



UFBA

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI

DOUTORADO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL

EDSON CORDEIRO DO VALLE

DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA AVALIAÇÃO E
MONITORAMENTO DE SISTEMAS DE MEDIÇÃO DE ÁGUAS
INDUSTRIAIS, SUJEITOS A BAIXA QUALIDADE DE INFORMAÇÃO



SALVADOR
2013



DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA AVALIAÇÃO E
MONITORAMENTO DE SISTEMAS DE MEDIÇÃO DE ÁGUAS
INDUSTRIAIS, SUJEITOS A BAIXA QUALIDADE DE INFORMAÇÃO

Edson Cordeiro do Valle

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

Orientador: Ricardo de Araújo Kalid
Argimiro Resende Secchi

Salvador

Agosto de 2013

V181 Valle, Edson Cordeiro do

Desenvolvimento de uma metodologia para avaliação e monitoramento de sistemas de medição de águas industriais, sujeitos a baixa qualidade de informação / Edson Cordeiro do Valle. – Salvador, 2013.

196 f. : il. color.

Orientador: Prof. Ricardo de Araújo Kalid; Argimiro Resende Secchi

Tese (doutorado) – Universidade Federal da Bahia. Escola Politécnica, 2013.

1. Águas reúso. 2. Água – Vazamento. 3. Controle de poluição - Indústria. 4. Monitoramento ambiental. I. Kalid, Ricardo de Araújo. II Secchi, Argimiro Resende. III. Universidade Federal da Bahia. IV. Título

CDD : 628

*Ao meu pai, Antonio
(em memória).
À minha esposa Silvana,
à minha filha, Clarissa
ao meu filho, Guilherme*

Agradecimentos

Gostaria de agradecer inicialmente a Deus, por ter me guiado, protegido e colocado as pessoas certas em meu caminho ao longo dessa jornada. Entre essas pessoas, minha mãe, Isamara e meu pai, Antonio, que nos deixou ano passado.

Gostaria de agradecer meus queridos parentes por tudo que fizeram por minha família, e o auxílio que nos ofereceram durante minhas ausências devido ao doutorado e trabalho. Entre os parentes que mais nos apoiaram está minha sogra, 'Nilda', meu 'compadre' Geraldo e minhas 'comadres' Adriana e Lariana, obrigado por toda atenção e carinho que deram aos meus filhos nesse período. Deixo um agradecimento especial ao amor da minha vida, minha esposa Silvana, que deu muito de si para me ajudar na conclusão desse trabalho, cuidando de nossos filhos e dos afazeres domésticos, sem dúvida uma heroína.

Entre os meus amigos, gostaria de agradecer Fernando Majolo e sua esposa Michele, por terem me acolhido com muito carinho em sua moradia durante minhas diversas estadias em Salvador. Das diversas pessoas que conheci em Salvador, duas merecem destaque por sua amizade e companheirismo, Fábio Menezes e Marcos Narciso. Agradeço também a secretária do PEI, Tatiane, pelas ajuda nos procedimentos de matrícula, Tiago Finkler pela ajuda com os PLS's. Agradeço também, Victor Aranovich, por ter me ajudado a superar uma fase bastante estressante de minha vida. Meus sinceros agradecimentos aos meus orientadores pelo tempo e dedicação investido, além dos ensinamentos que contribuíram para minha formação e meu amadurecimento: Ricardo de Araújo Kalid por ter me recebido de portas abertas na UFBA e acreditado em meu potencial, por todas as conversas e cafês. À Argimiro Resende Secchi, que, desde a graduação, vem sendo uma pessoa muito especial em minha formação de pesquisador. Por último, aos meus sócios e amigos da VRTech, Rafael e Paula, por terem compreendido e aceitado minhas ausências na empresa durante a elaboração desse trabalho.

Se For Embora

Rafael - Chimarruts

*Se for embora, leve um sorriso meu,
Guardado no teu peito,
Teu coração agora é meu
Mas se ficar, ganha um beijo meu
Com sabor de alegria
É um presente que Deus me deu
Sim, já passei por tudo nesta vida
Mas foi a fé que deu forças pra lutar
Batalhas ganhei, outras perdidas
Ai! Que bom, se pudesse ficar
Se a vida veio lhe chamar
Se tem que ir e não pode mais ficar
Se o destino não se encarregar
Da gente se ver, eu preciso te falar...*

A Vitória Demora Mas Vem

Juninho Thybau - Baiaco e Luis Caffé

*...Guerreiro não foge a luta
Eu tô sempre na disputa
Em prol de um amanhã melhor (bem melhor)
Pego firme na labuta
Malandro é quem escuta bom conselho
Pra não ficar na pior (na pior)
Eu vou compondo minha história
Guardo em minha memória
Quem sempre me fez o bem (fez o bem)
Aprendi pra ensinar o ensinamento
Que tudo na vida tem seu tempo, tem
A vitória demora mas vem*

Aquarela

Toquinho - Vinicius de Moraes -

M. Fabrizio - G. Morra

*...Um menino caminha e cami-
nhando chega no muro
E ali logo em frente, a esperar
pela gente, o futuro está.
E o futuro é uma astronave que
tentamos pilotar,
Não tem tempo nem piedade, nem
tem hora de chegar.
Sem pedir licença muda nossa
vida, depois convida a rir ou cho-
rar.
Nessa estrada não nos cabe co-
nhecer ou ver o que virá.
O fim dela ninguém sabe bem ao
certo onde vai dar.
Vamos todos numa linda passa-
rela
De uma aquarela que um dia, en-
fim, descolorirá.*

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

DESENVOLVIMENTO DE UMA METODOLOGIA PARA AVALIAÇÃO E
MONITORAMENTO DE SISTEMAS DE MEDIÇÃO DE ÁGUAS
INDUSTRIAIS, SUJEITOS A BAIXA QUALIDADE DE INFORMAÇÃO

Edson Cordeiro do Valle

Agosto/2013

Orientador: Ricardo de Araújo Kalid

Argimiro Resende Secchi

Programa: Engenharia Industrial

O setor industrial consome grande quantidade de água, que pode ser considerada um dos itens fundamentais em muitos processos industriais, além disso, é um dos principais responsáveis pela poluição dos corpos hídricos. A solução desses problemas passa pelo gerenciamento adequado dos recursos hídricos industriais e pela aplicação de ferramentas para reúso de águas (integração mássica), porém, nem sempre o uso de tais técnicas são possíveis devido à falta ou baixa qualidade de informação do circuito de uso de água. Nesse contexto, o objetivo deste trabalho é a seleção de índices para acompanhamento do sistema de medição de águas em plantas industriais em estado estacionário, assim como, a seleção de índices para o acompanhamento de métodos de estimação de vazões de águas industriais. Também consta como o objetivo do presente trabalho, o desenvolvimento de uma metodologia que, baseado nos índices selecionados, e, atuando em conjunto com modelos empíricos

multivariáveis, seja capaz de indicar possíveis falhas dos sensores de medição de vazão, ou das estimativas, e detectar vazamentos em equipamentos. Para cumprir tais objetivos, inicialmente foram selecionados 16 casos teste para uma validação do método proposto em cenários mais diversificados. Em seguida, foram escolhidos índices para caracterizar os balanços de massa. Os índices selecionados foram as estatísticas de testes para detecção de erros grosseiros: Teste Global, Teste Nodal e Teste de Medida. Em seguida foram estimados parâmetros de modelos empíricos multivariáveis utilizando o método de regressão em espaço reduzido de mínimos quadrados parciais de ordem quadrática (PLS quadrático ou QPLS). O modelo empírico tem como objetivo determinar a posição e magnitude dos erros grosseiros a partir dos índices selecionados. O ajuste dos parâmetros e validação dos modelos para cada problema teste foi executado tanto para falhas em medidores, ou estimadores, de vazão quanto para vazamentos, em suas formas individuais ou combinadas. O método proposto, denominado PMGEI (*Predictive Multivariate Gross Error Identification* ou Identificação de Erros Grosseiros por Predição Multivariável), foi comparado com os métodos de detecção de erros grosseiros únicos de Razão de Verossimilhança Generalizada (GLR para erros em medições e vazamento) e Teste Nodal (NT) usando a abordagem clássica de Monte Carlo para avaliação de métodos de detecção de erros grosseiros nos 16 problemas testes. Para avaliação dos resultados do método proposto para erros múltiplos, o método PMGEI foi aplicado a um exemplo de literatura e comparado com 3 métodos existentes na literatura: estimação simultânea de erros grosseiros, SEGE, com o método de estimação não-tendenciosa, UBET, e com o método GLR. Para erros grosseiros únicos, no conjunto de testes onde foi aplicado, o método PMGEI apresentou resultados superiores em relação ao método GLR para erros grosseiros em medições e apresentou resultados equivalentes para vazamentos (tanto para o GLR quanto para o NT). Para detecção de erros múltiplos, no respectivo conjunto de dados, o método PMGEI também apresentou resultados superiores para detecção de erros grosseiros múltiplos envolvendo erros em medições e combinação de erros em medições e vazamentos.

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

DEVELOPMENT OF A NEW METHOD FOR EVALUATION AND
MONITORING OF INDUSTRIAL WATER SYSTEMS SUBJECT TO LOW
QUALITY OF INFORMATION

Edson Cordeiro do Valle

August/2013

Advisor: Ricardo de Araújo Kalid
Argimiro Resende Secchi

Department: Industrial Engineering

The industry uses high amount of water in the production processes since this raw material is an essential item in several industrial processes. Furthermore, they are also responsible for the pollution of water. These problems can be handled by the appropriate use of water management tools and by the application of water reclamation tools. However, the use of these tools cannot be applied in any industrial case, due to the lack of information regarding the water material balance. In this context, the goal of this work is to select an index to evaluate the monitoring system of water use circuit in process industry in steady-state. Furthermore, this work aims to develop methods that, based on the selected index and acting together with multivariate empirical models, can detect the possibility of measurement sensor failures and equipment leaking. To reach these goals, initially, 16 benchmark test cases for validation of the method in a wide range of scenarios. Then, some indexes were selected that could represent the quality of the flowsheet

mass balance. The selected indexes were the statistics of the Global Test, Nodal Test and Measurement test. Then, the parameter estimation of multivariate empirical models were carried out using the reduced space regression model named Quadratic Partial Least Squares (Q-PLS) technique. The objective of the empirical model is to estimate the gross errors magnitude using the selected indexes. The estimation of the PLS models parameters were carried out, both for measurement bias and equipment leaking, either for single and multiple gross errors. The proposed method, named PMGEI (Predictive Multivariate Gross Error Identification) was compared with the Generalized Likelihood Ratio Test (GLR for measurement error and leaking) and the Nodal Test (NT), for the 16 test problems, using the classical Monte Carlo approach. For multiple gross errors, the proposed method was applied to one literature example and compared with 3 literature methods: unbiased estimation technique, UBET, simultaneous estimation of gross errors, SEGE and GLR method. For single gross errors detection, among the test problems where the proposed method was applied, it presented superior results when comparing with the GLR for measurement error, and equivalent results for leaking detection (with GLR and NT). For multiple gross errors detection where the method was compared, it also presented a superior result for measurement bias and simultaneous bias and leaking identification.

Sumário

Lista de Quadros	xxiii
Lista de Abreviaturas	xxiv
Lista de Símbolos	xxvi
1 Introdução	1
1.1 Água industrial e seu uso racional	1
1.2 Integração de processos, uma ferramenta para a redução do consumo de água na indústria	3
1.3 Objetivos do trabalho	11
1.4 Estrutura da tese	11
2 Revisão Bibliográfica	12
2.1 Coleta de informações de balanços hídricos	12
2.2 Métodos para correção de incoerências em balanços de massa	15
2.3 Reconciliação de Dados e Metrologia	20
2.4 Classificação de variáveis	21
2.5 Erros grosseiros e métodos para detecção e identificação	25
2.5.1 Teste global	29
2.5.2 Teste nodal	31
2.5.3 Teste de medida	32
2.5.4 Teste de razão de verossimilhança generalizada	34
2.5.5 Teste dos componente principais para equipamentos, medidas e global	35
2.5.6 Identificação e localização de erros grosseiros múltiplos usando estratégias simultâneas	36
2.5.6.1 Estratégias usando erros grosseiros individuais	36

2.5.6.2	Estratégias usando hipóteses combinatoriais	37
2.5.6.3	Identificação usando estimação simultânea das magnitudes dos erros grosseiros	37
2.5.7	Identificação e localização de erros de grosseiros múltiplos usando estratégias em série	38
2.5.7.1	Teste de medida iterativo	38
2.5.7.2	Estratégia da compensação serial simples	39
2.5.7.3	Estratégias de combinação de nodos	39
2.5.8	Detectabilidade e identificabilidade de erros grosseiros	40
2.5.9	Medidas de performance das técnicas de detecção de erros grosseiros	41
2.5.9.1	Ferramentas de mineração de dados	42
2.5.10	Métricas para detecção de erros de medição	43
2.6	Contexto do trabalho	43
3	Método Proposto	44
3.1	Visão geral do método proposto	44
3.2	Escolha do método de otimização	47
3.3	Seleção e formulação de estudos de caso	48
3.4	Seleção e cálculos de índices de qualidade do balanço para ajuste do modelo de PLS	51
3.5	Seleção da técnica de ajuste do modelo de DEG	54
3.5.1	Regressão linear múltipla	54
3.5.2	Técnicas de redução de dimensionalidade	55
3.6	Escolha da função objetivo	58
3.7	Escolha das incertezas	60
3.8	Geração e seleção de dados para ajuste dos modelos PLS	67
3.8.1	Geração e seleção de dados com erros puramente aleatórios	67
3.8.2	Geração e seleção de dados com erros grosseiros nos medidores - erros únicos	69
3.8.3	Geração e seleção de dados com erros grosseiros de vazamentos - erros únicos	72

3.8.4	Geração e seleção de dados com erros grosseiros nos medidores e vazamentos - erros múltiplos	74
3.9	Avaliação do método de DEG	75
4	Resultados e Discussões	81
4.1	Obtenção dos resultados	81
4.2	Erros únicos	84
4.2.1	Problema 1	87
4.2.2	Problema 2	89
4.2.3	Problema 3	90
4.2.4	Problema 7	94
4.2.5	Problema 8	96
4.2.6	Problema 9	98
4.2.7	Problema 14	101
4.3	Erros múltiplos	107
4.3.1	Comparação com outros métodos	111
4.4	Considerações finais	117
5	Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros	122
5.1	Conclusões	122
5.1.1	Principais contribuições	122
5.2	Sugestões para trabalhos futuros	123
5.2.1	Publicações geradas ao longo do trabalho	124
A	Resumos dos Artigo Submetidos	126
B	Estimadores Robustos	131
C	Influência dos Desvios Padrões no Poder Total do Teste	132
C.1	Problema 1	132
C.2	Problema 8	137
C.3	Problema 9	144
D	Resultados Completos	152
D.1	Erros Únicos	152

D.1.1	Problema 1	152
D.1.2	Problema 2	153
D.1.3	Problema 3	154
D.1.4	Problema 3 - Incerteza-Padrão = 5 t/h	155
D.1.5	Problema 4	156
D.1.6	Problema 5	157
D.1.7	Problema 6	158
D.1.8	Problema 7	159
D.1.9	Problema 8	160
D.1.10	Problema 9	161
D.1.11	Problema 10	162
D.1.12	Problema 11	163
D.1.13	Problema 12	164
D.1.14	Problema 13	166
D.1.15	Problema 14	168
D.1.16	Problema 14 - Incerteza- Padrão = 2 t/h	170
D.1.17	Problema 15	172
D.1.18	Problema 16	174
D.2	Erros Múltiplos	177
D.2.1	Problema 1	177
D.2.2	Problema 2	178
D.2.3	Problema 3	178
D.2.4	Problema 4	178
D.2.5	Problema 5	179
D.2.6	Problema 6	179
D.2.7	Problema 7	179
D.2.8	Problema 8	180
D.2.9	Problema 9	180
D.2.10	Problema 10	180
D.2.11	Problema 11	181
D.2.12	Problema 12	181
D.2.13	Problema 13	181

D.2.14 Problema 14	182
D.2.15 Problema 15	182
D.2.16 Problema 16	182

Referências Bibliográficas	184
-----------------------------------	------------

Lista de Figuras

1.1 Reúso, regeneração-reciclo, regeneração-reúso e segregação com tratamento distribuído.	5
2.1 Comparação entre estimador de Cauchy (C_C igual a 2,3849, determinado por Özyurt e Pike (2004)) e Mínimos Quadrados Ponderados.	18
2.2 Comparação entre estimador de Lorenz (C_L igual a 2,6, determinado por Özyurt e Pike (2004)) e Mínimos Quadrados Ponderados.	19
2.3 Exemplo de análise de observabilidade e redundância.	22
2.4 Exemplo de graduação da QI	23
2.5 Distribuição Normal com média μ e desvio padrão σ	29
2.6 Esquema para DEG usando o Teste Global.	31
2.7 Esquema para DEG usando o Teste Nodal.	32
2.8 Esquema para DEG usando o Teste de Medida.	33
3.1 Esquema simplificado da metodologia PMGEI visando gerar modelos para prever os erros grosseiros.	45
3.2 Esquema simplificado da aplicação da metodologia PMGEI proposta com os modelos gerados.	46
3.3 Exemplo de processo para elaboração da tabela de mapeamento de índices de qualidade.	52
3.4 Gráfico do OP do MT utilizando o estimador robusto de Cauchy para o Problema 1.	60
3.5 Fluxograma do Problema 9.	61
3.6 Algoritmo para avaliação de técnicas de DEG para erros em medições.	76

3.7	Algoritmo para avaliação das técnicas de DEG para vazamentos em equipamentos.	78
4.1	Fluxograma de processo do Problema 1.	88
4.2	Fluxograma de processo do Problema 2.	89
4.3	Fluxograma de processo do Problema 3.	91
4.4	Fluxograma de processo do Problema 7.	94
4.5	Fluxograma de processo do Problema 8.	97
4.6	Fluxograma de processo do Problema 9.	99
4.7	Fluxograma de processo do Problema 14.	103
4.8	Fluxograma de processo do Problema 15.	110
4.9	Fluxograma de processo do Problema 10.	111

Lista de Tabelas

3.1	Exemplo de tabela de dados usada para estimar os parâmetros de modelos multivariáveis usado pelo método proposto.	45
3.2	Tabela para mapeamento de índices de qualidade.	52
3.3	Tabela para mapeamento de índices de qualidade do exemplo apresentado.	53
3.4	Estatística de Teste de Medida para o Problema 1.	59
3.5	Poder Total (OP) do MT para o Problema 9 usando o estimador de mínimos quadrados ponderados.	61
3.6	Poder Total (OP) do MT para o estimador robusto de Cauchy, usando as incertezas originais.	62
3.7	Poder Total (OP) do MT para o estimador robusto de Cauchy, usando incertezas unitárias em todas as correntes.	63
3.8	Poder Total (OP) do MT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 0,1.	65

3.9	Poder Total (OP) do MT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 5.	65
3.10	Poder Total (OP) do NT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 0,1.	66
3.11	Poder Total (OP) do NT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 5.	66
3.12	Tabela para mapeamento de índices de qualidade para erros puramente aleatórios para um processo com um equipamento e três correntes.	69
3.13	Tabela para mapeamento de índices de qualidade após a geração de dados com erros aleatórios e erros grosseiros nas medições para processo com um equipamento e três correntes.	71
3.14	Tabela para mapeamento de índices de qualidade após a geração de dados com erros aleatórios e erros grosseiros nas medições e vazamentos para processo com um equipamento e três correntes.	74
4.1	Resultados do AVT1, tempo computacional e R^2	86
4.2	Exemplo de tabela de resultados para os problemas com erros únicos de medição.	87
4.3	Exemplo de tabela de resultados para vazamentos	87
4.4	Resultados do Problema 1 para erros grosseiros em medições.	88
4.5	Resultados do Problema 1 para vazamentos.	89
4.6	Resultados do Problema 2 para erros em medições.	90
4.7	Resultados do Problema 2 para vazamentos.	90
4.8	Resultados do Problema 3 para erros em medições.	91
4.9	Resultados do Problema 3 para vazamentos.	92
4.10	Resultados do Problema 3 para erros de medição com incerteza-padrão igual a 0,1 para todas as correntes.	93
4.11	Resultados do Problema 3 para vazamentos com incerteza-padrão igual a 0,1.	93
4.12	Resultados do Problema 7 para erros de medição.	95
4.13	Resultados do Problema 7 para vazamentos.	95

4.14	Resultados dos erros grosseiros de medição para o Problema 7 usando incerteza-padrão de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para todas as correntes.	96
4.15	Resultados de vazamentos para o Problema 7 usando incerteza-padrão de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para todas as correntes.	97
4.16	Resultados do Problema 8 para erros de medição.	98
4.17	Resultados do Problema 8 para vazamentos.	98
4.18	Resultados do Problema 9 para erros de medição.	100
4.19	Resultados do Problema 9 para vazamentos.	100
4.20	Conversão de dados de QI para incertezas-padrão para uso da função objetivo de Cauchy.	102
4.21	Resultados do Problema 14 para erros de medição.	104
4.22	Resultados do Problema 14 para erros de medição com incerteza-padrão igual a 5 t.h^{-1}	105
4.23	Resultados do Problema 14 para vazamentos utilizando incertezas-padrão unitários.	106
4.24	Resultados do Problema 14 para vazamentos e incertezas-padrão de 5 t.h^{-1}	107
4.25	Cenário de distúrbios com erros múltiplos e os resultados dos ajustes dos modelos.	108
4.26	Exemplo de tabela de resultados dos erros grosseiros múltiplos.	109
4.27	Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 15.	110
4.28	Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 10.	111
4.29	Comparação entre OP de diferentes métodos para DEG múltiplos para o Problema 6.	113
4.30	Comparação entre AEE de diferentes métodos para DEG múltiplos para o Problema 6.	115
4.31	Comparação entre OP de diferentes métodos para DEG múltiplos com vazamento para o problema 6.	116
4.32	Comparação entre AEE de diferentes métodos para DEG múltiplos com vazamento para o problema 6.	117
C.1	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	132

C.2	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	132
C.3	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.	133
C.4	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original. . .	133
C.5	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	134
C.6	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	134
C.7	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	135
C.8	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	135
C.9	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.	135
C.10	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária. . .	136
C.11	Poder Total do teste de medida utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	136
C.12	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	136
C.13	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	137
C.14	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	137
C.15	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.	138
C.16	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original. . .	139
C.17	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	139
C.18	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	140
C.20	Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	140
C.19	Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	141

C.21 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.	142
C.22 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária. . .	142
C.23 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	143
C.24 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	144
C.25 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	144
C.26 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.	145
C.27 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.	146
C.28 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original. . .	146
C.29 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	147
C.30 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.	148
C.31 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	148
C.32 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.	149
C.33 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.	150
C.34 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária. . .	150
C.35 Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	151
C.36 Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.	151
D.1 Resultados do Problema 1 para erros em medições.	152
D.2 Resultados do Problema 1 para erros em medições.	152
D.3 Resultados do Problema 2 para erros em medições.	153
D.4 Resultados do Problema 2 para vazamentos.	153
D.5 Resultados do Problema 3 para erros em medições.	154
D.6 Resultados do Problema 3 para vazamentos.	154

D.7 Resultados do Problema 3 para erros de medição com incerteza-padrão padrão igual a 5.	155
D.8 Resultados do Problema 3 para vazamentos com incerteza-padrão padrão igual a 5.	155
D.9 Resultados do Problema 4 para erros de medição.	156
D.10 Resultados do Problema 4 para vazamentos.	156
D.11 Resultados do Problema 5 para erros de medição.	157
D.12 Resultados do Problema 5 para vazamentos.	157
D.13 Resultados do Problema 6 para erros de medição.	158
D.14 Resultados do Problema 6 para vazamentos.	158
D.15 Resultados do Problema 7 para erros de medição.	159
D.16 Resultados do Problema 7 para vazamentos.	159
D.17 Resultados do Problema 8 para erros de medição.	160
D.18 Resultados do Problema 8 para vazamentos.	160
D.19 Resultados do Problema 9 para erros de medição.	161
D.20 Resultados do Problema 9 para vazamentos.	161
D.21 Resultados do Problema 10 para erros de medição.	162
D.22 Resultados do Problema 10 para vazamentos.	163
D.23 Resultados do Problema 11 para erros de medição.	163
D.24 Resultados do Problema 11 para vazamentos.	164
D.25 Resultados do Problema 12 para erros de medição.	164
D.26 Resultados do Problema 12 para vazamentos.	165
D.27 Resultados do Problema 13 para erros de medição.	166
D.28 Resultados do Problema 13 para vazamentos.	167
D.29 Resultados do Problema 14 para erros de medição.	168
D.30 Resultados do Problema 14 para vazamentos.	169
D.31 Resultados do Problema 14 para erros de medição com incerteza-padrão padrão igual a 5 t/h.	170
D.32 Resultados do Problema 14 para vazamentos e incerteza-padrão padrão de 5 t/h.	171
D.33 Resultados do Problema 15 para erros de medição.	172
D.34 Resultados do Problema 15 para erros de medição. Continuação . . .	173

D.35 Resultados do Problema 15 para vazamentos.	173
D.36 Resultados de erros grosseiros de medição para o Problema 16.	174
D.37 Resultados de erros grosseiros de medição para o Problema 16. Con- tinuação	175
D.38 Resultados de vazamentos para o Problema 16.	176
D.39 Cenário de distúrbios com erros múltiplos e os resultados dos ajustes dos modelos.	177
D.40 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 1.	177
D.41 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 2.	178
D.42 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 3.	178
D.43 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 4.	178
D.44 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 5.	179
D.45 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 6.	179
D.46 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 7.	179
D.47 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 8.	180
D.48 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 9.	180
D.49 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 10.	180
D.50 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 11.	181
D.51 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 12.	181
D.52 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 13.	181
D.53 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 14.	182
D.54 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 15.	182
D.55 Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 16.	183

Lista de Quadros

1.1 Maiores geradores de efluentes do Rio Grande do Sul no ano de 2011.	2
1.2 Ganho com a aplicação de ferramentas de integração mássica.	6
1.3 Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais nas indústrias do Estado de São Paulo.	7
1.4 Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais. Continuação	8
1.5 Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais. Continuação	9
2.6 Técnicas de identificação de erros grosseiros e o número de exemplos usados para a testar as mesmas.	27
4.7 Técnicas de identificação de erros grosseiros e o número de exemplos usadas para teste das mesmas.	119

Lista de Abreviaturas

AEE	Erro Médio de Estimação de Erro Grosseiro
AIC	Critério de Informação de Akaike
AVT1	Média dos Erros Estatísticos Tipo I
DEG	Detecção de Erro Grosseiro
DMT	Teste de Medida Dinâmico
DP	Desvio Padrão
EMT	Teste de Medida Estendido
GLR	Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada
GT	Teste Global
IMT	Teste de Medida Iterativo
MGLR	Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada Modificado
MI	Mista-Inteira
MQP	Mínimos Quadrados Ponderados
MSEGE	Técnica de Estimação de Erros Grosseiros Simultâneos Modificada
MT	Teste de Medida
MUBET	Técnica de Estimação Não-Tendenciosa Modificada
NIPALS	PLS Não-Linear Iterativo
NT	Teste Nodal

OP	Poder Total
PCA	Análise dos Componentes Principais
PCR	Regressão por Componentes Principais
PLS	Mínimos Quadrados Parciais
PMGEI	Identificação de Erros Grosseiros por Predição Multivariável
QI	Qualidade da Informação
RD	Reconciliação de Dados
SEGE	Estimação de Erros Grosseiros Simultâneos
UBET	Técnica de Estimação Não-Tendenciosa

Lista de Símbolos

C_C	Constante do estimador robusto de Cauchy
C_L	Constante do estimador robusto de Lorenz
H_0, H_1	Hipóteses para testes estatísticos
NA	Número de simulações no conjunto de geração de dados com erros puramente aleatórios
NB	Número de simulações no conjunto de geração de dados com erros grosseiros em medidas
NS	Número de simulações
NST	Número de simulações no conjunto de testes
NV	Número de simulações no conjunto de geração de dados com vazamentos
QI_i	Coefficiente de qualidade da informação relativa à medição i
R^2	Coefficiente de determinação de ajuste de um modelo empírico
VM_i	Vazão mapeada da corrente i
VR_i	Vazão reconciliada da corrente i
$V_{j,j}$	Elemento j,j , ou seja, da diagonal, da matriz \mathbf{V}
Δ_{bias}	Intervalo entre os valores superiores e inferiores dos erros de medição
Δ_{leak}	Intervalo entre os limites inferiores e superiores para os vazamentos

Σ	Matriz variância-covariância das medições
α	Significância estatística para o teste global, de medição ou teste nodal
α_i	Constante da expressão do QI em função da incerteza
χ^2	Teste Chi-Quadrado
$\chi^2_{(1-\alpha, \nu)}$	Valor crítico do teste χ^2 com significância α e ν graus de liberdade
δ	Erro sistemáticos de medição
$\delta_{i, ns}$	Erro de medição a ser adicionado na medição i na simulação ns
$\delta_{j, ns}^r$	Erro grosseiro no equipamento j na simulação ns
$\dot{m}_{i, entra}$	Vazão mássica que entra em um equipamento de processo
$\dot{m}_{j, sai}$	Vazão mássica que sai de um equipamento de processo
ϵ_r	Erro aleatório da medição
$\epsilon_{i, ns}$	Erro aleatório para a medida i na simulação ns
γ	Valor da estatística de teste do Teste Global
γ_k	Estatística de teste usada no teste de componentes principais baseada no balanço global
$\hat{\mathbf{b}}$	Vetor de parâmetros do modelo multivariável
$\hat{\mathbf{X}}_a$	Decomposição da matriz $\hat{\mathbf{X}}$ em suas sub matrizes não colineares
$\hat{\mathbf{X}}$	Vetor das variáveis independentes
$\hat{\mathbf{Y}}$	Vetor das variáveis dependentes
\hat{b}_i	Parâmetro do modelo multivariável
\hat{x}_k	Valor da variável independente k em uma regressão múltipla

$\hat{x}_{i,k}$	Valor da variável independente medida k no experimento i em uma regressão múltipla
\hat{y}_k	Valor da variável dependente k em uma regressão múltipla
A	Matriz de Incidência (matriz Jacobiana das restrições)
V	Matriz de variância-covariância dos resíduos, R
W	Inverso da matriz Σ
ϵ_r	Vetor de erro aleatório da medição
$\bar{\mathbf{X}}_{NOM}$	Vetor das vazões nominais do processo
\mathbf{m}_j	Vetor com valor 1 na posição j do vazamento e zero nas demais posições do teste GLR
μ	Média da distribuição Normal
ν	Graus de liberdade do Teste Chi-Quadrado
$\bar{\mathbf{W}}$	Matriz Variância-Covariância dos ajustes
$\bar{w}_{i,i}$	Elemento i,i da matriz $\bar{\mathbf{W}}$
$\bar{x}_{NOM,i}$	Valor da vazão nominal i na simulação ns
\bar{x}_{NOM}	Valor real da variável tomada pelo instrumento
ρ	Função objetivo genérica da reconciliação de dados
σ_i	Desvio-padrão dos dados de medição i
Ad	Vetor dos ajustes
F(X)	Vetor das restrições do processo relacionado com balanços de massa energia e quantidade de movimento
R	Vetor dos resíduos do Balanço de Massa
\mathbf{W}_a	Autovetores da matriz $\bar{\mathbf{W}}$ do teste de componentes principais das medições

\mathbf{W}_r	Autovetores da matriz \mathbf{V} do teste de componentes principais dos resíduos
\mathbf{X}	Vetor da medições reconciliadas
\mathbf{Y}	Vetor das medições
\mathbf{e}_i	Vetor com valor 1 na posição i do erro de medição e zero nas demais posições do teste GLR
\mathbf{f}	Vetor de assinatura do erro do teste GLR
\mathbf{g}	Vetor de parâmetros da regressão de componentes principais (PCR)
\mathbf{p}_{ai}	Vetor de componentes principais das medidas
\mathbf{p}_n	<i>loading vectors</i> da decomposição em componentes principais
\mathbf{p}_r	Vetor de componentes principais dos resíduos das restrições
\mathbf{t}_n	<i>score vectors</i> da decomposição em componentes principais
u_{x_i}	Incerteza-padrão da variável reconciliada i
ε_i	Diferença entre a variável medida e reconciliada, ponderada pelo inverso do desvio-padrão.
ad_i	Ajuste entre a medida y_i e a variável reconciliada x_i
b	Magnitude do erro grosseiro (medição ou vazamento) do teste GLR (escalar)
$bias_{lower}$	Limite inferior para o erro grosseiro de medição
$bias_{upper}$	Limite superior para o erro grosseiro de medição
l, up	Fator multiplicativo para o limite inferior e superior do erro grosseiro de medição das simulações, respectivamente
l_j^r, up_j^r	Fator multiplicativo para o limite inferior e superior do vazamento das simulações, respectivamente

$leak_{lower}$	Limite inferior para os vazamentos
$leak_{upper}$	Limite superior para os vazamentos
nc	Número de correntes
ne	Número de equipamentos
$r_{j,ns}$	Resíduo do equipamento j na simulação ns
r_j	Resíduo do balanço j (linha j do vetor \mathbf{R})
u	Incerteza-padrão
u_c	Incerteza-padrão combinada
u_i	Incerteza-padrão da variável i
$u_{c,i}$	Incerteza-padrão combinada da variável i
x_i	Valor reconciliado da medida i
$x_{i,max}$	Limite superior da variável reconciliada x_i
$x_{i,min}$	Limite inferior da variável reconciliada x_i
y_i	Medição i
y_m	Valor mais provável da medição
$y_{i,ns}$	Valor da medição i na simulação ns
$z_{a,c}$	Valor crítico do teste de medição da corrente i
$z_{a,i}$	Valor da estatística de teste do Teste de Medida da corrente i
$z_{am,i}$	Valor da estatística de teste do Teste de Medida modificado da corrente i
$z_{r,c}$	Valor crítico do teste de vazamento do equipamento j
$z_{r,j}$	Valor da estatística de teste do Teste Nodal do equipamento j
$z_{rm,j}$	Valor da estatística de teste do Teste Nodal modificado do equipamento j

Capítulo 1

Introdução

1.1 Água industrial e seu uso racional

Economicamente, a água é uma matéria-prima estratégica na agricultura e indústria (VALLE, 2005; CANADA, 2009; Van Der Leeden et al., 1990; AUSTRALIA, 2006; KENNY et al., 2009; EUROPEAN COMMISSION, 2010; UNITED KINGDON, 2011). Na indústria, empresas de transformação dos setores de química, petroquímica e de alimentos, utilizam grandes volumes deste recurso e também são os principais agentes poluidores, como pode ser comprovado através de um estudo da Fundação Estadual de Proteção Ambiental do Rio Grande do Sul(FEPAM, 2001), apresentado na Quadro 1.1 .

