



MONITORAMENTO DA CONDIÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS INDUSTRIAIS

Thiago de Sá Feital

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Orientadores: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Rio de Janeiro

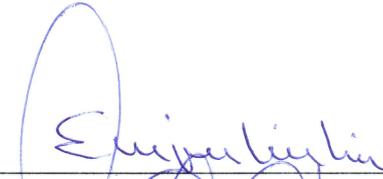
Novembro de 2011

MONITORAMENTO DA CONDIÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS INDUSTRIAIS

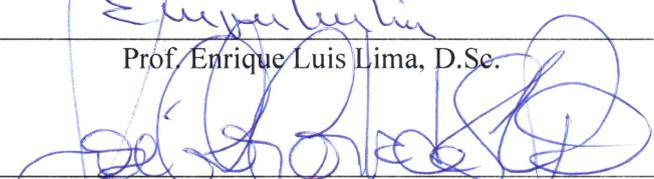
Thiago de Sá Feital

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Examinada por:



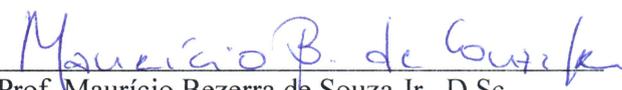
Prof. Enrique Luis Lima, D.Sc.



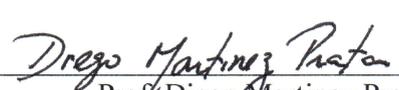
Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.



Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.



Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.



Prof. Diego Martinez Prata, D.Sc.



Dr. Mário Cesar Melo Massa de Campos, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

NOVEMBRO DE 2011

Feital, Thiago de Sá

Monitoramento da Condição de Processos Químicos Industriais/ Thiago de Sá Feital. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

XVI, 166 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Química, 2011.

Referências Bibliográficas: p. 150-166.

1. Monitoramento estatístico. 2. Análise em componentes principais. 3. Detecção de falhas. 4. Controle de qualidade. I. Lima, Enrique Luis *et al.*. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

AGRADECIMENTOS

A toda a minha família, em especial a meus pais. Obrigado por vocês estarem sempre presentes.

Aos irmãos que conheci na Rural: Allan, Ana, Diogo, Fred, Julio, Laranja, Lílian, Lú, Marcos, Pierre, Plínio, Praga, Talita, Thiago, Tupa e Willian. Espero encontrar todos vocês no aniversário de 10 anos da turma.

Aos professores da Rural, Márcia e Maurício. Obrigado pelas inúmeras oportunidades, pelas primeiras aulas de engenharia química e, principalmente, pela amizade.

A minha turma do PEQ, em especial para Adit, Dirceu, Ícaro, Juliana, Kese, Luciano e Marina. Que nos encontremos bem por aí.

Aos amigos trogloditas do LMSCP: Alessandra, André Alberton, André Quelhas, Carol, Diego, Eduardo Lemos, Eduardo Lima, Fabrício, Isaías, João, Normando e Schwaab. Obrigado pelas conversas, risadas e amizade.

Aos professores: Evaristo, Geraldo Lippel, José Herskovits, Márcia Dezotti, Príamo e Victor Teixeira. Obrigado pelas disciplinas, conselhos e oportunidades.

Ao professor Maurício de Souza Jr. e ao engenheiro Mário Campos. Obrigado pelas oportunidades e ajuda no trabalho de tese.

Aos meus orientadores Enrique, Zé e Uwe. Muito obrigado pelo altíssimo nível dos ensinamentos, oportunidades, conselhos, piadas, puxões de orelha e, principalmente, pela amizade que vou levar comigo. Valeu!

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Ao Flamengo, por tudo.

A você que está lendo esta tese e justificando o meu trabalho.

E a todos que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho, o meu muito obrigado!

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.).

MONITORAMENTO DA CONDIÇÃO DE PROCESSOS QUÍMICOS INDUSTRIAIS

Thiago de Sá Feital

Novembro, 2011

Orientadores: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Programa: Engenharia Química

Este trabalho apresenta dois procedimentos para monitoramento da condição de processos químicos industriais, utilizando apenas dados registrados em condições normais de operação. Estes procedimentos baseiam-se, principalmente, em técnicas relacionadas com a análise em componentes principais, para a modelagem empírica dos dados do processo, e em testes estatísticos, para a etapa de detecção de falhas. Os desempenhos dos sistemas de monitoramento propostos são avaliados com dados industriais simulados e reais e por comparação com o desempenho de sistemas convencionais propostos na literatura. O primeiro sistema proposto é adequado para o monitoramento de processos com comportamento probabilístico de suas variáveis desconhecido. Três problemas particulares são discutidos, mostrando-se a necessidade de implementação do sistema proposto. O segundo sistema é direcionado para o monitoramento de processos que operam em múltiplos pontos de operação. Mais uma vez, três problemas particulares são destacados para realçar a importância de tal sistema proposto. Em todos os casos analisados, os procedimentos aqui propostos permitem a identificação eficiente das falhas do processo, sendo por isso recomendada a implementação destes procedimentos em plantas reais.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

CONDITION MONITORING OF INDUSTRIAL CHEMICAL PROCESSES

Thiago de Sá Feital

November, 2011

Advisors: Enrique Luis Lima

José Carlos Costa da Silva Pinto

Department: Chemical Engineering

This work presents two approaches for condition monitoring of industrial chemical processes, using recorded data obtained under normal operation condition. These two approaches rely on principal component analyses, for empirical modeling of process data, and on standard statistical tests, for fault detection. The performances of the proposed monitoring systems are evaluated with simulated and real industrial data and are compared to the performance of conventional systems described in the literature. The first system is adequate to monitor processes with unknown probabilistic behavior. Three problems are then discussed, in order to highlight the need of the proposed system. The second proposed system is directed to the monitoring of processes that operate at multiple operating points. Again, three particular problems are discussed to emphasize the importance of the proposed system. In all analyzed cases, the proposed monitoring procedures allow for efficient detection of process faults, so that the implementation of the proposed procedures in real industrial sites can be encouraged and recommended.

Sumário

1. Introdução.....	1
1.1. Histórico	2
1.2. Motivação	3
1.3. Objetivo	5
1.4. Terminologia	6
1.5. Organização	8
2. Revisão bibliográfica.....	10
2.1. Início do século XX.....	11
2.2. Fim do século XX.....	11
2.3. Início do século XXI	15
2.4. Revisões e classificações da área.....	18
2.5. Comentários finais.....	19
3. Análise em componentes Principais	21
3.1. Fundamentos preliminares	22
3.1.1. Estatísticas descritivas	22
3.1.2. Conceitos fundamentais da probabilidade:.....	26
3.2. Formulação e resolução da técnica de PCA.....	27
3.3. Modelagem	30
3.4. Limitações.....	35
3.5. Extensões	37
3.5.1. PCA não-linear	37
3.5.2. PCA variante no tempo e PCA dinâmico	39
3.5.3. Análise em componentes independentes (ICA)	39
3.5.4. PCA probabilístico	40
3.5.5. PCA robusto	41
3.5.6. PCA heterogêneo	42
3.6. Outras técnicas.....	42
3.6.1. Modelos causais.....	42
3.6.2. Modelos de classificação	43
3.7. Comentários finais.....	44

4. Tecnologias de monitoramento	45
4.1. <i>Tecnologia para monitoramento univariado.....</i>	46
4.1.1. Cartas de controle de Shewhart	47
4.1.2. Regras de decisão	48
4.1.3. Cartas de controle CUSUM e EWMA	49
4.2. <i>Tecnologia para monitoramento multivariado</i>	52
4.2.1. Estatísticas T^2 de Hotelling e Q (ou SPE).....	53
4.2.2. Abordagem local estatística.....	55
4.2.3. Índices para diagnóstico de falha.....	58
4.3. <i>Tecnologia para monitoramento usando modelos fundamentais.....</i>	62
4.3.1. Reconciliação de dados	63
4.4. <i>Comentários finais.....</i>	66
5. Aplicações industriais	68
5.1. <i>Processo de reforma catalítica.....</i>	69
5.1.1. Mudança de operação no processo	72
5.1.2. Falha em sensores do processo	74
5.1.3. Falhas simultâneas no processo	77
5.2. <i>Processo de produção de eteno</i>	79
5.3. <i>Processo de debutanização</i>	89
5.4. <i>Comentários finais.....</i>	96
6. Monitoramento de processos com sinais desconhecidos	98
6.1. <i>Problemas com a modelagem de sinais.....</i>	99
6.1.1. Problema 1: Extração dos sinais do processo	99
6.1.2. Problema 2: Determinação do número de sinais do processo	100
6.1.3. Problema 3: Falta de um sistema de monitoramento para sinais desconhecidos	100
6.2. <i>Proposta de modelagem</i>	100
6.2.1. Estimção do modelo MLPCA.....	100
6.2.2. Determinação do número de sinais do processo.....	102
6.2.3. Correção dos componentes principais	103
6.2.4. Determinação e caracterização de sinais não-normais	104
6.3. <i>Monitoramento usando modelo proposto.....</i>	104

6.3.1. Estatística R^2 para sinais de distribuição desconhecida.....	104
6.4. <i>Aplicações industriais</i>	107
6.4.1. Processo simulado de síntese de metanol.....	107
6.4.2. Processo de produção de solventes.....	111
6.4.3. Processo de derretimento de resíduos.....	116
6.5. <i>Comentários finais</i>	121
7. Monitoramento de processos com sinais multimodais	123
7.1. <i>Problemas com modelagem de pontos de operação</i>	124
7.1.1. Problema 1: Determinação de variáveis multimodais.....	124
7.1.2. Problema 2: Determinação do número de pontos de operação	125
7.1.3. Problema 3: Falta de um sistema de monitoramento multimodal avançado	125
7.2. <i>Proposta de modelagem</i>	126
7.2.1. Técnica para determinação de agrupamentos.....	126
7.2.2. Modelo de mistura.....	128
7.3. <i>Monitoramento usando o modelo proposto</i>	128
7.3.1. Determinação do ponto de operação	128
7.3.2. Estatística χ^2 para componentes principais multimodais.....	129
7.4. <i>Aplicações industriais</i>	129
7.4.1. Processo simulado de um CSTR	129
7.4.2. Processo de produção de solventes.....	138
7.5. <i>Comentários finais</i>	143
8. Conclusões.....	145
8.1. <i>Conclusões</i>	146
8.2. <i>Sugestões para trabalhos futuros</i>	148
9. Referências bibliográficas	150

Lista de figuras

Figura 2.1: Linha histórica das metodologias usadas para monitoramento de processos.	18
Figura 2.2: Classificação das técnicas usadas para monitoramento de processos [162].	19
Figura 3.1: Sequência de uma variável.....	23
Figura 3.2: Superfície de densidade de probabilidade de duas variáveis associadas.	25
Figura 3.3: Superfície de densidade de probabilidade de duas variáveis não-associadas.	25
Figura 3.4: Sequência de duas variáveis associadas.....	26
Figura 3.5: Variáveis de um processo.	33
Figura 3.6: Projeção de uma observação no espaço de componentes.	34
Figura 3.7: Utilização do modelo para estimar a parcela de informação do processo contida na observação.....	35
Figura 4.1: Composição de uma variável medida de um processo industrial.	46
Figura 4.2: Cartas de controle de Shewhart.....	48
Figura 4.3: Regras de decisão.....	49
Figura 4.4: Carta de controle CUSUM.....	50
Figura 4.5: Carta de controle EWMA.	51
Figura 4.6: Carta de controle de Shewhart.	52
Figura 4.7: Comparação entre os monitoramentos univariados e multivariado.....	53
Figura 4.8: Estatísticas T^2 de Hotelling e Q	55
Figura 4.9: Abordagem local para dados que extrapolam o modelo PCA.	57
Figura 4.10: Abordagem local para dados com falha em uma das variáveis.	58
Figura 4.11: Esquema da técnica de contribuições.....	60
Figura 4.12: Esquema da técnica de colinearidades.....	61
Figura 4.13: Esquema da técnica de reconstruções.	62
Figura 4.14: Reconciliação de dados usando modelo fundamental.....	64
Figura 4.15: Função objetivo usada para detecção de falha e estimativa do sinal de falha.	65
Figura 5.1: Esquema do processo 1.	69
Figura 5.2: Dados do processo 1.	70
Figura 5.3: Determinação do número de componentes principais para o modelo PCA.	71
Figura 5.4: Estatísticas T^2 e Q para o processo 1.....	71

Figura 5.5: Dados com mudança anormal.	72
Figura 5.6: Estatísticas T^2 e Q para os dados anômalos.	73
Figura 5.7: Componentes principais para o processo 1.	73
Figura 5.8: Contribuições das variáveis para a Estatística T^2 no período anormal.	74
Figura 5.9: Dados com falha em um dos sensores.	75
Figura 5.10: Estatísticas T^2 e Q para os dados com falha em um sensor.	76
Figura 5.11: Identificação do sensor com falha usando técnicas de diagnóstico.	76
Figura 5.12: Reconstrução do sensor em falha usando a técnica de reconstrução.	77
Figura 5.13: Dados em condições anormais e com falha em um dos sensores.	78
Figura 5.14: Estatísticas T^2 e Q para os dados anômalos e com falha no sensor.	78
Figura 5.15: Esquema do processo 2.	79
Figura 5.16: Dados do processo 2.	80
Figura 5.17: Resultado da técnica VRE para o processo 2.	81
Figura 5.18: Variâncias dos componentes do processo 2.	82
Figura 5.19: Estatística T^2 para o processo 2.	83
Figura 5.20: Contribuições da Estatística T^2 para o processo 2.	84
Figura 5.21: Região de confiança para o processo 2.	85
Figura 5.22: Mapa do processo 2.	86
Figura 5.23: Contribuições da Estatística Q para o processo 2.	87
Figura 5.24: Estatísticas da abordagem local para o processo 2.	88
Figura 5.25: Parâmetros responsáveis pela falha de incrustação.	88
Figura 5.26: Esquema do processo 3.	89
Figura 5.27: Dados do processo 3.	91
Figura 5.28: Resultado da técnica VRE para o processo 3.	92
Figura 5.29: Variâncias dos componentes do processo 3.	92
Figura 5.30: Estatísticas T^2 e Q para o processo 3.	93
Figura 5.31: Comportamento da falha no processo 3.	94
Figura 5.32: Mapa dos componentes principais do processo 3.	94
Figura 5.33: Contribuições da Estatística T^2 para o processo 3.	95
Figura 5.34: Contribuições da Estatística Q para o processo 3.	95
Figura 6.1: Ilustração da Estatística R^2 [175].	105
Figura 6.2: Esquema do processo 1 [168].	107
Figura 6.3: Elementos da matriz de covariância entre sinais e resíduos.	109
Figura 6.4: Valores característicos dos componentes.	110

Figura 6.5: Regras de determinação do número de componentes principais.	111
Figura 6.6: Esquema do processo 2.	112
Figura 6.7: Testes EOE e JB.	112
Figura 6.8: Resultado do sistema de monitoramento convencional para o processo 2.	113
Figura 6.9: Resultado do sistema de monitoramento proposto para processo 2.	114
Figura 6.10: Variável em condição de falha.	115
Figura 6.11: Variáveis em condição de falha.	115
Figura 6.12: Esquema do processo 3.	117
Figura 6.13: Testes EOE e JB.	117
Figura 6.14: Resultado da aplicação da técnica de PCA nos dados do processo 3.	118
Figura 6.15: Resultado da aplicação da técnica de ICA nos dados do processo 3.	118
Figura 6.16: Resultado do sistema de monitoramento convencional para o processo 3.	119
Figura 6.17: Resultado do sistema de monitoramento proposto para o processo 3.	120
Figura 6.18: Período de ciclos anormais no processo 3.	121
Figura 7.1: Ilustração do processo.	130
Figura 7.2: Simulação de desativação catalítica.	132
Figura 7.3: Resultado do teste EOE para o processo 1.	133
Figura 7.4: Aplicação da técnica proposta para o processo 1.	134
Figura 7.5: Estatísticas T^2 e Q para o processo 1.	136
Figura 7.6: Estatística BIP para o processo 1.	136
Figura 7.7: Estatística χ^2 para o processo 1.	137
Figura 7.8: Mapa dos componentes usados para modelagem e para validação.	138
Figura 7.9: Aplicação da técnica proposta para o processo 2.	139
Figura 7.10: Resultado da técnica proposta para o processo 2.	140
Figura 7.11: Estatísticas T^2 e Q para o processo 2.	141
Figura 7.12: Estatística BIP para o processo 2.	141
Figura 7.13: Estatística χ^2 para o processo 2.	142
Figura 7.14: Início da condição de falha no processo 2.	143

Lista de tabelas

Tabela 3.1 – Técnicas para determinação do número de sinais	31
Tabela 3.2 – Técnicas para determinação do número de sinais	32
Tabela 5.1 – Variáveis do processo 2	81
Tabela 5.2 – Variáveis do processo 3	90
Tabela 6.1 – Parâmetros usados para gerar as variáveis independentes.....	108
Tabela 6.2 – Parâmetros usados para gerar as variáveis dependentes.....	108
Tabela 7.1 – Variáveis unimodais do processo 1.	131
Tabela 7.2 – Variáveis multimodais do processo 1.....	131
Tabela 7.3 – Parâmetros do processo 1.	131
Tabela 7.4 – Estrutura de controle do processo 1.....	132
Tabela 7.5 – Variâncias dos erros das variáveis do processo 1.....	134
Tabela 7.6 – Parâmetros do modelo de mistura do componente multimodal.....	135

Lista de siglas

AAN	Rede auto-associativa (<i>Auto-Associative Network</i>)
AIC	Cr�terio de informa�o de Akaike (<i>Akaike Information Criterion</i>)
ANN	Rede neuroral artificial (<i>Artificial Neural Network</i>)
ARCH	Autorregressivo com heterocedasticidade condicional (<i>Auto-Regressive Conditional Heteroskedasticity</i>)
BIP	Probabilidade baseada em infer�ncia Baysiana (<i>Bayesian Inference-based Probability</i>)
CUSUM	Soma cumulativa (<i>Cumulative Sum</i>)
CVA	An�lise de vari�veis can�nicas (<i>Canonical Variate Analysis</i>)
EOE	Igualdade de valores caracter�sticos (<i>Equality Of Eigenvalues</i>)
EWMA	M�dia m�vel ponderada exponencialmente (<i>Exponentially Weighted Moving Average</i>)
FDA	An�lise discriminante de Fisher (<i>Fisher Discriminant Analysis</i>)
ICA	An�lise em componentes independentes (<i>Independent Component Analysis</i>)
DICA	ICA din�mico (<i>Dynamic ICA</i>)
JB	Jarque-Bera
LDA	An�lise discriminante linear (<i>Linear Discriminant Analysis</i>)
MAD	Desvio absoluto m�dio (<i>Median Absolute Deviation</i>)
NIPALS	M�nimos quadrados parciais por itera�es n�o-lineares (<i>Nonlinear Iterative PARTial Least Squares</i>)
PCA	An�lise em componentes principais (<i>Principal Component Analysis</i>)
DPCA	PCA din�mico (<i>Dynamic PCA</i>)
EWMPCA	PCA m�vel ponderado exponencialmente (<i>Exponentially Weighted Moving PCA</i>)
FPCA	PCA funcional (<i>Functional PCA</i>)
GPCA	PCA generalizado (<i>Generalized PCA</i>)
IPCA	PCA iterativo (<i>Iterative PCA</i>)
KPCA	PCA por fun�es n�cleo (<i>Kernel PCA</i>)
MLPCA	PCA por m�xima verossimilhan�a (<i>Maximum Likelihood PCA</i>)
MWPCA	PCA por janela m�vel (<i>Moving Window PCA</i>)

NLPCA	PCA não-linear (<i>Nonlinear PCA</i>)
RPCA	PCA recursivo (<i>Recursive PCA</i>) ou PCA robusto (<i>Robust PCA</i>)
SIMPCA	Método de identificação de subespaço por PCA (<i>Subspace Identification Method via PCA</i>)
PCR	Regressão por componentes principais (<i>Principal Component Regression</i>)
PLS	Mínimos quadrados parciais (<i>Partial Least Squares</i>) ou Projeção para estrutura latente (<i>Projection to Latent Structures</i>)
PRESS	Soma dos quadrados dos erros de predição (<i>PRedicted Error Sum of Squares</i>)
RSS	Soma dos quadrados dos resíduos (<i>Residual Sum of Squares</i>)
SMI	Identificação de modelos de subespaço (<i>Subspace Model Identification</i>)
SPE	Quadrado do erro de predição (<i>Squared Prediction Error</i>)
SVDD	Descrição de dados por vetor suporte (<i>Support Vector Data Description</i>)
SVI	Índice de validação de sensor (<i>Sensor Validity Index</i>)
UIO	Observador com entrada desconhecida (<i>Unknown Input Observer</i>)
VPC	Correlação parcial de Velicer (<i>Velicer's Partial Correlation</i>)
VRE	Variância do erro de reconstrução (<i>Variance of the Reconstruction Error</i>)

Nomenclatura

x	Observação de uma variável
\mathbf{x}	Vetor de variáveis (ou observações de uma variável)
\mathbf{X}	Matriz de observações \times variáveis
μ_x	Média da variável x
σ_x^2	Variância da variável x
$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}$ e $\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{xx}}$	Matrizes de covariâncias das variáveis \mathbf{x} (amostral e populacional)
λ	Valor característico
\mathbf{v}	Vetor característico
$\mathbf{\Lambda}$	Matriz (diagonal) de valores característicos
\mathbf{V}	Matriz de vetores característicos
\mathbf{I}	Matriz identidade
$\mathbf{\Xi}$ e \mathbf{P}	Matrizes de mistura dos sinais do processo e dos componentes principais
s	Sinal do processo
\mathbf{s}	Vetor de sinais de um processo
$\boldsymbol{\varepsilon}$	Vetor de ruídos (erros de medição)
t	Componente principal
\mathbf{t}	Vetor de componentes principais
\mathbf{T}	Matriz de observações \times componentes principais
\hat{x}	Estimativa de determinado modelo para a variável x
$\hat{\mathbf{x}}$	Estimativas de determinado modelo para as variáveis \mathbf{x}
n_k	Número de observações
n_x	Número de variáveis medidas
n_s	Número de sinais do processo
n_t	Número de componentes principais extraídos

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Um dos maiores desafios enfrentados pelos engenheiros de processos na atualidade é o desenvolvimento, implementação e manutenção de sistemas que façam o gerenciamento de equipamentos e processos complexos e sejam ao mesmo tempo operados com confiança e relativa facilidade. Com estes sistemas, é possível assegurar a qualidade dos produtos, a perda mínima de material e a segurança das pessoas, dos equipamentos e do ambiente. Assim, é possível agregar valor ao processo e aos produtos. Portanto, o foco deste trabalho de tese é o desenvolvimento e implementação de procedimentos que integrem um sistema para lidar com estas deficiências e necessidades das indústrias químicas.

Essa área de atuação e pesquisa é relativamente antiga e tem recebido diferentes nomes ao longo dos anos, como “controle estatístico de processos” (*statistical process control*), “detecção e isolamento de falhas” (*fault detection and isolation*), “gestão de situações anormais” (*abnormal situation management*) e, mais recentemente, “monitoramento da condição de processos” (*process condition monitoring*). Este documento adota o nome mais recente e trata mais especificamente dos processos químicos industriais.

Devido ao avanço da tecnologia química, falhas cada vez mais impactantes demandam grande atenção e investimento por parte das indústrias e do meio acadêmico em sistemas de monitoramento cada vez mais avançados. A seguir é apresentado um breve histórico da área de controle de qualidade, em que teve início o controle estatístico de processos. Em seguida, o estágio atual e a dimensão dos problemas gerados por falhas em indústrias químicas são discutidos. O objetivo deste trabalho de tese e sua contribuição para a ciência são discutidos em seguida. A terminologia e a organização deste documento são apresentadas ao final deste capítulo.

1.1. Histórico

Esta seção apresenta um breve histórico da área de controle de qualidade, segundo apresentado pela Sociedade Americana de Qualidade [1].

A preocupação com a qualidade dos produtos e serviços comercializados surgiu no final do século XIII, na Europa medieval, quando artesãos formaram corporações visando a estabelecer normas para o controle da qualidade. Um comitê de inspeção classificava as mercadorias sem falhas com uma marca, que servia como prova de qualidade para consumidores. Esta prática foi preponderante até o início do século XIX.

Com a Revolução Industrial, o sistema fabril tornou-se predominante, fazendo com que artesãos executassem tarefas especializadas e donos de lojas supervisionassem a produção. Trabalhadores adicionais asseguravam a qualidade dos produtos por meio de auditorias e/ou inspeções, nas quais os produtos defeituosos eram reprocessados ou eliminados.

Já no início do século XX, Walter Shewhart contribuiu imensamente para o aumento da qualidade de produtos, incorporando métodos estatísticos às linhas de produção, monitorando o processo como um todo.

Mais tarde, quando os Estados Unidos entraram na Segunda Guerra Mundial em 1941, a quantidade de equipamentos militares a serem produzidos demandou atenção especial à qualidade, uma vez que o desempenho dos produtos entregues por diferentes indústrias deveria ser compatível. A utilização de técnicas de amostragem para aceleração da inspeção e o financiamento de cursos de capacitação em técnicas de controle estatístico de processos para os fornecedores de armamentos foram medidas tomadas pelas forças armadas para o aumento da qualidade dos produtos.

Após a Segunda Guerra Mundial, o Japão iniciou uma revolução na qualidade de seus produtos por meio de um novo sistema de gerenciamento e recebendo empresas e especialistas estrangeiros, como W. Edwards Deming e Joseph Juran. O novo sistema focava no melhoramento dos processos organizacionais por meio dos profissionais envolvidos. Isto tornou o Japão um grande exportador mundial de produtos de alta qualidade e baixos preços.

A resposta dos Estados Unidos, que perdera grande parte dos setores do mercado internacional, veio com um sistema semelhante ao japonês chamado de gestão da qualidade total (*total quality management*), abrangendo toda a organização. Outras iniciativas continuaram a seguir esta tendência de busca por qualidade, como a ISO (*International Organization for Standardization*) série 9000.

Um típico sistema atual de gestão de qualidade total apresenta alguns procedimentos e ferramentas fundamentais, como o controle estatístico de processos, a análise de dados, a análise de tendências, o projeto de experimentos, etc [2].

1.2. **Motivação**

O que antes começara como uma busca exclusiva por qualidade e lucro, com o passar dos anos tornou-se mais amplo, envolvendo segurança, preservação ambiental e

reputação. Diversas indústrias e plataformas de petróleo foram e têm sido palco de acidentes causadores de grande devastação e prejuízos em geral. Muitas delas ainda encobrem os verdadeiros fatos, fazendo com que os mesmos problemas perdurem [3]. A causa principal destes problemas e de 35% do número total de explosões é a falha no controle das reações químicas. Os principais fatores contribuintes são rupturas de equipamentos (27%), falhas humanas (18%) e procedimentos indevidos (18%). No caso de incêndios, as causas principais são vazões excessivas ou liberações de fluidos inflamáveis (18%), superaquecimento ou superfícies superaquecidas (16%), falhas em tubulações ou ajustes (11%) e pane elétrica (11%) [3].

Em termos gerais de acidentes em indústrias químicas, 25% são explosões ou incêndios e 71% são liberações de gases tóxicos na atmosfera, principalmente amônia e hidrocarbonetos. As causas gerais mais frequentes são falhas em equipamentos (29%), falhas operacionais (21%), cálculos inadequados de material (16%), problemas no processo (11%) e problemas na mecânica dos materiais (9%) [3].

Um dos piores acidentes industriais da história ocorreu na cidade de Bhopal, na Índia, em dezembro de 1984. Uma planta industrial da *Union Carbide* liberou 41 toneladas de gás tóxico (isocianato de metila) para a atmosfera, devido à ruptura de uma válvula de segurança provocada pelo aumento de pressão em um tanque. Uma reação exotérmica desencadeada pela entrada de água no tanque foi a causa do problema, que matou cerca de 2000 pessoas instantaneamente e milhares de outras mais tarde, devido aos efeitos colaterais [4].

Um dos maiores vazamentos de óleo da história ocorreu recentemente em uma plataforma da BP (*British Petroleum*), *Deepwater Horizon*, no Golfo do México, Estados Unidos, em abril de 2010. Cientistas estimam que cerca de cinco milhões de barris de óleo vazaram do poço em águas profundas durante 86 dias, devido a explosões causadas por falhas em série: aumento anormal da pressão, ruptura da sonda marinha e liberação e combustão de metano em alta pressão. Ao todo foram 11 mortes, 17 feridos e 4 estados americanos atingidos [5].

Relatos sobre outros acidentes significativos em indústrias químicas podem ser encontrados em [3,6]. Alguns destes acidentes geram prejuízos da ordem de bilhões de dólares para as indústrias, além de ferir suas reputações e influenciar no mercado financeiro. Em 2001, no Brasil, o acidente com a plataforma P-36, então maior do mundo em capacidade de produção, causou 7% de desvalorização da Petrobras logo no primeiro dia [7].

Todos estes grandes acidentes são sempre bastante noticiados devido às perdas causadas. Contudo, falhas rotineiras de menores proporções também exercem impacto direto sobre a segurança dos operadores, a qualidade dos produtos, a perda de material, o desgaste de equipamentos e a perda da confiabilidade. No geral, o custo das falhas para a sociedade é da ordem de bilhões de dólares todos os anos. Em 2003, estimava-se que somente a indústria petroquímica americana gastava aproximadamente 20 bilhões de dólares por ano em prejuízos. Atualmente estes valores podem ser muito maiores. Para a economia britânica, os acidentes custavam aproximadamente 27 bilhões de dólares ao ano [8].

1.3. Objetivo

Os sistemas de monitoramento de processos que podem monitorar equipamentos e processos complexos em tempo real, identificando quedas de desempenho, prevendo possíveis cenários de falha, detectando e diagnosticando falhas, recomendando fazer manutenções corretivas e gerando ações de controle, tornam-se cada vez mais necessários, em virtude do custo elevado das falhas para as indústrias. Há, evidentemente, uma série de desafios práticos durante a elaboração destes sistemas, como a dificuldade de modelagem do processo ou equipamento, o sensoriamento inadequado, a integridade dos dados disponíveis, etc.

Este trabalho foi realizado no laboratório de modelagem, simulação e controle de processos (LMSCP/PEQ/COPPE/UFRJ) e está inserido no contexto de gestão de operações de processos, juntamente com outros trabalhos do laboratório, como de Diego Martinez PRATA (MSc. em 2005 e DSc. em 2009) [9,10], Kese Pontes FREITAS (MSc. em 2009) [11], Marcelo Eduardo Spessatto RAMIS (MSc. em 2009) [12], João Miguel de FARIA JR. (DSc. em 2008) [13], Rafael Noac FELDMAN (MSc. em 2007) [14] e Antônio Martins de OLIVEIRA JR. (DSc. em 2006) [15]. Também contou com a colaboração do grupo de pesquisa do professor Maurício Souza Jr., da EQ/UFRJ, que desenvolve trabalhos mais específicos para o problema de falhas. Alguns destes podem ser citados, como Martha Maria Smilgat Leão BRANDÃO (MSc. em 2010), Andrea VALDMAN (MSc. em 2010), Raquel Machado CASTRO (MSc. em 2009), Milena da Silva MACIEL (MSc. Em 2009), Giovani Santos Correia da SILVA (MSc. Em 2008) e Elenice de Souza MENDONÇA (MSc. Em 2007). Os trabalhos destes grupos representam progressos importantes alcançados nesta grande área e contribuem

enormemente para o avanço da tecnologia e ciência no país. Além dos grupos supracitados, este trabalho teve participação direta do professor Uwe Kruger, do *Chemical Engineering Program / The Petroleum Institute*.

O objetivo desta tese em particular é desenvolver e implementar sistemas de monitoramento de processos químicos industriais, utilizando os métodos estatísticos para geração de modelos matemáticos, tomada de decisões e estimação de falhas. Estes sistemas são formados por algoritmos elaborados no programa Matlab versão 7.0.

Objetivos secundários desta tese são: *i*) apresentar uma introdução da área de monitoramento de processos com base estatística para novos pesquisadores; *ii*) fornecer o ferramental necessário para modelagem de processos usando somente dados registrados e técnicas estatísticas; e *iii*) oferecer idéias e referências para pesquisas futuras.

1.4. Terminologia

Devido ao interesse crescente da área de monitoramento de processos nos últimos anos, cada vez mais encontros científicos são realizados na forma de congressos e simpósios. Dois encontros de destaque são: *IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS)* – realizado em Baden-Baden (1991), Helsinki (1994), Hull (1997), Budapest (2000), Washington (2003), Beijing (2006) e Barcelona (2009); e *IFAC Workshop On-line fault detection and supervision in the chemical process industries* – realizado em Kyoto (1986), Newark (1992), Newcastle (1995), Folaize (1998) e Cheju (2001) [22]. De modo a tornar a terminologia da área consistente, o comitê de organização do primeiro simpósio, o SAFEPROCESS, tornou-se comitê técnico em 1993 [23] e sugeriu definições com base em suas discussões. A seguir, são apresentadas algumas das principais definições dos termos em português (e seus análogos em inglês), extraídas de [23] e usadas neste documento:

Falha (<i>fault</i>)	Desvio não permitido de, no mínimo, uma propriedade característica ou parâmetro do sistema de uma condição aceitável/usual/padrão.
Pane (<i>failure</i>)	Interrupção permanente da habilidade do sistema de realizar uma função requerida sob condições de

	operações especificadas.
Mau funcionamento (<i>malfunction</i>)	Irregularidade intermitente no cumprimento de uma função desejada do sistema.
Erro (<i>error</i>)	Desvio entre valor medido ou computado (de uma variável de saída) e o “valor verdadeiro” (sempre desconhecido), especificado ou teoricamente correto.
Distúrbio (<i>disturbance</i>)	Entrada desconhecida (e não-controlável) atuando no sistema.
Perturbação (<i>perturbation</i>)	Entrada atuando no sistema, que resulta em um desvio do estado corrente.
Resíduo (<i>residue</i>)	Indicador de falha, baseado no desvio entre medições e cálculos de equações ou modelos.
Sintoma (<i>symptom</i>)	Mudança do comportamento normal de uma quantidade observável.
Detecção de falhas (<i>fault detection</i>)	Determinação de falhas presentes em um sistema e do tempo de detecção.
Isolamento de uma falha (<i>fault isolation</i>)	Determinação do tipo, local e tempo de detecção de uma falha. Segue a detecção da falha.
Identificação de uma falha (<i>fault identification</i>)	Determinação do tamanho e comportamento variante no tempo de uma falha. Segue o isolamento da falha.
Diagnóstico de falhas (<i>fault diagnosis</i>)	Determinação do tipo, tamanho, local e tempo de detecção de uma falha. Segue detecção de falha. Inclui isolamento e identificação de falha.
Monitoramento (<i>monitoring</i>)	Tarefa contínua em tempo real de determinação das condições de um sistema físico, por meio de registro de informações, reconhecendo e indicando anomalias em seu comportamento.
Supervisão (<i>supervision</i>)	Monitoramento de um sistema físico e realização de ações apropriadas para manter a operação no caso de falhas.
Redundância analítica (<i>analytical redundancy</i>)	Uso de duas ou mais maneiras (não necessariamente idênticas) para determinar uma variável, onde uma delas utiliza um modelo matemático do processo de forma

analítica.

É importante citar alguns termos relacionados com comportamento anormal de processos, mas usados em outras linhas de pesquisa [10]:

Erro grosseiro (<i>Gross error</i>)	Originário de eventos não aleatórios, tendo pouca ou nenhuma ligação com o valor medido. Invalida a base estatística das técnicas convencionais de monitoramento.
Desvio sistemático (<i>bias</i>)	Classe de erro grosseiro. São valores consistentemente mais altos ou mais baixos das medidas em relação aos valores reais.
Valor espúrio (<i>outliers</i>)	Classe de erro grosseiro. Medida obtida a partir de algum comportamento anormal, resultante de distúrbios não medidos.

Além dessas definições, outras provenientes de linhas de pesquisa mais recentes também se tornaram importantes, como:

Prognóstico de falhas (<i>fault prognosis</i>)	Determinação da iminência de uma falha e das estimativas do tempo e da probabilidade em que irá ocorrer [24].
Gestão de falhas (<i>fault management</i>)	Prática de gerar reações automáticas para continuação da operação após a detecção de falhas [25].
Tolerância a falhas (<i>fault tolerance</i>)	Habilidade do sistema em gerir falhas inevitáveis [22].

1.5. Organização

Este documento é organizado da maneira descrita a seguir. O Capítulo II apresenta uma revisão bibliográfica na forma cronológica, ressaltando os principais desenvolvimentos obtidos em cada uma das vertentes da área ao longo dos anos. Os Capítulos III, IV e V oferecem uma base de ferramentas e exemplos para a compreensão dos métodos utilizados neste trabalho. Os Capítulos VI e VII apresentam o

desenvolvimento dos sistemas de monitoramento de processos propostos nesta tese, bem como os resultados de suas aplicações. Estes capítulos representam as principais contribuições deste trabalho de tese, tendo gerado o artigo:

FEITAL, T.S., KRUGER, U., XIE, L., SCHUBERT, U., LIMA, E.L., PINTO, J.C., “A unified statistical framework for monitoring multivariate systems with unknown source and error signals”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 104, pp. 223-232, 2010.

O Capítulo VIII resume todos os resultados obtidos, discute vantagens e desvantagens dos sistemas, conclui o trabalho de tese e aponta tendências para trabalhos futuros. Finalmente, as referências do texto são apresentadas no Capítulo IX.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este capítulo apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre os principais desenvolvimentos observados na área de monitoramento de processos nas últimas décadas. As mais importantes revisões da área e as classificações mais aceitas também são apresentadas ao final do capítulo, bem como alguns comentários finais.

2.1. Início do século XX

No ano 1901, o artigo de Karl PEARSON [26] introduziu a análise em componentes principais (PCA), que é atualmente uma das técnicas estatísticas mais usadas em sistemas de monitoramento de processos. Neste artigo, a técnica de PCA é interpretada como sendo “a linha ou plano de melhor ajuste de um conjunto de pontos”; ou seja, um modelo com base apenas nos dados analisados.

Nas décadas de 1920 e 1930, os trabalhos de Walter Shewhart, realizados nos *Bell Laboratories*, podem ser considerados os primeiros métodos estatísticos desenvolvidos especificamente para a área de monitoramento da condição de processos. Nestes trabalhos, foram elaboradas cartas de controle, baseadas em limites de confiança, para as variáveis mais importantes de um dado processo. Embora estas técnicas sejam simples e univariadas, elas são utilizadas até hoje, servindo de base para o desenvolvimento de técnicas mais avançadas. Walter Shewhart é considerado o pai do controle estatístico de processos [1].

Na década de 1950 foram desenvolvidos os primeiros métodos para solução do problema denominado de detecção de mudanças, por meio de abordagens Bayesianas e não-Bayesianas e com aplicações em processos em linha. Resoluções mais formais deste problema estatístico foram obtidas somente nas décadas seguintes [27].

2.2. Fim do século XX

No início da década de 1970 foram realizados trabalhos de monitoramento na área de controle automático de processos, utilizando o conceito de redundância analítica. Esta nova área foi então chamada de detecção e isolamento de falhas. Porém, sua formulação não constitui o mesmo problema estatístico de detecção de mudanças devido à falta de critérios matemáticos precisos [27]. Os trabalhos pioneiros foram duas teses de doutorado desenvolvidas no *Massachusetts Institute of Technology* [28,29]. Estes trabalhos elaboraram metodologias de detecção e isolamento de falhas baseadas

nos erros de predição dos modelos de processos utilizando observadores, o que de fato é semelhante aos conceitos de uma estatística suficiente para detecção de mudanças. A primeira tentativa de unir a metodologia da redundância analítica às ferramentas estatísticas de decisão foi realizada no artigo de WILLSKY [30].

Nas décadas de 1980 e 1990, em função do aumento da complexidade dos processos e ao aumento da disponibilidade de dados industriais, técnicas simples para modelagem foram exaustivamente estudadas, melhoradas e aplicadas em diversos sistemas. Dentre elas, destacam-se as melhorias da técnica de PCA, como as adaptações para sistemas dinâmicos [31,32] e não-lineares [33-35], para estimação por máxima verossimilhança [36,37] e para estatística robusta [38,39], e as técnicas desenvolvidas para seleção do número de componentes principais [40,41]. Referências importantes são os livros especializados sobre o tema, JOLLIFFE [42] e JACKSON [43].

Com relação à análise em variáveis canônicas (CVA, técnica de modelagem estatística semelhante à PCA), destacam-se os trabalhos de Wallace Larimore e seus colaboradores sobre a utilização desta técnica para identificação de sistemas lineares [44] e não-lineares [45]. Estes trabalhos deram início a uma nova área de identificação de sistemas, chamada identificação de modelos de subespaço (SMI). Estas técnicas foram unificadas por OVERSCHEE e DE MOOR [46,47] e exaustivamente estudadas por Michel Verhaegen e seus colaboradores, realizando inúmeras extensões e aplicações em diferentes sistemas [48-50].

Apesar de todo o avanço observado com os métodos de modelagem baseados somente em dados de processo, também houve um avanço significativo das técnicas voltadas para o desenvolvimento de observadores e filtros, utilizando modelos fenomenológicos linearizados. Estas técnicas podem lidar com problemas de não-linearidade e com a existência de perturbações e incertezas paramétricas, por meio de observadores ou filtros que admitem a existência de entradas desconhecidas (UIO ou UIF). Destaque especial pode ser dado para Ron Patton e seus colaboradores, que estudaram o assunto profundamente [51-53].

Em relação aos desenvolvimentos direcionados especialmente para o monitoramento da condição de processos, muitos trabalhos foram apresentados com fins práticos nas décadas de 1980 e 1990. Estes trabalhos fizeram uso de ferramentas clássicas de controle de qualidade, adaptadas às técnicas de PCA e CVA. Alguns dos autores que mais contribuíram neste período foram John MacGregor, Barry Wise, Neal Gallagher, Thomas McAvoy e Ali Çinar.

Os artigos do grupo de John MacGregor [54,55] apresentaram revisões de sistemas de monitoramentos de processos, utilizando técnicas de modelagem estatística e cartas de controle univariadas e de contribuição, ambas baseadas na estatística T^2 de Hotelling, que pode ser interpretada como um índice de detecção de falhas. WISE e GALLAGHER [56] revisaram diversas técnicas de modelagem estatística e suas aplicações para o monitoramento da condição de processos. CHEN e MCAVOY [57] desenvolveram um sistema de monitoramento baseado em uma extensão dinâmica da técnica de PCA e em um horizonte de predição para antecipar a detecção de falhas. NEGIZ e ÇINAR [58] utilizaram estados gerados por CVA, a estatística T^2 de Hotelling e cartas de contribuição para propor um sistema de monitoramento de processos dinâmicos.

Com relação à combinação das técnicas de controle automático de processos e dos modelos fenomenológicos linearizados para o monitoramento da condição de processos, ainda nas décadas de 1980 e 1990, destacam-se os autores Paul Frank, Janos Gertler e Rolf Isermann.

Paul Frank e seus colaboradores generalizaram uma abordagem de detecção e isolamento de falhas por fatorização baseada em filtros em [59]; revisaram as principais técnicas de monitoramento com base em modelos em espaço de estados (como equações de paridade, banco de observadores, filtros sensíveis, identificação de parâmetros) e as principais alternativas para robustez [60]; revisaram abordagens não-lineares para diagnóstico de falhas baseadas em observadores [61,62]; e analisaram particularidades e diferenças entre modelos necessários para o controle regulatório e o monitoramento de processos em [63].

Janos Gertler revisou técnicas de monitoramento (como equações de paridade, observadores e filtros) e alternativas para robustez [64], propôs sistemas de monitoramento baseados em equações de paridade [65] e publicou um dos livros mais conhecidos nesta área [66].

Rolf Isermann e seus colaboradores propuseram equações de paridade adaptativas [67] e revisaram a área de monitoramento da condição de processos de maneira histórica [23] e introdutória [68].

Nesse mesmo período, e dando continuidade aos trabalhos estatísticos para detecção de mudanças iniciados na década de 1950, Michèle Basseville pode ser apontada como nome mais relevante. Seus trabalhos giram em torno de uma estimação local do modelo do processo para diversos tipos de aplicações, como validação de

modelos e detecção de falhas. O fundamento de seus métodos pode ser considerado como uma generalização da abordagem local assintótica, proveniente da estatística não-Bayesiana.

Michèle Basseville e seus colaboradores apresentaram uma metodologia para o desenvolvimento de sistemas de detecção de mudanças e validação de modelos para sistemas dinâmicos [69]; discutiram ferramentas determinísticas e estocásticas para geração e avaliação de resíduos para detecção e isolamento de falhas [70], aplicaram a abordagem local para monitoramento em processos dinâmicos e não-lineares, modelados por equações algébrico-diferenciais polinomiais [71]; e revisaram toda a teoria da abordagem local e suas possíveis aplicações [72], além de publicar um livro muito conceituado [27].

Com relação somente à etapa de diagnóstico de falhas, trabalhos dos mais variados segmentos foram propostos e testados nas décadas de 1980 e 1990. Esta é considerada a etapa mais complexa do monitoramento e, por isso, recebeu atenção especial da comunidade científica, sobretudo do pesquisador Venkat Venkatasubramanian. Os esforços de seu grupo fizeram uso de sistemas especialistas baseados no conhecimento qualitativo do processo [73-76], de redes neuronais para executarem o papel de classificadores de falhas [77-81], de métodos qualitativos como a análise de tendências [82] e de grafos de sinais dirigidos [83].

Ainda a respeito da etapa de diagnóstico de falhas e em relação às técnicas de modelagem estatística, Joe Qin e seu grupo de pesquisa deram início a um trabalho importante, na segunda metade da década de 90. Primeiramente foi proposto um índice de validação do desempenho dos sensores em tempo real, baseado em reconstrução (estimativas de uma variável usando outras disponíveis), que identifica quais sensores estão em condição de falha [84,85]. Posteriormente, a técnica foi generalizada para: *i*) identificação de falha conhecida, *ii*) determinação do número de componentes principais para compor o modelo PCA, *iii*) estimação de dados ruins/faltantes, comuns em processos industriais e *iv*) reconciliação de dados [86-89]. Outros trabalhos de destaque foram desenvolvidos por RAICH e ÇINAR [90,91], que apresentaram uma técnica de diagnóstico baseada em colinearidade entre dados medidos e dados contendo falhas conhecidas.

2.3. Início do século XXI

Na década de 2000, o estudo de observadores para integrar sistemas de monitoramento continuou evoluindo consideravelmente, tornando-se o mais representativo dentro do segmento de controle automático de processos. Nestes trabalhos, a reconstrução da falha utilizada para diagnóstico do processo tornou-se fundamental. Alguns pesquisadores podem ser citados como bastante influentes nesta área, como Christopher Edwards, Qing Zhao e Steven Ding.

Os trabalhos de Christopher Edwards baseiam-se em observadores do tipo modo deslizante (*Sliding Mode Observers*) para detecção, isolamento e reconstrução de falhas [92,93]. Foi feito um estudo de comparação da reconstrução de falhas usando este tipo de observador e o de entradas desconhecidas (UIO), que tem sido o mais usado para esta finalidade [94]. Concluiu-se que os observadores sugeridos possuem melhor base teórica e abrangem um número maior de classes de sistemas em que podem ser aplicados do que os observadores UIO.

Nos trabalhos publicados por Qing Zhao e seus colaboradores, observadores dinâmicos são utilizados para detecção de falhas e diagnóstico baseado em reconstrução [95,96]. Este tipo de observador possui mais graus de liberdade em sua estrutura, que podem ser usados para gerar maior sensibilidade à detecção das falhas.

Os trabalhos de Steven Ding e seus colaboradores seguem uma linha mais tradicional, buscando a confecção de observadores/filtros robustos e não-lineares, para aplicações em diferentes tipos de sistemas [97-99].

Com relação ao estudo das técnicas estatísticas, diversos pesquisadores têm feito trabalhos de monitoramento baseados em diferentes tipos de modelos. Estes trabalhos propõem sistemas de monitoramento compostos pelas diversas técnicas de modelagem estatística, geradas nas décadas anteriores para suprir necessidades específicas de processos químicos. O pesquisador mais atuante nesta linha é In-Beum Lee.

In-Beum Lee e colaboradores aplicaram a técnica desenvolvida por Joe Qin, diagnóstico de falhas via reconstrução [84-89], para o modelo CVA [100]; propuseram a análise em componentes independentes dinâmicos (DICA) e índices para detecção de falhas [101]; utilizaram a técnica de PCA, baseada no critério de máxima verossimilhança, para compor um sistema de monitoramento [102]; e usaram diversas

vezes a técnica não-linear *kernel* PCA, propondo extensões dinâmicas e índices para detecção e isolamento de falhas em [103-108].

Outros trabalhos típicos neste período foram comparações entre diferentes sistemas de monitoramento de processos com base nas inúmeras técnicas de modelagem estatística. Os pesquisadores Leo Chiang, Evan Russell e Richard Braatz compararam o desempenho de alguns sistemas de monitoramento [109,110], o que rendeu um livro de caráter introdutório bastante conhecido [111].

Com o interesse crescente em técnicas de modelagem estatística, pesquisadores de outras linhas voltaram sua atenção para esta e passaram a trabalhar também com estas técnicas. Dois exemplos disto são os pesquisadores Janos Gertler e Venkat Venkatasubramanian.

Janos Gertler e seus colaboradores utilizaram o conhecimento adquirido em equações de paridade para traçar aspectos equivalentes e transferir conceitos de redundância analítica entre esta técnica e a de PCA [112-116]. Venkat Venkatasubramanian e seus colaboradores utilizaram o conhecimento adquirido com técnicas qualitativas, como grafos de sinais dirigidos e análise de tendências qualitativas, para propor sistemas híbridos destas com a técnica de PCA [117,118].

Ainda em relação às técnicas de modelagem, tem havido uma tendência de utilização das técnicas de identificação de modelos de subespaço para lidar com a dinâmica dos processos. Outro ponto de bastante interesse continua sendo o diagnóstico de falhas sem a utilização de dados contaminados. Alguns dos pesquisadores mais produtivos desta época são Uwe Kruger, Joe Qin e John MacGregor.

Uwe Kruger e seus colaboradores propuseram uma técnica de PCA dinâmica baseada em estados gerados por SMI [119]; desenvolveram uma técnica de PCA recursiva, com base em janelas móveis, mais rápida que as tradicionais [120]; aplicaram a técnica de janelas móveis à de PCA não-linear em [121], desenvolveram a abordagem local para o modelo PCA [122] e ao modelo PLS (técnica semelhante à CVA) [123]; e introduziram uma nova metodologia de reconstrução das variáveis, com base em regressão, utilizando-a para o diagnóstico de falhas [124].

Joe Qin e seus colaboradores propuseram duas técnicas de modelagem recursiva, baseada em PCA, e utilizaram-na para compor um sistema de monitoramento [125]; propuseram uma técnica de PCA dinâmica com estimativa consistente do modelo [126]; aplicaram um sistema de monitoramento com validação de sensores a uma unidade de FCC sob controle MPC [127]; revisaram as técnicas mais usadas para

monitoramento estatístico de processos [128]; desenvolveram técnicas de identificação de modelos de subespaço, propondo soluções para alguns dos problemas envolvidos neste tema [129-132]; desenvolveram um sistema de monitoramento de processos com múltiplos pontos de operação [133]; apresentaram uma técnica de diagnóstico de falhas com base na reconstrução das variáveis [134]; e desenvolveram um sistema de monitoramento de processos contínuos com prognóstico de falhas [24].

John MacGregor e colaboradores classificaram os sistemas de monitoramento e compararam um sistema, com base em técnicas estatísticas, com outro, baseado em equações de paridade e modelos fenomenológicos [135]; analisaram as semelhanças e diferenças entre as técnicas de identificação de modelos de subespaços e as generalizaram [136]; e revisaram as técnicas de isolamento de falhas, propondo uma nova com base em colinearidade [137].

Dando continuidade aos trabalhos baseados em estatística clássica não-Bayesiana, Michèle Basseville e colaboradores definiram estatisticamente os problemas de detecção, isolamento e diagnóstico de falhas e discutiram ferramentas para solução destes problemas [138]. Também realizaram diversos trabalhos, utilizando identificação de modelos de subespaço para monitoramento de vibrações (falhas estocásticas) [139-142]. Biao Huang e seus colaboradores também trabalharam com a abordagem local neste período, desenvolvendo diferentes extensões e aplicações desta metodologia [143-145].

Nesta década, também houve um interesse crescente em sistemas de monitoramento de processos com múltiplos pontos de operação, visto que estes processos são bastante comuns em indústrias químicas. Os trabalhos podem ser divididos conforme os tipos de técnicas ou modelos usados para integrar o sistema de monitoramento: *i)* modelo comum a todos os pontos operacionais [146,147], *ii)* múltiplos modelos, um para cada ponto operacional [102,148-150], e *iii)* modelo de mistura; isto é, modelo específico para processos multimodais [133,151,152].

Ainda nesta linha, Rajagopalan Srinivasan e seus colaboradores estudaram exaustivamente as transições dos processos entre pontos operacionais e propuseram sistemas de monitoramento nestes casos, usando modelos fenomenológicos e observadores/filtros [153,154], análise qualitativa de dados [155,156] e a técnica de PCA ou suas extensões [157,158].

2.4. Revisões e classificações da área

De acordo com esta apresentação histórica, é possível identificar três tipos de soluções distintas para o mesmo problema de monitoramento de processos ao longo do tempo. A Figura 2.1 ilustra esta linha histórica.

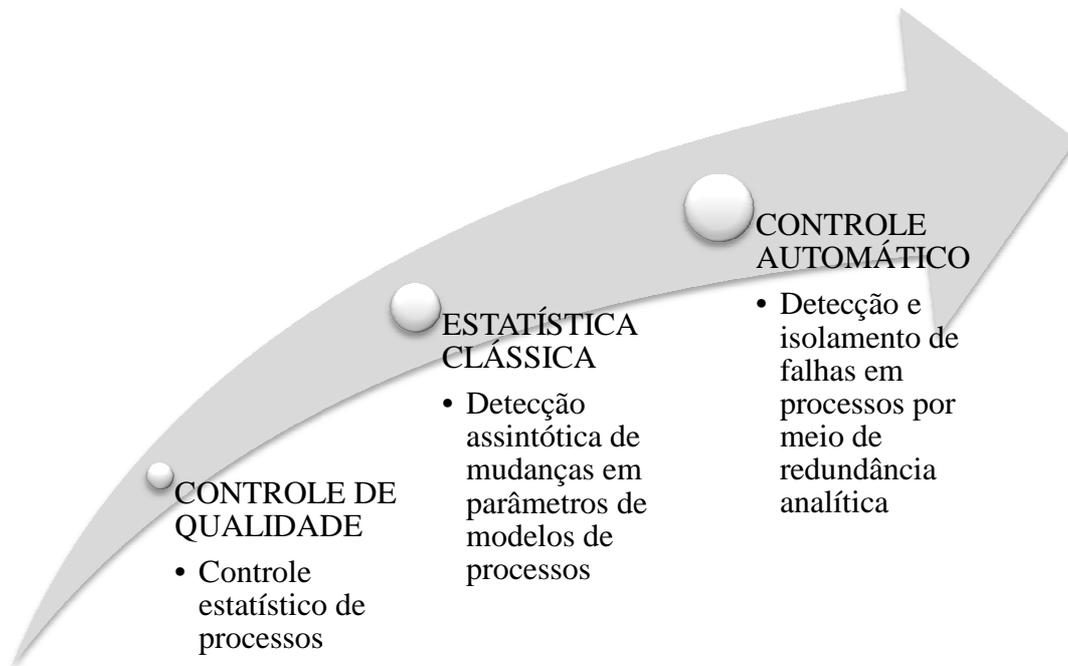


Figura 2.1: Linha histórica das metodologias usadas para monitoramento de processos.

Com a ampliação desta área e o número crescente de técnicas propostas na literatura, diversas revisões e classificações também vêm sendo feitas. Dentre as revisões mais recentes, vale a pena citar apenas a mais geral, feita por Venkat Venkatasubramanian e colaboradores, que foi dividida em três partes [159-161]. Nestes artigos, cada parte revisa um dos três tipos de técnicas, segundo sua classificação.

Em relação às classificações, além da sugerida pelo grupo de Venkat Venkatasubramanian, outras duas merecem destaque importante, propostas por YOON e MACGREGOR [135] e Rolf ISERMANN [22]; porém, a mais recente e bem elaborada foi feita por ZHANG e JIANG [162]. A Figura 2.2 ilustra esta classificação.

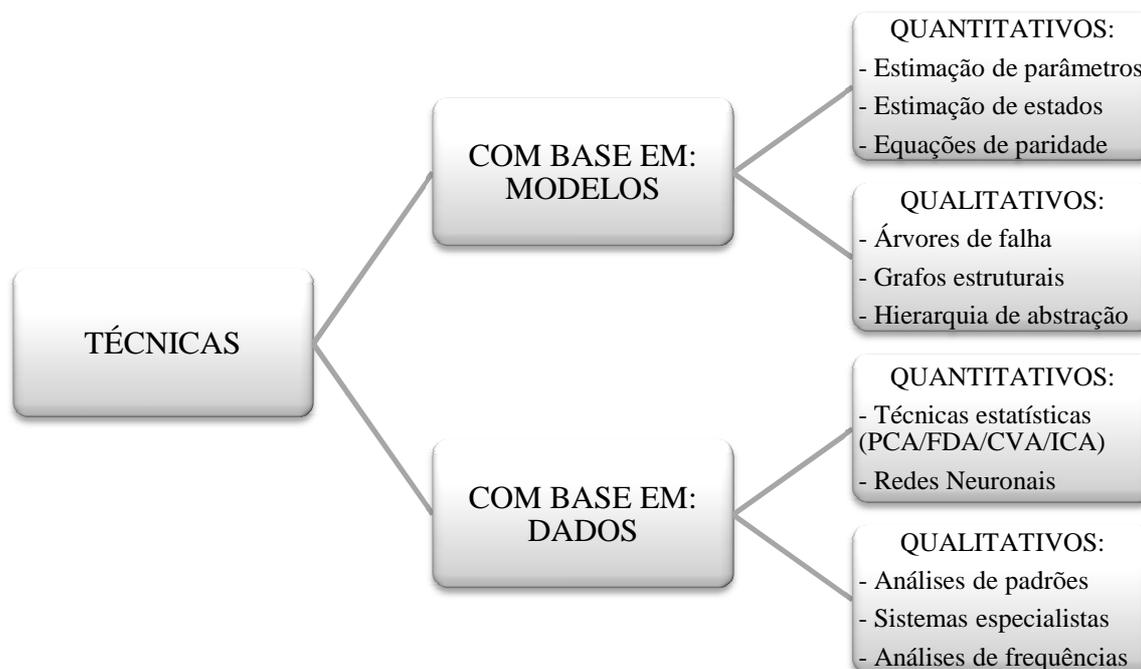


Figura 2.2: Classificação das técnicas usadas para monitoramento de processos [162].

2.5. Comentários finais

Analisando esta revisão bibliográfica histórica, observa-se que as diferentes linhas de pesquisa, ilustradas na Figura 2.1, foram desenvolvimentos independentes que não compartilharam seus sucessos muitas vezes na história da área de monitoramento de processos.

O controle estatístico de processos (multivariados), desenvolvido na área de controle de qualidade, pode ser representado principalmente por técnicas de modelagem estatística para utilização em processos complexos, como no caso dos processos químicos. Este tipo de modelagem pode propiciar propriedades desejáveis para um diagnóstico de falhas efetivo, como observado em alguns trabalhos [128,137]. Entretanto, pouca atenção tem sido dada ao problema de detecção de falhas. A tendência desta linha de pesquisa pode seguir na direção de modelos estatísticos mais complexos e, assim, mais adequados aos processos industriais.

