútua é uma medida de dependência entre variáveis aleatórias. Assim, em caso de informação mútua nula, as variáveis são estatisticamente independentes.

Pode-se expressar em um diagrama de Venn, como feito por Cover e Thomas (2006), a relação entre as entropias e a informação mútua. Esta última, por sua vez, corresponde à intersecção das informações.

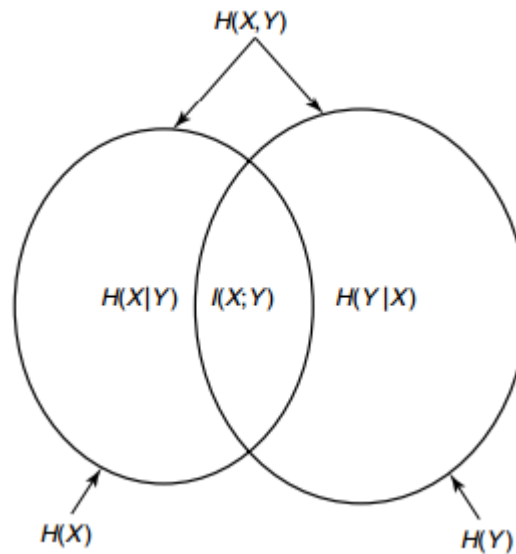


Figura A.1 - Relação entre informação mútua e entropias (adaptada de Cover e Thomas, 1991)

A.2 Momentos Estatísticos e Cumulantes

Sabe-se que uma variável aleatória caracteriza-se por sua função de densidade de probabilidade (fdp), ou seja, a fdp define plenamente uma variável aleatória. Frequentemente, desconhece-se a função densidade de probabilidade de uma variável aleatória. Entretanto, pode-se caracterizá-la por meio de momentos estatísticos. Estes, apesar de serem definidos em função da fdp, podem ser estimados diretamente dos dados.

A definição geral de momentos estatísticos de uma variável aleatória, diz respeito aos coeficientes dos termos da expansão em série de Taylor da transformada de Fourier da

função densidade de probabilidade da variável (Hyvärinen, 2001). Assim, considere uma variável aleatória x de média zero e com função densidade de probabilidade $p_x(x)$. A transformada de Fourier da fdp $p_x(x)$, definida como $\varphi(\omega)$, é dada por:

$$\varphi(\omega) = E\{\exp(j\omega x)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(j\omega x) p_x(x) dx \quad (\text{A.13})$$

Expandindo a função em série de Taylor, tem-se:

$$\varphi(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k (j\omega)^k}{k!} \right) p_x(x) dx = \sum_{k=0}^{\infty} E\{x^k\} \frac{(j\omega)^k}{k!} \quad (\text{A.14})$$

Os coeficientes da expansão são os momentos $E\{x^k\}$ de x .

Considere agora uma função $\phi(\omega)$, dada pelo logaritmo neperiano de $\varphi(\omega)$, isto é:

$$\phi(\omega) = \ln(\varphi(\omega)) = \ln(E\{\exp(j\omega x)\}) \quad (\text{A.15})$$

De forma similar ao que foi feito anteriormente, fazendo-se a expansão em série de Taylor, da função $\phi(\omega)$, vamos obter os cumulantes κ_k de x . Assim, pode-se definir os cumulantes como sendo os coeficientes dos termos da expansão em série de Taylor do logaritmo neperiano da transformada de Fourier da função densidade de probabilidade da variável aleatória. Com isso, após algumas manipulações matemáticas, pode-se chegar as relações entre as quatro primeiras cumulantes e os momentos, que são a seguir apresentadas:

$$\begin{aligned} \kappa_1 &= E\{x\} \\ \kappa_2 &= E\{x^2\} - [E\{x\}]^2 \\ \kappa_3 &= E\{x^3\} - 3E\{x^2\}E\{x\} + 2[E\{x\}]^3 \\ \kappa_4 &= E\{x^4\} - 3[E\{x^2\}]^2 - 4E\{x^3\}E\{x\} + 12E\{x^2\}[E\{x\}]^2 \\ &\quad - 6[E\{x\}]^4 \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Para entender as manipulações realizadas, consultar Hyvärinen (2001).