Quadro 1.1: Maiores geradores de efluentes do Rio Grande do Sul no ano de 2011.

Indústria	Setor	Vazão (m ³ .dia ⁻¹)
Riocell S/A (Atual Aracruz)	Papel e Celulose	31200
Gerdau S/A	Metalúrgica	10200
REFAP S/A	Petroquímica	9431
Bunge Alimentos - Proteína Atual Solae	Alimentos	8800
Celulose Cambará	Papel e Celulose	7325
Cervejaria Brahma	Alimentos	7280
Fabrica de Papel Santa Therezinha	Papel e Celulose	5760
COPEL (atual Braskem UNIB Triunfo)	Petroquímica	5540
	Total	85536

Fonte: (FEPAM, 2001)

A solução do problema de poluição dos corpos hídricos por parte da indústria é de grande complexidade, porém existem ferramentas para a minimização do uso da água e despejo de efluentes líquidos (MIRRE et al., 2009; MANN; LIU, 1999; EL-HALWAGI, 1997; SMITH, 2005; ALMATO et al., 1997; BAGAJEWICZ et al., 2002; BAGAJEWICZ, 2000; JODICKE et al., 2001). Para resolver tal problema com qualquer metodologia de minimização do uso de água, é necessário o conhecimento prévio do balanço hídrico industrial, como sua rede de conexões, vazões e cargas de poluentes. Além disso, muitas oportunidades para a redução do consumo de água e redução da geração de efluentes líquidos podem ser avaliadas sem a aplicação desse tipo de metodologia de minimização, porém, é necessário informações confiáveis sobre o balanço hídrico. De posse de informações apropriadas do balanço hídrico, diversas respostas podem ser fornecidas à equipe de processos, entre elas:

- Existem pontos de perdas ou vazamentos no sistema?

- Existem falhas na instrumentação de medição?
- Em qual faixa de eficiência o equipamento está operando?
- Qual o equipamento *gargalo* do sistema?
- Como distúrbios de vazão e composição se propagam no circuito?
- Qual o período de maior e menor demanda de água?
- Qual o melhor momento de troca de um equipamento para manutenção?
- Qual o melhor ponto para adicionar novos instrumentos de medição?
- Qual a margem que o processo deve operar para que as emissões de poluentes não ultrapassem os limites exigidos pela legislação ambiental?
- Qual a melhor forma de minimizar ou reaproveitar o uso da água no sistema?

No que diz respeito a metodologias disponíveis para a atenuação do problema de consumo e descarte excessivo de água na indústria, as mais recomendadas são as que utilizam os princípios da produção limpa¹, citadas na próxima seção, embora atualmente as mais utilizadas são as soluções de fim-de-tubo².

1.2 Integração de processos, uma ferramenta para a redução do consumo de água na indústria

O uso racional da água na indústria vem sendo estudado na área de engenharia química desde a década de 80. Diversas ferramentas para produção limpa estão disponíveis na literatura, entre as quais, a integração de processos, que merece destaque. A integração mássica de processos consiste no reúso de efluentes das unidades geradoras com o objetivo de reaproveitar as correntes com algum potencial para transferir massa, ou seja, receber carga poluidora, antes do descarte. Utilizando

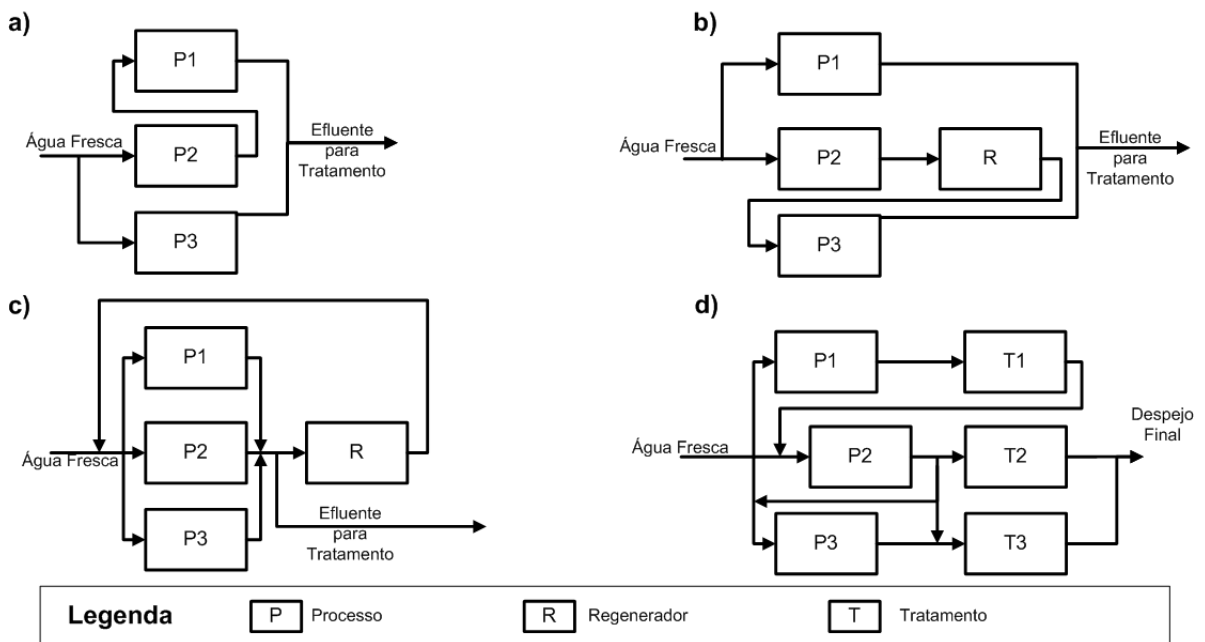
¹Ações preventivas que buscam evitar a geração de resíduos por meio do aproveitamento máximo das matérias-primas utilizadas durante o processo produtivo (CNTL, 2003).

²Ações que diminuem o impacto ambiental de resíduos ou dão-lhes disposição final (CNTL, 2003). Exemplo: tratamento de efluentes ou disposição de resíduos sólidos em aterros sanitários.

os princípios de integração mássica, diversas técnicas podem ser utilizadas com o intuito de minimizar o uso de águas industriais, entre elas:

- Reúso: Efluentes de processos podem ser reutilizados diretamente em outras unidades em que o nível de poluente não interfere nas operações dos equipamentos da unidade, apresentada na Figura 1.1.a.
- Regeneração-reúso: Efluentes de processos podem ser regenerados através do tratamento parcial ou total para remoção de poluentes, para então serem reutilizados em outras unidades, apresentada na Figura 1.1.b.
- Regeneração-reciclo: Efluentes de processos podem ser regenerados através do tratamento parcial ou total para remoção de poluentes para serem reciclados na mesma unidade, apresentada na Figura 1.1.c.
- Segregação: Consiste, simplesmente, em evitar a mistura de correntes. Com a segregação é possível alocar as unidades de tratamento de efluentes mais próximo a sua fonte geradora, denominado tratamento distribuído, conforme a característica do efluente em relação ao tipo de contaminante, concentração, etc. A segregação quando aplicada em conjunto com o tratamento distribuído pode permitir o reaproveitamento de uma corrente de processo como nas técnicas de regeneração-reúso e regeneração-reciclo. A segregação de correntes com diferentes composições, apresentada na Figura 1.1.d, também evita diluições desnecessárias, reduzindo o custo de remoção de poluente a partir de uma corrente mais concentrada.

Figura 1.1: Reúso, regeneração-reciclo, regeneração-reúso e segregação com tratamento distribuído.



Fonte: Próprio autor

Existem ganhos econômicos significativos quando se realiza a implementação prática de técnicas de reúso de águas e efluentes industriais, conforme apresentado na Quadro 1.2. A Federação das Indústrias do Estado de São Paulo, FIESP, promove anualmente um concurso para estimular a conservação de recursos hídricos industriais nesse Estado, sendo os principais casos de sucesso apresentados em seu sítio na internet (FIESP, 2013), e compilados na Quadro 1.3, Quadro 1.4 e Quadro 1.5. A redução de uso de água e descarte de efluentes apresentados nas tabelas previamente mencionadas poderiam ser resultantes da redução da produção das indústrias desses segmentos, porém, de acordo com dados de ABIQUIM (2013) a indústria química brasileira registrou um crescimento de 29,6 % entre os anos de 2010 e 2012, logo, os valores apresentados nas tabelas mencionadas são reduções reais devido a aplicações das técnicas de reaproveitamento de águas ou efluentes.

Quadro 1.2: Ganho com a aplicação de ferramentas de integração mássica.

Fonte	Área	Insumo	Economia(%)
Fontana (2002)	Teórico	Água	89
Farenzena et al. (2004)	Curtumes	Água	69
Raghava Rao et al. (2003)	Curtumes	Água e Insumos	60% de água e 24% de insumos
Aquim (2009)	Curtumes	Água	34
Mann e Liu (1999)	Petroquímica	Água	17
El-Halwagi e Manousiouthakis (1989)	Petroquímica	Água	58
El-Halwagi (1997)	Petroquímica	Água	60
Wang e Smith (1994)	Teórico	Água	58
Grande e Sales (2008)	Celulose e Papel	Água e Efluentes	10% de água e 14% de efluentes
Cunha et al. (2008)	Petroquímica	Efluentes	48
Hoinkis e Panten (2008)	Têxtil	Água	90
Shukla et al. (2011)	Papel	Água e Efluentes	42 71
Tokos et al. (2012)	Alimentos	Água	37
Khor et al. (2012)	Petroquímica	Efluentes	32
Kiperstok et al. (2013b)	Petroquímica	Água	20
Kiperstok et al. (2013b)	Petroquímica	Efluentes	40
Kiperstok et al. (2013b)	Petroquímica	Água	42
Thevendiraraj et al. (2003)	Alimentos	Água	30
Gomes (2002)	Teórico	Água	37

Fonte: Próprio autor

Quadro 1.3: Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais nas indústrias do Estado de São Paulo.

Empresa	Ramo	Insumo	Economia %
3M do Brasil	Químicos	Água	25
		Insumos	44
		Efluentes	33
AGCO Corporation	Mecânico	Efluentes	36
All Washed Lavanderia Industrial	Lavanderia	Água	50
		Efluentes	80
AmBev	Alimentos	Água	14
ArcelorMittal Brasil	Siderurgia	Água	20
Baxter hospitalar	Médico-Hospitalar	Água	70
Brasilit Ind. e Comp.	Construção Civil	Água	34
Braskem	Químicos	Água	85
		Efluentes	50
BSH Continental Eletrodomésticos	Eletrodomésticos	Efluentes	30
		Água	30
Cabot Brasil Ind. E Com.	Químicos	Água	30
Cargill Agrícola	Alimentos	Efluentes	20
Cargill Agrícola	Alimentos	Efluentes	29
Caterpillar	Mecânico	Água	60
Cebrace Cristal Plano	Transformação	Água	10
		Efluentes	47
Copebrás	Químicos	Água	81
Cosipa	Siderurgia	Água	96
Covolán Indústria Têxtil	Têxtil	Água	70
Dana Indústrias	Mecânico	Água	26
		Efluentes	28
Dedini Indústrias de Base	Fundição	Água	30

Continua

Quadro 1.4: Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais. Continuação

Empresa	Ramo	Insumo	Economia %
Elekeiroz	Químicos	Água	2
Electrolux do Brasil	Eletrodomésticos	Água	9
Eluma Ind. e Com.	Metalurgia	Efluentes	98
Emicol Eletrônica	Eletroeletrônico	Água	70
Destilaria Alcídia	Eletroeletrônico	Água	80
Geni Porcelana	Cerâmicos	Água	50
Gnatus Equip. Médicos Odontológicos	Médico-Hospitalar	Água	70
		Efluentes	85
Ind. Mineradora Pagliato	Químicos	Água	15
Iochpe-Maxion	Mecânico	Água	59
		Efluentes	60
Kimberly Clark Brasil	Papel	Água	50
Logictel	Telecomunicações	Água	93
Lwarcel Celulose e Papel	Papel	Água	43
Mahle Metal Leve	Mecânico	Água	40
Metalúrgica Inca	Metalurgia	Água	89
Metalúrgica Inca	Metalurgia	Água	90
Metalúrgica Inca	Metalurgia	Água	84
MWM International Ind. de Motores	Mecânico	Água	19
Nestlé Brasil	Alimentos	Água	23
Opersan Resíduos Ind.	Tratamento de efluentes	Água	22
		Efluentes	6
Orsa Celulose Papel e Embalagens	Papel	Água	75
Panozon Ambiental	Têxtil	Água	90
Papirus Ind. de Papel	Papel	Água	17
Refinaria de Paulínia	Petroquímica	Água	38
Pirelli Pneus	Transformação	Água	35

Continua

Quadro 1.5: Redução de consumo de água e descarte de efluentes obtida com técnicas de reúso de águas industriais. Continuação

Empresa	Ramo	Insumo	Economia %
Saint-Gobain-Brasilit	Transformação	Água	34
Sanofi-Aventis Farmacêutica	Farmacêutica	Água	20
Santista Têxtil Brasil	Têxtil	Água	25
		Efluentes	21
São Carlos S/A Ind. de Papel e Embalagens	Papel	Água	70
		Efluentes	70
Spal Ind. Brasileira de Bebidas	Alimentos	Água	75
Termogal Tratamento de Superfícies	Metalurgia	Água	95
Uniforme Lavanderia e Locação	Lavanderia industrial	Água	25
Unilever Brasil	Domissanitários	Efluentes	60
Usina Colombo Açúcar e Alcool	Sucroalcooleiro	Água	15
Valeo Sistemas Automotivos	Mecânico	Água	52
Voltra Brasil	Mecânico	Água	22
Votorantim Celulose e Papel	Celulose e papel	Água	86
White Martins Gases Industriais	Química	Água	22

Fonte: Próprio autor

Para aplicar ferramentas de reaproveitamento de água (KIPERSTOK et al., 2013b; KIPERSTOK et al., 2013a; MIRRE et al., 2009), é necessário que informações a respeito de seu uso sejam conhecidas, entre elas:

- Conexão entre os equipamentos;
- Vazão mássica ou volumétrica das correntes e dos equipamentos;
- Carga de poluentes gerada por cada equipamento;
- Limites máximos e mínimos de vazão das correntes;
- Limites máximos e mínimos de vazão na entrada ou saída dos equipamentos;

- Limites máximos e mínimos de concentração de poluentes na entrada ou saída dos equipamentos;
- Perdas para o meio ambiente, se existirem;
- Custos de novas conexões;
- Custo de instalação de novos equipamentos.

A falta de algumas destas informações, como, por exemplo, a vazão das correntes ou equipamentos, dificulta, ou pode inviabilizar, a aplicação direta de metodologias de reaproveitamento de águas industriais, sendo necessário o uso de outros métodos para avaliar o balanço mássico da unidade industrial. Além disso, é necessário que as informações mencionadas anteriormente tenham a melhor qualidade possível, sendo que a confiabilidade e a robustez da rede de reaproveitamento resultante está diretamente relacionada à qualidade das informações disponíveis. Kiperstok et al. (2013b) apresenta diversos estudos de casos industriais visando a minimização de uso e descarte de águas, onde salienta que medições de vazão e composição do circuito de uso da água em tais casos eram escassas ou inexistentes. O problema de falta ou baixa qualidade de informações de balanços hídricos tem sua origem na conjuntura histórica da concepção dos processos químicos: no Brasil, as plantas industriais atuais foram concebidas na década de 60 e 70, quando a água era considerada um recurso abundante e o investimento em redes de monitoramento do uso da água era visto como um gasto desnecessário. A falta de manutenção apropriada das redes de medição de água também levam à degradação da informação do circuito de uso de água prejudicando a aplicação de metodologias de minimização de consumo de água.

De forma resumida, o presente trabalho busca abordar o problema da falta ou baixa qualidade de informações relativas à balanços hídricos industriais e está inserido no contexto de desenvolvimento de técnicas de avaliação de balanços hídricos industriais.

1.3 Objetivos do trabalho

O presente trabalho tem como objetivo propor uma metodologia para realizar a avaliação e monitoramento de sistemas de medição de vazão total de água em indústrias de processos em estado estacionário. Os objetivos específicos do presente trabalho são:

- 1 Seleção de índices para acompanhamento do sistema de medição de vazão total de águas em plantas industriais.
- 2 Desenvolvimento de uma metodologia que, baseado nos índices selecionados, e, atuando em conjunto com modelos preditivos, seja capaz de indicar os sensores com falhas e detectar vazamentos em equipamentos de processo.

1.4 Estrutura da tese

Esta tese está dividida em cinco capítulos, arranjos da seguinte forma: No presente capítulo, é apresentado o problema, a motivação para o estudo do tema e os objetivos a serem abordados neste trabalho.

No Capítulo 2 são apresentadas as bases das teorias para avaliação de balanços mássicos: reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros, além das variantes e limitações destas técnicas.

No Capítulo 3 é apresentada a metodologia proposta para avaliação de balanços hídricos e detecção de erros nos mesmos.

No Capítulo 4 são avaliados os resultados do método proposto a partir da aplicação do mesmo em 16 problemas testes. Ao longo dos resultados, também são discutidas algumas particularidades relativas a cada problema.

No Capítulo 5 são apresentadas as principais conclusões deste trabalho, as publicações desenvolvidas a partir do mesmo e sugestões para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Coleta de informações de balanços hídricos

Conforme mencionado no capítulo introdutório, a coleta de informações sobre balanços hídricos para a aplicação de metodologias de minimização do uso de águas industriais passa por diversas dificuldades, desde a falta de informações até a baixa confiabilidade nos dados do processos. Devido à complexidade de alguns segmentos fabris, a simples coleta e levantamento dos equipamentos e correntes relacionadas aos balanços hídricos é uma tarefa de difícil execução, pois, é necessária uma grande interação com a equipe de engenharia e operação da planta para o levantamento de tais informações, tanto em nível técnico quanto em nível gerencial. Como exemplo, podemos citar as tarefas chave usadas por Mann e Liu (1999) em seus 5 trabalhos de aplicação do método do *Pinch* de água em complexos químicos em Taiwan de 1996 a 1997. Tais tarefas são descritas abaixo:

- 1 Selecionar a unidade industrial para o projeto;
 - 1.a Divulgar os objetivos do projeto para as unidades industriais interessadas;
 - 1.b Organizar um comitê diretor para o projeto em cada unidade industrial interessada;
 - 1.c Desenvolver um programa de incentivos para promover o sucesso do projeto nas unidades industriais interessadas;
- 2 Ajudar as unidades industriais na coleta de dado;

- 2.a Compilar e completar o diagrama de tubulação e instrumentação do circuito de uso de água;
- 2.b Pesquisar as fontes de água e pontos de uso (demanda e suprimento) de acordo com a categoria do processo ;
- 3 Identificar os potenciais de reúso de água e sua classificação de prioridade conforme determinado pelo comitê diretor;
 - 3.a Consultas entre os membros do comitê diretor do projeto para identificar os potenciais de reúso de água;
 - 3.b Classificação de importância das opções identificadas;
- 4 Medição das vazões e padrões de qualidade das fontes e pontos de uso;
- 5 Desenvolver as propostas de reúso de água baseadas em técnicas sistemáticas em conjunto com a experiência da equipe de engenharia;
 - 5.a Aplicação de métodos como diagrama de fontes de água, *Pinch* para água, programação matemática, entre outros;
 - 5.b Evolução dos resultados obtidos anteriormente com a experiência da equipe de engenharia;
- 6 Executar o projeto de engenharia preliminar e avaliação econômica das propostas;
 - 6.a Projeto de engenharia preliminar da nova rede de reúso proposta e das mudanças estruturais necessárias em outros equipamentos de processo;
 - 6.b Análise dos benefícios econômicos diretos e indiretos, com o uso de indicadores econômicos, como Valor Presente Líquido, Taxa Interna de Retorno, entre outros;
- 7 Detalhamento técnico final da nova rede de reúso e demais modificações necessárias;
- 8 Implementação detalhada da nova rede de reúso e demais modificações necessárias;

- 8.a Auxiliar os trabalhos da equipe de engenharia e a partida das unidades que farão uso da água de reúso;
- 8.b Acompanhamento dos benefícios econômicos e operacionais;
- 9 Divulgação dos resultados;
 - 9.a Publicação de relatórios e documentos com a experiência dos projetos;
 - 9.b Patrocínio de eventos relacionados à área de reúso de águas e apresentação dos resultados nos mesmos.

Também cabe citar a sistemática usada pela Rede de Tecnologias Limpas da Bahia (TECLIM) desenvolvida com base em 13 trabalhos na área ambiental em complexos químicos na região de Salvador. As 9 etapas da técnica denominada 'Auditoria de Fontes de Alimentação de Efluentes' (OLIVEIRA, 2011) são:

- 1 Caracterização das regiões próximas às fontes geradoras;
- 2 Avaliação das condições de amostragem quanto a distúrbios que possam mascarar resultados;
- 3 Levantamento das vazões medidas e estimadas de efluentes;
- 4 Amostragem das canaletas e bacias do sistema de efluentes orgânicos;
- 5 Análise das amostras coletadas nas canaletas e bacias de efluentes;
- 6 Realização do balanço de massa das correntes;
- 7 Cálculo do acúmulo de orgânicos sólidos na bacia de efluentes;
- 8 Análise dos dados;
- 9 Elaboração de programas de ação.

Além disso, Kiperstok et al. (2013b), Kiperstok et al. (2013a) apresentaram as principais etapas e dificuldades para aplicação de técnicas de uso racional de água na indústria petroquímica, destacando a importância da coleta e análise sistemática de dados de processo para esse fim. Nesse mesmo trabalho, são apresentadas as

ferramentas gerenciais e técnicas desenvolvidas ao longo de 11 anos de atuação em projetos com empresas do ramo petroquímico.

Nesse contexto, é importante salientar o papel fundamental da elaboração correta dos balanços hídricos industriais para aplicação de qualquer metodologia de otimização ambiental dos mesmos.

2.2 Métodos para correção de incoerências em balanços de massa

Após o levantamento topológico e das vazões das correntes e equipamentos de processo, é necessário testar os balanços materiais e as medições. O teste se faz necessário, pois, em muitos casos, onde as medições de processo estão presentes, frequentemente são encontradas incoerências nos balanços mássicos quando calculados a partir de medições. A principal fonte de incoerência no balanço mássico é a própria precisão do equipamento de medição, porém, é possível que o mesmo apresente alguma falha, ou ainda, exista um vazamento material em algum ponto do sistema. Para melhor compreender o papel da medição na detecção de incoerências em balanços de massa, é apresentado o conceito de medição segundo Romagnoli e Sánchez (1999):

$$y = \bar{x}_{NOM} + \epsilon_r + \delta, \quad y \in \mathbb{R}, \quad \bar{x}_{NOM} \in \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

em que y é o valor da medição, \bar{x}_{NOM} é o valor real da variável tomada pelo instrumento, ϵ_r é o erro aleatório da medição e δ é o erro sistemático da medição. Os erros aleatórios implicam que a magnitude e o sinal do erro de cada repetição não podem ser previstos, sendo a mesma caracterizada por uma variável aleatória a qual segue uma função de densidade de probabilidade (FDP). Em condições normais, estes tipos de erros não podem ser removidos e não são desejáveis, porém, é possível aplicar técnicas de filtragem por equipamentos ou por programas de computador. Os erros sistemáticos são causados por eventos não aleatórios como um defeito no instrumento de medição, instrumento mal calibrado, por corrosão, deformação mecânica ou más condições de operação, e tem, a cada repetição da

medida, sinal previsível e também não são desejáveis. Os erros sistemáticos são chamados, por diversos autores, de erros grosseiros, o qual não está de acordo com os preceitos da Metrologia, porém, como a literatura especializada em estudo de falhas em balanços e instrumento de medição de processos químicos industriais usa ambas como sinônimos, esta equivalência de terminologia será adotada neste trabalho. Em processos industriais, deseja-se detectar os efeitos dos erros grosseiros para acionar procedimentos de manutenção e manter as informações do processo sempre em níveis confiáveis. Na prática, busca-se sempre isolar os efeitos dos erros aleatórios e grosseiros e, para distinguí-los, aplicam-se técnicas matemáticas conhecidas como reconciliação de dados (RD) e detecção de erros grosseiros (DEG) descritas em detalhes a seguir.

Como todo processo químico, balanços hídricos seguem relações de conservação de massa, e podem ser considerados em estado estacionário e sem reações químicas, conforme:

$$\sum_{i=1}^n \dot{m}_{i,entra} = \sum_{j=1}^{n'} \dot{m}_{j,sai}, \quad (2.2)$$

em que $\dot{m}_{i,entra}$ são as vazões das correntes que entram no equipamento e $\dot{m}_{j,sai}$ as vazões das correntes j que saem do equipamento. Embora trivial, o modelo de conservação de massa é usado como base para corrigir as vazões de entrada e saída dos equipamentos através da técnica de reconciliação de dados. Quando combinadas com outras técnicas estatísticas, a reconciliação de dados pode ser usada para detecção de incoerências maiores em balanços, como, por exemplo, vazamentos em equipamentos ou falhas em instrumentos de medição.

A reconciliação de dados pode ser formulada como um problema de otimização com restrições, onde essas últimas provêm da termodinâmica, balanços de massa, energia ou quantidade de movimento do sistema em estudo. A função objetivo da otimização é a minimização do erro quadrático entre as variáveis medidas e reconciliadas, multiplicado pelo inverso da variância das medidas (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000), conhecida, também, como estimador de mínimos quadrados

ponderados (MQP), conforme:

$$\left\{ \begin{array}{l} \min_{x_i \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{y_i - x_i}{\sigma_i} \right)^2 \\ \text{sujeito a} \\ \mathbf{F}(\mathbf{X}) = 0 \\ x_{i_{min}} \leq x_i \leq x_{i_{max}}, \end{array} \right. \quad (2.3)$$

em que σ_i é o desvio-padrão das vazões medidas, y_i são as vazões medidas, x_i são as vazões reconciliadas, $x_{i_{min}}$ são os limites inferiores das vazões reconciliadas, $x_{i_{max}}$ são os limites superiores das vazões reconciliadas e $\mathbf{F}(\mathbf{X})$ são as restrições impostas pela termodinâmica, balanços de massa, energia e quantidade de movimento. Mais especificamente para balanços hídricos industriais, abordado no presente trabalho, as equações de restrições, $\mathbf{F}(\mathbf{X})$, são os balanços de vazão total em base mássica ou volumétrica. Como resultado da resolução do problema de RD, as variáveis reconciliadas, x_i , são ajustadas de forma ponderada pelo inverso de seu desvio-padrão, respeitando as equações de restrição. Note que, medições com o módulo de suas magnitudes muito elevadas, que podem ser indicativos de erros grosseiros, fazem com que as variáveis reconciliadas sofram um grande ajuste em relação ao seu valor medido, y_i , para minimizar esses desvios. Considerando que na RD, as variáveis estão conectadas pelos balanços de massa, o ajuste das variáveis reconciliadas, x_i , acaba afetando o valor final das demais variáveis, sendo esse efeito é denominado pela literatura como efeito de espalhamento ou *smearing*. Segundo Özyurt e Pike (2004), na presença de erros grosseiros ou quando a distribuição dos erros de medição não seguem a distribuição Normal, outros estimadores podem ser mais adequados. Os estimadores robustos são funções objetivo que reduzem o efeito dos erros grosseiros no problema de reconciliação de dados, amortecendo o valor das variáveis ajustadas à medida que a mesma aumenta, reduzindo o efeito do espalhamento e tornando mais confiáveis os resultados da RD mesmo na presença de erros grosseiros. Özyurt e Pike (2004) usaram diversos estimadores robustos para RD e GED, sendo os mesmos apresentados nas equações seguintes. Para apresentar os estimadores robustos, seja o regressor genérico:

$$\varepsilon_i = \left(\frac{y_i - x_i}{\sigma_i} \right), \quad (2.4)$$

em que y_i é o valor da medida i e x_i é o valor da medição i reconciliada. A equação regressora genérica, $\rho(\varepsilon_i)$, é definida para cada estimador. O estimador padrão de mínimos quadrados ponderados é definido da seguinte forma:

$$\rho(\varepsilon_i) = \frac{1}{2}\varepsilon_i^2, \quad (2.5)$$

já o estimador robusto de Cauchy é assim definido:

$$\rho(\varepsilon_i) = C_C^2 \ln \left(1 + \frac{\varepsilon_i^2}{C_C^2} \right), \quad (2.6)$$

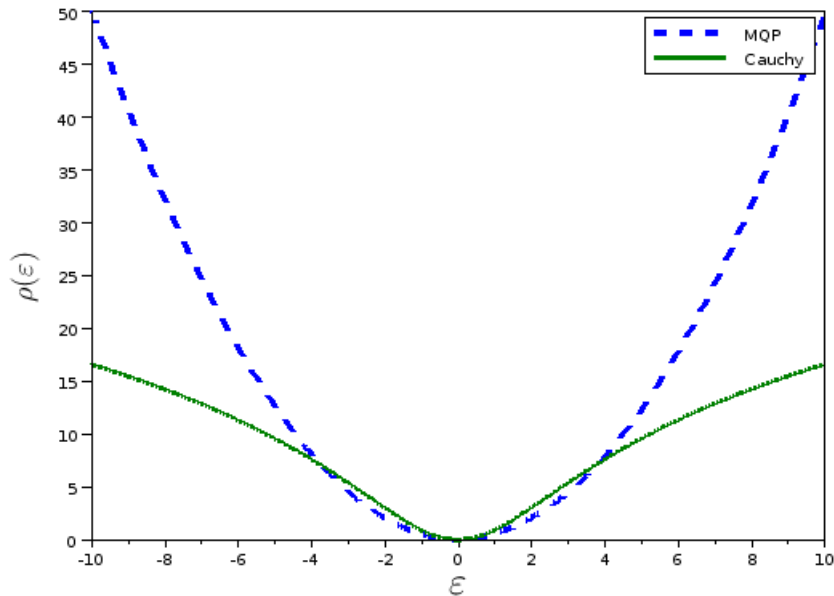
enquanto que o estimador robusto de Lorenz é definido como:

$$\rho(\varepsilon_i) = -\frac{1}{1 + \left(\frac{\varepsilon_i^2}{2C_L^2} \right)}, \quad (2.7)$$

em que C_C e C_L são parâmetros das funções.

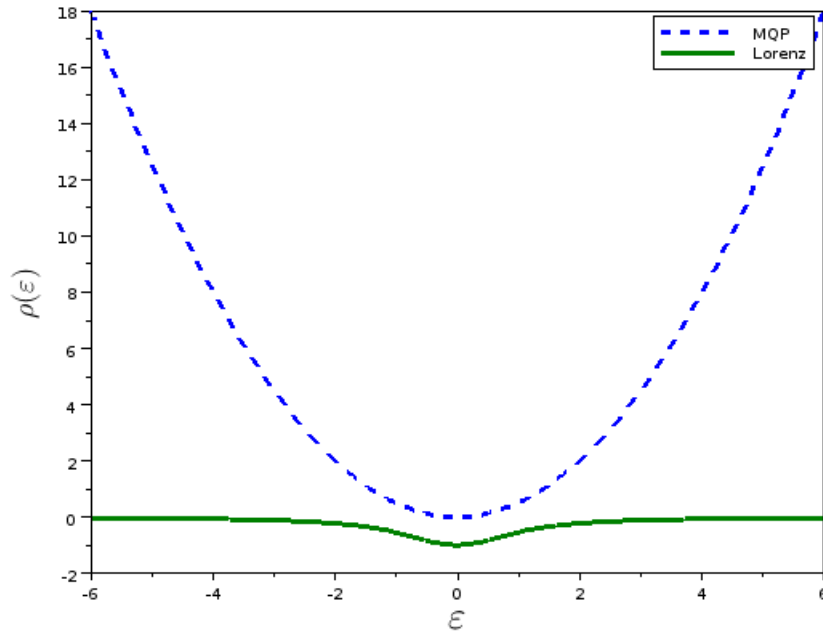
Para entender melhor o efeito dos estimadores robustos sobre o erro, são apresentados um gráfico de ρ em função do erro-padrão, ε , para o estimador de Mínimos Quadrados Ponderados (MQP) e de Cauchy na Figura 2.1 e o estimador MQP e de Lorenz na Figura 2.2.

Figura 2.1: Comparação entre estimador de Cauchy (C_C igual a 2,3849, determinado por Özyurt e Pike (2004)) e Mínimos Quadrados Ponderados.



Fonte: Próprio autor

Figura 2.2: Comparação entre estimador de Lorenz (C_L igual a 2,6, determinado por Özyurt e Pike (2004)) e Mínimos Quadrados Ponderados.



Fonte: Próprio autor

Como pode ser observado, com o estimador de mínimos quadrados ponderados, a função ρ , por ter sua forma quadrática, tem sua magnitude ampliada de forma muito elevada para grandes erros-padrão. Já no caso das funções com estimadores robustos, como Cauchy e Lorenz, é possível observar que, a medida que o erro-padrão aumenta, a magnitude de ρ aumenta de forma não tão elevada. Na prática, os estimadores robustos amortecem o efeito dos erros grosseiros no problema de otimização, resultando em ajustes mais proporcionais às magnitudes dos erros, evitando assim, o espalhamento dos erros grosseiros através de outras variáveis. A avaliação de diversos outros estimadores robustos com aplicação à reconciliação de dados é apresentada em Özyurt e Pike (2004). Nesse extenso trabalho, os estimadores foram aplicados em diversos problemas clássicos de reconciliação e detecção de erros mostrando um desempenho semelhante e, em alguns casos, até melhores que os métodos sequenciais de detecção de erros, com a vantagem de ser necessário somente uma resolução de um problema de otimização. Os autores também apresentam a importância de seleção adequada dos parâmetros dos estimadores, como C_C , para Cauchy e C_L para Lorenz. Arora e Biegler (2001) e Zhang et al. (2010) tam-

bém apresentaram resultados de estimadores aplicados à RD e DEG para processos industriais onde destacam resultados positivos em relação ao uso dos mesmos.