A detecção de mudanças, desenvolvida na área da estatística clássica, pode ser considerada um tipo de solução geral para monitoramento, uma vez que independe do tipo de modelo do processo/sistema. Por isso, as técnicas desta linha de pesquisa são comumente aplicadas nos mais variados tipos de problemas. Especificamente, a abordagem local aplicada aos processos químicos pode ser considerada como uma das

melhores opções para detecção de falhas [143,144]. Vale ressaltar que toda esta metodologia para solução dos problemas envolvidos em monitoramento, baseada na estatística clássica, também pode ser desenvolvida utilizando a estatística Bayesiana.

A detecção e o isolamento de falhas, desenvolvidos na área de controle automático, representam um tipo de solução não-formal e sem qualquer respaldo estatístico para os problemas de monitoramento [27]. As técnicas desenvolvidas neste tipo de abordagem são extremamente dependentes dos modelos dos processos, que em geral são modelos fenomenológicos simplificados e linearizados, obtendo assim um sistema de monitoramento ruim [159]. Contudo, devido ao forte desenvolvimento de estimadores de estados e parâmetros, as técnicas desta linha de pesquisa podem render um diagnóstico de falhas promissor [51].

Finalmente, é possível identificar técnicas promissoras em cada linha de pesquisa desta área de monitoramento de processos.

CAPÍTULO III

ANÁLISE EM COMPONENTES PRINCIPAIS

Este capítulo apresenta a base necessária para o entendimento da técnica de PCA, que será usada nos sistemas de monitoramento propostos neste trabalho. O capítulo está dividido nas seguintes seções: *i*) fundamentos preliminares; *ii*) formulação e resolução da técnica de PCA; *iii*) modelagem; *iv*) limitações; *v*) extensões; e *vi*) outras técnicas relacionadas. Foram utilizados os livros [42,43] como principais referências para a confecção deste capítulo.

3.1. Fundamentos preliminares

Dois subseções definem as estatísticas descritivas mais comuns e os conceitos fundamentais da probabilidade.

3.1.1. Estatísticas descritivas

Considere uma sequência de n_k observações de uma variável aleatória x , que deste ponto em diante será chamada apenas de sequência:

$$\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_{n_k}]^T \quad 3.1$$

Define-se como frequência a quantidade de observações contidas em um intervalo de valores desta variável. Esta definição implica em um pensamento frequentista, que leva ao conceito de probabilidade. Baseando-se na frequência de ocorrência de observações do passado, ou seja, em uma densidade de probabilidade, é possível conhecer qualitativamente o comportamento futuro da variável. Isto pode ser feito de acordo com características descritivas implícitas da curva formada pela densidade de probabilidades, como por exemplo, a tendência central, a dispersão, a obliquidade e o achatamento. Estas características do formato da curva podem ser representadas por medidas matemáticas (estatísticas).

A tendência central da curva possui um grande número de medidas matemáticas para representá-la, como médias (aritmética, geométrica, harmônica, etc.), mediana, moda, entre outras. Cada uma destas estatísticas pode gerar um resultado diferente, dependendo do formato da curva de densidade de probabilidade.

A dispersão, ou o grau de espalhamento, das observações sobre as possibilidades de valores da variável pode ser medida usualmente com base em um ponto, por exemplo, a tendência central. As estatísticas mais conhecidas para este comportamento são a amplitude, o desvio padrão e a variância. Esta grandeza permite gerar limites estatísticos tais que englobem a maior parte da dispersão da variável.

Com o aumento da complexidade da característica descritiva, diminui o número de estatísticas conhecidas para sua representação. Entretanto, é possível obter inúmeras medidas descritivas para uma curva de densidade de probabilidade fazendo uso de abstrações matemáticas, chamados de momentos estatísticos. A obliquidade, o achatamento e outros comportamentos da curva podem então ser representados por medidas baseadas na tendência central e na dispersão.

A Figura 3.1 ilustra uma sequência de uma variável x e pode-se observar claramente a existência de: *i*) uma tendência central em zero, explicitada pela média; *ii*) uma dispersão ao redor desta tendência, implícita no cálculo dos limites estatísticos; e *iii*) uma curva de densidade de probabilidade resumindo toda a informação estocástica contida nas observações da variável.

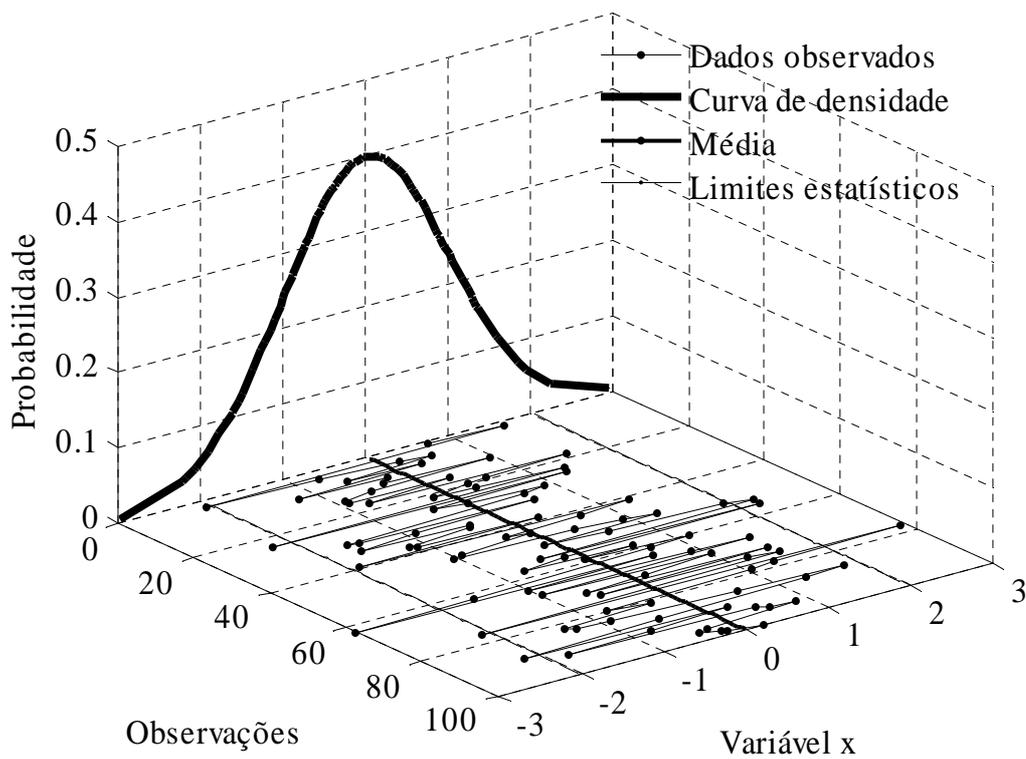


Figura 3.1: Sequência de uma variável.

Considere agora sequências de duas variáveis aleatórias, x e y :

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}^T \\ \mathbf{y}^T \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_{n_k} \\ y_1 & y_2 & \dots & y_{n_k} \end{bmatrix}^T \quad 3.2$$

Define-se associação como o grau de dependência entre duas sequências; ou seja, o quão semelhante elas são. As principais estatísticas para representar esta característica descritiva são covariância e correlação, que estendem a definição de variância. Além destas, existem outras medidas de associação obtidas por abstração matemática. Em relação à associação da própria variável e suas observações adjacentes, é possível definir a autocorrelação utilizando a seguinte sequência de variáveis:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{x}^T \\ \mathbf{x}_{-1}^T \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_{n_k} \\ x_0 & x_1 & \dots & x_{n_k-1} \end{bmatrix}^T \quad 3.3$$

Desta vez, a análise gráfica deve ser feita utilizando-se as curvas de densidade de probabilidade de cada variável. Neste caso, em um espaço bidimensional, as duas curvas formam uma superfície que apresenta características de associações não reveladas pelas curvas separadamente. As Figuras 3.2 e 3.3 mostram, respectivamente, a superfície de densidade de probabilidade de duas variáveis, associadas (dependentes) e não-associadas (independentes).

Conforme pode ser visualizado nas Figuras 3.2 e 3.3, a associação entre as variáveis faz com que haja determinadas direções que mostram maiores ou menores dispersões entre as variáveis originais em um conceito mais amplo. Portanto, a informação de dispersão contida nos limites estatísticos mostrados anteriormente é insuficiente para delimitar a densidade de probabilidade de variáveis associadas. A Figura 3.4 mostra os limites de dispersão das variáveis individuais, chamados de univariados, e o limite de associação, chamado de multivariado.

Conforme observado na Figura 3.4, o plano de observações das variáveis apresenta uma região de maior incidência, demarcada pelos limites multivariados, devido ao grau elevado de associação. Esta região apresenta o formato de elipse para casos em que a associação entre as variáveis é linear, podendo ser representada por correlações.

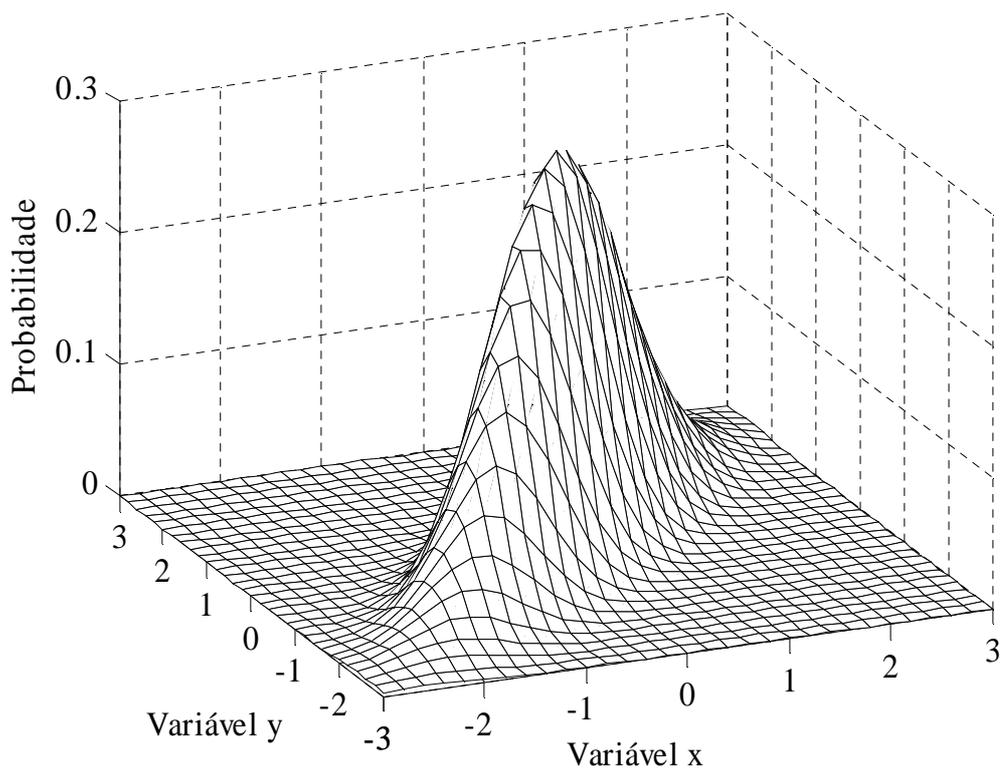


Figura 3.2: Superfície de densidade de probabilidade de duas variáveis associadas.

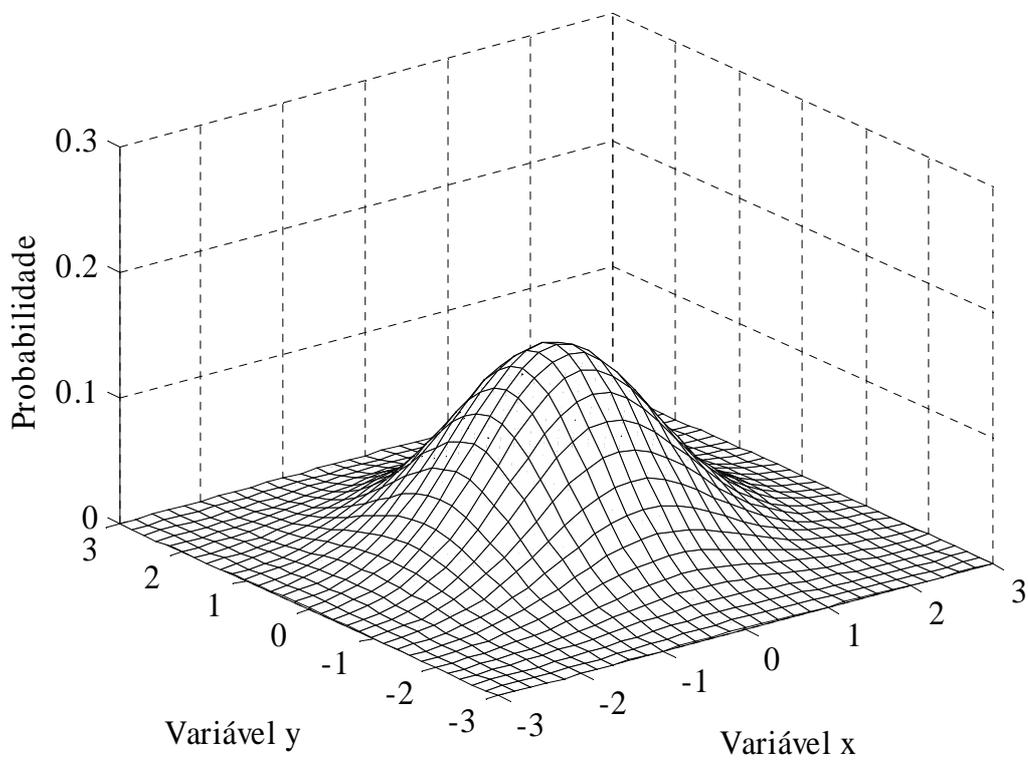


Figura 3.3: Superfície de densidade de probabilidade de duas variáveis não-associadas.

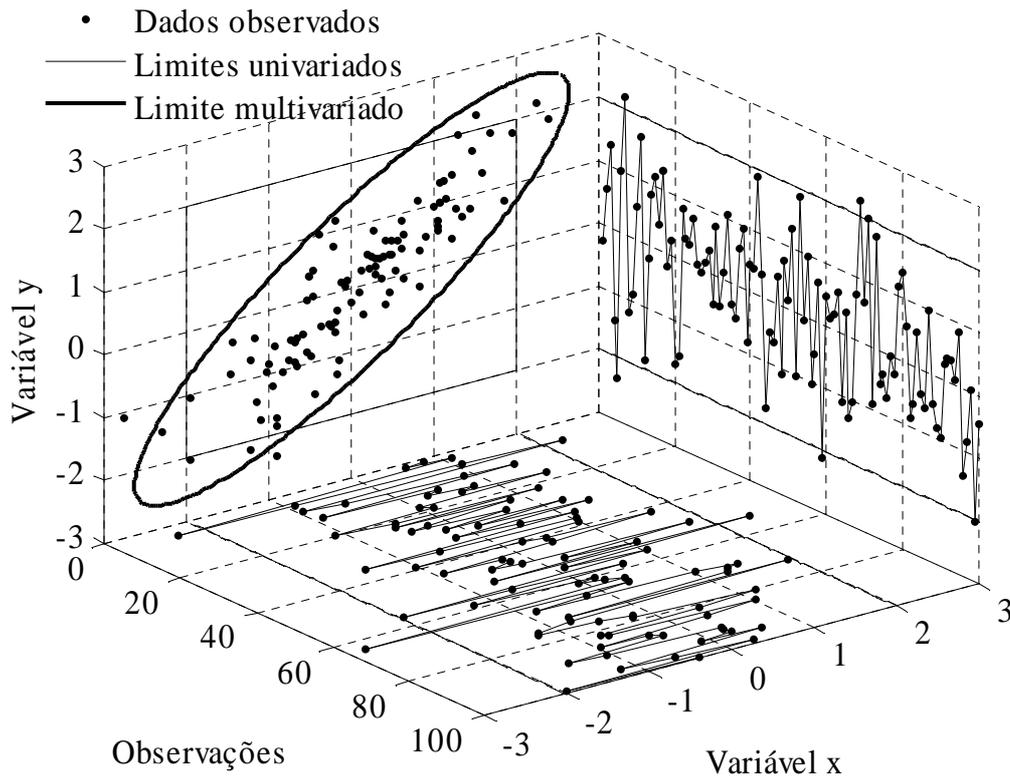


Figura 3.4: Sequência de duas variáveis associadas.

3.1.2. Conceitos fundamentais da probabilidade:

Nesta subseção, os dois conceitos fundamentais da probabilidade são introduzidos.

1º - *Lei dos Grandes Números* – Esta lei afirma que os valores calculados das estatísticas descritivas tendem para os valores verdadeiros com o aumento do número de observações das sequências das variáveis utilizadas nesses cálculos.

Esta lei baseia-se no fato de que um número pequeno de observações pode ser insuficiente para representar o comportamento global da variável, implicando nos conceitos amostral (número limitado de valores observados da variável) e populacional (todos os possíveis valores que a variável pode assumir).

2° - *Teorema do Limite Central* – Este teorema afirma que a mistura de duas ou mais sequências independentes (não-associadas) de variáveis com diferentes curvas de densidade de probabilidades tende a apresentar, com o aumento do tamanho destas sequências, um tipo especial de densidade de probabilidade, chamada normal.

Este teorema tem grande importância, uma vez que esta curva resultante, normal, possui propriedades relevantes, como simetria, e seus parâmetros representam explicitamente a tendência central e a dispersão da mistura; isto é, a média μ_x e a variância σ_x^2 , respectivamente:

$$\mu_x = \frac{1}{n_k} \sum_{k=1}^{n_k} x_k \quad 3.4$$

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{n_k - 1} \sum_{k=1}^{n_k} (x_k - \mu_x)^2 \quad 3.5$$

3.2. Formulação e resolução da técnica de PCA

Nesta seção é introduzida a base teórica da análise em componentes principais.

Considere que uma variável observada em um processo possui sua variabilidade devida à mistura de inúmeros sinais independentes não-observados deste mesmo processo, de suas vizinhanças ou do próprio sistema de medição. Mais especificamente, os diversos sinais misturados em uma variável trazem informações da natureza do processo, vizinhanças e sistema de medição e são as verdadeiras fontes de variabilidade da variável observada. Considere agora n_x variáveis observadas no mesmo processo (redefinição do vetor \mathbf{x}):

$$\mathbf{x} = [x_1 \dots x_{n_x}]^T \in \mathbb{R}^{n_x} \quad 3.6$$

Estas variáveis são misturas dos mesmos sinais intrínsecos do processo e, portanto, possuem algum tipo de associação. De acordo com o teorema do limite central, a despeito do tipo de densidade de probabilidade dos sinais intrínsecos do processo, as variáveis observadas tendem a apresentar densidades de probabilidade normais, uma vez que são misturas de sinais independentes. Tendo em vista que cada variável é observada propositalmente para captar informações específicas do processo, a

composição dos sinais nas variáveis é distinta. Especificamente, uma variável é composta majoritariamente por sinais específicos do processo e, minoritariamente, por sinais das vizinhanças e do sistema de medição. Então, seja um grupo de n_s sinais do processo,

$$\mathbf{s} = [s_1 \dots s_{n_s}]^T \in \mathbb{R}^{n_s} \quad 3.7$$

onde $n_s < n_x$, ou seja, admite-se que existem mais variáveis observadas do que sinais do processo. Nestas condições, pode-se estabelecer uma estrutura para essas variáveis, em termos da seguinte relação linear,

$$\mathbf{x} = \mathbf{\Xi}\mathbf{s} + \boldsymbol{\varepsilon} \quad 3.8$$

onde $\mathbf{\Xi} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_s}$ representa a informação da mistura e $\boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^{n_x}$ representa a parcela das variáveis que não corresponde à informação do processo vinculada aos sinais das vizinhanças e do sistema de medição; ou seja, ruído (ou erro). Uma vez que os sinais são independentes, as duas parcelas das variáveis são também independentes. Portanto, a inferência de informações de um processo, por meio de um grupo de variáveis observadas, pode ser interpretada como um procedimento de “desmistura”, no qual as variáveis são divididas em duas parcelas. Neste ponto, o problema de inferência pode ser então definido como um problema de determinação da matriz de mistura $\mathbf{\Xi}$ e dos sinais do processo \mathbf{s} .

Uma forma de resolver esse problema é usar a análise em componentes principais, cujo objetivo é calcular a base mais apropriada para representar um conjunto de dados ruidosos no espaço vetorial que os contem. A expectativa é que essa base filtre o ruído nos dados e revele a estrutura intrínseca que os determina.

Assim, para inferir os sinais do processo por meio da análise em componentes principais, utiliza-se uma sequência de observações de um conjunto de variáveis \mathbf{x} do sistema,

$$\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_{n_k}]^T \in \mathbb{R}^{n_k \times n_x} \quad 3.9$$

onde \mathbf{x}_i representa a i -ésima observação de \mathbf{x} .

Este conjunto de dados apresenta um grau de associação, que pode ser descrito utilizando-se as estatísticas covariância ou correlação entre as variáveis. O uso de variáveis associadas é necessário, pois realça a presença dos sinais intrínsecos que estão ocultos nestas variáveis. Define-se a matriz de covariância amostral deste conjunto de dados como,

$$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} = \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{n_k - 1} \approx \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x} \quad 3.10$$

onde $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}}$ é a matriz de covariância verdadeira. De acordo com a Lei dos Grandes Números, $\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}$ tende para $\boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{xx}}$ quando n_k tende para infinito. Vale ressaltar que esta matriz de covariância e toda a análise em componentes principais devem ser realizadas utilizando-se variáveis com mesma tendência central nula; ou seja, deve ser realizada uma etapa de centralização das variáveis em suas médias para o caso mais simples.

Cada observação na matriz \mathbf{X} é um vetor que se encontra em um espaço vetorial de dimensão n_x , descrito por uma base ortonormal. Uma vez calculado o grau de associação das variáveis, a análise em componentes principais utiliza um critério de máxima variância para determinar a nova base do espaço vetorial e dela extraírem os sinais. Este critério implica em que os sinais intrínsecos de um processo possuem variância igual ou maior do que a das variáveis observadas. Isto pode ser justificado pelo fato de os sinais serem o motivo da variação das variáveis e, portanto, possuírem variação mais significativa.

A mudança de base é feita por meio de uma transformação linear das variáveis observadas,

$$\mathbf{T} = \mathbf{X}\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n_k \times n_x} \quad 3.11a$$

onde $\mathbf{T} = [\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_{n_x}] \in \mathbb{R}^{n_k \times n_x}$ é matriz de dados transformados e $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_{n_x}] \in \mathbb{R}^{n_k \times n_x}$ é matriz de transformação. Assim, os n_t sinais estimados, $\mathbf{t} = \hat{\mathbf{s}} \in \mathbb{R}^{n_t}$, são então transformações lineares das variáveis observadas:

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{X}\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^{n_k} \quad 3.11b$$

As colunas da matriz de transformação, \mathbf{v}_i , são obtidas por meio de estimação utilizando o critério de máxima variância,

$$\max_{\mathbf{v}_i} \left(\lambda_i = E \{ \mathbf{t}_i^T \mathbf{t}_i \} = E \{ \mathbf{v}_i^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{v}_i \} = \mathbf{v}_i^T E \{ \mathbf{X}^T \mathbf{X} \} \mathbf{v}_i = \mathbf{v}_i^T \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{v}_i \right) \in \mathbb{R} \quad 3.12$$

onde $\lambda_i \in \mathbb{R}$ e $\mathbf{v}_i \in \mathbb{R}^{n_x}$ representam, respectivamente, o valor e o vetor característico i da matriz $\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}$ e E representa o operador esperança matemática. O critério da máxima variância baseia-se na busca por direções (que formarão uma base ortogonal ou um espaço principal) onde a se concentre a maior parte de informação contida nos dados. Em outras palavras, cada direção apresenta a máxima variância independente possível, fazendo uso da variância amostral dos dados transformados. Conforme o primeiro e o

último termo da Equação 3.11 revelam, o problema pode ser posto na forma de uma equação característica:

$$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i \quad 3.13$$

A resolução desta equação pode ser interpretada como a decomposição da matriz $\mathbf{S}_{\mathbf{xx}}$ em uma matriz diagonal de valores característicos, $\mathbf{\Lambda} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, que representam as variâncias λ_i de todos os sinais estimados, e uma matriz de vetores característicos, $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, que representam as estimativas das leis de mistura destes sinais,

$$\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T = \mathbf{v}_1 \lambda_1 \mathbf{v}_1^T + \dots + \mathbf{v}_{n_t} \lambda_{n_t} \mathbf{v}_{n_t}^T + \dots + \mathbf{v}_{n_x} \lambda_{n_x} \mathbf{v}_{n_x}^T \quad 3.14$$

onde $\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{I}$, $\mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{I}$ e $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_{n_x}$.

Por meio desta resolução, é possível estimar:

1° - As leis de mistura dos sinais do processo:

$$\mathbf{P} = [\mathbf{v}_1 \dots \mathbf{v}_{n_t}] \approx \mathbf{\Xi} \quad 3.15$$

2° - Os próprios sinais:

$$\mathbf{T} = [\mathbf{t}_1 \dots \mathbf{t}_{n_s}] = [\mathbf{X} \mathbf{v}_1 \dots \mathbf{X} \mathbf{v}_{n_t}] \approx [\mathbf{s}_1 \dots \mathbf{s}_{n_s}] \quad 3.16$$

3° - As variâncias destes sinais:

$$\text{diag}(\mathbf{\Lambda}) = [\lambda_1 \dots \lambda_{n_t}] \approx [E\{\mathbf{s}_1^T \mathbf{s}_1\} \dots E\{\mathbf{s}_{n_s}^T \mathbf{s}_{n_s}\}] \quad 3.17$$

onde E é o operador esperança matemática.

Sendo assim, utilizando a matriz de covariância amostral e a Lei dos Grandes Números, as estimativas acima tendem para seus valores verdadeiros quando n_k tende para o infinito.

3.3. Modelagem

Nesta seção são mostradas interpretações geométricas e exemplos da aplicação de PCA para modelagem, bem como alguns aspectos práticos.

Considerando um espaço dimensional formado pelas variáveis associadas observadas em um processo, admite-se que subespaços menores e independentes são formados pelos diferentes sinais intrínsecos do processo. A análise em componentes principais utiliza direções lineares para representação de um subespaço; ou seja, retas, planos e hiperplanos relativos a 1, 2 e 3, ou mais, dimensões. Sendo assim, o modelo gerado pela técnica PCA é, basicamente, um pequeno (e conveniente) subespaço do

espaço de variáveis observadas, chamado subespaço principal, e sua respectiva variabilidade. A questão fundamental a responder para a geração deste modelo é: quão pequeno é este subespaço?

A técnica PCA pode ser interpretada como uma expansão da matriz de covariância dos dados em série de Karhunen-Loève [42], para representação do processo modelado; ou seja, uma técnica não-paramétrica. O truncamento desta série é análogo à escolha do número de sinais relativos ao processo ou ao número de dimensões principais. Na formulação da PCA, considera-se que os primeiros termos da série representam os sinais intrínsecos do processo, enquanto que os últimos termos podem representar os sinais das vizinhanças e do sistema de medição ou serem nulos. Portanto, de acordo com esta interpretação, a geração do modelo é definida unicamente pela determinação do número de termos da série de Karhunen-Loève.

A literatura apresenta uma variedade de técnicas para determinação do número de sinais do sistema presentes nas variáveis observadas [41,42]. As técnicas mais comuns são basicamente critérios empíricos baseados na variância dos dados associados; ou seja, os valores característicos da matriz de covariância dos dados. As técnicas da Tabela 3.1 podem ser citadas como exemplo [41,42], onde δ , $\bar{\lambda}$ e λ^* são os parâmetros das técnicas, representando, respectivamente, o limite da variância acumulada, a média das variâncias e as variâncias dos dados não correlacionados.

Tabela 3.1 – Técnicas para determinação do número de sinais

Técnicas	Critérios
Percentagem de variância acumulada (<i>Cumulative Variance Percentage</i>)	$n_t = \arg \min_i \left(\left(\frac{\sum_{c=1}^i \lambda_c}{\sum \lambda} \right) 100 > \delta \right)$
Valor característico médio (<i>Average Eigenvalue</i>)	$n_t = \arg \min_i (\lambda_i > \bar{\lambda})$
Análise paralela (<i>Parallel Analysis</i>)	$n_t = \arg \min_i (\lambda_i > \lambda_i^*)$
Teste do “joelho” (<i>Scree Test</i>)	$n_t = \arg \min_i (\lambda_i \gg \lambda_{i+1})$

Outro tipo de técnica bastante usada é a medida do desempenho (ajuste) do modelo, representado por meio de critérios de informação ou validações cruzadas. A Tabela 3.2 apresenta algumas das principais técnicas deste tipo [41,42], baseadas nos parâmetros definidos nas Equações 3.18 a 3.22, que são funções da predição do modelo, $\hat{\mathbf{x}}$,

$$RSS_i = \sum_{k=1}^{n_k} \hat{\mathbf{x}}(i)_k^2 \quad 3.18$$

$$PRESS_i = \sum_{k=1}^{n_k} (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}(i))_k^2 \quad 3.19$$

$$AIC_i = n_k \ln \left(\frac{2\pi PRESS_i}{n_k} + 1 \right) + 2n_x n_s \quad 3.20$$

$$R_i = \frac{PRESS_i}{RSS_{i-1}} \quad 3.21$$

$$VRE_i = \sum_{j=1}^{n_x-1} \frac{\mathbf{I}_j^T \tilde{\mathbf{P}}_i \tilde{\mathbf{P}}_i^T \mathbf{S}_{xx} \tilde{\mathbf{P}}_i \tilde{\mathbf{P}}_i^T \mathbf{I}_j / \mathbf{I}_j^T \tilde{\mathbf{P}}_i \tilde{\mathbf{P}}_i^T \mathbf{I}_j}{\mathbf{I}_j^T \mathbf{S}_{xx} \mathbf{I}_j} \quad 3.22$$

onde k , i e j são os índices das observações, dos componentes e das variáveis, respectivamente, $\hat{\mathbf{x}}(i)_k$ é a estimativa do vetor de variáveis na observação k pelo modelo usando os i primeiros componentes, \mathbf{I}_j é a coluna j da matriz identidade de tamanho n_x e $\tilde{\mathbf{P}}_i$ é a matriz de vetores característicos residuais. A matriz \mathbf{S}_{xx} foi definida na Equação 3.10, o vetor \mathbf{x} , na Equação 3.6, e os escalares n_k , n_x e n_s , nas Equações 3.1, 3.6 e 3.7, respectivamente. Os primeiros somatórios das Equações 3.18 e 3.19 atuam sobre os n_x elementos dos vetores resultantes de seus argumentos.

Tabela 3.2 – Técnicas para determinação do número de sinais

Técnicas	Crítérios
Crítério de informação de Akaike (<i>Akaike Information Criterion</i>)	$n_t = \arg \min_i (AIC_i)$
Soma dos quadrados dos erros de predição (<i>PRediction Error Sum of Squares</i>)	$n_t = \arg \min_i (PRESS_i)$
Razão R (<i>R Ratio</i>)	$n_t = \arg \min_i (R_i < 1)$
Variância do erro de reconstrução (<i>Variance of Reconstruction Error</i>)	$n_t = \arg \min_i (VRE_i)$

Fazendo-se uso de uma das técnicas acima para estimação do número de sinais do sistema, o modelo PCA pode ser gerado conforme as Equações 3.23a e 3.23b:

$$\mathbf{t} = \mathbf{P}^T \mathbf{x} \quad 3.23a$$

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{P}\mathbf{t} = \mathbf{P}\mathbf{P}^T \mathbf{x} \quad 3.23b$$

A matriz \mathbf{P} representa o subespaço principal do espaço das variáveis e sua multiplicação por um vetor \mathbf{x} (Equação 3.23a) implica em uma operação de projeção

deste vetor para tal subespaço. Uma nova multiplicação por esta matriz (Equação 3.23b) representa a projeção da parcela de informação contida no subespaço principal do vetor \mathbf{x} de volta para o espaço das variáveis. Desta forma, a matriz \mathbf{PP}^T pode ser utilizada como um modelo para as variáveis do processo (eliminando ruídos). Esta interpretação geométrica com base em projeções é mostrada nas Figuras 3.5 a 3.7.

A Figura 3.5 apresenta observações de um conjunto de variáveis associadas, pertencentes a um processo genérico. O formato hiper-elíptico da nuvem de dados observados, que não ocupa todo o espaço tridimensional, é devido ao grau de associação das variáveis. Este comportamento também é mostrado na Figura 3.4, porém em um espaço bidimensional.

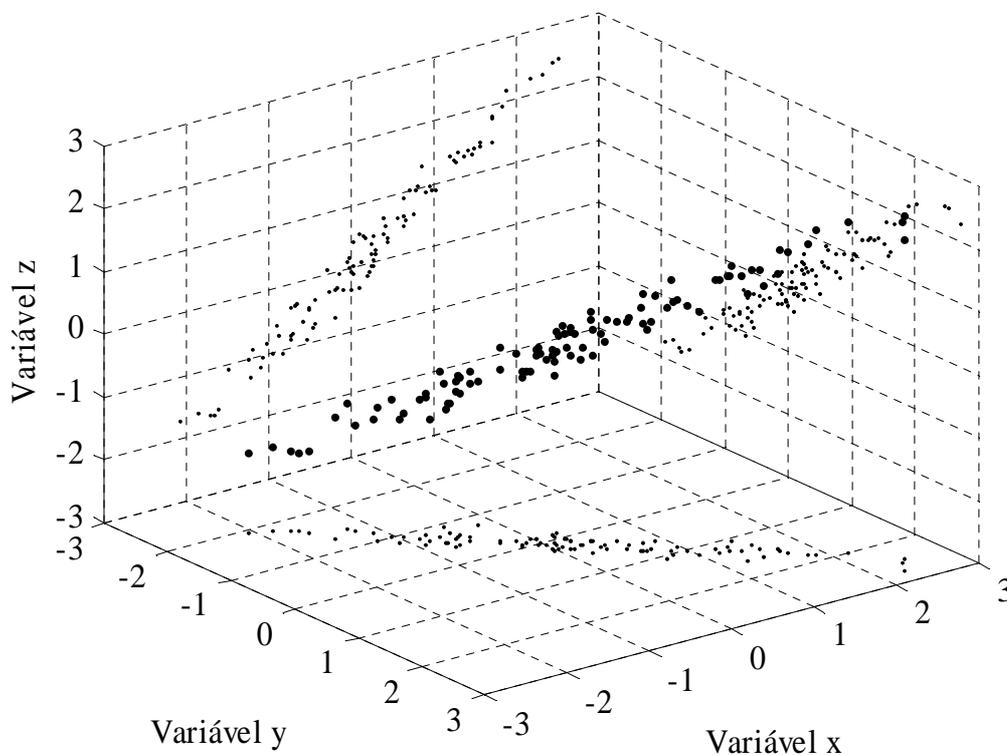


Figura 3.5: Variáveis de um processo.

Tendo em vista que a análise em componentes principais utiliza o critério da máxima variância, a técnica realiza uma transformação linear sobre as variáveis originais para gerar novas variáveis (latentes) que respeitem este critério. Geometricamente, esta transformação consiste na rotação de eixo de coordenadas. Assim, o espaço das variáveis originais, representado pela matriz identidade \mathbf{I} , transforma-se no espaço de componentes (variáveis latentes), representado pela matriz de vetores característicos \mathbf{V} , cujos subespaços são ordenados de acordo com o critério

da máxima variância. A Figura 3.6 ilustra o procedimento de projeção de uma dada observação $[x,y,z]$ no novo eixo de coordenadas, gerando uma nova representação para a observação, $[t_1,t_2,t_3]$.

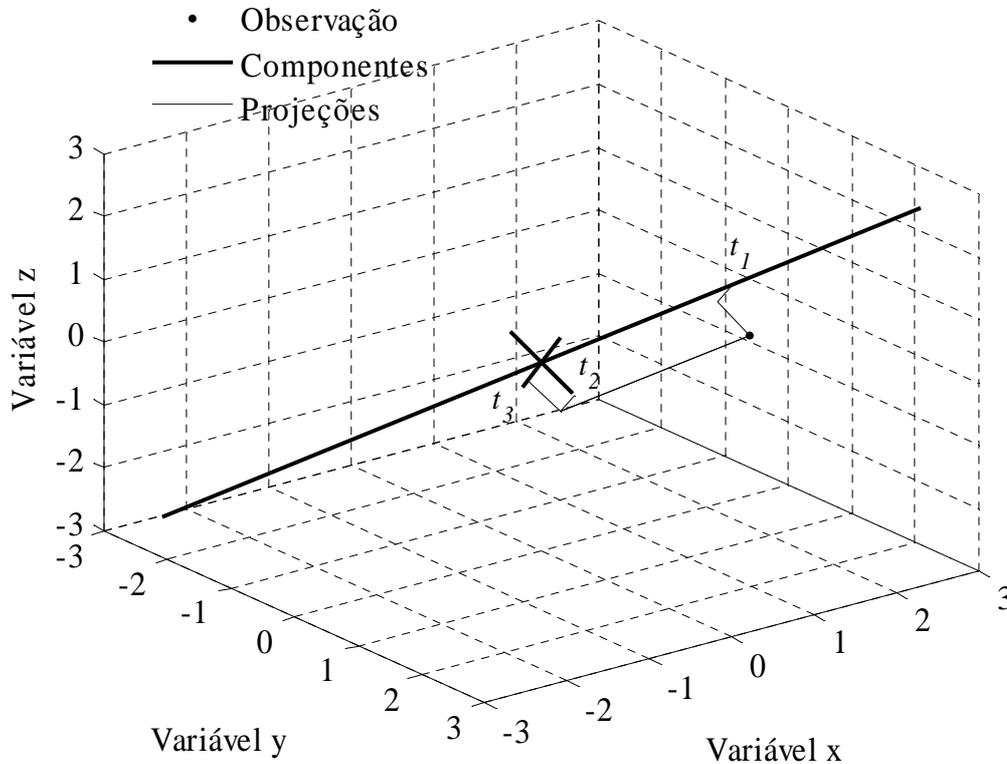


Figura 3.6: Projeção de uma observação no espaço de componentes.

Conforme mencionado anteriormente, a técnica PCA pode ser usada para gerar um modelo do processo por meio das primeiras direções; ou seja, o subespaço principal. Assim como em qualquer outro modelo, o subespaço complementar é chamado de residual. Vale ressaltar que neste ponto faz-se necessária a utilização de uma das técnicas de determinação do número de sinais do processo. Neste exemplo, admite-se que estes sinais são representados apenas pelo primeiro subespaço, uma vez que a variação das outras direções é muito pequena, sugerindo haver apenas ruído. O subespaço principal é então representado por uma reta, enquanto que o subespaço residual é representado por um plano ortogonal a esta reta.

A utilização do modelo gerado é feita simplesmente por projeções (Equações 3.23a e 3.23b). No exemplo estudado, a estrutura original do sistema é dada por $x = y = z$, que deve ser representada pelo componente principal. Sendo assim, uma

vez que a observação da Figura 3.6 tem coordenadas [1,2,1], a predição do modelo deve ser [1.33,1.33,1.33], que respeita a estrutura $x = y = z$ e leva à distância mínima entre a observação e a predição. A Figura 3.7 ilustra a utilização do modelo.

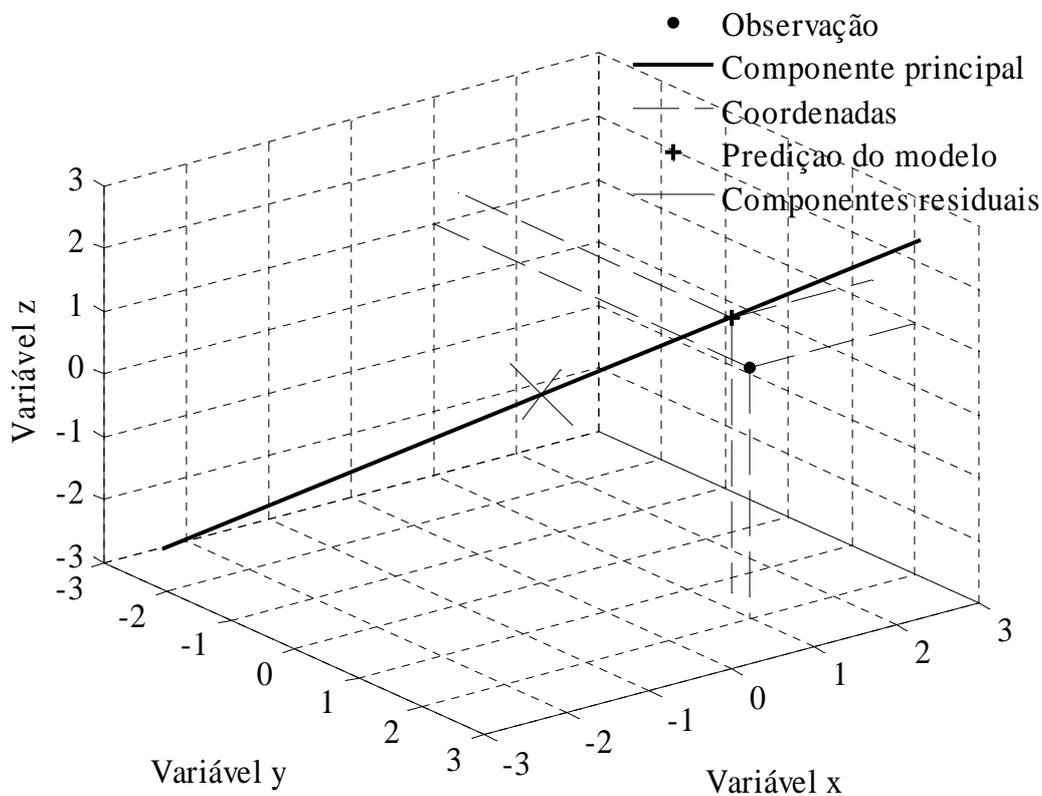


Figura 3.7: Utilização do modelo para estimar a parcela de informação do processo contida na observação.

3.4. Limitações

Esta seção analisa minuciosamente as principais limitações de aplicabilidade da técnica PCA, devido às hipóteses admitidas nas etapas de formulação e resolução do problema. Como forma de apontar os problemas envolvidos em aplicações, as hipóteses principais da técnica de PCA são enumeradas e discutidas a seguir:

- 1- Associação de 1ª ordem (dados lineares);
- 2- Autoassociação de ordem zero (dados estacionários);
- 3- Sinais principais sujeitos a flutuações normais e independentes;
- 4- Sinais residuais sujeitos a flutuações normais, independentes e identicamente distribuídos;

- 5- Dados representam o comportamento original do processo;
- 6- Propriedades estatísticas homogêneas (unimodalidade e homocedasticidade).

A hipótese 1, associação de 1ª ordem, admite que a dependência entre as variáveis seja linear; isto é, determinada completamente pela covariância e pela correlação. Aplicações como reconhecimento de padrões podem facilmente ilustrar a deficiência da técnica PCA. Sistemas representados por imagens tortuosas necessitam de abordagens não-lineares para serem devidamente modelados e então reconhecidos. Diversos outros sistemas complexos também fazem com que suas respectivas variáveis tenham comportamentos não-lineares, como a maior parte dos sistemas físicos, químicos ou biológicos de interesse da engenharia química.

A hipótese 2 estabelece que as variáveis observadas não apresentam autoassociações, fazendo com que a ordem das observações nas sequências dos dados seja irrelevante. Entretanto, sistemas econômicos e processos industriais dinâmicos estão sujeitos a mudanças de cenários ou condições de operação, provocando assim autoassociação nas sequências de variáveis observadas. Por isso, a técnica de PCA tem que ser cuidadosamente adaptada para utilização em sistemas dinâmicos.

A hipótese 3 é a mais abstrata dentre as hipóteses e tem relação direta com a base teórica que suporta a técnica de PCA e com o que se idealiza sobre a estrutura do sistema. Admite-se que os sinais do processo são sujeitos a flutuações normais e independentes. A independência neste caso é dada pela medida de covariância ou correlação nula entre as flutuações. Nos sistemas em que os sinais estão sujeitos a flutuações que não apresentem comportamento normal, a técnica de PCA não pode ser aplicada diretamente. Isto ocorre porque as medidas de covariância ou correlação não correspondem à medida de dependência. Em outras palavras, o Teorema do Limite Central pode não ser verificado e o comportamento dos sinais não-normais é certamente transmitido para uma ou mais variáveis do problema.

A hipótese 4 diz respeito às propriedades do resíduo do modelo PCA resultante. A parcela das variáveis correspondente aos sinais de menor variância deve ter matriz de covariâncias diagonal e com elementos iguais. Isto significa dizer que todos os sinais remanescentes misturam-se, segundo uma lei, formando parcelas de comportamento idêntico. Esta hipótese é ingênua, no sentido de exigir condições improváveis em uma aplicação real, em que variáveis diferentes estão envolvidas, como

vazões e temperaturas. Além disso, as restrições físicas nos equipamentos de medição de um processo podem levar a sinais não-normais e a erros diferentes nas diferentes variáveis.

A hipótese 5 tem relação direta com a Lei dos Grandes Números, uma vez que somente com um número infinito de observações o comportamento das variáveis é totalmente conhecido. Deve-se adicionar a isto o fato de que em processos reais podem existir observações corrompidas por algum outro fator externo, diferente do processo analisado e suas vizinhanças. Este fator externo é uma anomalia que não condiz com o comportamento normal do processo. Esta anomalia pode ser interpretada como uma fraude, para o caso de sistemas administrativos, ou uma falha, para o caso de processos industriais, por exemplo.

Além das hipóteses discutidas acima, existe ainda uma hipótese intrínseca à formulação da técnica PCA, hipótese 6, que é a invariabilidade de propriedades estatísticas por todo o espaço geométrico das variáveis. Por exemplo, as associações entre as variáveis são consideradas constantes ao longo das observações; ou seja, o comportamento é homocedástico. O desrespeito desta hipótese, neste caso um comportamento heterocedástico, leva à formulação de modelos imprecisos. Alguns sistemas que apresentam este tipo de problema são comumente encontrados em setores da economia. Outro exemplo de desrespeito desta hipótese é a ocorrência de múltiplas tendências locais na curva de probabilidade dos dados; ou seja, dados multimodais. Neste caso, as variáveis também apresentam dispersões discretas, formando agrupamentos no espaço dimensional dos dados. Processos onde existem diferentes pontos de operação representam o exemplo mais esclarecedor sobre a geração de dados multimodais.

3.5. Extensões

Esta seção apresenta uma revisão resumida das diversas técnicas propostas nos últimos anos na literatura especializada para resolver os problemas discutidos na seção anterior.

3.5.1. PCA não-linear

Para solucionar o problema do uso limitado do modelo PCA para processos lineares, estabelecido pela hipótese 1, diversas alternativas têm sido propostas na

literatura. A fim de analisar objetivamente as extensões não-lineares da técnica de PCA, apenas a essência de cada proposta é apresentada nesta seção.

A primeira e mais simples proposta para abordagem de um problema não-linear consiste no aumento da dimensão do problema, considerando variáveis sem significado físico que representam efeitos não-lineares de mistura dos sinais. Somente após este aumento da dimensionalidade dos dados é que a dependência entre eles se torna linear. Assim, é possível finalmente reduzir a dimensão destes dados, transformados não linearmente, para modelar um processo não-linear. Duas técnicas que usam este tipo de abordagem são PCA generalizado (*Generalized PCA*, GPCA) [163] e PCA por funções núcleo (*Kernel PCA*, KPCA) [35].

GPCA foi a primeira tentativa de lidar com sistemas não-lineares usando PCA. Originalmente, utilizaram-se transformações quadráticas ou cúbicas (ou seja, monômios aplicados aos dados) para adicionar efeitos não-lineares ao processo. Portanto, o aumento da dimensão dos dados é polinomial, o que restringe a aplicabilidade desta técnica para processos com poucas variáveis ou processos que apresentam poucos efeitos não-lineares.

A técnica KPCA utiliza uma transformação (*kernel trick*) para evitar esse aumento brusco da dimensão. Este truque permite a utilização de efeitos não-lineares que não constituem um conjunto de transformações polinomiais. Estes efeitos são representados por funções núcleo e devem satisfazer o teorema de Mercer para serem utilizados [35]. O defeito desta técnica é a dificuldade de utilização do modelo no sistema original devido à impossibilidade da transformação inversa por meio de projeções.

A segunda proposta para uma abordagem não-linear da técnica PCA é a utilização de filtros ou ajustes locais, para a suavização dos dados, gerando componentes não-lineares: as curvas principais [164]. Diversas técnicas foram desenvolvidas de acordo com esta abordagem, como no trabalho de DONG e McAVOY [34], que propuseram o uso de redes neuronais para a modelagem e o uso das curvas principais.

Finalmente, a terceira alternativa para geração de um modelo PCA não-linear é a utilização direta de redes neuronais, como uma rede auto-associativa (*Auto-Associative Network*, AAN) [33], que tem 5 camadas de neurônios (1 entrada, 1 saída e 3 escondidas) em sua conformação. A redução de dimensão é feita por meio de um “gargalo”; ou seja, um número menor de neurônios na segunda camada escondida, em

comparação com o número de variáveis. O modelo resultante desta técnica não gera componentes principais, apenas estimativas da parcela de informação do processo contida nas variáveis.

3.5.2. PCA variante no tempo e PCA dinâmico

Diversas aplicações da técnica de PCA necessitam de abordagens dinâmicas e/ou variantes no tempo, como é o caso da maioria dos processos químicos industriais. Contudo, a segunda hipótese da formulação da PCA admite que a associação temporal dos dados seja nula, inviabilizando a sua utilização. Para solucionar este problema, diversos tipos de alternativas têm sido discutidos na literatura. Novamente, a revisão das técnicas é feita de acordo com sua fundamentação.

Um grupo de técnicas pode ser classificado como variante no tempo (*Time-Varying PCA*), uma vez que as informações temporais são adaptadas ao modelo PCA, tornando-o mais realista. As técnicas mais conhecidas, segundo esta abordagem, são: PCA móvel ponderado exponencialmente (*Exponentially Weighted Moving PCA*, EWM-PCA) [32], PCA recursivo (*Recursive PCA*, RPCA) [125] e PCA por janela móvel (*Moving Window PCA*, MWPCA) [120].

Outra abordagem utiliza identificação da estrutura dinâmica do processo para geração de um único modelo dinâmico. Alguns exemplos: *i*) técnicas em que esta identificação é feita por meio de transformadas (PCA por Fourier e PCA por wavelets) [165]; *ii*) técnicas em que a autodependência temporal dos dados é acrescentada à formulação da PCA, fazendo uso de variáveis defasadas no tempo de maneira semelhante à associação (PCA dinâmico ou defasado no tempo) [31] e *iii*) técnicas de identificação de um modelo de subespaço com uma estrutura dinâmica específica e realizável utilizando PCA (SIMPCA e SIMPCA-w) [129,130].

3.5.3. Análise em componentes independentes (ICA)

Embora a técnica ICA não seja uma extensão direta da técnica PCA, sua formulação teórica pode ser interpretada desta maneira [166]. Isto porque a diferença entre estas técnicas refere-se à medida de independência entre os sinais extraídos das variáveis. Uma vez que a técnica PCA considera sinais normais, esta medida é dada por meio de covariâncias ou correlações. Alternativamente, a técnica de ICA utiliza medidas “não-normais”, como o grau de afunilamento de uma curva de densidade de probabilidades, chamado de curtose. Entretanto, é importante ressaltar que o grau de

independência dos sinais extraídos é diretamente relacionado com a medida utilizada. Sendo assim, é virtualmente possível que haja dependência entre os sinais extraídos mesmo utilizando medidas de ordens elevadas, tornando a técnica ineficiente.

3.5.4. PCA probabilístico

De modo a estabelecer estimativas de modelos PCA com base probabilística, algumas alternativas têm sido estudadas e formuladas. A revisão das técnicas é dada a seguir.

PCA probabilístico (*Probabilistic PCA*) [167] é a primeira abordagem probabilística dada à técnica PCA, uma vez que sua formulação tradicional não impõe conhecimento das curvas de densidade de probabilidade das variáveis. Esta técnica dá apenas respaldo estatístico formal para a técnica PCA, considerando o resíduo do modelo PCA normal e isotrópico.

PCA por máxima verossimilhança (*Maximum Likelihood PCA*) [36,37] foi a primeira proposta amplamente conhecida a lidar com os problemas de erros de modelagem (resíduo) dependentes, diferentemente distribuídos e heterocedásticos. A proposta é uma reformulação da estimação de parâmetros da técnica PCA, considerando uma estrutura mais ampla para os erros das variáveis. Portanto, exige-se o conhecimento da matriz de covariância dos erros, uma vez que ainda existe a hipótese de variáveis normais. Com isso, o problema de estimação recai sobre a técnica de mínimos quadrados ponderados. Ao considerar erros diferentes entre variáveis e entre observações simultaneamente, a resolução proposta é feita alternadamente por duas funções objetivo, porém utilizando ainda a decomposição em valores característicos (Equação 3.12).

PCA iterativo (*Iterative PCA*) [168] é a alternativa mais recente e com profunda base teórica, desenvolvida para processos com erros de variáveis não-isotrópicos. A idéia desta técnica é fazer uso de ponderações arbitrárias sobre as variáveis e inspecionar o respectivo resultado em termos de probabilidade. Mais uma vez é considerada a hipótese de variáveis normais; portanto, o problema de estimação recai na técnica de mínimos quadrados ponderados com um dado grau de liberdade. Neste caso, este problema deve ser resolvido por técnicas de otimização. As ponderações ótimas geram a matriz de covariância do erro das variáveis.

3.5.5. PCA robusto

As técnicas classificadas como PCA robusto (*Robust PCA*) têm por objetivo garantir a geração correta do modelo PCA, lidando com problemas relacionados a observações insuficientes, perdidas, espúrias ou sob condições impostas por fatores externos. Desconsiderando o problema de observações insuficientes, que não satisfaz a Lei dos Grandes Números, os problemas restantes podem ser generalizados como sendo de valor espúrio. A literatura especializada apresenta duas principais vertentes para resolução deste problema geral: *i*) estimação robusta e *ii*) ponderação robusta. Três trabalhos de revisão são referências apropriadas para este grande número de técnicas [169-171]. A seguir são revisadas algumas das principais técnicas propostas neste tópico.

Seguindo a primeira vertente da literatura, a estimação robusta, algumas técnicas utilizam estatísticas descritivas alternativas para gerarem a matriz de covariâncias dos dados sem a influência dos valores espúrios. Estas estatísticas alternativas são, por exemplo, a mediana ou a moda para a tendência central, e o desvio absoluto da mediana (MAD) ou os estimadores S_n ou Q_n para a dispersão. Com a normalização dos dados por estas estatísticas, obtém-se uma matriz de covariâncias robusta e, assim, um modelo PCA robusto, tendo em vista que as estatísticas geralmente usadas, média e desvio padrão, são facilmente corrompidas por valores espúrios. Outra técnica que faz uso destes estimadores é a busca por projeção (*Projection Pursuit*), em que a associação dos dados não é mais medida pela correlação, mas sim por um estimador robusto, como MAD, S_n ou Q_n .

Ainda em relação às técnicas de estimadores robustos, diversas funções têm sido propostas para transformar os resíduos de um dado modelo e, com isso, obter uma estimativa robusta. Estes estimadores são chamados de estimadores-M e podem ser aplicados a qualquer modelo matemático. Alguns dos estimadores mais conhecidos são os estimadores de Cauchy, Fair, Hampel, Huber e Welsch [10].

Em relação à segunda vertente da literatura, a ponderação robusta, as técnicas reduzem ou eliminam a influência dos valores espúrios diretamente por meio de ponderação ou remoção. Basicamente, as técnicas elaboram meios de classificar todas as observações e ponderar aquelas consideradas espúrias. Como exemplos, podem ser citadas as técnicas de mínimos quadrados ponderados (*Least Trimmed Squares*) e ponderação multivariada (*Multivariate Trimming*), em que o resíduo do modelo e a

distância das observações até a tendência central são utilizados, respectivamente, como critérios para ponderação/remoção de valores espúrios.

3.5.6. PCA heterogêneo

Com base no não cumprimento da hipótese 6 da técnica de PCA pelos dados de um processo, algumas alternativas têm sido sugeridas pela literatura para aplicação em processos heterogêneos; ou seja, com propriedades estatísticas variáveis. Em relação a múltiplas tendências centrais, os modelos de mistura destacam-se por seu rigor estatístico, ao considerar cada tendência central isolada como sendo um componente normal de uma mistura [133,150].

Já em relação a processos heterocedásticos, em que a variância não se mantém constante nos dados, uma alternativa existente pode ser a técnica de PCA por máxima verossimilhança (*Maximum Likelihood PCA*) [36,37], que utiliza diferentes matrizes de covariâncias dos erros das variáveis ou uma matriz de covariâncias dos erros das observações. Outra alternativa para esta limitação é o uso direto de modelos heterocedásticos, bastante conhecidos na área de econometria, como o modelo autorregressivo com heterocedasticidade condicional (ARCH, *AutoRegressive Conditional Heteroskedasticity*).

3.6. Outras técnicas

Esta seção apresenta técnicas estatísticas multivariadas que oferecem outras estruturas de modelos, como os modelos causais e os modelos de classificação.

3.6.1. Modelos causais

Regressão por componentes principais (*Principal Component Regression*, PCR) é a primeira técnica apresentada e faz uso dos sinais do processo, extraídos de variáveis independentes pela técnica de PCA, para modelar variáveis dependentes deste mesmo processo. A estrutura do modelo PCR é dada a seguir,

$$\mathbf{t} = \Xi_1 \mathbf{x} + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \quad 3.24a$$

$$\mathbf{y} = \Xi_2 \mathbf{t} + \boldsymbol{\varepsilon}_2 \quad 3.24b$$

onde \mathbf{x} e \mathbf{y} são as variáveis independentes e dependentes do processo, respectivamente, enquanto que \mathbf{t} representa o vetor de variáveis latentes da técnica de PCA; ou seja, os componentes principais.

Outra técnica é a projeção para estruturas latentes ou mínimos quadrados parciais (*Projection to Latent Structures* ou *Partial Least Squares*, PLS). Esta técnica utiliza um único conjunto de sinais para prever todas as variáveis do processo, dependentes e independentes. Desta maneira, a dispersão deste conjunto de sinais indica o grau de associação entre os conjuntos de variáveis dependentes e independentes. A estrutura do modelo PLS é dada a seguir:

$$\mathbf{x} = \mathbf{\Xi}_1 \mathbf{t} + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \quad 3.25a$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{\Xi}_2 \mathbf{t} + \boldsymbol{\varepsilon}_2 \quad 3.25b$$

Contudo, uma vez que o conjunto de sinais é gerado para aproximar dois conjuntos diferentes de variáveis, o modelo PLS resultante geralmente necessita de um número grande de sinais extraídos.

Finalmente, a técnica de análise em variáveis canônicas (*Canonical Variate Analysis*, CVA) apresenta uma estrutura mais bem elaborada do que as demais técnicas. Um conjunto de variáveis latentes (sinais) é extraído de cada conjunto de variáveis originais do processo, dependentes e independentes, de tal forma que estas variáveis latentes tenham máxima associação. A estrutura do modelo CVA é dada a seguir,

$$\mathbf{u} = \mathbf{\Xi}_1 \mathbf{x} + \boldsymbol{\varepsilon}_1 \quad 3.26a$$

$$\mathbf{w} = \mathbf{\Xi}_2 \mathbf{y} + \boldsymbol{\varepsilon}_2 \quad 3.26b$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{u}^T \mathbf{w} \quad 3.26c$$

onde \mathbf{u} e \mathbf{w} são as variáveis latentes do conjunto de variáveis independentes e dependentes, respectivamente, e \mathbf{R} é a matriz diagonal de correlações entre essas variáveis latentes (variáveis canônicas).