De uma forma geral, pode-se dizer que o k -ésimo momento estatístico de uma variável aleatória x , em que sua fdp seja $f_x(x)$, é definido por (Hyvärinen, 2001):

$$u'_k = E\{x^k\} = \int_{-\infty}^{\infty} f_x(x) x^k dx \quad (\text{A.17})$$

Em que: $E\{ \}$ é a esperança matemática de uma variável aleatória.

Para o caso discreto, estes são definidos como:

$$u'_k = E\{x^k\} = \sum_j f_x(x_j) x_j^k \quad (\text{A.18})$$

No caso do ICA, os momentos mais importantes são os de primeira até os de quarta ordem. O primeiro momento de uma variável aleatória x é a média, representada por $\bar{x}$. A partir da definição do primeiro momento, pode-se introduzir o conceito de momento central, que é definido como segue:

$$u_k = E\{(x - \bar{x})^k\} \quad (\text{A.19})$$

Observa-se assim que momento central nada mais é do que o momento em relação à média, ou seja, o momento centrado na média.

O segundo momento é denominado de correlação, enquanto que o segundo momento central é denominado de variância. Este é igual ao seu momento, quando a média, ou seja, o primeiro momento, é nulo.

O terceiro momento central, é conhecido como “*skewness*”, por indicar uma medida da assimetria da fdp. Para funções de densidade de probabilidade simétricas em torno da média, como as gaussianas, a *skewness*, ou assimetria, é zero.

Os momentos e os momentos centrais de quarta ordem, embora simples, são substituídos pela estatística de quarta ordem, denominada de curtose. A curtose diz respeito ao quarto cumulante, já discutido anteriormente, e é usada na aplicação do ICA por partilhar de algumas propriedades úteis que o momento central de quarta ordem não tem.

A.3 Independência Estatística x Correlação

A grande diferença entre o PCA e o ICA está no significado de independência estatística e decorrelação. Para exemplificar o conceito de cada um, considera-se apenas

duas variáveis aleatórias, x e y , embora se possa estender os conceitos para um caso mais geral, isto é, com mais variáveis.

Duas variáveis aleatórias são descorrelacionadas quando a covariância entre elas é zero, ou ainda (Hyvärinen, 2001):

$$c_{xy} = E\{(x - \bar{x})(y - \bar{y})\} = 0 \quad (\text{A.20})$$

Em que: c_{xy} é a covariância entre as variáveis. O que é equivalente a:

$$r_{xy} = E\{xy\} = E\{x\}E\{y\} = m_x m_y \quad (\text{A.21})$$

Em que: r_{xy} é a correlação entre as variáveis. Assim, quando duas variáveis aleatórias são descorrelacionadas, a esperança matemática do produto entre elas é igual ao produto das suas esperanças. Em outras palavras, é igual ao produto de suas médias estatísticas. Isto implica que, neste caso, a covariância é nula. No caso de as variáveis terem média zero, como acontece em muitos casos práticos, a covariância nula implicará em correlação nula, ou seja:

$$E\{xy\} = 0 \quad (\text{A.22})$$

A condição vista em (A.22) é uma condição de ortogonalidade.

Embora sejamos conduzidos a pensar que variáveis descorrelacionadas não “carregam” informações uma das outras, isso não é correto. Nesse caso, devemos tratar do conceito de independência estatística.

Duas variáveis aleatórias são independentes uma da outra se conhecido o valor de uma, esta não dar nenhuma informação com relação ao valor da outra, ou ainda, a ocorrência de uma não interfere na ocorrência da outra. Do ponto de vista matemático, duas variáveis aleatórias, x e y , são ditas ser independentes se (Hyvärinen, 2001):

$$p_{x,y}(x, y) = p_x(x)p_y(y) \quad (\text{A.23})$$

Ou seja, a densidade conjunta $p_{x,y}(x, y)$ de x e y é o produto de suas densidades marginais $p_x(x)$ e $p_y(y)$.