2.3 Reconciliação de Dados e Metrologia

Na função objetivo da reconciliação de dados, o regressor genérico, apresentado na Equação 2.4, representa a diferença entre o valor observado e o valor reconciliado ponderado pelo recíproco do desvio-padrão. O desvio-padrão é uma medida de dispersão de dados em torno da média dos mesmos e pode ser aplicado a qualquer tipo de dados com distribuição Normal, obtidos a partir de sistemas de medição ou não. Em reconciliação de dados é assumido que os dados das medições do processo partem de instrumentos de medição, onde, além das dispersão dos dados, devem ser considerados a variabilidade relativa ao instrumento propriamente dito. O parâmetro que caracteriza a dispersão dos valores atribuídos a uma grandeza medida é denominado incerteza (INMETRO, 2012). A incerteza de medição geralmente engloba muitas componentes, que são geralmente divididas em duas categorias: Tipo A e Tipo B. Avaliação da componente da incerteza de medição do Tipo A é realizada por uma análise estatística dos valores medidos, obtidos sob condições definidas de medição, e pode ser caracterizada por desvio-padrão. Já a incerteza do Tipo B é toda a incerteza avaliada ou obtida por meios diferentes daquele adotado para uma avaliação do Tipo A, por exemplo:

- Associada a valores publicados por autoridade competente;
- Associada ao valor de um material de referência certificado;
- Obtida a partir de um certificado de calibração ou classe de exatidão de um instrumento de medição verificado;
- Obtida a partir de limites deduzidos da experiência pessoal.

Embora a literatura de reconciliação de dados utilize amplamente o desvio-padrão na definição de seus regressores genéricos, segundo os preceitos da metrologia, o parâmetro mais apropriado a ser usado é a incerteza-padrão, definida como (INMETRO,

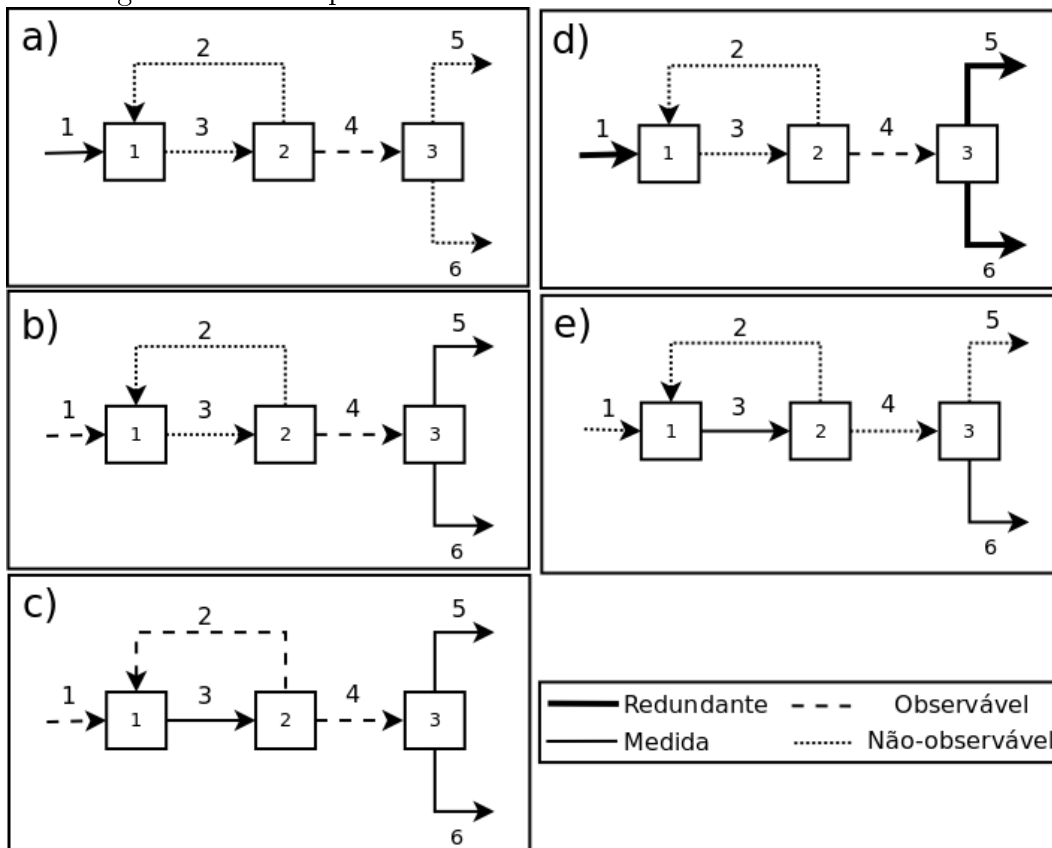
2012): 'Incerteza de medição expressa na forma de um desvio-padrão'. A incerteza-padrão envolve a incerteza da variabilidade dos dados em conjunto com a variabilidade do instrumento de medição e é representada pelo símbolo u . Para caso em que a incerteza-padrão u depende de uma soma de outras incertezas individuais, esta é denominada de incerteza-padrão combinada e é representada pelo símbolo u_c (INMETRO, 2012; BIPM, 2008; BIPM, 2009). Nesse contexto, o presente trabalho, passa a mencionar o desvio-padrão de medições por sua terminologia metrológica apropriada, ou seja, incerteza-padrão.

2.4 Classificação de variáveis

Como pode ser observado na Equação 2.3 as medições das variáveis são incluídas na função objetivo com a respectiva variável a ser reconciliada. No fim da otimização, as variáveis terão seu valor ajustado, satisfazendo as restrições do processo. O número de variáveis que podem ser efetivamente reconciliadas depende do número de medições, da posição no fluxograma de processo e da topologia do processo em si (restrições). Em alguns casos, uma medida, por exemplo, vazão total, não oferece informação suficiente para realizar a RD, neste caso, esta é classificada como 'medida' e 'não redundante' e é apresentada na Figura 2.3, caso 'e' (correntes 3 e 6). No caso que uma variável possui informações para efetuar a RD, esta é dita 'redundante', como no caso 'd' (correntes 1, 5 e 6) da Figura 2.3, conseqüentemente, terá seu valor ajustado. Embora para uma melhor confiabilidade nos resultados da aplicação de RD seja necessário ter um grande número de variáveis medidas, isso não é viável na prática por questões de custo. Quando uma variável, por exemplo, uma vazão total, não pode ser medida, mas pode ser estimada através do balanço de massa, esta é classificada como 'observável' e pode ser exemplificada através do caso 'c' (correntes 1, 2 e 4) e 'b' (correntes 1 e 4) da Figura 2.3. Variáveis observáveis não terão seus valores ajustados pela técnica de RD, mas serão estimadas. Em alguns casos, algumas variáveis não medidas não podem ser observadas, pois, as equações que as relacionam com outras variáveis (balanços de massa) não permitem tal inferência, sendo tais variáveis classificadas como 'não-observáveis', conforme apresentado no caso 'e' (correntes 1, 2, 4 e 5) na Figura 2.3. Correntes não-observáveis não podem ser es-

timadas por restrições de processo, e, embora alguns métodos de RD apresentem valores numéricos para as mesmas, esses não tem sentido. Embora sejam necessárias variáveis redundantes para a realização da reconciliação de dados, dependendo da técnica de RD escolhida, a técnica de classificação de variáveis em si não se faz necessária, entretanto, a classificação oferece informações importantes sobre a estrutura do problema de RD. As técnicas de classificação de variáveis mais usadas são baseadas na análise da matriz Jacobiana do modelo do processo (ALBUQUERQUE; BIEGLER, 1996; CROWE, 1989; VEVERKA; MADRON, 1997; SWARTZ, 1989; SÁNCHEZ; ROMAGNOLI, 1996), embora alguns autores utilizem análise de grafos para tal classificação (STANLEY; MAH, 1980; KRETISOVALIS; MAH, 1987).

Figura 2.3: Exemplo de análise de observabilidade e redundância.



Fonte: Próprio autor

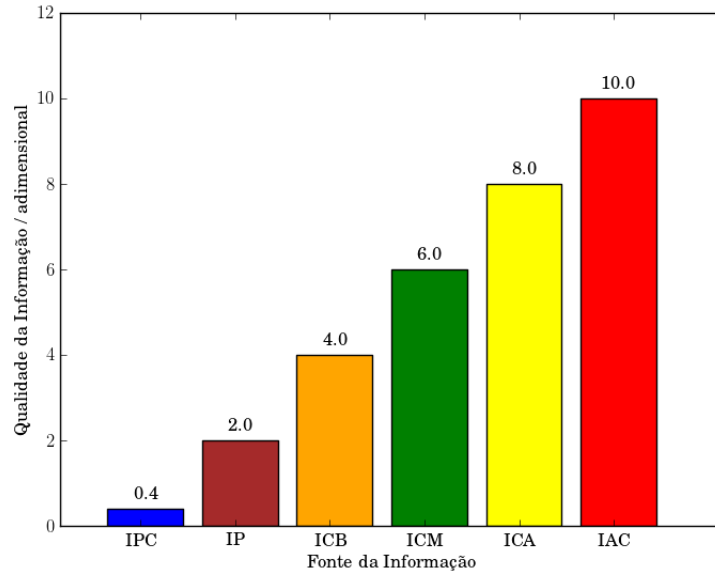
Conforme mencionado anteriormente, um problema frequente encontrado em balanços hídricos industriais é a falta de medições, que restringe ou impossibilita a aplicação de técnicas de RD, visto que é necessário um número mínimo de variáveis redundantes para aplicar tal técnica. Para contornar esse problema, Fontana et al.

(2004a), Fontana et al. (2004b) propuseram um método para casos onde diversas variáveis de processos não são medidas. Nesses trabalhos, posteriormente aprimorado por Martins et al. (2010), é definido o conceito de Qualidade de Informação, ou QI, para introduzir uma redundância artificial no sistema de medição, tanto para vazões medidas quanto para não-medidas. A QI é um conceito subjetivo e adimensional, que utiliza diversas fontes de informações disponíveis para inferir a sua incerteza da variável associada. Para que isso ocorra, todo tipo de informação pode ser avaliada, como:

- Estimativas;
- Dados de projeto;
- Documentação existente;
- Variáveis medidas;
- Dados técnicos como, por exemplo, simulações computacionais ou inferências a partir de outras medições;
- Informações da equipe de trabalho da planta, etc.

Cada informação obtida recebe um nível de confiança, que é um conceito definido em acordo entre a equipe de pesquisa e a equipe de engenharia da planta, onde os dados provenientes de medições diretas também são classificadas conforme seu índice de confiança. Um exemplo de como pode ser definida a graduação de QI é apresentada na Figura 2.4.

Figura 2.4: Exemplo de graduação da QI .



Fonte: (NARCISO, 2012).

No caso da Figura 2.4, a QI foi graduada em seis conceitos:

- **IPC**, ou informação pouco confiável, a qual possui valor 0,4;
- **IP**, ou informação precária, a qual possui valor 2,0;
- **ICB**, ou informação de confiança baixa, a qual possui valor 4,0;
- **ICM**, ou informação de confiança média, a qual possui valor 6,0;
- **ICA**, ou informação de confiança alta, a qual possui valor 8,0;
- **IAC**, ou informação de altíssima confiança, a qual possui valor 10,0.

Segundo a metodologia, uma vazão medida pode ser redundante ou não, ou ainda, as medidas podem ser redundantes mas sua incerteza associada desconhecida, sendo assim, a vantagem da metodologia é atribuir pesos relativos para cada fonte de informação. Usando a função objetivo com a incorporação do conceito da QI, é possível obter em sistemas sem redundância de medição, um resultado similar a reconciliação de dados clássica (FONTANA et al., 2004b; FONTANA et al., 2004a; SOUZA et al., 2010), conforme:

$$\min_{V_{R_i} \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \frac{QI_i^2}{VM_i} (VR_i - VM_i)^2, \quad (2.8)$$

em que VR_i é a vazão reconciliada, VM_i é a vazão mapeada obtida através de alguma fonte de informação associada ao QI_i . A relação entre QI e a incerteza é dada por (FONTANA et al., 2004b; FONTANA et al., 2004a; MARTINS et al., 2010; SOUZA et al., 2010):

$$QI_i = \alpha_i \cdot \frac{y_i}{k_i \cdot u_{c_i}}, \quad (2.9)$$

em que u_{c_i} é a incerteza-padrão combinada e α_i/k_i é uma constante de proporcionalidade. Martins et al. (2010) provaram que para balanços de massa total, a razão α_i/k_i é constante e igual a 0,1, logo, é possível utilizar outros estimadores na função objetivo com a conversão apropriada entre QI e a incerteza, ou ainda, usar diretamente a função objetivo da Equação 2.8. Martins et al. (2010) citam, ainda, a aplicação desta metodologia com sucesso em casos industriais reais.

2.5 Erros grosseiros e métodos para detecção e identificação

Em muitos processos onde se dispõe de um sistema de medição, observa-se que, ao calcular o balanço de massa ou energia com informações das respectivas medições, muitas vezes esses balanços não são respeitados exatamente. Tal fato pode ocorrer por diversos motivos, entre eles:

- 1 Oscilação aleatória (ruído branco) do circuito que realiza a medição;
- 2 Variações nas condições climáticas (temperatura, umidade, etc) que interferem na precisão de determinados equipamentos de medição;
- 3 Falta de calibração e/ou manutenção periódica no medidor;
- 4 Medidor danificado;
- 5 Vazamento em algum equipamento ou tubulação;
- 6 Intrumento instalado de forma não adequada.

Os itens acima mencionados são indesejáveis do ponto de vista de operação de processos químicos, porém, somente os itens 3, 4, 5 e 6 podem ser eliminados através da manutenção apropriada dos equipamentos de medição ou de processo e são denominados erros grosseiros. Segundo Narasimhan e Jordache (2000), qualquer técnica de detecção de erros grosseiros deve, preferencialmente, possuir as seguintes características:

- 1 Detectar a presença de um ou mais erros nos dados.
- 2 Identificar o tipo (vazamento ou falha na medição) e a localização do erro.
- 3 Localizar e identificar múltiplos erros de medição que poderão estar presentes nos dados.
- 4 Estimar a magnitude do erro.

Para detectar e identificar anormalidades em sensores de medição ou em balanços de massa (vazamentos), diversas técnicas estão disponíveis apresentadas de forma detalhada no livro texto de Narasimhan e Jordache (2000). Muitas dessas técnicas possuem a capacidade somente de detectá-las no balanço de massa do processo como um todo, enquanto outras de identificá-las e localizá-las em pontos únicos. Outras técnicas podem identificar ou localizar erros grosseiros em múltiplos locais. Os métodos de detecção de erros grosseiros (DEG) também se distinguem pela forma de aplicação, sendo que alguns aplicam o procedimento uma única vez enquanto outros são baseados em testes iterativos, realizando diversos testes intermediários em versões modificadas do balanço de massa. Algumas das técnicas mais consolidadas para DEG são apresentadas na Quadro 2.6, onde também é possível observar que muitos autores testam seus métodos de DEG em um universo muito restrito de problemas.

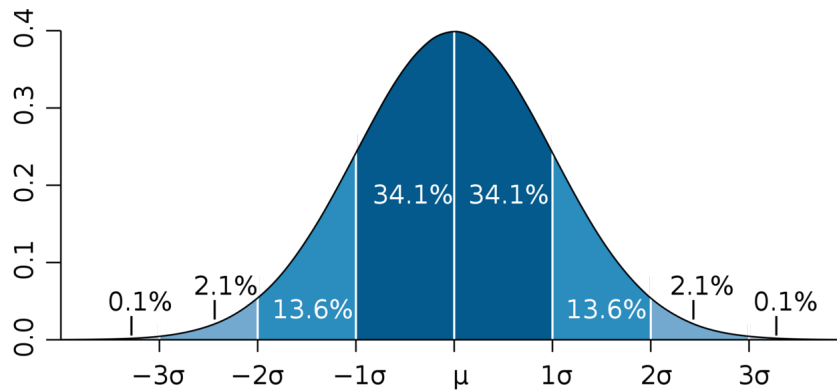
Quadro 2.6: Técnicas de identificação de erros grosseiros e o número de exemplos usados para a testar as mesmas.

Autor	Teste para Detecção/Identificação de Erros Grosseiros	Número de Exemplos Testados
Alhaj-Dibo et al. (2008)	RD usando distribuições robustas	1
Arora e Biegler (2001)	Estimadores Robustos para RD e DEG	3
Bagajewicz et al. (1999)	Avaliação de PCA para DEG	1
Devanathan et al. (2005)	Métodos Bayesianos e de Verossimilhança	1
Farias (2009)	IMT Robusto	2
Kongsjahju et al. (2000)	Modificação do Método UBET para sistemas em série	1
Maronna e Arcas (2009)	RD and DEG baseada em Modelos de Regressão	2
Mei et al. (2006)	NT-MT para DEG	2
Narasimhan e Mah (1987)	Razão de Verossimilhança Generalizada	2
Özyurt e Pike (2004)	Reconciliação Robusta	7
Reddy e Mavrouniotis (1998)	Abordagem de Redes Neurais	1
Romagnoli e Stephanopoulos (1981)	Método Algorítmico Proposto	3
Rosenberg et al. (1987)	DMT and EMT	7
Sánchez et al. (1999)	MSEGE, MUBET and MGLR	2
Soderstrom et al. (2001)	Abordagem Inteira-Mista	4
Wang et al. (2004)	Aprimoramento do MT e NT	1
Zhang et al. (2010)	Estimadores Robustos	4

Fonte: Próprio autor

Embora as técnicas de RD com o estimador de MQP sejam importantes para ajustar balanços de massa, estas técnicas, por si só, não realizam a detecção de erros grosseiros (DEG) e devem ser usadas em conjunto com outros métodos. As técnicas de detecção existentes são baseadas em testes estatísticos aplicados aos resultados do problema de reconciliação de dados (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). Tais testes são necessários porque existe uma componente aleatória no valor medido, relativo à aleatoriedade do sistema (instrumentação e processo), a qual se deseja, dentro de um intervalo de confiança, separar do erro grosseiro. O teste mais amplamente usado para DEG é o teste de hipóteses. Para a detecção de erros grosseiros, são formuladas duas hipóteses: H_0 e H_1 . A hipótese H_0 considera que não há presença de erros grosseiros (de medição ou vazamentos), ou, existe a presença somente de erros aleatórios. Como o teste de hipótese usa uma significância estatística, definida pelo indivíduo que aplicará o teste, existe a possibilidade que, em um caso real onde existam somente erros aleatórios, ocorra a falsa detecção de um ou mais erros grosseiros. Tal comportamento pode ser melhor entendido analisando a Figura 2.5 onde é apresentado a Função de Distribuição de Probabilidade Normal com média μ e desvio padrão σ . Supondo uma medição de processo que siga essa distribuição, embora 99,8% das medições estejam entre o intervalo de -3σ e $+3\sigma$ existe a probabilidade de 0,2% das medições estarem fora desses intervalos. Se for usado, por exemplo, a faixa de intervalo -3σ e $+3\sigma$ para classificar uma medição como puramente aleatória, em um período muito longo de amostragem de medidas, eventualmente ocorrerão dados que estarão fora dessa faixa, acusando um falso alarme. Tal adversidade é também conhecida como falha de teste de hipótese do 'Tipo I', quando a hipótese H_0 é verdadeira, ou seja, não existem erros grosseiros, mas os mesmos são detectados, acionando um falso alarme.

Figura 2.5: Distribuição Normal com média μ e desvio padrão σ .



Fonte: Wikipedia. Autor: Petter Strandmark.

A segunda hipótese do teste é denominada H_1 e parte do princípio que existe um ou mais erros grosseiros. Também existe a possibilidade de declarar que não existe a presença de erro, quando na verdade há, denominado de falha do teste estatístico do *Tipo II*, quando a hipótese H_1 é falsa. As características de cada teste para detecção de erros grosseiros associadas aos testes de hipóteses estatísticos são apresentadas nas próximas seções e é importante ressaltar que todas as técnicas exigem que os erros de medição sigam a distribuição de probabilidade Normal, com desvio padrão conhecido.

2.5.1 Teste global

O Teste Global (MADRON, 1985) apud (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000), ou *Global Test* (GT), usa o resultado dos resíduos dos balanços, ponderados pela matriz de variância-covariância dos balanços e é realizado por uma sequência de cálculos. Inicialmente, o vetor de resíduos dos balanços, \mathbf{R} é calculado conforme:

$$\mathbf{R} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{Y}, \quad (2.10)$$

em que \mathbf{A} é a matriz Jacobiana do balanço de massa do processo (constante quando é considerada a vazão total) e \mathbf{Y} é o vetor das vazões medidas. Em seguida, a matriz

variância-covariância dos resíduos do balanço de massa, \mathbf{V} , é assim calculada:

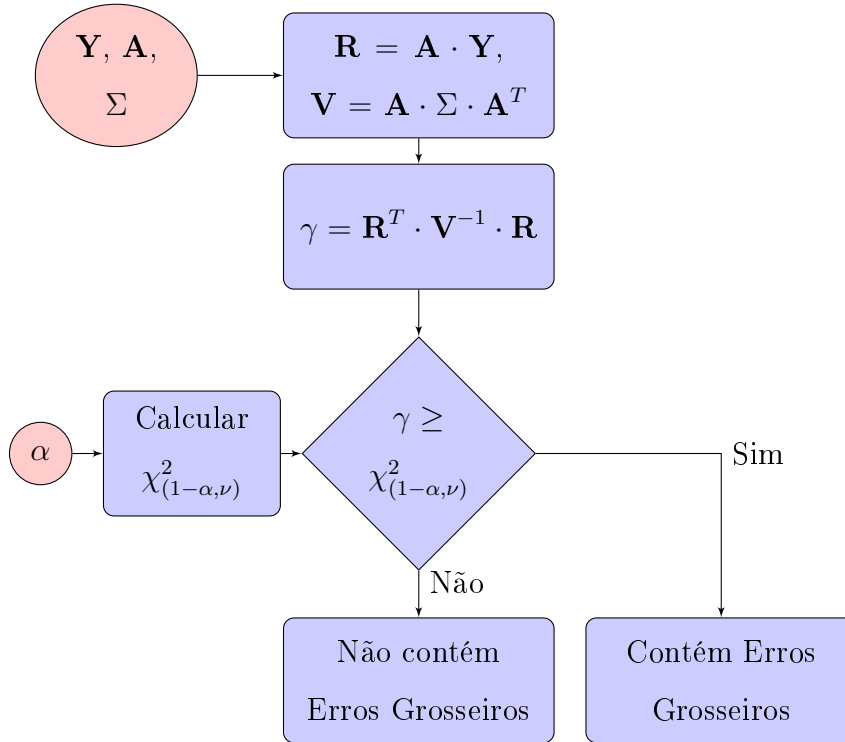
$$\mathbf{V} = cov(\mathbf{R}) = \mathbf{A} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{A}^T, \quad (2.11)$$

em que Σ é a matriz variância-covariância das medidas. O valor da estatística de teste, γ , é calculado da seguinte maneira:

$$\gamma = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{R}. \quad (2.12)$$

Como γ considera simultaneamente as interações de todo o balanço, trata-se de uma estatística multivariável que segue uma distribuição χ^2 com ν graus de liberdade, onde ν é o *rank* da matriz Jacobiana do balanço, \mathbf{A} . Para aceitar ou rejeitar a hipótese H_0 , seleciona-se uma significância estatística, α , e, utilizando as informações da distribuição χ^2 com ν graus de liberdade através de dados tabelados ou da avaliação da própria função, encontra-se o valor crítico do teste, ou critério do teste, cuja magnitude deve ser comparado com γ . Se γ é maior que o valor crítico do teste, $\chi^2_{(1-\alpha, \nu)}$, o balanço como um todo, dentro da significância estatística escolhida, é classificado como contendo um ou mais erros grosseiros, conforme apresentado na Figura 2.6. Se γ é menor que o valor crítico do teste, o balanço como um todo, é classificado como contendo erros de medição puramente aleatórios. Também é possível provar que γ é o valor final da função objetivo de mínimos quadrados ponderados da reconciliação de dados (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). O teste global é capaz de detectar a presença de erro no fluxograma de processo como um todo, porém, somente com seu resultado não é possível apontar a localização do erro, o tipo (vazamento ou falha de medição) nem mesmo se estão presentes um ou mais erros de medição. Geralmente, o resultado do Teste Global é usado em conjunto com outras técnicas para ajudar a localização e identificação dos erros grosseiros.

Figura 2.6: Esquema para DEG usando o Teste Global.



Fonte: Próprio Autor

2.5.2 Teste nodal

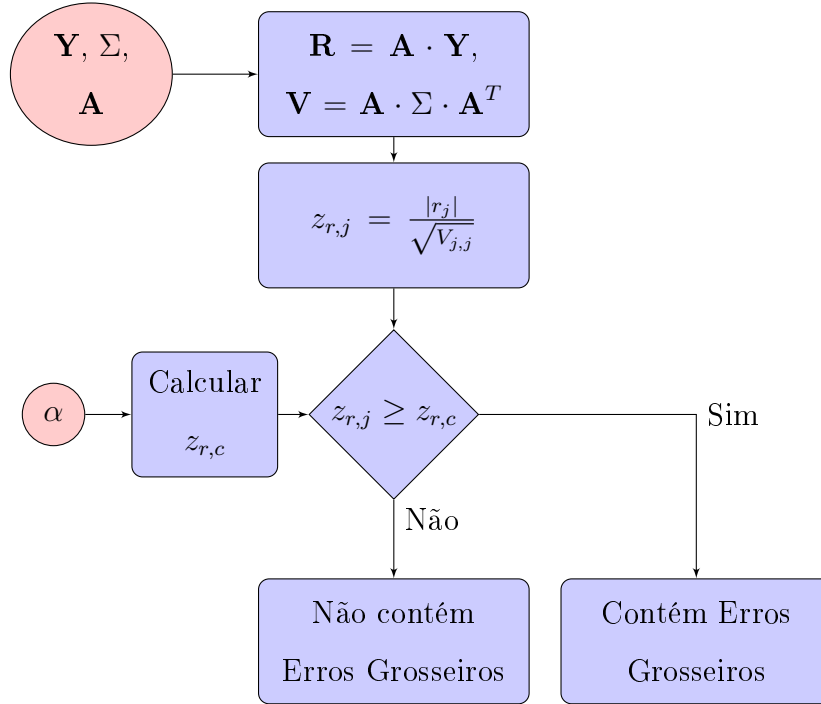
O Teste Nodal (MAH et al., 1976), ou *Nodal Test* (NT), é um teste realizado nos resíduos dos balanços individualmente. Para cada nó, ou equipamento, a variável $z_{r,j}$ é calculada conforme:

$$z_{r,j} = \frac{|r_j|}{\sqrt{V_{j,j}}}, \quad (2.13)$$

em que r_j é o resíduo do balanço j e $V_{j,j}$ é o elemento j,j , ou seja, da diagonal, da matriz \mathbf{V} . O teste de hipótese monovariável z é aplicado considerando normalidade de medidas, baseado no valor da variável $z_{r,j}$. Para aceitar ou rejeitar a hipótese H_0 , seleciona-se uma significância estatística, α , e, utilizando a informações da distribuição z , através de dados tabelados ou da avaliação da própria função, encontra-se o valor crítico do teste, ou critério do teste, cuja magnitude deve ser comparado com $z_{r,j}$. Se $z_{r,j}$ é maior que o valor crítico do teste, $z_{r,c}$, o equipamento, dentro da significância estatística escolhida, é classificado como contendo vazamento. Se $z_{r,j}$ é menor que o valor crítico do teste, o equipamento é classificado como não con-

tendo vazamento, conforme Figura 2.7 . É possível detectar mais de um vazamento aplicando o mesmo teste para outros equipamentos simultaneamente.

Figura 2.7: Esquema para DEG usando o Teste Nodal.



Fonte: Próprio Autor

2.5.3 Teste de medida

O teste da medida proposto por Mah e Tamhane (1982) é baseado no ajuste da medida após a reconciliação, sendo o ajuste definido conforme:

$$ad_i = y_i - x_i \quad (2.14)$$

ou na forma vetorial por:

$$\mathbf{Ad} = \Sigma \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{R}, \quad (2.15)$$

em que x_i é o valor reconciliado da medida e y_i o valor medido. Inicialmente é construída a matriz de covariância dos ajustes $\overline{\mathbf{W}}$, conforme:

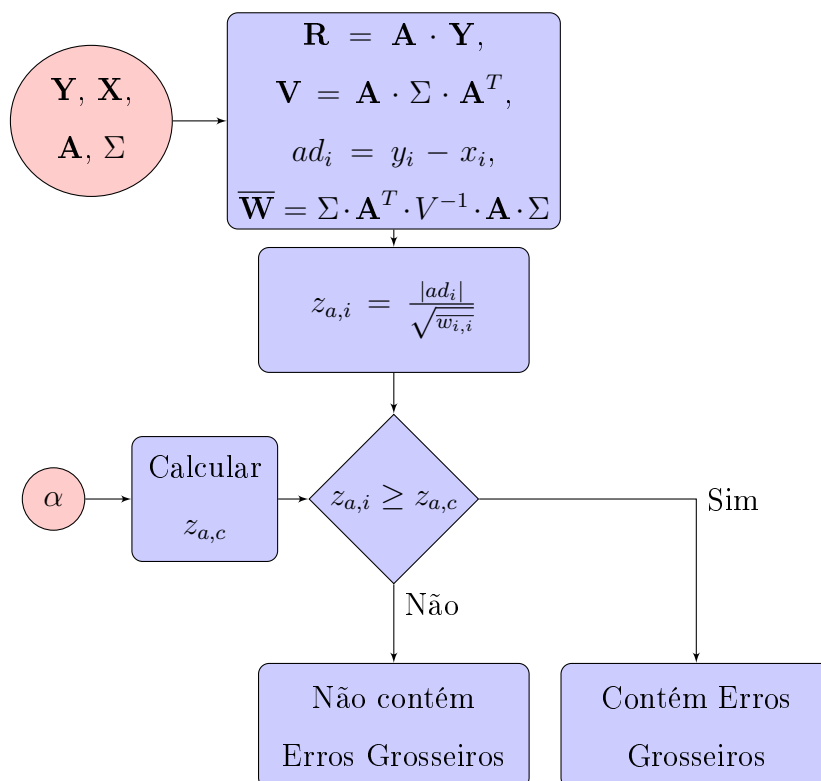
$$\overline{\mathbf{W}} = \Sigma \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \Sigma, \quad (2.16)$$

em seguida, é calculado o termo $z_{a,i}$, para a estatística de teste, conforme :

$$z_{a,i} = \frac{|ad_i|}{\sqrt{\overline{w_{i,i}}}}, \quad (2.17)$$

em que $\overline{w_{i,i}}$ é o elemento i,i , ou seja da diagonal, da matriz $\overline{\mathbf{W}}$. O teste de hipótese monovariável z é aplicado considerando a normalidade das medidas, baseado no valor da variável $z_{a,i}$ e é capaz de detectar falha em uma medição específica. Para aceitar ou rejeitar a hipótese H_0 , seleciona-se uma significância estatística, α , e, utilizando a informações da distribuição z , através de dados tabelados ou da avaliação da própria função, encontra-se o valor crítico do teste, ou critério do teste, cuja magnitude deve ser comparado com $z_{a,i}$. Se $z_{a,i}$ é maior que o valor crítico do teste, $z_{a,c}$, a medição, dentro da significância estatística escolhida, é classificada como contendo erro grosseiro. Se $z_{a,i}$ é menor que o valor crítico do teste, a medição é classificada como contendo erros puramente aleatórios, conforme Figura 2.8. Caso existam falhas em outras medições, é possível detectá-las aplicando o teste em outras medidas do processo simultaneamente.

Figura 2.8: Esquema para DEG usando o Teste de Medida.



Fonte: Próprio Autor

2.5.4 Teste de razão de verossimilhança generalizada

O Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada (NARASIMHAN; MAH, 1987), ou *Generalized Likelihood Ratio Test* (GLR), é formulado baseado no modelo de processo com erros grosseiros. O modelo de erro de medição de magnitude b é definido por:

$$\mathbf{Y} = \bar{\mathbf{X}}_{NOM} + \epsilon_r + b\mathbf{e}_i, \quad (2.18)$$

em que $\bar{\mathbf{X}}_{NOM}$ é o vetor das vazões nominais do processo, ϵ_r é o vetor de erro aleatório e \mathbf{e}_i é um vetor com valor 1 na posição do erro i , e zero nas demais posições e b é a magnitude do erro de medição. Já um vazamento no equipamento j de magnitude desconhecida b é modelado conforme:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{Y} - b\mathbf{m}_j = 0, \quad (2.19)$$

em que \mathbf{m}_j é um vetor com valor 1 na posição do vazamento e zero nas demais posições e b é a magnitude do vazamento. Pode ser provado (NARASIMHAN; MAH, 1987) que quando um erro de medição ou vazamento está presente, tem-se que:

$$E[\mathbf{R}] = b\mathbf{f} \quad (2.20)$$

em que $E[\mathbf{R}]$ é a função de valor esperado da variável \mathbf{R} , $\mathbf{f} = A\mathbf{e}_i$ para erros grosseiros de medição no instrumento i e $\mathbf{f} = \mathbf{m}_j$ para vazamento no equipamento j . Os vetores \mathbf{f} também são conhecidos como assinatura do erro. Baseado no teste da razão de verossimilhança entre as hipóteses:

H_0 não possui erros grosseiros e

H_1 possui erros grosseiros com magnitude $b\mathbf{f}$, é formulado um teste estatístico do tipo χ^2 para cada erro (medição ou balanço). O teste da Razão de Verossimilhança Generalizada é um dos mais completos pois, além de localizar e identificar o tipo de erro, pode estimar sua magnitude (cálculo apresentado em Narasimhan e Mah (1987)). O GLR, através de procedimentos iterativos, também pode identificar erros múltiplos, técnica denominada de Estratégia de Compensação Serial (NARASIMHAN; MAH, 1987).

2.5.5 Teste dos componente principais para equipamentos, medidas e global

Ao contrário dos testes anteriormente apresentados que usam informações somente das diagonais das matrizes \mathbf{V} e $\overline{\mathbf{W}}$, os testes dos componentes principais usam informações destas matrizes como um todo, realizando transformações lineares dos resíduos dos balanços ou das medidas ou na estatística do teste global (γ) para a realização dos testes estatísticos (TONG; CROWE, 1995). O teste de componentes principais dos resíduos dos balanços é feito, inicialmente, realizando a transformação de variáveis nos resíduos dos balanços, conforme:

$$\mathbf{p}_r = \mathbf{W}_r^T \cdot \mathbf{R}, \quad (2.21)$$

em que \mathbf{p}_r é o vetor de componentes principais dos resíduos das restrições, \mathbf{W}_r são os autovetores de \mathbf{V} . Após o cálculo de \mathbf{p}_r , o teste de hipótese monovariável z é aplicado baseado no valor da variável \mathbf{p}_r , considerando a normalidade das medidas. O teste de componentes principais dos resíduos é capaz de detectar vazamentos no equipamento onde o mesmo foi aplicado. Caso existam vazamentos em outros equipamentos, é possível detectá-los aplicando o teste em outros equipamentos do processo.