3.6.2. Modelos de classificação

A técnica de análise discriminante linear ou de Fisher (*Linear Discriminant Analysis*, FDA – *Fisher Discriminant Analysis*, LDA), utiliza informação a priori sobre classes referentes aos dados de um sistema para geração de um modelo de classificação. A estrutura do modelo é semelhante à do modelo PCA, porém a maneira de extrair os sinais é ligeiramente diferente. A estrutura do modelo FDA é dada a seguir:

$$\mathbf{x} = \mathbf{\Xi} \mathbf{t} + \boldsymbol{\varepsilon} \begin{cases} \in \mathbb{C}_i & \text{se } \delta_1 \leq \mathbf{t} \leq \delta_2 \\ \notin \mathbb{C}_i & \text{se } \mathbf{t} < \delta_1 \text{ ou } \delta_2 < \mathbf{t} \end{cases} \quad 3.27$$

onde \mathbb{C}_i representa a classe i do sistema com limites δ_1 e δ_2 para os sinais.

3.7. Comentários finais

Conforme apresentado neste capítulo, a técnica de PCA oferece uma solução ótima para a extração de sinais de processos sujeitos a algumas hipóteses que, em muitos casos, são bastante razoáveis. Contudo, a complexidade da indústria moderna tem aumentado significativamente, devido aos processos atuais e suas interações necessárias, refletindo no comportamento dos dados gerados [172]. Desta forma, técnicas simples, como a técnica de PCA, podem não ser adequadas devido a suas limitações (Seção 3.4), fazendo com que técnicas mais complexas sejam cada vez mais necessárias para a modelagem dos dados. Conforme mostrado na Seção 3.5, muitos trabalhos vêm sendo realizados na literatura com o intuito de simular ou extrair as verdadeiras fontes de variação dos processos, respeitando o comportamento natural dos dados. Alguns destes trabalhos possuem grande potencial para uma ampla variedade de análises no tratamento de dados, que são pertinentes para a investigação das condições dos processos. Neste sentido, é possível citar os trabalhos de Schölkopf e colaboradores à frente do desenvolvimento de abordagens e técnicas com base em funções núcleo [35].

Durante a realização deste trabalho de tese, identificaram-se também as técnicas de PCA funcional e suas extensões [173] como técnicas bastante úteis e promissoras, devido a suas versatilidades no tratamento e modelagem de dados. Alguns estudos preliminares foram desenvolvidos no sentido de utilizar bases funcionais (*splines*, por exemplo) para modelar nuvens de dados não-lineares, tendências temporais qualitativas e quantitativas, bateladas, operações cíclicas e outras variáveis funcionais de interesse da engenharia química, como curvas de probabilidade de erros de medição ou predição e espectros de infravermelho. De uma maneira geral, existe uma ampla gama de técnicas com base na análise em dados funcionais que podem ser diretamente aplicadas (e com grandes chances de sucesso) nos problemas da engenharia química, não somente na área de monitoramento de processos.

Finalmente, a divisão do problema original em “partes menores” pode auxiliar as técnicas a obter um desempenho melhor na aplicação em dados industriais. A utilização de janelas móveis temporais, modelos locais e/ou estimacões recursivas tem mostrado bons resultados, utilizando dados oriundos de processos reais [9,10,125,152,158].

CAPÍTULO IV

TECNOLOGIAS DE MONITORAMENTO

Este capítulo apresenta a base teórica necessária para a compreensão das principais técnicas de monitoramento existentes na literatura e utilizadas neste trabalho. Primeiramente, algumas hipóteses sobre a composição dos dados de processos devem ser feitas. Por isto, uma breve explicação é dada a seguir sobre a natureza dos dados analisados.

Nas indústrias, todas as variáveis medidas, que serão utilizadas para monitoramento, são compostas pelos sinais do processo (informação ou valor verdadeiro), por sinais das vizinhanças do processo e do sistema de medição (ruído ou erro) e por sinais de falhas, quando houver. A Figura 4.1 ilustra a composição geral de uma variável de processo medida.

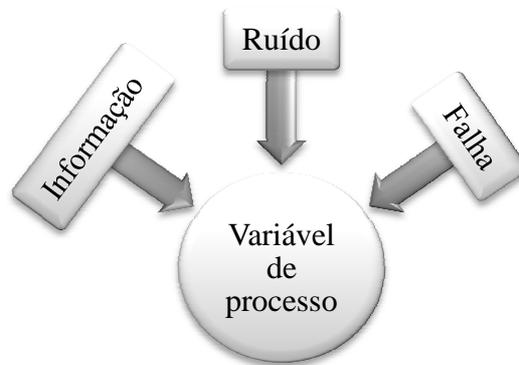


Figura 4.1: Composição de uma variável medida de um processo industrial.

Como a geração de modelos deve ser feita com a utilização de dados em condições normais de operação, admite-se que a parcela de falha é nula, restando apenas informação e ruído. Neste ponto, alguns métodos ainda utilizam conhecimento prévio sobre o ruído do processo para gerar o modelo. Similarmente, alguns métodos utilizam dados de falhas ocorridas previamente para o auxílio na identificação. Estas questões são discutidas nas seções que seguem. Por razões didáticas, este capítulo está dividido nas seguintes seções: *i*) tecnologia para monitoramento univariado; e *ii*) tecnologia para monitoramento multivariado.

4.1. Tecnologia para monitoramento univariado

Estas técnicas são compostas basicamente por cartas de controle individuais para variáveis importantes do processo e representam o alicerce do monitoramento estatístico utilizado até os dias de hoje. Regras probabilísticas também compõem os

sistemas de monitoramento, porém com menor expressão. As referências [174,175] foram utilizadas para a composição desta seção.

4.1.1. Cartas de controle de Shewhart

Nomeadas em homenagem ao “pai do Controle Estatístico de Processos” (CEP), estas cartas exibem o comportamento de variáveis importantes para o processo monitorado e consideradas normais. Sendo assim, uma carta é destinada ao monitoramento de sua tendência e outra carta é destinada ao monitoramento da dispersão (neste caso, a amplitude móvel, apenas por razões práticas). O conjunto de Equações 4.1 define os elementos presentes na carta de monitoramento de tendências, enquanto que o conjunto de Equações 4.2 define os elementos da carta de dispersão,

$$\text{dados} = \mathbf{x} \quad 4.1a$$

$$\text{média} = \hat{\mu}_{n_k} \quad 4.1b$$

$$\text{limites} = \hat{\mu}_{n_k} \pm z_{\alpha/2} \frac{\bar{R}_{n_k}}{\mu_w} \quad 4.1c$$

$$\text{amplitude} = \left| \max(\mathbf{x}_{n_w}) - \min(\mathbf{x}_{n_w}) \right| \quad 4.2a$$

$$\text{amplitude média} = \bar{R}_{n_k} \quad 4.2b$$

$$\text{limites} = \left(1 \pm z_{\alpha/2} \frac{\sigma_w}{\mu_w} \right) \bar{R}_{n_k} \quad 4.2c$$

onde \mathbf{x} e \mathbf{x}_{n_w} são o vetor de todos os dados analisados e o vetor contendo apenas uma janela móvel de tamanho n_w , $\hat{\mu}_{n_k}$ e \bar{R}_{n_k} são estimativas da média e da amplitude média de n_k dados históricos em condições normais, $z_{\alpha/2}$ é o percentil da distribuição normal, α é a tolerância admitida e μ_w e σ_w são a média e o desvio padrão da amplitude de uma variável normal padronizada. A Figura 4.2 ilustra as cartas de Shewhart, com tolerância de 1 % e janela de tamanho $n_w = 2$, para um conjunto de dados de média zero e variância unitária em condições normais. Note que em 100 observações, espera-se que 1 (em média) esteja fora dos limites estatísticos, conforme mostrado na Figura 4.2. Além disso, como o limite inferior das amplitudes não pode ser negativo, ele é alterado para zero.

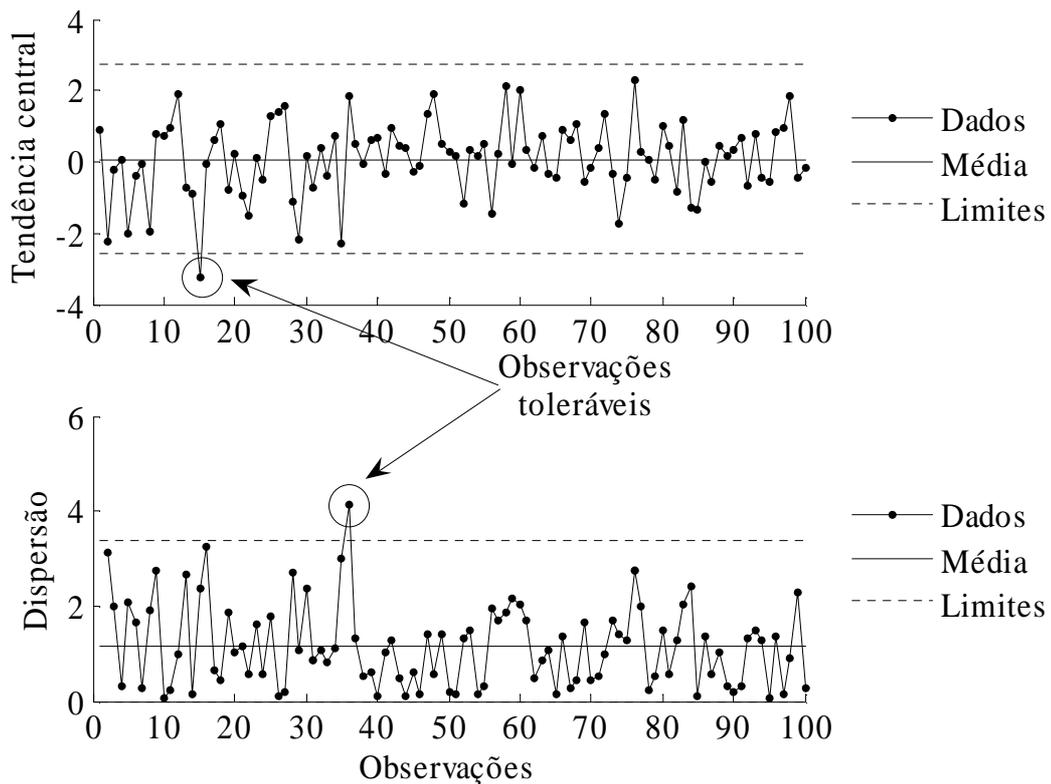


Figura 4.2: Cartas de controle de Shewhart.

Vale ressaltar que, na prática, o conceito de observação tolerável é polêmico, uma vez que se necessita do conhecimento do conjunto total de dados para identificar que as observações toleradas são apenas flutuações aleatórias; na rotina do monitoramento não são conhecidas as observações *a posteriori*. Sendo assim, normalmente são usados dois limites: um com tolerância (menor) e outro sem tolerância (maior). No primeiro caso, uma não conformidade é tolerada e checada nas observações posteriores (caso da Figura 4.2). No segundo caso, a não-conformidade não é tolerada e gera uma ação de controle imediata.

4.1.2. Regras de decisão

Embora as cartas de controle detectem falhas por meio de observações fora dos limites estatísticos e, assim, improváveis de ocorrer em um dado período de tempo, outros tipos de falhas ainda podem incidir sobre a variável monitorada, mesmo que as observações permaneçam dentro da região de confiança. Alguns exemplos são ciclos ao redor da média e tendências sutis para longe da média. De modo a detectar estes padrões determinísticos no interior das cartas de controle, onde a condição da variável é supostamente normal, algumas regras com base probabilística foram propostas para a

detecção destes tipos de falhas. Dentre as regras mais tradicionais está o conjunto da empresa *Western Electric Company*, que afirma que a variável está em condição anormal quando há:

- i. 1 observação fora dos limites 3-sigma ($z_{\alpha/2} = 3$);
- ii. 2 entre três observações consecutivas além dos limites de 2-sigma ($z_{\alpha/2} = 2$);
- iii. 4 entre 5 observações consecutivas além dos limites de 1-sigma ($z_{\alpha/2} = 1$);
- iv. 8 observações consecutivas de um lado da média.

A Figura 4.3 ilustra o comportamento relativo a cada regra.

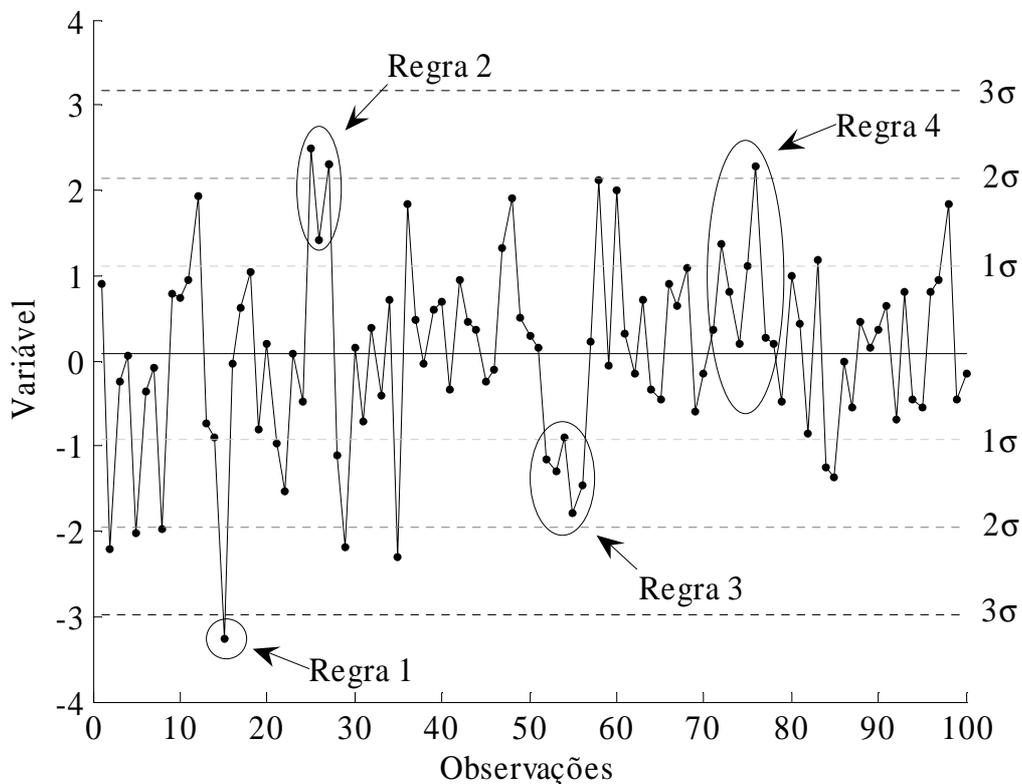


Figura 4.3: Regras de decisão.

4.1.3. Cartas de controle CUSUM e EWMA

Além das regras de decisões, outras alternativas mais práticas foram propostas para a detecção de desvios sutis da média da variável monitorada, como as cartas de controle CUSUM e EWMA. Estas cartas utilizam estatísticas que consideram informações correntes e passadas recentes, fazendo com que sejam mais sensíveis a

pequenas mudanças. As estatísticas das cartas CUSUM (tabular) estão apresentadas nas Equações 4.3,

$$C_k^+ = \max\left(0, x_k - \left(\mu + \frac{\Delta\mu}{2}\right) + C_{k-1}^+\right) \quad 4.3a$$

$$C_k^- = \max\left(0, \left(\mu - \frac{\Delta\mu}{2}\right) - x_k + C_{k-1}^-\right) \quad 4.3b$$

onde C_k^+ e C_k^- são as somas cumulativas unilaterais superior e inferior na observação k e μ e $\Delta\mu$ são a média e o desvio da média, respectivamente. Para a geração dos limites estatísticos, a literatura sugere o uso de 5σ . A Figura 4.4 ilustra a utilização desta carta, para o monitoramento de uma variável de média zero e variância unitária, em que existe um desvio da média de 1σ ($\Delta\mu = 1$) a partir da observação 51.

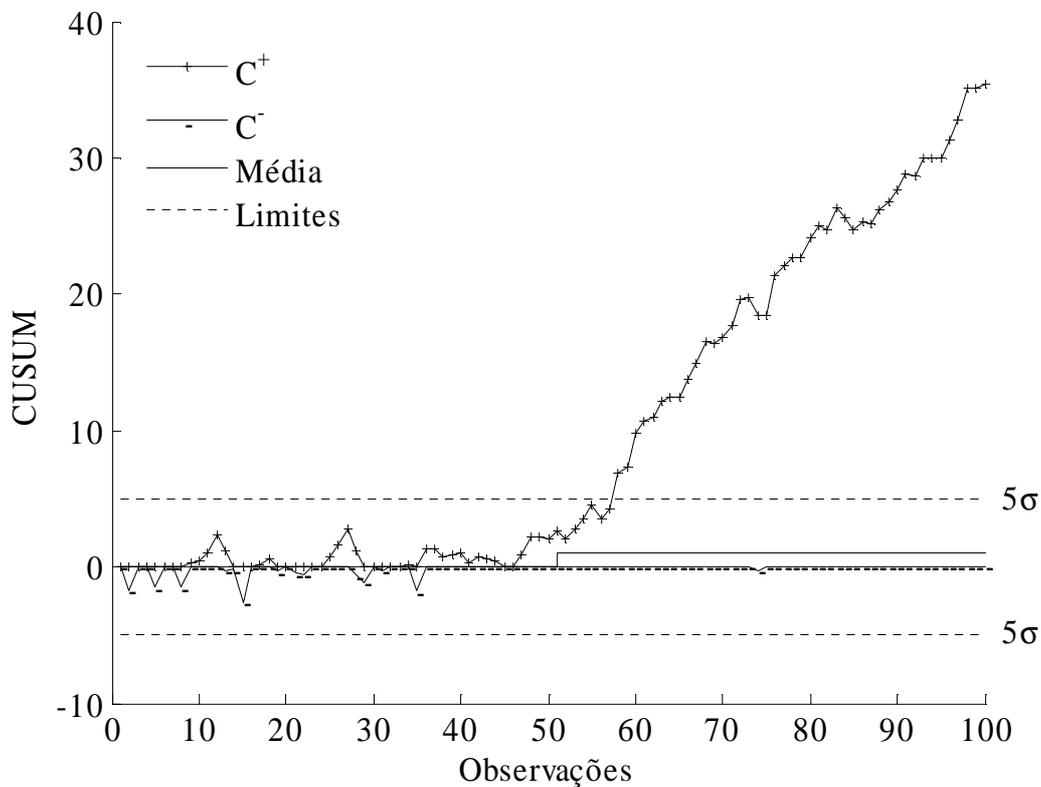


Figura 4.4: Carta de controle CUSUM.

Já a carta de controle EWMA utiliza uma média móvel ponderada exponencialmente para eliminação do ruído excessivo e, assim, obter uma detecção mais adequada para desvios sutis da média. As estatísticas desta carta estão apresentadas nas Equações 4.4,

$$z_k = \lambda x_k + (1 - \lambda) z_{k-1} \quad 4.4a$$

$$\text{média} = \hat{\mu}_{n_k} \quad 4.4b$$

$$\text{limites} = \hat{\mu}_{n_k} \pm L\hat{\sigma}_{n_k} \sqrt{\left(\frac{\lambda}{2-\lambda}\right)\left(1-(1-\lambda)^{2k}\right)} \quad 4.4c$$

onde z_k é a média móvel ponderada exponencialmente na observação k , λ é o parâmetro de esquecimento (entre maior que 0 e 1), $\hat{\mu}_{n_k}$ e $\hat{\sigma}_{n_k}$ são estimativas da média e do desvio padrão usando n_k observações em condições normais e L é a distância entre os limites de controle (normalmente entre 2,5 e 3). A Figura 4.5 ilustra a carta de controle EWMA, com parâmetros $L = 2,5$ e $\lambda = 0,2$, para o mesmo conjunto de dados analisado com a carta CUSUM.

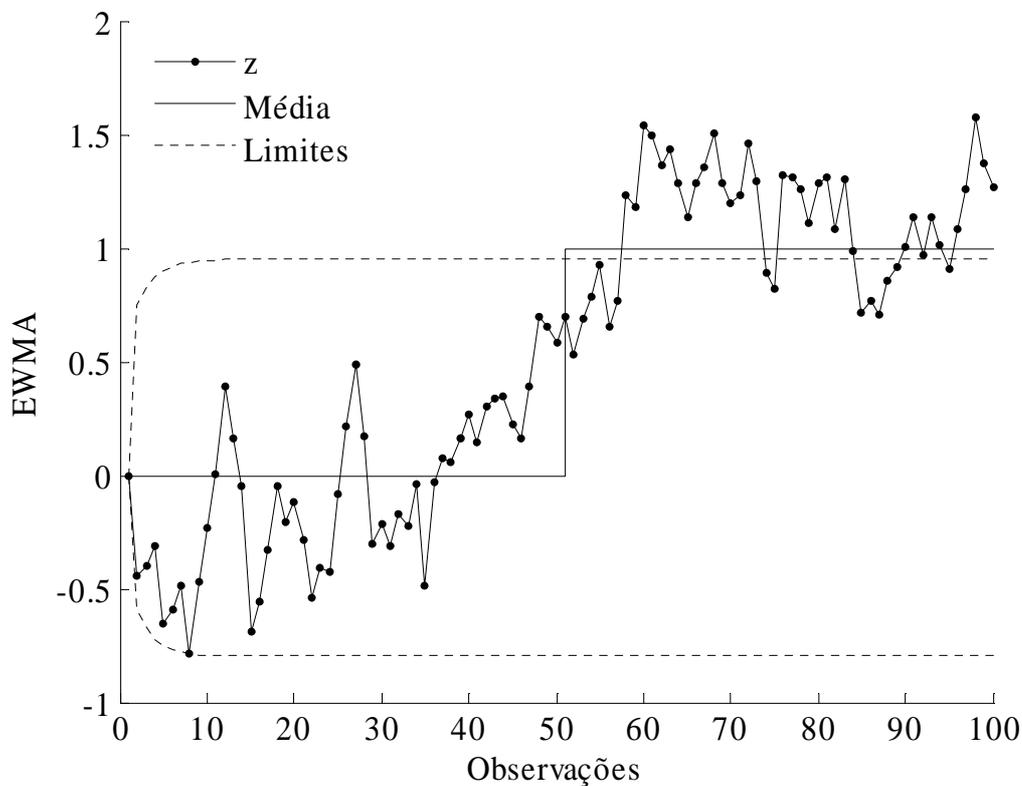


Figura 4.5: Carta de controle EWMA.

Vale ressaltar que ambas as cartas de controle, CUSUM e EWMA, detectaram na observação 58 o desvio da média de 0 para 1, ocorrido na observação 51. Por outro lado, a aplicação da carta de Shewhart, mostrada na Figura 4.6, revelou-se superior a ambas, utilizando-se as regras de decisão da Seção 4.1.2. Este resultado realça a importância do monitoramento do comportamento estatístico das variáveis como um todo e não somente pela regra 1.

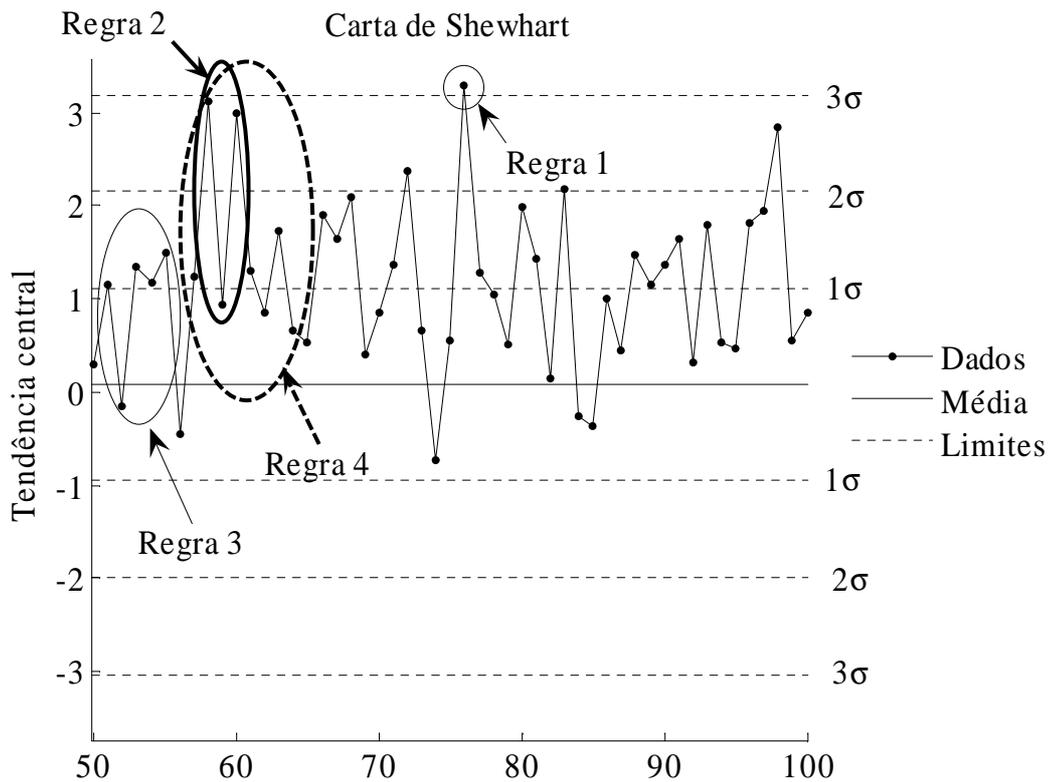


Figura 4.6: Carta de controle de Shewhart.

4.2. Tecnologia para monitoramento multivariado

Diferentemente das cartas de controle univariadas, as técnicas multivariadas monitoram o processo como um todo, fazendo uso de estatísticas aplicadas em todas as variáveis relevantes simultaneamente. Como as variáveis observadas apresentam necessariamente associações, devido à resposta a um conjunto comum de fenômenos envolvidos no processo, o uso de um modelo estatístico de associação, como o modelo PCA, é desejável, ao invés do uso da média ou da amplitude dessas observações, que podem ser interpretadas como modelos apenas para a tendência central e para a dispersão, respectivamente. A Figura 4.7 ilustra uma comparação entre ambos os tipos de abordagem para monitoramento, univariado e multivariado, em que a observação número 90 é analisada.

Como é possível notar na Figura 4.7 e de acordo com a observação 90, as duas variáveis possuem forte associação positiva, sugerindo o uso de um modelo estatístico apropriado. Além disso, a região de condição normal das variáveis em uma abordagem

multivariada (a elipse) é menor do que aquela oriunda de uma abordagem univariada (o quadrado). Sendo assim, podem existir falhas que somente uma abordagem multivariada seja capaz de detectar. Algumas abordagens estatísticas são apresentadas a seguir, utilizando o modelo PCA.

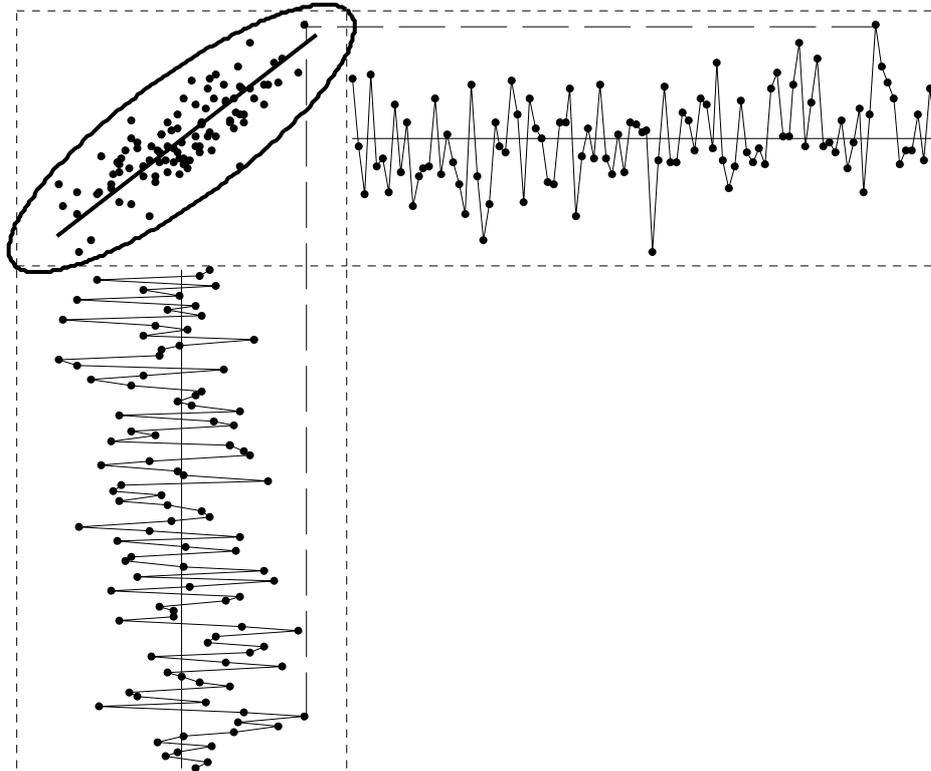


Figura 4.7: Comparação entre os monitoramentos univariados e multivariado.

4.2.1. Estatísticas T^2 de Hotelling e Q (ou SPE)

De modo a gerar cartas de controle semelhantes às cartas univariadas, algumas estatísticas podem ser utilizadas, com o auxílio de um modelo PCA para o processo. A primeira estatística, T^2 de Hotelling [111,128], está baseada na variabilidade dos componentes principais. Dessa forma, a estatística T^2 indica se os dados estão em concordância com o modelo. Esta estatística testa, por meio do bem conhecido teste F , a igualdade das variâncias (corrente e registrada) dos componentes principais. As Equações 4.5 apresentam os elementos necessários para o monitoramento,

$$T^2 = \mathbf{t}^T \Lambda_n^{-1} \mathbf{t} \quad 4.5a$$

$$T_{max}^2 = \frac{n_t (n_k^2 - 1)}{n_k (n_k - n_t)} F_\alpha (n_t, n_k - n_t) \quad 4.5b$$

onde n_t e n_k são os números de componentes escolhidos e observações para compor e gerar o modelo e F_α é o percentil da distribuição F com n_t e $n_k - n_t$ graus de liberdade e tolerância α [128]. A Equação 4.5a é uma medida padronizada da variância das n_t direções selecionadas (cuja variância total é idealmente igual a n_t). A Equação 4.5b é uma relação oriunda das hipóteses de normalidade da variação dos sinais e de amostragem suficientemente grande, admitindo-se que médias e covariâncias populacionais podem ser estimadas dos dados.

A segunda estatística Q ou SPE (*Squared Prediction Error*) [111,128] está baseada na variabilidade dos dados em relação ao modelo; ou seja, na variabilidade do resíduo, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}}$. Como neste caso as variáveis utilizadas por hipótese seguem a distribuição normal, a variável Q , definida como a soma dos desvios ao quadrado, segue a distribuição χ^2 . As Equações 4.6 apresentam os elementos necessários para o monitoramento,

$$Q = \tilde{\mathbf{x}}^T \tilde{\mathbf{x}} \quad 4.6a$$

$$Q_{max} = g \chi_\alpha^2 (h) \quad 4.6b$$

onde g e h são parâmetros estimados conforme a Equação 4.7a ou 4.7b (método de combinação dos momentos) e χ_α^2 é o percentil da distribuição χ^2 com tolerância α [128].

$$g = \frac{\sum_{i=n_t+1}^{n_x} \lambda_i^2}{\sum_{i=n_t+1}^{n_x} \lambda_i} \quad e \quad h = \frac{\left(\sum_{i=n_t+1}^{n_x} \lambda_i \right)^2}{\sum_{i=n_t+1}^{n_x} \lambda_i^2} \quad 4.7a$$

$$g = \frac{\hat{\sigma}_Q^2}{2\hat{\mu}_Q} \quad e \quad h = \frac{2\hat{\mu}_Q^2}{\hat{\sigma}_Q^2} \quad 4.7b$$

Nas Equações 4.7, λ são os valores característicos residuais ($i = n_t+1 \dots n_x$) e $\hat{\mu}_Q$ e $\hat{\sigma}_Q^2$ são estimativas da média e da variância da estatística Q aplicada a dados registrados em condições normais de operação. Mais detalhes sobre as Equações 4.6 e 4.7 podem ser obtidos na referência [176].

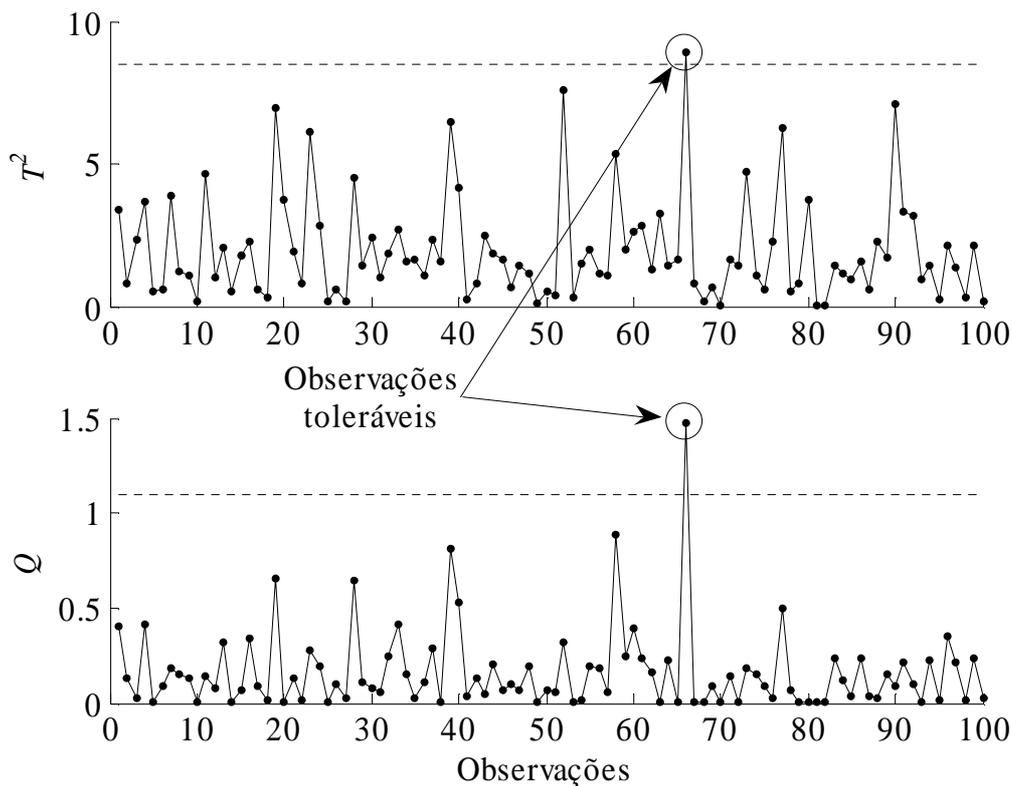


Figura 4.8: Estatísticas T^2 de Hotelling e Q .

A Figura 4.8 ilustra as cartas geradas pelas Estatísticas T^2 e Q aplicadas a um conjunto de 100 observações de duas variáveis normais padronizadas e correlacionadas, e com $\alpha = 0,01$, ou seja, 1% de tolerância. A discussão sobre observações toleráveis no caso do monitoramento univariado (Seção 4.1.1) são também aplicáveis para o caso multivariado. Porém, uma observação de uma estatística (T^2 ou Q , por exemplo) fora dos limites de confiança pode ser mais impactante, devido ao acumulado de informações utilizado na geração dessas estatísticas. Em outras palavras, somente uma combinação de valores extremos entre as variáveis ou um valor espúrio de uma variável pode originar tais valores elevados das estatísticas, rendendo assim maior probabilidade de condição anormal de operação do processo.

4.2.2. Abordagem local estatística

Similarmente à tecnologia univariada, as técnicas multivariadas tradicionais também sofrem com a falta de sensibilidade a mudanças sutis no processo. De modo a sanar este problema, algumas técnicas foram propostas na literatura, como versões das cartas de CUSUM e EWMA multivariadas. Entretanto, a abordagem local estatística é considerada a melhor opção devido a seu forte respaldo teórico [27].

A técnica consiste na definição de um resíduo primário, que deve apresentar propriedades estatísticas apropriadas, como ser uma função de dimensão finita, diferenciável em relação aos seus parâmetros e possuir média nula na condição normal e não-nula em condição de falha sutil, além de possuir mesma covariância em ambas as condições. A função escolhida é geralmente a função objetivo para estimação do modelo. Definido o resíduo primário, a técnica ainda faz uso de um processamento deste resíduo de forma a torná-lo normalizado, definindo assim o resíduo normalizado. Este processamento, em termos práticos, é feito com o auxílio de uma janela móvel, utilizando observações correntes e passadas recentes, assim como na tecnologia univariada. Esta normalização garante as propriedades estatísticas necessárias para o resíduo se tornar uma variável normal, podendo ser monitorado, por exemplo, de acordo com a distribuição χ^2 , utilizando os resíduos ao quadrado.

KRUGER *et al.* [122] aplicaram esta abordagem local ao modelo PCA. Dada a função objetivo para estimar o modelo, Equação 4.8,

$$f = \mathbf{p}^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{p} - \lambda (\mathbf{p}^T \mathbf{p} - 1) \quad 4.8$$

a determinação de dois resíduos primários (usando a função objetivo e uma transformação desta) foi feita de acordo com as Equações 4.9,

$$\mathbf{r}_p = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 2 \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{p} - 2\lambda \mathbf{p} = 2 \mathbf{X} \mathbf{t} - 2\lambda \mathbf{p} \quad 4.9a$$

$$r_\lambda = \frac{\partial f}{\partial \lambda} = 2 \mathbf{p}^T \mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{p} - 2\lambda \mathbf{p}^T \mathbf{p} = 2 \mathbf{t}^T \mathbf{t} - 2\lambda \quad 4.9b$$

onde \mathbf{r}_p e r_λ são os resíduos primários que satisfazem as exigências necessárias e possuem máxima sensibilidade em relação aos vetores e valores característicos, respectivamente. Estes resíduos são organizados na forma de dois vetores e processados, dando lugar aos resíduos normalizados, ambos apresentados pela Equação 4.10,

$$\bar{\mathbf{r}}_k = \frac{1}{\sqrt{n_w}} \sum_{w=k-n_w+1}^k \mathbf{r}_w \quad 4.10$$

onde n_w é o número de observações da janela móvel. Finalmente, estes dois vetores de resíduos normalizados são divididos em dois grupos cada, principal e residual, e quatro variáveis χ^2 são geradas, Equação 4.11, de modo a atuar em cartas para monitoramento.

$$\chi^2 = \bar{\mathbf{r}}^T \mathbf{S}_{\bar{\mathbf{r}}}^{-1} \bar{\mathbf{r}} \quad 4.11$$

onde S_{rr} é a matriz de covariância dos resíduos normalizados, obtida em condição normal de operação. Esta matriz é utilizada para padronizar a importância de cada resíduo na composição da variável monitorada. Os limites de confiança podem ser determinados de acordo com o percentil da distribuição χ^2 com graus de liberdade iguais a n_t e $n_x - n_t$ para χ^2_λ (principal e residual) e $n_x n_t$ e $n_x(n_x - n_t)$ para χ^2_p (principal e residual).

As Figuras 4.9 e 4.10 ilustram a abordagem local, utilizando o modelo PCA e comparando com as Estatísticas T^2 e Q . São geradas 100 observações para 2 variáveis normais padronizadas e correlacionadas, fazendo com que o modelo seja composto por 1 componente principal ($x_1 = x_2$). Apenas as cartas com base nos valores característicos são utilizadas. No primeiro caso, Figura 4.9, a média de cada variável é acrescida de um desvio padrão a partir da observação 51, ou seja, suas médias passam a valer 1 no lugar de 0.

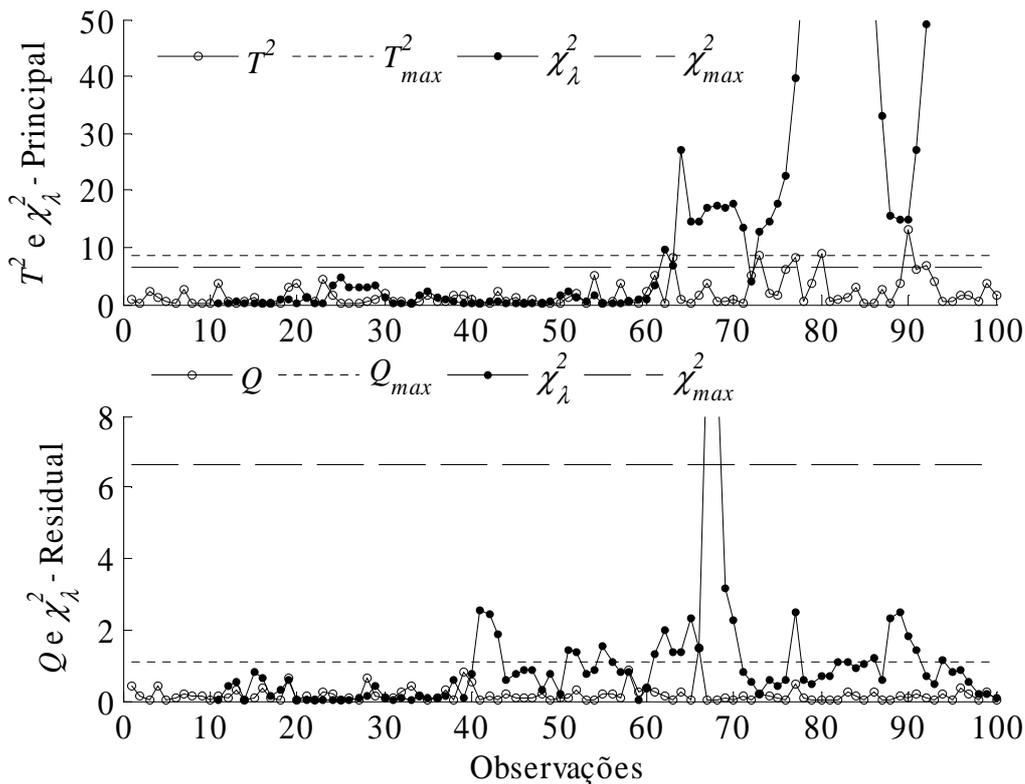


Figura 4.9: Abordagem local para dados que extrapolam o modelo PCA.

Já no segundo caso, Figura 4.10, apenas a média da primeira variável foi modificada para 1 a partir da observação 51. De acordo com estes exemplos, é possível fazer as mesmas interpretações das cartas tradicionais. Ou seja, no primeiro caso, onde

apenas a primeira carta detectou a falha, os dados são deslocados sutilmente ao longo do modelo, fazendo com que a variância dos componentes principais aumente. No segundo caso, onde apenas a segunda carta detectou a falha, a correlação das variáveis é quebrada devido ao deslocamento dos dados em direção a apenas uma das variáveis, fazendo com que a variância residual seja alterada.

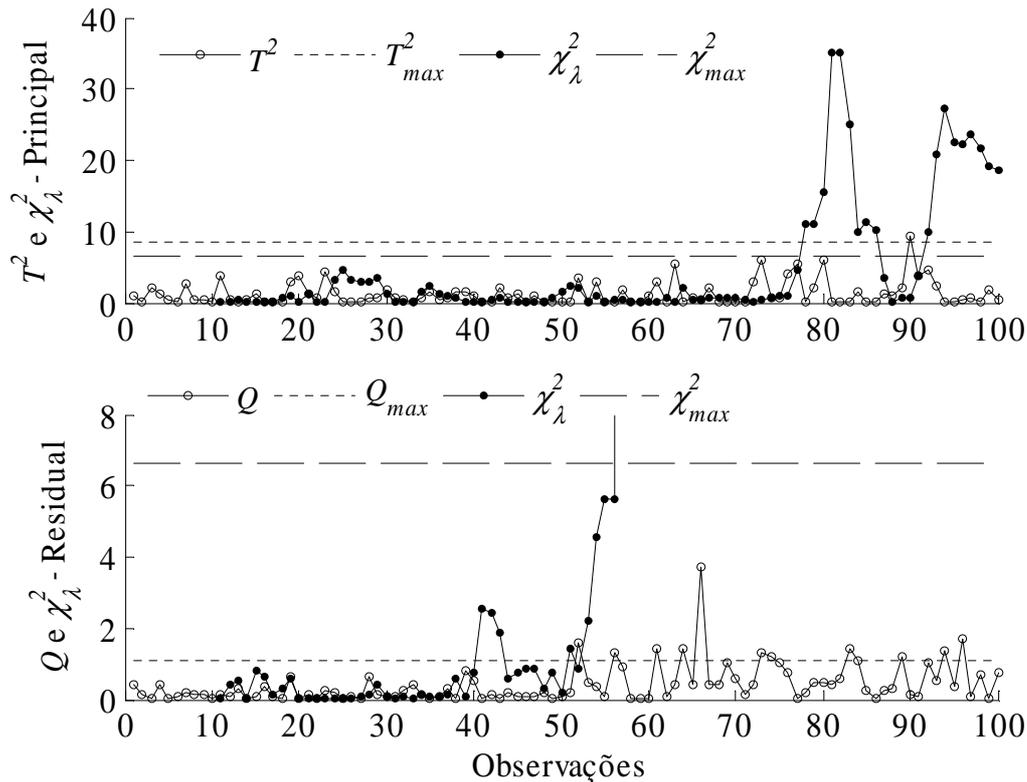


Figura 4.10: Abordagem local para dados com falha em uma das variáveis.

Como é possível observar nas Figuras 4.9 e 4.10, os índices baseados na abordagem local foram claramente capazes de detectar as condições anormais, enquanto que as Estatísticas T^2 e Q apresentaram resultados ruins, em relação ao primeiro caso, e bons resultados, para o segundo caso. Entretanto, a despeito da clareza dos resultados, as Estatísticas T^2 e Q apresentaram mudanças na flutuação de seus valores que, utilizando regras baseadas em suas curvas de probabilidade, poderiam ter sido identificadas com mais evidência.

4.2.3. Índices para diagnóstico de falha

Uma vez que a tecnologia multivariada aborda o processo como um todo, reunindo todas as variáveis relevantes (e correlacionadas) e aplicando estatísticas para a

detecção de falhas, as etapas posteriores, como isolamento da falha e identificação da falha ou do sinal de falha, tornam-se mais desafiadoras. Em virtude desta dificuldade, diversas técnicas têm sido propostas na literatura para o diagnóstico de falhas. É possível dividir as técnicas em dois grandes grupos: *i*) técnicas que utilizam informação de falhas conhecidas *a priori* e *ii*) técnicas que não utilizam informação *a priori*. Tendo em vista que o conhecimento de falhas não é uma situação geral nos processos industriais e que, além disso, estes processos estão sempre sujeitos a outras falhas ainda desconhecidas, as técnicas analisadas nesta seção são pertencentes ao segundo grupo da classificação.

Neste segundo grupo, apenas as etapas de isolamento da falha e de identificação do sinal de falha podem ser realizadas. Mais especificamente, as informações geradas nestas etapas são: um sub-conjunto de variáveis mais afetadas pela falha, as observações em que a falha foi mais impactante, o tipo de falha (estocástica, insipiente, sutil, brusca, etc), a estimativa do sinal de falha e, conseqüentemente, as estimativas das variáveis isentas de falha; ou seja, reconstruídas (reconciliadas ou ainda retificadas). As técnicas baseadas no modelo PCA mais comuns da literatura envolvem três diferentes maneiras, de acordo com sua base teórica, para a realização destas etapas: *i*) contribuição de cada variável ao índice estatístico [111], *ii*) colinearidade entre as direções de cada variável e das observações correntes [90,91,137] e *iii*) reconstrução de cada variável com base no modelo [84,85]. A seguir são dados exemplos ilustrativos para cada tipo de técnica.

O primeiro tipo de técnica está diretamente relacionado com a estatística usada para detecção da falha. As Equações 4.12 apresentam as contribuições de uma variável *i* às Estatísticas T^2 e Q .

$$c_i^{T^2} = \sum_{j=1}^{n_t} t_j \lambda_j^{-1} p_{j,i} x_i \quad 4.12a$$

$$c_i^Q = \tilde{x}_i^2 \quad 4.12b$$

Na primeira equação, a parcela de cada variável presente em cada componente principal é agrupada e corresponde à contribuição de cada variável para a condição descrita pela estatística. Na segunda equação, o resíduo de cada variável ao quadrado define a contribuição de cada variável para a Estatística Q . Estas duas medidas são de longe as mais conhecidas da literatura, porém possuem uma desvantagem conhecida como efeito *smearing*. Este efeito é dado pela propagação do sinal de falha em todas as

variáveis, podendo tornar a etapa de isolamento imprecisa. A Figura 4.10 ilustra o esquema de contribuição para o subespaço residual; ou seja, a Estatística Q .

Como é possível observar na Figura 4.11, as contribuições c_1 e c_2 são predominantes sobre a contribuição c_3 ; porém, c_1 não é totalmente devida à observação anormal, uma vez que o elemento mais significativo do componente principal é proveniente da variável x_1 . Em outras palavras, a variável mais relevante para o componente principal terá a maior contribuição, considerando um conjunto de dados em condições normais. Isto faz com que haja possibilidade de erros de diagnóstico de falha.

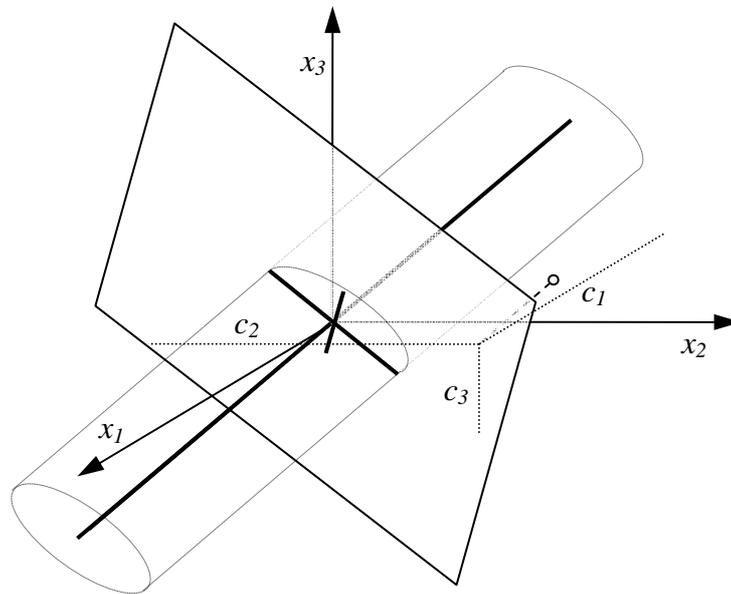


Figura 4.11: Esquema da técnica de contribuições.

O segundo tipo de técnica está baseado em medidas de colinearidades entre direções das variáveis e das observações correntes. Ambas as direções são projetadas no subespaço principal e no residual, de forma a gerar dois índices de colinearidade. As Equações 4.13 apresentam estes índices.

$$\cos(\hat{\theta}_i) = \frac{\hat{\mathbf{x}}^T \hat{\mathbf{d}}_i}{\sqrt{\hat{\mathbf{x}}^T \hat{\mathbf{x}} \hat{\mathbf{d}}_i^T \hat{\mathbf{d}}_i}} \quad 4.13a$$

$$\cos(\tilde{\theta}_i) = \frac{\tilde{\mathbf{x}}^T \tilde{\mathbf{d}}_i}{\sqrt{\tilde{\mathbf{x}}^T \tilde{\mathbf{x}} \tilde{\mathbf{d}}_i^T \tilde{\mathbf{d}}_i}} \quad 4.13b$$

onde $\hat{\mathbf{x}}$, $\tilde{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{d}}_i$ e $\tilde{\mathbf{d}}_i$ são projeções da observação corrente e da direção da variável i nos subespaços principal e residual, respectivamente. A direção \mathbf{d}_i é dada pelo i -ésimo vetor da matriz identidade. De modo a evitar ruídos, a direção de \mathbf{x} pode ser dada pela média

das observações corrente e passadas recentes. A Figura 4.12 ilustra o esquema da técnica de colinearidades.

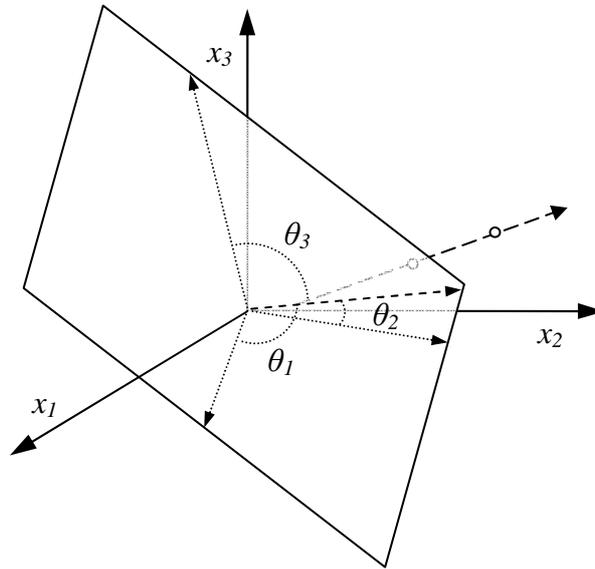


Figura 4.12: Esquema da técnica de colinearidades.

Na Figura 4.12, as setas pontilhadas dentro do plano residual são as projeções das coordenadas das variáveis, $\tilde{\mathbf{d}}_i$, e a seta tracejada é a projeção das observações mais recentes, $\tilde{\mathbf{x}}$. Os índices de valores mais próximos a 1 (ou -1) são referentes às variáveis mais afetadas pela falha.

Finalmente, o terceiro tipo de técnica baseia-se na utilização do modelo para estimativa das variáveis isentas de falha. As estimativas são feitas em um procedimento alternado, considerando cada variável como sendo a única responsável pela falha. Em seguida, este sinal de falha é removido da Estatística Q , fazendo com que seu valor seja o mais reduzido para a variável mais afetada. O índice proposto para isolamento de falhas e baseado neste raciocínio é chamado SVI (*Sensor Validity Index*) [84,85]. As Equações 4.14 apresentam os elementos desta técnica,

$$\tilde{f}_i = (\tilde{\mathbf{d}}_i^T \tilde{\mathbf{d}}_i)^{-1} \tilde{\mathbf{d}}_i^T \tilde{\mathbf{x}} \quad 4.14a$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_i = \tilde{f}_i \tilde{\mathbf{d}}_i \quad 4.14b$$

$$SVI_i = \frac{Q_i}{Q} = \frac{(\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{r}}_i)^T (\tilde{\mathbf{x}} - \tilde{\mathbf{r}}_i)}{\tilde{\mathbf{x}}^T \tilde{\mathbf{x}}} \quad 4.14c$$

onde f_i e \tilde{r}_i são a magnitude e a projeção residual do sinal da falha, considerando a variável i como afetada. A Figura 4.13 ilustra o esquema da técnica de reconstruções.

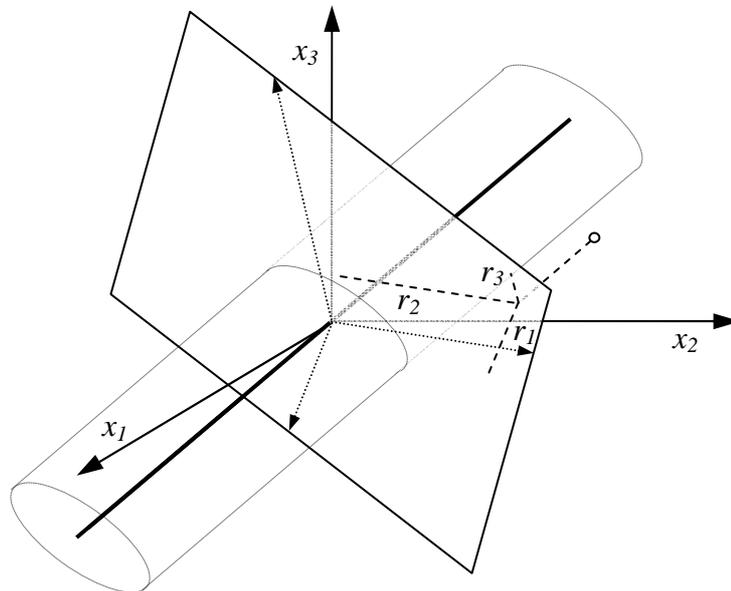


Figura 4.13: Esquema da técnica de reconstruções.

Mais uma vez, as setas pontilhadas no plano residual correspondem às projeções das variáveis, enquanto que as linhas tracejadas indicam a parcela de falha da observação, considerando cada variável como sendo a única causadora da falha.

Repare que nas técnicas baseadas em colinearidades e em reconstruções, a variável indicada foi x_2 isoladamente, diferente da técnica baseada em contribuições. Isto indica o fato destas duas últimas técnicas possuírem o efeito *smearing* menos pronunciado, porém ainda presente.

Embora estes três tipos de técnicas que utilizam o modelo PCA sejam bastante conhecidos e aceitos pela literatura, existem diversos outros baseados em diferentes abordagens, tendo em vista que estas etapas de diagnóstico de falhas representam provavelmente o maior desafio do monitoramento.

4.3. Tecnologia para monitoramento usando modelos fundamentais

O monitoramento de processos estudado nesta seção é realizado por meio de técnicas com base em modelos fundamentais (ou fenomenológicos), que representam a associação das variáveis de acordo com os fenômenos conhecidos do processo. Estimções de variáveis de estado, parâmetros e até mesmo de sinais de falhas

utilizando estes modelos são algumas das possibilidades de técnicas para integrar um sistema de monitoramento [60,64,68]. Tradicionalmente, os modelos são linearizados e procedimentos simplificados podem ser então aplicados, como observadores e filtros. Esta seção demonstra um procedimento genérico de estimação, chamado de reconciliação de dados, que faz uso de modelos em suas configurações originais e fornece estimativas de variáveis, parâmetros e/ou sinais de falha. O grupo de pesquisa dos professores José Carlos Pinto e Enrique Luis Lima tem destaque relevante utilizando esta abordagem [9-15].

4.3.1. Reconciliação de dados

Esta técnica geralmente admite variáveis normais e utiliza conhecimento *a priori* dos erros destas variáveis; ou seja, a matriz de covariância $\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$. Desta forma, o procedimento de estimação por máxima verossimilhança pode ser simplificado para estimação por mínimos quadrados ponderados. A função objetivo para esta estimação é, basicamente, um somatório de variáveis normais padronizadas ao quadrado, constituindo uma variável χ^2 , que indica o quanto as observações podem ser explicadas por meio dos fenômenos descritos pelo modelo. Mais especificamente, a função objetivo tem a mesma interpretação da Estatística Q ; ou seja, representa a distância (desta vez padronizada) entre as observações e o modelo. Sendo assim, pode ser utilizada para detecção de falhas em uma carta de controle. As Equações 4.15 apresentam os elementos presentes em tal carta,

$$f_k = \sum_{w=k-n_w+1}^k (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})_w^T \mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}^{-1} (\mathbf{x} - \hat{\mathbf{x}})_w \quad 4.15a$$

$$f_{max} = \chi_{\alpha}^2(h) \quad 4.15b$$

onde f_k é a o valor da função objetivo na observação k , n_w é o número de observações de uma janela móvel, $\hat{\mathbf{x}}$ é o vetor de variáveis estimadas pelo modelo e h é o número de graus de liberdade, que depende de cada modelo e do número de sinais estimados. A seguir, um exemplo de reconciliação de dados é apresentado para um processo de tanque de nível.