É fácil perceber que variáveis independentes também satisfazem (A.22), ou seja, variáveis independentes implicam em variáveis descorrelacionadas. Isso revela que a independência estatística é uma propriedade mais “forte” que a descorrelação. Quando se

tem duas variáveis independentes, elas obrigatoriamente serão descorrelacionadas. Porém, em caso destas serem descorrelacionadas, não podemos afirmar nada quanto a independência entre elas.

Um caso especial referente ao que foi dito anteriormente é o das variáveis gaussianas. Neste caso, a descorrelação implica em independência estatística. Essa peculiaridade ocorre devido ao fato que as variáveis gaussianas são descritas apenas por estatísticas de segunda ordem.

A.4 Gaussianidade

Uma variável aleatória é dita Gaussiana ou normal, se sua função densidade de probabilidade for Gaussiana. Uma importante propriedade da função de densidade Gaussiana é que esta pode ser completamente descrita pela sua média e covariância, ou seja, pode-se defini-la totalmente apenas com estatísticas de primeira e de segunda ordem. Isto porque, os momentos de alta ordem dependem somente da média e da covariância. Concluí-se facilmente que estes momentos não carregam informações novas sobre a distribuição gaussiana. Para um maior aprofundamento destas e de outras propriedades, pode-se consultar Papoulis (1991).

Uma das restrições do ICA, abordadas no capítulo 5, é a de garantir que as fontes não sejam gaussianas. Assim, maximizar a não-gaussianidade é uma sistemática para realizar a localização das componentes independentes. Para um melhor entendimento desse fato, utilizar-se-á o teorema do limite central.

Suponha-se que z seja um vetor de variáveis independentes e identicamente distribuídas. Somando-se k variáveis de z , tem-se:

$$x_k = \sum_{i=1}^k z_i \quad (\text{A.24})$$

Normalizando-se x_k , levando-se em consideração que a média e a variância crescem de forma considerada a medida que $k \rightarrow \infty$, o teorema do limite central afirma que a função densidade de probabilidade de x_k normalizada converge para uma distribuição gaussiana com média zero e variância unitária. Assim, intuitivamente, pode-se dizer que x_k tende a ser mais próxima da gaussianidade. Ainda, de forma análoga, pode-se dizer que z são mais distantes da gaussianidade.

Na aplicação do ICA, utiliza-se o teorema do limite central as fontes independentes de modo a maximizar a não-gaussianidade dessas fontes, de forma que estas estejam o mais distante possível da gaussianidade. A seguir, apresentam-se duas, dentre várias, formas clássicas de medir a não-gaussianidade, que são: a curtose e a negentropia.

A.4.1 Curtose

Como já visto anteriormente, a curtose trata-se do cumulante de quarta ordem de uma variável aleatória. Os cumulantes, de primeira à quarta ordem, mencionadas anteriormente, são dadas por:

$$\begin{aligned}
 \kappa_1 &= E\{x\} \\
 \kappa_2 &= E\{x^2\} - [E\{x\}]^2 \\
 \kappa_3 &= E\{x^3\} - 3E\{x^2\}E\{x\} + 2[E\{x\}]^3 \\
 \kappa_4 &= E\{x^4\} - 3[E\{x^2\}]^2 - 4E\{x^3\}E\{x\} + 12E\{x^2\}[E\{x\}]^2 \\
 &\quad - 6[E\{x\}]^4
 \end{aligned} \tag{A.25}$$

Para o caso em que a média, que é o primeiro momento, ser nula, as equações dos cumulantes resultam em:

$$\begin{aligned}
 \kappa_1 &= 0 \\
 \kappa_2 &= E\{x^2\} \\
 \kappa_3 &= E\{x^3\} \\
 \kappa_4 &= E\{x^4\} - 3[E\{x^2\}]^2
 \end{aligned} \tag{A.26}$$

Assim, para uma média zero, tem-se que a curtose é dada por:

$$curt(x) = E\{x^4\} - 3[E\{x^2\}]^2 \quad (A.27)$$

Normalizando-se a equação (A.27), tem-se:

$$\tilde{c}(x) = \frac{E\{x^4\}}{[E\{x^2\}]^2} - 3 \quad (A.28)$$

Esta versão da curtose normalizada é comumente utilizada.