O teste de componente principais das medidas é realizado através da estatística de teste \mathbf{p}_{ai} , calculado conforme:

$$\mathbf{p}_{ai} = (\mathbf{W}_a^T \cdot \mathbf{Ad})_i, \quad (2.22)$$

em que \mathbf{W}_a são os autovetores de $\overline{\mathbf{W}}$ e \mathbf{Ad} é definido pela Equação 2.15. Após o cálculo de \mathbf{p}_{ai} , o teste de hipótese monovariável z é aplicado baseado no valor da variável \mathbf{p}_{ai} , considerando a normalidade das medidas. Tal teste é capaz de detectar falhas em uma medição específica. Caso existam falhas em outras medições, é possível detectá-las aplicando o teste em outras medidas do processo.

O teste global baseado em componentes principais, denominado de teste global coletivo (baseado em componentes principais) é realizado, inicialmente, calculando a variável γ_k , conforme:

$$\gamma_k = \mathbf{p}_r^T \cdot \mathbf{p}_r. \quad (2.23)$$

O teste de hipótese monovariável z é aplicado baseado no valor da variável γ_k , considerando a normalidade das medidas. Assim como o teste global tradicional, o teste global dos componentes principais é capaz de detectar a presença de erro no fluxograma de processo como um todo, porém, somente com seu resultado, não é possível apontar a localização do erro, o tipo, nem mesmo se estão presentes um ou mais erros de medição.

2.5.6 Identificação e localização de erros grosseiros múltiplos usando estratégias simultâneas

Em uma planta industrial existe a possibilidade de falhas simultâneas dos sensores de medição. A maioria das técnicas de detecção de múltiplos erros de medição faz uso das técnicas de detecção de erros de medição individuais as quais serão apresentadas nas próximas seções.

2.5.6.1 Estratégias usando erros grosseiros individuais

Estratégias simultâneas buscam encontrar erros em medições de uma forma não-iterativa, ou seja, em uma única etapa. Tais técnicas se baseiam no princípio de que os erros grosseiros são detectados simultaneamente em todas as medições ou balanços cuja estatística de teste ultrapassam o valor limite. Algumas das estratégias previamente apresentadas podem ser consideradas como estratégias simultâneas, como, por exemplo, o Teste das Medidas e da Razão de Verossimilhança Generalizada. Serth e Heenan (1986) e Iordache et al. (1985) mostraram resultados em que o Teste das Medidas e da Razão de Verossimilhança Generalizada tendem a apresentar resultados errôneos, classificando equivocadamente correntes sem erros grosseiros como tal. Tal fato ocorre principalmente porque as medições estão relacionadas pelas equações dos balanços, sendo assim um erro grosseiro em uma medição pode se *espalhar* por uma medição vizinha e ser detectado erroneamente nesta. A forma desse *espalhamento* depende de vários fatores, como o nível de redundância, a diferença entre as incertezas de medição e a magnitude do erro grosseiro.

2.5.6.2 Estratégias usando hipóteses combinatoriais

De forma semelhante ao Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada, a estratégia de Hipóteses Combinatoriais é formulada de forma a detectar todas as possibilidades de erros grosseiros levando em consideração a presença de dois ou mais erros grosseiros (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000; ROSENBERG et al., 1987). Estendendo o Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada, a estratégia de Hipóteses Combinatoriais monta uma matriz com as possíveis combinações de erros aplicando uma estatística de teste do tipo χ^2 , porém, com k graus de liberdade, em que k é o número de medições presentes, considerando distribuição Normal. A estratégia de Hipóteses Combinatoriais tem como desvantagem o tempo computacional que tende a ser elevado para balanços com muitas correntes e equipamentos, além disso, não é possível detectar e identificar combinações de erros para k menor que o número de equipamentos.

2.5.6.3 Identificação usando estimação simultânea das magnitudes dos erros grosseiros

Com o objetivo de contornar a limitação da estratégia de Hipóteses Combinatoriais de não detectar e identificar combinações de erros para k menor que o número de equipamentos, Rollins e Davis (1992) formularam um procedimento simultâneo denominado técnica de estimação não tendenciosa (*unbiased estimated technique*, UBET). Nesse procedimento, assume-se que existe uma matriz $F_{n,m}$, onde as colunas são as denominadas *assinatura de erros* (semelhante ao método da Razão da Verossimilhança Generalizada) e m é o número de balanços, sendo a matriz com dimensões n,m com todas as linhas e colunas linearmente independentes. Na UBET, é realizado um teste de hipóteses para avaliar se o erro previamente assumido na *assinatura de erros* possui magnitude zero ou não, aplicando um teste z . Os candidatos iniciais aos erros podem ser obtidos através do Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada, Teste Nodal ou testes dos componentes principais.

Sánchez et al. (1999) revisaram o procedimento de estimação simultânea de erros grosseiros (SEGE) e propuseram uma nova técnica para contornar as falhas da metodologia de estimação simultânea, denominando-a de procedimento de estimação

simultânea de erros grosseiros modificada (MSEGE), aplicando-a a um exemplo de literatura onde é observada uma superior melhora em relação aos demais métodos. A nova técnica proposta se aplica ao caso onde existem correntes não medidas e também trata de casos onde um conjunto de erros grosseiros é equivalente a outro conjunto (quando conjuntos de erros grosseiros apresentam o mesmo valor da função objetivo, tornando os dois conjuntos indistinguíveis entre si).

2.5.7 Identificação e localização de erros de grosseiros múltiplos usando estratégias em série

As estratégias em série, em contraste com as simultâneas, identificam os erros grosseiros serialmente, sendo que existem diversas combinações de testes estatísticos e de estratégias sequenciais.

2.5.7.1 Teste de medida iterativo

No algoritmo de Teste de Medida Iterativo, IMT, é aplicado uma série de Testes de Medidas, sendo que, as que apresentam as maiores estatísticas de testes são eliminadas do problema subsequente de reconciliação. A eliminação busca as medições com maior estatística de teste: possíveis candidatas a erro. O procedimento de eliminação de correntes é equivalente à fusão de nós ou equipamentos das correntes que os conectam. O teste em questão pode ser aplicado com redundância de todas as medidas, ou somente com algumas medidas, além disso, também é possível aplicar o Teste Global ao invés do Teste de Medidas. Considerando ainda a eliminação em série de medições, Serth e Heenan (1986) propuseram um modificação do método anterior onde informações sobre os valores inferiores e superiores das vazões são alimentadas no problema, denominado Testes Iterativo das Medidas Modificados. Rosenberg et al. (1987) estenderam o trabalho de Serth e Heenan (1986) acrescentando limites inferiores e superiores não só às variáveis medidas, mas também às variáveis não-medidas, ou seja, estimadas como resultado do problema. Cabe ressaltar que os testes anteriormente descritos são exclusivos para detectar erros em medições. Farias (2009) apresentou a versão robusta para o IMT, denominada r-

IMT, baseado no uso de estimadores robustos na função objetivo, sendo que tal teste apresentou resultados superiores ao IMT.

2.5.7.2 Estratégia da compensação serial simples

O algoritmo da Estratégia da Compensação Serial Simples, inicialmente proposto por Narasimhan e Mah (1987), é usado tanto para detectar erros de medida quanto vazamentos em equipamentos. O procedimento usa iterativamente o Teste de Razão de Verossimilhança Generalizada e baseia-se no princípio de compensar o vazamento ou desvio da medição com a respectiva magnitude do erro grosseiro estimado, seguido da reaplicação das estatísticas de teste. A repetição do teste é realizada até que a estatística de teste máximo não exceda o critério de teste. Rolins e Davis (1992) demonstraram através de estudos de simulação que a técnica proposta pode apresentar diversos erros de predição, tanto quanto ao tipo e localização quanto na estimativa da magnitude do erro, problemas que tentaram ser resolvidos pela técnica de Compensação Serial Modificada (KELLER et al., 1994). De modo semelhante aos Testes de Medida Iterativo, onde se evoluiu para a adição de restrições de vazão superior e inferior, Harikumar e Narasimhan (1993) também apresentaram a versão do Teste de Razão de Verossimilhança Generalizada com informações de restrições de limites superiores e inferiores das medições.

2.5.7.3 Estratégias de combinação de nodos

As técnicas que usam Estratégias de Combinação de Nodos são usadas, principalmente, para detectar desvios em medições. Inicialmente proposto por Mah et al. (1976), tal técnica se baseia no fato de que, se uma corrente apresenta erro grosseiro, esta afetará os nodos, ou equipamentos nos quais a mesma está conectada. Para eliminar o efeito dessa medição com erro grosseiro, a adição dos dois nodos que conectam a corrente com erro de medição, tende a eliminar o efeito deste erro no balanço global. Para explorar esse princípio, as Estratégias de Combinação de Nodos, aplicam sistematicamente a união de um ou mais equipamentos conectados, indicando correntes candidatas a problemas e possíveis isentas de problemas. Outras técnicas podem ser aplicadas subsequentemente para confirmar as suposições. Rol-

lins et al. (1996) sistematizou tal técnica criando a Técnica da Combinação Linear (*Linear Combination Technique* LCT).

2.5.8 Detectabilidade e identificabilidade de erros grosseiros

Um requisito essencial para a detecção de erros grosseiros é a presença de redundância na medição. Na prática, algumas medidas redundantes podem apresentar comportamento de variáveis não redundantes, denominadas praticamente não-redundantes. Tal caso foi apresentado por Crowe (1988), que reportou dificuldades em reconciliar e detectar erros grosseiros em medidas presentes com características específicas. Madron (1992), apud Narasimhan e Jordache (2000), apresentou o conceito de ajustabilidade e Charpentier et al. (1991), apud Narasimhan e Jordache (2000), o conceito de detectabilidade para classificar esses tipos de medidas redundantes. Jordache et al. (1985), através de simulações, observou que em alguns tipos de balanços, as medidas redundantes também se comportam como praticamente não-redundantes, são eles:

- Variáveis com pequena incerteza-padrão em um mesmo balanço com variáveis com grande incertezas-padrão;
- Variáveis com grandes diferenças em ordem de grandeza envolvidas em um mesmo balanço;
- Correntes em paralelo, como, por exemplo, correntes de saída de divisores de correntes;
- Medidas que aparecem somente em uma equação com uma corrente não medida sem restrição de outro balanço ou equação, como por exemplo, fontes e sumidouros.

A detectabilidade é calculada pela seguinte expressão:

$$\text{detect}_i = \sqrt{\left(1 - \frac{u_{x_i}^2}{u_i^2}\right)} \quad (2.24)$$

em que u_i é a incerteza-padrão da medição e u_{x_i} é a incerteza-padrão das variáveis reconciliadas, este último pode ser calculado por (HEYEN et al., 1996)

$$u_{x_i} = \sqrt{\sum_{j=1}^{mc} \frac{(M_{i,j}^{-1})^2}{u_j^2}}, \quad (2.25)$$

em que mc é o número de correntes medidas e M é a matriz:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{W} & \mathbf{A}^T \\ \mathbf{A} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

2.5.9 Medidas de performance das técnicas de detecção de erros grosseiros

Para avaliar a performance dos testes de detecção de erros grosseiros, a literatura reporta o uso de experimento numéricos do tipo simulações de Monte Carlo com a localização e magnitude dos erros grosseiros conhecidos (SÁNCHEZ et al., 1999; ÖZYURT; PIKE, 2004; FARIAS, 2009; ROSENBERG et al., 1987; KONGSJAHRU et al., 2000; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). Nesses experimentos numéricos, erros grosseiros de magnitudes conhecidas são sistematicamente adicionados em posições do balanço conhecidas. São realizadas quantidades elevadas de simulações e os resultados são avaliados com algumas métricas. Diversas métricas estão presentes na literatura (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000) para avaliar a performance dos testes de detecção de erros de grosseiros. As mais importantes são as seguintes:

- Poder Total(OP) = Número de Erros Grosseiros Corretamente Identificados / Número de Erros Grosseiros Simulados;
- Média do Valor dos Erros do Tipo I (AVT1) = Número de Erros Erroneamente Identificados / Número de Simulações;
- Seletividade = Número de Erros Grosseiros Corretamente Identificados / Número de Erros Grosseiros Detectados;
- Erro Médio de Estimação (AEE) = $\frac{1}{NS} \sum_{i=1}^{NS} \left| \frac{\text{valor estimado}_i - \text{valor real}_i}{\text{valor real}_i} \right|$;

em que NS é o número de simulações de Monte Carlo realizadas.

O Poder Total (OP) é uma das principais métricas para avaliação da performance de métodos para DEG, seu valor máximo é 1, quando todos os erros grosseiros foram corretamente identificados nas simulações. Também é usual elaborar uma curva de OP, denominada curva do Poder Total, onde a magnitude do erro grosseiro é variada dentro de um intervalo e o OP do método de DEG é avaliado.

O AVT1 está associado com Erros do Tipo I do teste de hipóteses, ou falso positivo. É importante ressaltar que todo método de detecção apresentará uma fração de falso positivo, de acordo com a significância estatística usada, mesmo em simulações numéricas. Cabe ressaltar, que cada método de DEG pode usar uma significância estatística diferente, porém, quando o AVT1 é mantido no mesmo valor, diferentes métodos de DEG podem ser comparados na mesma base, independente da significância estatística configurada. Em simulações do tipo Monte Carlo para avaliação da performance de métodos de DEG, a significância estatística do teste de hipótese é configurada realizada por tentativa e erro para que o AVT1 seja aproximadamente 0,1 ou 10%.

A Seletividade avalia se o erro grosseiro adicionado em uma determinada medição ou equipamento em uma simulação foi apropriadamente identificado no mesmo local adicionado. Em casos de erros grosseiros múltiplos, a seletividade é capaz de indicar se os erros grosseiros foram identificados nos locais adicionados ou não.

O Erro Médio de Estimação não é aplicável a qualquer método de DEG, pois, somente alguns métodos podem estimar a magnitude do erro grosseiro adicionado, entre eles o GLR, a técnica de estimação simultânea de erros grosseiros (SEGE), e suas versões modificadas. Cabe ressaltar que essa métrica só é avaliada em casos onde o erro grosseiro foi corretamente identificado. Também é necessário manter o registro da magnitude do erro grosseiro original adicionado para tal comparação.

2.5.9.1 Ferramentas de mineração de dados

As ferramentas de mineração de dados tem como objetivo classificar e segmentar conjuntos de dados para a obtenção de informações úteis nos mesmos. Junior et

al. (2008) apresentaram uma metodologia de classificadores hierárquicos e teoria dos protótipos para classificar o tipo de erro grosseiro, localização e magnitude do mesmo, em conjunto com ferramentas de reconciliação de dados. Prata et al. (2008) apresentaram o uso de análise de *clusters* para a reconciliação e detecção de dados espúrios de um processo dinâmico e não-linear, detecção de erros grosseiros, aplicando o mesmo para um reator de polimerização industrial.

2.5.10 Métricas para detecção de erros de medição

As técnicas para detecção de erros grosseiros anteriormente mencionadas, usam suas respectivas métricas nas estatísticas de testes, sendo as mais importantes abaixo listadas (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000):

- Teste Global;
- Teste Global Coletivo;
- Teste de Medida;
- Teste Nodal;
- Teste da Razão de Verossimilhança Generalizada;
- Teste de componentes Principais das Restrições ou componentes Principais das Medidas.

Através da revisão bibliográfica, foi possível observar que as metodologias de reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros presentes na literatura usam uma, ou, no máximo, duas métricas em seus testes.

2.6 Contexto do trabalho

Conforme destacado no início do capítulo, na prática, a avaliação de balanços hídricos é uma tarefa bastante trabalhosa, devido à falta de dados e informações, sendo que a avaliação dos problemas nos balanços deve ser feita com informações

das equipes de operações e de engenharia da empresa. Nesse contexto, o trabalho desenvolvido busca fundir as informações das diversas métricas existentes na literatura para desenvolver um algoritmo para avaliação e monitoramento de balanços sujeitos a pouca quantidade ou baixa qualidade de informações.

Capítulo 3

Método Proposto

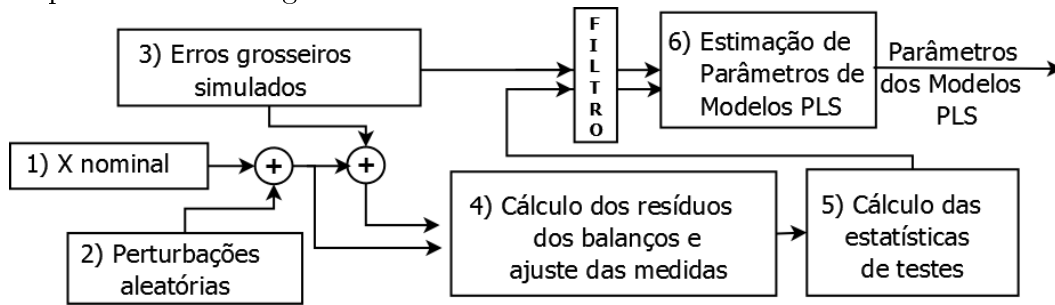
3.1 Visão geral do método proposto

A melhoria da confiabilidade das informações dos balanços de massa em equipamentos envolvendo balanços hídricos pode ser obtida com o uso de ferramentas de reconciliação de dados em conjunto com técnicas de detecção de erros grosseiros para identificar eventuais falhas em sistemas de medição ou vazamentos.

Além da falta de redundância e da observabilidade nos sistemas industriais, a grande dificuldade para detecção de erros grosseiros é a possibilidade dos mesmos estarem presentes em pontos múltiplos nos sistemas em estudo. Durante a etapa de revisão bibliográfica, foi possível perceber que existe uma lacuna para detectar corretamente erros grosseiros únicos e múltiplos de forma adequada para balanços mássicos de forma genérica, independente da sua topologia, e é sobre esse aspecto que foi proposto um método que funcione em ambientes industriais, foco do presente estudo. Uma das dificuldades que surge dos métodos citados no Capítulo 2 é a característica combinatorial da detecção de erros grosseiros múltiplos, sendo assim, sua resolução fica muito complexa à medida que aumentam o número de correntes e de equipamentos. Também observa-se a ocorrência de falsos positivos para alguns métodos de detecção e, para determinadas topologias, existem falhas na detecção mesmo para erros de medição únicos.

Para contornar o problema, foi desenvolvida a metodologia apresentada na Figura 3.1, denominada PMGEI, do acrônimo em inglês *Predictive Multivariate Gross Error Identification* ou Identificação de Erros Grosseiros por Predição Multivariável.

Figura 3.1: Esquema simplificado da metodologia PMGEI visando gerar modelos para prever os erros grosseiros.



Fonte: Próprio autor

A metodologia PMGEI se resume em estimar parâmetros de um modelo empírico multivariável capaz de identificar a existência de um erro grosseiro, sua posição e magnitude, representado pela etapa 6 da Figura 3.1. Inicialmente é necessário gerar dados através de simulações com erros puramente aleatórios e com erros grosseiros em diversas posições, que serão as variáveis dependentes do modelo empírico, as quais se deseja prever, apresentados nas etapas 1 a 3 da Figura 3.1. Em seguida são calculados índices de qualidade dos balanços, variáveis independentes, correspondente ao respectivo erro, aleatório ou grosseiro, apresentadas nas etapas 4 e 5 da Figura 3.1. Em seguida, são aplicados filtros que realizam uma pré-seleção de dados, sendo, em seguida, montada uma tabela, conforme Tabela 3.1. Finalmente, os parâmetros do modelo empírico são estimados, considerando como variáveis independentes os índices de qualidade e como variáveis dependentes a magnitude dos erros.

Tabela 3.1: Exemplo de tabela de dados usada para estimar os parâmetros de modelos multivariáveis usado pelo método proposto.

Entradas					Saídas
Valor do Índice 1	Valor do Índice 2	Valor do Índice 3	Valor do Índice 4	Valor do Índice N	Valor Nominal do Erro i
I_1	I_2	I_3	I_4	I_5	Im_1
I_{1_n}	I_{2_n}	I_{3_n}	I_{4_n}	I_{5_n}	Im_{1_n}

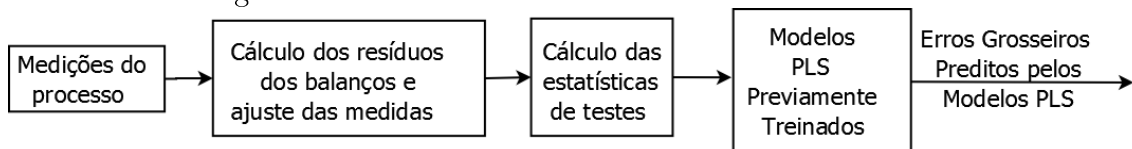
Fonte: Próprio autor

De forma mais detalhada, o método é composto das seguintes etapas:

- 1 A partir de um fluxograma de processo conhecido, são selecionadas, ou arbitradas estimativas preliminares para as vazões (valores nominais), onde os balanços de massa são todos satisfeitos, denominado $\bar{x}_{NOM,i,ns}$.
- 2 Erros aleatórios, $\epsilon_{i,ns}$, são gerados e somados à $\bar{x}_{NOM,i,ns}$ e denominados $y_{i,ns}$, ou seja $y_{i,ns} = \bar{x}_{NOM,i,ns} + \epsilon_{i,ns}$.
- 3 Erros grosseiros, $\delta_{i,ns}$, são adicionados ao termo $y_{i,ns}$.
- 4 Baseado nos valores de $y_{i,ns}$ e $\delta_{i,ns}$, são calculados os resíduos dos balanços de massa e os ajustes das medidas usando um problema de reconciliação de dados modificado.
- 5 Índices de qualidade dos balanços baseados nas estatísticas de testes dos testes Global (γ), Nodal ($z_{r,j}$) e de Medida ($z_{a,i}$), são calculados a partir dos resíduos dos balanços de massa e dos ajustes das medidas.
- 6 Os dados calculados, γ , $z_{r,j}$, $z_{a,i}$, $y_{i,ns}$ e $\delta_{i,ns}$, variáveis de dependentes e independentes, são usados para estimar parâmetros de modelos multivariáveis.

Os modelos obtidos pela metodologia PMGEI tem como objetivo prever a posição e magnitude dos erros grosseiros puros, $\delta_{i,ns}$, a partir de medições de processo, conforme Figura 3.2.

Figura 3.2: Esquema simplificado da aplicação da metodologia PMGEI proposta com os modelos gerados.



Fonte: Próprio autor

Para consolidar a metodologia PMGEI de avaliação de balanços de massa e DEG apresentada na Figura 3.1 foram desenvolvidas as seguintes etapas:

- 1 Escolha do método de otimização;
- 2 Seleção e formulação de estudos de caso;
- 3 Seleção e cálculo de índices de qualidade do balanço para ajuste de modelos;
- 4 Seleção da técnica de ajuste do modelos de DEG;
- 5 Escolha da função objetivo;
- 6 Escolha das incertezas;
- 7 Geração e seleção de dados para estimação de parâmetros dos modelos PLS;
- 8 Ajuste do modelo PLS;
- 9 Avaliação do método.

Detalhes de cada uma das etapas estão descritas nas demais seções deste capítulo.

3.2 Escolha do método de otimização

Quando se deseja realizar a reconciliação de dados somente com vazões totais e com a função objetivo de Mínimos Quadrados Ponderados, o problema de otimização resultante possui solução analítica mesmo na presença de variáveis não-medidas (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000; ROMAGNOLI; SÁNCHEZ, 1999; CROWE et al., 1983; KELLY, 1999; MITSAS, 2010; SWARTZ, 1989; VEVERKA; MADRON, 1997). Como na metodologia PMGEI deseja-se explorar outras funções objetivo (estimadores robustos) se faz necessário o uso de um otimizador externo. O otimizador escolhido foi o Ipopt (WÄCHTER; BIEGLER, 2006), capaz de tratar de problemas de Programação Não-Linear (NLP) genéricos com funções objetivos e restrições não-lineares. O Ipopt utiliza um algoritmo de ponto interior primal-dual com filtro para busca em linha (*line-search*). O Ipopt possui interface de comunicação com diversos programas de computador para computação científica, entre eles, o Scilab (INRIA, 2010). O Ipopt usa informações das derivadas primeira (matriz Jacobiana) e segunda (Matriz Hessiana), ou suas versões aproximadas, para encontrar o ótimo local do problema de otimização. Neste trabalho, as informações das matrizes

Jacobiana e Hessiana dos estimadores robustos (função objetivo) foram expressas analiticamente, enquanto que a matriz Jacobiana do balanço de massa é constante, porque os balanços de massa total nos equipamentos são funções lineares. Todas essas funções são expressas dentro do Scilab. Cabe ressaltar que outros otimizadores capazes de resolver problemas de programação não-linear também podem ser usados, porém, como o Ipopt apresenta-se, em termos de método e velocidade computacional, completamente adequado e devido também à integração com o *software* Scilab, o Ipopt foi escolhido.

3.3 Seleção e formulação de estudos de caso

A identificação apropriada de erros grosseiros é uma tarefa difícil, pois, os métodos de detecção são influenciados por muitos fatores que podem levar a resultados equivocados. Estudos anteriores elaborados por Rosenberg et al. (1987), Iordache et al. (1985) e Sánchez et al. (1999) indicaram que os algoritmos de detecção e identificação de erros grosseiros únicos e múltiplos podem ser influenciados por fatores como:

- 1 Magnitude das medições e seus limites;
- 2 Magnitude da razão entre erro grosseiro e a incerteza da medição;
- 3 Posição da medição que contém o erro grosseiro;
- 4 Restrições e estrutura do fluxograma de processo.

Mais especificamente em relação ao fluxograma de processo, Iordache et al. (1985) observou que, em alguns fluxogramas, a redundância necessária para a aplicação de técnicas de DEG pode ser degenerada, comprometendo os resultados das mesmas. As medições para esses fluxogramas são denominadas 'praticamente não-redundantes' e podem estar presentes nos seguintes casos (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000; SÁNCHEZ et al., 1999):

- Vazões com incertezas pequenas no mesmo equipamento (ou balanço) que uma vazão com incerteza elevada;

- Correntes paralelas;
- Vazões medidas que aparecem somente em uma equação com uma corrente não-medida;

Embora o tema de RD e DEG datem de mais de 50 anos, ainda existem muitos desafios nessa área (CROWE, 1996; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). A complexidade do tema sugere que os métodos de detecção propostos sejam testados em diversos casos para torná-los mais generalizáveis e robustos. Nesse sentido, o presente trabalho coletou 15 problemas lineares (somente com balanço de vazão total) de literatura, mais um caso industrial, para testar a metodologia PMGEI aqui desenvolvida. Os problemas foram selecionados para testar as adversidades presentes ao se aplicar técnicas de DEG. As principais características de cada problema selecionado são apresentadas na Quadro 3.1. Os problemas completos são apresentados em Valle (2011). A Tabela 1 é dividida em três colunas, a primeira indica o problema. Na segunda coluna são apresentadas as correntes do processo. Na terceira coluna, são apresentadas as características das respectivas correntes, conforme a seguinte abreviação:

- P: Correntes paralelas;
- R: Reciclo;
- M: Magnitude da incerteza ou medição.

Logo, tomando como exemplo o Problema 5, tem-se as correntes 4 e 5 como paralela e as correntes 2, 6, 7 e 8 como correntes problemáticas por diferença na magnitude de suas incertezas ou de suas medições. As notações com ponto-e-vírgula indicam que mais de um conjunto de correntes possuem a mesma característica, como, por exemplo, o Problema 8 que possui as seguintes correntes em paralelo: 2,3; 6, 7; 8, 9; 10, 11. Correntes entre parênteses indicam um reciclo alternativo, ou seja, com mais de um caminho possível.

Quadro 1: Características dos problemas selecionados.

Problema	Correntes	Características
P1	2,3	P
P2	2,3;5,6	P
P3	2,11;9,12;4,5,6,7,8	P
	1,2(11),9(12),3	R
P4		-
P5	4,5	P
	2,6,7,8	M
P6	2,3,4;2,3,5,6	R
P7	5,9;8,10	M
	5,7,8,9;2,3,5,6	R
P8	2,3;6,7;8,9;10,11	P
P9	1,2	P
	8,9,10	R
	3,4,5;5,6,7	M
P10	1,2;8,9,10,13;5,11,12	M
P11	2,3,6,5;2,7,9,8,5;9,12,10	R
	5,6,8;10,11,12	M
P12	5,6,7	P
	1,2,3,4;4,9,10;8,9,11;10,11,12	M
P13	12,13	P
	2,3,4;6,7,10;12(13),14,16	R
	1,2,4;6,7,8;7,9,10;14,15,16	M
P14	1,2,3,4;21,22;23,24	P
	10,11,15;15,16,19	M
P15	10,12,22,18,7,5;26,8,5,1,3,15,26	R
	1,2,3,4;5,6,7,8,9;10,11,12;12,16,22,25	M
P16	319,316,378,312;456,460;592,581;549,550	P
	408,453;441,401,402,404,405,407	R
	503,592,581;537,598,599	M

*P: Correntes paralelas; R: Reciclo

M: Magnitude da incerteza (ou medição)

Fonte: Próprio autor

3.4 Seleção e cálculos de índices de qualidade do balanço para ajuste do modelo de PLS

A detecção de erros grosseiros na metodologia PMGEI foi desenvolvida através da elaboração de modelos multivariáveis para predição da presença de erros grosseiros, e, caso existentes, sua magnitude e localização. A elaboração desses modelos necessita de dados de medições para predições dos erros grosseiros. Através da revisão bibliográfica, foi observado que algumas estatísticas de testes são boas indicadoras da qualidade do sistema de medição e do balanço de massa e podem ser usadas para predição de erros grosseiros. Outro critério para a escolha dos índices de qualidade de cada um dos balanços e medições foi a simplicidade computacional para sua avaliação e a capacidade de capturar erros grosseiros únicos e múltiplos dos sistemas propostos para estudo de caso. As seguintes estatísticas de teste foram escolhidas como índices de qualidade das medições e balanços de massa:

- Estatística de Teste Global (GT);
- Estatística de Teste de Medida (MT);
- Estatística de Teste Nodal (NT).

Os índices foram calculados usando o *software* Scilab (INRIA, 2010), que possui pacotes de otimização e de cálculos estatísticos. Cabe ressaltar que a estatística do Teste de Medida e Nodal não foram tomadas com seus valores absolutos, ou seja, os sinais dos ajustes e dos resíduos dos balanços foram considerados no cálculo desses índices, conforme

$$z_{am,i} = \frac{ad_i}{\sqrt{w_{i,i}}} \quad (3.1)$$

e

$$z_{rm,j} = \frac{r_j}{\sqrt{V_{j,j}}}, \quad (3.2)$$

em que $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$ são os índices das estatísticas de teste do MT e NT, respectivamente, sem considerar a operação de módulo em seu numerador. Com os índices calculados e propriamente mapeados, foram montadas tabelas para a coleta de dados e subsequente estimação de parâmetros do modelo preditivo. Nestas tabelas,

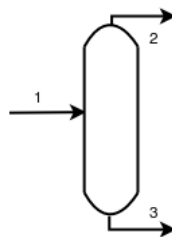
os dados de entrada, ou variáveis independentes (apresentadas em colunas), são os índices, enquanto que os dados de saída, ou variáveis dependentes (apresentadas em colunas) são os valores dos erros grosseiros gerados nas simulações, conforme apresentado na Tabela 3.2. Cada linha da tabela correspondente a um experimento numérico, podendo ou não conter erros grosseiros. Para melhor exemplificar a elaboração da Tabela 3.2, seja o equipamento de processo apresentado na Figura 3.3. A tabela para mapeamento de índices de qualidade pode ser representada pela Tabela 3.3. Cada linha da Tabela 3.3 corresponde à um experimento numérico com as primeiras 5 colunas descrevendo as variáveis independentes do modelo (ou entradas), em que $I1$ são os valores de γ ; $I2$, $I3$ e $I4$ são os respectivos valores de $z_{am,1}$, $z_{am,2}$ e $z_{am,3}$; $I5$ é o valor de $z_{rm,1}$. Cabe ressaltar que todos os valores de I_n são diferentes para cada linha da tabela. As saídas ou variáveis dependentes são as magnitudes dos erros grosseiros simulados (sem adição de erros aleatórios), tanto para erros de medição ($Bias_1$, $Bias_2$ e $Bias_3$) quanto para vazamentos ($Vazamento$). É possível notar que a magnitude do erro grosseiro de medição pode possuir tanto sinal positivo quanto negativo, enquanto que o vazamento terá sempre o mesmo sinal.

Tabela 3.2: Tabela para mapeamento de índices de qualidade.

Entradas					Saídas
Valor do Índice 1	Valor do Índice 2	Valor do Índice 3	Valor do Índice 4	Valor do Índice N	Valor Nominal do Erro i
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	$Im1$
$I1_n$	$I2_n$	$I3_n$	$I4_n$	$I5_n$	$Im1_n$

Fonte: Próprio autor

Figura 3.3: Exemplo de processo para elaboração da tabela de mapeamento de índices de qualidade.



Fonte: Próprio autor

Tabela 3.3: Tabela para mapeamento de índices de qualidade do exemplo apresentado.

Entradas					Saídas			
γ	$z_{am,1}$	$z_{am,2}$	$z_{am,3}$	$z_{rm,1}$	$Bias_1$	$Bias_2$	$Bias_3$	$Vazamento$
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	5	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	-5	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	5	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	-5	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	5	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	-5	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	5
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	5
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	6	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	-6	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	6	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	-6	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	6	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	-6	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	6
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	6
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>

Fonte: Próprio autor

A organização dos dados das simulações de erros grosseiros em forma de tabelas, como a Tabela 3.3, permite a alimentação de motores de cálculo para ajuste de modelos de forma simplificada. Diversas técnicas de ajuste de modelos estão disponíveis na literatura cuja seleção e aplicação será abordada na seção seguinte.

3.5 Seleção da técnica de ajuste do modelo de DEG

No caso em estudo, o principal objetivo é identificar erros grosseiros únicos e múltiplos de forma robusta, além de evitar a detecção de erros puramente aleatórios. Para executar tal tarefa, a metodologia PMGEI busca extrair informações dos dados das simulações (com e sem erros grosseiros) e, em um segundo momento, classificar os erros grosseiros em uma das categorias: medidor, vazamento, únicos ou múltiplos. Uma das alternativas para prever o comportamento de variáveis de processo baseados em variáveis independentes é a regressão multivariável. Em problemas de regressão multivariável, geralmente se deseja prever o comportamento de uma variável de resposta, ou dependente, ou de saída, baseado na magnitude de múltiplas variáveis independentes, ou entradas. Tal problema é consolidado e bem documentado na literatura por diversos autores (AGUIRRE, 2000; WERKEMA; AGUIAR, 2006; RAWLINGS et al., 1998). Nesta abordagem, parâmetros de um modelo multivariável puramente empírico são estimados a partir de variáveis independentes e dependentes. Com a estimação dos parâmetros, consolida-se um modelo matemático capaz de calcular o valor das variáveis dependentes a partir de variáveis independentes.