Seja o modelo fundamental para o processo, dado pelas Equações 4.16, onde h , F_i e F representam respectivamente as variáveis nível do tanque e vazão de entrada e saída; e A e R representam os parâmetros: área transversal do tanque e resistência à vazão de saída.

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{A}(F_i - F(t)) \quad 4.16a$$

$$F(t) = \frac{h(t)}{R} \quad 4.16b$$

A variável F_i foi simulada a partir de uma sequência de 40 observações, seguindo a distribuição normal de média 10 e variância $0,5^2$ e, com o auxílio do modelo, as outras variáveis puderam ser também simuladas, com os parâmetros $R = 1 \text{ h/m}^2$ e $A = 2 \text{ m}^2$. Erros seguindo a distribuição normal de média zero e variância $0,1^2$ foram adicionados ao conjunto de variáveis. Uma falha foi introduzida na metade final das observações, fazendo com que o processo operasse em condição anormal. A falha é uma segunda vazão de saída, representando um vazamento no tanque de magnitude 1.

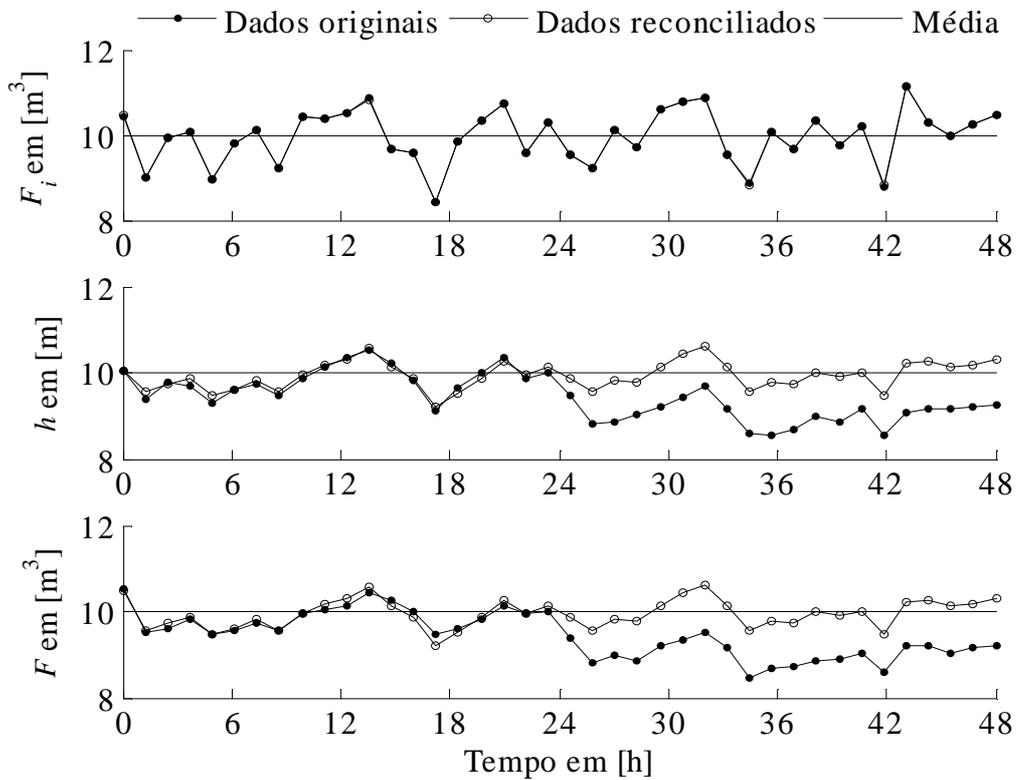


Figura 4.14: Reconciliação de dados usando modelo fundamental.

A técnica de reconciliação está ilustrada nas Figuras 4.14 e 4.15, onde o tamanho da janela móvel foi de 10 observações. Os elementos de estimação para a Figura 4.14 foram as n_w observações de F_i e $h(t_0)$, em cada janela móvel, usando o modelo original (Equações 4.16).

Já para a estimação do sinal de falha na Figura 4.15, o modelo teve de ser alterado para a inclusão desta nova variável, $vazamento(t)$, sendo também estimadas suas n_w observações em cada janela. As Equações 4.17 apresentam o modelo modificado, que considera o sinal de falha.

$$\frac{dh(t)}{dt} = \frac{1}{A} (F_i - F(t) - vazamento(t)) \quad 4.17a$$

$$F(t) = \frac{h(t)}{R} \quad 4.17b$$

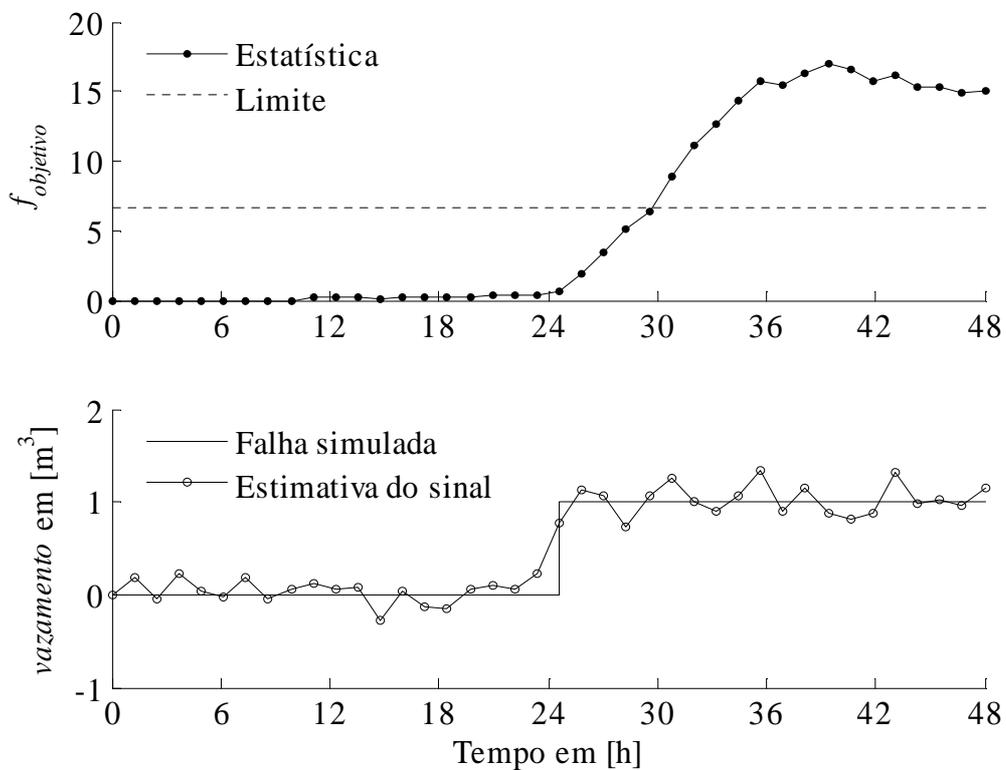


Figura 4.15: Função objetivo usada para detecção de falha e estimativa do sinal de falha.

Neste exemplo, foi admitido que as variáveis F_i , h e F são todas medidas, porém, em muitos processos, isto pode não ser verificado, o que leva a problemas relacionados à redundância necessária para estimação. Similarmente, os parâmetros R e A foram admitidos conhecidos e constantes; entretanto, algumas falhas, como desvio do valor de um parâmetro, são bastante comuns em processos químicos. Sendo assim, suas estimativas fornecem informação relevante para o monitoramento da condição do processo.

4.4. Comentários finais

Neste capítulo foi apresentado um apanhado de técnicas utilizadas para o monitoramento da condição de processos. Conforme mostrado na Seção 4.1, as primeiras cartas de controle, cartas de Shewhart, eram utilizadas com o auxílio de regras de decisão, que identificavam sequências apresentando flutuações ou tendências fora da condição de normalidade (hipótese admitida pela maioria das técnicas). Comparando as cartas de Shewhart com outras cartas de controle mais sofisticadas, CUSUM e EWMA, as quais utilizavam conhecimento de observações passadas para realçar a condição anormal, foi possível verificar que as regras de decisão permitem uma detecção mais rápida e concreta, de acordo com os resultados do exemplo mostrado. Este resultado difere do esperado, tendo em vista que as cartas CUSUM e EWMA foram desenvolvidas objetivando uma detecção mais acelerada. Contudo, é importante lembrar que este foi apenas um exemplo simulado, onde as hipóteses de normalidade são, de fato, respeitadas ao gerar dados com flutuações normais. Desta forma, as regras de decisão necessitam de uma investigação mais profunda, levando em conta que também poderiam ter sido desenvolvidas para as demais cartas de controle.

Em relação ao monitoramento multivariado, a comparação entre estatísticas convencionais, T^2 e Q , e a abordagem local permitiu discussão semelhante ao monitoramento univariado, com relação a mudanças quase imperceptíveis na flutuação dos dados. Neste caso, novas regras de decisão também poderiam ser sugeridas, de acordo com a probabilidade de índices de detecção. Apesar destes resultados, a abordagem local possui extrema importância no monitoramento estatístico, uma vez que realiza normalizações em resíduos que apresentam comportamento probabilístico desconhecido.

Em relação aos índices de diagnóstico de falhas, o trabalho de ALCALA e QIN [177] analisa e generaliza os índices apresentados neste trabalho e outros, revelando suas vantagens e desvantagens. Contudo, um estudo preliminar deste trabalho de tese analisou o desempenho de índices baseados em modelos não-lineares para falhas. A abordagem foi semelhante à abordagem das técnicas de reconstrução, porém, utilizando redes neurais ao invés de direções. O desempenho das técnicas estudadas foi bastante superior ao desempenho das técnicas convencionais. Isto é devido ao fato de a dinâmica de um processo em condição de falha apresentar comportamento não-linear longe de

seu ponto de operação. Estes resultados preliminares mostram que as técnicas estudadas são bastante promissoras.

Finalmente, em relação ao monitoramento usando modelos fundamentais, a experiência acumulada do grupo de pesquisa do professor José Carlos Pinto e Enrique Luis Lima demonstra que esta é uma abordagem bastante aceitável para processos industriais complexos, uma vez que parâmetros desconhecidos e medições sujeitas a incertezas podem ser diretamente estimadas e reconciliadas, respectivamente [9-15]. Desta forma, mesmo com a utilização de modelos mais simples, as estimativas dos parâmetros com significado físico do modelo podem indicar a condição corrente do processo. Por outro lado, a utilização de modelos mais complexos (e dinâmicos) pode permitir predições de cenários futuros e estimar a solução ótima de ação de controle, minimizando custos, perdas e/ou danos. A referência [24] apresenta um esquema de predição e prognóstico de falhas, com base em modelos dinâmicos empíricos, que corrobora com a abordagem sugerida.

CAPÍTULO V

APLICAÇÕES INDUSTRIAIS

Este capítulo apresenta três estudos de aplicação de sistemas de monitoramento em processos industriais, utilizando dados reais em condições normais e anormais. Os sistemas são baseados no modelo PCA, cujo número de componentes principais é determinado a partir da regra de seleção especificada em cada caso. As técnicas de detecção e diagnóstico de falhas são compostas pelas Estatísticas T^2 e Q e suas contribuições e reconstruções. Os processos estudados são: *i*) a reforma catalítica do petróleo, *ii*) a produção de eteno a partir de etano e *iii*) a debutanização de uma corrente de C_{5+} .

5.1. Processo de reforma catalítica

Este estudo de aplicação é focado em uma caldeira intermediária de um processo de reforma catalítica do petróleo (processo 1), neste caso *powerforming*, ilustrado na Figura 5.1. Este processo é usado para converter nafta leve, tipicamente de baixa octanagem, em gasolina de alta octanagem. Reatores de leito fixo, constituído por catalisadores, e caldeiras compõem o processo, que opera em temperaturas e pressões elevadas.

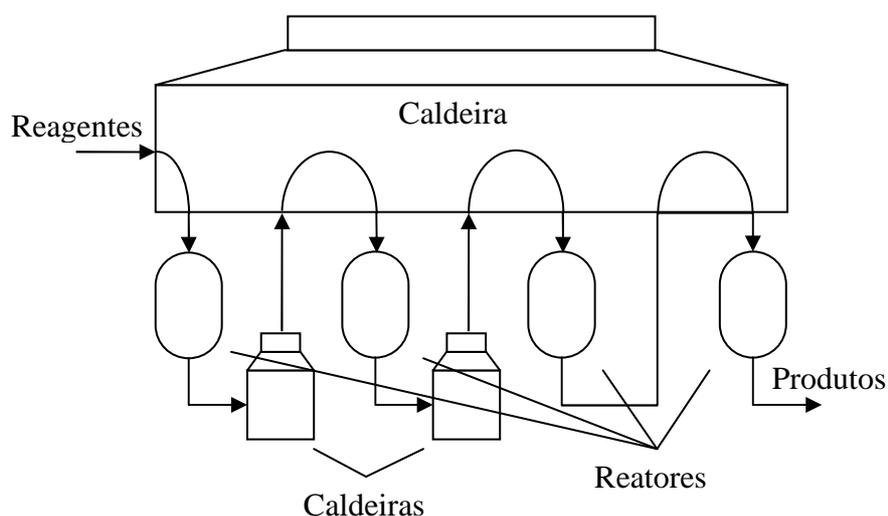


Figura 5.1: Esquema do processo 1.

As caldeiras exercem um papel fundamental neste processo, uma vez que ajustam a temperatura da mistura a níveis requeridos para a ocorrência de reações específicas em unidades posicionadas à jusante. Assim, é importante haver um sistema de monitoramento da condição destas caldeiras. Nesta seção realiza-se um estudo de

aplicação em uma das caldeiras intermediárias. As variáveis utilizadas para a composição do sistema de monitoramento são as temperaturas de entrada e saída da caldeira e as temperaturas do seu interior, medidas por sensores localizados nos tubos de troca térmica. A Figura 5.2 apresenta estas variáveis, registradas a cada 30 segundos.

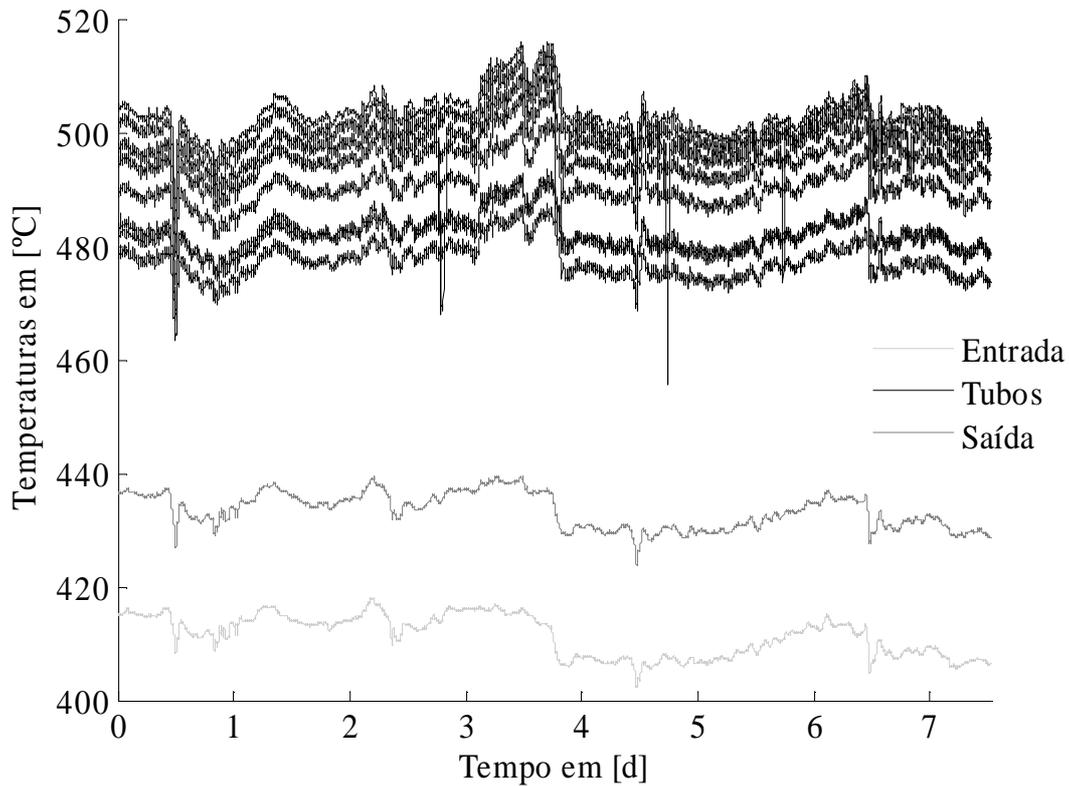


Figura 5.2: Dados do processo 1.

Observa-se na Figura 5.2 que existe grande associação entre as variáveis, mas também um grande número de variações anormais do processo. Primeiramente, o modelo PCA deve ser gerado com o auxílio de uma regra de seleção do número de componentes principais. Neste caso específico, a correlação entre as variáveis é tão significativa que uma regra mais simples pode ser aplicada com resultados satisfatórios. A técnica da percentagem de variância acumulada, apresentada na Tabela 3.1 da Seção 3.3, sugere a utilização de dois componentes principais, com a percentagem da variância acumulada de 99 %. A Figura 5.3 ilustra as variâncias percentuais de cada componente, assim como a variância percentual acumulada. O modelo PCA é então gerado com dois componentes principais. Em seguida, as Estatísticas T^2 e Q são aplicadas aos dados registrados contendo condições anormais na Figura 5.4.

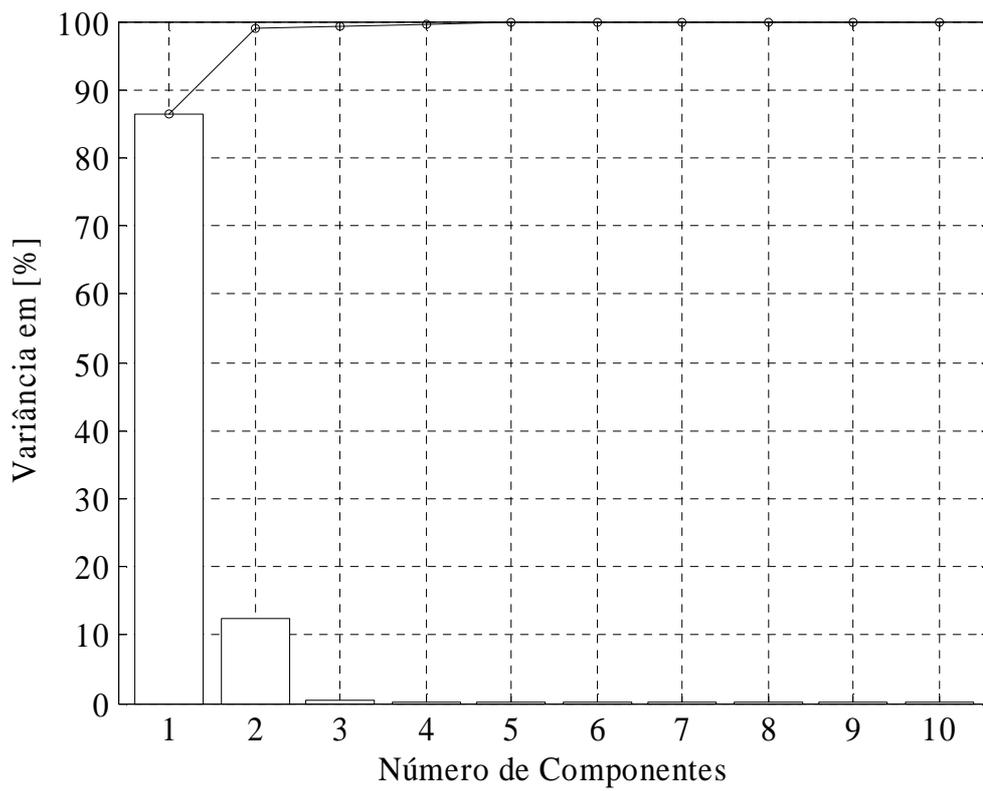


Figura 5.3: Determinação do número de componentes principais para o modelo PCA.

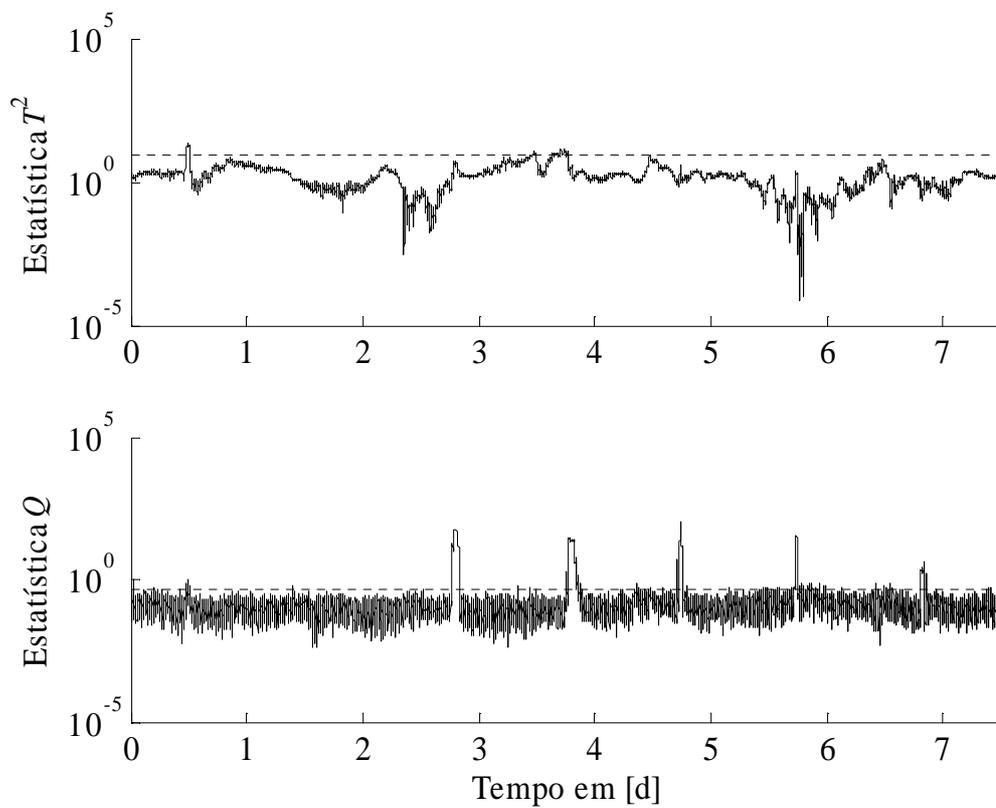


Figura 5.4: Estatísticas T^2 e Q para o processo 1.

Três casos particulares são estudados a seguir.

5.1.1. Mudança de operação no processo

Neste primeiro exemplo, as variáveis exibem em conjunto um comportamento extremo, apresentado na Figura 5.5. Todas as temperaturas são reduzidas em aproximadamente 10 °C, fazendo com que o processo opere em uma região anormal; ou seja, não apresentada no conjunto de dados usados para a modelagem. Sendo assim, as estatísticas monitoradas devem ser capazes de detectar tal anomalia.

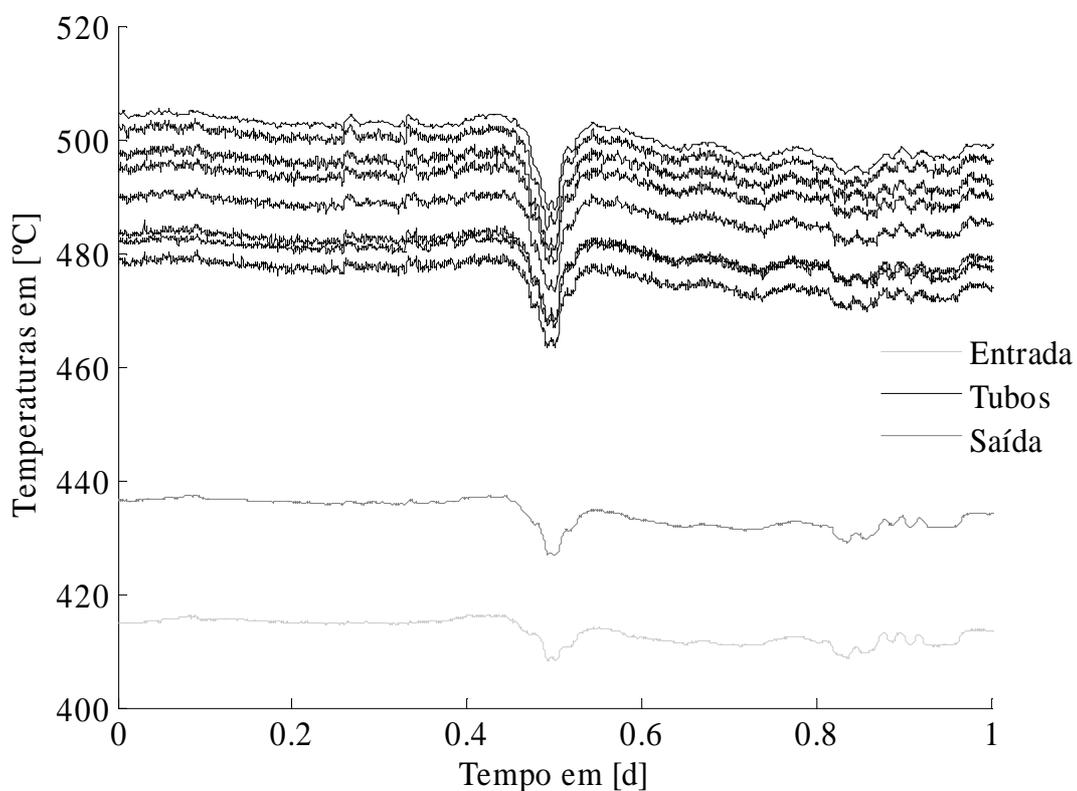


Figura 5.5: Dados com mudança anormal.

Conforme mostrado na Figura 5.6 e de acordo com a explicação dada na Seção 4.2.1, de fato a Estatística T^2 é adequada para detectar mudanças no comportamento do processo como um todo. Isto é devido à utilização dos componentes principais, que são responsáveis pela maior parte da variabilidade do processo, conforme demonstrado pela Figura 5.3. Outra maneira de analisar esta mudança é a visualização direta dos componentes principais, restritos ao limite da Estatística T^2 correspondente a uma região elíptica de condição normal do processo, ilustrado na Figura 5.7.

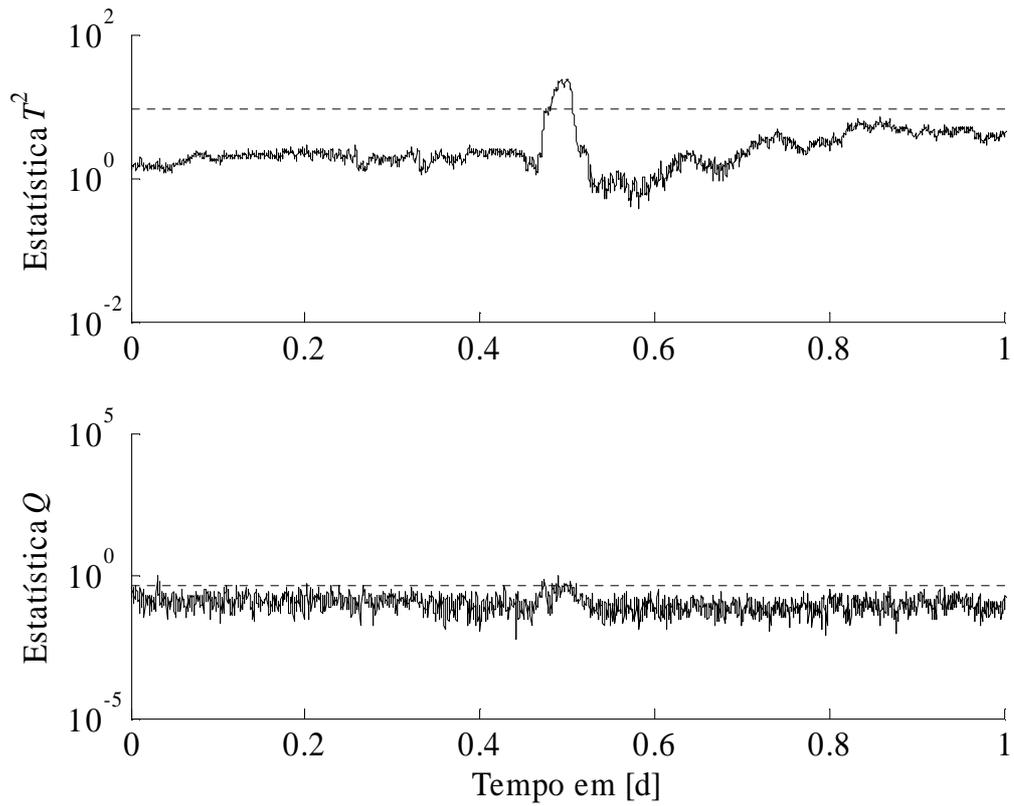


Figura 5.6: Estatísticas T^2 e Q para os dados anômalos.

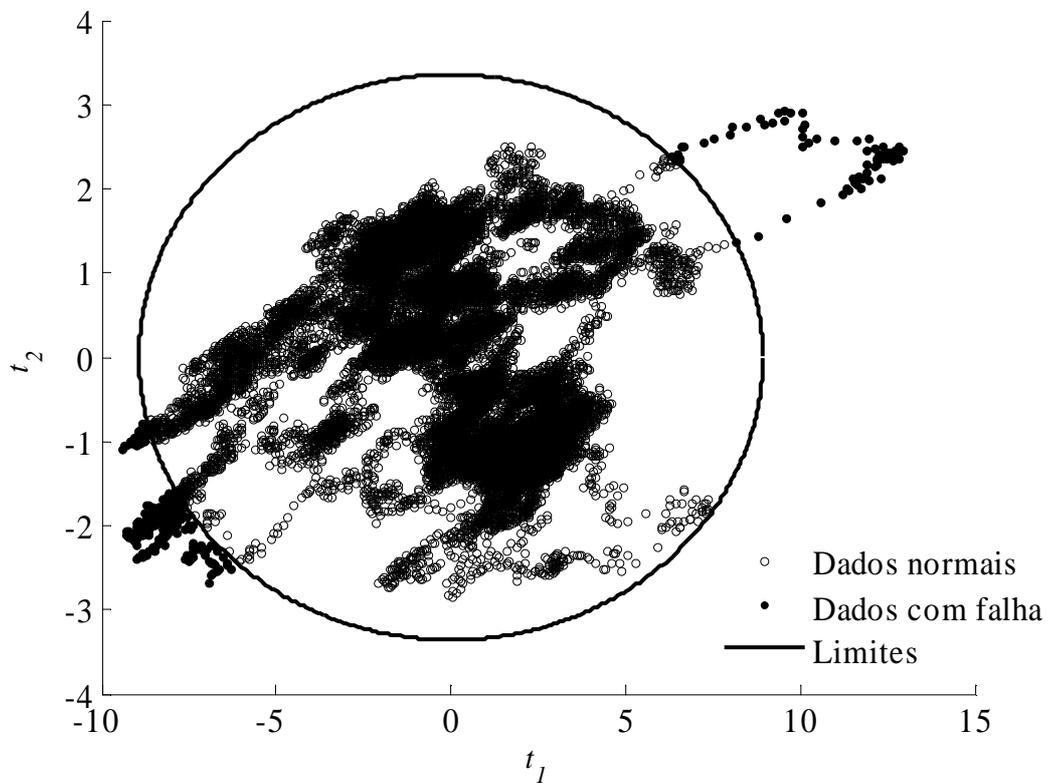


Figura 5.7: Componentes principais para o processo 1.

Em relação à Estatística Q , observa-se na Figura 5.6 que existe uma pequena tendência dos dados para fora do limite de confiança; porém, não chega a ser equiparável com a Estatística T^2 , o que configura uma condição anormal do processo e não uma quebra das correlações existentes.

Posteriormente à detecção da falha, a técnica de diagnóstico baseada na contribuição da Estatística T^2 é utilizada, em virtude da natureza da falha, e revela um grupo de variáveis mais afetadas pela falha na Figura 5.8. Embora neste caso não haja uma diferença significativa entre as variáveis, é possível afirmar que as temperaturas 5, 6 e 7 são as mais afetadas e as temperaturas de entrada, 1, e saída, 10, são as menos afetadas. Vale ressaltar que estes valores representam a média das contribuições no período anormal.

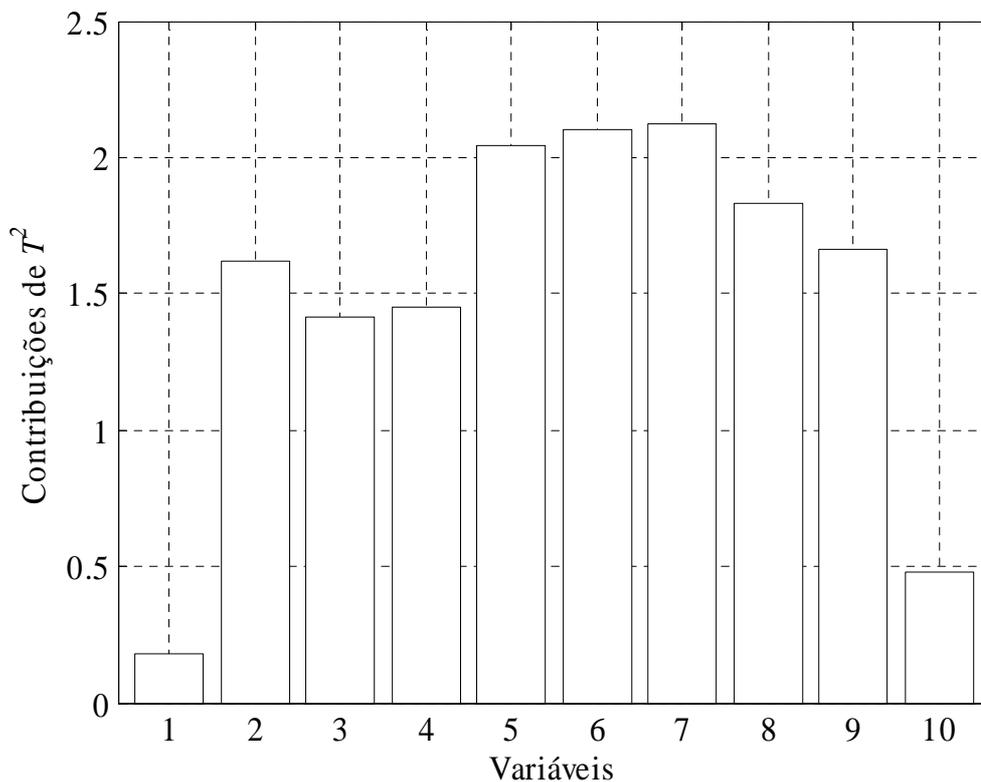


Figura 5.8: Contribuições das variáveis para a Estatística T^2 no período anormal.

5.1.2. Falha em sensores do processo

Neste segundo exemplo, o mau funcionamento de um dos sensores é estudado. Estas falhas ocorrem intermitentemente e resultam em erros nos cálculos de controle da

temperatura da mistura de hidrocarbonetos. A Figura 5.9 ilustra a primeira falha deste sensor defeituoso no conjunto de dados analisado.

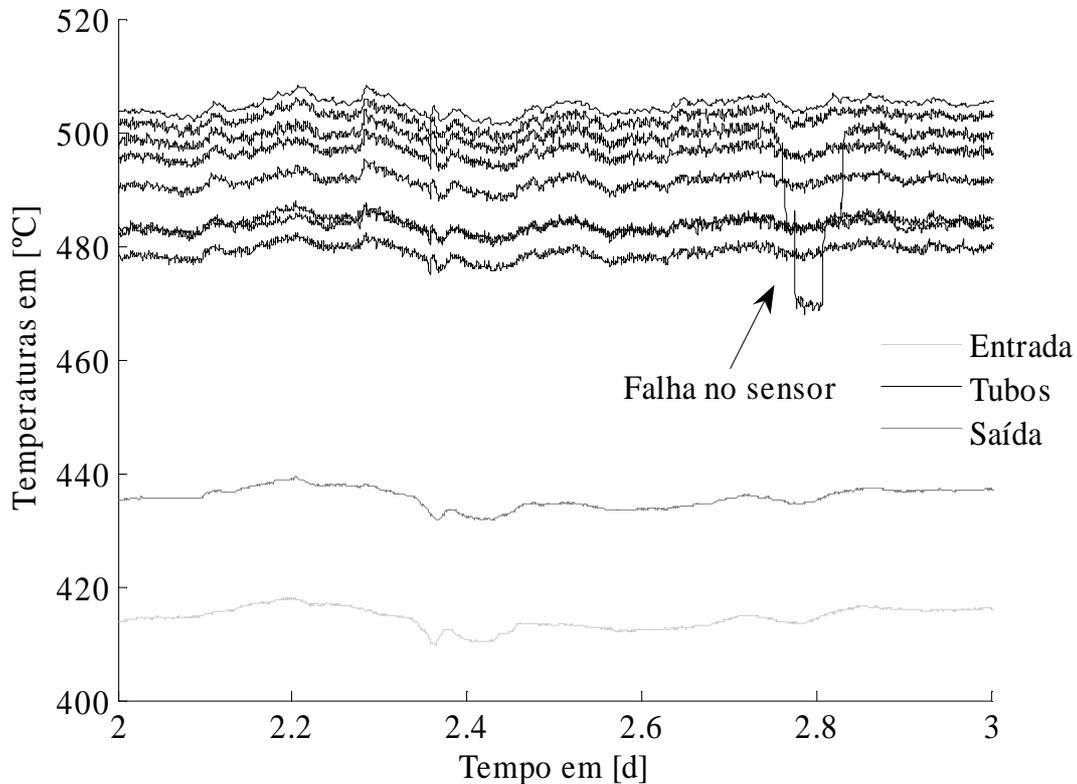


Figura 5.9: Dados com falha em um dos sensores.

Desta vez, o período analisado revela uma quebra de correlação existente entre as variáveis do processo. Conforme a explicação da Seção 4.2.1, esta falha deve ser detectada mais significativamente pela Estatística Q . A Figura 5.10 apresenta os resultados das Estatísticas T^2 e Q , comprovando esta afirmação, já que a Estatística T^2 sequer detectou a falha. Portanto, apenas as técnicas de diagnóstico com base nos resíduos podem ser aplicadas. A Figura 5.11 apresenta as técnicas de contribuição e de reconstrução das variáveis para a identificação do sensor defeituoso. Conforme evidenciado pela Figura 5.11, o sensor em falha foi corretamente identificado por ambas as técnicas, permitindo reparos.

Neste tipo de falha, a perda de informação de um dos sensores pode implicar em outros problemas diretos, como reconfigurações de malhas de controle do processo, para evitar o uso de um sensor defeituoso. No entanto, é possível utilizar as técnicas de diagnóstico para gerar estimativas das variáveis isentas de falha.

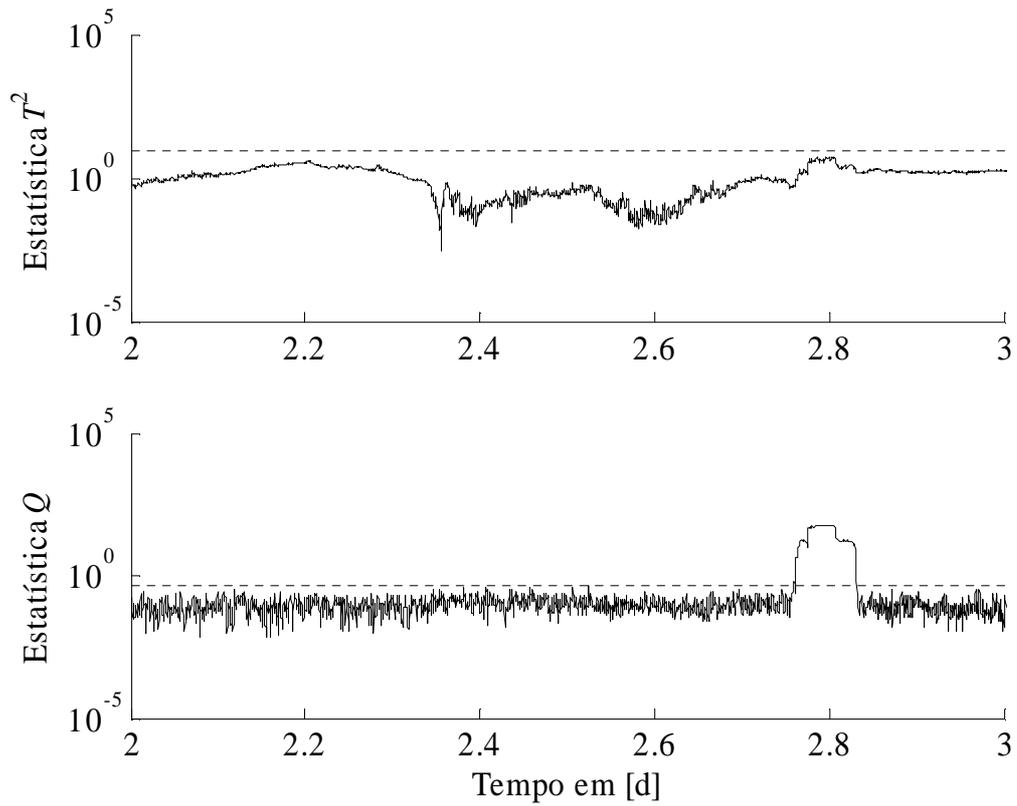


Figura 5.10: Estatísticas T^2 e Q para os dados com falha em um sensor.

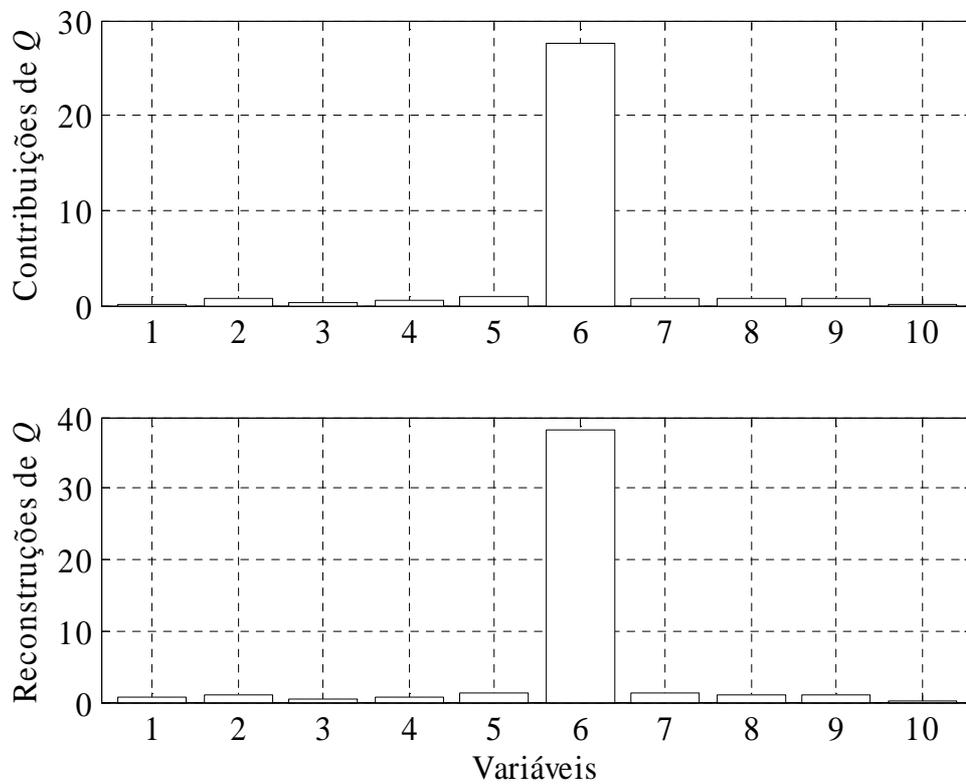


Figura 5.11: Identificação do sensor com falha usando técnicas de diagnóstico.

A Figura 5.12 apresenta o resultado da técnica de reconstrução para o sensor 6. Observe que o período analisado (do dia 2 ao dia 3) não é o único que sofre com falhas neste sensor; os outros períodos estão mostrados na Figura 5.12.

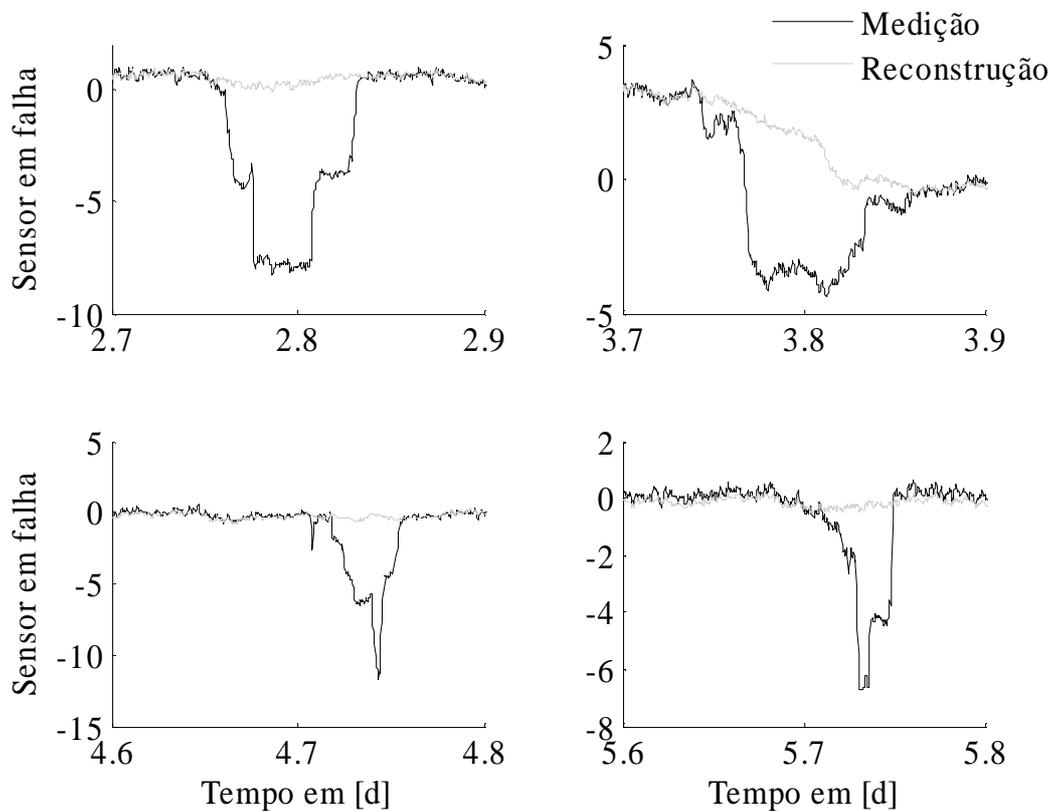


Figura 5.12: Reconstrução do sensor em falha usando a técnica de reconstrução.

Esta técnica utiliza informações das outras variáveis, livres de falha, para gerar estimativas razoáveis para o sensor em falha. Esta abordagem é essencialmente similar à reconciliação de dados usando modelos fundamentais; porém, neste caso, como o modelo é linear e estacionário, as estimativas para as variáveis são geradas analiticamente.

5.1.3. Falhas simultâneas no processo

Neste terceiro exemplo, o período anormal é constituído por ambos os tipos de falha analisados anteriormente. Isto leva ambas as estatísticas a detectarem condição de falha. As Figuras 5.13 e 5.14 apresentam os dados e as estatísticas, respectivamente.

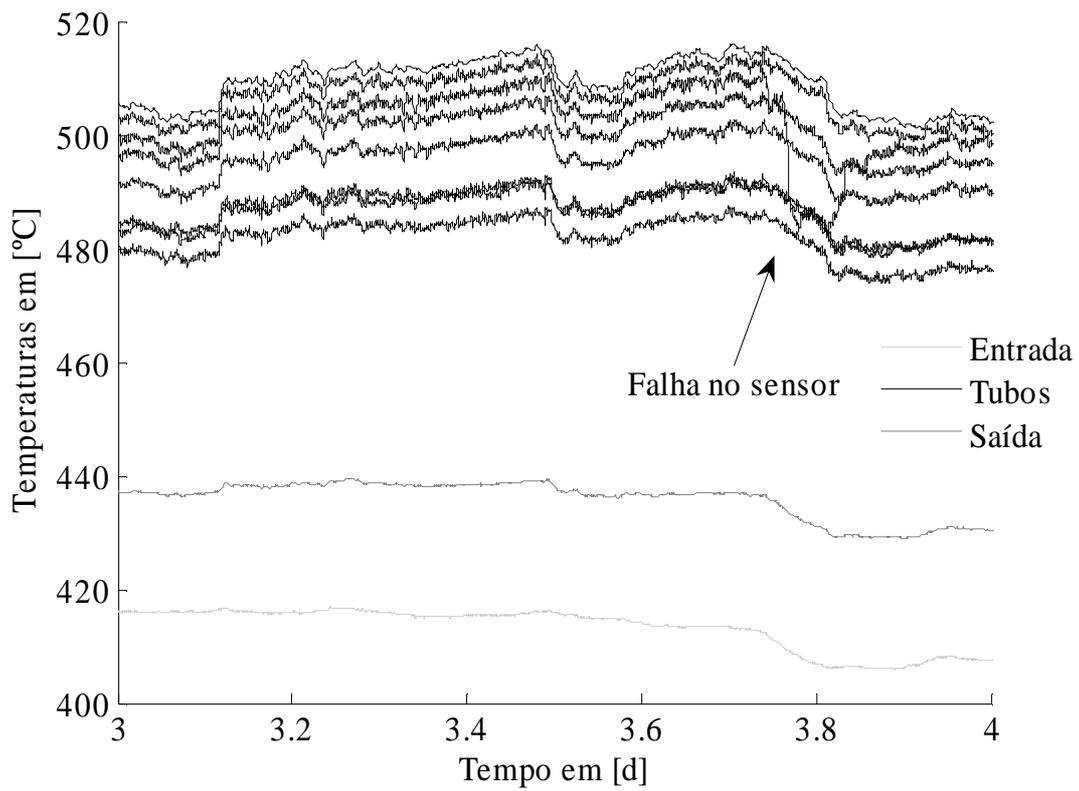


Figura 5.13: Dados em condições anormais e com falha em um dos sensores.

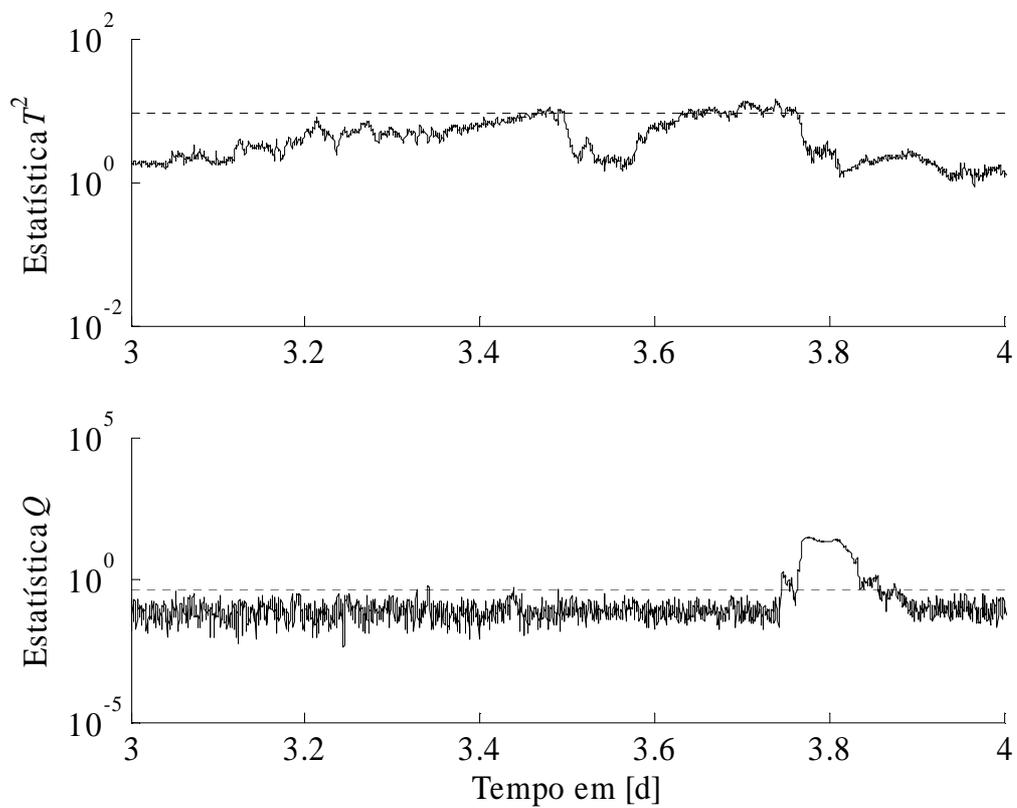


Figura 5.14: Estatísticas T^2 e Q para os dados anômalos e com falha no sensor.

Analisando estas figuras, percebe-se que o processo apresenta condições extremas de operação, juntamente com o mau funcionamento do sensor 6. Já que estas falhas situam-se em subespaços diferentes, conforme analisado nos casos anteriores, o diagnóstico apresenta resultados similares.

Vale ressaltar que, embora este exemplo tenha sido simplificado pelo fato de ocorrerem falhas de naturezas distintas, se tivessem ocorrido falhas em três ou quatro sensores diferentes, por exemplo, a etapa de diagnóstico se tornaria bastante complexa. Isto é devido ao fato de que as técnicas perdem o poder de identificação com o aumento do subespaço afetado pela falha [124].

5.2. Processo de produção de eteno

Este estudo de aplicação foca um processo de produção de eteno a partir do etano (processo 2), também conhecido como craqueamento de gás, onde os reagentes são etano e propano, Figura 5.15. Neste processo existem dois circuitos fechados de água, objetivando: *i*) reduzir a pressão parcial na corrente de alimentação ao se misturar com os reagentes e obter assim reações desejadas nos fornos de pirólise e *ii*) resfriar, por contato direto, o efluente do segundo separador.

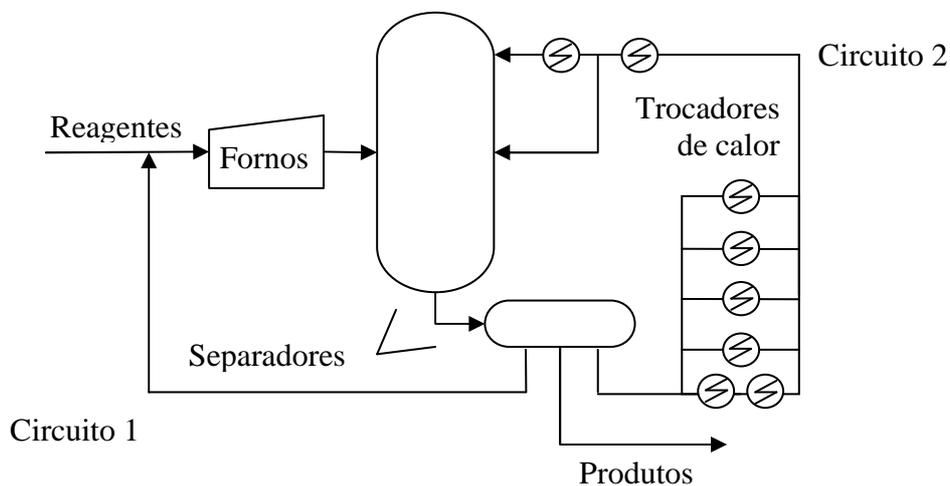


Figura 5.15: Esquema do processo 2.

Os trocadores de calor do segundo circuito sofrem com a formação de incrustações nas paredes dos tubos, fazendo com que seus desempenhos sejam reduzidos. Estas incrustações são formadas por compostos orgânicos de alta viscosidade remanescentes do separador à montante. Com isso, são realizadas manutenções

corretivas periodicamente. Sendo assim, um sistema de monitoramento deve ser integrado ao processo para indicação do início do período de falha.

As variáveis utilizadas para compor o modelo PCA, basicamente vazões e temperaturas, estão ilustradas na Figura 5.16 e listadas na Tabela 5.1.

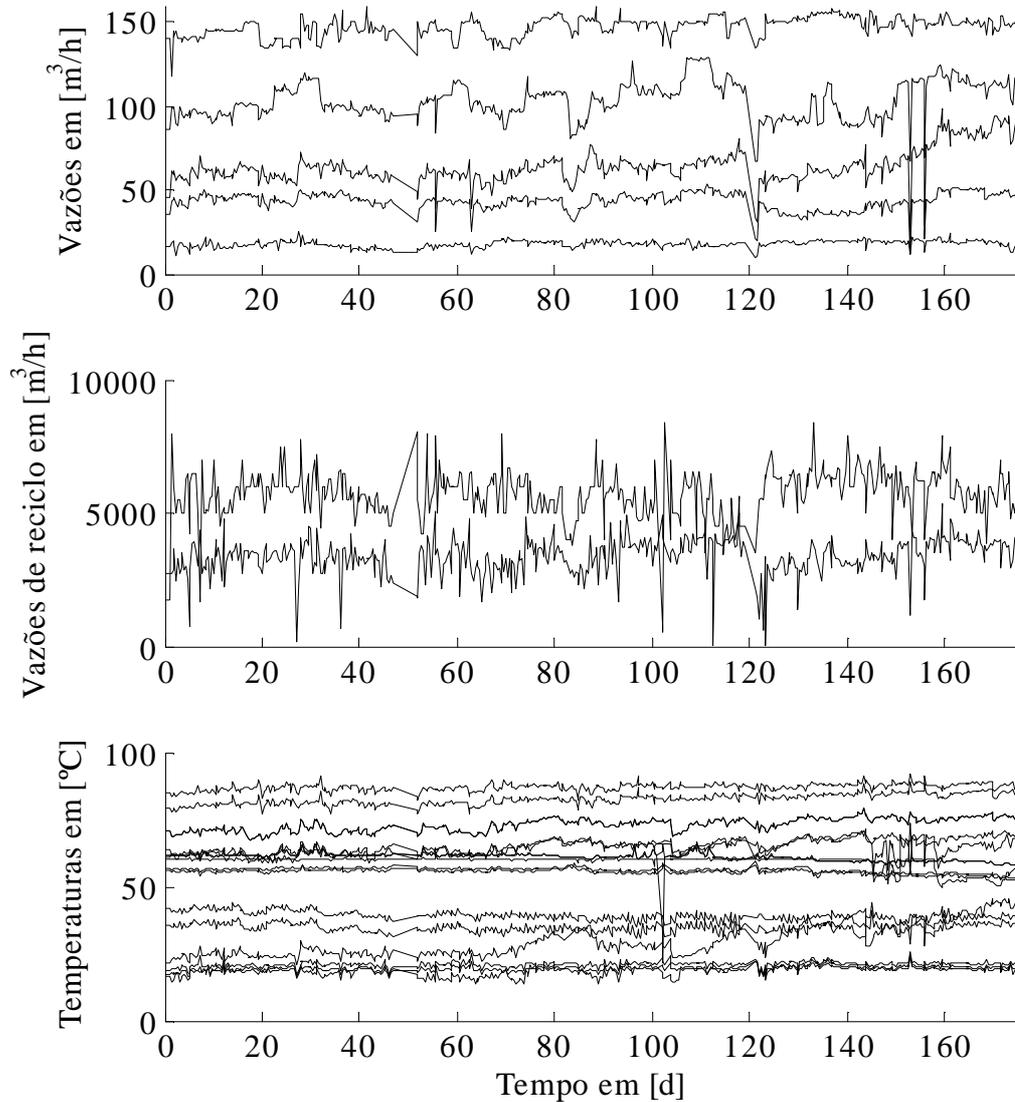


Figura 5.16: Dados do processo 2.