Algumas propriedades da curtose de relevância, diz respeito a aditividade e a não-linearidade. Tem-se assim que:

$$curt(x + y) = curt(x) + curt(y) \quad (A.29)$$

$$curt(\alpha x) = \alpha^4 curt(x) \quad (A.30)$$

Outra característica muito importante da curtose, que é a mais importante na análise e aplicação neste trabalho, é a que assegura que esta é uma forma de medida de não-gaussianidade de uma variável aleatória. Para variáveis que tem distribuição gaussiana, a curtose é zero. Diferente do quarto momento, que não é zero para variáveis gaussianas (Hyvärinen, 2001). Entretanto, apesar do quarto momento ser diferente de zero para variáveis gaussianas, o mesmo não traz informações novas com relação a variável, já que esse momento pode ser calculado por meio do momento de primeira e segunda ordem, como já mencionado anteriormente.

Assim, tendo-se como objetivo maximizar a não-gaussianidade, pretendendo-se achar as variáveis independentes, pode-se utilizar a curtose como uma medida de não-gaussianidade, maximizando-a.

A.4.2 Negentropia

No item A.1.2, inseriu-se os conceitos de entropia e algumas características que essa medida traz. Sabe-se que a entropia é nada mais que a informação média associada às observações relativas à variável aleatória, ou seja, a entropia está ligada a quantidade de

informação que essa variável aleatória traz. Quanto mais incerta, ou aleatória, maior será a informação e, conseqüentemente, maior a entropia.

Provou-se, também no item A.1.2, que a entropia será máxima quando a função densidade de probabilidade for uniforme. Por outro lado, sabe-se que a distribuição mais incerta de acontecer, isto é, a mais aleatória possível, é a distribuição gaussiana. Assim, conclui-se que, comparando-se com outras distribuições de mesma variância, a distribuição gaussiana é a de maior entropia.

A partir destas afirmações, introduz-se uma medida de não-gaussianidade que é nula para variáveis aleatórias gaussianas. Esta é a negentropia. A negentropia é uma versão normalizada da entropia e é definida como segue:

$$J(x) = H(x_{Gauss}) - H(x) \quad (A.31)$$

Em que: $H(x_{Gauss})$ é a entropia do vetor gaussiano aleatório x_{Gauss} , que tem mesma média e variância que o vetor x , e $H(x)$ é a entropia de x .

Fazendo-se uma interpretação da equação da negentropia, conclui-se que esta é nula para variáveis gaussianas, pois $H(x_{Gauss}) = H(x)$. Além disso, a negentropia será sempre não-negativa.

Assim, tendo-se como objetivo maximizar a não-gaussianidade, pretendendo-se achar as variáveis independentes, pode-se utilizar a negentropia como uma medida de não-gaussianidade. Isto acontece quando esta é máxima.

Apêndice B – Algoritmo FastICA

O algoritmo FastICA, proposto por Hyvärinen e Oja (1997), implementa um método para estimação do modelo ICA, com desempenho computacional altamente eficiente. Este algoritmo maximiza uma função objetivo, que é relacionada a não-gaussianidade, tal que a maximização dessa função corresponde a maximizar a não-gaussianidade. Neste trabalho, o algoritmo em questão utiliza uma aproximação da negentropia segundo a equação (4.25), como medida de não-gaussianidade. A formulação geral será brevemente descrita a seguir e, para conhecimentos mais aprofundados, consultar Hyvärinen (2001).