3.5.1 Regressão linear múltipla

Conforme comentado na seção anterior, o objetivo da regressão múltipla é prever o valor da variável dependente, ou de resposta, denominada \hat{y}_i , utilizando valores de variáveis independentes, denominadas \hat{x}_j , estimando o valor dos parâmetros do modelo, \hat{b}_j . Logo o modelo multivariável para o caso linear assume a forma:

$$\hat{y}_i = \hat{b}_0 + \hat{b}_1\hat{x}_{i,1} + \hat{b}_2\hat{x}_{i,2} + \cdots + \hat{b}_k\hat{x}_{i,k}, \quad (3.3)$$

em que o subscrito i , representa as diferentes observações, que, em nosso caso, serão as reconciliações de dados. A Equação 3.3 pode ser escrita pela notação vetorial da seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\mathbf{X}} \cdot \hat{\mathbf{b}}, \quad (3.4)$$

em que $\hat{\mathbf{Y}}$ é o vetor contendo as predições do modelo para o valor da variável de resposta em cada uma das n observações experimentais, conforme:

$$\hat{\mathbf{Y}} = [\hat{y}_1, \hat{y}_2, \hat{y}_3, \dots, \hat{y}_n]^T, \quad (3.5)$$

em que $\hat{\mathbf{b}}$ é o vetor cujos coeficientes representam as estimativas para cada um dos $k + 1$ coeficientes do modelo linear e assume a seguinte forma:

$$\hat{\mathbf{b}} = [\hat{b}_0, \hat{b}_1, \hat{b}_2, \hat{b}_3, \dots, \hat{b}_k]^T, \quad (3.6)$$

e $\hat{\mathbf{X}}$ é a matriz de valores de variáveis independentes cujas linhas são as observações das variáveis independentes (em nosso caso, as reconciliações de dados) e as colunas cada uma das variáveis, sendo que esta matriz assume a forma:

$$\hat{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} 1 & \hat{x}_{1,1} & \hat{x}_{1,2} & \cdots & \hat{x}_{1,k} \\ 1 & \hat{x}_{2,1} & \hat{x}_{2,2} & \cdots & \hat{x}_{2,k} \\ 1 & \hat{x}_{3,1} & \hat{x}_{3,2} & \cdots & \hat{x}_{3,k} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \hat{x}_{n,1} & \hat{x}_{n,2} & \cdots & \hat{x}_{n,k} \end{bmatrix}. \quad (3.7)$$

A solução analítica para o problema de mínimos quadrados para a estimação dos coeficientes $\hat{\mathbf{b}}$ pode ser obtida, através da aplicação de álgebra matricial, por:

$$\hat{\mathbf{b}} = (\hat{\mathbf{X}}^T \hat{\mathbf{X}})^{-1} \cdot (\hat{\mathbf{X}}^T \hat{\mathbf{Y}}). \quad (3.8)$$

Além disso, a forma linear apresentada pela Equação 3.3 também pode ser estendida para casos não-lineares nas variáveis independentes através da transformação destas variáveis \hat{x}_i (FINKLER, 2003; WERKEMA; AGUIAR, 2006).

3.5.2 Técnicas de redução de dimensionalidade

Um dos problemas encontrados em técnicas de regressão multivariável é a limitação numérica. Quando as variáveis independentes estão correlacionadas entre si, os métodos envolvidos no problema de estimação de parâmetros podem apresentar problemas (FINKLER, 2003). Na prática, quando as colunas da matriz $\hat{\mathbf{X}}$ são quase colineares, a inversão da matriz $\hat{\mathbf{X}}^T \hat{\mathbf{X}}$ acaba sendo muito sensível aos valores das

variáveis $\hat{x}_{i,k}$. Para resolver tais problemas existem os métodos de redução de dimensionalidade cujo princípio é realizar uma transformação da matriz $\hat{\mathbf{X}}$ em uma nova matriz onde não esteja presente a colinearidade, como, por exemplo, a técnica de Análise de Componentes Principais (PCA), assim apresentada:

$$\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{X}}_1 + \hat{\mathbf{X}}_2 + \cdots + \hat{\mathbf{X}}_a \quad (3.9)$$

ou

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{t}_1 \mathbf{p}_1^T + \mathbf{t}_2 \mathbf{p}_2^T + \cdots + \mathbf{t}_n \mathbf{p}_n^T \quad (3.10)$$

ou em notação vetorial

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}^T. \quad (3.11)$$

Segundo a técnica de PCA, cada um dos vetores $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \dots, \mathbf{t}_n$ (*score vectors*) é composto por n elementos, resultantes das combinações lineares das colunas de $\hat{\mathbf{X}}$ enquanto que os vetores $\mathbf{p}_1^T + \mathbf{p}_2^T + \cdots + \mathbf{p}_n^T$ (*loading vectors*) são compostos de k elementos, resultantes das combinações lineares das linhas de $\hat{\mathbf{X}}$. A partir da Decomposição em Valores Singulares (SVD) da matriz $\hat{\mathbf{X}}$, é possível obter os vetores \mathbf{T} e \mathbf{P} da seguinte forma (VARMUZA; FILZMOSE, 2009):

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{P}^T, \quad (3.12)$$

em que \mathbf{T}_0 contém os *pca scores* normalizados para o tamanho de 1 e \mathbf{P}^T é a matriz com os *loading vectors*. Os *pca scores*, \mathbf{T}_0 são obtidos por:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{S}, \quad (3.13)$$

enquanto que os *loading vectors* são obtidos por:

$$\mathbf{P} = \hat{\mathbf{X}}^T \cdot \mathbf{T}_0 \cdot \mathbf{S}^{-1}. \quad (3.14)$$

Após a extração da informação útil das variáveis em $\hat{\mathbf{X}}$ é possível realizar uma regressão multivariável nesse novo espaço de variáveis não correlacionadas, denominada de Regressão por Componentes Principais, ou PCR (*Principal Components Regression*). Substituindo $\hat{\mathbf{X}}$ da Equação 3.11 na Equação 3.4, temos:

$$\hat{\mathbf{Y}} = (\mathbf{TP}^T) \hat{\mathbf{b}} \quad (3.15)$$

e reagrupando

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{T}\mathbf{g} \quad (3.16)$$

em que $\mathbf{g} = \mathbf{P}^T \hat{\mathbf{b}}$, sendo que o vetor \mathbf{g} pode ser obtido por

$$\mathbf{g} = (\mathbf{T}^T \mathbf{T})^{-1} \cdot (\mathbf{T}^T \hat{\mathbf{Y}}) \quad (3.17)$$

sendo que os parâmetros $\hat{\mathbf{b}}$ originais podem ser obtidos novamente através de

$$\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{P}\mathbf{g}. \quad (3.18)$$

O método PCR pode ser aplicado quando a variável de saída é única ou as mesmas não estão correlacionadas. Quando diversas variáveis de saída, $\hat{\mathbf{Y}}$, estão presentes e estas podem estar correlacionadas, é conveniente usar a técnica de mínimos quadrados parciais, ou PLS (*Partial Least Squares*), que consiste em decompor as variáveis $\hat{\mathbf{Y}}$ em seus respectivos componentes principais, conforme:

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{U}\mathbf{Q}^T, \quad (3.19)$$

e, em seguida, realizar a regressão nesses novos espaços de variáveis não-correlacionadas, dadas por Equação 3.11.

Detalhes sobre implementações e descrições mais detalhadas da regressão por componentes principais (PCR) e os mínimos quadrados parciais (PLS) são abordados em diversos livros texto (VARMUZA; FILZMOSE, 2009; ADAMS, 2004; MARK; WORKMAN, 2007; JOLLIFFE, 2002).

Como ferramenta computacional para geração de modelos PLS, foi usado o *software* VRAnalyst (FINKLER et al., 2006). Neste programa de computador, os dados são alimentados em forma de tabela e estatísticas básicas em relação à qualidade do modelo podem ser facilmente avaliadas e os resultados com os modelos gerados podem ser simulados e avaliados. Estão presentes diversos tipos de modelos de mínimos quadrados parciais: Linear, Quadrático, Cúbico e Box-Tidel flexível cujos parâmetros são estimados usando o algoritmo NIPALS (*Non-Linear Iterative Partial Least Squares*)(VARMUZA; FILZMOSE, 2009). Os modelos podem ser exportados em formato compatível com o software Scilab. No presente trabalho foram ajustados modelos matemáticos tipo PLS quadráticos pois apresentaram melhor coeficiente de

determinação (R^2) que modelos PLS lineares em todos os 16 casos estudados. Modelos PLS cúbicos também apresentaram um coeficiente de determinação um pouco melhor que modelos PLS quadráticos, porém, como a estimação de seus parâmetros é mais onerosa computacionalmente, optou-se pelo uso de modelos PLS quadráticos. A vantagem do uso de modelos PLS está no fato de que erros grosseiros múltiplos, dependendo da posição onde os mesmos estão presentes no fluxograma de processo, podem gerar dados das variáveis de entrada (ou saída) correlacionados, dificultando a estimação dos parâmetros em modelos multivariáveis simples.

Os dados de entrada e saída para estimação de parâmetros dos modelos PLS quadráticos foram obtidos através de simulações numéricas conforme metodologia descrita nas próximas seções.

3.6 Escolha da função objetivo

Conforme comentado na seção anterior, alguns algoritmos de DEG falham quando estão presentes correntes paralelas nos equipamentos, que é um caso bastante comum em processos industriais. Um dos principais testes para a detecção de erros em medidores, o Teste de Medida (MT), que é o principal teste usado para detecção de erros únicos ou múltiplos, também apresenta limitações para esse tipo de sistema. A principal limitação do MT em sistemas com correntes paralelas é porque sua estatística de teste apresenta o mesmo valor para todas as correntes nessa categoria, não sendo possível distinguir o local certo do erro grosseiro. A Tabela 3.4 apresenta o resultado de uma simulação numérica do Problema 1 (apresentado na Figura 3.3), utilizando a função objetivo de mínimos quadrados ponderados, onde um erro grosseiro de medição com a magnitude de nove vezes a incerteza-padrão é adicionado nas correntes 1, 2 e 3 individualmente (apresentado nas linhas). É possível observar que, devido à topologia do sistema, não é possível distinguir a localização do erro grosseiro com este método, pois, todas as correntes possuem a mesma estatística de teste, não importando a localização do erro grosseiro adicionado. Nesse caso, o Poder Total (OP) do Teste de Medida (MT), que indica a fração de erros grosseiros corretamente identificada, é zero para todas as correntes,

pois não é possível identificar a posição do erro. Por esse motivo, o presente trabalho buscou explorar outras funções objetivo com o intuito de obter uma distinção entre a estatística de teste das correntes em questão, para que o sistema de aprendizado pudesse distinguí-las para determinar a posição correta do erro de medição.

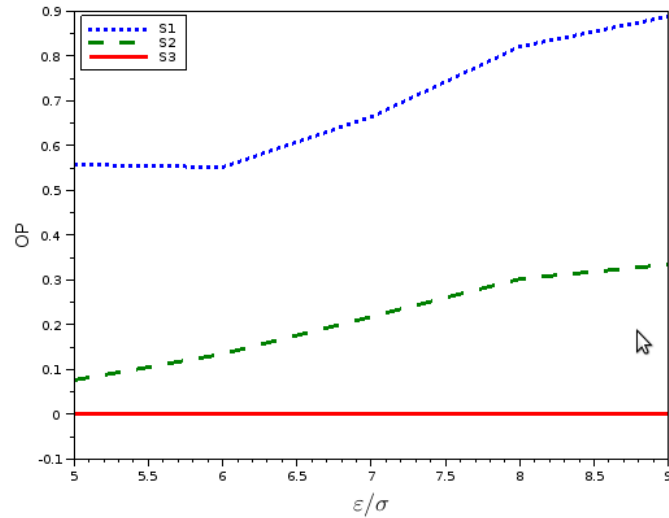
Tabela 3.4: Estatística de Teste de Medida para o Problema 1.

Erro	Estatística de Teste MT		
	$z_{a,1}$	$z_{a,2}$	$z_{a,3}$
Grosseiro			
Corrente 1	0,1462	0,1462	0,1462
Corrente 2	0,1462	0,1462	0,1462
Corrente 3	0,1462	0,1462	0,1462

Fonte: Próprio autor

Como funções objetivo alternativas, foram testados estimadores robustos, conforme apresentado no Apêndice B. Entre os estimadores utilizados, optou-se pelo estimador de Cauchy, pois o mesmo apresentou o melhor resultado para todos os problemas estudados. No método aqui apresentado foi usada a constante C_c com o valor de 2,3849, determinado por Özyurt e Pike (2004). Como exemplo do uso deste estimador, é apresentada a curva de Poder Total (OP), onde é graficado a magnitude da razão δ/u (onde δ é a magnitude do erro grosseiro e u a incerteza-padrão) contra o OP para o Problema 1, conforme Figura 3.4. Neste gráfico, é possível observar que, ao contrário do que acontece com o estimador MQP, o estimador de Cauchy apresenta um OP maior para as correntes 1 e 2, porém, erros de medição para a corrente 3 continuam sendo indistinguíveis. Tal limitação foi solucionada através da modificação das incertezas do problema original, apresentada na próxima seção.

Figura 3.4: Gráfico do OP do MT utilizando o estimador robusto de Cauchy para o Problema 1.

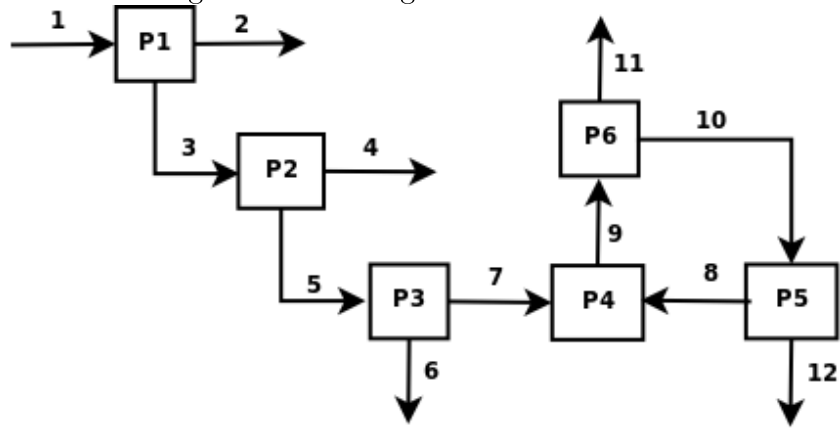


Fonte: Próprio autor

3.7 Escolha das incertezas

Conforme apresentado na seção anterior, somente a modificação da função objetivo não é suficiente para melhorar o OP para o Problema 1. Além disso, para sistemas onde existe reciclo interno de correntes, é possível que, devido à diferença entre as incertezas das correntes presentes no reciclo, a medição com erro seja incorretamente identificada. Tal fenômeno pode ser melhor exemplificado através do Problema 9, apresentado na Figura 3.5. Nesse fluxograma, é possível observar um reciclo formado pelas correntes 8, 9 e 10. Conforme apresentado na Tabela 3.5 a corrente 8 é a de maior precisão entre as correntes que formam o reciclo (menor incerteza-padrão), e, ao ser adicionado um erro grosseiro na mesma, esse erro acaba sendo atribuído às correntes mais imprecisas após a reconciliação de dados, como as correntes 9 e 10, mesmo usando uma função objetivo robusta, conforme apresentado na Tabela 3.6.

Figura 3.5: Fluxograma do Problema 9.



Fonte: Próprio autor

Tabela 3.5: Poder Total (OP) do MT para o Problema 9 usando o estimador de mínimos quadrados ponderados.

Corrente	Medida Nominal	Desvio Padrão	OP MT
1	230	38	0
2	21	1.1	0
3	209	5.0	0.507
4	35	1.8	0.104
5	174	2.0	0.384
6	15	0.9	0.036
7	159	7.3	0.839
8	50	1.0	0.149
9	209	5.0	0.755
10	94	2.0	0.310
11	115	18.1	0.853
12	44	2.4	0.403

Fonte: Próprio autor

Tabela 3.6: Poder Total (OP) do MT para o estimador robusto de Cauchy, usando as incertezas originais.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0.978	0.992	0.994	0.992	1
2	0	0	0	0	0
3	0.606	0.592	0.67	0.686	0.78
4	0.004	0.032	0.05	0.092	0.124
5	0.278	0.408	0.526	0.6	0.632
6	0.002	0.002	0.006	0.002	0.01
7	0.98	0.992	0.996	0.998	1
8	0	0.004	0.002	0.002	0.004
9	0.964	0.982	0.99	0.992	0.996
10	0.356	0.424	0.456	0.456	0.506
11	0.974	0.988	0.992	0.996	0.998
12	0.456	0.504	0.506	0.522	0.562

Fonte: Próprio autor

Uma alternativa eficiente para remover o problema do espalhamento de erros é a utilização das incertezas das medições iguais em todas as correntes, dando assim pesos iguais a todos os erros e reduzindo o efeito de espalhamento ou distribuição dos erros grosseiros. O uso das incertezas idênticas, em conjunto com o estimador robusto de Cauchy, apresentaram bons resultados para identificação de erros, conforme apresentado na Tabela 3.7.

Tabela 3.7: Poder Total (OP) do MT para o estimador robusto de Cauchy, usando incertezas unitárias em todas as correntes.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0.403	0.473	0.487	0.473	0.510
2	0.300	0.453	0.490	0.497	0.503
3	0.763	0.900	0.973	0.977	0.997
4	0.723	0.837	0.947	0.980	1.000
5	0.773	0.927	0.973	1.000	1.000
6	0.737	0.877	0.953	0.993	1.000
7	0.810	0.947	1.000	1.000	1.000
8	0.743	0.893	0.967	0.987	0.993
9	0.760	0.917	0.963	0.990	0.997
10	0.770	0.870	0.953	0.993	1.000
11	0.767	0.920	0.957	1.000	1.000
12	0.777	0.923	0.980	0.983	1.000

Fonte: Próprio autor

Com as técnicas do uso do estimador de Cauchy em conjunto com o uso de incertezas iguais, o poder de detecção de erros para o teste de medição apresentaram bons resultados, pois mimificam o que acontece com erros grosseiros em casos reais, ou seja, em uma planta industrial, onde uma falha em um medidor não afeta os demais medidores. Devido à melhoria no Poder Total dos testes MT e NT de DEG, o estimador de Cauchy em conjunto com o uso das incertezas unitárias foram usados para geração de dados para ajuste dos modelos PLS.

Ao longo dos experimentos numéricos desenvolvidos para a escolha das incertezas, outras magnitudes das incertezas originais e unitárias também foram testadas, entretanto, ao se aumentar essas magnitudes, o OP para detecção de vazamentos (Teste Nodal) é comprometido (diminui). É importante observar que, quando a incerteza de uma determinada corrente aumenta, o valor do respectivo elemento da diagonal da matriz de variância das medidas, Σ , aumenta. Consequentemente, a

matriz de variância-covariância dos balanços, \mathbf{V} aumenta, conforme a Equação 2.11, aqui rerepresentada:

$$\mathbf{V} = cov(\mathbf{R}) = \mathbf{A} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{A}^T,$$

assim, a estatística de teste $z_{rm,j}$, apresentada na Equação 2.13, diminui, pois o termo $V_{i,i}$ encontra-se no denominador da expressão, aqui rerepresentada:

$$z_{rm,j} = \frac{|r_j|}{\sqrt{V_{j,j}}}.$$

Também é possível observar que o mesmo efeito ocorre com a estatística de teste, $z_{am,i}$, pois, ao aumentar as incertezas, $z_{am,i}$ aumenta, conforme a Equação 2.17, aqui rerepresentada:

$$z_{am,i} = \frac{|ad_i|}{\sqrt{\overline{w_{i,i}}}},$$

rerepresentando a equação que define o respectivo elemento do denominador, $\overline{w_{i,i}}$:

$$\overline{\mathbf{W}} = \Sigma \cdot \mathbf{A}^T \cdot V^{-1} \cdot \mathbf{A} \cdot \Sigma,$$

logo, tanto $z_{am,i}$ quanto $z_{rm,j}$ sofrem o mesmo efeito com o aumento ou diminuição das incertezas e quanto maior forem suas magnitudes, maior a probabilidade dos erros serem classificados como grosseiros ou vazamentos. Embora o teste estatístico que classifica correntes e balanços com a presença de erros grosseiros dependa da magnitude de $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$ o efeito final sobre o OP, que determina a qualidade do método de DEG, não depende somente da magnitude dessas variáveis. Na prática, o efeito da variação das incertezas sobre as estatísticas de testes $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$ não é difícil de ser obtido analiticamente, porém, o efeito final sobre o OP é complexo. É importante salientar que, ao variar as incertezas, a distribuição de probabilidade Normal, parametrizada pela média e desvio-padrão, sofre mudança e há a necessidade de definir uma nova significância estatística dos testes em questão, por tentativa

e erro, para manter o AVT1 em 0,1. Logo, embora o uso de incertezas iguais para todas as correntes distribua os erros de forma mais homogênea, após a reconciliação de dados, entre as correntes, a determinação exata das magnitudes iguais das incertezas para obter uma boa relação de custo benefício entre o MT e NT, devem ser obtidas através de experimentos numéricos. Para exemplificar melhor a influência da magnitude das incertezas idênticas no OP do teste de medida, seja o Problema 1, apresentado na Figura 3.3 cujos dados são apresentadas as Tabelas 3.8 e 3.9. Através desses dados, é possível observar o aumento do OP com o aumento das magnitude das incertezas de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para 5 t.h^{-1} . Em contraponto, o OP do NT é reduzido ao aumentar a magnitude das incertezas idênticas de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para 5 t.h^{-1} , conforme pode ser observado nas Tabelas 3.10 e 3.11, respectivamente.

Tabela 3.8: Poder Total (OP) do MT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 0,1.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,395	0,459	0,495	0,506	0,495
2	0,198	0,348	0,446	0,45	0,484
3	0,339	0,458	0,489	0,449	0,466

Fonte: Próprio autor

Tabela 3.9: Poder Total (OP) do MT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 5.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,757	0,796	0,82	0,818	0,814
2	0,498	0,531	0,532	0,548	0,512
3	0,538	0,509	0,529	0,471	0,497

Fonte: Próprio autor

Tabela 3.10: Poder Total (OP) do NT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 0,1.

OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1

Fonte: Próprio autor

Tabela 3.11: Poder Total (OP) do NT utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicado por 5.

OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
7%	9%	11%	13%	15%
0,102	0,099	0,103	0,102	0,105

Fonte: Próprio autor

Segundo testes numéricos conduzidos nos problemas 1, 6 e 9, utilizando as incertezas originais e modificadas, a incerteza unitária para todas as correntes apresenta um bom compromisso para detecção de erros de medição e vazamentos, sendo tais testes apresentados no Apêndice C. Também foi possível observar nesses testes numéricos que, ao usar a incerteza igual para todas as correntes, o OP é influenciado pela magnitude da incerteza escolhida e da vazão da corrente associada. Em processos onde existem um grande número de correntes paralelas ligadas ao mesmo equipamento, também foi observado falhas na detecção, sendo necessário reajustar um novo conjunto de incertezas idênticas para todo o fluxograma, sendo tais casos apresentados e discutidos no próximo capítulo.

3.8 Geração e seleção de dados para ajuste dos modelos PLS

Após a seleção da função objetivo e das incertezas necessárias para distinguir entre os erros grosseiros, inicia-se o processo de seleção dos dados gerados para a estimação de parâmetros dos modelos PLS.

3.8.1 Geração e seleção de dados com erros puramente aleatórios

Nesse tipo de experimento numérico semelhante à simulação de Monte Carlo, previamente à geração de dados com erros aleatórios, a literatura reporta a necessidade de determinar uma significância estatística, por tentativa e erro, para os testes GT, MT e NT de forma a manter a Média dos Erros do Tipo I (AVT1) em 0,1 ou 10% (SERTH; HEENAN, 1986; ÖZYURT; PIKE, 2004; ROSENBERG et al., 1987; IORDACHE et al., 1985; ZHANG et al., 2010; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). Em seguida, são gerados e selecionados dados com erros puramente aleatórios através das seguintes etapas:

- 1 Gerar dados de medições de vazão total com erros puramente aleatórios, utilizando a função Normal, com o desvio-padrão idêntico e unitário, e adicionar a todas as correntes.
- 2 Reconciliar os dados e calcular as estatísticas de teste para o GT, MT e NT $(\gamma, z_{a,i}, z_{r,j})$.
- 3 Se as estatísticas dos testes GT, MT (para todas as medições) e NT (para todos os balanços) forem maior que a significância, descartar a simulação.
- 4 Caso contrário, adicionar ao conjunto de ajuste com erro grosseiro zero.
- 5 Repetir o procedimento NA vezes.

No procedimento acima descrito, após as etapas 1 e 2 estarão presentes tanto dados com erros puramente aleatórios quanto dados com erros grosseiros, devido a

quantidade elevada de experimentos numéricos realizado. Na etapa 3, a eliminação das simulações que ultrapassam a estatística de testes para o GT, MT e NT é necessária, pois, não é desejado que no conjunto de dados com erros puramente aleatórios estejam presentes dados com erros grosseiros para estimação de parâmetros do modelo. Logo, nesse conjunto de dados, somente dados com erros aleatórios são usados nos ajustes dos modelos. O critério de inclusão ou descarte dos dados é baseado na significância estatística dos testes de hipótese previamente determinada de forma a manter o AVT1 em 0,1 ou 10%. Esta significância estatística será a mesma usada para distinguir dados com erros grosseiros e sem erros grosseiros nas seções seguintes. O descarte dos dados que excedem a significância estatística tem um efeito positivo posteriormente na estimação de parâmetros do modelo empírico multivariável, pois qualquer erro aleatório adicionado à variáveis de entrada ou saída desse tipo de modelo reduzem a qualidade dos resultados dos mesmos (VARMUZA; FILZMOSE, 2009), sendo que tal efeito aumenta em função da magnitude do erro aleatório adicionado.

O número NA de repetições do procedimento está relacionado à obtenção de um conjunto de dados suficientemente grande para evitar o efeito de *overfitting* ou sobreajuste. Fixando o parâmetro NA do procedimento em 100, garante a obtenção, na média, de 90 pontos que serão incluídos nesse conjunto de dados. Considerando que para geração de um modelo quadrático multivariável estão presentes $2n\hat{X} + 1$ parâmetros ¹, onde $n\hat{X}$ é o número de variáveis independentes do modelo, seria necessário $2n\hat{X} + 2$ pontos para evitar o sobreajuste. Para o método proposto, considerando em processo com um equipamento e três correntes, estão presentes 5 variáveis de entradas, sendo que nesse caso, seriam necessárias 12 simulações. Considerando que restarão em média 90 simulações após a aplicação do procedimento acima descrito, após o descarte das simulações, é possível observar que o número de simulações é mais que suficiente para evitar o sobreajuste. Além disso, é importante salientar que mais dados serão adicionados ao conjunto de estimação após as etapas seguintes.

Após a etapa anteriormente descrita, são construídas as primeiras linhas da tabela com dados puramente aleatórios, conforme Tabela 3.12, onde o número de linhas está relacionado ao número de simulações não descartadas.

¹Considerando a ausência de termos quadráticos cruzados

Tabela 3.12: Tabela para mapeamento de índices de qualidade para erros puramente aleatórios para um processo com um equipamento e três correntes.

Entradas					Saídas			
γ	$z_{am,1}$	$z_{am,2}$	$z_{am,3}$	$z_{rm,1}$	$Bias_1$	$Bias_2$	$Bias_3$	$Vazamento$
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$

Fonte: Próprio autor

3.8.2 Geração e seleção de dados com erros grosseiros nos medidores - erros únicos

A geração e seleção de dados com erros grosseiros nos medidores devem ser aplicadas sequencialmente em todas as medições, e segue as seguintes etapas descritas abaixo:

- 1 Usando o conjunto de dados aleatórios gerados na etapa anterior (removidos os falsos positivos) gera-se, para uma determinada corrente, diga-se C , um erro grosseiro
- 2 Reconciliar os dados e calcular as estatísticas de teste para o GT, MT e NT $(\gamma, z_{a,i}, z_{r,j})$.
- 3 Usando a significância estatística dos erros puramente aleatórios (seção anterior), se a estatística dos testes GT, MT e NT para a corrente, ou nós que envolvem a corrente, forem menor que a significância, descartar a simulação.
- 4 Caso contrário, adicionar ao conjunto de ajuste com erro grosseiro diferente de zero.
- 5 Repetir o procedimento NB vezes com a corrente C .

Os erros grosseiros da etapa 1 foram variados da magnitude de cinco a nove vezes as incertezas-padrão. O sinal dos erros foi escolhido utilizando uma distribuição uniforme, com a mesma probabilidade do sinal ser positivo ou negativo. O número de simulações, NB , foi fixado em 100 para obter um conjunto de dados com diversos elementos para evitar o efeito de sobre-ajuste. A significância estatística da etapa de geração de dados com erros puramente aleatório (seção anterior) foi usada como critério para descartar as simulações. Tal procedimento de descarte foi realizado para remover simulações que poderiam entrar na estimação de parâmetros do modelo e, após somar erros aleatórios e grosseiros, os erros de medições e vazamentos serem considerados como erros aleatórios. Cabe ressaltar que esse teste era feito individualmente ou seja, se, ao adicionar um erro na corrente C e a estatística de teste dessa, e somente dessa, corrente fosse inferior ao critério de corte, a simulação como um todo era eliminada. Testes numéricos foram previamente elaborados e indicaram, conforme esperado, que a inclusão de todos os dados, sem descarte, reduz a qualidade do ajuste do modelo, avaliado através do coeficiente de determinação R^2 e também reduz a capacidade de identificação de erros grosseiros do método proposto. A faixa de erros grosseiros entre cinco a nove vezes os desvios-padrão usada no presente trabalho foi determinada através de experimentos numéricos. Valores dos desvios-padrão menor que cinco reduzem a magnitude de $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$, e, consequentemente a probabilidade de classificação da medição final como erro grosseiro, reduzindo o número de dados no conjunto usado para estimação de parâmetros do modelo. O uso de nove desvios-padrão já incluem uma quantidade suficiente de dados no conjunto de dados para estimação, não sendo necessário usar desvios-padrão de magnitudes maiores.

Além disso, existe um compromisso entre a escolha da magnitude da incerteza idêntica e as estatísticas de teste $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$. Ao se reduzir as magnitudes das incertezas, $z_{am,i}$ aumenta, consequentemente, aumenta a probabilidade de detectar erros grosseiros, incluindo um maior número de dados nesse conjunto. Em contraponto, como $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$ não possuem uma relação diretamente proporcional com as magnitudes das incertezas, com a redução dessas, pode ocorrer a redução de $z_{rm,j}$, reduzindo o número de dados no conjunto para determinação de vazamentos. Cabe ressaltar que, para a estimação de parâmetros de um modelo genérico, quanto maior

o número de dados distribuídos de forma homogênea em um intervalo, melhor a qualidade do ajuste(WERKEMA; AGUIAR, 2006; VARMUZA; FILZMOSER, 2009), o que foi confirmado no caso em estudo através de experimentos numéricos.

Após essa etapa, o conjunto de dados será concatenado com os dados obtidos na etapa anterior conforme apresentado na Tabela 3.13, onde o número de linhas está relacionado ao número de simulações não descartadas.

Tabela 3.13: Tabela para mapeamento de índices de qualidade após a geração de dados com erros aleatórios e erros grosseiros nas medições para processo com um equipamento e três correntes.

Entradas					Saídas			
γ	$z_{am,1}$	$z_{am,2}$	$z_{am,3}$	$z_{rm,1}$	$Bias_1$	$Bias_2$	$Bias_3$	$Vazamento$
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	5	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	-5	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	5	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	-5	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	5	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	-5	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	6	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	-6	0	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	6	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	-6	0	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	6	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$	0	0	-6	0
$I1$	$I2$	$I3$	$I4$	$I5$

Fonte: Próprio autor

3.8.3 Geração e seleção de dados com erros grosseiros de vazamentos - erros únicos

A geração e seleção de dados com erros grosseiros de vazamentos deve ser aplicada sequencialmente em todos os equipamentos, e segue as seguintes etapas:

- 1 Usando o conjunto de dados aleatórios gerados na etapa anterior (removidos os falso positivo) gera-se, para um determinado equipamento, diga-se M , um vazamento.
- 2 Calcular as medições a partir dos resíduos.
- 3 Reconciliar os dados e calcular as estatísticas de teste para o GT, MT e NT $(\gamma, z_{am,i}, z_{rm,j})$.
- 4 Usando a significância estatística dos erros puramente aleatórios (seção anterior), se a estatística dos testes GT, MT e NT para as correntes envolvidas no equipamento, ou no próprio equipamento, forem menor que a significância, descartar a simulação.
- 5 Caso contrário, adicionar ao conjunto de ajuste com erro grosseiro diferente de zero.
- 6 Repetir o procedimento NV vezes.

Os vazamentos adicionados nos equipamentos eram variados da magnitude de 7% a 15% (com intervalo de 2%) da vazão total que passa pelo equipamento (soma das vazões que entram e que saem, sem considerar o sinal), determinado por experimentos numéricos com o objetivo de obter um conjunto de dados com um número razoável de elementos. O número de simulações, NV , foi fixado em 100 para obter um conjunto de dados com diversos elementos para evitar o efeito de sobre-ajuste. Cabe ressaltar que o vazamento tem sempre sinal negativo em relação ao resíduo aleatório. Como a estatística do Teste Nodal não necessita da reconciliação, é necessário obter as medições a partir dos resíduos dos balanços de massa da seguinte forma:

$$\mathbf{Y} = \Sigma \cdot \mathbf{A}^T \cdot (\mathbf{A}\Sigma \cdot \mathbf{A}^T)^{-1} \cdot \mathbf{R} + \bar{\mathbf{X}}_{NOM}, \quad (3.20)$$

em que \bar{X}_{NOM} é o valor nominal da medição. Em seguida, obtida as medições a partir dos vazamentos, as estatísticas de teste γ , $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$ foram calculadas. Na próxima etapa, as simulações onde as correntes ou resíduos dos equipamentos que possuem uma estatística de teste abaixo do critério de corte são descartadas, utilizando a mesma significância estatística do erro puramente aleatório da seção anterior. Tal procedimento foi realizado para remover simulações que poderiam entrar no conjunto de dados e, após somar erros aleatórios e grosseiros, os erros de medições e vazamentos serem considerados como erros aleatórios. Cabe ressaltar que esse teste era feito individualmente ou seja, se, ao adicionar um vazamento no equipamento M e a estatística de teste desse, e somente desse, equipamento fosse inferior ao critério de corte, a simulação como todo era eliminada. Testes numéricos foram previamente elaborados e indicaram, conforme esperado, que a inclusão de todos os dados, sem descarte, reduz a qualidade do ajuste do modelo, avaliado através do coeficiente de determinação R^2 e também reduz a capacidade de identificação de erros grosseiros. Conforme discutido na seção anterior, existe um compromisso entre a magnitude das incertezas idênticas e as estatísticas de teste $z_{am,i}$ e $z_{rm,j}$. Dependendo da magnitude das incertezas idênticas escolhidas, após o ajuste adequado do AVT1, haverá um maior probabilidade de detecção de erros grosseiros nas correntes ou para os vazamentos, sendo essa relação difícil de deduzir analiticamente. No presente trabalho, conforme mencionado anteriormente, a escolha da magnitude das incertezas foi determinada por experimentos numéricos visando obter um melhor compromisso entre o OP da detecção de erros grosseiros nas correntes e para os vazamentos. É importante ressaltar que, se o OP para o NT é muito baixo, poucos dados serão incluídos no conjunto de dados, reduzindo o OP do método proposto.