Desta vez é empregada a técnica VRE (Tabela 3.2), que seleciona o número de componentes principais de maneira que a variância do erro de reconstrução seja minimizada. Uma vez que as variâncias dos componentes não revelam claramente a dimensão do subespaço principal, esta técnica pode ser considerada como a mais adequada para definição do seu critério de seleção.

Tabela 5.1 – Variáveis de cada trocador de calor do processo 2

Unidade 1		Unidade 2		Unidade 3		Unidade 4		Unidade 5	
1	°C	7	°C	12	m ³ /h	16	°C	22	m ³ /h
2	°C	8	m ³ /h	13	°C	17	°C	23	°C
3	°C	9	°C	14	°C	18	°C	24	°C
4	m ³ /h	10	°C	15	°C	19	m ³ /h	25	°C
5	°C	11	°C			20	m ³ /h		
6	m ³ /h					21	m ³ /h		

O resultado da técnica está apresentado na Figura 5.17, em que o número de componentes principais selecionado foi igual a 7.

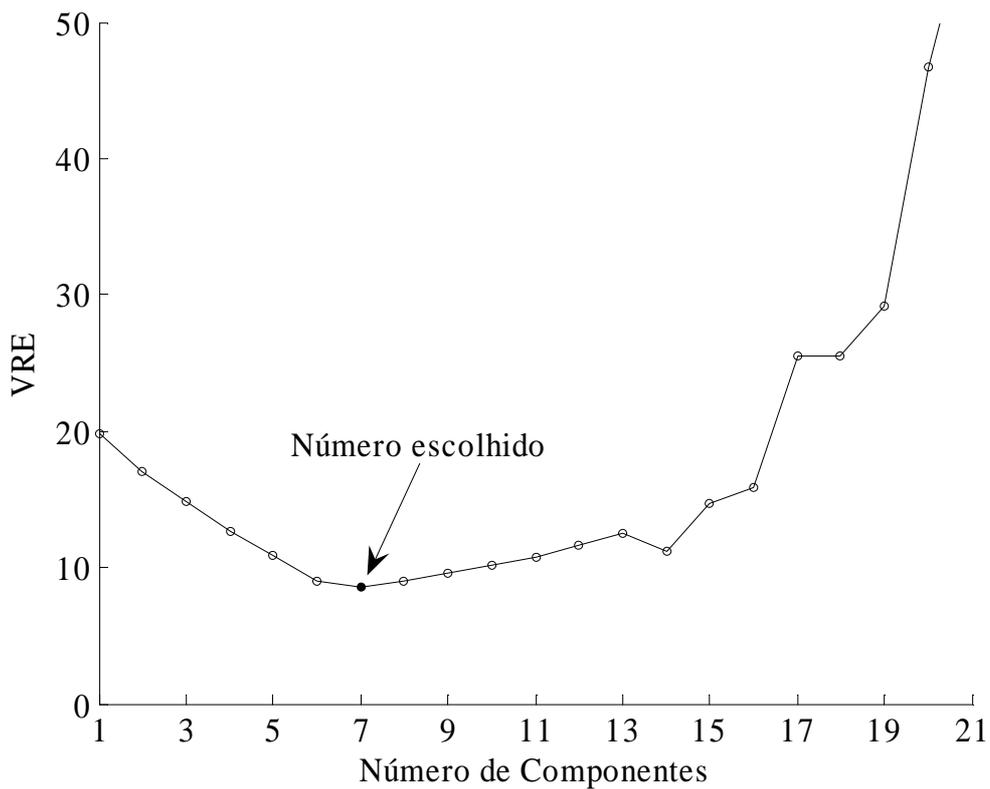


Figura 5.17: Resultado da técnica VRE para o processo 2.

Com este modelo PCA, a variância capturada do processo é de pouco mais de 80 %, conforme visualizado na Figura 5.18. Esta figura mostra também a dificuldade de selecionar este parâmetro, tendo como base apenas mudanças entre as variâncias de

componentes consecutivos. Se fosse usado o conjunto de componentes que captura 90 % da variância do processo, por exemplo, certamente seria agregado algum ruído ao modelo, uma vez que a variância do erro de reconstrução aumenta (embora não muito), como mostrado na Figura 5.17.

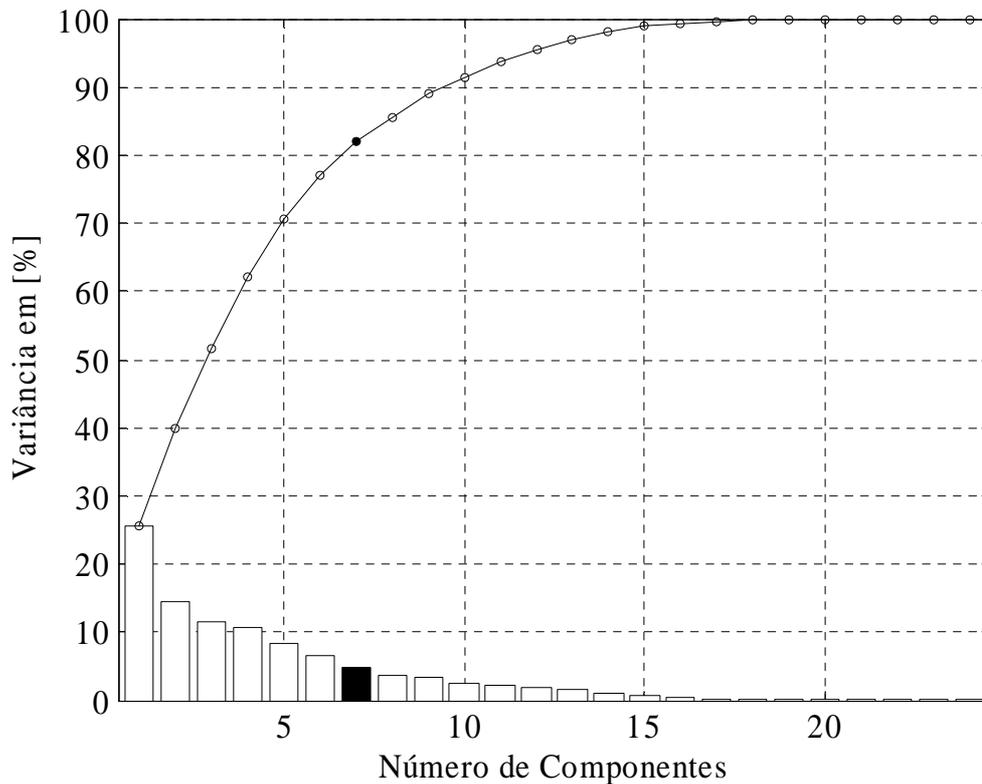


Figura 5.18: Variâncias dos componentes do processo 2.

De posse do modelo PCA, faz-se em seguida a aplicação das Estatísticas T^2 e Q para detecção da falha, ilustrada pela Figura 5.19. Observa-se que ambas as estatísticas detectaram a falha aproximadamente no mesmo instante de tempo. Isto quer dizer que, além do processo estar operando longe do seu ponto operacional, existem quebras de correlações nos dados analisados. Em outros termos, as incrustações fazem as temperaturas sofrerem desvios de suas médias, ao mesmo tempo em que algumas vazões continuam operando nos pontos estacionários, o que leva a contribuições para as Estatísticas T^2 e Q , respectivamente.

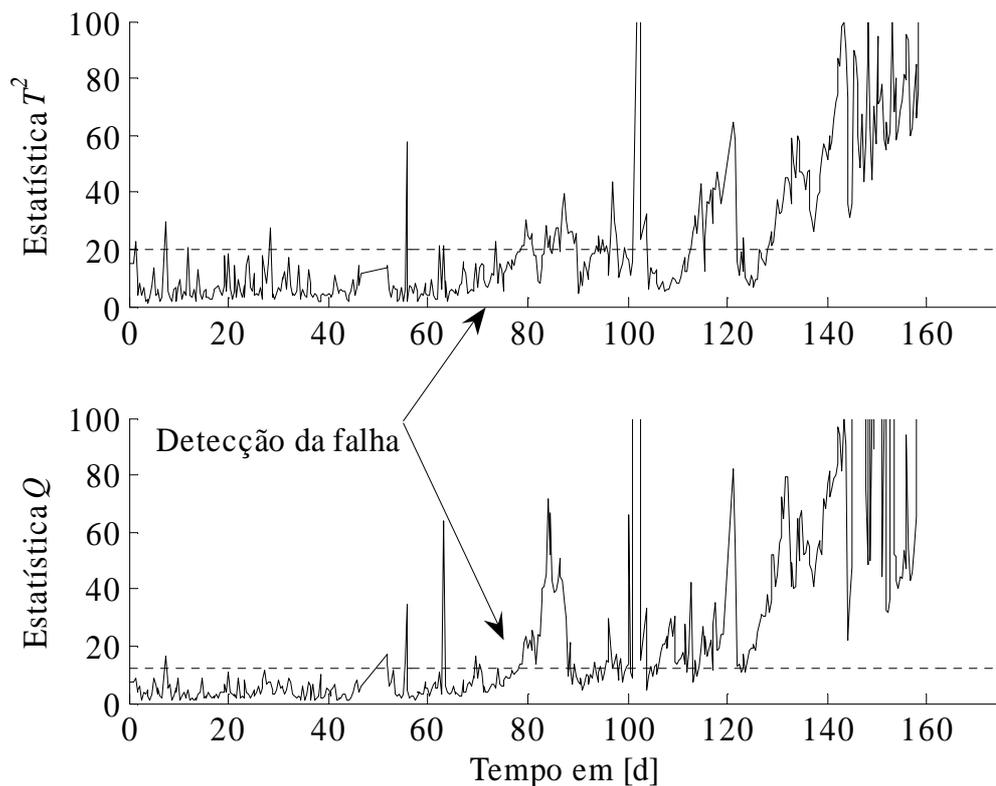


Figura 5.19: Estatística T^2 para o processo 2.

Como neste caso já se conhece a falha, a etapa de diagnóstico restringe-se apenas a obter informações sobre o local e a magnitude da falha. A Figura 5.20 apresenta o sinal de falha de cada componente, estimado pela técnica de contribuição usando a Estatística T^2 (Equação 4.11a); ou seja, o comportamento variante no tempo das contribuições das variáveis. Analisando a Figura 5.20, é possível identificar que, por volta do tempo 80 dias (instante da detecção da falha), as variáveis 12, 17 e 19 apresentam um pico e, a partir de então, a variável 18 apresenta uma elevação sutil do seu valor. Em seguida, é a vez das variáveis 2, 10-13, 17-19 e 25 apresentarem comportamento anômalo. Tendo em vista que os trocadores de calor utilizam variáveis em comum, já que a temperatura de entrada de um é igual à temperatura de saída do outro, por exemplo, é possível identificar alguns locais onde a falha é mais significativa.

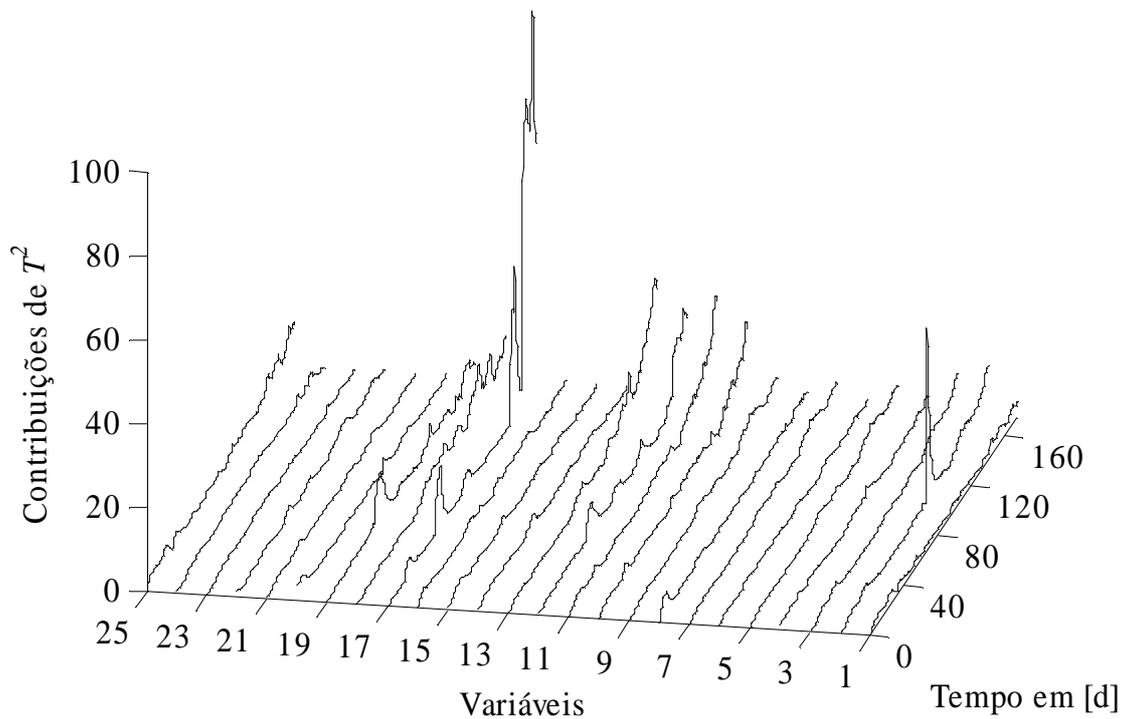


Figura 5.20: Contribuições da Estatística T^2 para o processo 2.

Outra análise pertinente é a visualização do mapa de elementos dos componentes principais para identificar variáveis afetadas. As Figuras 5.21 e 5.22 ilustram esta análise, onde as regiões exploradas pelos dados com falha na primeira figura são confrontadas com as regiões da segunda figura, que revelam quais são as variáveis mais importantes. Na Figura 5.22, as variáveis mais afetadas estão destacadas (em **negrito e itálico**) e há uma concordância com as regiões da Figura 5.21, conforme observado.

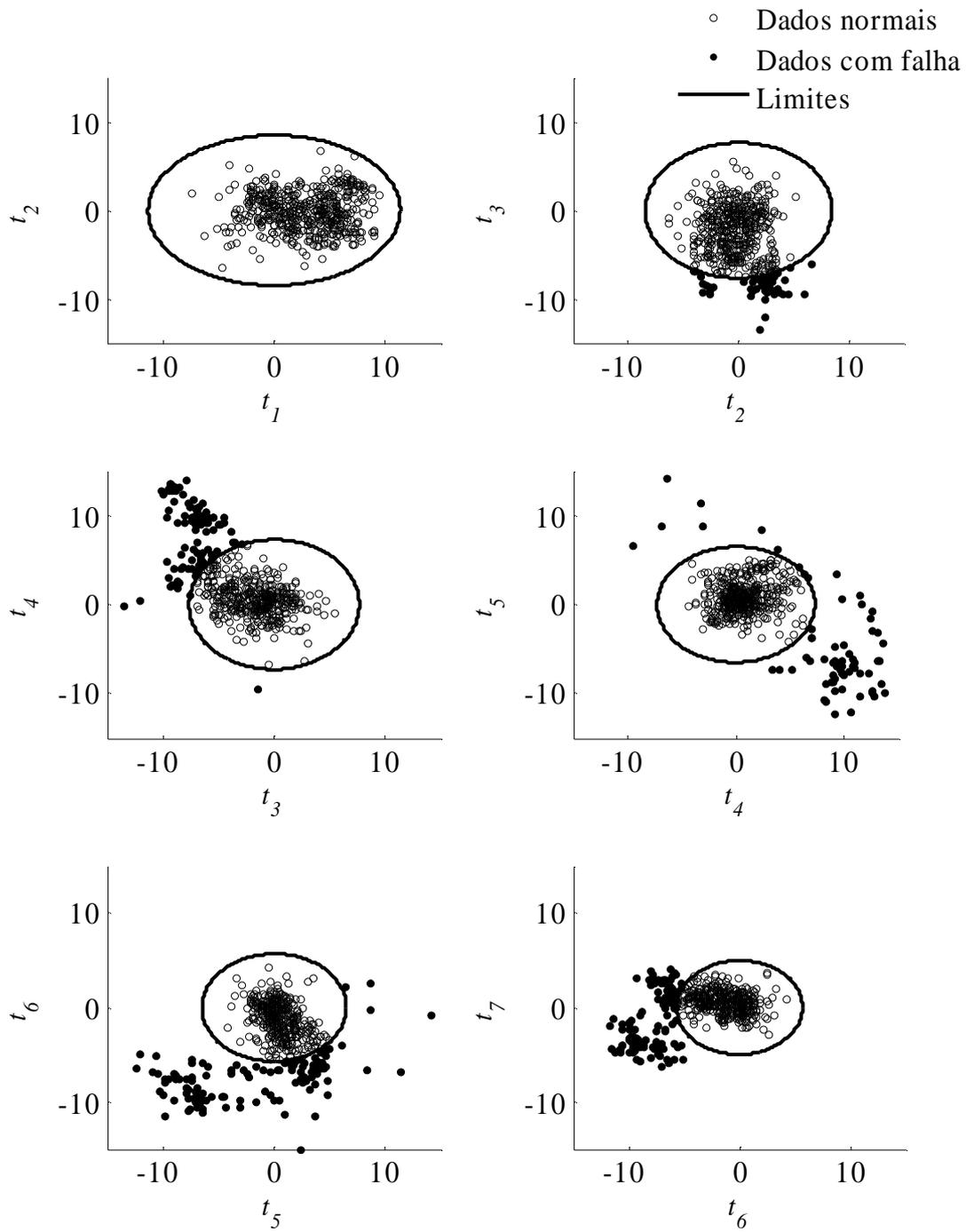


Figura 5.21: Região de confiança para o processo 2.

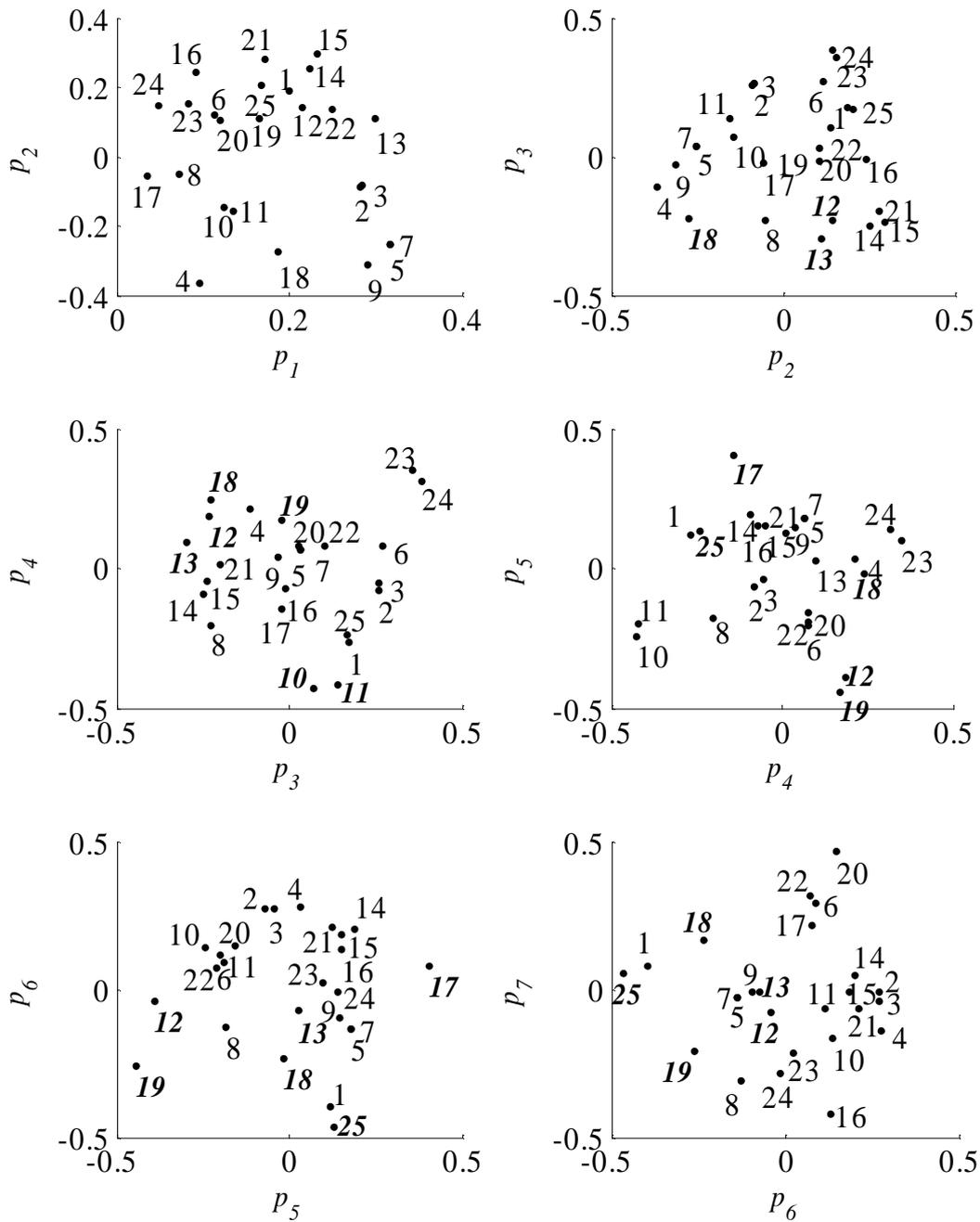


Figura 5.22: Mapa do processo 2.

Em relação à Estatística Q , a Figura 5.23 apresenta as contribuições das variáveis para o seu valor (Equação 4.12b). Observa-se que o mesmo conjunto de variáveis é mais uma vez identificado como o mais afetado.

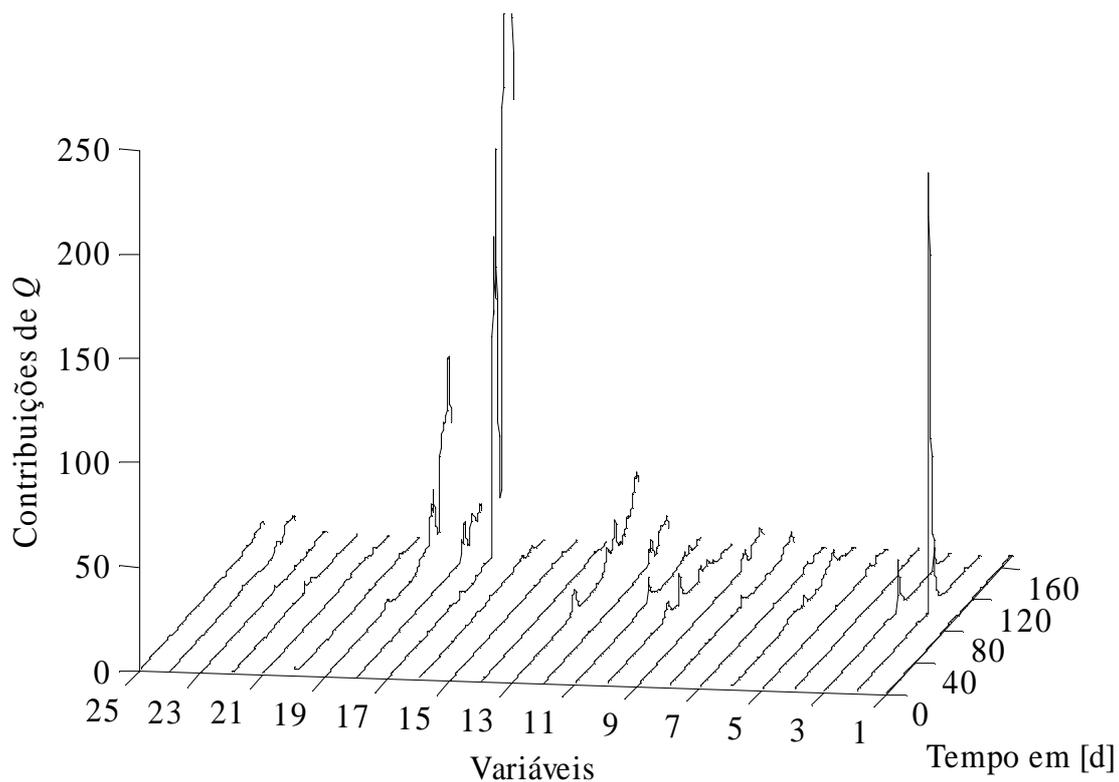


Figura 5.23: Contribuições da Estatística Q para o processo 2.

Tendo em vista que as incrustações ocorrem sutilmente, fazendo com que o sinal de falha aumente lentamente, a abordagem local também foi aplicada neste exemplo, apresentada na Figura 5.24. Como se pode perceber, esta abordagem detecta a falha tão logo o processo altera sua variabilidade, por volta dos tempos 70 dias e 60 dias para as duas estatísticas. Este resultado é superior aos demais, tendo em vista que isto permite a manutenção mais precisa do processo. A Figura 5.25 apresenta os parâmetros obtidos por balanços térmicos e responsáveis pela falha em três unidades para fins de comparação. Observa-se na Figura 5.25 que a falha tem início de fato por volta do tempo 70 dias para as três unidades apresentadas.

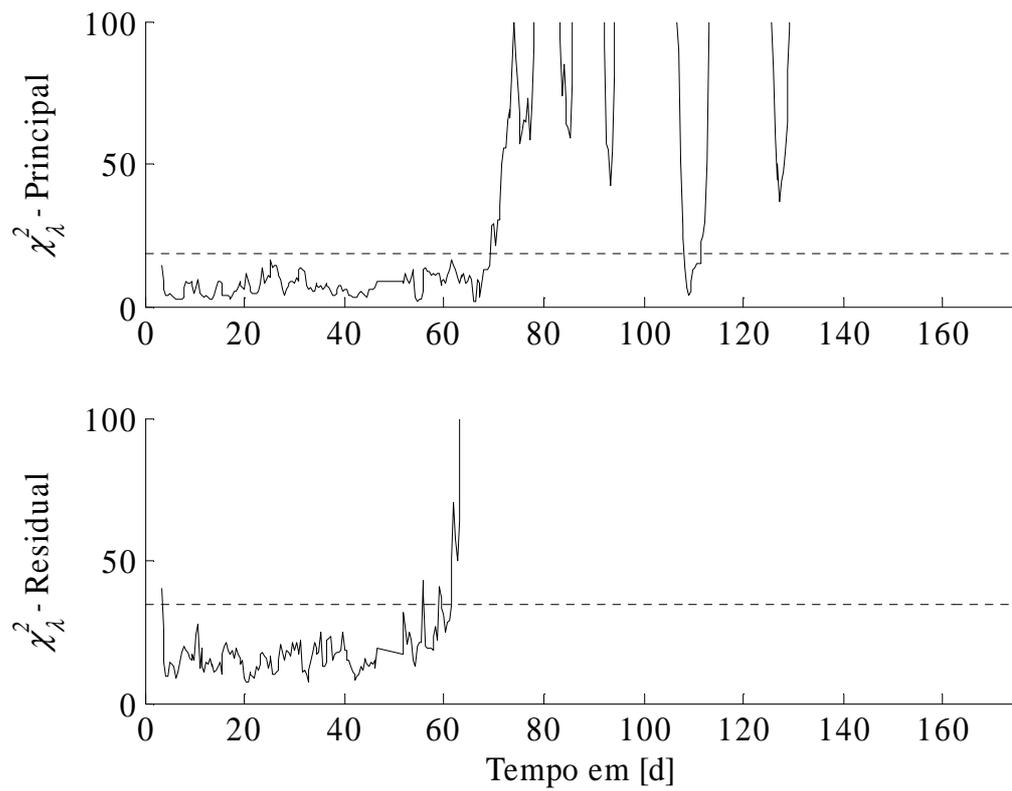


Figura 5.24: Estatísticas da abordagem local para o processo 2.

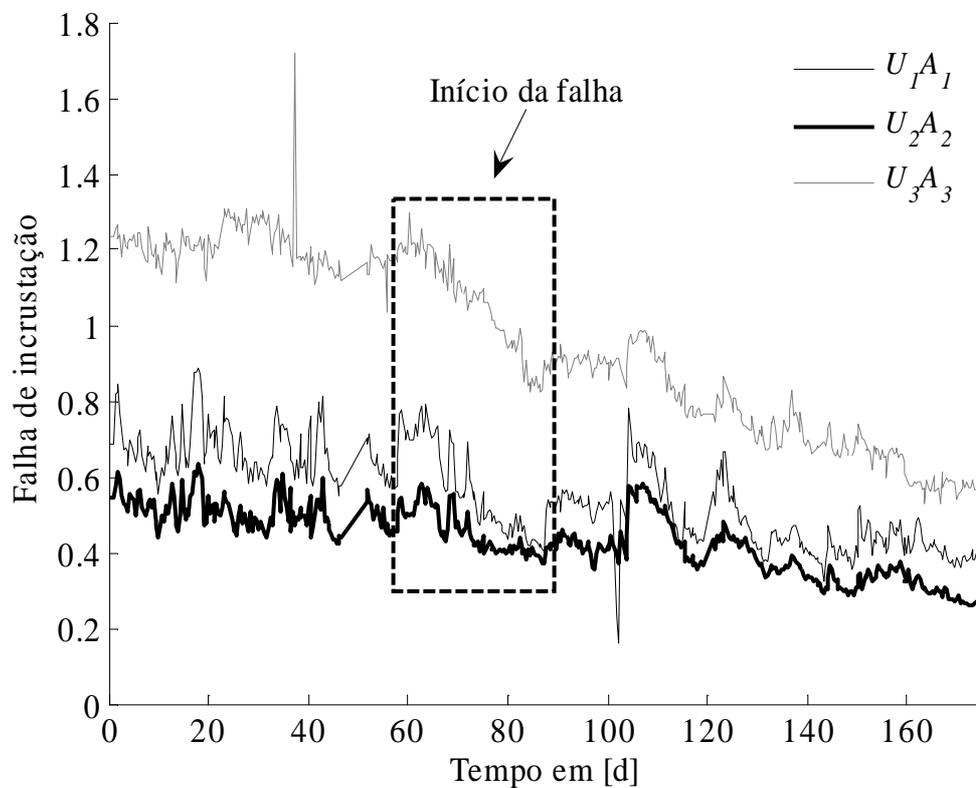


Figura 5.25: Parâmetros responsáveis pela falha de incrustação.

5.3. Processo de debutanização

Este terceiro e último estudo de aplicação concentra-se em um processo de debutanização (processo 3), integrado por uma coluna de destilação, um condensador e um refeedor, conforme mostra a Figura 5.26. As variáveis envolvidas no processo estão listadas na Tabela 5.2 e ilustradas na Figura 5.27, onde as concentrações não são utilizadas para a geração do modelo.

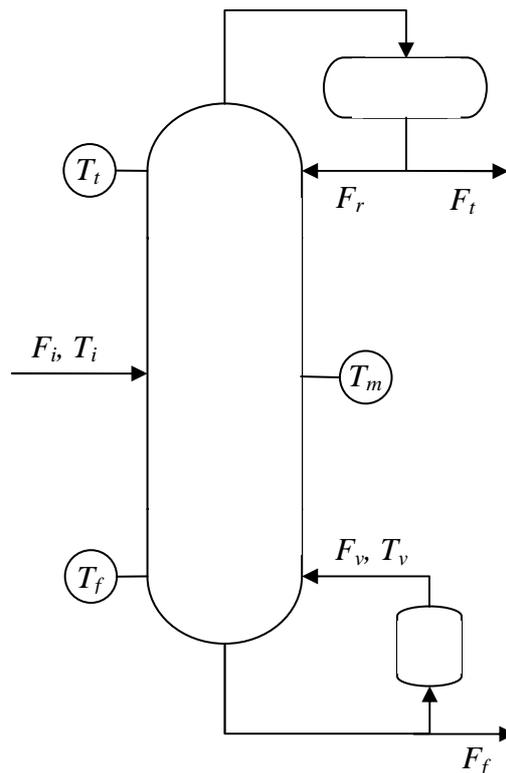


Figura 5.26: Esquema do processo 3.

O objetivo do processo é a purificação de butano a partir de uma mistura de hidrocarbonetos. De modo a manter a qualidade dos produtos, limites operacionais são impostos às variáveis, como, por exemplo, as concentrações de pentano na saída do topo da coluna e de butano na saída do fundo. Neste caso, estas concentrações deverão ser mantidas abaixo de um valor pré-estabelecido.

Tabela 5.2 – Variáveis do processo 3

Índices	Variáveis	Descrição	Unidades
1	F_i	Vazão de entrada	t/h
2	T_i	Temperatura de entrada	°C
3	F_r	Vazão de refluxo	t/h
4	T_m	Temperatura do meio	°C
5	T_t	Temperatura do topo	°C
6	F_t	Vazão do topo	t/h
7	T_f	Temperatura do fundo	°C
8	F_v	Vazão de vapor	t/h
9	F_f	Vazão do fundo	t/h
10	T_v	Temperatura de vapor	°C
-	$C_{3,t}$	Concentração de propano no topo	mol/L
-	$C_{5,t}$	Concentração de pentano no topo	mol/L
-	$C_{4,f}$	Concentração de butano no fundo	mol/L

Este processo opera sob uma estrutura de controle que prioriza o controle das composições de topo e de fundo, porém, também fazendo com que seja sensível a alterações na vazão de entrada. Esta vazão é proveniente de uma unidade à montante e é mantida em um ponto estacionário. Entretanto, esta vazão é frequentemente reduzida em cerca de 30 %, fazendo com que a malha de controle tente se adaptar à condição corrente. Os controladores da pressão interna da coluna e dos níveis do refeedor e condensador conseguem compensar a perturbação; por outro lado, os controladores das temperaturas são incapazes, levando a concentração de pentano no topo, $C_{5,t}$, a ultrapassar seu limite operacional.

O monitoramento das concentrações apenas seria inadequado, visto que suas respostas têm um atraso de 2 horas, aproximadamente. Além disso, o monitoramento da vazão de entrada apenas também seria insuficiente, já que uma elevação lenta de seu valor não produziria tal condição de falha nas concentrações, apesar do processo operar fora de seu ponto estacionário. Isto pode ser observado na Figura 5.27 no período de 6 a 8 horas, quando existe um ligeiro decréscimo da vazão de entrada.

O modelo PCA é então utilizado mais uma vez para compor o sistema de monitoramento do processo.

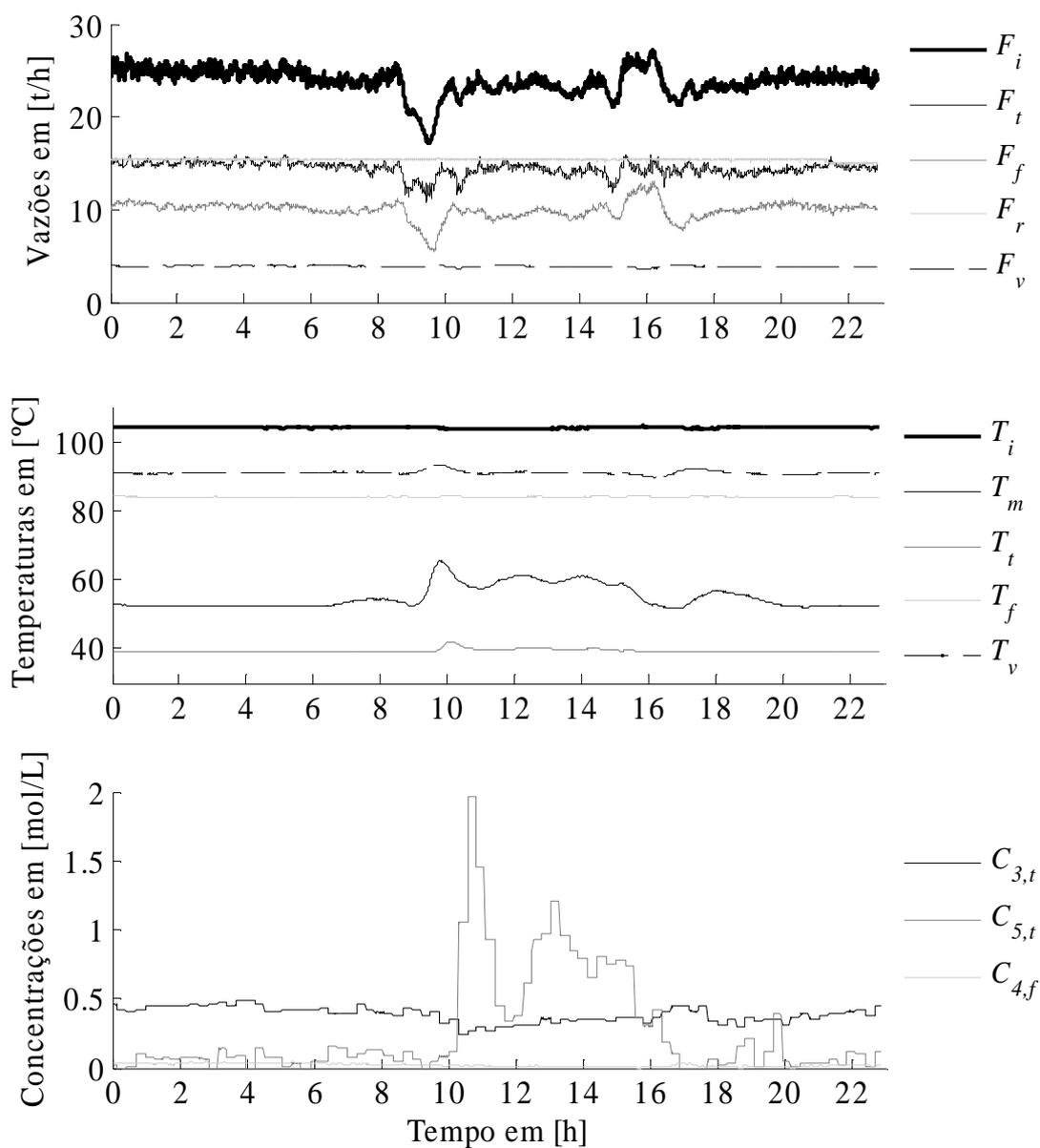


Figura 5.27: Dados do processo 3.

Assim como no exemplo anterior, a técnica VRE foi utilizada para a seleção do número de componentes principais. As Figuras 5.28 e 5.29 apresentam, respectivamente, o resultado desta técnica e as variâncias percentuais dos componentes. Como é possível perceber, apenas dois componentes principais do modelo PCA são suficientes para fornecer a melhor reconstrução das variáveis, mesmo com a captura de menos de 70 % da variância total do processo.

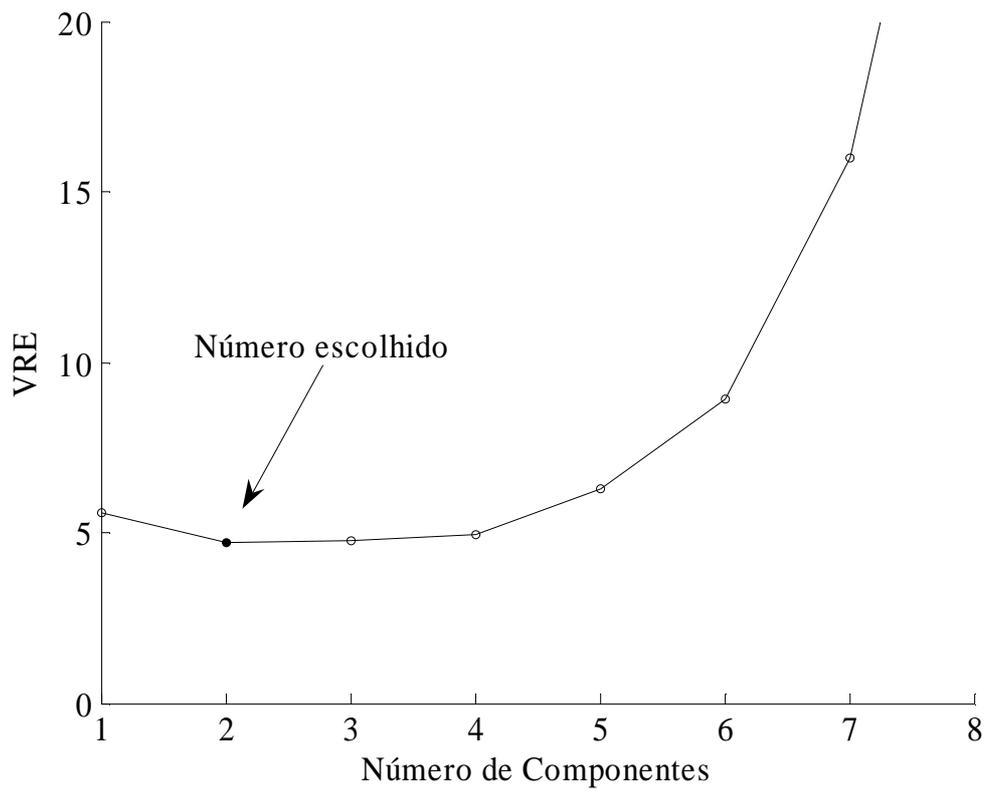


Figura 5.28: Resultado da técnica VRE para o processo 3.

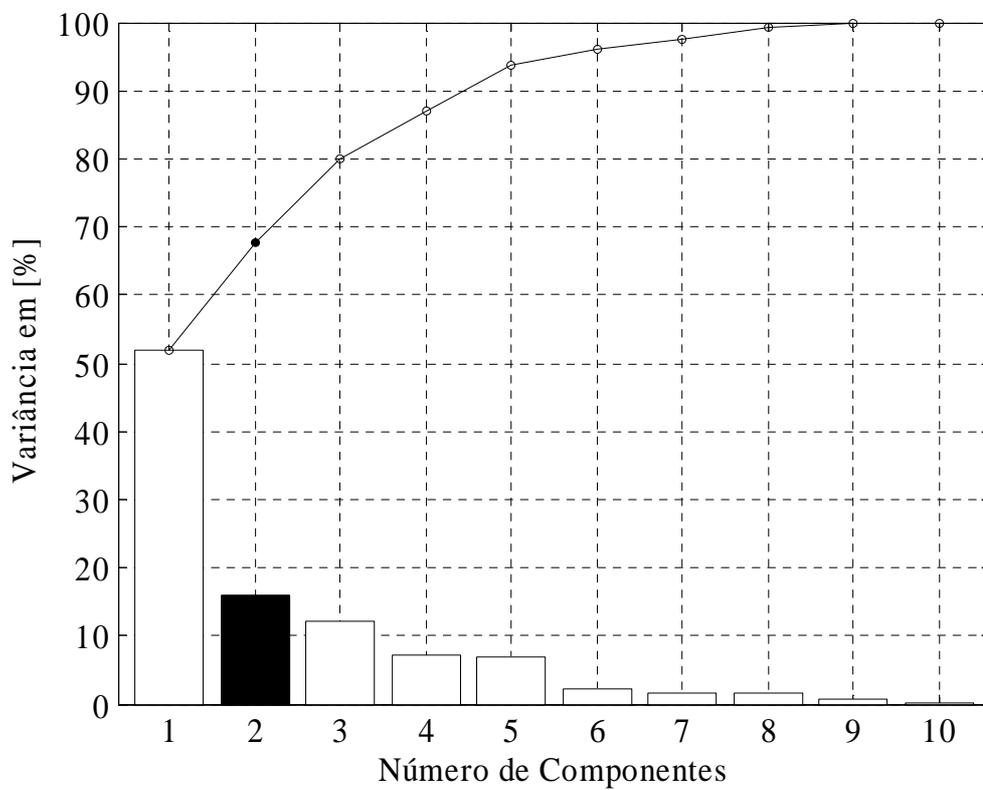


Figura 5.29: Variâncias dos componentes do processo 3.

Na etapa de detecção de falhas, as Estatísticas T^2 e Q indicam o início do período de condição anormal por volta dos tempos 7 horas e 6,5 horas, respectivamente, segundo mostrado pela Figura 5.30. Este período corresponde ao aumento da temperatura do meio da coluna, consequente a uma redução da vazão de entrada. Assim, o processo opera longe de seu ponto usual, contribuindo para elevação da Estatística T^2 . E, como algumas variáveis são controladas, existe uma quebra de correlação, contribuindo para uma elevação mais acentuada da Estatística Q .

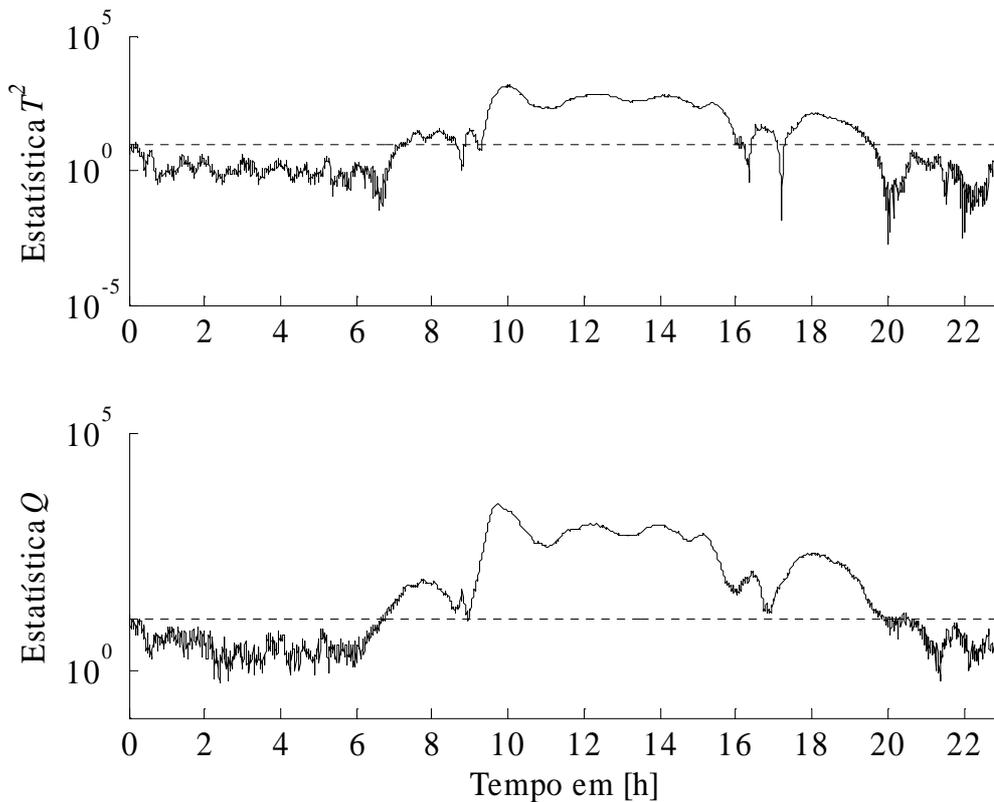


Figura 5.30: Estatísticas T^2 e Q para o processo 3.

Como primeira análise de diagnóstico da falha, o plano gerado pelos componentes principais pode ser confrontado com o mapeamento de seus parâmetros, conforme visualizado pelas Figuras 5.31 e 5.32. Como esperado, as primeiras variáveis afetadas são as temperaturas do interior da coluna de destilação, 4, 5 e 7, que sofrem pela mudança da quantidade de material na alimentação. Esta análise está de acordo com a da técnica de contribuições de T^2 , mostrada na Figura 5.33. Nesta última, é possível verificar a magnitude da falha para cada variável, revelando que a temperatura do meio da coluna é realmente a mais afetada devido à proximidade com a entrada.

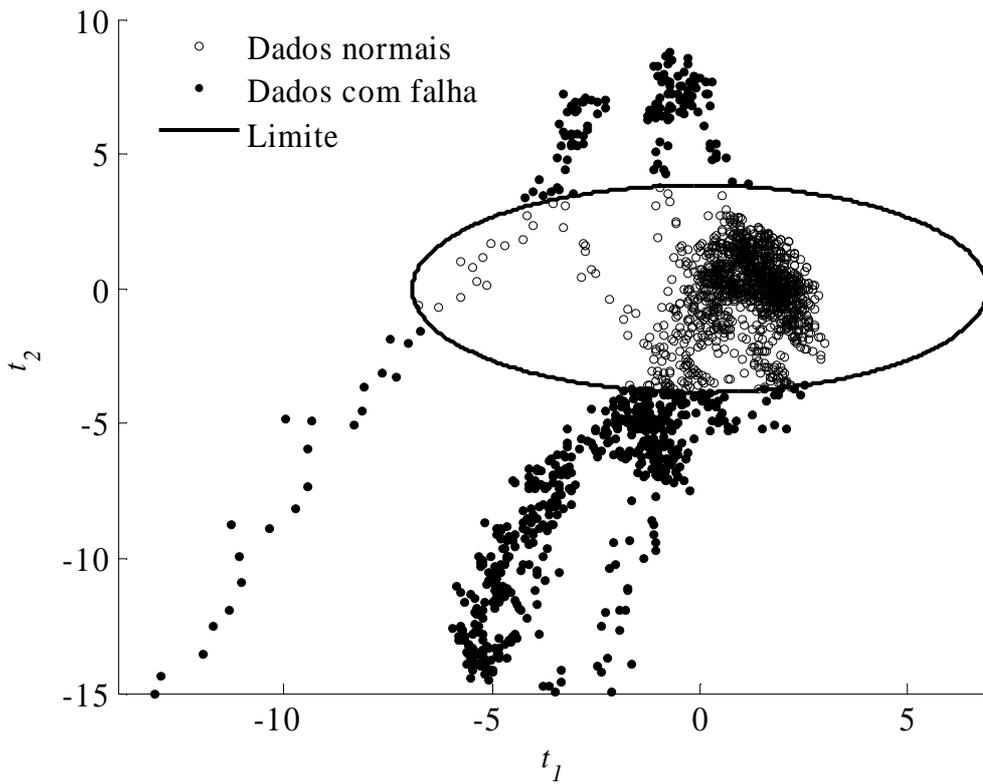


Figura 5.31: Comportamento da falha no processo 3.

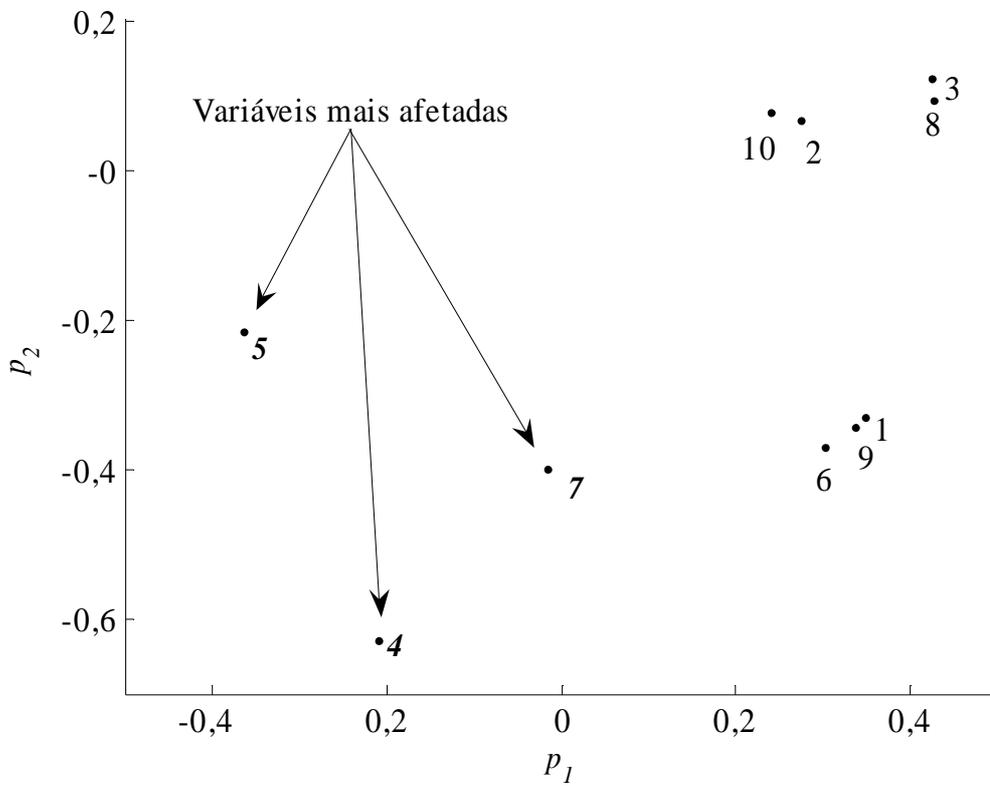


Figura 5.32: Mapa dos componentes principais do processo 3.

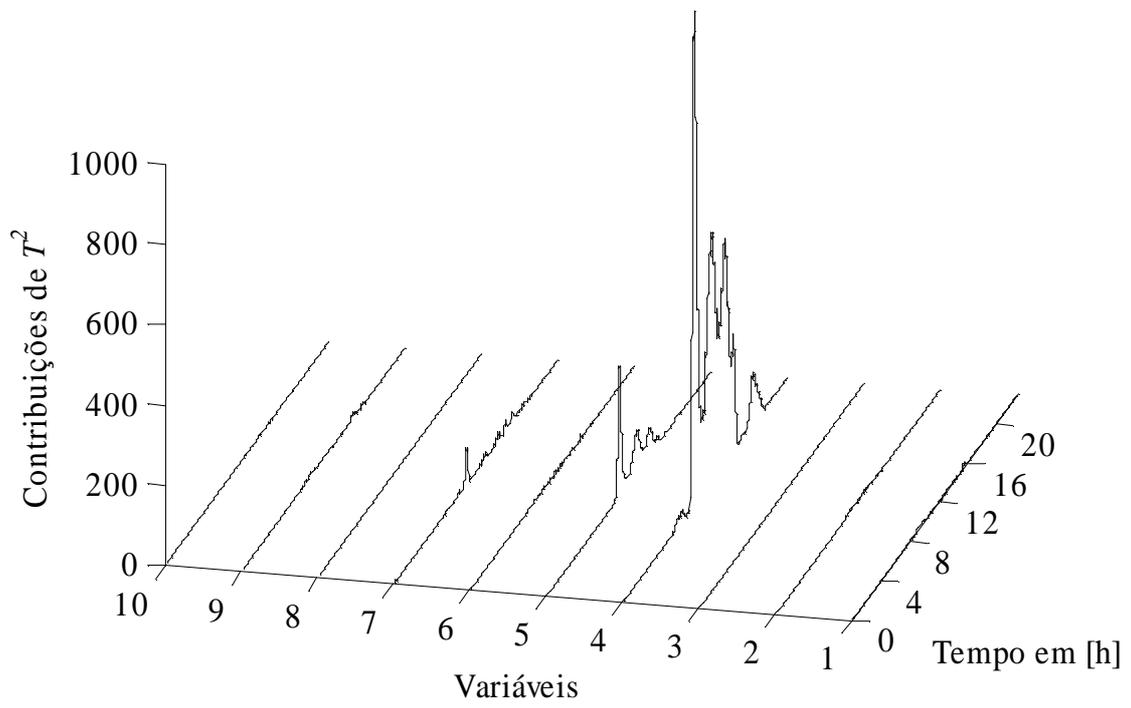


Figura 5.33: Contribuições da Estatística T^2 para o processo 3.

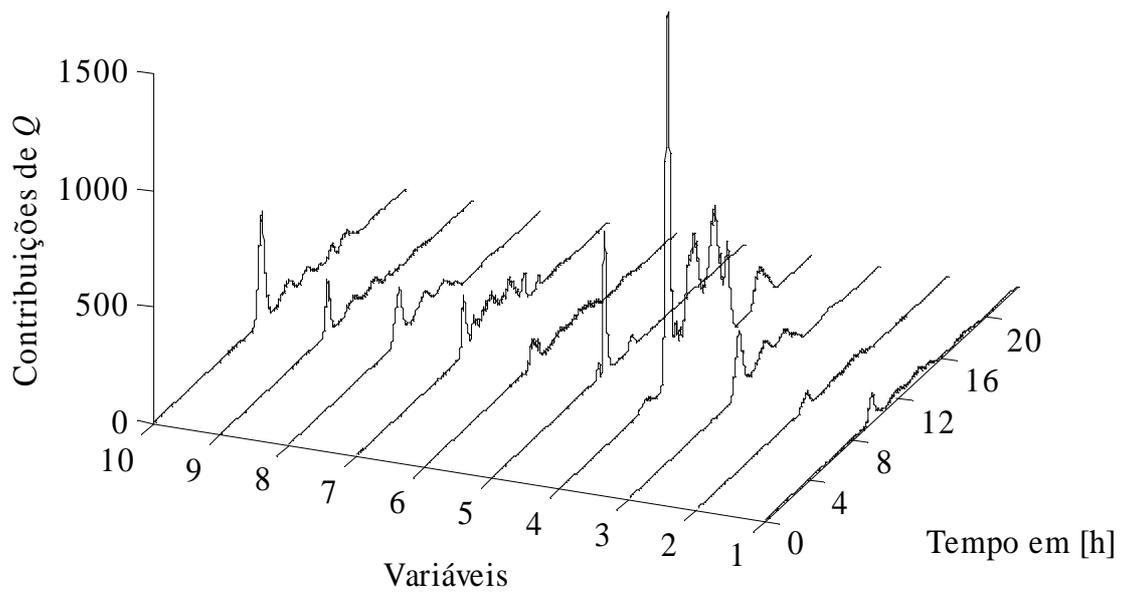


Figura 5.34: Contribuições da Estatística Q para o processo 3.

Já em relação à Estatística Q , a Figura 5.34 identifica porções de falha presentes em todas as variáveis, com destaque para a variável 4 novamente.

Em conclusão, neste exemplo, as Estatísticas detectaram a condição anormal de operação do processo tão logo a falha ocorreu. Em seguida, ao analisar as cartas de contribuição no momento de detecção, foi possível identificar que a temperatura do meio da coluna revelava um problema proveniente da alimentação, que se transferiu para as outras variáveis da coluna nos instantes seguintes até, finalmente, afetar as composições de saída (variáveis de qualidade).

Estes estudos de aplicação destacam a eficiência e simplicidade de um sistema de monitoramento com base em um modelo PCA para processos reais, sendo possível evitar perda de desempenho ou mesmo situações desastrosas.

5.4. Comentários finais

Este capítulo apresentou aplicações da tecnologia convencional de monitoramento estatístico de processos em dados industriais. Embora os processos e os cenários estudados não representem toda a diversidade encontrada nas industriais, as técnicas aplicadas tiveram desempenho bastante satisfatório para esses casos particulares. Utilizou-se um esquema de monitoramento bastante simples, constituído por um modelo PCA, gerado com o auxílio da técnica VRE, e das Estatísticas T^2 e Q , juntamente com seus índices de diagnóstico e mapas de componentes. Os principais problemas ou dificuldades encontrados nestas aplicações foram: *i*) o efeito da dinâmica na hipótese de normalidade da nuvem de dados (Seção 5.1), *ii*) a aplicação da abordagem local em dados reais (Seção 5.2) e *iii*) o diagnóstico de falhas de processo (Seção 5.3).

Conforme visualizado na Figura 5.7 (Seção 5.1), a nuvem de dados é constituída pela dinâmica do processo e não pelas flutuações aleatórias, desrespeitando a hipótese de normalidade dos sinais do processo. O resultado deste problema fica evidente nas Figuras 5.4, 5.6, 5.10 e 5.14, em que a Estatística T^2 incorpora a dinâmica das variáveis, permitindo erros de avaliação da condição do processo. Por outro lado, a Estatística Q apresenta um comportamento puramente estocástico, realçando a detecção de qualquer mudança nos resíduos do modelo.