Por meio do método de Lagrange e do método de Newton, Hyvärinen (2001) mostra que a aproximação da negentropia fornece uma função objetivo para recuperação de uma componente independente, sujeito à restrição $E\{(y_i)^2\} = 1$. Isto é: o ajuste de uma das linhas da matriz de separação W , denotada por $\mathbf{w}_i^T$, de forma que $y_i = \mathbf{w}_i^T \mathbf{z}$ corresponda a estimativa de uma das componentes independentes. Assim, devem-se seguir os seguintes passos:

Tabela B.1 – Algoritmo FastICA usando negentropia

- 1) Centralizar e branquear os dados observados $\mathbf{x}$, obtendo o vetor $\mathbf{z}$
- 2) Escolher aleatoriamente valores iniciais para o vetor $\mathbf{w}$ com norma unitária
- 3) Calcular: $\mathbf{w}^* \leftarrow E\{\mathbf{z}g(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\} - E\{g'(\mathbf{w}^T \mathbf{z})\}\mathbf{w}$
- 4) Normalizar o novo $\mathbf{w}^*$ obtido no passo 3: $\mathbf{w} \leftarrow \frac{\mathbf{w}^*}{\|\mathbf{w}^*\|}$
- 5) Em caso de não convergir, voltar ao passo 3

Atingir a convergência significa que os valores antigo e novo de $\mathbf{w}$ apontam na mesma direção. Deve-se escolher a função não linear g , derivada de funções G não quadráticas. As funções derivadas são basicamente as da equação (B.1), (B.2) e (B.3).

$$g_1(y) = \tanh(a_1 y) \quad (\text{B.1})$$

$$g_2(y) = y \exp\left(-\frac{y^2}{2}\right) \quad (\text{B.2})$$

$$g_3(y) = y^3 \quad (\text{B.3})$$

Em que: $1 \leq a_1 \leq 2$ é uma constante, frequentemente com valor unitário.

O algoritmo utilizando a negentropia só estima um componente independente em cada execução. Portanto, para estimar todos os componentes, faz-se necessário executar o algoritmo várias vezes. Entretanto, para garantir que todos os componentes sejam encontrados, é necessário restringir as execuções de tal forma que as estimativas de cada um sejam ortogonalizadas. Isto garante que os componentes calculados sejam diferentes. A ortogonalização pode ser feita de duas maneiras, quais sejam: deflacionária ou simétrica.

De acordo com Morimitzu (2008), as configurações utilizando negentropia com ortogonalização deflacionária da matriz e a função de não-linearidade cúbica apresentaram os melhores resultados. Assim, utilizou-se esta configuração neste trabalho.

Nesta abordagem, utiliza-se o processo de ortogonalização de Gram-Schmidt. Os vetores são ortogonalizados um de cada vez, tal que a ortogonalização do componente seguinte depende dos anteriores. Após estimar o p -ésimo vetor $\mathbf{w}_p$, subtrai-se de $\mathbf{w}_p$ as projeções dele sobre os demais vetores estimados anteriormente, e então se renormaliza o vetor $\mathbf{w}_p$.

Tabela B.2 – Algoritmo FastICA usando negentropia com ortogonalização deflacionária

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1) Escolher número de componentes independentes k a ser estimado. Definir $p \leftarrow 1$ 2) Escolher aleatoriamente valores iniciais para o vetor $\mathbf{w}_p$ com norma unitária 3) Executar uma iteração do algoritmo FastICA para estimar uma unidade de $\mathbf{w}_p$ 4) Realizar a ortogonalização: $\mathbf{w}_p \leftarrow \mathbf{w}_p - \sum_{j=1}^{p-1} (\mathbf{w}_p^T \mathbf{w}_j) \mathbf{w}_j$ 5) Normalizar $\mathbf{w}_p$ 6) Em caso de não convergir, voltar ao passo 3 7) Definir $p \leftarrow p + 1$. Se $p \leq k$, voltar ao passo 2 |
|--|