Após essa etapa, o conjunto de dados será concatenado com os dados obtidos na etapa anterior conforme apresentado na Tabela 3.14, onde o número de linhas está relacionado ao número de simulações não descartadas.

Tabela 3.14: Tabela para mapeamento de índices de qualidade após a geração de dados com erros aleatórios e erros grosseiros nas medições e vazamentos para processo com um equipamento e três correntes.

Entradas					Saídas			
γ	$z_{am,1}$	$z_{am,2}$	$z_{am,3}$	$z_{rm,1}$	$Bias_1$	$Bias_2$	$Bias_3$	$Vazamento$
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	5	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	-5	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	5	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	-5	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	5	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	-5	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	5
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	5
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	6	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	-6	0	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	6	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	-6	0	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	6	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	-6	0
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	6
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>	0	0	0	6
<i>I1</i>	<i>I2</i>	<i>I3</i>	<i>I4</i>	<i>I5</i>

Fonte: Próprio autor

3.8.4 Geração e seleção de dados com erros grosseiros nos medidores e vazamentos - erros múltiplos

No caso de erros múltiplos, a metodologia de seleção de dados é um pouco diferente da metodologia de erros únicos. É possível ajustar um modelo de DEG com erros múltiplos somente de erros de medição, somente de vazamentos ou ambos

combinados. Também é possível selecionar a quantidade de erros grosseiros para ser adicionada ao fluxograma, gerando assim um problema combinatorial. Como no conjunto de problemas teste estão presentes 16 fluxogramas, a quantidade de simulações necessárias seria bastante grande, por isso, o presente trabalho selecionou alguns cenários de erros para cada fluxograma de teste.

O problema de geração de erros grosseiros de medição e vazamentos para erros múltiplos é ligeiramente distinto dos apresentados para erros únicos. A principal diferença nesse caso, é que, ao invés de investigar a estatística de teste somente das correntes, ou equipamentos, onde os erros grosseiros são adicionados, todo o conjunto de estatística de testes de medições e resíduos de balanços de equipamentos é investigado. Somente simulações onde qualquer estatística de teste de medição ou resíduos dos balanços ultrapassar o limite da estatística de teste, essa linha é incluída no conjunto de teste. Esse procedimento foi assim tomado pois, observou-se que, em algumas simulações, erros múltiplos em medidores acabavam se comportando como erros únicos em outros medidores, sendo que esse fenômeno deveria ser capturado e enviado para o modelo que terá seus parâmetros ajustados.

Após montada a tabela de dados, semelhante à Tabela 3.3, uma parte dos dados foi separada para ajuste dos parâmetros dos modelos de DEG e outra utilizada para teste do mesmo, sendo que essa última não foi inserida no conjunto de dados para ajuste. Para cada problema, 2 modelos foram gerados, um para erros únicos e outro para erros múltiplos.

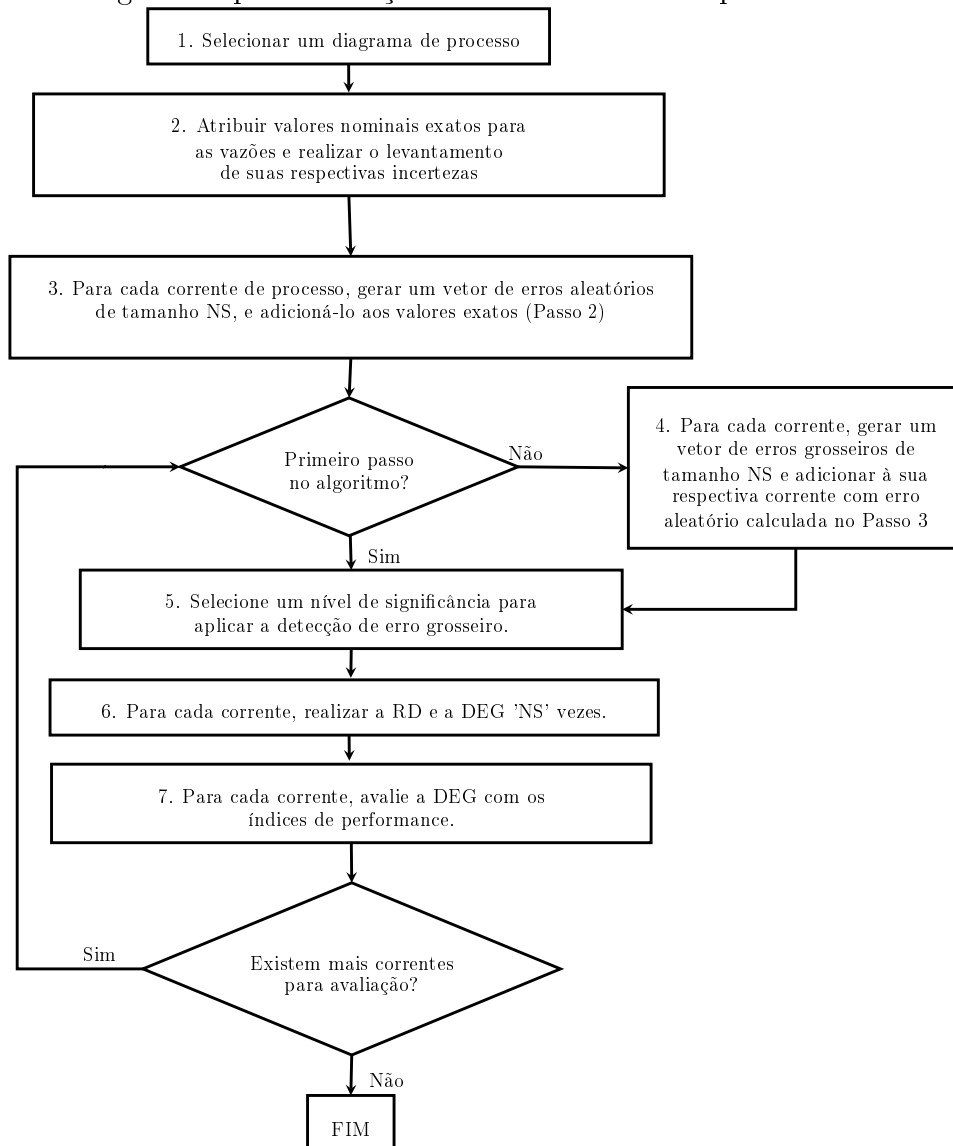
redução de dimensionalidade possam isolar o efeito de cada erro grosseiro nos erros múltiplos, independente de sua magnitude.

3.9 Avaliação do método de DEG

Após ajustados os parâmetros dos modelos, para os 16 problemas teste selecionados, foram utilizadas simulações numéricas para avaliar a capacidade dos métodos de literatura e proposto de identificar apropriadamente os erros grosseiros. Os testes de literatura utilizados são o Teste Nodal (NT) e Razão de Verossimilhança

Generalizada (GLR). As simulações numéricas utilizadas estão de acordo com as metodologias de avaliação de técnicas de identificação de erros grosseiros encontradas na literatura (SERTH; HEENAN, 1986; ÖZYURT; PIKE, 2004; ROSENBERG et al., 1987; IORDACHE et al., 1985; ZHANG et al., 2010; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). O detalhamento das etapas para o teste do método de identificação de erros de medição e vazamentos são apresentadas na Figura 3.6 e Figura 3.7, respectivamente.

Figura 3.6: Algoritmo para avaliação de técnicas de DEG para erros em medições.



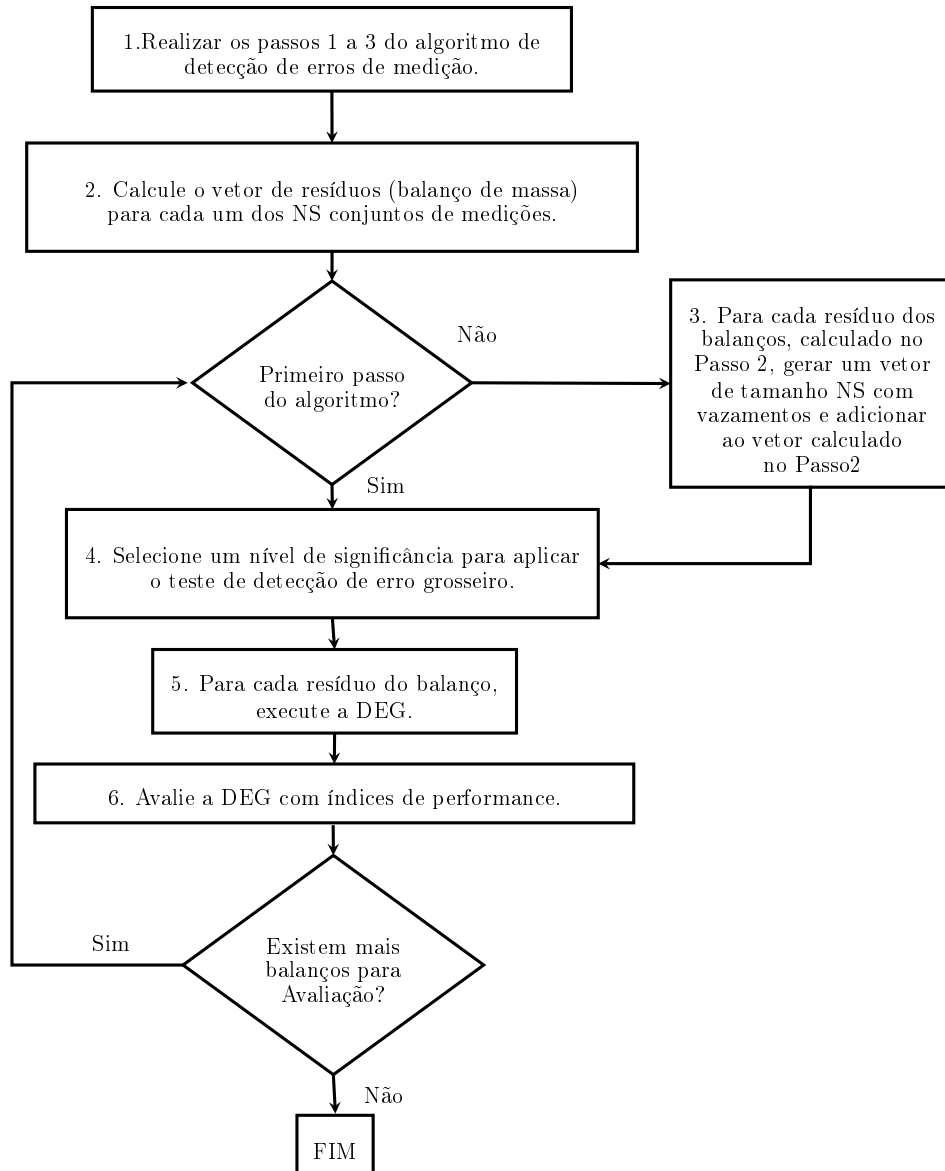
Fonte: Próprio autor

As etapas detalhadas do algoritmo apresentado na Figura 3.6 são assim descritas.

- 1 Selecionar o fluxograma de processo.
- 2 Selecionar valores nominais para todas as vazões, considerando o sistema em estado estacionário, satisfazendo o balanço de massa de todas as unidades, denominando-as de $\bar{x}_{NOM,i}$. Configurar a incerteza-padrão de cada instrumento de medição.
- 3 Gerar um vetor de erros aleatórios de tamanho NS (em que NS é o número de testes de simulação), denominando-os de $\epsilon_{i,ns}$, para cada medida, utilizando distribuição Normal com média zero e desvio padrão dado pelo valor da incerteza-padrão configurada na Etapa 2. Adicionar $\epsilon_{i,ns}$ aos valores nominais das medições: $y_{i,ns} = \bar{x}_{NOM,i} + \epsilon_{i,ns}$ (ou \mathbf{Y}_{ns} em notação vetorial).
 - 3.1 Se for a primeira execução do laço, ir para a Etapa 5, caso contrário, ir para a Etapa 4.
- 4 Para cada corrente, gerar um vetor de erros grosseiros de tamanho NS, denominado $\delta_{i,ns}$. A magnitude e o sinal do mesmo deve seguir uma distribuição uniforme e aleatória escolhida entre os limites superiores e inferiores: $l(\bar{x}_{NOM,i} + \epsilon_{i,ns}) \leq \delta_{i,ns} \leq up(\bar{x}_{NOM,i} + \epsilon_{i,ns})$. Onde l é o fator multiplicativo para o limite inferior e up é o fator multiplicativo do limite superior do erro grosseiro que serão gerados. Adicionar $\delta_{i,ns}$ ao termo $y_{i,ns}$ (previamente avaliado no passo 3), para obter o valor final da medição. No caso de múltiplos erros grosseiros, a localização dos mesmos deve ser de forma uniforme e aleatória, ou seja algumas medições podem não conter erros grosseiros.
- 5 Selecionar o nível de significância, α , para o teste estatístico. Essa significância deve ser determinada por tentativa e erro para manter o AVT1 próximo a 0,1 quando não há erros grosseiros presentes.
- 6 Executar o método de RD e DEG a ser estudado. As etapas 3.1 à 6 devem ser repetidas NS vezes.
- 7 Avaliar o método de DEG em estudo através de índices de performance usando os resultados de todas as NS simulações.

Também foi realizada simulações para aplicação do Teste Nodal, NT, apresentado na Figura 3.7, que é ligeiramente diferente do procedimento anterior, devido ao fato de que não é necessário aplicar o procedimento de reconciliação de dados à cada simulação, visto que os testes estatísticos são aplicados somente aos resíduos brutos.

Figura 3.7: Algoritmo para avaliação das técnicas de DEG para vazamentos em equipamentos.



Fonte: Próprio autor

As etapas detalhadas do algoritmo apresentado na Figura 3.7 são assim descritas.

1 Executar os passos 1 a 3 do algoritmo apresentado na Figura 3.7.

2 Para cada simulação, NS, use o conjunto de medições (\mathbf{Y}_{ns}) e calcule, para cada equipamento o resíduo, denominado $r_{j,ns}$, ou vetor dos resíduos, \mathbf{R}_{ns} .

2.1 Se for a primeira execução do laço, ir para a Etapa 4, caso contrário ir para a Etapa 3.

3 Para cada equipamento, gerar um vetor de erros grosseiros de tamanho NS, denominado $\delta_{j,ns}^r$. O sinal do erro grosseiro é sempre negativo, por se tratar de um vazamento. A magnitude do vazamento deve ser escolhida aleatoriamente entre os limites inferiores e superiores: $l_j^r (\text{total nf}_j) \leq \delta_{j,ns}^r \leq up_j^r (\text{total nf}_j)$, em que l_j^r é o fator multiplicativo do limite inferior de geração de vazamentos, total nf_j é a soma total das vazões que entram e saem do equipamento e up_j^r é o fator multiplicativo do limite superior de geração de vazamentos. Em seguida, somar $r_{j,ns}$ e $\delta_{j,ns}^r$ para obter os resíduos finais (aleatório mais vazamento).

4 Escolher o nível de significância, α , para o teste estatístico. Essa significância deve ser determinada por tentativa e erro para manter o AVT1 próximo a 0,1 quando não há erros grosseiros presentes.

5 Executar a técnica de DEG em estudo. Repetir NS vezes as etapas 1 a 5.

6 Avaliar o método de DEG em estudo através de índices de performance usando os resultados de todas as NS simulações.

No que diz respeito ao trabalho em questão, é possível afirmar que, um sistema de detecção de erros grosseiros satisfatório deve atender aos seguintes requisitos:

- Detectar a existência e posição do sensor com falha e seu sinal (positivo ou negativo).
- Detectar a existência e posição do vazamento.
- Não detectar erros aleatórios como falhas (falso positivo).
- Não detectar falso positivos em outras correntes.
- Fornecer uma estimativa da magnitude do erro.

Nesse sentido, para avaliar a performance dos testes de detecção de erros de grosseiros (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000) serão utilizados os seguintes índices: Poder Total(OP), Média do Valor dos Erros do Tipo 1 (AVT1), Seletividade e Erro Médio de Estimção (AEE), conforme apresentado no Capítulo 2.

Como, na metodologia PMGEI proposta, os resultados das medições e resíduos dos balanços dos equipamentos partem de dados preditos por um modelo, algumas definições são propostas para tornar equivalentes os índices de performance de modelos preditivos com os utilizados pela literatura, acima descritos. No conjunto de dados de teste com erros grosseiros (medição e vazamentos) são separados os dados de todas as correntes. O menor valor do erro grosseiro predito e do vazamento passa a ser o critério de corte de falso positivo, ou seja, no conjunto de erros puramente aleatórios, o valor de erro predito que ultrapassar o menor valor do erro grosseiro predito passa a ser considerado um falso positivo e contabilizará a Média do Valor dos Erros do Tipo 1, ATV1. Já a contabilização de um erro grosseiro corretamente identificado (usado na avaliação do Poder Total e Seletividade) é dado quando o valor do erro grosseiro ultrapassa o maior e o menor valor do erro puramente aleatório (pois deve ser também considerado o sinal do mesmo). O Erro Médio de Estimção é aplicado somente em casos onde os erros grosseiros são corretamente identificados. Os resultados da metodologia PMGEI são apresentados no próximo capítulo.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Obtenção dos resultados

Conforme descrito no capítulo anterior, os resultados da metodologia de DEG propostos foram obtidos, resumidamente descrito, em três etapas:

- Geração de dados;
- Ajuste dos modelos PLS para DEG;
- Teste dos modelos PLS.

Os procedimentos descritos no capítulo anterior foram implementados utilizando o programa de computador Scilab (INRIA, 2010). O Scilab possui uma série de comandos e bibliotecas estatísticas e permite a execução dos mesmos em série através de *scripts*, facilitando a criação de algoritmos e execução de tarefas iterativas. Além disso, o Scilab é capaz de se comunicar com o otimizador Ipopt (WÄCHTER; BIEGLER, 2006). Entre as diversas vantagens do aplicativo, é importante citar a sua gratuidade além de possuir código-fonte aberto. O *software* utilizado para estimação de parâmetros dos modelos PLS foi o VRAnalyst 1.0.23 (FINKLER et al., 2006).

Para execução destas etapas, foram utilizados 2 computadores diferentes. O primeiro, onde a maioria dos testes foi executado, um computador PC Core 2 Quad Q8400 2.7 Mhz com 4 GB de memória RAM, utilizando como sistema operacional Ubuntu Linux 10.04. O software utilizado para gerar os dados foi o Scilab versão 5.4.0. O segundo computador, um laptop PC Core 2 Duo 1.7Mhz com 3 GB de memória RAM utilizando como sistema operacional Ubuntu Linux 10.04. O software

utilizado para gerar os dados foi o Scilab versão 5.3.3. Cabe ressaltar que nenhum recurso de paralelização foi utilizado para redução de tempo computacional.

Inicialmente, foram gerados para teste do método proposto, cenários com erros únicos e múltiplos, sendo primeiro apresentado o potencial de predição de erros únicos, seguido dos erros múltiplos. Para os erros múltiplos, devido à possibilidade muito grande de combinações (de número e posições), optou-se por selecionar apenas um cenário para a avaliação do método.

Para comparação dos resultados do método proposto, foi escolhido o GLR para teste de erros de medição e vazamentos e Teste Nodal para vazamentos. O Teste de Medida não foi utilizado devido a sua equivalência ao GLR para erros únicos (NARASIMHAN; MAH, 1987; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000). Outro motivo para uso do GLR, é a capacidade de estimar a magnitude do erro grosseiro, tanto para medições quanto para vazamentos. O GLR também tem sido usado por alguns autores como teste de referência para comparação de novas técnicas de DEG, devido ao seu potencial (KELLER et al., 1994; SINGTH et al., 2001; SÁNCHEZ et al., 1996; SÁNCHEZ et al., 1999). Para geração de dados dos métodos GLR e NT para comparação com a metodologia PMGEI, foi utilizado o procedimento conforme apresentado na Figura 3.6, para erros de medição, e Figura 3.7 para vazamentos, utilizando as incertezas-padrão originais de cada problema. Para avaliação do Poder Total (OP) e Erro Médio de Estimção (AEE) foram utilizadas 2500 simulações, NS , para cada erro grosseiro de medição ou vazamento. Tal número se mostrou adequado pois, de acordo com Rosenberg et al. (1987), o Poder do Teste estatístico é aproximado pelo OP com um erro menor que 0.02 em aproximadamente 95% das simulações. Os erros grosseiros de medição foram gerados aleatoriamente na faixa de cinco a nove vezes a incerteza-padrão (originais), pois, estes limites são bem comuns na literatura. Os sinais dos erros grosseiros de medição foram atribuídos com a mesma probabilidade de ocorrer (distribuição uniforme). A faixa de vazamentos gerados ficou entre 0,07 e 0,15 vezes a vazão total que passa pelo equipamento, sendo esse limite proposto no presente trabalho.

Para o ajuste do modelo proposto foram utilizados aproximadamente 180 dados para cada faixa de vazão de corrente mais 180 dados para cada faixa de vazamento

e mais 180 dados para erros aleatórios. O número de pontos usado para a estimação de parâmetros do modelo é dado pela seguinte expressão:

$$\frac{bias_{upper} - bias_{lower} + 1}{\Delta_{bias}} .nc.NS + ne \frac{leak_{upper} - leak_{lower} + 1}{\Delta_{leak}} .NS + NS, \quad (4.1)$$

em que $bias_{upper}$ é o limite superior para o erro grosseiro de medição, $bias_{lower}$ é o limite inferior para o erro grosseiro de medição, Δ_{bias} é o intervalo entre os valores superiores e inferiores dos erros de medição, nc é o número de correntes, ne o número de equipamentos, NS o número de simulações, $leak_{upper}$ o limite superior para os vazamentos, $leak_{lower}$ o limite inferior para os vazamentos e Δ_{leak} o intervalo entre os limites inferiores e superiores para os vazamentos. No estudo em questão o erro grosseiro de medição foi variado entre a faixa de cinco e nove vezes as incertezas-padrão ($bias_{lower}$ e $bias_{upper}$, respectivamente) com intervalo de uma unidade de erro grosseiros (Δ_{bias}). O vazamento foi simulado no intervalo entre 7% a 15% da vazão total que passa pelo equipamento ($leak_{lower}$ e $leak_{upper}$, respectivamente) com intervalo de 2% (Δ_{leak}). Utilizando como exemplo o Problema 1, com 3 correntes e 1 equipamento, tem-se:

$$(9 - 5 + 1) .3.180 + 1.5.180 + 180 = 3780,$$

dessa forma, tem-se quantidade de dados suficiente para evitar o fenômeno de sobreajuste ou *overfitting*.

O número de pontos usado no conjunto de teste é dado pela seguinte equação:

$$\frac{bias_{upper} - bias_{lower} + 1}{\Delta_{bias}} .nc.NST + ne \frac{leak_{upper} - leak_{lower} + 1}{\Delta_{leak}} .NST, \quad (4.2)$$

em que NST o número de simulações no conjunto de testes. No estudo em questão, 10 simulações (NST) de cada cenário foram utilizadas para teste, variando o erro grosseiro de medição na faixa entre cinco e nove vezes a respectiva incerteza-padrão ($bias_{lower}$ e $bias_{upper}$, respectivamente) com intervalo de uma unidade de erro grosseiros (Δ_{bias}). O vazamento foi simulado no intervalo entre 7% a 15% da vazão total que passa pelo equipamento ($leak_{lower}$ e $leak_{upper}$, respectivamente) com intervalo de 2% (Δ_{leak}). Tendo como exemplo o Problema 1, com 3 correntes, 1 equipamento, tem-se:

$$(9 - 5 + 1) \cdot 3 \cdot 10 + (1.5 + 1) \cdot 10 = 210.$$

Para erros múltiplos segue a fórmula:

$$\frac{bias_{upper} - bias_{lower} + 1}{\Delta_{bias}} \cdot nc, \quad (4.3)$$

ou seja, para o problema 1 tem-se:

$$(9 - 5 + 1) \cdot 3 = 18.$$

Devido aos resultados positivos do método proposto e, para facilitar a leitura do texto, optou-se por apresentar e discutir os resultados dos problemas somente onde o método proposto apresentou alguma peculiaridade. Nos demais casos, representados pelos problemas 4, 7, 10, 11, 12, 13 e 15, os resultados são apresentados em forma de tabela no Apêndice D.

Os resultados com erros múltiplos foram comparados com dados de literatura com os valores numéricos obtidos diretamente de Sánchez et al. (1999). Nos resultados com erros múltiplos, também são discutidos alguns casos onde o método proposto apresentou baixa seletividade.

4.2 Erros únicos

Inicialmente são apresentados na Tabela 4.1 os dados do AVT1, tempo computacional para geração e seleção de dados e coeficiente de determinação dos modelos gerados. O coeficiente de determinação ou R^2 é uma medida da qualidade do ajuste de um modelo em relação aos valores observados. Este coeficiente pode variar entre 0 e 1 indicando o quanto o modelo consegue explicar os dados observados de saída, em nosso caso, os erros grosseiros. Quanto mais próximo de 1 o R^2 , melhor a explicação das variáveis de saída pelo modelo (magnitudes dos erros grosseiros) a partir das variáveis de entrada (estatísticas de testes do GT, GLR e NT), indicando um bom ajuste.

A configuração da significância estatística para todos os testes é realizada para configurar o AVT1 em aproximadamente 0,1, ou seja, 10% de falso-positivos no conjunto de dados com erros puramente aleatórios. Isso garante que diversos métodos possam ser comparados em uma base comum (NARASIMHAN; JORDACHE, 2000; IORDACHE et al., 1985; ROSENBERG et al., 1987). Também foi registrado o tempo computacional para fins de referência, visto que alguns problemas foram executados em computadores com características bem distintas. As significâncias estatísticas foram configuradas para manter a AVT1 próximas a 0,1 (falso-positivos), garantindo assim, a mesma base de comparação entre os métodos (exceto a AVT1 do método proposto), como é possível observar na Tabela 4.1. Como a definição de AVT1 para o método proposto se baseia nos resultados de modelos preditos (o menor valor do erro grosseiro predito passa a ser o valor de corte para determinar o falso-positivo), o AVT1 do presente método não pode ser comparado com os demais. Além disso, como é esperado, o tempo computacional tem a tendência de aumentar conforme o número de correntes e equipamentos. O R^2 apresentou um valor médio de 0,8 para todos os problemas, exceto para os problemas 8 e 16 em que o R^2 ficou próximo a 0,62 para ambos. O valor médio de R^2 de 0,8 pode ser considerado razoável devido ao elevado número de simulações realizadas e devido à magnitude dos erros aleatórios (entre -4 e 4 vezes a incerteza-padrão de cada corrente) e à magnitude dos erros grosseiros gerados (entre -9 e 9 vezes a incerteza-padrão de cada corrente).

Tabela 4.1: Resultados do AVT1, tempo computacional e R^2 .

Problema	AVT1	AVT1	AVT1	AVT1	AVT1	Tempo (s)	R^2
	GT	GLR-MT	GLR-NT	NT	Proposto		
P1	0,087	0,091	0,087	0,091	0	14,8	
P2	0,113	0,111	0,102	0,116	0	18,7	0,86
P3	0,098	0,091	0,093	0,101	0	735,3	0,85
P3_2	0,102	0,093	0,094	0,102	0	584,8	0,85
P4	0,102	0,110	0,113	0,099	0	168,2	0,88
P5	0,103	0,109	0,109	0,093	0	18,7	0,86
P6	0,093	0,089	0,100	0,090	0	34,7	0,88
P7	0,096	0,102	0,101	0,097	0	494,8	0,70
P7_2	0,094	0,099	0,113	0,108	0	1185,2	0,81
P8	0,101	0,108	0,106	0,107	0	2719,5	0,63
P9	0,102	0,099	0,112	0,104	0	1549,9	0,80
P10	0,105	0,105	0,104	0,118	0	762,0	0,83
P11	0,087	0,094	0,093	0,105	0	557,0	0,82
P12	0,101	0,098	0,104	0,091	0	1796,9	0,80
P13	0,113	0,108	0,112	0,117	0	1823,0	0,80
P14	0,103	0,104	0,088	0,102	0	2252,1	0,78
P14_2	0,103	0,104	0,088	0,102	0	4059,1	0,74
P15	0,095	0,101	0,098	0,096	0	4169,8	0,85
P16	0,101	0,149	0,098	0,112	0	20079,5	0,62
Média	0,1	0,1	0,1	0,1	0	2264	0,80

Fonte: Próprio autor

Para os erros únicos, as tabelas de resultados tem o formato conforme apresentado na Tabela 4.2, onde são apresentados os dados das correntes, como: nome, valor nominal, incerteza-padrão. Na próxima coluna é apresentada a detectabilidade, que é uma medida da *facilidade* de detectar erros grosseiros nas medições (Charpentier et al. (1991), apud Narasimhan e Jordache (2000)). Geralmente, o OP de técnicas como o MT e GLR apresentam uma correlação com a detectabilidade

(a detectabilidade é calculada pela Equação 2.5.8), ou seja, quando o OP é elevado, a detectabilidade também é, sendo o contrário também observado. Em seguida são apresentados o OP do método GLR e do proposto, assim como o Erro Médio de Estimção, AEE. Na última coluna é apresentado a Seletividade, que indica se algum erro grosseiro também foi encontrado em outra corrente. Cabe ressaltar que uma Seletividade menor que 1 indica que também foram encontrados erros grosseiros em outras correntes, porém, se o OP é 1, indica que o maior erro grosseiro foi na corrente onde o tal erro foi adicionado. As unidades de medição do valor nominal de vazão para as correntes e as incertezas-padrão são expressas em $t.h^{-1}$ para todos os problemas, suprimidas das tabelas para redução de espaço.

Tabela 4.2: Exemplo de tabela de resultados para os problemas com erros únicos de medição.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detectabilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	8,50	0,277	0,846	0	-	1	2,202	0,970

Fonte: Próprio autor

Para vazamentos, os dados são apresentados em tabelas semelhantes à Tabela 4.3

Tabela 4.3: Exemplo de tabela de resultados para vazamentos

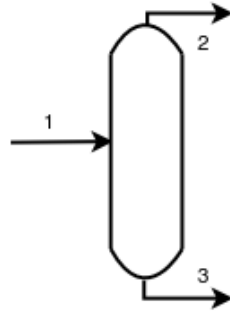
Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,997	0,997	0	0,84	0,040	1

Fonte: Próprio autor

4.2.1 Problema 1

O Problema 1 trata de um divisor simples entre duas correntes, conforme Figura 4.1. Este é um equipamento bastante comum em indústrias de processos e,

Figura 4.1: Fluxograma de processo do Problema 1.



Fonte: Próprio autor

conforme discutido no Capítulo 3, métodos como o MT e o GLR não conseguem detectar erros em suas correntes. Esse é um dos principais motivos pelo qual grandes diagramas não são divididos em diagramas menores para facilitar a detecção ou identificação de erros grosseiros em medições: a divisão de um diagrama grande pode levar à presença de vários divisores, impossibilitando a detecção.

Conforme apresentado na Tabela 4.4, o método proposto apresentou resultados superiores ao método GLR, com a identificação praticamente perfeita e boa seletividade, demonstrando o potencial da técnica proposta.

Tabela 4.4: Resultados do Problema 1 para erros grosseiros em medições.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detectabilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	8,50	0,277	0,846	0	-	1	2,202	0,970
2	4,50	0,145	0,443	0	-	0,978	2,227	0,813
3	4,00	0,097	0,296	0	-	1	2,315	0,890

Fonte: Próprio autor

Já para o teste de vazamento do Problema 1, o GLR se mostrou um pouco superior ao método proposto, conforme apresentado na Tabela 4.5. Conforme apresentado no Capítulo 3, para o método proposto, existe um compromisso entre o poder de teste do erro de medição e vazamento, e este pode ser ajustado a partir da configuração apropriada da incerteza-padrão da respectiva medida.

Tabela 4.5: Resultados do Problema 1 para vazamentos.

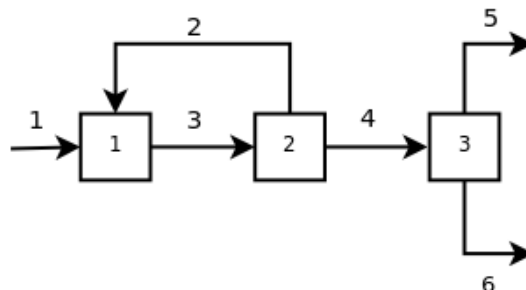
Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	0,997	0,997	0	0,84	0,040	1

Fonte: Próprio autor

4.2.2 Problema 2

O Problema 2, conforme apresentado na Figura 4.2, possui dois pares de correntes em paralelo: 2 e 3; 5 e 6. Tal fato leva o GLR a não identificar corretamente erros grosseiros nessas 4 correntes, em contraste com a metodologia PMGEI que identifica corretamente tais correntes com elevada seletividade, conforme apresentado na Tabela 4.6. Já para a detecção de vazamentos, ambas as metodologias apresentaram resultados equivalentes, conforme apresentado na Tabela 4.7.

Figura 4.2: Fluxograma de processo do Problema 2.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.6: Resultados do Problema 2 para erros em medições.

Corrente	Valor	Desvio	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	11	0,179	0,791	0,981	0,090	1,000	0,343	0,993
2	10	0,161	0,404	0,000	-	0,989	1,503	0,998
3	21	0,346	0,869	0,000	-	0,980	0,980	0,996
4	11	0,182	0,798	0,984	0,087	1,000	0,659	1,000
5	5,5	0,228	0,798	0,000	-	0,940	1,045	0,993
6	5,5	0,122	0,429	0,000	-	1,000	1,048	0,993

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.7: Resultados do Problema 2 para vazamentos.