Na Seção 5.2 mostrou-se o resultado superior da abordagem local, comparando-se com aplicações convencionais das Estatísticas T^2 e Q , na detecção de

uma falha de baixa magnitude. Este resultado corrobora com os estudos simulados do Capítulo 4, em que a detecção por meio da abordagem local é mais evidente. Porém, o comportamento brusco dos índices de detecção da abordagem local revela que qualquer mudança mínima na estrutura do processo ou da operação pode indicar falhas, tornando a técnica difícil de ser implementada em processos reais. Em outras palavras, perturbações intrínsecas do processo ou erros de modelagem insignificantes podem atrapalhar o esquema de monitoramento. O modelo deve ser muito preciso para a aplicação da abordagem local.

Em terceiro lugar, o problema do diagnóstico de falhas em processos industriais mais complexos do que os estudados neste capítulo pode configurar uma tarefa árdua para as técnicas convencionais usadas. Este tipo de falha de processo é constituído por uma combinação de efeitos das variáveis, que podem gerar um sinal de falha. As abordagens mais indicadas nos casos mais complexos podem envolver modelagens de falhas conhecidas, gerando bancos de falhas, ou alterações no modelo do processo, incorporando os sinais de falha.

Além desses problemas e dificuldades, a escolha de uma técnica com critério heurístico adequado para seleção do parâmetro n_t é considerada uma etapa polêmica. Neste estudo, escolheu-se a técnica VRE por ter bom respaldo teórico e garantir a geração do modelo PCA que gera o erro de reconstrução total de menor variância. Entretanto, é sabido que esta técnica pode selecionar um número menor de componentes do que o número de sinais do processo [41]. No desenvolvimento deste trabalho de tese, verificou-se que este problema ocorre com maior frequência quando o número de sinais do processo é relativamente elevado (maior que 10). Mais especificamente, alguns componentes extraídos aumentam (ou não reduzem) a variância do erro de predição do modelo PCA, fazendo com que sejam ignorados pela técnica VRE.

CAPÍTULO VI

MONITORAMENTO DE PROCESSOS COM SINAIS DESCONHECIDOS

Este capítulo apresenta a primeira contribuição central deste trabalho: um sistema para monitoramento da condição de processos constituídos por sinais normais e não-normais. Este sistema é um desenvolvimento do trabalho realizado por LIU *et al.* [172] e baseia-se em um modelo de componentes devidamente extraídos e processados, cujo procedimento de estimação supera alguns dos problemas provenientes das hipóteses do modelo PCA. O capítulo está dividido nas seguintes seções: *i*) problemas com a modelagem de sinais, *ii*) proposta de modelagem, *iii*) monitoramento usando modelo proposto e *iv*) aplicações industriais.

6.1. Problemas com a modelagem de sinais

Conforme explicado na Seção 3.4 do Capítulo 3, o modelo PCA está baseado em uma série de hipóteses que limitam seu uso em processos reais, cujas características desrespeitam algumas destas hipóteses. Além disto, a etapa de geração do modelo também possui uma dificuldade prática que é a escolha do número de sinais, o parâmetro n_r , uma vez que as regras existentes são geralmente empíricas. Outros problemas também são provenientes dos procedimentos de estimação de outros modelos, como o MLPCA. Nesta seção, três problemas da modelagem de sinais de processo são apresentados. Estes problemas representam temas de pesquisa em aberto na literatura pela falta de resoluções adequadas.

6.1.1. Problema 1: Extração dos sinais do processo

Este primeiro problema está relacionado com dois aspectos: *i*) a aplicação da técnica de PCA não garante que os sinais do processo estão totalmente encapsulados nos componentes principais e *ii*) a aplicação da técnica MLPCA, que utiliza em seu procedimento de estimação a informação dos erros das variáveis, não produz componentes principais que sejam não correlacionados e que possuam máxima variância. Ambos os aspectos podem ser comprovados pela medida de associação; ou seja, a matriz de covariância entre os componentes principais e os resíduos do modelo PCA, para o primeiro caso, e entre os componentes principais do modelo MLPCA, para o segundo caso. Em outras palavras, componentes principais e resíduos correlacionados indicam uma extração pobre dos sinais do processo, enquanto que componentes principais correlacionados indicam que não foram extraídos segundo o critério de máxima variância, mas sim máxima verossimilhança dos erros das variáveis neste caso.

6.1.2. Problema 2: Determinação do número de sinais do processo

Dentre as principais regras usadas para determinação do número de sinais do processo, muitas admitem erros isotrópicos para as variáveis ou se baseiam em procedimentos empíricos. É importante ressaltar que a escolha indevida do número de sinais pode provocar o aumento ou a redução da variação residual, alterando o erro de todas as variáveis [41]. Este problema é especialmente importante para o monitoramento da condição de processos, já que o resíduo das variáveis tem um papel fundamental.

6.1.3. Problema 3: Falta de um sistema de monitoramento para sinais desconhecidos

Este problema envolve a falta de um sistema de monitoramento de processos que seja baseado em um modelo adequado a determinados processos químicos, composto por sinais normais e não-normais. Também é desejado que este modelo seja consistente com os erros das variáveis do processo. Para processos mais complexos, em que são esperados erros anisotrópicos, a técnica de PCA certamente apresentará estimativas inconsistentes do modelo do processo. Sendo assim, é necessário um procedimento de estimação do modelo que leve em consideração informações *a priori* da estrutura do erro das variáveis ou forneça estimativas destas.

6.2. Proposta de modelagem

Nesta seção, um modelo de sinais baseado nas técnicas de MLPCA e ICA e um procedimento de estimação são propostos.

6.2.1. Estimação do modelo MLPCA

Em virtude da limitação da estrutura do modelo PCA em relação aos erros das variáveis, uma técnica MLPCA é desenvolvida com base no trabalho de NARASIMHAN e SHAH [168]. A estrutura do erro das variáveis admitida por esta técnica pode ser mais flexível, englobando variáveis com erros dependentes e diferentes entre si. Todo o fundamento teórico desta técnica MLPCA baseia-se na estrutura admitida para os dados do processo, apresentada pelas Equações 3.8 e 6.1,

$$\mathbf{S}_{xx} = \mathbf{\Xi}\mathbf{\Lambda}\mathbf{\Xi}^T + \mathbf{S}_{ee} \quad 6.1$$

e também na padronização destes dados por meio da matriz de covariância dos erros das variáveis, decomposta com o auxílio da técnica de decomposição de Cholesky, Equações 6.2.

$$\mathbf{S}_\varepsilon^{-T} \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{S}_\varepsilon^{-I} = \mathbf{S}_\varepsilon^{-T} \mathbf{\Xi} \mathbf{\Lambda} \mathbf{\Xi}^T \mathbf{S}_\varepsilon^{-I} + \mathbf{I} \quad 6.2a$$

$$\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon} = \mathbf{S}_\varepsilon \mathbf{S}_\varepsilon^T \quad 6.2b$$

A padronização dos dados é feita tradicionalmente usando o desvio padrão de cada variável, para torná-las equiparáveis no procedimento de estimação do modelo. Entretanto, as variáveis possuem dinâmica ao redor da média, tornando seus desvios padrão maiores do que os erros. Em outras palavras, ao padronizar as variáveis com seus desvios padrão e em seguida estimar um modelo, os erros das variáveis com maior dinâmica tornam-se superestimados e os das variáveis de menor dinâmica se tornam subestimados, fazendo com que informações do processo sejam distribuídas também pelo subespaço dos resíduos e vice-versa [168].

Portanto, o conhecimento da matriz de covariância dos erros das variáveis é de extrema importância para a estimativa correta do subespaço principal. Uma vez de posse da matriz padronizada, $\mathbf{S}_\varepsilon^{-T} \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{S}_\varepsilon^{-I}$, sua decomposição em valores e vetores característicos proporciona parâmetros para um modelo que respeita o critério de máxima verossimilhança, ou seja, um modelo MLPCA. As Equações 6.3 apresentam a determinação do modelo MLPCA, \mathbf{P} , e seu complemento, $\tilde{\mathbf{P}}$,

$$\mathbf{S}_\varepsilon^{-T} \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{S}_\varepsilon^{-I} = \mathbf{V} \mathbf{\Lambda} \mathbf{V}^T \quad 6.3a$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} \mathbf{V}_{n_r} & \mathbf{V}_{n_x - n_r} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{\Xi}} & \tilde{\mathbf{\Xi}} \end{bmatrix} \quad 6.3b$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{S}_\varepsilon \hat{\mathbf{\Xi}} \quad 6.3c$$

$$\tilde{\mathbf{P}} = \mathbf{S}_\varepsilon^{-I} \tilde{\mathbf{\Xi}} \quad 6.3d$$

enquanto que as Equações 6.4 apresentam as estimativas das variáveis pelo modelo MLPCA e seus resíduos na forma de componentes residuais,

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{P} \mathbf{P}^T \mathbf{x} \quad 6.4a$$

$$\mathbf{e} = \tilde{\mathbf{P}}^T \mathbf{x} \quad 6.4b$$

No trabalho de NARASIMHAN e SHAH [168], um procedimento iterativo de estimação (*Iterative PCA*, *IPCA*) foi desenvolvido para casos em que a matriz de covariância dos erros das variáveis não é conhecida. O procedimento consiste basicamente na estimação desta matriz em um ciclo externo. Assim, selecionam-se os parâmetros (variáveis de otimização) para gerar a matriz $\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$ (ou \mathbf{S}_ε), obtém-se o modelo

MLPCA correspondente, Equação 6.3, e então o valor da função objetivo, f_L , Equação 6.5, é determinado para direcionar a nova iteração do procedimento de otimização (minimização).

$$f_L = \ln |\tilde{\mathbf{P}}^T \mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon} \tilde{\mathbf{P}}| + \frac{\mathbf{e}^T (\tilde{\mathbf{P}}^T \mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon} \tilde{\mathbf{P}})^{-1} \mathbf{e}}{n_k} \quad 6.5$$

A função f_L é baseada na verossimilhança dos erros das variáveis, admitidos normais, e $|\cdot|$ significa o determinante de \cdot .

Neste trabalho, utiliza-se esta técnica com uma ligeira modificação, que é a inclusão de restrições teóricas da estrutura dos dados na função objetivo. Neste caso, obtém-se,

$$f = f_L + a_1 \mathbf{c}_1^T \mathbf{c}_1 + a_2 \mathbf{c}_2^T \mathbf{c}_2 \quad 6.6a$$

$$\mathbf{c}_1 = \text{diag}(\tilde{\mathbf{P}}^T \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \tilde{\mathbf{P}} - \mathbf{I}) \quad 6.6b$$

$$\mathbf{c}_2 = \text{diag}(\tilde{\mathbf{V}}^T (\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} - \mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}) \tilde{\mathbf{V}}) \quad 6.6c$$

onde f é a nova função objetivo, a_1 e a_2 são parâmetros de ponderação, \mathbf{c}_1 e \mathbf{c}_2 são restrições, \mathbf{I} é a matriz identidade e $\tilde{\mathbf{V}}$ é a matriz de vetores característicos descartados de $\mathbf{S}_{\mathbf{xx}} - \mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$.

Vale ressaltar que o número de parâmetros a estimar com este procedimento deve ser menor ou igual a $(n_x - n_t)(n_x - n_t + 1)/2$; ou seja, o número de parâmetros independentes da matriz de covariância dos componentes residuais, $\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$. Em outras palavras, o número de componentes principais, n_t , é fundamental para determinar quantos parâmetros da matriz $\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$ são passíveis de serem estimados. Para estimação de uma matriz $\mathbf{S}_{\varepsilon\varepsilon}$ diagonal, admitindo erros independentes, porém diferentes entre as variáveis, a seguinte inequação deve ser respeitada:

$$(n_x - n_t)(n_x - n_t + 1)/2 \geq n_x \quad 6.7$$

6.2.2. Determinação do número de sinais do processo

Como o procedimento descrito na seção anterior não determina *a priori* o número de componentes principais para compor o modelo, um procedimento deve ser realizado de modo a testar, estatisticamente, todos os valores possíveis. O teste estatístico é baseado na igualdade dos valores característicos residuais da matriz de padronizada $\mathbf{S}_{\varepsilon}^{-T} \mathbf{S}_{\mathbf{xx}} \mathbf{S}_{\varepsilon}^{-1}$ [42]. Neste caso, esses valores devem ser todos iguais a 1. As

Equações 6.8 apresentam o teste estatístico, que segue uma distribuição χ^2 com h graus de liberdade,

$$\text{teste}(n_t) = (n_k - 1) \left((n_x - n_t) \ln \left(\sum_{i=n_t+1}^{n_x} \frac{\lambda_i}{(n_x - n_t)} \right) - \sum_{i=n_t+1}^{n_x} \ln(\lambda_i) \right) \quad 6.8a$$

$$\text{limite} = \chi^2_\alpha(h) \quad 6.8b$$

$$h = (n_x - n_t - 1)(n_x - n_t + 2) / 2 \quad 6.8c$$

Este teste é denominado de teste EOE (*Equality of Eigenvalues*) e pode ser dividido por seu limite estatístico para sua melhor visualização. A Equação 6.9 apresenta esta divisão.

$$\text{EOE}(n_t) = \text{teste}(n_t) / \text{limite} \leq 1 \quad 6.9$$

6.2.3. Correção dos componentes principais

Nesta etapa da modelagem, os subespaços, principal e residual já estão definidos. Contudo, os componentes que exploram o subespaço principal não representam uma base ótima em relação ao critério de máxima variância, uma vez que foram estimados indiretamente pelo critério de máxima verossimilhança aplicado aos erros das variáveis. Para configurá-los de acordo com a máxima variância, a decomposição em valores e vetores característicos pode ser repetida, porém desta vez apenas para as projeções das variáveis no subespaço principal. Alternativamente, o algoritmo NIPALS [43,111] pode ser modificado e obter resultados similares, de acordo com as Equações 6.10,

$$\hat{\mathbf{p}}_i^{(j)} = \hat{t}_i^{(j)} (\mathbf{P}\mathbf{P}^T) \mathbf{x}_i \quad 6.10a$$

$$\hat{\mathbf{p}}_i^{(j)} = \hat{\mathbf{p}}_i^{(j)} / \sqrt{\hat{\mathbf{p}}_i^{(j)T} \hat{\mathbf{p}}_i^{(j)}} \quad 6.10b$$

$$\hat{t}_i^{(j+1)} = \hat{\mathbf{p}}_i^{(j)T} \mathbf{x}_i \quad 6.10c$$

onde $\mathbf{P}\mathbf{P}^T$ representa a matriz de projeção para o subespaço principal e $\hat{t}_i^{(j)}$ e $\hat{\mathbf{p}}_i^{(j)}$ representam o componente e o vetor característico i na iteração j . As iterações finalizam quando as estimativas do componente são equivalentes, em iterações consecutivas. Então as variáveis são deflacionadas, segundo a Equação 6.11, para repetir o procedimento com o componente e o vetor característico $i + 1$.

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i - \hat{t}_i \hat{\mathbf{p}}_i \quad 6.11$$

Esta correção dos componentes principais é importante, uma vez que eles são usados para extrair sinais não-normais do processo.

6.2.4. Determinação e caracterização de sinais não-normais

Finalmente, nesta última etapa de modelagem os componentes principais estimados e corrigidos são testados estatisticamente por um teste de normalidade para determinação do número de sinais não-normais existentes no processo. O teste utilizado neste trabalho é o teste Jarque-Bera, apresentado pelas Equações 6.12, que segue uma distribuição χ^2 com 2 graus de liberdade,

$$\text{teste}(i) = n_k \left(\frac{1}{6} \left(\sum_{k=1}^{n_k} \frac{z_{k,i}^3}{n_k} \right)^2 + \frac{1}{24} \left(\sum_{k=1}^{n_k} \frac{z_{k,i}^4}{n_k} - 3 \right)^2 \right) \quad 6.12a$$

$$z = \frac{t - \mu_t}{\sigma_t} \quad 6.12b$$

$$\text{limite} = \chi_\alpha^2(2) \quad 6.12c$$

onde μ_t e σ_t são a média e o desvio padrão de um dado componente t . Este é um teste baseado em momentos e pode ser aplicado a muitos outros dados.

O resultado desse teste determina os componentes não-normais do processo e, com o auxílio da técnica ICA, torna-se possível extraí-los de maneira apropriada, gerando componentes independentes.

6.3. Monitoramento usando modelo proposto

Conforme apresentado na seção anterior, o modelo do processo é composto por n_t componentes independentes e componentes principais, enquanto que os resíduos são compostos por n_x variáveis normais de covariância \mathbf{S}_{ee} . De modo a monitorar estes três conjuntos de variáveis, três estatísticas são sugeridas para gerar cartas de controle: *i*) Estatística R^2 para os componentes independentes, *ii*) Estatística T^2 para os componentes principais e *iii*) e Estatística Q (ou SPE) para os resíduos. A seguir, a Estatística R^2 é apresentada.

6.3.1. Estatística R^2 para sinais de distribuição desconhecida

Uma vez que os componentes independentes seguem distribuições desconhecidas, torna-se necessário o uso de um modelo não-linear genérico para caracterizá-los, para que o monitoramento possa ser efetuado. Neste trabalho, um

modelo com base na técnica de descrição de dados por vetor suporte (*Support vector data description*, SVDD) [172] é desenvolvido, em que uma função núcleo de transformação é usada para transportar os dados para um espaço característico. Em ambos os espaços, original e característico, os dados permanecem no interior de uma hipersfera; porém, somente no espaço característico é que os dados encontram-se agrupados e alinhados, ocupando um volume menor. Então, é possível delimitar uma região para condição de operação normal do processo fazendo uso de uma nova hipersfera, cuja posição radial determina a condição de cada observação. A Figura 6.1, originalmente apresentada por LIU *et al.* [172], ilustra a Estatística R^2 .

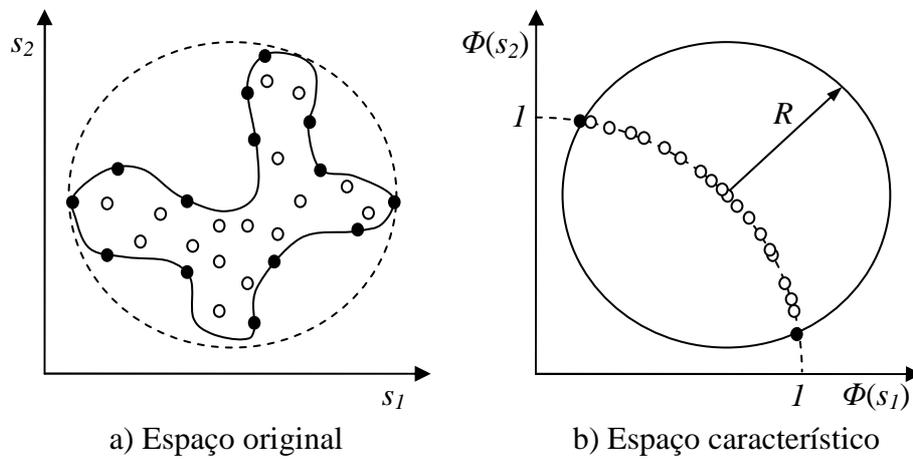


Figura 6.1: Ilustração da Estatística R^2 [175].

Neste trabalho a função núcleo de transformação utilizada é a função de base radial, apresentada pela Equação 6.13,

$$K(\mathbf{s}_{k_1}, \mathbf{s}_{k_2}) = K_{k_1, k_2} = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{s}_{k_1} - \mathbf{s}_{k_2}\|^2}{\sigma^2}\right) \quad 6.13$$

onde $K(\cdot, \cdot)$ é a função que gera elementos da matriz \mathbf{K} , k_1 e k_2 são índices de observações e σ^2 é um parâmetro da função. A matriz \mathbf{K} representa a relação entre as observações das variáveis no novo espaço, sendo assim, um vetor de n_k coeficientes \mathbf{a} deve ser estimado para a geração de uma base, que representa a hipersfera. As Equações 6.14 apresentam a função objetivo, que deve ser minimizada, e suas restrições para estimar estes coeficientes:

$$f = \mathbf{a}^T \mathbf{K} \mathbf{a} \quad 6.14a$$

$$\sum \mathbf{a} = 1 \quad 6.14b$$

$$0 \leq a \leq 1/n_k \quad 6.14c$$

O valor mínimo da função objetivo desta estimação representa, geometricamente, o centro da hipersfera; sendo assim, os coeficientes que apresentam os valores mais significativos são relativos às observações mais afastadas de seu centro.

De posse dos coeficientes de todas as observações normais (ou seja, realizada a transformação completa dos dados para o espaço característico), a posição radial de cada observação pode ser calculada de acordo com as Equações 6.15,

$$R_k = \sqrt{1 + \mathbf{a}^T \mathbf{K} \mathbf{a} - 2 \mathbf{a}^T \mathbf{K}_k} \quad 6.15a$$

$$\mathbf{K}_k = K(\mathbf{s}, \mathbf{s}_k) \quad 6.15b$$

onde \mathbf{K}_k representa a relação entre a observação k e observações registradas em condições normais de operação de um conjunto de componentes independentes \mathbf{s} .

Finalmente, para gerar a Estatística R^2 , utiliza-se apenas a posição radial, R_k , de uma observação no espaço característico, \mathbf{K}_k , ao quadrado. Já o limite estatístico é dado pela média ao quadrado da posição radial de um subconjunto de observações em condições normais, cujos coeficientes estão dentro do intervalo de significância,

$$a_\alpha \leq \mathbf{a}_{NOC} \leq a_{1-\alpha} \quad 6.16$$

onde a_α e $a_{1-\alpha}$ representam limites de significância α para os coeficientes e estão relacionado com o percentil das funções de distribuição de probabilidade conhecidas. \mathbf{a}_{NOC} representa o conjunto de coeficientes em observações passadas significativas, que se encontram na região da hipersfera onde ocorrem com maior frequência, e que possui tamanho n_{NOC} . Os parâmetros a_α e $a_{1-\alpha}$ podem ser obtidos por meio do ordenamento do vetor \mathbf{a} e da identificação dos elementos nas posições αn_k e $(1-\alpha)n_k$.

As Equações 6.17 fornecem a Estatística R^2 e seu limite estatístico.

$$R_k^2 = 1 + \mathbf{a}^T \mathbf{K} \mathbf{a} - 2 \mathbf{a}^T \mathbf{K}_k \quad 6.17a$$

$$\text{limite} = \left(\frac{\sum \mathbf{R}_{NOC}}{n_{NOC}} \right)^2 \quad 6.17b$$

6.4. Aplicações industriais

Esta seção apresenta três aplicações industriais, sendo a primeira uma simulação usada para ilustrar a técnica proposta de modelagem MLPCA e as outras duas, aplicações industriais utilizando dados reais de processos químicos.

6.4.1. Processo simulado de síntese de metanol

Este processo possui uma rede de 28 sensores para a medição de vazões de vapor, sendo que 17 destes representam variáveis independentes [168]. A estrutura básica das variáveis independentes é dada por $x_i = p_{ii}s + \varepsilon$, enquanto que a das variáveis dependentes é dada por $x_d = f(s) + \varepsilon$, onde s é uma variável normal padronizada, ε é uma variável normal com variância entre 0,1 e 0,5, p_{ii} são parâmetros e $f(s)$ são restrições. A Figura 6.2 ilustra o processo, enquanto que as Tabelas 6.1 e 6.2 apresentam os parâmetros usados para a simulação dos dados.

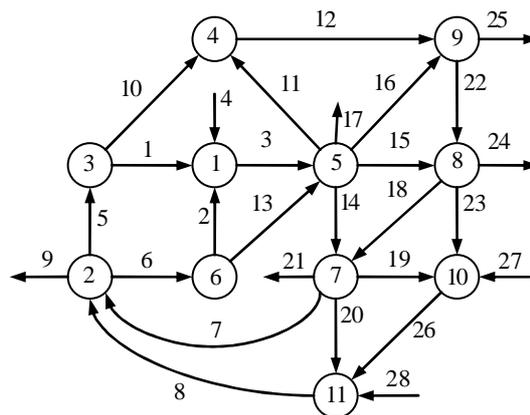


Figura 6.2: Esquema do processo 1 [168].

Conforme discutido na Seção 6.1 sobre os problemas na modelagem de sinais de processos, as técnicas PCA, IPCA e a proposta MLPCA foram aplicadas neste processo para comparação de seus desempenhos. Foram também usadas três regras para determinação do número de componentes principais, para comparação com o teste EOE sugerido.

Tabela 6.1 – Parâmetros usados para gerar as variáveis independentes.

x_i	p_{ii}	σ_ε^2	$\sigma_s^2 / \sigma_\varepsilon^2$
F4	3,4497	0,1219	2,8637
F6	2,7893	0,1590	2,5080
F10	1,1375	0,1142	2,9594
F11	7,7211	0,1468	2,6104
F13	5,0059	0,1801	2,3564
F14	9,3863	0,4380	1,5109
F16	5,1939	0,2744	1,9090
F17	4,7678	0,1100	3,0152
F18	8,6160	0,1196	2,8910
F19	5,7264	0,4467	1,4962
F20	2,8238	0,1158	2,9381
F21	7,0492	0,1727	2,4064
F22	8,5431	0,3538	1,6811
F24	1,1768	0,1970	2,2531
F26	7,1315	0,2299	2,0857
F27	4,4153	0,2028	2,2204
F28	8,4862	0,4241	1,5355

Tabela 6.2 – Parâmetros usados para gerar as variáveis dependentes.

x_d	$f(x)$	σ_ε^2	$\sigma_s^2 / \sigma_\varepsilon^2$
F1	F5-F10	0,4181	1,5466
F2	F6-F13	0,2490	2,0040
F3	F1+F2+F4	0,2840	1,8766
F5	-F6+F7+F8-F9	0,3201	1,7674
F7	F14+F18-F19-F20-F21	0,1256	2,8221
F8	F20+F26+F28	0,4006	1,5799
F9	F4-F17-F21-F24-F25+F27+F28	0,1777	2,3725
F12	F10+F11	0,1905	2,2912
F15	F3-F11+F13-F14-F16-F17	0,2952	1,8404
F23	F15-F18+F22-F24	0,3573	1,6729
F25	F12+F16-F22	0,1030	3,1157

A Figura 6.3 apresenta os elementos da matriz de covariância entre os componentes e resíduos dos modelos PCA e MLPCA. Como é possível perceber, o modelo PCA não é capaz de extrair os sinais do processo adequadamente, ao contrário do modelo MLPCA. Esta correlação no modelo PCA indica que a padronização das variáveis utilizando o desvio padrão de cada variável não permite um modelo consistente. Já em relação à técnica proposta MLPCA, a padronização das variáveis utilizando a estimativa da matriz de covariância dos erros comprova que o subespaço principal estimado é consistente ao gerar componentes principais e resíduos não correlacionados.

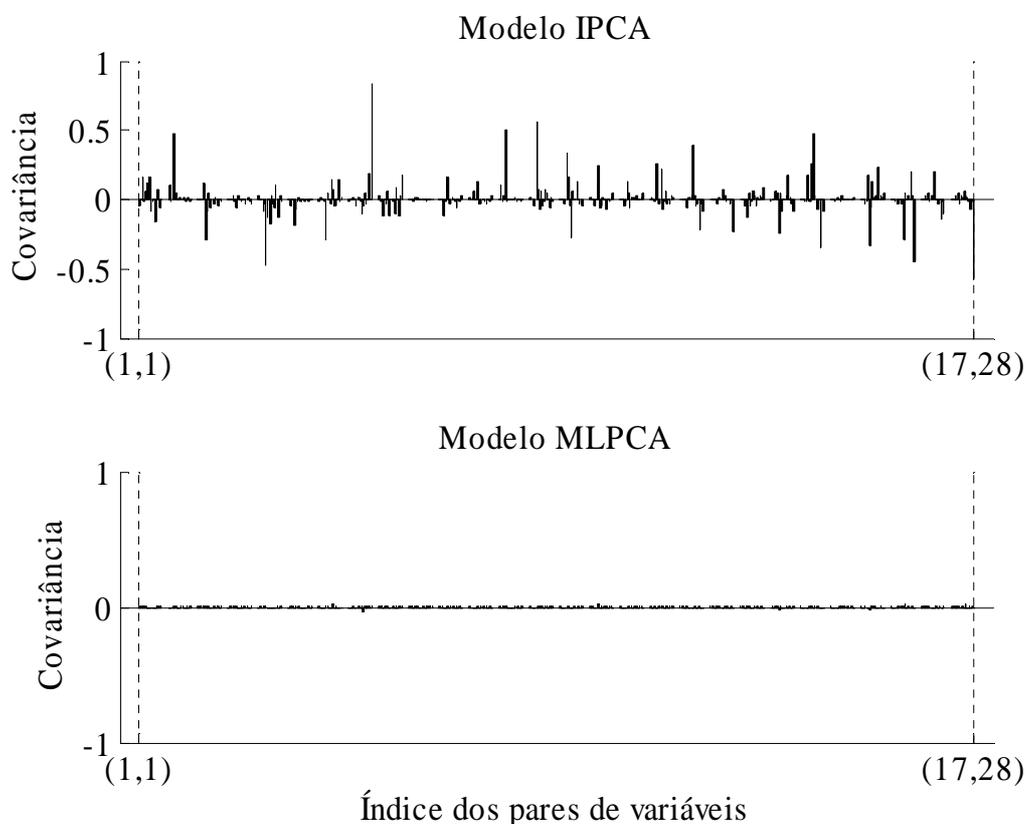


Figura 6.3: Elementos da matriz de covariância entre sinais e resíduos.

Em relação à qualidade dos componentes principais estimados, a Figura 6.4 revela os valores característicos provenientes dos procedimentos de estimação usando as técnicas IPCA e MLPCA. Tendo em vista que estes valores característicos representam a variância de cada componente principal, fica evidente que a primeira técnica não respeita o critério da máxima variância, gerando componentes correlacionados. As Figuras 6.3 e 6.4 mostram o problema relatado na Seção 6.1.1 a

respeito da extração dos sinais de um processo e sua resolução utilizando a tecnologia proposta neste trabalho.

Sobre o problema relatado na Seção 6.1.2, a respeito da determinação do número de sinais de um processo, a Figura 6.5 apresenta uma comparação entre três regras empíricas, AIC, VRE (Tabela 3.2) e VPC (*Velicer's Partial Correlation*), e o teste estatístico EOE. Na Figura 6.5, o número de componentes principais é corretamente determinado pelo teste estatístico, 17 sinais, enquanto que as outras regras apontam para diferentes valores incorretos, 25 e 6 sinais. Isto pode ser devido à hipótese de erros isotrópicos ou ao empirismo relacionado a essas técnicas.

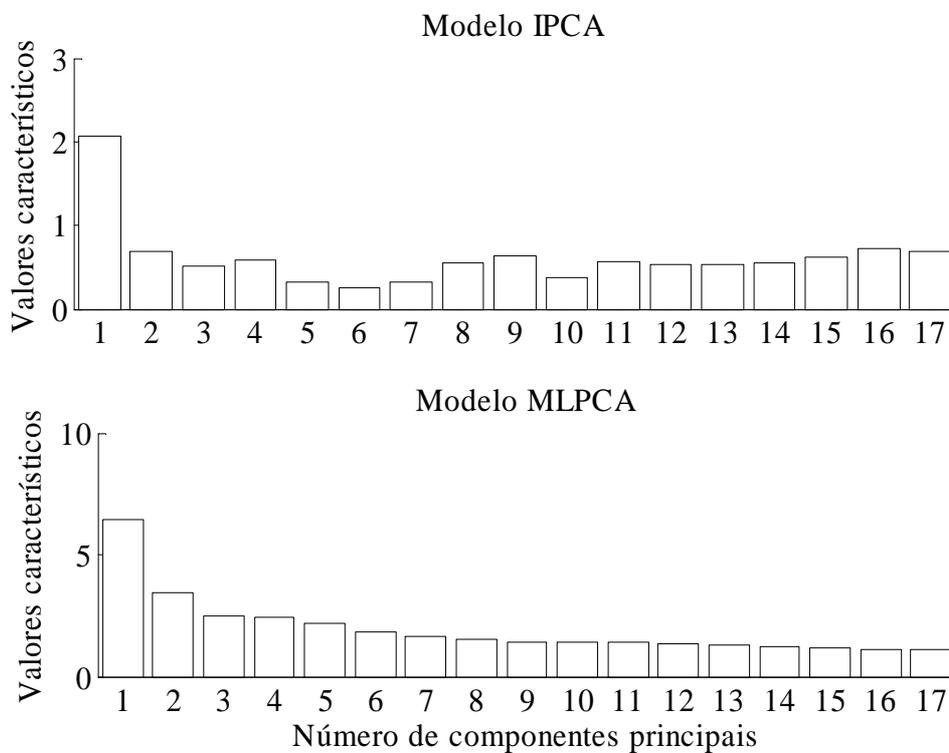


Figura 6.4: Valores característicos dos componentes.

Vale ressaltar que a regra de seleção sugerida está intrinsecamente ligada ao procedimento de estimação do modelo MLPCA, fazendo com que seu resultado tenha respaldo estatístico formal.

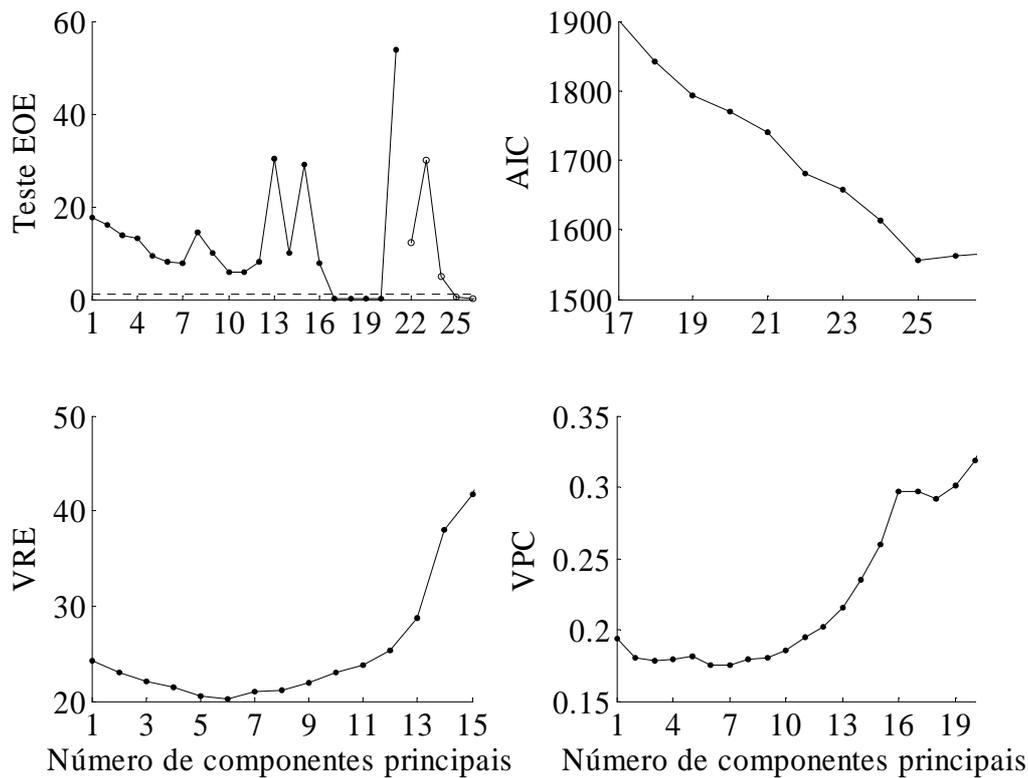


Figura 6.5: Regras de determinação do número de componentes principais.

6.4.2. Processo de produção de solventes

Este processo produz dois solventes químicos usando cinco reatores de leito catalítico fluidizado em paralelo. A Figura 6.6 ilustra o esquema de um destes reatores. O processo conta com cinco correntes de alimentação diferentes, provenientes de tanques de armazenamento, unidades à montante e reciclo. Cada reator possui diversos tubos verticais onde ocorrem as reações químicas, sustentadas pelos catalisadores fluidizados. Um líquido refrigerante circula ao redor destes tubos para remoção de calor e, 35 sensores, denominados de M_1 - M_{35} , fazem a medição da temperatura.

O processo está sujeito a uma série de distúrbios, grande parte proveniente da unidade de vaporização, que afetam a fluidização do leito catalítico e, conseqüentemente, as reações químicas, alterando a temperatura observada. De modo a manter o processo em condição normal de operação, o sistema de monitoramento proposto neste capítulo é aplicado.

Primeiramente, o modelo MLPCA é gerado com o auxílio do procedimento de estimação introduzido na Seção 6.2. A Figura 6.7 apresenta os resultados dos testes

EOE, para determinação do número de componentes principais para compor o modelo, e Jarque-Bera (JB), para determinação dos componentes principais não-normais.

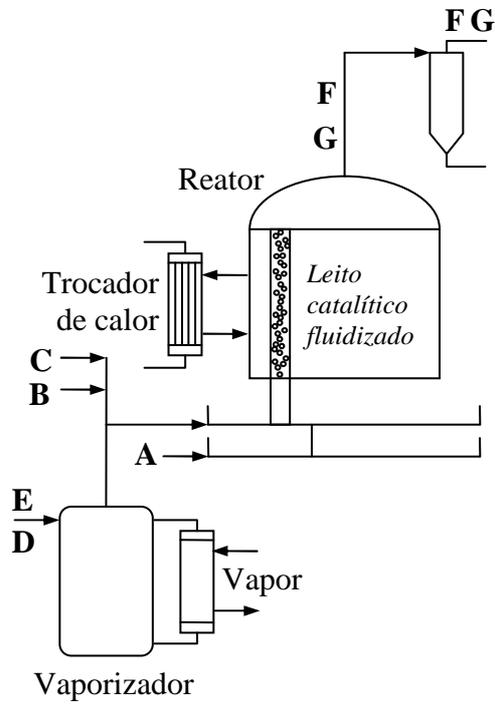


Figura 6.6: Esquema do processo 2.

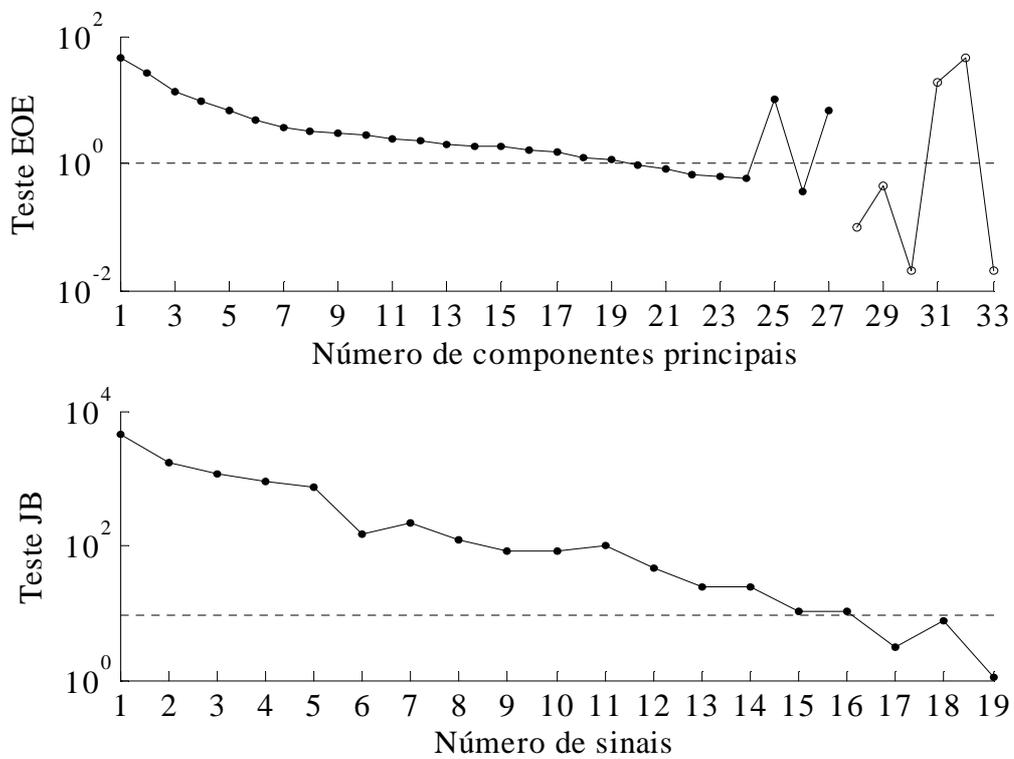


Figura 6.7: Testes EOE e JB.

De acordo com a Figura 6.7, o teste EOE apontou um total de 20 componentes principais, sendo que, 16 destes são não-normais, segundo o teste JB.

Com a estimação do modelo MLPCA, as Estatísticas R^2 , T^2 e Q podem ser acompanhadas ao longo do tempo e confrontadas com seus respectivos limites estatísticos, fornecendo informações sobre a condição do processo. Os procedimentos para geração destas estatísticas seguem as discussões das Seções 6.3.1 e 4.2.1. Todos os limites estatísticos gerados são relativos a 99 % de confiança, ou seja, $\alpha = 0.01$.

De forma a contrastar o sistema proposto com outro da literatura, o sistema convencional, composto pelo modelo PCA, pela regra VRE, e pelas Estatísticas T^2 e Q , foi utilizado. O número de componentes principais selecionados, segundo este sistema, foi 4 e o mesmo nível de confiança foi adotado para determinação dos limites estatísticos. As Figuras 6.8 e 6.9 apresentam os resultados de ambos os sistemas de monitoramento, o convencional e o proposto, respectivamente.

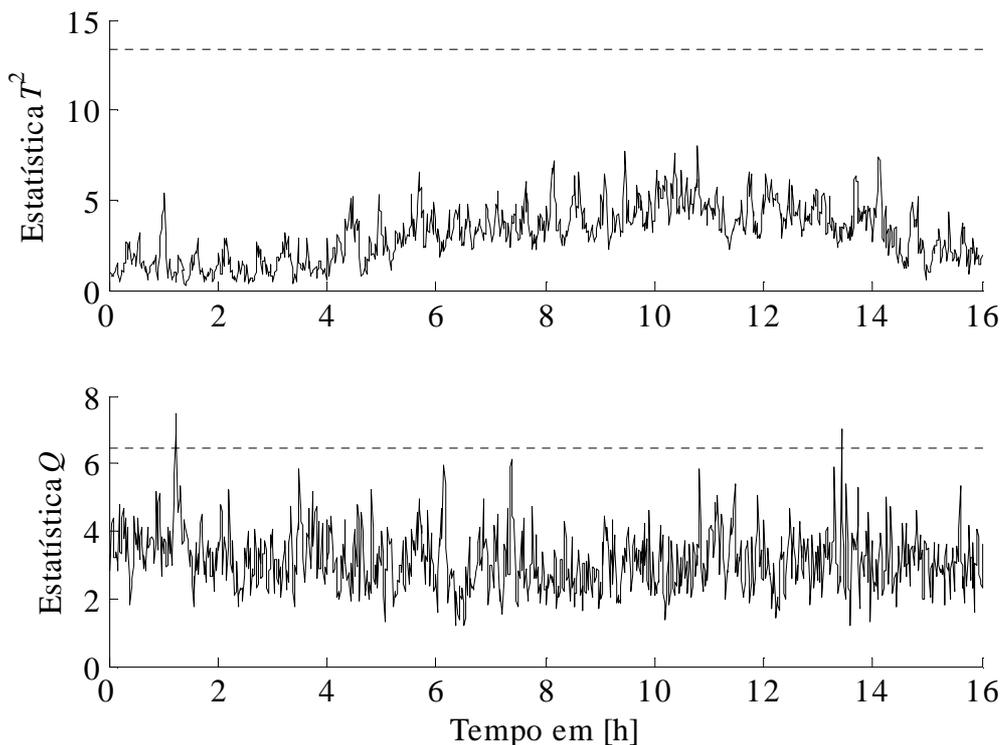


Figura 6.8: Resultado do sistema de monitoramento convencional para o processo 2.

Como é possível perceber na Figura 6.8, o limite da Estatística T^2 é superestimado e a detecção da falha não é então possível. Este problema é devido ao

desrespeito das hipóteses do modelo PCA, especificamente a hipótese de variáveis normais. Já a Estatística Q não apresenta qualquer variação fora do normal.

Em relação ao sistema proposto, Figura 6.9, as primeiras horas demonstram uma condição atípica, revelada pela Estatística Q com muitas observações acima do limite tolerado. Este comportamento pode ser interpretado como a quebra de correlação entre uma ou mais variáveis que, possivelmente, denunciam um problema gerado nos arredores dos correspondentes sensores. E, pouco antes de 5 horas do início do monitoramento, uma falha é detectada pela Estatística T^2 , que perdura por aproximadamente 9 horas, voltando à condição normal em seguida.

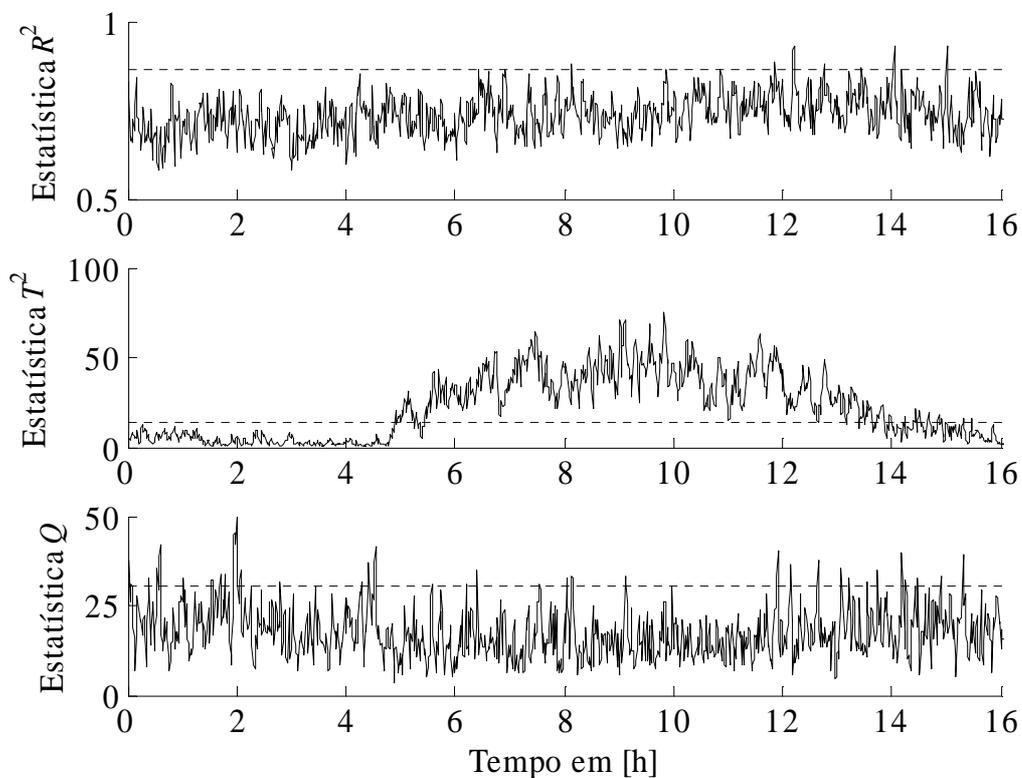


Figura 6.9: Resultado do sistema de monitoramento proposto para processo 2.

As Figuras 6.10 e 6.11 apresentam o comportamento das variáveis nos momentos das condições anormais. Na Figura 6.10, apenas a variável M_{11} apresenta comportamento anormal, enquanto que na Figura 6.11, todas as variáveis apresentam um desvio da condição normal, porém apenas quatro delas são mostradas para melhor visualização.

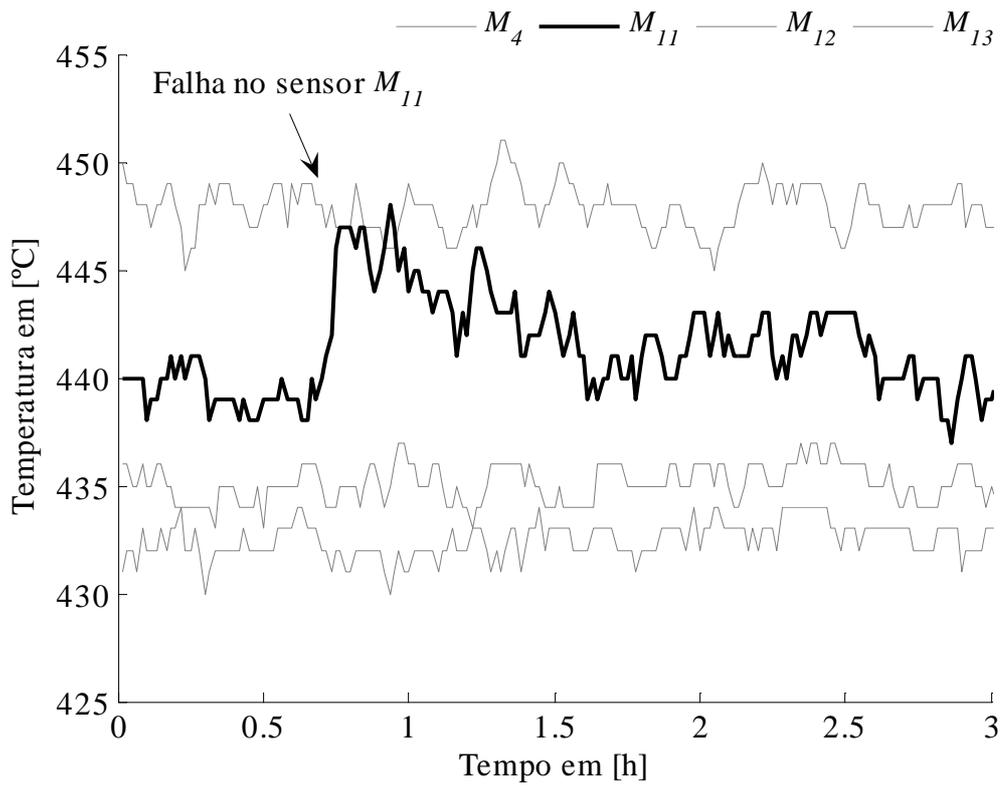


Figura 6.10: Variável em condição de falha.

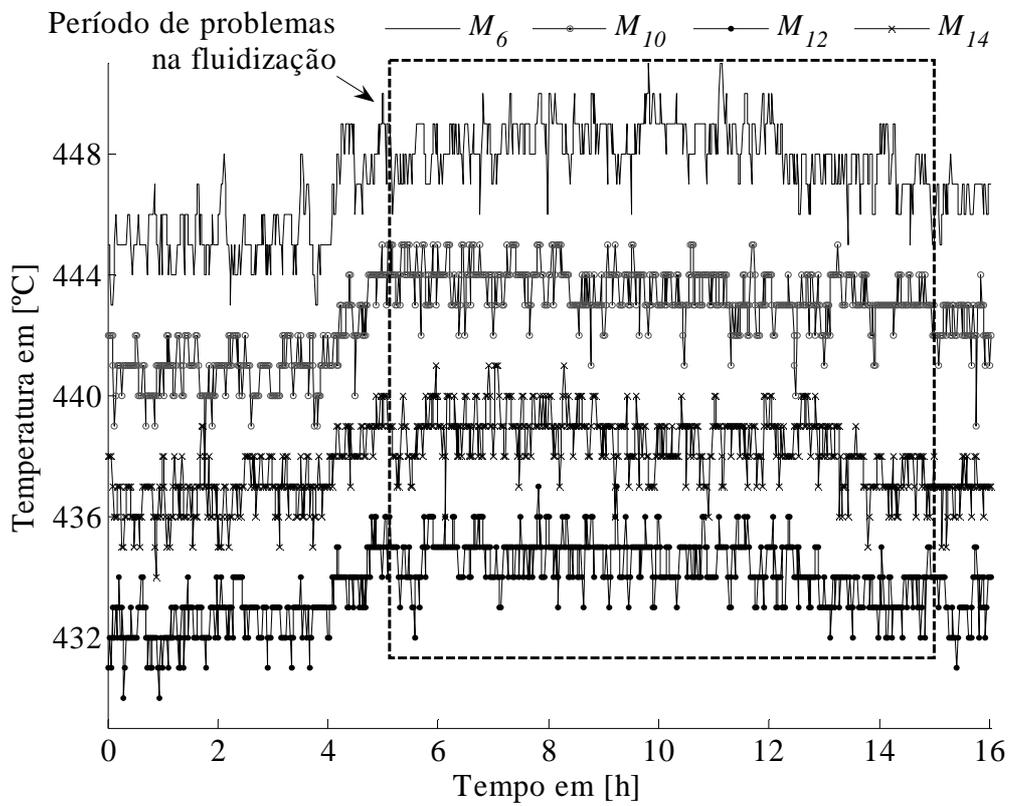


Figura 6.11: Variáveis em condição de falha.

Analisando as duas figuras, é possível concluir que um problema com a variável M_{11} pode ter sido transmitido para as demais variáveis, agravando a condição de falha para todo o processo. Mais especificamente, a região próxima ao sensor da variável M_{11} pode ter sido afetada por uma perturbação mais severa, Figura 6.10, que, ao não ser detectada e eliminada, levou o processo como um todo para uma condição de falha, Figura 6.11, de acordo com a Estatística T^2 . De fato, o problema foi mais tarde atribuído a alterações na velocidade de fluidização nos tubos, que fez com que a taxa de reação se elevasse e, por conseguinte, a temperatura do sistema fosse modificada.

Esta aplicação industrial demonstrou o problema 3, discutido na Seção 6.1.3, e também forneceu uma alternativa para sua resolução, o sistema proposto, que se mostrou mais sensível em relação ao sistema convencional composto pelo modelo PCA.

6.4.3. Processo de derretimento de resíduos

Este último processo consiste de um tanque utilizado para derretimento de resíduos industriais e vidro bruto, ilustrado na Figura 6.12. O tanque é alimentado intermitentemente pelo resíduo e discretamente pelo vidro. A mistura é aquecida por quatro bobinas de indução, que circundam o tanque, e 15 sensores, M_1-M_{15} , fazem a medição da temperatura. O conteúdo derretido é removido do tanque por uma abertura no fundo, em determinados instantes, para então reiniciar as etapas de preenchimento e aquecimento, gerando um ciclo intrínseco do processo.

Novamente, o sistema convencional é aplicado para contrastar com o sistema proposto. O resultado dos Testes EOE e JB é apresentado na Figura 6.13, revelando 10 componentes principais, sendo todos não-normais. Sendo assim, neste caso existem apenas as Estatísticas R^2 e Q para realização do monitoramento. Já o sistema convencional da literatura apontou 6 componentes principais, usando a técnica VRE.

De posse dos componentes principais e dos componentes independentes, obtidos pelos sistemas em estudo, é possível comparar seus comportamentos nas Figuras 6.14 e 6.15.

A Figura 6.14 apresenta os dois primeiros componentes principais, revelando o comportamento não-linear dos dados da operação deste processo e tornando evidente que a utilização de uma elipse para delimitar a região de condição normal é inadequada. Por outro lado, a Figura 6.15 apresenta os dois primeiros componentes independentes, revelando uma ordenamento maior dos dados, incluindo uma região onde a

probabilidade de ocorrência de observações é maior. Desta forma, a Estatística R^2 pode ser aplicada com mais chances de sucesso nos componentes independentes.

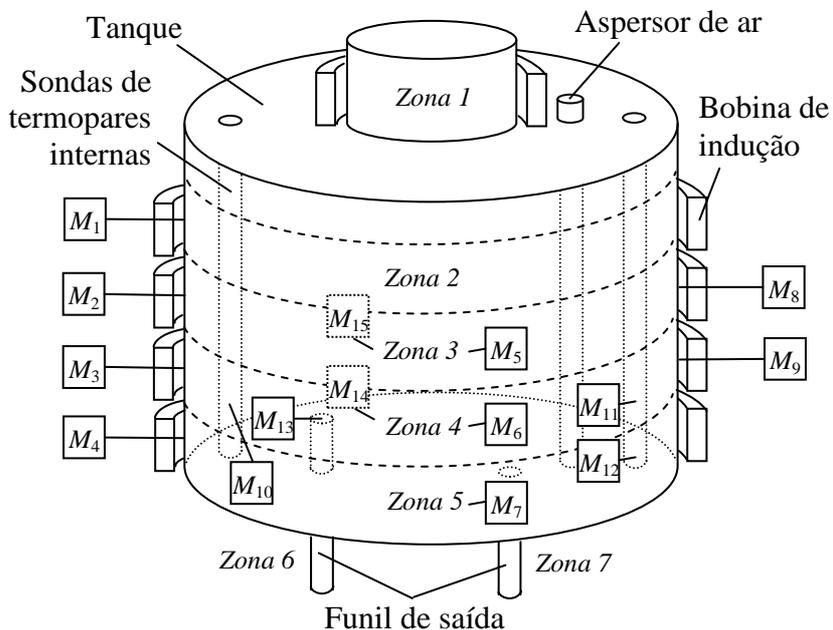


Figura 6.12: Esquema do processo 3.

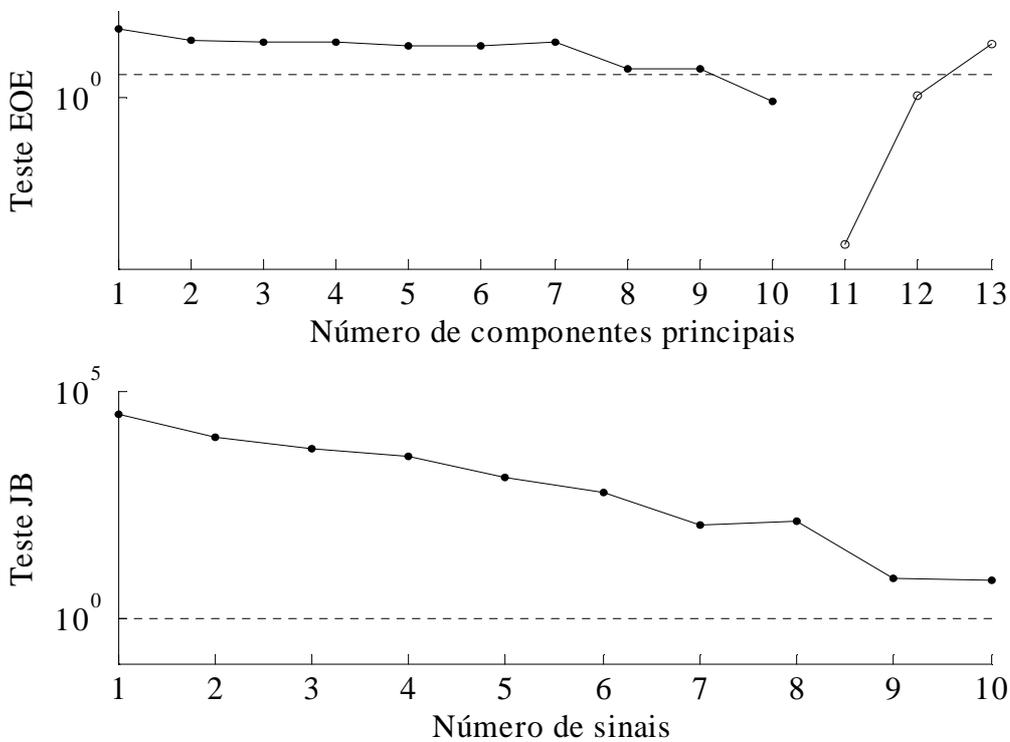


Figura 6.13: Testes EOE e JB.