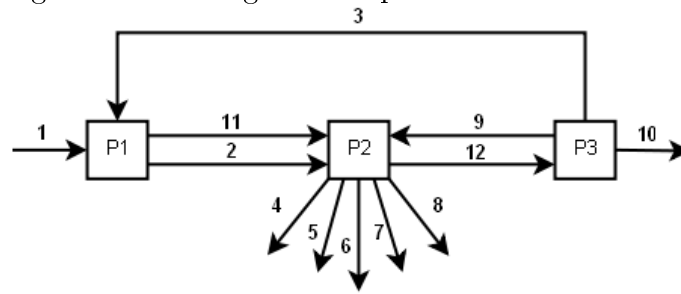
Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	beta or	NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
	1	1	6,677	1	0,005	1
	1	1	6,810	1	0,0001	1
	1	1	4,848	1	0,001	1

Fonte: Próprio autor

4.2.3 Problema 3

O Problema 3, conforme apresentado na Figura 4.3, possui 3 conjuntos de correntes em paralelo: 2 e 11; 9 e 12; 4, 5, 6, 7, 8. Tal fato leva o GLR a não identificar corretamente erros grosseiros nessas correntes. Já a metodologia PMGEI apresentou um resultado bem superior, porém, as correntes 4 e 5 apresentaram OP de zero e a corrente 6 um OP de 0,76, considerado baixo, conforme apresentado na Tabela 4.8.

Figura 4.3: Fluxograma de processo do Problema 3.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.8: Resultados do Problema 3 para erros em medições.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detectabilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
x1	189,980	2,141	0,900	0,994	0,058	1,000	1,436	0,963
x2	174,600	1,948	0,875	0,000	-6,660	1,000	1,218	0,973
x3	3,139	0,034	0,045	0,017	7,821	1,000	0,980	0,981
x4	32,770	0,345	0,183	0,000	-	-	-	-
x5	33,470	0,400	0,212	0,000	-	-	-	-
x6	7,250	0,087	0,046	0,000	-	0,793	1,854	1,000
x7	0,316	0,004	0,002	0,000	-	1,000	0,448	1,000
x8	92,376	1,059	0,560	0,000	-	1,000	0,131	1,000
x9	28,629	0,361	0,452	0,000	-	1,000	1,030	0,987
x10	23,800	0,300	0,400	0,405	0,246	1,000	0,821	1,000
x11	18,526	0,200	0,090	0,000	-	1,000	0,246	0,987
x12	55,568	0,645	0,810	0,000	-	1,000	1,299	1,000

Fonte: Próprio autor

Já para a detecção de vazamentos, ambas metodologias apresentaram resultados equivalentes, conforme apresentado na Tabela 4.9.

Tabela 4.9: Resultados do Problema 3 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1,00	1,000	0,033	1	0,007	1
2	1,00	1,000	0,026	1	0,004	1
3	1,00	1,000	0,019	1	0,001	1

Fonte: Próprio autor

Uma alternativa para melhorar a identificação de erros grosseiros nas correntes 4 e 5 foi a de reduzir a incerteza-padrão de 1 t.h^{-1} para $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para todas as correntes. Após esse procedimento, foi possível identificar corretamente erros de medição nessas duas correntes, conforme apresentado na Tabela 4.10. Cabe ressaltar que esse procedimento não comprometeu a detecção de vazamentos, conforme apresentado na Tabela 4.11

Tabela 4.10: Resultados do Problema 3 para erros de medição com incerteza-padrão igual a 0,1 para todas as correntes.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
x1	189,980	2,141	0,900	0,996	0,058	1,000	0,789	1,000
x2	174,600	1,948	0,875	0,000	-	1,000	1,387	1,000
x3	3,139	0,034	0,045	0,015	7,648	1,000	0,654	1,000
x4	32,770	0,345	0,183	0,000	-	1,000	0,249	1,000
x5	33,470	0,400	0,212	0,000	-	1,000	0,072	1,000
x6	7,250	0,087	0,046	0,000	-	1,000	1,296	1,000
x7	0,316	0,004	0,002	0,000	-	1,000	0,791	1,000
x8	92,376	1,059	0,560	0,000	-	1,000	1,315	0,995
x9	28,629	0,361	0,452	0,000	-	1,000	0,556	1,000
x10	23,800	0,300	0,400	0,386	0,238	1,000	1,272	1,000
x11	18,526	0,200	0,090	0,000	-	1,000	1,654	0,989
x12	55,568	0,645	0,810	0,000	-	1,000	0,243	0,997

Nota: A incerteza-padrão aqui apresentada refere-se ao problema original.

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.11: Resultados do Problema 3 para vazamentos com incerteza-padrão igual a 0,1.

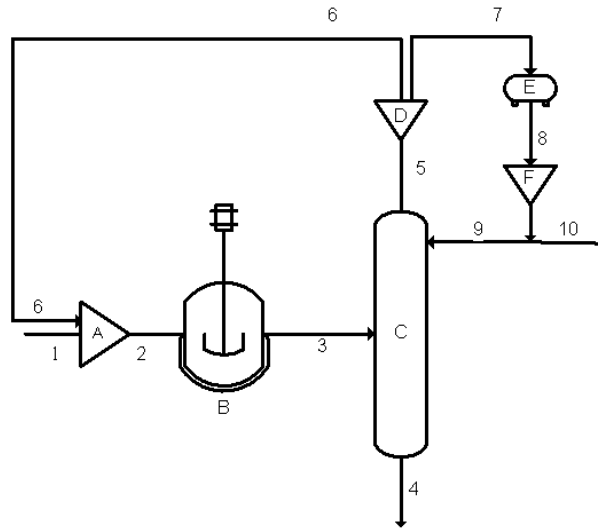
Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1,00	1,000	0,033	1	0,007	1
2	1,00	1,000	0,026	1	0,008	1
3	1,00	1,000	0,019	1	0,001	1

Fonte: Próprio autor

4.2.4 Problema 7

O Problema 7 é apresentado na Figura 4.4.

Figura 4.4: Fluxograma de processo do Problema 7.



Fonte: Próprio autor

A detecção de erros grosseiros de medição do presente problema pela metodologia PMGEI apresentou bons resultados, conforme apresentado na Tabela 4.12. Já para os vazamentos, o equipamento F não teve seus vazamentos identificados, conforme apresentado na Tabela 4.13. Tal fato ocorreu pois, quando a incerteza-padrão de uma determinada corrente aumenta, o valor do respectivo elemento da diagonal da matriz de variância das medidas, Σ , aumenta. Conseqüentemente, a matriz de variância-covariância dos balanços, \mathbf{V} aumenta, conforme a Equação 2.11, aqui rerepresentada:

$$\mathbf{V} = cov(\mathbf{R}) = \mathbf{A} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{A}^T,$$

assim, a estatística de teste $z_{r,j}$, apresentada na Equação 2.13, diminui pois o termo $V_{j,j}$ encontra-se no denominador da expressão, aqui rerepresentada:

$$z_{r,j} = \frac{|r_j|}{\sqrt{V_{j,j}}}.$$

Com a diminuição de $z_{r,j}$, os erros grosseiros adicionados se comportam como erros aleatórios e não são incorporados no conjunto de dados com erros grosseiros, comprometendo o OP do método para detecção de vazamentos. Tal fato não ocorre com o GLR para a detecção de vazamentos, pois em tal teste foram usados as incertezas-padrão originais, com magnitude menor.

Tabela 4.12: Resultados do Problema 7 para erros de medição.

Corrente	Valor	Desvio	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	50	1,000	0,810	0,985	0,086	1,000	0,648	1,000
2	75	1,000	0,815	0,984	0,084	1,000	1,066	1,000
3	75	1,000	0,815	0,984	0,084	1,000	0,996	0,971
4	48	1,000	0,802	0,988	0,087	1,000	1,166	0,971
5	30	1,000	0,805	0,983	0,088	1,000	0,978	0,971
6	25	1,000	0,810	0,988	0,087	1,000	1,188	1,000
7	5	0,387	0,806	0,981	0,088	1,000	1,460	0,996
8	5	0,387	0,806	0,982	0,086	1,000	1,303	0,971
9	3	0,316	0,617	0,735	0,140	1,000	1,289	1,000
10	2	0,316	0,623	0,753	0,135	1,000	0,921	0,971

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.13: Resultados do Problema 7 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
A	1	1,000	0,062	1	0,002	0,971
B	1	1,000	0,052	1	0,001	0,971
C	1	1,000	0,061	1	0,0003	0,971
D	0,9336	0,982	0,141	1,000	0,000	0,971
E	0,37	0,512	0,158	1,000	0,001	0,972
F	0,3252	0,438	0,141	0,000	1,200	0,000

Fonte: Próprio autor

Semelhante ao realizado no Problema 3, tal limitação foi contornada reduzindo a incerteza-padrão de todas as correntes para $0,1 \text{ t.h}^{-1}$, aumentando a sensibilidade para detecção de vazamentos com o aumento da estatística de teste $z_{r,j}$. Os resultados da detecção de erros grosseiros de medição e vazamentos são apresentados na Tabela 4.14 e Tabela 4.15, respectivamente.

Tabela 4.14: Resultados dos erros grosseiros de medição para o Problema 7 usando incerteza-padrão de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para todas as correntes.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detectabilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	50	1,000	0,810	0,985	0,087	1,000	1,073	1,000
2	75	1,000	0,815	0,986	0,081	1,000	0,792	1,000
3	75	1,000	0,815	0,985	0,082	1,000	1,498	1,000
4	48	1,000	0,802	0,983	0,088	1,000	1,114	1,000
5	30	1,000	0,805	0,988	0,087	1,000	1,015	1,000
6	25	1,000	0,810	0,988	0,083	1,000	1,079	0,954
7	5	0,387	0,806	0,980	0,088	1,000	1,538	1,000
8	5	0,387	0,806	0,984	0,087	1,000	1,252	1,000
9	3	0,316	0,617	0,749	0,134	1,000	1,534	1,000
10	2	0,316	0,623	0,755	0,138	1,000	1,663	0,995

Fonte: Próprio autor

4.2.5 Problema 8

O problema 8, apresentado na Figura 4.5, possui 4 conjuntos de correntes paralelas, entre elas: 2 e 3; 6 e 7; 8 e 9; 10 e 11. Tal fato leva o GLR a não detectar erros grosseiros nessas correntes. A metodologia proposta apresentou bons resultados, exceto para a corrente 6, que apresentou um baixo OP, conforme apresentado na Tabela 4.16. A melhoria do poder OP para a corrente 6 pode ser obtida através de testes, avaliando o efeito da incerteza-padrão sobre seu OP. Nesse procedimento é necessário avaliar se tal procedimento não afetará o OP da detecção de vazamentos. Já para a detecção de vazamentos, ambas metodologias apresentaram resultados

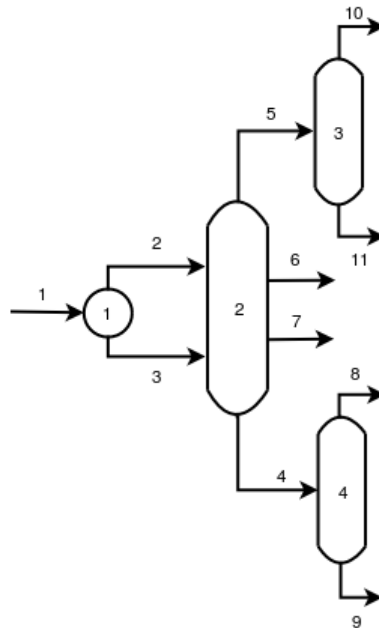
Tabela 4.15: Resultados de vazamentos para o Problema 7 usando incerteza-padrão de $0,1 \text{ t.h}^{-1}$ para todas as correntes.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
A	1	1,000	0,061	1	0,003	1
B	1	1,000	0,051	1,000	0,003	1,000
C	1	1,000	0,060	1,000	0,012	1,000
D	0,937	0,982	0,137	1,000	0,012	1,000
E	0,374	0,506	0,155	1,000	0,004	1,000
F	0,325	0,439	0,149	1,000	0,004	1

Fonte: Próprio autor

equivalentes, conforme apresentado na Tabela 4.17.

Figura 4.5: Fluxograma de processo do Problema 8.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.16: Resultados do Problema 8 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Desvio Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	3600	111,210	0,915	0,995	0,052	1,000	1,784	0,984
2	1850	57,000	0,595	0,000	-	1,000	1,393	1,000
3	1750	54,210	0,566	0,000	-	1,000	0,813	1,000
4	2837	87,300	0,859	0,987	0,070	1,000	1,518	1,000
5	730	22,110	0,748	0,802	0,103	1,000	1,886	1,000
6	25	0,780	0,009	0,000	-	0,640	5,508	0,973
7	8	0,228	0,003	0,000	-	0,960	4,510	0,989
8	137	3,150	0,032	0,000	-	1,000	4,938	0,960
9	2700	84,960	0,850	0,000	-	1,000	2,013	0,984
10	58	1,710	0,058	0,000	-	1,000	4,794	0,955
11	672	20,04	0,682	0,000	-	1,000	1,733	0,989

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.17: Resultados do Problema 8 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,991	0,995	0,066	1,000	0,040	1,000
2	0,998	0,999	0,086	1,000	0,074	1,000
3	0,988	0,987	0,028	1,000	0,038	1,000
4	0,981	0,993	0,095	1,000	0,027	1,000

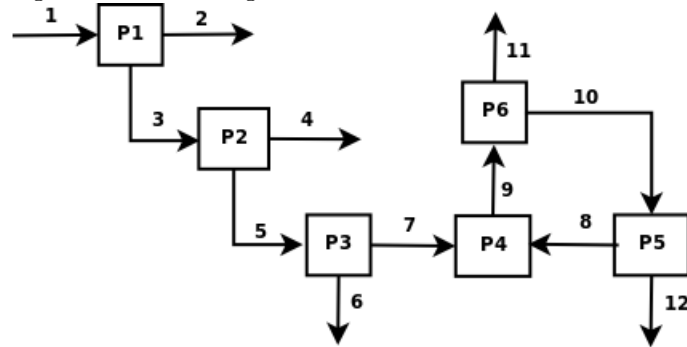
Fonte: Próprio autor

4.2.6 Problema 9

O Problema 9 é bastante peculiar no que diz respeito à estrutura de seu diagrama, sendo este apresentado na Figura 4.6. Neste fluxograma, encontram-se correntes paralelas, 1 e 2, e reciclo, formado pelas correntes 8, 9 e 10. Utilizando

as incertezas do problema original, o reciclo reduz o OP do GLR, pois a corrente 8 apresenta maior precisão que as demais correntes do reciclo, e, após a reconciliação, os erros simulados nessa corrente acabam se espalhando para as demais, conforme apresentado na Tabela 4.18. Já a metodologia proposta remove esse efeito, pois faz uso das incertezas-padrão unitárias e uso de uma função objetivo robusta, nesse caso, o estimador de Cauchy. Já para a detecção de vazamentos, ambas metodologias apresentaram resultados equivalentes, conforme apresentado na Tabela 4.19.

Figura 4.6: Fluxograma de processo do Problema 9.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.18: Resultados do Problema 9 para erros de medição.

Corrente	Valor	Desvio	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	230	37,575	0,998	0,000	-	1,000	1,103	1,000
2	21	1,08	0,029	0,000	-	1,000	1,491	1,000
3	209	5	0,890	0,665	0,060	1,000	1,511	1,000
4	35	1,825	0,327	0,237	0,367	1,000	1,164	1,000
5	174	2	0,522	0,725	0,174	1,000	1,433	0,999
6	15	0,88	0,193	0,095	1,060	1,000	1,877	0,993
7	159	7,245	0,967	0,997	0,031	1,000	1,677	1,000
8	50	1	0,349	0,370	0,320	1,000	1,288	0,999
9	209	5	0,916	0,974	0,052	1,000	1,501	0,999
10	94	2	0,616	0,548	0,145	1,000	0,928	0,991
11	115	18,1	0,991	0,999	0,016	1,000	1,363	1,000
12	44	2,385	0,733	0,638	0,105	1,000	1,144	0,999

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.19: Resultados do Problema 9 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	0,159	0,161	0,033	1,000	0,014	1,000
2	1,000	1,000	0,020	1,000	0,040	1,000
3	0,973	0,996	0,135	1,000	0,008	1,000
4	0,976	0,993	0,134	1,000	0,004	1,000
5	0,994	0,994	0,014	1,000	0,033	1,000
6	0,546	0,568	0,065	1,000	0,021	1,000

Fonte: Próprio autor

4.2.7 Problema 14

O Problema 14 é baseado em um balanço hídrico real de uma planta de tratamento de água para uma fábrica de fertilizantes e é apresentado na Figura 4.7. Este é um fluxograma maior que os anteriormente apresentados com 24 correntes e 14 equipamentos. Nesse fluxograma foi aplicada a metodologia do QI para avaliação das incertezas de medição para fins de comparação com o método GLR. Inicialmente, a partir do balanço de massa original e de informações da equipe de responsáveis pela planta, foi organizada as atribuições de QI para cada corrente do processo. Em seguida, a partir do uso da Equação 2.9 foram obtidas as respectivas incertezas-padrão, conforme apresentado na Tabela 4.20.

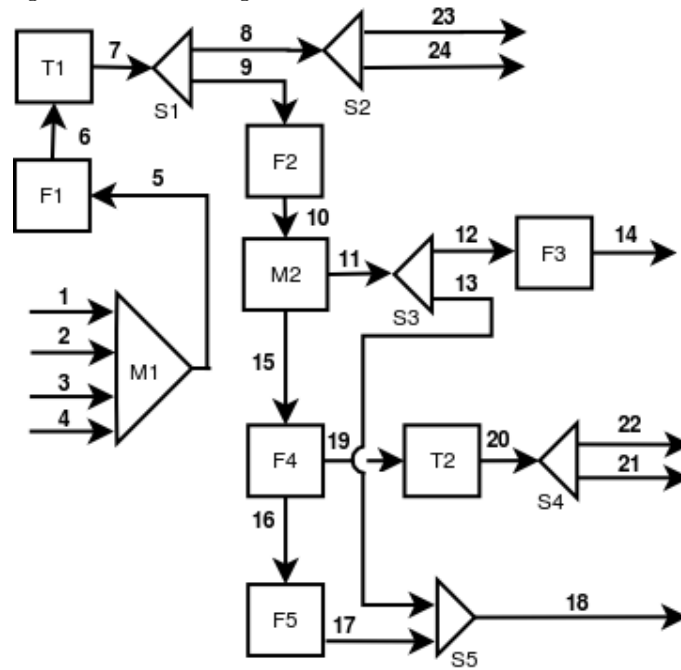
Em seguida, foi aplicado o método proposto para DEG. Os resultados para os erros grosseiros de medição são apresentados na Tabela 4.21. É possível observar que, como nos casos anteriormente apresentados, as correntes paralelas, 1, 2, 3 e 4, não são corretamente identificadas pelo GLR. Nos resultados do método proposto com incertezas-padrão unitárias, é possível observar que, conforme o ocorrido no Problema 3, quando um número elevado de corrente paralelas estão presentes, o método não identificou corretamente os erros grosseiros nas correntes 3 e 4. Tal dificuldade foi contornada aumentando a incerteza-padrão para 5 t.h^{-1} em todas as correntes, conforme apresentado na Tabela 4.22.

Tabela 4.20: Conversão de dados de QI para incertezas-padrão para uso da função objetivo de Cauchy.

Corrente	Valor Nominal	QI	Desvio Padrão
1	50	10	0,533
2	150	10	1,460
3	140	10	1,541
4	140	10	1,451
5	480	6	7,611
6	480	6	7,611
7	480	6	8,335
8	220	10	2,136
9	260	10	2,865
10	260	10	2,865
11	85,8	10	0,827
12	15,8	3	0,441
13	70	9	0,772
14	15,8	3	0,441
15	174,2	10	2,038
16	3,484	3	0,095
17	3,484	3	0,095
18	73,484	3	2,852
19	170,716	10	1,858
20	170,716	10	1,999
21	55	10	0,532
22	115,716	10	1,467
23	200	10	1,977
24	20	10	0,160

Fonte: Próprio autor

Figura 4.7: Fluxograma de processo do Problema 14.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.21: Resultados do Problema 14 para erros de medição.

Corrente	Valor	Desvio	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	50	0,533	0,173	0,000	-	1,000	0,057	0,996
2	150	1,460	0,473	0,000	-	1,000	0,416	0,993
3	140	1,541	0,499	0,000	-	0	-	-
4	140	1,451	0,470	0,000	-	0	-	-
5	480	7,611	0,983	0,997	0,022	1,000	2,058	1,000
6	480	7,611	0,983	0,999	0,022	1,000	1,975	0,993
7	480	8,335	0,986	1,000	0,020	1,000	1,918	1,000
8	220	2,136	0,810	0,974	0,085	1,000	2,090	0,994
9	260	2,865	0,949	0,996	0,039	1,000	2,528	0,999
10	260	2,865	0,949	0,998	0,039	1,000	1,976	0,996
11	85,8	0,827	0,745	0,927	0,105	1,000	2,144	0,996
12	15,8	0,441	0,735	0,895	0,103	1,000	3,154	0,988
13	70	0,772	0,701	0,897	0,113	1,000	2,655	0,996
14	15,8	0,441	0,735	0,882	0,104	0,960	3,460	0,987
15	174,2	2,038	0,918	0,996	0,051	1,000	2,711	1,000
16	3,484	0,095	0,708	0,573	0,117	1,000	3,686	0,993
17	3,484	0,095	0,708	0,573	0,113	1,000	3,517	1,000
18	73,484	2,852	0,981	0,997	0,023	1,000	2,508	0,993
19	170,716	1,858	0,900	0,994	0,058	1,000	2,402	0,996
20	170,716	1,999	0,914	0,998	0,053	1,000	2,143	1,000
21	55	0,532	0,292	0,000	-	1,000	2,425	0,996
22	115,716	1,467	0,804	0,000	-	1,000	1,924	0,991
23	200	1,977	0,773	0,000	-	0,960	2,636	0,987
24	20	0,160	0,062	0,000	-	0,860	3,308	1,000

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.22: Resultados do Problema 14 para erros de medição com incerteza-padrão igual a 5 t.h^{-1} .

Corrente	Valor	Desvio	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	50	0,533	0,173	0,000	-	1,000	1,062	0,997
2	150	1,460	0,473	0,000	-	0,989	0,987	0,988
3	140	1,541	0,499	0,000	-	1,000	1,109	0,990
4	140	1,451	0,470	0,000	-	1,000	0,876	0,991
5	480	7,611	0,983	0,997	0,022	1,000	1,974	0,999
6	480	7,611	0,983	0,999	0,022	1,000	1,716	0,996
7	480	8,335	0,986	1,000	0,020	1,000	1,825	0,988
8	220	2,136	0,810	0,974	0,085	1,000	1,745	0,995
9	260	2,865	0,949	0,996	0,039	1,000	2,291	0,988
10	260	2,865	0,949	0,998	0,039	1,000	1,718	0,992
11	85,8	0,827	0,745	0,927	0,105	1,000	1,343	1,000
12	15,8	0,441	0,735	0,895	0,103	1,000	1,667	0,999
13	70	0,772	0,701	0,897	0,113	1,000	1,703	0,996
14	15,8	0,441	0,735	0,882	0,104	1,000	2,109	0,984
15	174,2	2,038	0,918	0,996	0,051	1,000	2,050	0,988
16	3,484	0,095	0,708	0,573	0,117	1,000	1,619	0,996
17	3,484	0,095	0,708	0,573	0,113	1,000	1,744	1,000
18	73,484	2,852	0,981	0,997	0,023	1,000	1,507	0,990
19	170,716	1,858	0,900	0,994	0,058	1,000	2,001	1,000
20	170,716	1,999	0,914	0,998	0,053	1,000	1,657	0,988
21	55	0,532	0,292	0,000	-	1,000	2,216	0,995
22	115,716	1,467	0,804	0,000	-	1,000	1,735	0,994
23	200	1,977	0,773	0,000	-	1,000	1,747	0,992
24	20	0,160	0,062	0,000	-	0,820	2,227	0,992

Fonte: Próprio autor

No caso de vazamentos, o aumento da incerteza-padrão de 1 t.h^{-1} para 5 t.h^{-1} resultou em falha de identificação de vazamentos nos balanços F3 e F5, conforme

apresentado na Tabela 4.23 e Tabela 4.24. Cabe ressaltar que a necessidade de ajustar as incertezas-padrão de alguns fluxogramas passa a ser uma das limitações do método. Uma outra alternativa possível seria testar outros estimadores robustos para avaliar o efeito dos mesmos para tratar esse tipo de situação.

Tabela 4.23: Resultados do Problema 14 para vazamentos utilizando incertezas-padrão unitários.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
M1	1	1	0,061	1,0	0,013	0,996
F1	1	1	0,086	1,0	0,015	0,996
T1	1	1	0,089	1,0	0,003	0,996
S1	1	1	0,069	1,0	0,000	0,996
F2	1	1	0,049	1,0	0,004	0,996
M2	1	1	0,044	1,0	0,005	0,996
S3	1	1	0,022	1,0	0,002	0,996
F3	0,9764	0,982	0,041	1,0	0,003	0,996
F4	1	1	0,049	1,0	0,030	0,996
F5	0,9804	0,9836	0,007	1,0	0,003	0,996
S5	0,97	0,9756	0,028	1,0	0,003	0,996
T2	1	1	0,050	1,0	0,007	0,996
S4	1	1	0,040	1,0	-0,003	0,996
S2	1	1	0,024	1,0	0,011	0,996

Fonte: Próprio autor

Tabela 4.24: Resultados do Problema 14 para vazamentos e incertezas-padrão de 5 t.h⁻¹.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
M1	1	1	0,061	1,0	-0,002	0,992
F1	1	1	0,086	1,0	0,002	0,992
T1	1	1	0,089	1,0	-0,002	0,992
S1	1	1	0,069	1,0	-0,001	0,992
F2	1	1	0,049	1,0	-0,003	0,992
M2	1	1	0,044	1,0	-0,002	0,992
S3	1	1	0,022	1,0	0,000	0,992
F3	0,9764	0,982	0,041	0,0	1,186	0,000
F4	1	1	0,049	1,0	-0,002	0,992
F5	0,9804	0,9836	0,007	0,0	-	-
S5	0,97	0,9756	0,028	1,0	0,001	0,992
T2	1	1	0,050	1,0	-0,003	0,992
S4	1	1	0,040	1,0	-0,002	0,992
S2	1	1	0,024	1,0	-0,001	0,992

Fonte: Próprio autor

4.3 Erros múltiplos

Os cenários para erros grosseiros de medição e vazamentos (posição da corrente com erro grosseiro e o equipamento com vazamento) para cada um dos problemas teste foram escolhidos de forma aleatória. Os cenários e os coeficientes de correlação são apresentados na Tabela 4.25.

Tabela 4.25: Cenário de distúrbios com erros múltiplos e os resultados dos ajustes dos modelos.

Problema	Corrente com Erro Medição	Equipamento com Vazamento	R ² Modelo
P1	1	1	0,97
P2	3	3	0,97
P3	3;10	2	0,96
P4	1	4	0,98
P5	2;4	4	0,95
P6	4;5	2	0,95
P7	6;9	5	0,96
P8	4;11	2	0,94
P9	2;3	5	0,94
P10	3;7;12	8	0,97
P11	6;12	3;7	0,97
P12	3;6;11	2	0,95
P13	2;7;13;15	6	0,97
P14	1;8;9;15;19	4;13;14	0,96
P15	1;13;15;19	1;5;10	0,95
P16	1;6;13;15;19;30;43;46;48	1;12;16;18;26	0,96

Fonte: Próprio autor

Os resultados dos problemas são apresentados em tabelas conforme Tabela 4.26, onde, na primeira coluna é indicado onde os erros grosseiros múltiplos foram adicionados: **C** indica corrente e **E** indica equipamento, logo, na Tabela 4.26 foi adicionado um erro grosseiro de medição na Corrente 3 e um vazamento no Equipamento 3.

Tabela 4.26: Exemplo de tabela de resultados dos erros grosseiros múltiplos.

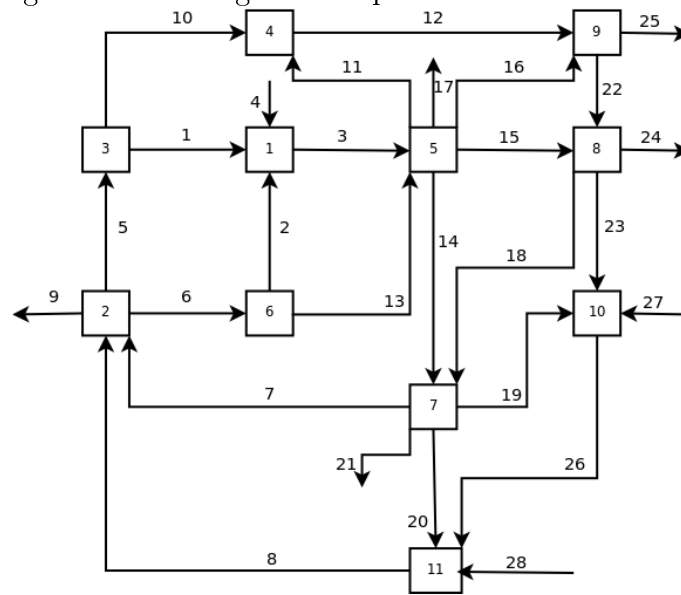
Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	0,221	1
E-3	1	0,033	1

Fonte: Próprio autor

Como os resultados dos erros múltiplos foram bastante satisfatórios para os cenários escolhidos, apresentando um elevado OP e baixo AEE, optou-se por comentar somente alguns problemas, principalmente os que apresentaram uma baixa seletividade para erros múltiplos, entre eles, os problemas 1, 4, 14, 15 e 16. Os resultados dos demais problemas para erros múltiplos são apresentados no Apêndice D.

Os problemas 1, 4, 14, 15 e 16 apresentaram a seletividade reduzida para detecção dos erros grosseiros múltiplos simulados, indicando que, embora o OP e AEE estejam em uma faixa satisfatória, existem outras correntes ou equipamentos onde os erros grosseiros também excederam os limites de teste, porém, as maiores estimativas foram nas posições dos erros grosseiros adicionados. Tal fato está associado, provavelmente, pela posição de erros grosseiros adicionados, sendo que nesses problemas, os mesmos estão muito próximos. Para evidenciar tal proposição é apresentado o Problema 15, conforme Figura 4.8, onde os erros grosseiros simultâneos foram adicionados às correntes 1, 13, 15 e 19 enquanto que os vazamentos foram adicionados nos equipamentos 1, 5 e 10. A seletividade reduzida do Problema 15 para erros simultâneos pode ser observada na Tabela 4.27.

Figura 4.8: Fluxograma de processo do Problema 15.



Fonte: Próprio autor

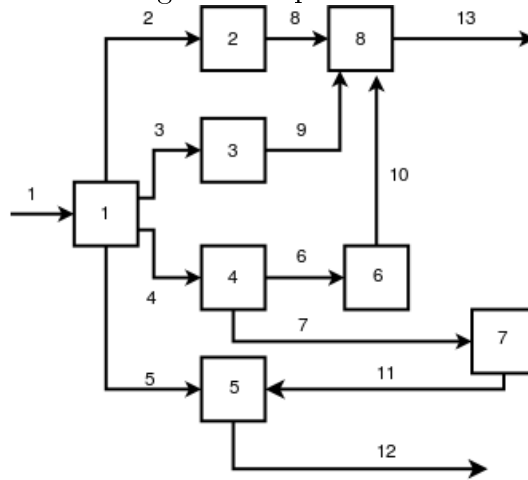
Tabela 4.27: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 15.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	0,944	0,771	0,673
C-13	0,967	0,503	0,673
C-15	1	0,227	0,685
C-19	0,989	0,452	0,649
E-1	1	0,035	0,649
E-5	1	0,035	0,649
E-10	1	0,035	0,649

Fonte: Próprio autor

Em contraponto, problemas onde os erros múltiplos estão posicionados em regiões 'afastadas' do fluxograma, a seletividade apresentou o valor máximo de um, conforme exemplificado através do Problema 10, apresentado na Figura 4.9, onde as correntes com erros grosseiros foram as 3, 7 e 12, enquanto que o vazamento foi adicionado no balanço 8, conforme apresentado na Tabela 4.28.

Figura 4.9: Fluxograma de processo do Problema 10.



Fonte: Próprio autor

Tabela 4.28: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 10.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	0,080	1
C-7	1	0,210	1
C-12	1	0,484	1
E-8	1	0,020	1

Fonte: Próprio autor

4.3.1 Comparação com outros métodos

Poucos autores apresentam dados publicados para DEG múltiplos em condições de serem comparados na mesma base do método proposto, visto que muitos apresentam somente o resultado de 1 simulação numérica (WANG et al., 2004; MEI et al., 2006) enquanto outros autores não informam o local exato da adição dos erros grosseiros múltiplos (NARASIMHAN; MAH, 1987). Como base para comparação, foram utilizados dados de Sánchez et al. (1999), que apresentam uma comparação detalhada com erros grosseiros múltiplos comparando três métodos: UBET (ROLLINS; DAVIS, 1992), GLR (NARASIMHAN; MAH, 1987) e SEGE (proposto pelos próprios autores). Embora nem todos os dados obtidos por Sánchez et al. (1999)

foram obtidos exatamente nas mesmas condições que o presente trabalho, tais dados são bastante semelhantes e podem ser considerados apropriados para uma comparação.

A Tabela 4.29 apresenta a comparação do OP de diferentes métodos e do método proposto, onde na primeira coluna estão presentes as correntes onde os erros grosseiros simultâneos foram adicionados. A principal diferença entre os dados de Sánchez et al. (1999) e o presente trabalho está na magnitude dos erros grosseiros. Enquanto Sánchez et al. (1999) usou erros grosseiros com magnitudes diferentes para as duas correntes onde foram adicionados erros grosseiros (7 e 4 vezes as incertezas-padrão, respectivamente), o presente trabalho usou 7 vezes a incerteza-padrão para ambas as correntes. É possível observar através da Tabela 4.29 que o método proposto apresentou máximo OP para todos os conjuntos de distúrbios e se mostrou superior no exemplo estudado em relação aos métodos comparados.

Tabela 4.29: Comparação entre OP de diferentes métodos para DEG múltiplos para o Problema 6.

Corrente	OP SEGE	OP UBET	OP GLR	OP PMGEI
1-7	0,997	0,5	0,504	1
2-3	0,999	0,5	0,997	1
2-4	0,958	0,944	0,5	1
3-4	0,96	0,504	0,5	1
4-5	0,999	0,5	0,999	1
4-6	0,998	0,875	0,577	1
5-6	0,977	0,517	0,5	1
6-7	1	0,499	0,886	1
1-2	0,996	0,999	0,971	1
1-3	1	0,977	0,972	1
1-4	0,974	0,932	0,973	1
1-5	0,704	0,963	0,145	1
2-5	0,999	0,982	0,999	1
2-6	0,987	0,98	0,966	1
2-7	0,999	0,93	0,999	1
3-5	1	0,965	1	1
3-6	0,987	0,972	0,967	1
3-7	0,999	0,976	0,999	1
4-7	0,998	0,6	0,998	1
5-7	0,997	0,946	0,996	1
1-6	0,997	0,966	0,993	1

Fonte: Próprio autor

A Tabela 4.29 compara o AEE para alguns casos de erros grosseiros múltiplos em conjuntos de 2 medições simultâneas, onde é possível observar que o método proposto se apresentou inferior quando comparado com os métodos SEGE e UBET e apresentou equivalente quando comparado com o GLR. Tal fato pode ter ocor-

rido, provavelmente, porque os autores originais não modificaram os sinais dos erros grosseiros, enquanto que no presente trabalho, os sinais dos mesmos são escolhidos aleatoriamente usando uma distribuição uniforme.