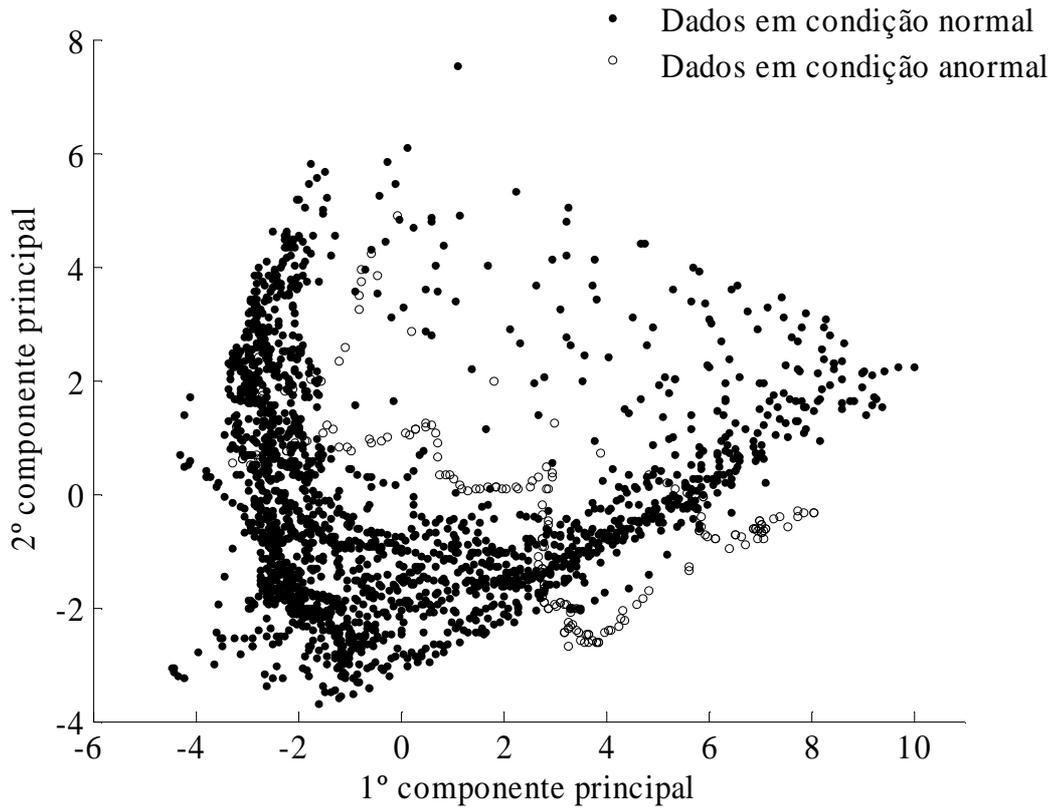


Figura 6.14: Resultado da aplicação da técnica de PCA nos dados do processo 3.

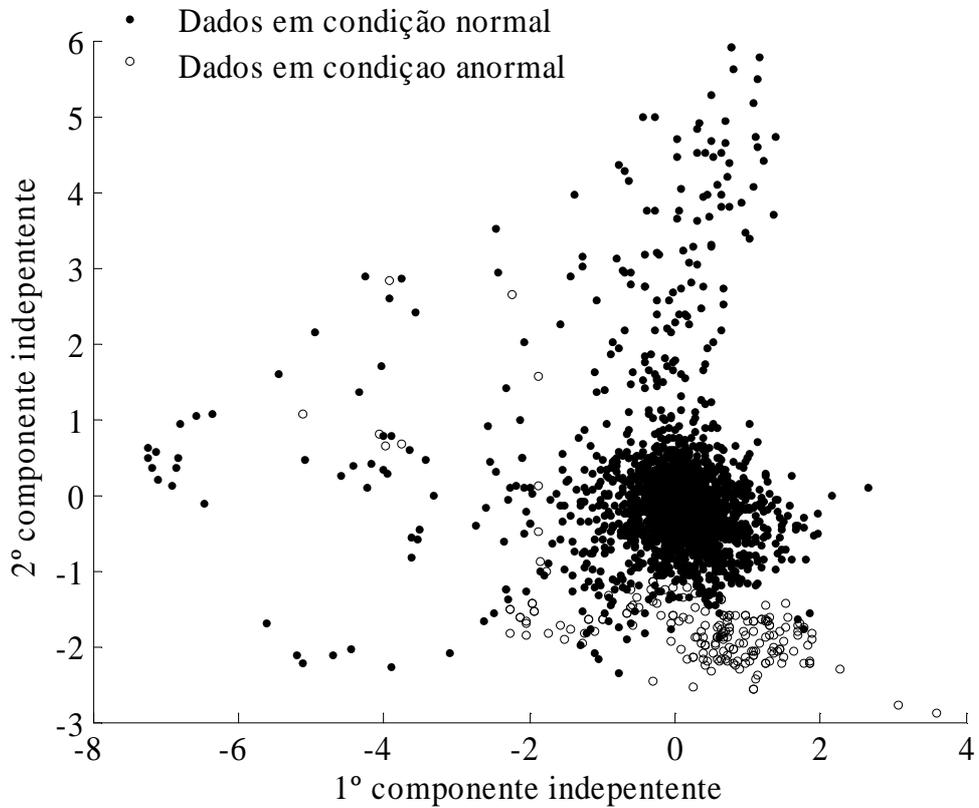


Figura 6.15: Resultado da aplicação da técnica de ICA nos dados do processo 3.

A comparação entre ambos os sistemas de monitoramento é mostrada nas Figuras 6.16 e 6.17. Neste caso, o período analisado engloba uma falha que os dois sistemas conseguem detectar facilmente; entretanto, é possível notar a diferença entre as observações durante o período de condição normal do processo nas Estatísticas R^2 e T^2 . Além disso, a Estatística Q do sistema convencional é baseada no modelo PCA, que admite a hipótese de erros independentes e identicamente distribuídos, enquanto que a Estatística Q do sistema proposto é baseada no modelo MLPCA, que leva em consideração as estimativas das covariâncias dos erros das variáveis. Em outras palavras, o sistema proposto utiliza considerações mais próximas da estrutura real do processo, fazendo com que as flutuações da Estatística Q apresentem maior significância.

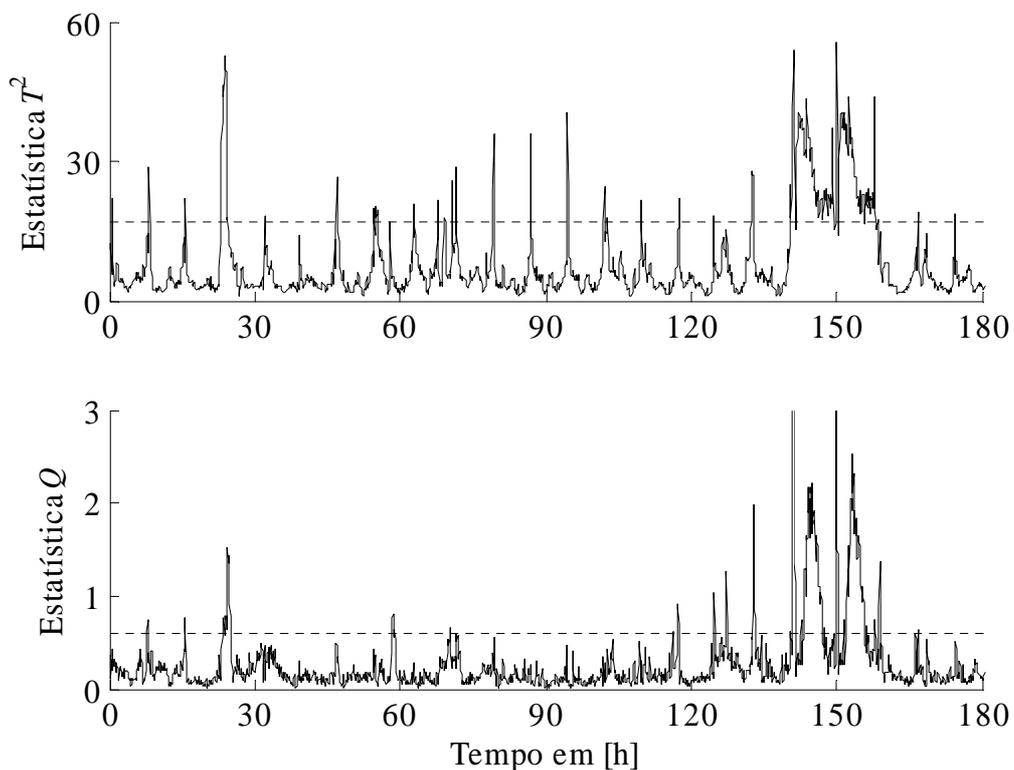


Figura 6.16: Resultado do sistema de monitoramento convencional para o processo 3.

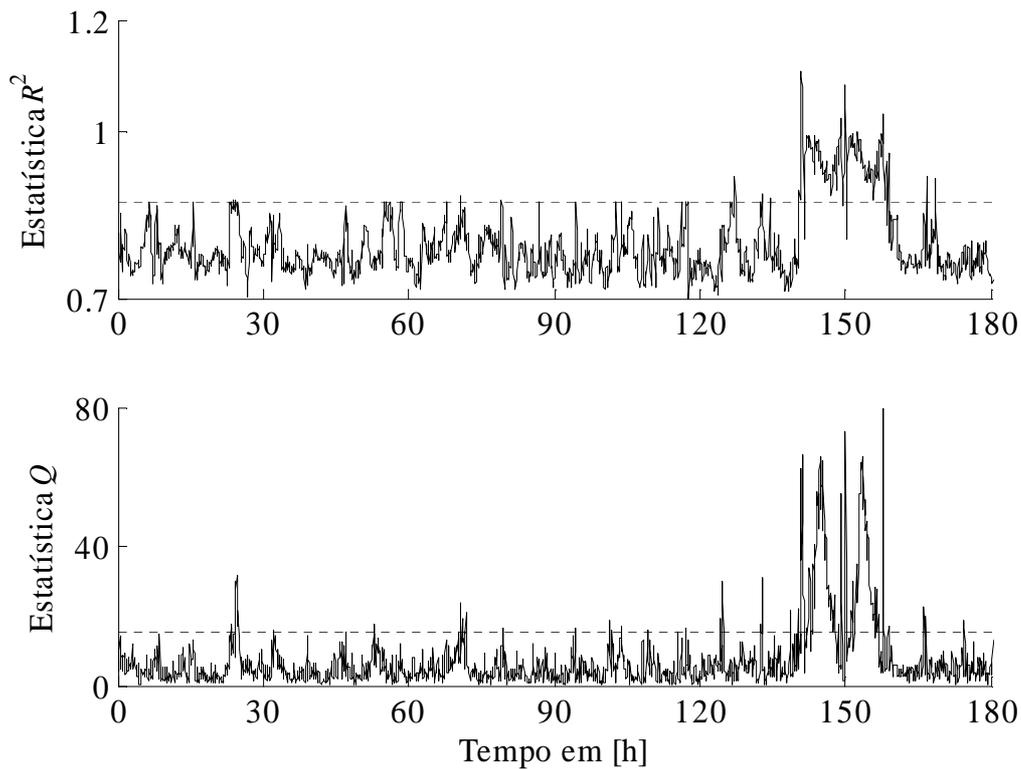


Figura 6.17: Resultado do sistema de monitoramento proposto para o processo 3.

O sistema convencional, por admitir hipóteses restritivas, faz com que haja um número demasiado de observações fora dos limites estatísticos, gerando assim alarmes falsos em excesso. Já o sistema proposto consegue modelar mais adequadamente os ciclos, apresentando um comportamento com mais aleatório, principalmente no início e no fim de cada ciclo, onde existem picos observados na Estatística T^2 .

Em relação ao período de ciclos anômalos, a Figura 6.18 mostra algumas das variáveis que representam o comportamento global de todo o processo. Como é possível perceber, os ciclos anômalos apresentam um aumento das temperaturas mais suave, diferente dos ciclos normais ilustrados no início e no final da Figura 6.18.

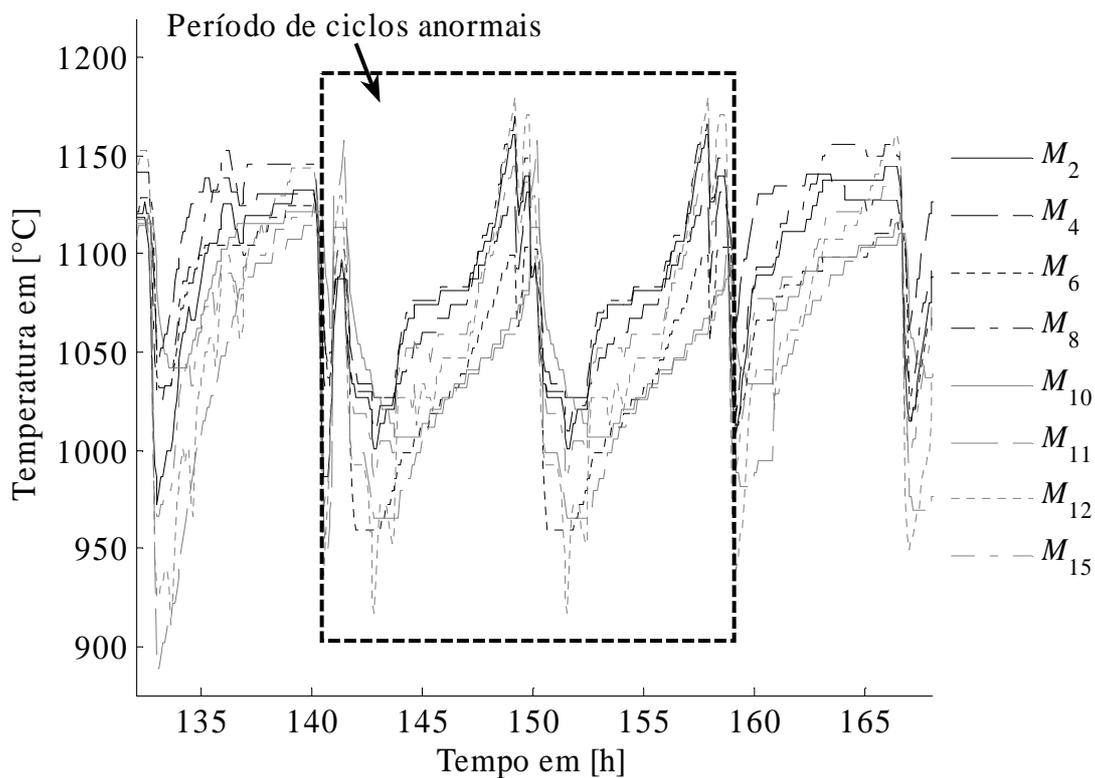


Figura 6.18: Período de ciclos anormais no processo 3.

6.5. Comentários finais

Este capítulo apresentou um sistema para monitoramento de processos cujos sinais têm comportamento estatístico desconhecido. Isto pode ser devido a interações não-lineares intrínsecas das operações do processo, gerando dados com comportamento estatístico não-convencional. Do ponto de vista do monitoramento, este é um problema central, uma vez que a maior parte das técnicas é baseada na probabilidade dos sinais presentes nos dados. A referência [178] apresenta uma alternativa para este problema, desenvolvendo modelos estatísticos para os índices de detecção de falhas. Na proposta deste capítulo, a técnica de ICA é utilizada para extrair os sinais do processo que apresentam flutuações não-normais e a Estatística R^2 é aplicada para identificar quais observações dos sinais não seguem o comportamento natural de tais flutuações.

Analisando esse sistema de monitoramento forma genérica, é razoável afirmar que haja outras maneiras de, a partir dos dados registrados em condições normais, extrair sinais com comportamento desconhecido. Neste trabalho utilizou-se a técnica de ICA, extraíndo-se, portanto, sinais não-normais; ou seja, foi utilizada uma função objetivo que mede o grau de não-normalidade de dados. Seguindo este raciocínio,

outros sistemas poderiam ser desenvolvidos de maneira similar, porém, utilizando técnicas compatíveis com o comportamento dos dados analisados.

CAPÍTULO VII

MONITORAMENTO DE PROCESSOS COM SINAIS MULTIMODAIS

Este capítulo apresenta a segunda contribuição central deste trabalho: um sistema para monitoramento da condição de processos constituídos por sinais normais e multimodais. Este sistema baseia-se em um modelo de componentes devidamente extraídos e processados, cujo procedimento de estimação supera os problemas encontrados em alguns dos procedimentos da literatura. O capítulo está dividido nas seguintes seções: *i*) problemas com a modelagem de pontos de operação, *ii*) proposta de modelagem, *iii*) monitoramento usando modelo proposto e *iv*) aplicações industriais.

7.1. Problemas com modelagem de pontos de operação

Assim como na Seção 6.1, esta seção ressalta alguns dos problemas fundamentais relacionados ao tema de monitoramento. Neste caso, o tipo de processo analisado possui diferentes pontos de operação que fazem com que o procedimento de modelagem se torne mais complexo. Três problemas da modelagem de sinais de processo são apresentados. Estes problemas também representam temas de pesquisa em aberto na literatura por falta de resoluções apropriadas.

7.1.1. Problema 1: Determinação de variáveis multimodais

Este problema representa o primeiro desafio na elaboração de um sistema de monitoramento de um processo que opera em mais de um ponto de operação. Este tipo de operação é comum, por exemplo, nas indústrias químicas e petroquímicas, em que várias receitas são produzidas ou diferentes materiais são processados [146-148]. Basicamente, este fato significa que algumas variáveis observadas apresentam comportamento multimodal; isto é, apresentam mais de uma tendência na curva de densidade de probabilidades. Certas variáveis são prontamente apontadas como multimodais, devido às características de especificação dos produtos, de armazenamento do material, da otimização da operação da planta e/ou das estratégias de manufatura. Entretanto, a utilização das variáveis originais para compor um modelo pode produzir um número muito elevado de parâmetros, sendo que muitos deles podem estar fortemente correlacionados, conforme mostrado na estrutura dos dados simulados em [133].

A utilização da técnica de PCA faz com que a máxima variabilidade do processo seja armazenada nos primeiros componentes, sendo razoável admitir que a variação entre dois pontos de operação seja maior que a variação estabelecida em cada

um deles. Assim, a informação multimodal deve estar contida nos primeiros componentes. A questão subjacente, no entanto, é: quantos componentes são multimodais? Uma abordagem de utilização dos componentes para a geração de modelos de mistura Gaussiana (GMM) é conhecida da literatura [151], porém não foi proposta de fato uma regra para determinação de quantos componentes são multimodais.

7.1.2. Problema 2: Determinação do número de pontos de operação

O número de pontos de operação reais de um processo pode ser desconhecido, principalmente devido a mudanças na alimentação [148]. A determinação automática de pontos de operação distintos é um problema ainda em aberto na literatura. Da mesma maneira que é usualmente feito para determinar o número de componentes principais para um modelo PCA, diversas regras empíricas têm sido propostas na literatura para determinar pontos de operação com base nas distâncias entre as observações do processo. Em geral, admite-se que observações suficientemente próximas umas das outras pertencem ao mesmo ponto operacional, formando um agrupamento. Isto parece razoável, mas a variabilidade natural dos pontos de operação pode fazer com que as observações se espalhem em mais de uma região operacional. Assim, a existência de dois ou mais agrupamentos próximos pode fazer com que o número total de pontos de operação seja determinado erroneamente [147].

Mesmo que a determinação do número de pontos operacionais seja feita de forma correta, a classificação das observações em relação aos distintos pontos identificados, delimitando regiões de operação distintas (agrupamentos), pode ser incorreta devido ao desconhecimento *a priori* da associação das variáveis. Em outras palavras, ainda que a média dos agrupamentos possa ser estimada razoavelmente, o mesmo não pode ser garantido para as matrizes de covariância [147].

7.1.3. Problema 3: Falta de um sistema de monitoramento multimodal avançado

O problema da multimodalidade tem recebido cada vez mais atenção, tendo sido apresentadas diferentes propostas para implementação de sistemas de monitoramento multimodal na literatura especializada [133,146-152]. Contudo, ainda persiste a deficiência em relação à proposição de um modelo adequado e consistente para a análise de processos multimodais, capaz de prover soluções para os problemas 1 e 2. Além disso, desvios sutis de um ponto de operação próximo a outros podem não ser

detectados, haja vista que, geometricamente, um agrupamento pode ocupar parcialmente o espaço de seu vizinho, fazendo com que o sistema classifique alteração constante entre os pontos operacionais correspondentes. Sendo assim, processos multimodais demandam maior necessidade de proposição de um monitoramento avançado, capaz de detectar desvios sutis.

7.2. Proposta de modelagem

Esta seção introduz o procedimento de estimação de um modelo multimodal, baseado na técnica de MLPCA e em uma técnica para determinação de agrupamentos. Primeiramente, a técnica de MLPCA, Seções 6.2.1, 6.2.2 e 6.2.3, é aplicada sobre os dados para extração adequada dos sinais do processo, gerando os componentes principais. Em seguida, uma técnica é proposta para determinar simultaneamente: *i)* o conjunto de componentes principais que possui comportamento multimodal, *ii)* o número de agrupamentos presentes nos dados (que é o número de pontos de operação) e *iii)* a classificação de cada observação em relação aos pontos de operação, fornecendo um modelo de mistura para os componentes principais multimodais. Estes resultados representam propostas para a solução dos problemas 1 e 2, apresentados nas Seções 7.1.1 e 7.1.2. Na seção seguinte, a técnica para determinação de agrupamentos é apresentada.

7.2.1. Técnica para determinação de agrupamentos

Esta técnica baseia-se na hipótese de que os componentes principais multimodais podem ser considerados variáveis normais no período de tempo em que processo opera em torno de apenas um ponto. Sendo assim, os parâmetros estatísticos que caracterizam estas variáveis podem ser estimados com o auxílio de uma janela móvel, de acordo com as Equações 7.1.

$$\hat{\mu}_k = \frac{1}{n_w} \sum_{w=k-n_w+1}^k t_w \quad 7.1a$$

$$\hat{\sigma}_k^2 = \frac{1}{n_w - 1} \sum_{w=k-n_w+1}^k (t_w - \hat{\mu}_k)^2 \quad 7.1b$$

$$(n_w)_{k+1} = (n_w)_k + 1 \quad 7.1c$$

onde t é um componente principal, n_w é o tamanho da janela e $\hat{\mu}$ e $\hat{\sigma}^2$ são estimativas da média e da variância de t na janela, respectivamente.

De posse desses parâmetros, admite-se que toda observação futura desta variável poderá ser testada, utilizando os limites estatísticos da Equação 7.2, para determinação de sua pertinência ao conjunto de dados operacionais que caracteriza o ponto considerado.

$$\text{limites} = \hat{\mu}_k \pm z_{\alpha/2} \hat{\sigma}_k \quad 7.2$$

onde $z_{\alpha/2}$ é o percentil $\alpha/2$ da função normal.

Os dois resultados possíveis para esse teste são: *i*) se a observação testada se encontra dentro dos limites estatísticos, então o processo continua operando no mesmo ponto e o procedimento segue para testar a observação seguinte; ou *ii*) se a observação testada não se encontra dentro dos limites estatísticos, então o processo encontra-se em transição ou em uma condição anormal e a aplicação de outros testes é necessária.

No segundo caso, as observações passadas recentes devem ser analisadas para determinar se o processo está de fato em transição ou se a observação testada é apenas um valor espúrio. Se as observações passadas recentes caracterizarem a transição do processo, por meio de uma sequência de valores espúrios, por exemplo, outros testes devem ser realizados para determinação do ponto operacional, caso haja outros registrados. Estes outros testes são realizados utilizando-se os parâmetros de todos os pontos operacionais existentes, de acordo com a Equação 7.3,

$$\text{limites} = \hat{\mu}_{k,m} \pm z_{\alpha/2} \hat{\sigma}_{k,m} \quad 7.3$$

onde m indica o número do ponto de operação. Se a observação pertencer a dois ou mais pontos de operação, o mais provável é selecionado, de acordo com o menor valor da Equação 7.4.

$$z = \frac{t - \hat{\mu}_m}{\hat{\sigma}_m} \quad 7.4$$

Por outro lado, se a observação não pertencer a nenhum ponto de operação, um novo ponto operacional deve ser gerado, com parâmetros estimados a partir da sequência de observações consideradas espúrias anteriormente. Para todas as mudanças de pontos operacionais, a janela móvel crescente deve ser reconfigurada para inclusão apenas das observações do ponto operacional corrente.

Este procedimento é realizado até que a última observação do conjunto de dados registrados em condições normais de operação seja considerada. O procedimento é então repetido para todos os componentes principais restantes ou até que um dado componente principal apresente comportamento unimodal.

7.2.2. Modelo de mistura

Na seção anterior, as estimativas dos parâmetros multimodais, $\hat{\mu}_m$ e $\hat{\sigma}_m$, não levam em consideração possíveis correlações existentes entre os componentes principais de um dado agrupamento. Contudo, estas estimativas “univariadas” podem descrever razoavelmente bem a operação do processo e prover os períodos de tempo característicos para todos os pontos de operação. Portanto, é possível estimar a probabilidade *a priori*, $\hat{\pi}$, o vetor de médias, $\hat{\mu}$, e a matriz de covariâncias, $\hat{\Sigma}$, para cada agrupamento, além de um vetor que contém todas as observações consideradas espúrias no conjunto de dados normais. Vale ressaltar que o processo entra em condição de transição se ao menos um componente entra em condição de transição. As estimativas resultantes representam um modelo de mistura de variáveis normais para os componentes principais multimodais, mostrado pela Equação 7.5.

$$f(\mathbf{t} | \boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{m=1}^{n_m} \pi_m N(\mathbf{t} | \boldsymbol{\mu}_m, \boldsymbol{\Sigma}_m) \quad 7.5$$

7.3. Monitoramento usando o modelo proposto

Conforme apresentado na seção anterior, o modelo do processo é composto por n_t componentes principais multimodais e unimodais, enquanto que os resíduos são compostos por n_x variáveis normais de covariância \mathbf{S}_{ee} . Para monitorar estes conjuntos de variáveis, três técnicas estatísticas são sugeridas para gerar as cartas de controle: *i*) Estatística χ^2 da abordagem local para os componentes principais multimodais, *ii*) Estatística T^2 para os componentes principais unimodais e *iii*) Estatística Q (ou SPE) para os resíduos. Este sistema de monitoramento representa uma proposta para solução do problema 3, apresentado na Seção 7.1.3. Neste sistema, uma nova etapa deve ser realizada: a determinação do ponto de operação corrente. A seguir, esta etapa e a Estatística χ^2 são apresentadas.

7.3.1. Determinação do ponto de operação

Para realizar esta etapa, um teste estatístico deve ser empregado, com base nas observações correntes e passadas recentes. Este teste é baseado na probabilidade de que uma dada observação pertença a um dado agrupamento. A Equação 7.6 apresenta o teste estatístico.

$$m = \arg \max_m \left(\frac{\pi_m N(\mathbf{t} | \boldsymbol{\mu}_m, \boldsymbol{\Sigma}_m)}{\sum_{i=1}^{n_m} \pi_i N(\mathbf{t} | \boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)} \right) \quad 7.6$$

7.3.2. Estatística χ^2 para componentes principais multimodais

Conforme demonstrado na Seção 4.2.2, a abordagem local estatística é recomendada para detecção de falhas sutis do processo. Este tipo de falha representa parte do problema 3, relacionado às deficiências de um sistema para monitoramento de processos multimodais, Seção 7.1.3. As Equações 7.7 apresentam os elementos necessários para a geração de cartas de controle com base na abordagem local, aplicadas aos componentes principais multimodais,

$$\mathbf{r}_k = (\mathbf{t}_{k,m} - \boldsymbol{\mu}_m) \boldsymbol{\Sigma}_m^{-1/2} \quad 7.7a$$

$$\bar{\mathbf{r}}_k = \frac{1}{\sqrt{n_w}} \sum_{w=k-n_w+1}^k \mathbf{r}_w \quad 7.7b$$

$$\chi^2 = \bar{\mathbf{r}}^T \mathbf{S}_{\bar{\mathbf{r}}}^{-1} \bar{\mathbf{r}} \quad 7.7c$$

$$\text{limite} = \chi_{\alpha}^2(h) \quad 7.7d$$

onde m é o ponto operacional determinado pela Equação 7.6, \mathbf{r} é o resíduo primário escolhido para este sistema de monitoramento e $\mathbf{S}_{\bar{\mathbf{r}}}$ é a matriz de covariâncias dos resíduos normalizados (matriz identidade). O número de graus de liberdade, h , é igual ao número de componentes principais multimodais.

7.4. Aplicações industriais

Esta seção apresenta duas aplicações industriais, sendo a primeira uma simulação usada para ilustrar o sistema de monitoramento proposto e a segunda, uma aplicação industrial utilizando dados reais de um processo químico.

7.4.1. Processo simulado de um CSTR

Este processo é focado em um reator CSTR com jaqueta, Figura 7.1, usado para realizar a reação $A \rightarrow B$. O modelo do processo é dado pelas Equações 7.8, enquanto que as variáveis, os parâmetros e a estrutura de controle usados para simulação deste processo, estão listados nas Tabelas 7.1-7.4. Utilizou-se a referência [179] como base para a simulação deste processo.

Como é possível perceber na Tabela 7.2, este processo apresenta comportamento multimodal devido à existência de três estados estacionários (E.E.) possíveis, sendo dois estáveis e um instável. Esta instabilidade intrínseca do processo faz com que haja necessidade de uma estrutura de controle. Os parâmetros do controlador proporcional são mostrados na Tabela 7.4.

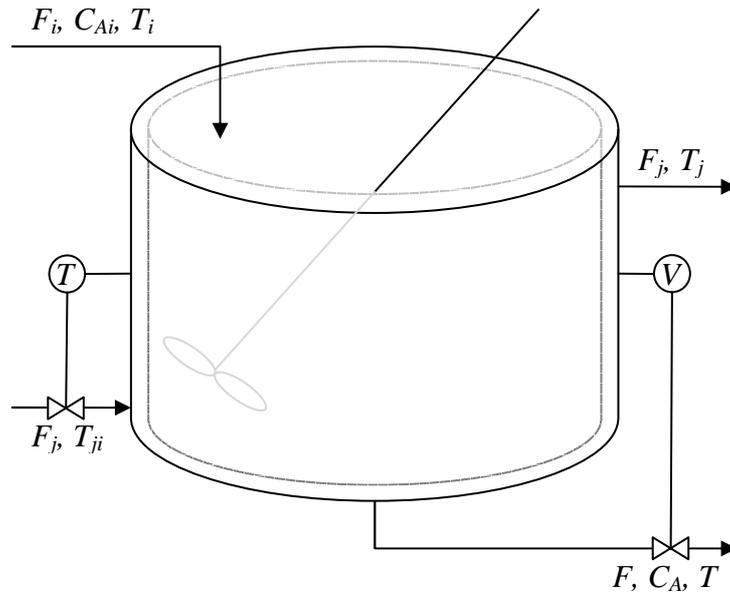


Figura 7.1: Ilustração do processo.

$$\frac{dV}{dt} = F_i - F \quad 7.8a$$

$$\frac{dVC_A}{dt} = F_i C_{A_i} - FC_A - Vkc_A \quad 7.8b$$

$$\frac{dVT}{dt} = F_i T_i - FT - \frac{\Delta H}{\rho c_p} Vkc_A - \frac{UA}{\rho c_p} (T - T_j) \quad 7.8c$$

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_j (T_{j_i} - T_j)}{V_j} + \frac{UA}{\rho_j c_{p_j} V_j} (T - T_j) \quad 7.8d$$

$$k = k_0 e^{\frac{-E}{RT}} \quad 7.8e$$

$$F = F_s + P_v (V_s - V) \quad 7.8f$$

$$F_j = F_{j_s} + P_T (T_s - T) \quad 7.8g$$

Tabela 7.1 – Variáveis unimodais do processo 1.

Variáveis	Descrição	μ	σ	Unidades
F_i	Vazão de entrada do reator	40	2	ft ³ /h
C_{Ai}	Concentração de A na entrada	0,5	0,1	mol/ft ³
T_i	Temperatura na entrada	530	4	R
T_{ji}	Temperatura de entrada do fluido refrigerante	530	3	R
F_j	Vazão do fluido refrigerante	49,9	-	ft ³ /h
F	Vazão de saída do reator	40	-	ft ³ /h
V	Volume do reator	48	-	ft ³

Tabela 7.2 – Variáveis multimodais do processo 1.

Variáveis	Descrição	1° E.E.	2° E.E.	3° E.E.	Unidades
C_A	Concentração de A	0,4739	0,2451	0,0591	mol/ft ³
T	Temperatura do reator	537,1641	599,9909	651,0596	R
T_j	Temperatura da jaqueta	536,6157	594,6328	641,7920	R

Tabela 7.3 – Parâmetros do processo 1.

Parâmetros	Descrição	Valores	Unidades
ρ	Densidade da corrente líquida	50	lb _m /ft ³
ρ_j	Densidade da corrente refrigerante	62,5	lb _m /ft ³
c_p	Capacidade calorífica da corrente líquida	0,75	BTU/lb _m R
c_{pj}	Capacidade calorífica da corrente refrigerante	1	BTU/lb _m R
V_j	Volume da jaqueta	3,85	ft ³
U	Coefficiente global de troca térmica na jaqueta	150	BTU/h ft ² R
A	Área de troca térmica	250	ft ²
k_0	Fator pré-exponencial de reação	$7,08 \cdot 10^{10}$	1/h
E	Energia de ativação	30000	BTU/mol
R	Constante universal dos gases	1,99	BTU/mol R
ΔH	Entalpia de reação	-30000	BTU/mol

Tabela 7.4 – Estrutura de controle do processo 1.

Variáveis controladas	Variáveis manipuladas	Parâmetros
V	F	$P_V = -10$
T	F_j	$P_T = -4$

Os dados usados para modelagem e para validação do procedimento proposto foram gerados por simulação de 96 horas de operação normal (48 horas) e com falha (48 horas), sendo o período de amostragem igual de 2,5 minutos, totalizando 2304 observações. Para a condição de falha, simulou-se uma desativação catalítica sutil, ocorrendo a partir da 16ª hora do início da simulação, como mostrado na Figura 7.2. Nesta condição, a taxa de reação é reduzida, fazendo com que as variáveis multimodais, C_A , T e T_j , operem cada vez mais distantes de seus estados estacionários originais.

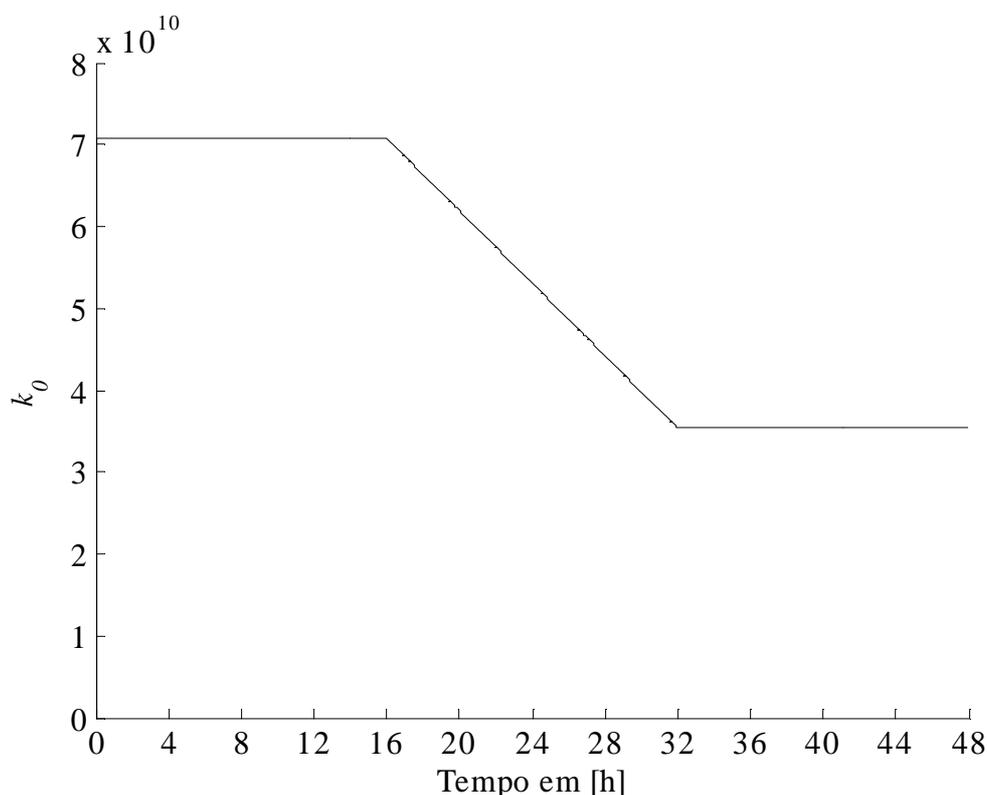


Figura 7.2: Simulação de desativação catalítica.

O sistema proposto para o monitoramento de processos multimodais foi então aplicado a este processo usando todas as variáveis, com exceção das variáveis manipuladas, F e F_j , que contêm as mesmas informações das variáveis controladas. O procedimento de estimação do modelo tem início com a aplicação da técnica MLPCA, apresentada nas Seções 6.2.1-6.2.3. O teste EOE, para determinação do número de

componentes principais, está ilustrado na Figura 7.3. O resultado obtido aponta para a existência de 4 componentes principais. Este resultado está correto, uma vez que, dentre as variáveis usadas, F_i , C_{Ai} , T_i e T_{ji} são as únicas variáveis realmente independentes.

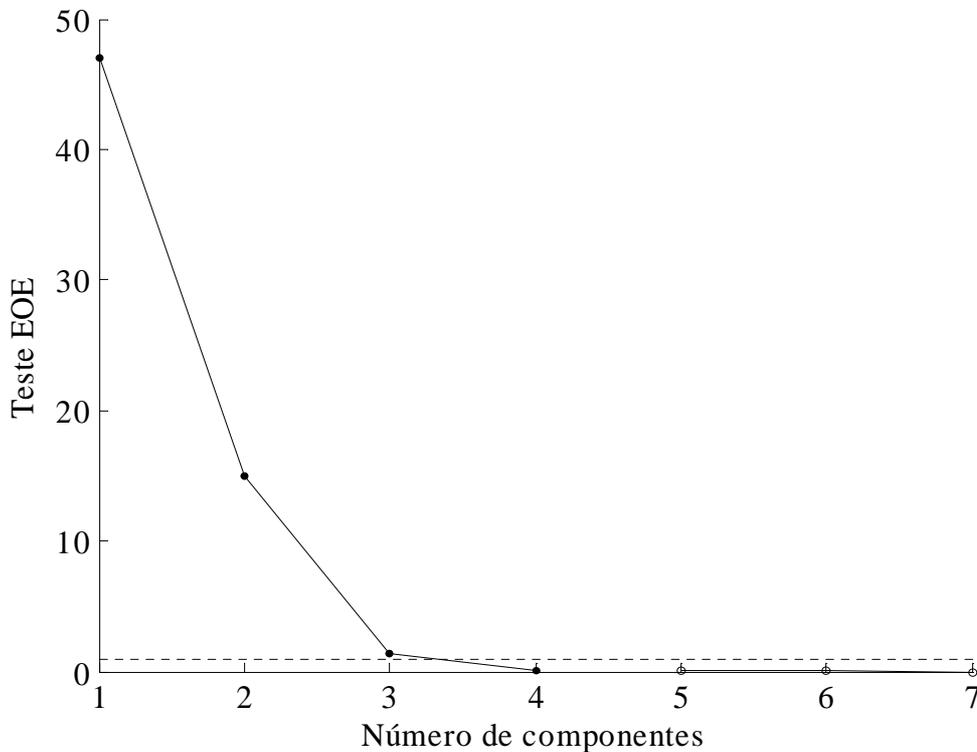


Figura 7.3: Resultado do teste EOE para o processo 1.

Como resultado indireto do procedimento, obtém-se a estimativa da matriz de covariâncias dos erros das variáveis, considerada diagonal, apresentada na Tabela 7.5. Os valores de variância foram estimados como descrito na Seção 6.2, com grau de liberdade calculado pela primeira parcela da Equação 6.7.

Embora algumas estimativas da Tabela 7.5 estejam relativamente destoando dos valores simulados, deve-se ressaltar que o modelo do processo deforma a estrutura normal dos dados e os valores reais se alteram. Levando em consideração esse problema, o resultado geral obtido com a aplicação da técnica MLPCA para estimação da matriz de covariâncias dos erros das variáveis é bastante bom.

Tabela 7.5 – Variâncias dos erros das variáveis do processo 1.

Variáveis	Simulado	Estimado
F_i	0,3000	0,1702
C_{Ai}	0,0010	0,0009
T_i	0,2500	0,3483
T_{ji}	0,2000	0,1897
V	0,5000	0,5002
C_A	0,0010	0,0010
T	0,2500	0,2237
T_j	0,2000	0,2233

Posteriormente à obtenção dos componentes principais, a técnica proposta para determinação do modelo de mistura deve ser aplicada. A Figura 7.4 ilustra a aplicação.

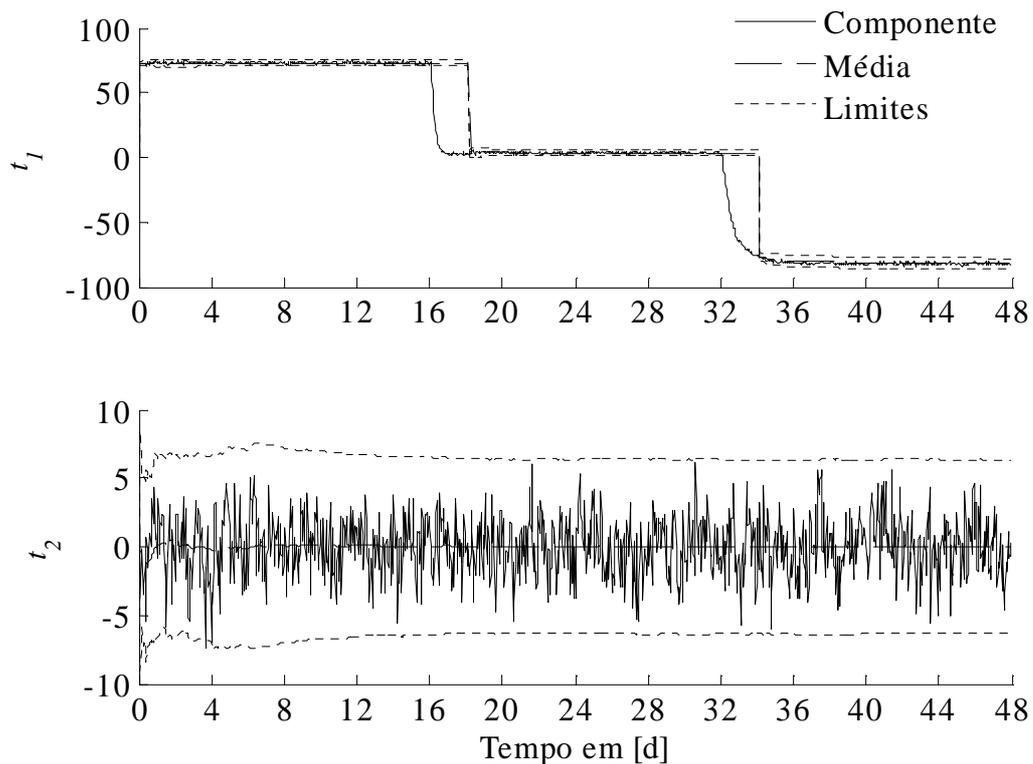


Figura 7.4: Aplicação da técnica proposta para o processo 1.

Com base na Figura 7.4, a técnica demonstra que toda variação existente entre os agrupamentos é capturada pelo primeiro componente principal. Sendo assim, este é o único componente multimodal do processo. Além disso, este componente revela 3

pontos de operação, relativos aos três estados estacionários. Na aplicação do procedimento da Seção 7.2 aos dados do processo, a janela móvel crescente foi interrompida sempre que as 50 últimas observações se encontravam fora dos limites estatísticos (Equação 7.3). Além disso, foram utilizadas somente as 2 últimas observações para estimar os parâmetros do novo ponto de operação, tendo em vista que as observações ainda sob transição do processo poderiam interferir nos valores verdadeiros dos parâmetros. O modelo de mistura gerado é, na verdade, constituído pelas próprias estimativas univariadas dos parâmetros de probabilidade *a priori*, média e variância. A Tabela 7.6 apresenta este modelo.

Tabela 7.6 – Parâmetros do modelo de mistura do componente multimodal.

$\hat{\pi}$	$\hat{\mu}$	$\hat{\sigma}^2$
0,3776	73,1659	0,8028
0,3333	3,6230	0,6236
0,2882	-81,5326	1,5000

De posse do modelo, o monitoramento do processo pode ser realizado, utilizando-se os dados em condição de falha. De forma a ilustrar o desempenho do sistema proposto adequadamente, os resultados entre este sistema e dois outros convencionais da literatura são comparados. O primeiro deles é baseado no modelo MLPCA e nas Estatísticas T^2 e Q , enquanto que o segundo é baseado no modelo de mistura aplicado às variáveis originais e a estatística chamada probabilidade baseada em inferência Bayesiana (*Bayesian Inference-based Probability*, BIP) [133]. Os resultados destes dois sistemas de monitoramento estão apresentados nas Figuras 7.5 e 7.6.

De acordo com a Figura 7.5, o sistema constituído pelo modelo MLPCA foi incapaz de detectar a falha, já que este modelo é inadequado para sinais multimodais. Geometricamente, a hiperelipse formada pelo limite estatístico do modelo engloba todos os agrupamentos, fazendo com que falhas em seu interior não sejam detectadas.

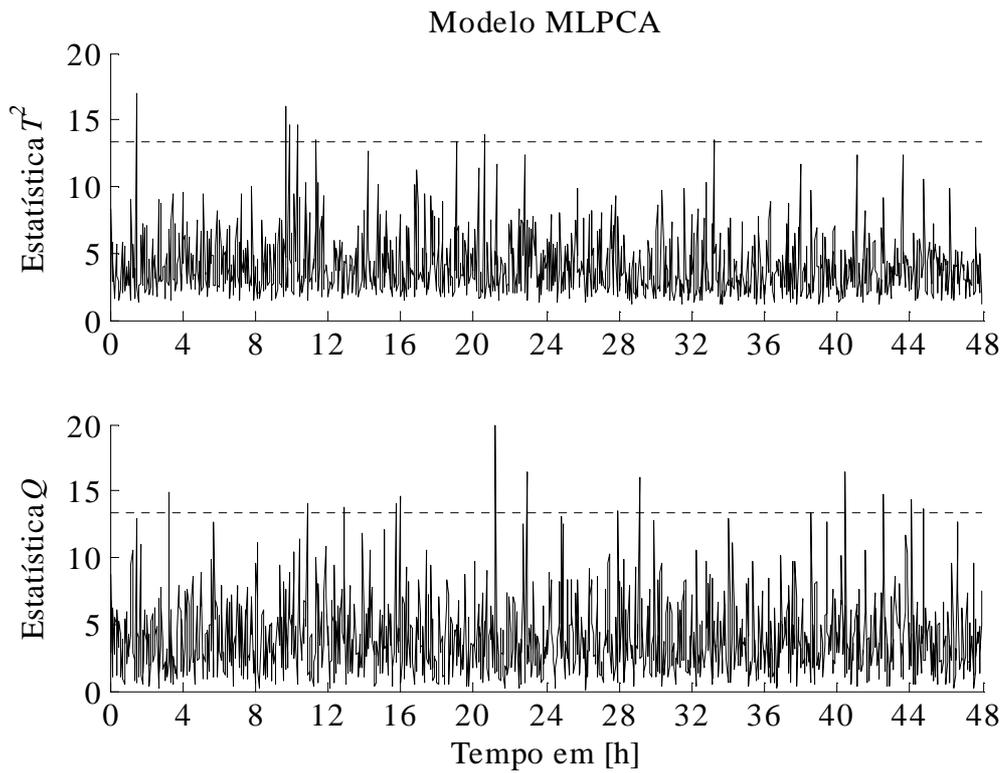


Figura 7.5: Estatísticas T^2 e Q para o processo 1.

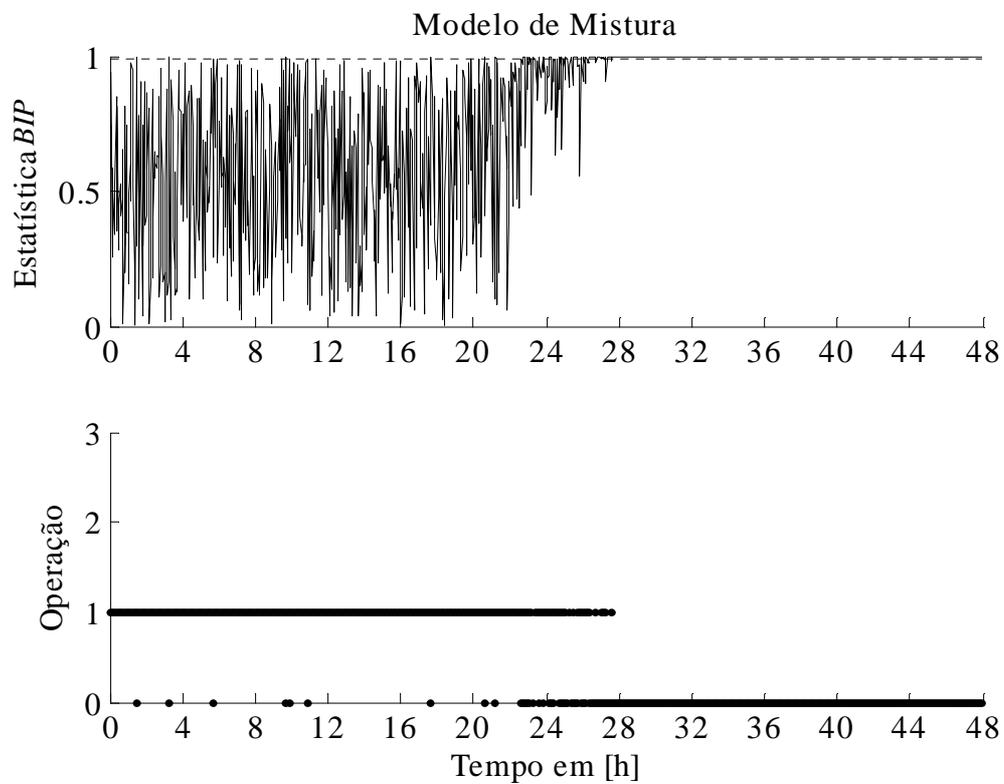


Figura 7.6: Estatística BIP para o processo 1.

Por outro lado, com a aplicação de um sistema baseado em um modelo multimodal, Figura 7.6, a detecção foi realizada, porém com pouco mais de 6 horas de atraso. Ademais, o número de parâmetros do modelo, $n_m(I + n_x + n_x(n_x + 1)/2) = 135$, é relativamente grande, quando comparado com o modelo proposto, formado por um modelo MLPCA e um modelo de mistura, $n_m(I + I + I(I + 1)/2) + n_x n_t = 9 + 32 = 41$.

O resultado obtido com o sistema de monitoramento proposto está apresentado na Figura 7.7. Como é possível visualizar, a detecção foi realizada pela Estatística χ^2 com, aproximadamente, uma hora de atraso, ilustrando a grande sensibilidade do sistema em relação a esta falha, quando comparado aos outros sistemas convencionais.

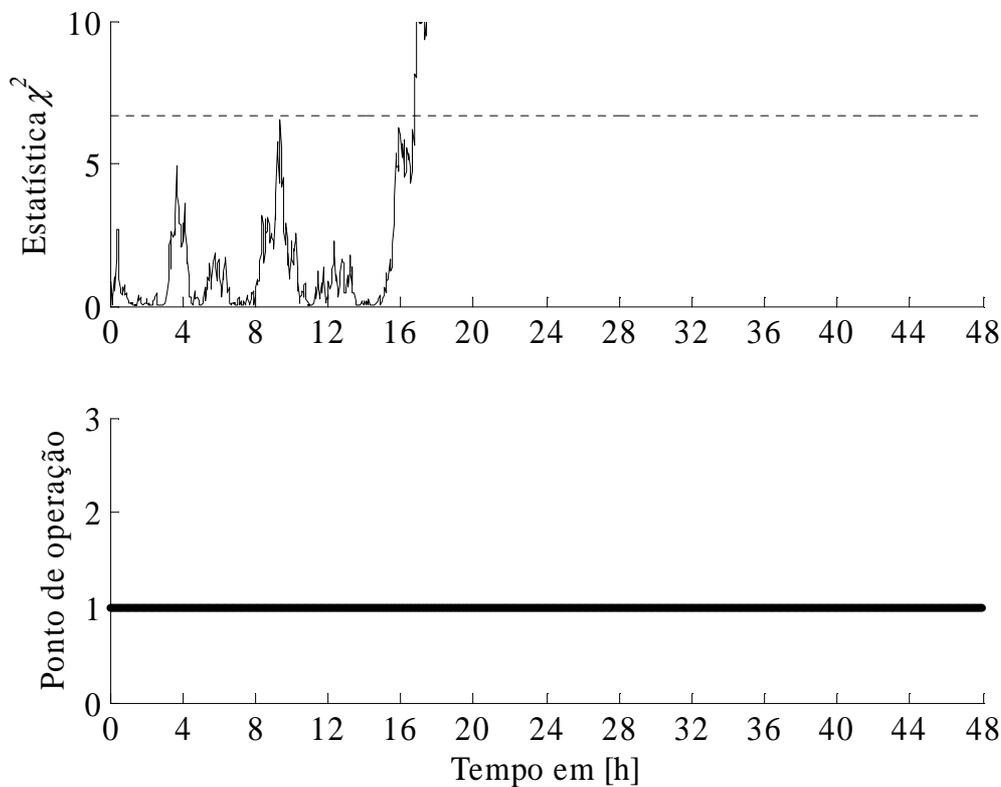


Figura 7.7: Estatística χ^2 para o processo 1.

As Estatísticas T^2 e Q não detectaram a falha, uma vez que seus desempenhos foram semelhantes aos mostrados na Figura 7.5. Isto já era esperado, tendo em vista que o processo continua a apresentar as mesmas variações e correlações dentro do agrupamento, sendo alterada apenas a posição do agrupamento em si.

A Figura 7.8 apresenta o mapa dos dois primeiros componentes, sendo apenas o primeiro multimodal. Como mostrado nesta figura, a condição de falha do processo

tem início no interior do limite estatístico, uma vez que algumas observações presentes nesta região encontram-se em condições de falha. A capacidade da Estatística χ^2 para detectar a condição de falha é devida à abordagem local, cuja finalidade é a detecção de falhas de pequena magnitude. Os três agrupamentos da parte superior da Figura 7.8 correspondem aos três estados estacionários do processo, usados para modelagem. Já a parte inferior da Figura 7.8 mostra os dados em condição de falha, usados para validação do sistema proposto. Nesta figura fica evidente que a falha ocorre apenas no componente t_1 , formando um agrupamento entre dois estados estacionários. Somente uma estatística com base em um modelo para sinais multimodais é, de fato, capaz de detectar tal falha.

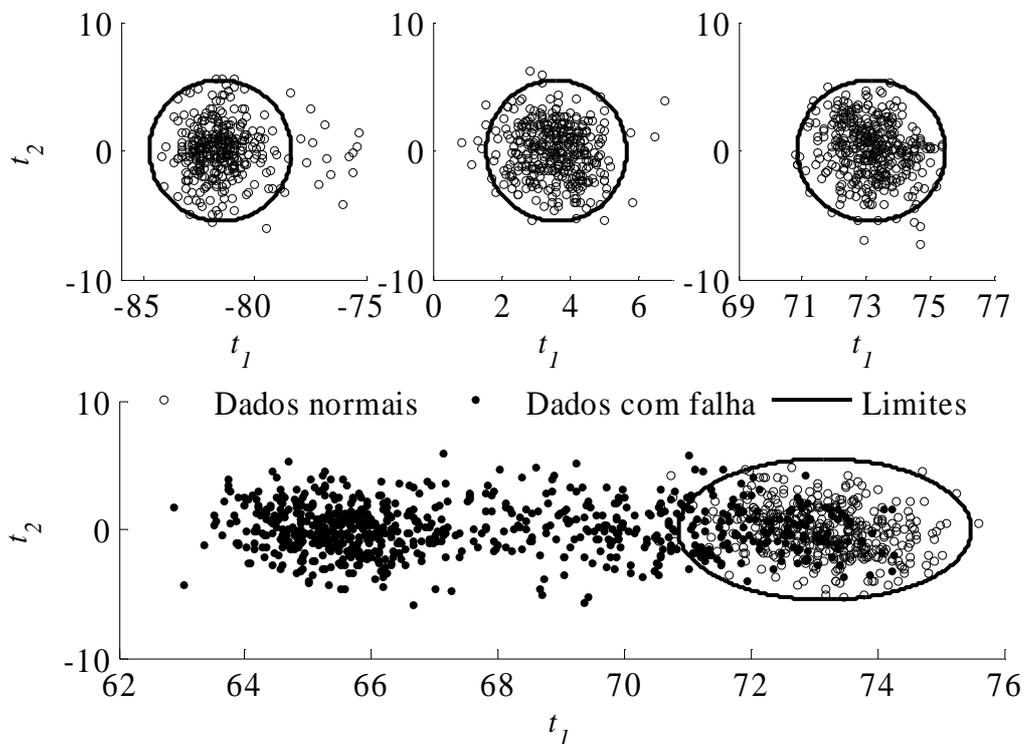


Figura 7.8: Mapa dos componentes usados para modelagem e para validação.

7.4.2. Processo de produção de solventes

Esta seção analisa o mesmo processo estudado na Seção 6.4.2, em que foram considerados sinais com distribuição de probabilidade desconhecida. Nesta seção, admite-se que a distribuição dos sinais é uma mistura de funções normais, cada uma representando um ponto de operação. O modelo MLPCA gerado para integrar o sistema

de monitoramento é composto por 11 componentes principais, determinados pelo teste EOE, Figura 6.7. Estes componentes principais são analisados pela técnica de determinação de agrupamentos e, assim, o modelo de mistura pode ser gerado. As Figuras 7.9 e 7.10 ilustram o resultado obtido com a aplicação da técnica proposta.

Conforme é possível observar na Figura 7.9, os três primeiros componentes principais apresentam comportamento multimodal, cujas variações englobam 11 pontos de operação. Observações pertencentes a agrupamentos com probabilidade *a priori*, $\hat{\pi}$, menor do que 0,01 são consideradas valores espúrios. Assim, agrupamentos com menos de 1% de observações do número total usado para modelagem não fazem parte da condição normal de operação do processo.

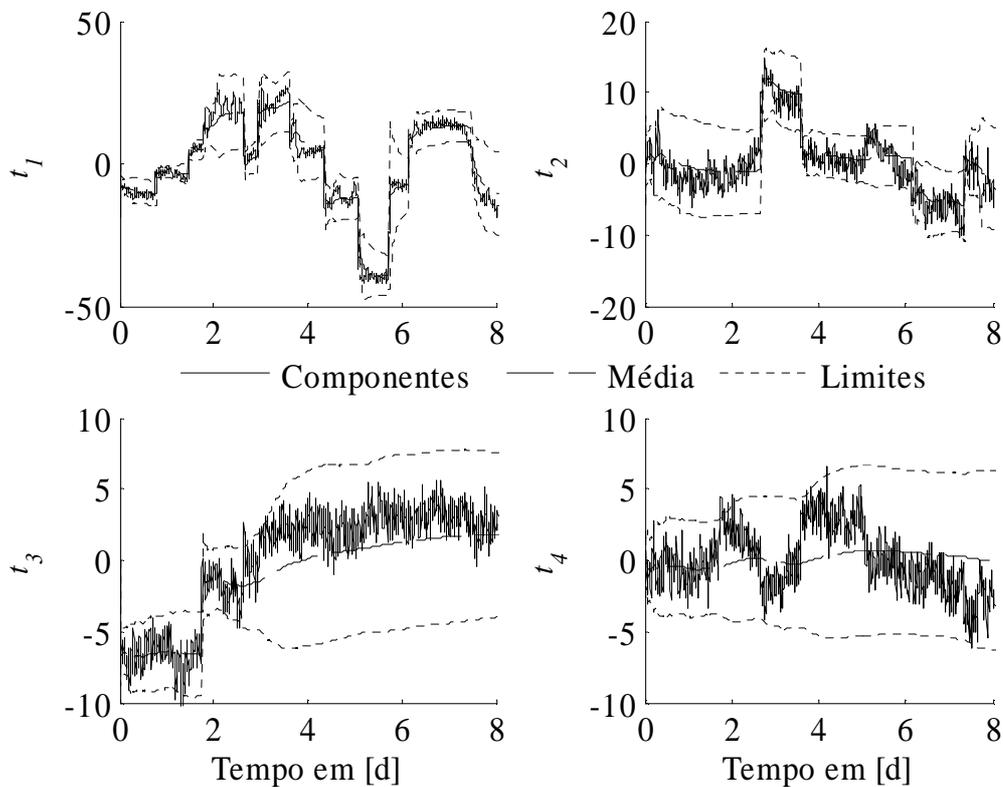


Figura 7.9: Aplicação da técnica proposta para o processo 2.

A Figura 7.10 demonstra o comportamento de cada ponto de operação. É importante ressaltar que alguns sistemas de monitoramento propostos na literatura estão baseados em modelos de covariância comum a todos os agrupamentos [146,147]. Isto significa dizer que apenas uma matriz de covariâncias é estimada para o modelo multimodal e que todos os limites estatísticos são dados por uma mesma hiperelipse.

Neste exemplo, fica evidente que os diferentes pontos de operação de processos químicos possuem comportamento variado e podem ser modelados pelas técnicas propostas neste capítulo.

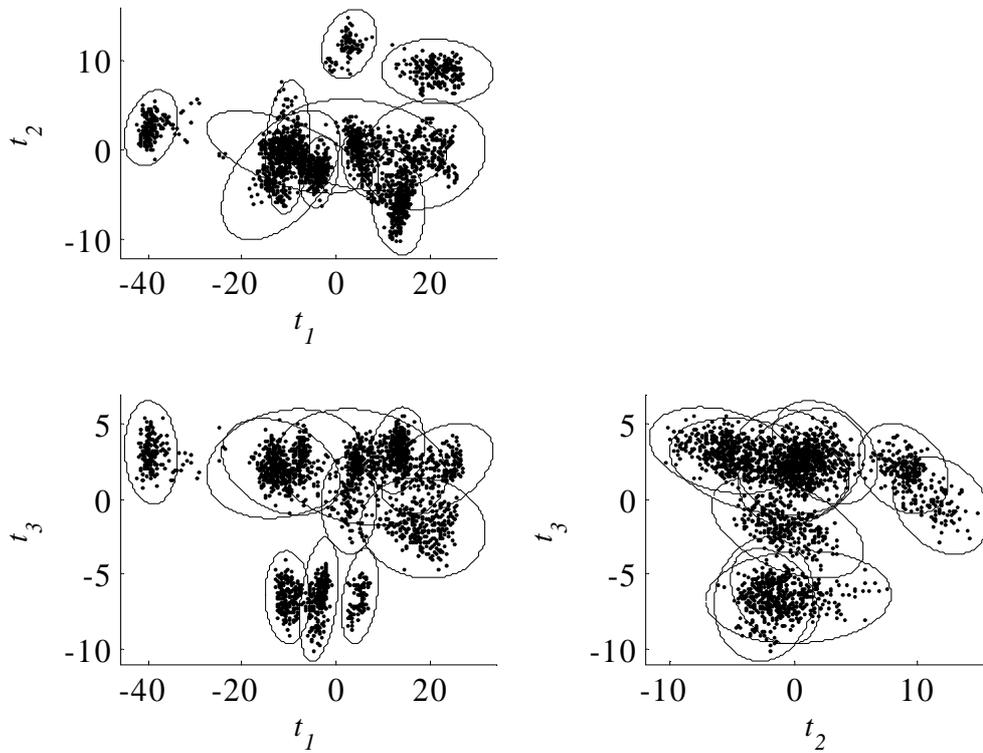


Figura 7.10: Resultado da técnica proposta para o processo 2

Com relação ao monitoramento propriamente dito, mais uma vez o sistema proposto é comparado com alternativas convencionais presentes na literatura, como o sistema com base no modelo MLPCA e nas Estatísticas T^2 e Q , Figura 7.11, e no sistema com base no modelo de mistura e na Estatística BIP [133], Figura 7.12. O conjunto de dados com falha não é o mesmo analisado na Seção 6.4.2. Neste caso, os dados analisados registram uma queda na pressão da corrente de vapor, fornecida pelo vaporizador, fazendo com que a corrente na entrada do reator sofresse pequenas mudanças e levando todo o processo a operar em uma condição de falha.

Como é possível perceber na Figura 7.11, após cinco dias do início da operação registrada, a Estatística Q detecta um número excessivo de observações fora do limite de confiança.

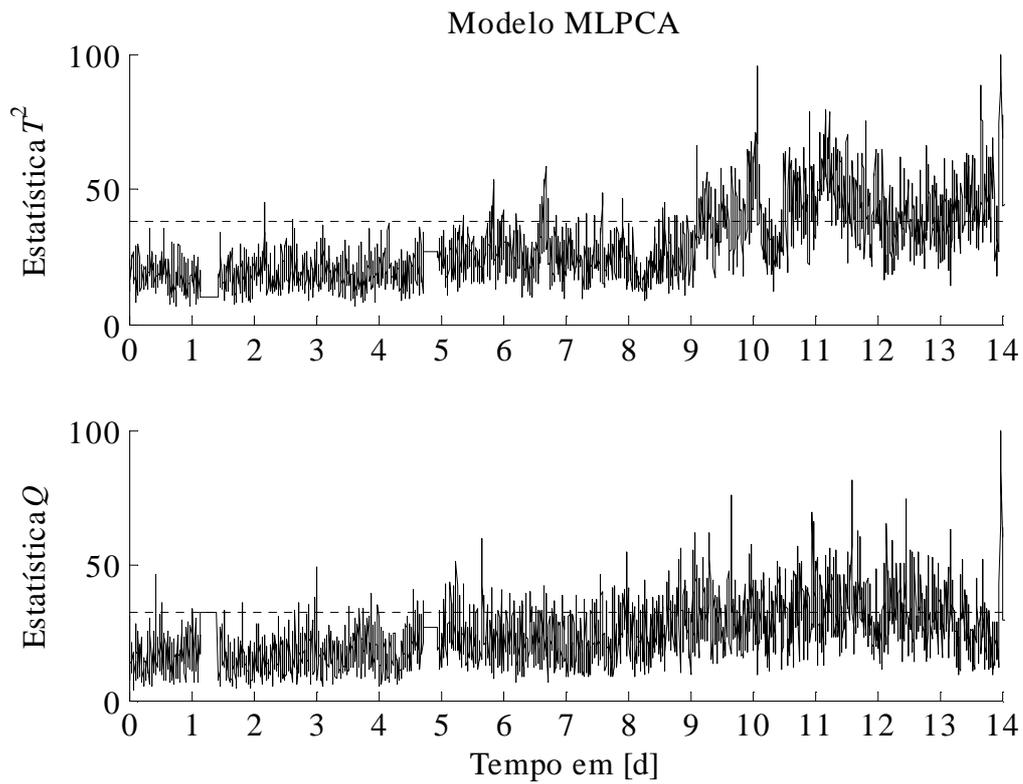


Figura 7.11: Estatísticas T^2 e Q para o processo 2.

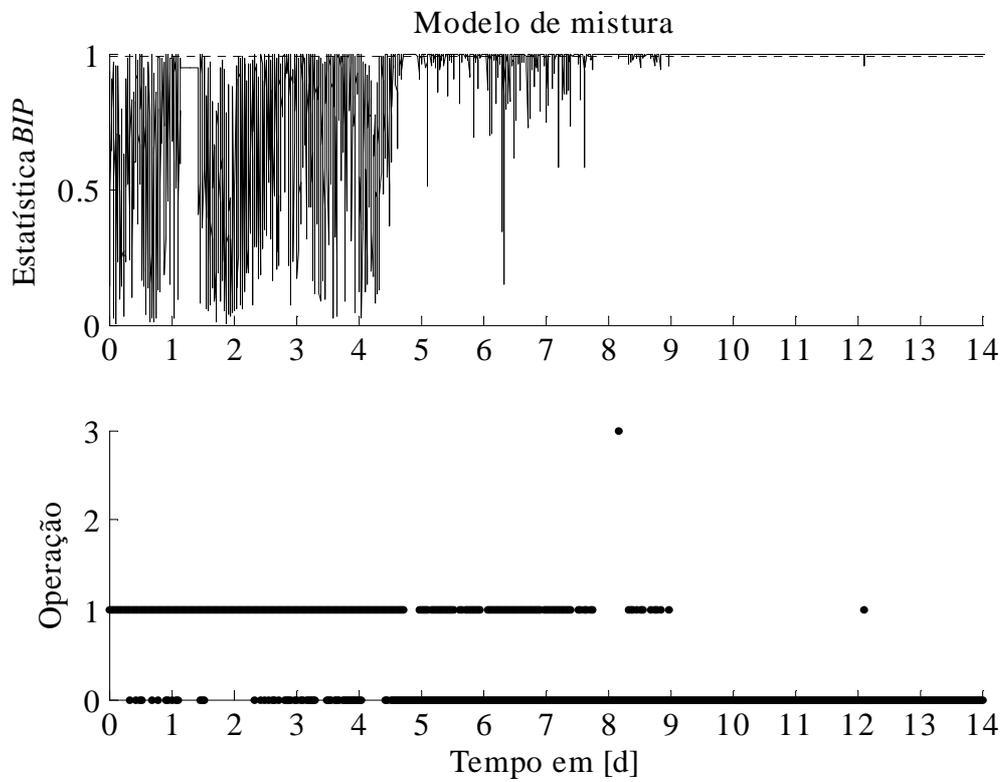


Figura 7.12: Estatística BIP para o processo 2.

Já na Figura 7.12, a Estatística *BIP* detecta um número muito elevado de observações anômalas desde o início da operação, indicando que o processo não foi modelado adequadamente. De fato, apenas 3 pontos de operação foram determinados por este sistema. As observações que correspondem ao ponto zero, na parte inferior da Figura 7.12, representam valores espúrios; isto é, observações que não pertencem a nenhum dos agrupamentos modelados.

Em relação ao sistema proposto, o processo operou nos pontos um e dois e, ao mudar para o ponto três, uma falha é detectada pela Estatística χ^2 , conforme visualizado na Figura 7.13. Vale ressaltar que a regra usada para determinação do ponto de operação é somente uma indicação do agrupamento mais provável em que as observações correntes pertencem. Isto significa que a transição do ponto dois para o ponto três pode ter sido provocada por uma condição de falha e não por uma mudança na operação do processo.

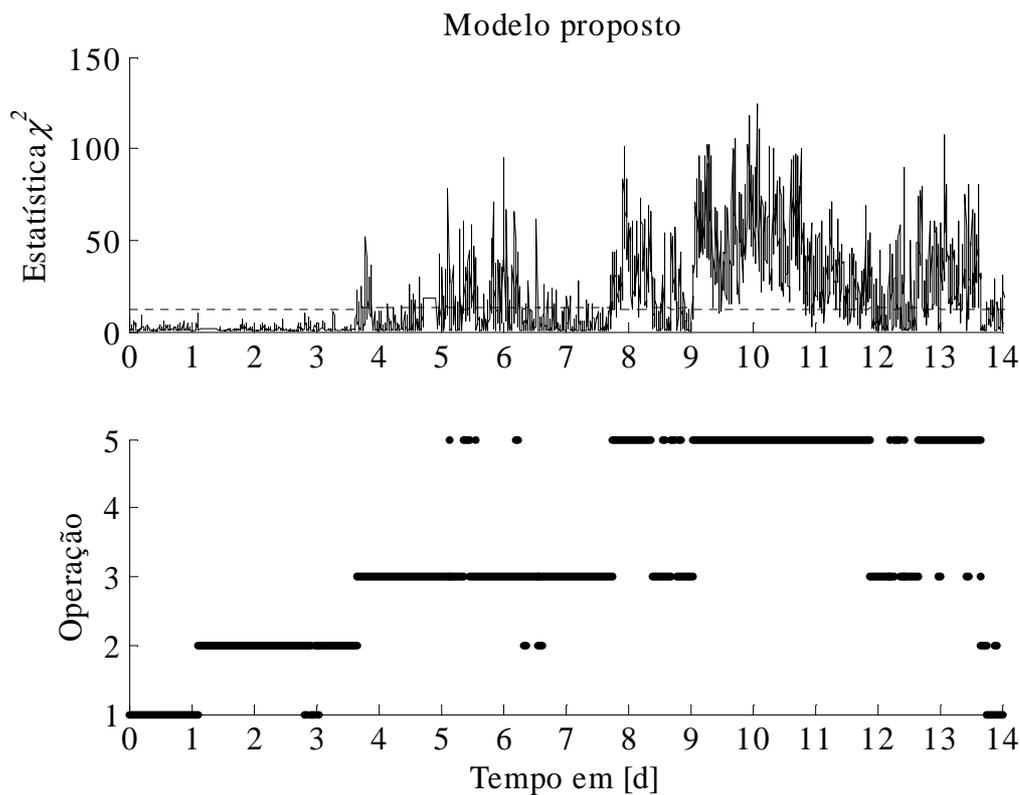


Figura 7.13: Estatística χ^2 para o processo 2

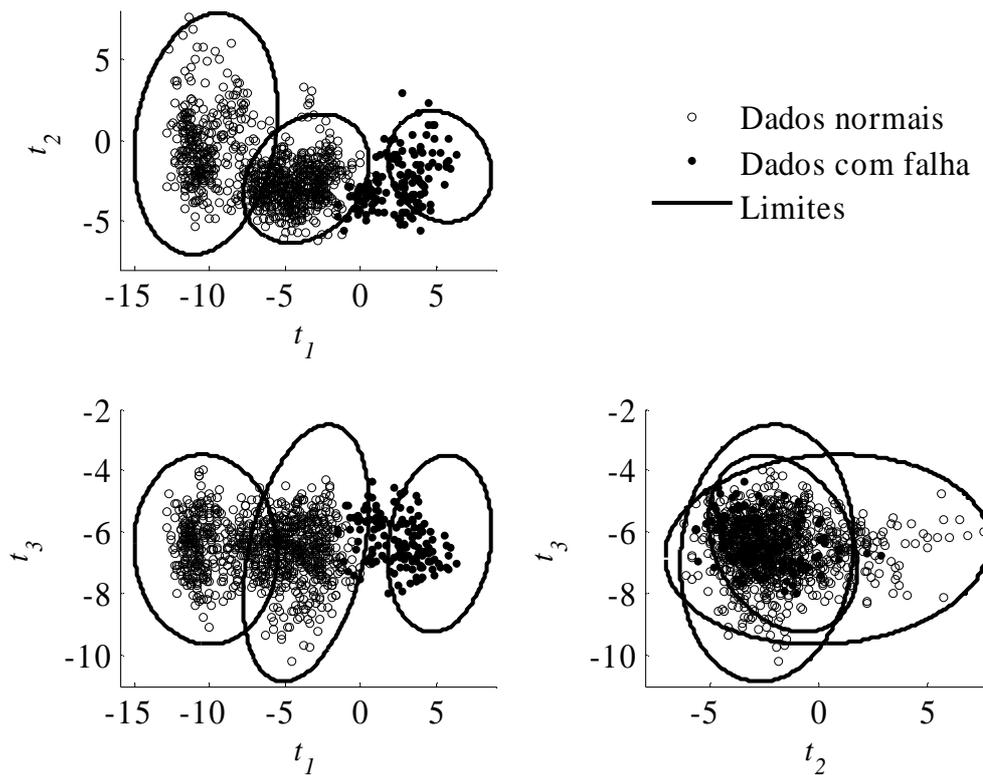


Figura 7.14: Início da condição de falha no processo 2

A Figura 7.14 ilustra as observações dos quatro primeiros dias, revelando que, na verdade, o processo passou a operar entre os agrupamentos dois e três, ou seja, uma região anormal.

7.5. Comentários finais

Este capítulo apresentou um sistema para monitoramento de processos cujos sinais apresentam comportamento multimodal. Diversos processos industriais geram dados com tal comportamento, conforme discutido na Seção 7.1. Este capítulo apresentou um sistema para monitoramento destes processos com base na técnica de PCA e em uma técnica proposta para identificação de agrupamentos. Os estudos realizados para o desenvolvimento desta técnica foram motivados pela necessidade de discriminar dados em condição normal de dados em condição anormal, sem a utilização de informações fundamentais. Este é um problema real e preterido pela literatura especializada. A princípio, aparenta ser uma tarefa com propósito prático, mas deficiente de artifícios. Assim, optou-se por utilizar uma abordagem cronológica, com

base na operação momentânea do processo. Desta forma, além de detectar valores espúrios e condições “suspeitas”, esta técnica possibilitou a identificação de todos os pontos de operação do processo e as respectivas correlações locais dos dados.

Uma possível extensão deste sistema seria a classificação dos diferentes pontos de operação em categorias que indicassem a condição ou o desempenho do processo. Assim, por meio de monitoramento, poderia ser verificada qualquer tendência com relação a esta nova variável. Sensibilidade nas estruturas de medição ou de controle regulatório podem ser exemplos de investigação, conforme já verificado em estudos preliminares deste trabalho de tese. Outro ponto que pode ser investigado mais profundamente é a sintonia dos parâmetros da técnica de agrupamentos. Na aplicação da Seção 7.4.1 foi utilizado um critério de 50 observações fora dos limites estatísticos para indicar a mudança do ponto de operação e a inclusão de apenas as 2 últimas observações para a estimação dos parâmetros do novo ponto de operação. A determinação destes parâmetros poderia ser automatizada de acordo com o comportamento dinâmico dos dados de modelagem.

CAPÍTULO VIII

CONCLUSÕES

Este capítulo apresenta algumas conclusões gerais sobre o tema de monitoramento da condição de processos químicos, as contribuições mais relevantes deste trabalho de tese e algumas sugestões para trabalhos futuros.

8.1. Conclusões

Os principais temas envolvidos na manufatura de materiais nas indústrias químicas e na produção de energia em usinas são a preocupação com o meio ambiente, a segurança do processo, a qualidade de produtos e serviços gerados e a economia com desgastes e perdas intrínsecas do processo. Todos estes temas envolvem riscos à sociedade, ao meio ambiente e aos responsáveis pelo processo. Quando o processo é atingido por uma falha, devido a erro humano ou mau funcionamento de um equipamento ou por simples envelhecimento, torna-se mais vulnerável aos riscos indesejáveis. Portanto, esta é a motivação para o desenvolvimento de um sistema de monitoramento da condição de processos.

Diversos sistemas têm sido desenvolvidos na literatura desde o início do século XX. A maioria destes sistemas apresenta uma alternativa para as questões de detecção e diagnóstico de uma falha. Invariavelmente, estas alternativas são provenientes da teoria de decisão, como a teoria da probabilidade. Mais especificamente, testes estatísticos são realizados para fornecer informações relevantes da condição do processo. Alguns exemplos são, se o processo está ou não em condição de falha, quais variáveis apresentam comportamento anormal, qual tipo de falha atingiu o processo, qual a magnitude da falha, se o processo consegue operar de forma satisfatória em condição de falha, etc. Os testes estatísticos são baseados em comparações entre um modelo ideal, geralmente um processo virtual obtido por meio de dados históricos ou conhecimento sobre os fenômenos envolvidos, e o processo real. Este conjunto de modelo e testes constitui o sistema de monitoramento.

Em virtude da variedade, complexidade e constante mudança dos processos químicos industriais, a etapa mais árdua do desenvolvimento de um sistema de monitoramento é, geralmente, a confecção de um modelo ideal para o processo. Neste sentido, este trabalho de tese objetivou, principalmente, a construção de sistemas de monitoramento de processos comumente encontrados nas indústrias químicas. Estes sistemas são baseados em modelos gerais, elaborados a partir de dados registrados. Dois tipos de processos foram focados: processos estacionários com comportamento

desconhecido e processos com múltiplos pontos de operação. Além dos modelos, testes estatísticos também integram os sistemas de monitoramento.

Em relação à primeira contribuição deste trabalho de tese, buscou-se por uma solução tecnológica para três problemas específicos, envolvendo processos com sinais com comportamento desconhecido: *i*) a extração destes sinais do processo, *ii*) a determinação do número de sinais do processo e *iii*) proposta de um sistema de monitoramento para processos com sinais com comportamento estatístico desconhecido. Utilizaram-se as técnicas de MLPCA e ICA, juntamente com os testes EOE e JB para a geração do modelo do processo. Esta modelagem empírica é uma proposta de solução para os problemas *i* e *ii*, enquanto que as Estatísticas R^2 , T^2 e Q constituem os índices para detecção de falhas do sistema para monitoramento, representando a proposta de solução para o problema *iii*.

Em relação à segunda contribuição deste trabalho de tese, buscou-se por uma solução tecnológica para outros três problemas específicos, envolvendo processos com múltiplos pontos de operação: *i*) a determinação de variáveis multimodais, *ii*) a determinação do número de pontos de operação e *iii*) proposta de um sistema de monitoramento para processos com múltiplos pontos de operação. Utilizaram-se as técnicas de MLPCA e de determinação de agrupamentos, que constituem uma solução para os problemas *i* e *ii*, enquanto que as Estatísticas χ^2 , T^2 e Q constituem uma proposta de solução para o problema *iii*.

Ambos os sistemas foram contrastados com sistemas convencionais da literatura, revelando melhor adequação dos modelos em relação aos processos e maior sensibilidade na detecção de falhas. A técnica de estimação da matriz de covariâncias dos erros das variáveis mostrou-se bastante promissora, principalmente no estudo de aplicação do CSTR simulado (Seção 7.4.1), em que a matriz estimada pode ser comparada com a matriz simulada. O teste EOE foi capaz de determinar o número de componentes principais em processos relativamente complexos, levando em consideração a estrutura dos erros das variáveis e gerando resultados com maior respaldo teórico. A comparação deste teste com outras técnicas de seleção do número de componentes principais no estudo de aplicação da Seção 6.4.1 evidenciou a superioridade do teste frente às outras técnicas. E, a técnica de agrupamento proposta foi capaz de identificar iterativamente quais os componentes principais que possuem comportamento multimodal e quantos agrupamentos cada um deles apresenta em seus dados. A aplicação desta técnica em dados reais de um processo de produção de

solventes (Seção 7.4.2) permitiu a comparação e verificação de sua superioridade frente a uma técnica convencional. A abordagem utilizada baseia-se em um princípio bastante simples, mas ainda não explorado: uma pequena sequência cronológica das observações permite a hipótese de normalidade localmente (ou momentaneamente). Estas são algumas das contribuições principais do trabalho de tese.

Além das propostas de sistemas de monitoramento, outras contribuições secundárias fizeram parte deste trabalho. Primeiro, uma introdução ao tema de monitoramento estatístico de processos, relatando sua gênese, os principais acontecimentos históricos, principais pesquisadores, as técnicas mais utilizadas na literatura e os encontros existentes sobre o tema. Segundo, uma introdução das técnicas estatísticas mais relevantes na área, como a análise em componentes principais e as tecnologias de monitoramento univariadas e multivariadas. E terceiro, aplicações industriais ressaltando o passo a passo da utilização de um sistema de monitoramento convencional.

8.2. Sugestões para trabalhos futuros

Ainda que um significativo esforço venha sendo direcionado para estudo das deficiências dos processos e dos sistemas de monitoramento, existem questões ainda não exploradas na literatura em relação ao tema de modelagem de processos usando apenas dados históricos registrados. A primeira exigência é a necessidade de dados em condição normal de operação para a geração de um modelo adequado. Existem alternativas robustas na literatura que reduzem ou eliminam o efeito de valores espúrios possivelmente presentes no conjunto de dados. Entretanto, em um contexto industrial, não existem garantias quanto à condição dos dados, uma vez que pode haver longos períodos do processo em condição de falha estável e desconhecida. Isto faz com que os modelos sejam estimados incorretamente, mesmo em uma abordagem robusta, arruinando assim todo o sistema de monitoramento. O desenvolvimento de alternativas para análise e resolução deste problema é fundamental para a aplicação de sistemas de monitoramento em um ambiente industrial.

Já em relação a um ambiente laboratorial e/ou acadêmico, há a necessidade de ferramentas para análise estatística de dados de forma simples e intuitiva. As técnicas contidas neste trabalho de tese são diretamente aplicáveis a outros processos e problemas. Contudo, muitas vezes os usuários não dominam linguagens de computador,

havendo a necessidade de auxílio para a elaboração das análises necessárias. Assim, o desenvolvimento de interfaces gráficas e de aplicativos representa uma alternativa direta para este problema.

Um tipo de processo bastante comum nas indústrias químicas, e que não foi analisado neste trabalho, é constituído pelos processos em batelada. Devem ser sugeridas abordagens funcionais para a geração de um modelo dinâmico e um sistema de monitoramento. A referência [173] apresenta algumas alternativas para modelagem e representa uma introdução bastante satisfatória ao tema, conforme já discutido na Seção 3.7.

CAPÍTULO IX

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] AMERICAN SOCIETY FOR QUALITY, *The History of Quality - Overview*. Disponível em: <<http://asq.org/learn-about-quality/history-of-quality/overview/overview.html>>. Acesso em: 13 dez. 2010, 21:09:00.
- [2] PURI, S.C., *Certificação ISO Série 9000 e Gestão da Qualidade Total*, Rio de Janeiro, Qualitymark Ed., 1994.
- [3] KHAN, F.I., ABBASI, S.A., “Major accidents in process industries and an analysis of causes and consequences”, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 12, pp. 361-378, 1999.
- [4] BISARYA, R.K., PURI, S., “The Bhopal gas tragedy – A perspective”, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, v. 18, pp. 209-212, 2005.
- [5] THE NEW YORK TIMES, *Gulf of Mexico Oil Spill*. Disponível em: <http://topics.nytimes.com/top/reference/timestopics/subjects/o/oil_spills/gulf_of_mexico_2010/index.html>. Acesso em: 16 dez. 2010, 14:55:00.
- [6] ABDOLHAMIDZADEH, B., ABBASI, T., RASHTCHIAN, D., ABBASI, S.A., Domino effect in process-industry accidents - An inventory of past events and identification of some patterns, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, doi:10.1016/j.jlp.2010.06.013, 2010.
- [7] JORNAL DA GLOBO, *Mercado Financeiro (edição do dia 15/03/2001)*. Disponível em: <<http://g1.globo.com/jornaldaglobo/0,,MUL906683-16021,00-MERCADO+FINANCEIRO.html>>. Acesso em: 16 dez. 2010, 22:26:00.
- [8] VENKATASUBRAMANIAN, V., “Abnormal Events Management in Complex Process Plants: Challenges and Opportunities in Intelligent Supervisory Control”, In: *Proceedings Foundations Computer-Aided Process Operations*, pp. 117-132, Florida, USA, Jan. 2003.
- [9] PRATA, D.M., *Reconciliação de dados em um reator de polimerização*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.
- [10] PRATA, D.M., *Reconciliação robusta de dados para monitoramento em tempo real*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [11] FREITAS, K.P., *Ferramentas estatísticas para monitoramento de modelos inferenciais*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [12] RAMIS, M.E.S., *Reconciliação de dados aplicada ao tratamento de gás combustível em unidades marítimas de produção de petróleo*, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.

- [13] FARIA JUNIOR, J.M., *Monitoramento in-situ e em tempo real de variáveis morfológicas do PVC com o uso de uma sonda NIR*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2008.
- [14] FELDMAN, R.N., *Reconciliação de dados em tempo real para monitoração e detecção de falhas em terminal de transporte e armazenamento de derivados de petróleo*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [15] OLIVEIRA JUNIOR, A.M., *Estimação de parâmetros em modelos de processo usando dados industriais e técnica de reconciliação de dados*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2006.
- [16] BRANDÃO, M.M.S.L., *Detecção e Diagnóstico de Falhas de um Processo Químico Dinâmico por Redes Neurais Multicamadas e Mapas Auto-organizáveis*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.
- [17] VALDMAN, A., *Sistema de Automação para Monitoramento Online de Gases Residuais e Diagnóstico de uma Caldeira Operada com Misturas Diesel/Biodiesel*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.
- [18] CASTRO, R.M., *Desenvolvimento de Ferramentas de Apoio Operacional para Gerenciamento de Eventos Anormais em uma Unidade de Hidrotratamento de Diesel*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [19] MACIEL, M.S., *Detecção de Grandes Perturbações de Vazão de Produção em Plataformas Brasileiras de Petróleo Usando Monitoramento Estatístico de Processos*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2009.
- [20] SILVA, G.S.C., *Aplicação a um Reator de Hidrotratamento de Método de Detecção e Diagnóstico de Falhas Baseado em Modelo*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2008.
- [21] MENDONÇA, E.S., *Monitoramento, Diagnóstico e Otimização Operacional de uma Unidade de Processamento de Gás Natural*. Dissertação de M.Sc., EQ/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- [22] ISERMANN, R., *Fault-diagnosis systems: an introduction from fault detection to fault tolerance*, Berlin, Springer-Verlag, 2006.
- [23] ISERMANN, R., BALLÉ, P., "Trends in the application of model-based fault detection and diagnosis of technical processes", *Control Eng. Practice*, v. 5, n. 5, pp. 709-719, 1997.

- [24] LI, G., QIN, S.J., JI, Y., ZHOU, D., “Reconstruction based fault prognosis for continuous processes”, *Control Eng. Practice*, v. 18, pp. 1211-1219, 2010.
- [25] MUENCHHOF, M., BECK, M., ISERMANN, R., “Fault-tolerant actuators and drives – Structures, fault detection principles and applications”, *Annual Reviews in Control*, v. 33, 136-148, 2009.
- [26] PEARSON, K., “On lines and planes of closest fit to systems of points in space”. *Philosophical Magazine*, v. 2, n. 6, pp. 559-572, 1901.
- [27] BASSEVILLE, M., NIKIFOROV, I., *Detection of Abrupt Changes: Theory and Application*, Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1993.
- [28] BEARD, R., 1971, *Failure accommodation in linear systems through self-reorganization*. PhD Thesis, Dept. of Aeronautics, M.I.T., Cambridge, USA.
- [29] JONES, H., 1973, *Failure detection in linear systems*. PhD Thesis, Dept. of Aeronautics, M.I.T., Cambridge, USA.
- [30] WILLSKY, A. S., “A survey of design methods for failure detection in dynamic systems”, *Automatica*, v. 12, pp. 601-611, 1976.
- [31] KU, W., STORER, R. H., GEORGAKIS, C., “Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 30, pp. 179-196, 1995.
- [32] WOLD, S., “Exponentially weighted moving principal components analysis and projections to latent structures”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 23, pp. 149-161, 1994.
- [33] KRAMER, M. A., “Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks”, *AIChE Journal*, v. 37, n. 2, pp. 233-243, Feb. 1991.
- [34] DONG, D., McAVOY, T. J., “Nonlinear principal component analysis based on principal curves and neural networks”, *Computers chem. Engng*, v. 20, n. 1, pp. 65-78, 1996
- [35] SCHÖLKOPF, B., SMOLA, A. J., MÜLLER, K., “Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem”, *Neural Computation*, v. 10, n. 5, pp. 1299-1399, 1998.
- [36] WENTZELL, P. D., ANDREWS, D. T., HAMILTON, D. C., FABER, K., KOWALSKI, B. R., “Maximum likelihood principal component analysis”, *Journal of Chemometrics*, v. 11, pp. 339-366, 1997.

- [37] WENTZELL, P. D., LOHNES, M. T., “Maximum likelihood principal component analysis with correlated measurement errors: theoretical and practical considerations”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 45, pp. 65-85, 1999.
- [38] WALCZAK, B., MASSART, D. L., “Robust principal component regression as a detection tool for outliers”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 27, pp. 41-54, 1995.
- [39] XIE, Y. L., WANG, J. H., LIANG, Y.-Z., SUN, L.X., SONG, H., YU, R. Q., “Robust principal component analysis by projection pursuit”, *Journal of Chemometrics*, v. 7, pp. 527–541, 1993.
- [40] HIMES, D. H., STORER, R. H., GEORGAKIS, C., “Determination of the number of principal components for disturbance detection and isolation”. In: *Proceedings of the American Control Conference*, pp. 1279-1283, Maryland, Jun. 1994.
- [41] VALLE, S., LI, W., QIN, S. J., “Selection of the number of principal components: the variance of the reconstruction error criterion with a comparison to other methods”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, pp. 4389-4401, 1999.
- [42] JOLLIFFE, I. T., *Principal Component Analysis*, New York, USA, Springer-Verlag, 1986.
- [43] JACKSON, J. E., *A User’s Guide to Principal Components*, New York, USA, John Wiley & Sons, 1991.
- [44] LARIMORE, W., “Canonical variate analysis in identification, filtering, and adaptive control”. In: *Proceedings of the 29th Conference on Decision and Control*, pp. 596-604, Hawaii, Dec. 1990.
- [45] LARIMORE, W., BAILLIEUL, J., “Identification and filtering of nonlinear systems using canonical variate analysis”. In: *Proceedings of the 29th Conference on Decision and Control*, pp. 596-604, Hawaii, Dec. 1990.
- [46] VAN OVERSCHEE, P., DE MOOR, B., “A unifying theorem for three subspace system identification algorithms”, *Automatica*, v. 31, n. 12, pp. 1853-1861, 1995.
- [47] VAN OVERSCHEE, P., DE MOOR, B., *Subspace Identification for Linear Systems: Theory, Implementation, Applications*, Dordrecht, Netherlands, Kluwer Academic Publishers, 1996.

- [48] VERHAEGEN, M., “Application of a subspace model identification technique to identify LTI systems operating in closed-loop”, *Automatica*, v. 29, n. 4, pp. 1027-1040, 1993.
- [49] VERHAEGEN, M., YU, X., “A class of subspace model identification algorithms to identify periodically and arbitrarily time-varying systems”, *Automatica*, v. 31, n. 2, pp. 20-216, 1995.
- [50] CHOU, C. T., VERHAEGEN, M., “Subspace algorithms for the identification of multivariable dynamic errors-in-variables models”, *Automatica*, v. 33, n. 10, pp. 1857-1869, 1997.
- [51] CHEN, J., PATTON, R. J., *Robust Model-Based Fault Diagnosis for Dynamic Systems*, Kluwer Academic Publishers, 1999.
- [52] PATTON, R. J., CHEN, J., “Observer-based fault detection and isolation: robustness and applications”, *Control Eng. Practice*, v. 5, n. 5, pp. 671-682, 1997.
- [53] PATTON, R. J., “Robustness in model-based fault diagnosis: the 1995 situation”, *A. Rev. Control*, v. 21, pp. 103-123, 1997.
- [54] KOURTI, T., MACGREGOR, J. F., “Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 28, pp. 3-21, 1995.
- [55] MACGREGOR, J. F., KOURTI, T., “Statistical process control of multivariate processes”, *Control Eng. Practice*, v. 3, n. 3, pp. 403-414, 1995.
- [56] WISE, B. M., GALLAGHER, N. B., “The process chemometrics approach to process monitoring and fault detection” *J. Proc. Cont.*, v. 6, n. 6, pp. 329-348, 1996.
- [57] CHEN, G., MCAVOY, T. J., “Predictive on-line monitoring of continuous processes”, *J. Proc. Cont.*, v. 8, n. 5-6, pp. 409-420, 1998.
- [58] NEGIZ, A., ÇINAR, A., “Statistical monitoring of multivariable dynamic processes with state-space models”, *AIChE Journal*, v. 43, n. 8, pp. 2002-2020, 1997.
- [59] DING, X., FRANK, P., “Fault detection via factorization approach”, *Systems & Control Letters*, v. 14, pp. 431-436, 1990.
- [60] FRANK, P., “Fault diagnosis in dynamic systems using analytical and knowledge-based redundancy: a survey and some new results”, *Automatica*, v. 26, n. 3, pp. 459-474, 1990.

- [61] GARCÍA, E. A., FRANK, P., “Deterministic nonlinear observer-based approaches to fault diagnosis: a survey”, *Control Eng. Practice*, v. 5, n. 5, pp. 663-670, 1997.
- [62] FRANK, P., DING, X., “Survey of robust residual generation and evaluation methods in observer-based fault detection systems”, *J. Proc. Cont.*, v. 7, n. 6, pp. 403-424, 1997.
- [63] FRANK, P., GARCÍA, E. A., KÖPPEN-SELIGER, B., “Modelling for fault detection and isolation versus modelling for control”, *Mathematics and Computers in Simulation*, v. 53, pp. 259–271, 2000.
- [64] GERTLER, J., “Analytical redundancy methods in fault detection and isolation”. In: *IFAC Safeprocess Symposium*, pp. 9-21, Baden-Baden, 1991.
- [65] GERTLER, J., “Fault detection and isolation using parity relations”, *Control Eng. Practice*, v. 5, n. 5, pp. 653-661, 1997.
- [66] GERTLER, J., *Fault Detection and Diagnosis in Engineering Systems*, New York, USA, Marcel Dekker, 1998.
- [67] HÖFLING, T., ISERMANN, R., “Fault detection based on adaptive parity equations and single-parameter tracking”, *Control Eng. Practice*, v. 4, n. 10, pp. 1361-1369, 1996.
- [68] ISERMANN, R., “Supervision, fault-detection and fault-diagnosis methods - an introduction”, *Control Eng. Practice*, v. 5, n. 5, pp. 639-652, 1997.
- [69] BENVENISTE, A., BASSEVILLE, M., MOUSTAKIDES, G. V., “The asymptotic local approach to change detection and model validation”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. ac-32, n. 7, 1987.
- [70] BASSEVILLE, M., “Information criteria for residual generation and fault detection and isolation”, *Automatica*, v. 33, n. 5, pp. 783-803, 1997.
- [71] ZHANG, Q., BASSEVILLE, M., BENVENISTE, A., “Fault detection and isolation in nonlinear dynamic systems: a combined input-output and local approach”, *Automatica*, v. 34, n. 11, pp. 1359-1373, 1998.
- [72] BASSEVILLE, M., “On-board component fault detection and isolation using statistical local approach”, *Automatica*, v. 34, n. 11, pp. 1391-1415, 1998.
- [73] RICH, S. H., VENKATASUBRAMANIAN, V., “Model-based reasoning in diagnostic expert systems for chemical process plants”, *Comput. Chem. Engng.*, v. 11, n. 2, pp. 111-122, 1987.

- [74] VENKATASUBRAMANIAN, V., RICH, S. H., "An object-oriented two-tier architecture for integrating compiled and deep-level knowledge for process diagnosis", *Comput. Chem. Engng.*, v. 12, n. 9/10, pp. 903-921, 1988.
- [75] VENKATASUBRAMANIAN, V., "Towards a specialized shell for diagnostic expert systems for chemical plant", *J. Loss Prev. Process Ind.*, v. 1, pp. 84-91, Apr. 1988.
- [76] RICH, S. H., VENKATASUBRAMANIAN, V., NASRALLAHT, M., MATTEO C., "Development of a diagnostic expert system for a whipped toppings process", *J. Loss Prev. Process Ind.*, v. 2, pp. 145-154, Jul. 1989.
- [77] VENKATASUBRAMANIAN, V., VAIDYANATHAN R., and YAMAMOTO, Y., "Process fault detection and diagnosis using neural networks – I. Steady-state processes", *Computers chem. Engng*, v. 14, n. 7. pp. 699-712, 1990.
- [78] KAVURI, S. N., VENKATASUBRAMANIAN, V., "Combining pattern classification and assumption-based techniques for process fault diagnosis", *Computers chem. Engng.*, v. 16, n. 4, pp. 299-312, 1992.
- [79] VAIDYANATHAN R., VENKATASUBRAMANIAN, V., "On the nature of fault space classification structure developed by neural networks", *Engng Applic. Artif. Intell.*, v. 5, n. 4, pp. 289-297, 1992.
- [80] KAVURI, S. N., VENKATASUBRAMANIAN, V., "Representing bounded fault classes using neural networks with ellipsoidal activation functions", *Computers chem. Engng*, v. 17, n. 2, pp. 139-163, 1993.
- [81] KAVURI, S. N., VENKATASUBRAMANIAN, V., "Using fuzzy clustering with ellipsoidal units in neural networks for robust fault classification", *Computers Chem. Engng*, v. 17, n. 8, pp. 765-784, 1993.
- [82] RENGASWAMY, R., VENKATASUBRAMANIAN, V., "A syntactic pattern-recognition approach for process monitoring and fault diagnosis", *Engng Applic. Artif. Intell.*, v. 8, n. 1, pp. 35-51, 1995.
- [83] VEDAM, H., VENKATASUBRAMANIAN, V., "Signed digraph based multiple fault diagnosis", *Computers chem. Engng*, v. 21, Suppl., pp. S655-S660, 1997.
- [84] DUNIA, R., QIN, S. J., EDGAR, T. F., MCAVOY, T. J., "Use of principal component analysis for sensor fault identification", *Computers chem. Engng*, v. 20, Suppl., pp. S713-S718, 1996.

- [85] QIN, S. J., YUE, H., DUNIA, R., “Self-validating inferential sensors with application to air emission monitoring”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 36, pp. 1675-1685, 1997.
- [86] DUNIA, R., QIN, S. J., “A unified geometric approach to process and sensor fault identification and reconstruction: the unidimensional fault case”, *Computers Chem. Engng*, v. 22, n. 7-8, pp. 927-943, 1998.
- [87] DUNIA, R., QIN, S. J., “Joint diagnosis of process and sensor faults using principal component analysis”, *Control Engineering Practice*, v. 6, pp. 457-469, 1998.
- [88] DUNIA, R., QIN, S. J., “Subspace approach to multidimensional fault identification and reconstruction”, *AIChE Journal*, v. 44, n. 8, pp. 1813-1831, 1998.
- [89] QIN, S. J., DUNIA, R., “Determining the number of principal components for best reconstruction”, *Journal of Process Control*, v. 10, pp. 245-250, 2000.
- [90] RAICH, A. C., ÇINAR, A., “Multivariate statistical methods for monitoring continuous processes: assessment of discrimination power of disturbance models and diagnosis of multiple disturbances”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 30, pp. 37-48, 1995.
- [91] RAICH, A. C., ÇINAR, A., “Diagnosis of process disturbances by statistical distance and angle measures”, *Computers chem. Engng*, v. 21, n. 6, pp. 661-673, 1997.
- [92] EDWARDS, C., SPURGEON, S. K., PATTON, R. J., “Sliding mode observers for fault detection and isolation”, *Automatica*, v. 36, pp. 541-553, 2000.
- [93] TAN, C. P., EDWARDS, C., “Sliding mode observers for detection and reconstruction of sensor faults”, *Automatica*, v. 38, pp. 1815- 1821, 2002.
- [94] EDWARDS, C., “A comparison of sliding mode and unknown input observers for fault reconstruction”, In: *Proceedings of the 43rd IEEE Conference on Decision and Control*, pp. 5279-5284, Atlantis, Paradise Island, Bahamas, Dec. 2004.
- [95] PERTEW, A. M., MARQUEZ, H. J., ZHAO, Q., “ H_{∞} Dynamic observer design with application in fault diagnosis”, In: *Proceedings of the 44th IEEE Conference on Decision and Control, and the European Control Conference 2005*, pp. 3803-3808, Seville, Spain, December 12-15, 2005.

- [96] PERTEW, A. M., MARQUEZ, H. J., ZHAO, Q., “LMI-based sensor fault diagnosis for nonlinear Lipschitz systems”, *Automatica*, v. 43, pp. 1464- 1469, 2007.
- [97] ZHONG, M., DING, S. X., LAM, J., WANG, H., “An LMI approach to design robust fault detection filter for uncertain LTI systems”, *Automatica*, v. 39, pp. 543-550, 2003.
- [98] ZHANG, P., DING, S. X., “Disturbance decoupling in fault detection of linear periodic systems”, *Automatica*, v. 43, pp. 1410-1417, 2007.
- [99] ZHANG, P., DING, S. X., “An integrated trade-off design of observer based fault detection systems”, *Automatica*, v. 44, pp. 1886-1894, 2008.
- [100] LEE, C., CHOI, S. W., LEE, I.-U., “Variable reconstruction and sensor fault identification using canonical variate analysis”, *Journal of Process Control*, v. 16, pp. 747–761, 2006.
- [101] LEE, J.-M., YOO, C., LEE, I.-U., “Statistical monitoring of dynamic processes based on dynamic independent component analysis”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 2995- 3006, 2004.
- [102] CHOI, S. W., MARTIN, E. B., MORRIS, A. J., LEE, I.-B., “Fault detection based on a maximum-likelihood principal component analysis (PCA) mixture”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, 2316-2327, 2005.
- [103] LEE, J.-M., YOO, C., LEE, I.-U., “Fault detection of batch processes using multiway kernel principal component analysis”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 1837–1847, 2004.
- [104] CHOI, S. W., LEE, I.-U., “Nonlinear dynamic process monitoring based on dynamic kernel PCA”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 5897-5908, 2004.
- [105] LEE, J.-M., YOO, C., CHOI, S. W., VANROLLEGHEM, P. A., Lee, I.-U., “Nonlinear process monitoring using kernel principal component analysis”, *Chemical Engineering Science*, v. 59, pp. 223- 234, 2004.
- [106] CHOI, S. W., LEE, C., LEE, J.-M., PARK, J. H., LEE, I.-U., “Fault detection and identification of nonlinear processes based on kernel PCA”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 75, pp. 55-67, 2005.
- [107] CHO, J. H., LEE, J.-M., CHOI, S. W., LEE, D., LEE, I.-U., “Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis”, *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 279-288, 2005.

- [108] CHOI, S. W., MORRIS, J., LEE, I.-U., “Nonlinear multiscale modelling for fault detection and identification”, *Chemical Engineering Science*, v. 63, pp. 2252-2266, 2008.
- [109] CHIANG, L. H., RUSSELL, E. L., BRAATZ, R. D., “Fault diagnosis in chemical processes using Fisher discriminant analysis, discriminant partial least squares, and principal component analysis”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 50, pp. 243-252, 2000.
- [110] RUSSELL, E. L., CHIANG, L. H., BRAATZ, R. D., “Fault detection in industrial processes using canonical variate analysis and dynamic principal component analysis”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 51, pp. 81–93, 2000.
- [111] CHIANG, L. H., RUSSELL, E. L., BRAATZ, R. D., *Fault detection and diagnosis in industrial systems*, Heidelberg, Springer-Verlag, 2000.
- [112] GERTLER, J., LI, W., HUANG, Y., Mcavoy, T., “Isolation enhanced principal component analysis”, *AIChE Journal*, v. 45, n. 2, pp. 323-334, 1999.
- [113] GERTLER, J., CAO, J., “PCA-based fault diagnosis in the presence of control and dynamics”, *AIChE Journal*, v. 50, n. 2, pp. 1-15, 2004.
- [114] GERTLER, J., CAO, J., “Design of optimal structured residuals from partial principal component models for fault diagnosis in linear systems”, *Journal of Process Control*, v. 15, pp. 585-603, 2005.
- [115] GERTLER, J., “Residual generation from principal component models for fault diagnosis in linear systems part I: review of static systems”, In: *IEEE Conference on Intelligent Control*, Limassol, Cyprus, Jun. 2005.
- [116] GERTLER, J., “Residual generation from principal component models for fault diagnosis in linear systems part II: extension to optimal residuals and dynamic systems”, In: *IEEE Conference on Intelligent Control*, Limassol, Cyprus, Jun. 2005.
- [117] VEDAM, H., VENKATASUBRAMANIAN, V., “PCA-SDG based process monitoring and fault diagnosis”, *Control Engineering Practice*, v. 7, pp. 903-917, 1999.
- [118] MAURYA, M. R., RENGASWAMY, R., VENKATASUBRAMANIAN, V., “Fault diagnosis by qualitative trend analysis of the principal components”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 83, n. A9, pp. 1122–1132, 2005.

- [119] TREASURE, R. J., KRUGER, U., COOPER, J. E., “Dynamic multivariate statistical process control using subspace identification”, *Journal of Process Control*, v. 14, pp. 279-292, 2004.
- [120] WANG, X., KRUGER, U., IRWIN, G. W., “Process monitoring approach Using fast moving window PCA”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 44, pp. 5691-5702, 2005.
- [121] LIU, X., XIE, L., KRUGER, U., LITTLER, T., WANG, S., “Moving window kernel PCA for adaptive monitoring of nonlinear processes”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 96, pp. 132-143, 2009.
- [122] KRUGER, U., KUMAR, S., LITTLER, T., “Improved principal component monitoring using the local approach”, *Automatica*, v. 43, pp. 1532-1542, 2007.
- [123] KRUGER, U., DIMITRIADIS, G., “Diagnosis of process faults in chemical systems using a local partial least squares approach”, *AIChE Journal*, v. 54, n. 10, pp. 2581-2586, 2008.
- [124] LIEFTUCHT, D., VÖLKER, M., SONNTAG, C., KRUGER, U., IRWIN, G. W., ENGELL, S., “Improved fault diagnosis in multivariate systems using regression-based reconstruction”, *Control Engineering Practice*, v. 17, pp. 478-493, 2009.
- [125] LI, W., YUE, H. H., VALLE-CERVANTES, S., QIN, S. J., “Recursive PCA for adaptive process monitoring”, *Journal of Process Control*, v. 10, pp. 471-486, 2000.
- [126] LI, W., QIN, S. J., “Consistent dynamic PCA based on errors-in-variables subspace identification”, *Journal of Process Control*, v. 11, pp. 661-678, 2001.
- [127] PRANATYASTO, T. N., QIN, S. J., “Sensor validation and process fault diagnosis for FCC units under MPC feedback”, *Control Engineering Practice*, v. 9, pp. 877-888, 2001.
- [128] QIN, S. J., “Statistical process monitoring: basics and beyond”, *Journal of Chemometrics*, v. 17, pp. 480-502, 2003.
- [129] WANG, J., QIN, S. J., “A new subspace identification approach based on principal component analysis”, *Journal of Process Control*, v. 12, pp. 841-855, 2002.
- [130] HUANG, B., DING, S. X., QIN, S. J., “Closed-loop subspace identification: an orthogonal projection approach”, *Journal of Process Control*, v. 15, pp. 53-66, 2005.

- [131] WANG, J., QIN, S. J., “Closed-loop subspace identification using parity space”, *Automatica*, v. 42, pp. 315-320, 2006.
- [132] QIN, S. J., “An overview of subspace identification”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 30, pp. 1502-1513, 2006.
- [133] YU, J., QIN, S. J., Multimode process monitoring with bayesian inference-based finite Gaussian mixture models, *AIChE Journal*, v. 54, n. 7, pp. 1811-1829, 2008.
- [134] ALCALA, C. F., QIN, S. J., “Reconstruction-based contribution for process monitoring”, *Automatica*, v. 45, 1593-1600, 2009.
- [135] YOON, S., MACGREGOR, J. F., “Statistical and causal model-based approaches to fault detection and isolation” *AIChE Journal*, v. 46, n. 9, pp. 1813-1824, 2000.
- [136] SHI, R., MACGREGOR, J. F., “A framework for subspace identification methods”, In: *Proceedings of the American Control Conference*, pp. 25-27, Arlington, VA, Jun., 2001.
- [137] YOON, S., MACGREGOR, J. F., “Fault diagnosis with multivariate statistical models part I: using steady state fault signatures”, *Journal of Process Control*, v. 11, pp. 387-400, 2001.
- [138] BASSEVILLE, M., NIKIFOROV, I., “Fault isolation for diagnosis: nuisance rejection and multiple hypotheses testing”, *Annual Reviews in Control*, v. 26, pp. 189-202, 2002.
- [139] MEVEL, L., BASSEVILLE, M., GOURSAT, M., “Stochastic subspace-based structural identification and damage detection – Application to the steel-quake benchmark”, *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 17, n. 1, pp. 91-101, 2003.
- [140] MEVEL, L., GOURSAT, M., BASSEVILLE, M., “Stochastic subspace-based structural identification and damage detection and localisation – Application to the z24 bridge benchmark”, *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 17, n. 1, pp. 143-151, 2003.
- [141] BASSEVILLE, M., MEVEL, L., GOURSAT, M., “Statistical model-based damage detection and localization: subspace-based residuals and damage-to-noise sensitivity ratios”, *Journal of Sound and Vibration*, v. 275, pp. 769-794, 2004.

- [142] BALMÈS, É., BASSEVILLE, M., MEVEL, L., Nasser, H., “Handling the temperature effect in vibration monitoring of civil structures: A combined subspace-based and nuisance rejection approach”, *Control Engineering Practice*, v. 17, pp. 80-87, 2009.
- [143] HUANG, B., “Multivariable model validation in the presence of time-variant disturbance dynamics”, *Chemical Engineering Science*, v. 55, pp. 4583-4595, 2000.
- [144] HUANG, B., “Detection of abrupt changes of total least squares models and application in fault detection”, *IEEE transactions on control systems technology*, v. 9, n. 2, pp. 357-367, 2001.
- [145] MALHOTRA, A., HUANG, B., “Detection of abrupt change and applications in sensor decalibration monitoring”, *ISA Transactions*, v. 41, pp. 155–166, 2002.
- [146] LANE, L., MARTIN, E.B., KOOIJMANS, R., MORRIS, A.J., “Performance monitoring of a multi-product semi-batch process”, *Journal of Process Control*, v. 11, pp. 1-11, 2001.
- [147] MAESTRI, M., FARALL, A., GROISMAN, P., CASSANELLO, M., HOROWITZ, G., “A robust clustering method for detection of abnormal situations in a process with multiple steady-state operation modes”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 34, pp. 223-231, 2010.
- [148] ZHAO, S.J., ZHANG, J., XU, Y.M., “Performance monitoring of processes with multiple operating modes through multiple PLS models”, *Journal of Process Control*, v. 16, 763-772, 2006.
- [149] GE, Z., SONG, Z., “Online monitoring of nonlinear multiple mode processes based on adaptive local model approach”, *Control Engineering Practice*, v. 16, pp. 1427– 1437, 2008.
- [150] GE, Z., SONG, Z., “Maximum-likelihood mixture factor analysis model and its application for process monitoring”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 102, pp. 53-61, 2010.
- [151] CHOI, S.W., PARK, J.H., LEE, I.-B., “Process monitoring using a Gaussian mixture model via principal component analysis and discriminant analysis”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 1377-1387, 2004.
- [152] YU, J., “Hidden Markov models combining local and global information for nonlinear and multimodal process monitoring”, *Journal of Process Control*, v. 20, pp. 344-359, 2010.

- [153] BHAGWAT, A., SRINIVASAN, R., KRISHNASWAMY, P. R., “Fault detection during process transitions: a model-based approach”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 309-325, 2003.
- [154] BHAGWAT, A., SRINIVASAN, R., KRISHNASWAMY, P. R., “Multi-linear model-based fault detection during process transitions”, *Chemical Engineering Science*, v. 58, pp. 1649-1670, 2003.
- [155] SUNDARRAMAN, A., SRINIVASAN, R., “Monitoring transitions in chemical plants using enhanced trend analysis”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, 1455-1472, 2003.
- [156] SRINIVASAN, R., VISWANATHAN, P., VEDAM, H., NOCHUR, A., “A framework for managing transitions in chemical plants”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 305-322, 2005.
- [157] NG, Y.S., SRINIVASAN, R., “An adjoined multi-model approach for monitoring batch and transient operations”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 33, pp. 887-902, 2009.
- [158] NATARAJAN, S., SRINIVASAN, R., “Multi-model based process condition monitoring of offshore oil and gas production process”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 88, pp. 572-591, 2010.
- [159] VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY R., YIN K., KAVURI, S. N., “A review of process fault detection and diagnosis part I: quantitative model-based methods”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp. 293-311, 2003.
- [160] VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY R., KAVURI, S. N., “A review of process fault detection and diagnosis part II: qualitative models and search strategies”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp. 313-326, 2003.
- [161] VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY R., KAVURI, S. N., Yin K., “A review of process fault detection and diagnosis part III: process history based methods”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp. 327-346, 2003.
- [162] ZHANG, Y., JIANG, J., “Bibliographical review on reconfigurable fault-tolerant control systems”, *Annual Reviews in Control*, v. 32, pp. 229-252, 2008.
- [163] GNANADESIKAN, R., *Methods for statistical data analysis of multivariate observations*, New York, John Wiley & Sons, 1977.

- [164] HASTIE, T., STUETZLE, W., “Principal curves”, *Journal of the American Statistical Association*, v. 84, n. 406, pp. 502-516.
- [165] CHOW, K.C., TAN, K-J., TABE, H., ZHANG, J., THORNHILL, N.F., “Dynamic principal component analysis using integral transforms”, In: *AIChE annual meeting*, n. 232c, pp. 1-7, Miami Beach, Nov. 1999.
- [166] COMON, P., “Independent component analysis, a new concept?”, *Signal Processing*, v. 36, pp. 287-314, 1994.
- [167] TIPPING, M.E., BISHOP, C.M., “Probabilistic principal component analysis”, *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, v. 61, pp. 611-622, 1999.
- [168] NARASIMHAN, S., SHAH, S. L., “Model identification and error covariance matrix estimation from noisy data using PCA”, *Control Engineering Practice*, v. 16, pp. 146–155, 2008.
- [169] LIANG, Y-Z., KVALHEIM, O.M., “Robust methods for multivariate analysis - a tutorial review’. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 32, pp. 1-10, 1996.
- [170] DASZYKOWSKI, M., KACZMAREK, K., HEYDEN, Y.V., WALCZAK, B., “Robust statistics in data analysis - A review basic concepts”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 85, pp. 203-219, 2007.
- [171] MØLLER, S.F., FRESE, J.V., BRO, R., “Robust methods for multivariate data analysis”, *Journal of Chemometrics*, v. 19, pp. 549-563, 2005.
- [172] LIU, X., XIE, L., KRUGER, U., LITTLER, T., WANG, S., “Statistical-based monitoring of multivariate non-Gaussian systems”, *AIChE journal*, v. 54, n. 9, pp. 2379-2391, 2008.
- [173] RAMSAY, J.O., SILVERMAN, B.W., *Functional data analysis*. 2 ed., New York, Springer-Verlag, 2005.
- [174] MONTGOMERY, D.C., *Introduction to statistical quality control*. 5 ed., New York, John Wiley & Sons, 2005.
- [175] JURAN, J.M.; GODFREY, A.B., *Juran's Quality Handbook*. 5 ed., New York, McGraw-Hill, 1999.
- [176] NOMIKOS, P., MACGREGOR, J.F., “Multivariate SPC charts for monitoring batch processes”, *Technometrics*, v. 37, n. 1, pp. 41-59, 1995.
- [177] ALCALA, C.F., QIN, S.J., “Analysis and generalization of fault diagnosis methods for process monitoring”, *Journal of Process Control*, v. 21, pp. 322-330, 2011.

- [178] CHEN, Q., KRUGER, U., MERONK, M., LEUNG, A.Y.T., “Synthesis of T^2 and Q statistics for process monitoring”, *Control Engineering Practice*, v. 12, pp. 745-755, 2004.
- [179] VACHHANI, P., RENGASWAMY, R., VENKATASUBRAMANIAN, V., “A framework for integrating diagnostic knowledge with nonlinear optimization for data reconciliation and parameter estimation in dynamic systems”, *Chemical Engineering Science*, v. 56, pp. 2133-2148, 2001.