Tabela 4.30: Comparação entre AEE de diferentes métodos para DEG múltiplos para o Problema 6.

Correntes com Erros Grosseiros	Corrente	AEE SEGE x 100	AEE UBET x 100	AEE GLR x 100	AEE PMGEI x 100
1-2	1	0,114	0,000	8,000	10,91
	2	0,200	0,067	1,733	7,33
1-3	1	0,114	0,114	8,000	5,42
	3	0,067	0,067	1,667	1,21
1-4	1	0,114	0,114	5,714	2,94
	4	1,000	3,000	2,600	17,18
2-5	2	0,000	0,038	8,419	9,52
	5	0,100	0,000	2,700	3
2-6	2	0,076	0,038	11,238	9,19
	6	0,600	0,200	12,200	0,56
2-7	2	0,000	0,076	5,600	16,43
	7	0,200	0,200	1,800	6,15
3-5	3	0,038	0,038	8,381	4,25
	5	0,200	0,000	2,700	10,16
3-6	3	0,114	0,000	11,200	11,49
	6	0,600	0,200	11,200	5
3-7	3	0,038	0,038	5,600	7,76
	7	0,200	0,000	1,600	14,65
4-7	4	0,000	5,714	2,286	6,7
	7	0,200	4,400	10,800	13,57
5-7	5	0,114	0,229	11,314	7,76
	7	0,200	0,200	6,000	14,46

Fonte: Próprio autor

Na Tabela 4.31 são apresentados resultados de erros grosseiros simultâneos de medição e vazamento, sendo que neste caso, ambos os resultados são equivalentes

pois a magnitude do vazamento e do erro de medição são as mesmas apresentadas por Sánchez et al. (1999). É possível observar que o método proposto apresenta desempenho superior, identificando todos os erros grosseiros, resultando em um OP máximo.

Tabela 4.31: Comparação entre OP de diferentes métodos para DEG múltiplos com vazamento para o problema 6.

Erro Grosseiro	OP	OP	OP	OP
Múltiplo	SEGE	UBET	GLR	PMGEI
E2-C4	0,993	0,961	0,996	1
E2-C5	0,999	0,952	0,837	1
E2-C6	0,996	0,969	0,999	1
E2-C7	0,99	0,951	0,872	1
E3-C2	0,981	0,921	0,999	1
E3-C6	0,999	0,963	0,937	1

Fonte: Próprio autor

A comparação entre o AEE na presença de erros múltiplos é apresentada na Tabela 4.32, onde é possível observar que o método proposto apresenta resultados superiores ao GLR, porém inferiores ao UBET e SEGE.

Tabela 4.32: Comparação entre AEE de diferentes métodos para DEG múltiplos com vazamento para o problema 6.

Erro Grosseiro	Erro Grosseiro	AEE	AEE	AEE	AEE
Múltiplo		SEGE	UBET	GLR	PMGEI
E2-C4	E2	0,00	0,06	1,17	2,62
	C4	0,16	0,48	0,48	2,78
E2-C5	E2	0,06	0,39	12,33	0,93
	C5	0,00	0,32	29,20	7,58
E2-C6	E2	0,06	0,06	4,39	0,32
	C6	0,00	0,00	4,00	0,82
E2-C7	E2	0,06	0,06	-	0,32
	C7	0,16	0,00	-	0,81
E3-C2	E3	0,00	0,80	12,00	6,19
	C2	0,21	1,44	10,24	1,49
E3-C6	E3	0,08	0,08	1,84	1,27
	C6	0,00	0,00	1,12	0,72

Fonte: Próprio autor

4.4 Considerações finais

Conforme apresentado no Capítulo 3, muitos autores testam suas metodologias para DEG em um universo restrito de problemas, conforme pode ser observado na Quadro 4.7, aqui rerepresentada. Entre as razões para esse motivo, estão os recursos computacionais limitados disponíveis no passado, além da ausência de pacotes computacionais (como Matlab, Maple, Scilab, etc.) que facilitam a tarefa de operações matriciais, comuns nesse tipo de problema. Além disso, os problemas encontravam-se distribuídos ao longo da literatura tornando a coleção dos mesmos uma tarefa um pouco difícil. Ao longo de desenvolvimento desse trabalho, buscou-se coletar um conjunto bem heterogêneo de problemas, desde um único equipamento até fluxogramas de processos industriais reais, para teste do método proposto de maneira

ampla e robusta. Os problemas testes gerados foram reunidos em um repositório de problemas teste na internet em Valle (2011) disponível através de *scripts* do *software* Scilab para que outros autores possam testar ou implementar outras técnicas de RD ou DEG.

Quadro 4.7: Técnicas de identificação de erros grosseiros e o número de exemplos usadas para teste das mesmas.

Autor	Teste para Detecção/Identificação de Erros Grosseiros	Número de Exemplos Testados
Alhaj-Dibo et al. (2008)	RD usando distribuições robustas	1
Arora e Biegler (2001)	Estimadores Robustos para RD e DEG	3
Bagajewicz et al. (1999)	Avaliação de PCA para DEG	1
Devanathan et al. (2005)	Métodos Bayesianos e de Verossimilhança	1
Farias (2009)	IMT Robusto	2
Kongsjahju et al. (2000)	Modificação do Método UBET para sistemas em série	1
Maronna e Arcas (2009)	RD and DEG baseada em Modelos de Regressão	2
Mei et al. (2006)	NT-MT para DEG	2
Narasimhan e Mah (1987)	Razão de Verossimilhança Generalizada	2
Özyurt e Pike (2004)	Reconciliação Robusta	7
Reddy e Mavrouniotis (1998)	Abordagem de Redes Neurais	1
Romagnoli e Stephanopoulos (1981)	Método Algorítmico Proposto	3
Rosenberg et al. (1987)	DMT and EMT	7
Sánchez et al. (1999)	MSEGE, MUBET and MGLR	2
Soderstrom et al. (2001)	Abordagem Inteira-Mista	4
Wang et al. (2004)	Aprimoramento do MT e NT	1
Zhang et al. (2010)	Estimadores Robustos	4
Presente Trabalho	PMGEI	16

Além do teste da metodologia PMGEI em diversos problemas, diversos experimentos numéricos foram conduzidos para escolha do melhor estimador robusto e melhor magnitude da incerteza-padrão. Com diversos experimentos computacionais realizados, comprovou-se que a metodologia apresentada nesse trabalho apresentou um desempenho consideravelmente superior às existentes na literatura em uma ampla faixa de problemas. Tal fato se deve, principalmente, porque o método proposto mimifica o que ocorre nos processos industriais onde um erro em uma medição ou vazamento não se espalha para as demais medições do processo.

Nas metodologias de RD e DEG presentes na literatura, o GT, MT e NT são a base para a identificação de erros únicos e erros múltiplos. A principal limitação, principalmente do MT, é que esse é aplicado aos ajustes das medições, ou seja, após o procedimento de RD. Analisando o procedimento de RD mais detalhadamente, é possível observar que, embora o mesmo possua sólida base estatística, ao aplicar tal técnica, na presença de erros grosseiros, os dados são ajustados de maneira completamente diferente dos fenômenos que ocorrem em processos reais: os erros das medições se espalham para as demais medições; os balanços de massa são forçados a serem satisfeitos o que é inviável de ocorrer na presença de vazamentos reais, também levando ao espalhamento dos erros grosseiros. Tal problema surge da própria base estatística da RD que parte do princípio que, o erro de medição possui distribuição de erro conhecida, geralmente Normal, com desvio padrão conhecido, o que não ocorre na presença de erros grosseiros. É possível notar ainda, que, o NT não sofre essa limitação, pois sua estatística de teste é baseada nos resíduos antes da RD, como pode ser observado nas tabelas de resultados apresentadas. Logo, para erros únicos o NT ou o GLR para detecção de vazamentos podem ser utilizados sem limitações para detecção de erros.

A faixa de confiabilidade dos modelos gerados para mudanças de pontos operacionais não foi explorada nesse trabalho, ficando indicada como sugestões para trabalhos futuros. Como a detecção de medições com erros grosseiros é influenciada pela magnitude da medição em questão, é de se esperar que, ao se mudar o ponto de operação, seja necessário o ajuste do modelo na nova condição.

Como limitações da técnica proposta, podemos citar a necessidade de avaliação

prévia da magnitude da incerteza-padrão, sendo que em alguns casos apresentados, o OP não apresentou bons resultados usando a incerteza-padrão unitária. Uma segunda limitação é a necessidade de geração de um novo conjunto de dados e realização de um novo ajuste dos modelos ao serem modificadas as condições operacionais do processo. Outro problema que pode ocorrer se refere à aplicação da técnica para identificar erros múltiplos, sendo que nesse caso, existe a necessidade de gerar diversas combinações de erros grosseiros múltiplos para estimação de parâmetros do modelo, que pode resultar em um problema combinatorial de grande escala, entretanto, esse número pode ser reduzido se for realizado um procedimento de planejamento ótimo de perturbações para determinar um conjunto mínimo de experimentos numéricos. Uma terceira limitação da técnica é que como a mesma modifica consideravelmente o problema original, tanto em relação à função objetivo quanto à incerteza-padrão, a mesma só pode ser usada especificamente para a DEG no ponto operacional onde os dados foram ajustados, não sendo possível usá-la, por exemplo, para RD. Por esse motivo, para uma futura aplicação industrial, seria necessário ter a técnica de RD sendo executada em paralela com o método proposto.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

5.1 Conclusões

5.1.1 Principais contribuições

Conforme apresentado na revisão bibliográfica desse trabalho, as técnicas de DEG podem ser influenciadas por muitos fatores, como conexão entre os equipamentos, incerteza-padrão da medição, posição do erro grosseiro, entre outras. Conseqüentemente a correta detecção e identificação de erros grosseiros ainda pode ser considerada um desafio (CROWE, 1996; NARASIMHAN; JORDACHE, 2000) mesmo para fluxogramas em estado estacionário com todas as medições redundantes, e, através dos resultados desse trabalho, isso pode ser comprovado ao se usar técnicas de DEG de referências como o GLR.

Nesse trabalho, um cuidado especial foi tomado na seleção de problemas para teste do método proposto de maneira mais geral e robusta. É possível afirmar ainda, que, em relação ao número de problemas e cenários simulados, o presente trabalho é o mais completo apresentado na literatura até o momento.

Conforme os experimentos numéricos conduzidos nos problemas testes, foi possível observar a melhoria no poder do MT ao usar incerteza-padrão unitária e também ao usar estimadores robustos na função objetivo do problema de RD.

Em relação ao método proposto foi observado que, para alguns problemas, como

o Problema 3, Problema 7 e Problema 14, foi necessário a escolha de outros valores para as incertezas-padrão, onde se é possível concluir a importância de uma análise mais detalhada dos valores das incertezas-padrão antes de aplicar a metodologia. A necessidade de análise da incerteza-padrão para alguns problemas testes pode ser considerada uma limitação da tecnologia proposta.

A metodologia para geração e seleção de dados também se mostrou apropriada para que a estimação de parâmetros de modelos PLS com um bom coeficiente de determinação fosse realizada para predição da magnitude dos erros grosseiros. Os resultados do método proposto sendo testados com um conjunto de dados não utilizados no conjunto de estimação dos parâmetros do modelo, consolida positivamente a adequação do método proposto para identificação de erros grosseiros e estimação de sua magnitude.

Como conclusão final, é possível afirmar que, no conjunto de problemas onde o método foi aplicado, o mesmo se destacou na identificação de erros grosseiros em medidores quando comparado com o método GLR para erros únicos e apresentou um resultado semelhante aos métodos do NT e GLR NT para detecção de vazamentos. Para erros múltiplos foi possível a comparação somente com um exemplo de literatura, onde o método proposto foi comparado com outras técnicas de DEG, sendo elas, GLR, UBET e SEGE, também apresentando resultado superior. Em relação à erros múltiplos, o método proposto apresentou elevado OP para o conjunto de cenários estudados e seletividade reduzida para alguns problemas, sendo necessário, para uma avaliação mais rigorosa, realizar o teste do método em cenários com um conjunto maior de erros múltiplos em cada problema.

5.2 Sugestões para trabalhos futuros

A primeira sugestão é a avaliação mais aprofundada dos efeitos da incerteza na detecção de erros grosseiros com objetivo de obtenção de um OP máximo, tanto para erros grosseiros em medições quanto vazamentos, visto que, no presente trabalho, somente experimentos numéricos com incertezas arbitrárias foram realizados para a validação dos resultados.

A segunda sugestão é a avaliação da capacidade de predição de modelos para erros únicos a partir de erros grosseiros múltiplos. Também é interessante investigar se modelos ajustados para prever erros únicos são capazes de prever erros grosseiros múltiplos. Além disso, é possível explorar se ao concatenar os dados usados para ajustar modelos de erros grosseiros únicos e múltiplos, a capacidade de predição do modelo tem a tendência de melhorar ou piorar. Outra sugestão, no sentido de explorar a capacidade extrapolativa do método proposto, seria avaliar em que faixa de mudanças em pontos operacionais de cada diagramas o modelo empírico gerado seria capaz de prever, com alguma confiabilidade, o local e magnitude dos erros grosseiros.

Como terceira sugestão, está um método sistemático para geração de cenários de erros grosseiros múltiplos de forma a gerar os modelos a serem ajustados com um número mínimo de cenários, semelhante à técnica de planejamento de experimentos. Nesta mesma linha, é possível explorar o uso de Lógica Nebulosa (*Fuzzy*) para a minimização de cenários de erros grosseiros múltiplos.

Outra sugestão está o estudo de seleção de variáveis independentes para avaliar a possibilidade de eliminar algumas variáveis de entrada, estudando o comportamento do modelo PLS resultante. Além disso, o presente método usou as estatísticas dos testes GT, MT e NT, mas é possível, ainda usar estatísticas de outros testes, como o PCA para erro de medição, de vazamento, entre outros, para avaliar a possibilidade de gerar modelos eficientes com poucas variáveis de entrada.

Como sugestão final para trabalhos futuros está a avaliação da capacidade de predição de erros grosseiros em cenários com variáveis não medidas e fluxogramas mais complexos envolvendo restrições não-lineares, como balanço de composição, energia e quantidade de movimento.

5.2.1 Publicações geradas ao longo do trabalho

O presente trabalho gerou uma série de publicações, entre elas:

- Artigo submetido à revista *Industrial and Engineering Chemistry Research* com o título: *Collection of Benchmark Test Problems for Gross Error Detec-*

tion and Identification, cujo resumo é apresentado no Apêndice A.

- Artigo submetido à revista *Industrial and Engineering Chemistry Research* com o título: *Collection of Benchmark Test Problems for Data Reconciliation*, cujo resumo é apresentado no Apêndice A .
- Repositórios de problemas *benchmark* e métodos para RD e DEG (VALLE, 2011).
- Co-autoria no trabalho apresentado no 6o. Congresso Brasileiro de Metrologia (2012), com o título: *A Minlp Formulation to Optimize Sensor Allocation Using Reconciled Data in Systems With Fewer Measurements*.
- Co-autoria no trabalho apresentado no *International Conference on Engineering Optimization - EngOpt2012* , com o título: *Optimizing Sensor Allocation Using Reconciled Data in Systems with Scarce Measurements: MINLP and MILP Approaches*.
- Co-autoria no trabalho apresentado no XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Química 2012, com o título: Validação de Modelo Minlp para Alocação Ótima de Instrumentos Utilizando Dados Reconciliados em Sistemas sem Medições -XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Química.
- Registro de *software* no Instituto Nacional de Propriedade Intelectual (INPI): Módulo de Estudo de Caso no Simulador EMSO.
- Registro de *software* no (INPI): Módulo de Análise de Sensibilidade no Simulador EMSO.
- Registro de *software* no (INPI): Método TECLIM de Reconciliação de Dados no Simulador EMSO.
- Registro de *software* no (INPI): Suplemento de comunicação Excel-EMSO para Otimização e Reconciliação de Dados.

Apêndice A

Resumos dos Artigo Submetidos

Collection of benchmark test problems for data reconciliation

Edson Cordeiro do Valle,^{*,†,‡} Ricardo de Araújo Kalid,^{*,†} Argimiro Resende Secchi,^{*,¶} and Asher Kiperstok[†]

Programa de Engenharia Industrial - Universidade Federal da Bahia, VRTech Tecnologias Industriais Ltda, and COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro

E-mail: edsoncv@vrtech.com.br; kalid@ufba.br; arge@peq.coppe.ufrj.br

Phone: +55 (51)9209-2102; +55 (71)3283-9811. Fax: +55 (71) 3283-9801

Abstract

Since 60th decade, data reconciliation (DR) and gross error detection (GED) has been the focus of several academic studies. The main goal of DR is to perform measured data adjustment based on the process model while the main objective of GED is to distinguish between a simple random error in the measurement equipment and a failure or a process leak. The data reconciliation for any generic process topology remain as a challenge. Through a literature review, it was possible to notice that most papers that proposes DR techniques do not validate them in an accurate manner, since they use only few cases to test these techniques. In this context, the aim of this work is to present a collection of challenge benchmark test problems, some of them from literature review, in order to help researchers to validate DR and GED methods.

*To whom correspondence should be addressed

[†]Programa de Engenharia Industrial - Escola Politécnica - Universidade Federal da Bahia - Rua Aristides Novis, 2, 6 sexto andar, Salvador - BA - CEP: 40210-630, Brazil

[‡]VRTech Tecnologias Industriais Ltda - Rua Guilherme Schmitz, 625, Gravataí - RS - CEP: 94065-200, Brazil

[¶]COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Centro de Tecnologia, Bloco G, sala 115 Cidade Universitária, Rio de Janeiro - RJ - CEP 21941-972

The problems are grouped in 4 categories: 1) DR of linear flowsheets to test robust estimators; 2)Parameter estimation with DR; 3)Data pretreatment, gross error and dynamics effects in DR; 4)Nonlinear DR with measured and unmeasured variables. The results of selected problems are presented illustrating the challenge issues regarding to each category. As a conclusion, it can be observed that this research area shows the need for a common problem set for validating DR techniques due to the problem complexity and this paper fills this lack, presenting those problems for the scientific community.

Collection of benchmark test problems for gross error detection

Edson Cordeiro do Valle,^{*,†,‡} Ricardo de Araújo Kalid,^{*,†} Argimiro Resende Secchi,^{*,¶} and Asher Kiperstok[†]

Programa de Engenharia Industrial - Universidade Federal da Bahia, VRTech Tecnologias Industriais Ltda, and COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro

E-mail: edsoncv@vrtech.com.br; kalid@ufba.br; arge@peq.coppe.ufrj.br

Phone: +55 (51)9209-2102; +55 (71)3283-9811. Fax: +55 (71) 3283-9801

Abstract

Frequently, in a realistic industrial scenario one can find measured data that do not satisfy the mass and energy laws of conservation, which can arise from sensor malfunctioning, process leaking or simply by random noise from measurement sensors. This problem can be approached by applying data reconciliation (DR) and gross error detection and identification (GEDI) techniques, but even with these methods, distinguish between the error sources accurately is not a trivial task. Due to complex nature of GEDI, a general method, that can be applied to any flowsheet, to correctly identify gross error types and location, have not been proposed yet. In this context, the objective of this work is to propose a collection of challenge benchmark problems and data set generation for GEDI in order to help the scientific community to evaluate theirs DR and GEDI methods in a common environment and in different

*To whom correspondence should be addressed

[†]Programa de Engenharia Industrial - Escola Politécnica - Universidade Federal da Bahia - Rua Aristides Novis, 2, 6 sexto andar, Salvador - BA - CEP: 40210-630, Brazil

[‡]VRTech Tecnologias Industriais Ltda - Rua Guilherme Schmitz, 625, Gravataí - RS - CEP: 94065-200, Brazil

[¶]COPPE - Universidade Federal do Rio de Janeiro - Centro de Tecnologia, Bloco G, sala 115 Cidade Universitária, Rio de Janeiro - RJ - CEP 21941-972

types of flowsheets. First, challenge problems were collected from literature or proposed and its challenge issues were presented. The problems are grouped in 3 categories: 1) GED of linear flowsheets with measured and unmeasured variables; 2)Time-varying systems; 3)Flowsheets with nonlinear equations with measured and unmeasured variables. Then, some GEDI techniques were applied for the benchmark problems. In the results section, the main issues of selected challenge problems are presented and discussed. As a conclusion, the analysis of several challenge test problems together let the reader have an idea of the particularities that arise when applying GEDI techniques. Beyond, applying the GEDI techniques in a common set of problems, leads the validation of the methods in a more general and robust manner.

Apêndice B

Estimadores Robustos

Definição da função erro:

$$\varepsilon_i = (y_i - x_i) / \sigma_i$$

MQP

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2} \cdot \varepsilon_i^2$$

Cauchy

$$\rho(\varepsilon) = c_C^2 \ln \left(1 + \frac{\varepsilon_i^2}{c_C^2} \right)$$

Lorentzian

$$\rho(\varepsilon) = -\frac{1}{1 + (\varepsilon_i^2 / 2c_{CL}^2)}$$

Quasi-Weighted

$$\rho(\varepsilon) = \frac{\varepsilon_i^2}{2 + \beta|\varepsilon_i|}$$

onde: c_{CC} , c_{CL} e β são parâmetros do modelo.

Apêndice C

Influência dos Desvios Padrões no Poder Total do Teste

C.1 Problema 1

Tabela C.1: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,993	0,998	1	1	1
2	0	0,001	0,001	0,002	0,003
3	0	0	0	0	0

Tabela C.2: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total = 9%	OP - Vazão Nodal Total = 11%	OP - Vazão Nodal Total = 13%	OP - Vazão Nodal Total = 15%
1	1	1	1	1

Tabela C.3: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,59	0,543	0,653	0,814	0,867
2	0,081	0,136	0,215	0,268	0,34
3	0	0	0	0,001	0,001

Tabela C.4: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original.

OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
7%	9%	11%	13%	15%
0,91	0,99	1	1	1

Tabela C.5: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,579	0,577	0,591	0,54	0,499
2	0,03	0,053	0,15	0,314	0,414
3	0,003	0,002	0,006	0,063	0,217

Tabela C.6: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
0,172	0,231	0,31	0,379	0,46

Tabela C.7: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,395	0,459	0,495	0,506	0,495
2	0,198	0,348	0,446	0,45	0,484
3	0,339	0,458	0,489	0,449	0,466

Tabela C.8: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
1	1	1	1	1

Tabela C.9: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,231	0,35	0,459	0,549	0,583
2	0,203	0,308	0,405	0,444	0,51
3	0,25	0,376	0,41	0,502	0,505

Tabela C.10: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária.

OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
7%	9%	11%	13%	15%
0,175	0,227	0,275	0,339	0,424

Tabela C.11: Poder Total do teste de medida utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,757	0,796	0,82	0,818	0,814
2	0,498	0,531	0,532	0,548	0,512
3	0,538	0,509	0,529	0,471	0,497

Tabela C.12: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
7%	9%	11%	13%	15%
0,102	0,099	0,103	0,102	0,105

C.2 Problema 8

Tabela C.13: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,946	0,984	0,998	1	1
2	0,7	0,872	0,924	0,978	0,986
3	0	0	0	0,002	0,002
4	0,934	0,978	0,998	0,998	1
5	0,816	0,878	0,916	0,916	0,924
6	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0
9	0,932	0,974	0,996	0,998	1
10	0	0	0	0	0
11	0,49	0,544	0,626	0,656	0,72

Tabela C.14: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1

Tabela C.15: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,954	0,996	0,996	0,998	0,998
2	0,602	0,672	0,684	0,748	0,704
3	0,072	0,088	0,172	0,182	0,282
4	0,944	0,984	0,994	0,992	0,97
5	0,586	0,556	0,52	0,506	0,558
6	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0
9	0,934	0,986	0,994	0,982	0,948
10	0	0	0	0	0
11	0,512	0,518	0,498	0,466	0,552
12					

Tabela C.16: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original.

	OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total = 9%	OP - Vazão Nodal Total = 11%	OP - Vazão Nodal Total = 13%	OP - Vazão Nodal Total = 15%
	0,898	0,986	1	1	1
1	0,902	0,996	1	1	1
2	0,972	1	1	1	1
3	0,876	0,986	1	1	1
4	0,85	0,966	0,994	1	1

Tabela C.17: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,962	0,986	0,998	0,994	0,996
2	0,432	0,544	0,59	0,638	0,66
3	0,294	0,394	0,476	0,58	0,634
4	0,926	0,984	0,994	0,988	0,988
5	0,658	0,67	0,654	0,696	0,702
6	0,032	0,15	0,356	0,476	0,466
7	0,01	0,084	0,236	0,452	0,488
8	0	0	0,02	0,104	0,256
9	0,942	0,982	0,988	0,994	0,992
10	0,012	0,094	0,264	0,446	0,474
11	0,488	0,52	0,534	0,5	0,508

Tabela C.18: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

Equipamento	OP Vazão	OP Vazão	OP Vazão	OP Vazão	OP Vazão
	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	0,064	0,1	0,144	0,198	0,27
2	0,088	0,13	0,19	0,254	0,344
3	0,072	0,094	0,136	0,172	0,222
4	0,058	0,082	0,116	0,17	0,23

Tabela C.20: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1

Tabela C.19: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,756	0,88	0,94	0,962	0,972
2	0,53	0,62	0,64	0,61	0,624
3	0,082	0,188	0,254	0,298	0,31
4	0,714	0,868	0,948	0,964	0,974
5	0,716	0,882	0,936	0,968	0,982
6	0,228	0,306	0,412	0,46	0,474
7	0,196	0,312	0,382	0,452	0,436
8	0,316	0,42	0,444	0,466	0,504
9	0,342	0,412	0,464	0,446	0,504
10	0,338	0,424	0,454	0,454	0,452
11	0,358	0,426	0,438	0,512	0,492

Tabela C.21: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,752	0,848	0,836	0,756	0,698
2	0,268	0,282	0,270	0,172	0,096
3	0,422	0,496	0,566	0,588	0,608
4	0,704	0,790	0,790	0,670	0,596
5	0,700	0,794	0,762	0,674	0,626
6	0,200	0,328	0,402	0,468	0,516
7	0,132	0,158	0,132	0,100	0,102
8	0,236	0,278	0,208	0,128	0,110
9	0,420	0,520	0,566	0,616	0,588
10	0,216	0,202	0,230	0,188	0,214
11	0,452	0,534	0,638	0,584	0,556

Tabela C.22: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1

Tabela C.23: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,712	0,824	0,846	0,812	0,746
2	0,144	0,162	0,196	0,164	0,144
3	0,464	0,586	0,608	0,558	0,522
4	0,662	0,784	0,784	0,676	0,602
5	0,68	0,798	0,76	0,686	0,614
6	0,362	0,528	0,718	0,87	0,936
7	0,516	0,582	0,6	0,638	0,598
8	0,17	0,212	0,232	0,18	0,138
9	0,464	0,556	0,564	0,54	0,542
10	0,216	0,282	0,318	0,368	0,356
11	0,484	0,604	0,598	0,632	0,576

Tabela C.24: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

Equipamento	OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1

C.3 Problema 9

Tabela C.25: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,97	0,994	0,992	0,994	1
2	0	0	0	0	0
3	0,97	0,986	0,992	1	1
4	0	0	0	0	0
5	0,326	0,436	0,592	0,704	0,77
6	0	0	0	0	0
7	0,976	0,986	0,992	0,998	1
8	0	0	0	0	0
9	0,964	0,99	0,998	1	1
10	0,116	0,156	0,148	0,178	0,18
11	0,954	0,99	0,994	0,996	1
12	0,892	0,924	0,938	0,952	0,944

Tabela C.26: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 0,1.

Equipamento	OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1
6	1	1	1	1	1

Tabela C.27: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,978	0,992	0,994	0,992	1
2	0	0	0	0	0
3	0,606	0,592	0,67	0,686	0,78
4	0,004	0,032	0,05	0,092	0,124
5	0,278	0,408	0,526	0,6	0,632
6	0,002	0,002	0,006	0,002	0,01
7	0,98	0,992	0,996	0,998	1
8	0	0,004	0,002	0,002	0,004
9	0,964	0,982	0,99	0,992	0,996
10	0,356	0,424	0,456	0,456	0,506
11	0,974	0,988	0,992	0,996	0,998
12	0,456	0,504	0,506	0,522	0,562

Tabela C.28: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	0,046	0,094	0,16	0,216	0,296
2	1	1	1	1	1
3	0,778	0,962	0,996	1	1
4	0,794	0,96	0,994	1	1
5	0,952	0,996	1	1	1
6	0,202	0,348	0,492	0,66	0,816

Tabela C.29: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,959	0,981	0,983	0,993	0,996
2	0,407	0,492	0,5	0,474	0,503
3	0,792	0,764	0,75	0,742	0,729
4	0,28	0,418	0,524	0,519	0,535
5	0,318	0,428	0,509	0,592	0,625
6	0,415	0,506	0,498	0,509	0,456
7	0,969	0,993	0,994	0,993	0,998
8	0,018	0,023	0,061	0,099	0,135
9	0,953	0,993	0,988	0,989	0,996
10	0,323	0,446	0,523	0,591	0,599
11	0,965	0,993	0,996	0,997	0,998
12	0,593	0,626	0,619	0,646	0,652

Tabela C.30: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão original multiplicada por 5.

Equipamento	OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
1	0,025	0,025	0,026	0,028	0,03
2	0,099	0,165	0,239	0,32	0,432
3	0,029	0,044	0,07	0,103	0,133
4	0,049	0,065	0,091	0,128	0,178
5	0,064	0,087	0,136	0,198	0,265
6	0,024	0,025	0,03	0,035	0,036

Tabela C.31: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,337	0,423	0,463	0,487	0,493
2	0,32	0,4067	0,4367	0,52	0,48
3	0,8	0,903	0,96	0,98	0,9967
4	0,703	0,853	0,953	0,963	0,997
5	0,797	0,93	0,987	0,99	0,997
6	0,73	0,897	0,977	0,98	0,997
7	0,79	0,927	0,993	1	1
8	0,76	0,897	0,96	0,997	1
9	0,77	0,92	0,967	0,993	1
10	0,74	0,877	0,963	0,993	1
11	0,78	0,93	0,977	0,993	1
12	0,787	0,93	0,977	0,99	1

Tabela C.32: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 0,1.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =				
	7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1
6	1	1	1	1	1

Tabela C.33: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária.

Corrente	OP	OP	OP	OP	OP
	$\delta/u = 5$	$\delta/u = 6$	$\delta/u = 7$	$\delta/u = 8$	$\delta/u = 9$
1	0,403	0,473	0,487	0,473	0,510
2	0,300	0,453	0,490	0,497	0,503
3	0,763	0,900	0,973	0,977	0,997
4	0,723	0,837	0,947	0,980	1,000
5	0,773	0,927	0,973	1,000	1,000
6	0,737	0,877	0,953	0,993	1,000
7	0,810	0,947	1,000	1,000	1,000
8	0,743	0,893	0,967	0,987	0,993
9	0,760	0,917	0,963	0,990	0,997
10	0,770	0,870	0,953	0,993	1,000
11	0,767	0,920	0,957	1,000	1,000
12	0,777	0,923	0,980	0,983	1,000

Tabela C.34: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária.

Equipamento	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão	OP - Vazão
	Nodal Total =	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total	Nodal Total
	7%	9%	11%	13%	15%
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1
6	1	1	1	1	1

Tabela C.35: Poder Total do teste nodal utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

Equipamento	OP - Vazão Nodal Total = 7%	OP - Vazão Nodal Total 9%	OP - Vazão Nodal Total 11%	OP - Vazão Nodal Total 13%	OP - Vazão Nodal Total 15%
1	0,917	0,980	0,997	0,997	1,000
2	0,833	0,907	0,960	0,993	0,993
3	0,623	0,730	0,870	0,930	0,973
4	0,840	0,940	0,980	0,990	1,000
5	0,160	0,210	0,310	0,403	0,493
6	0,867	0,943	0,983	0,993	1,000

Tabela C.36: Poder Total do teste de medição utilizando a incerteza-padrão unitária multiplicada por 5.

Corrente	OP $\delta/u = 5$	OP $\delta/u = 6$	OP $\delta/u = 7$	OP $\delta/u = 8$	OP $\delta/u = 9$
1	0,360	0,437	0,540	0,587	0,590
2	0,080	0,113	0,253	0,353	0,480
3	0,810	0,883	0,933	0,917	0,813
4	0,617	0,780	0,770	0,730	0,773
5	0,773	0,900	0,940	0,920	0,830
6	0,697	0,893	0,977	0,993	0,987
7	0,800	0,940	0,987	1,000	1,000
8	0,750	0,907	0,923	0,837	0,807
9	0,730	0,823	0,813	0,653	0,497
10	0,727	0,893	0,947	0,903	0,890
11	0,750	0,917	0,973	0,950	0,947
12	0,800	0,893	0,920	0,860	0,770

Apêndice D

Resultados Completos

D.1 Erros Únicos

D.1.1 Problema 1

Tabela D.1: Resultados do Problema 1 para erros em medições.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	8,50	0,277	0,846	0	-	1	2,202	0,970
2	4,50	0,145	0,443	0	-	0,978	2,227	0,813
3	4,00	0,097	0,296	0	-	1	2,315	0,890

Tabela D.2: Resultados do Problema 1 para erros em medições.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,997	0,997	0	0,84	-0,040	1

D.1.2 Problema 2

Tabela D.3: Resultados do Problema 2 para erros em medições.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	11	0,179	0,791	0,981	0,090	1,000	0,343	0,993
2	10	0,161	0,404	0,000	-	0,989	1,503	0,998
3	21	0,346	0,869	0,000	-	0,980	0,980	0,996
4	11	0,182	0,798	0,984	0,087	1,000	0,659	1,000
5	5,5	0,228	0,798	0,000	-	0,940	1,045	0,993
6	5,5	0,122	0,429	0,000	-	1,000	1,048	0,993

Tabela D.4: Resultados do Problema 2 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
	1	1	6,677	1	0,005	1
	1	1	6,810	1	0,0001	1
	1	1	4,848	1	0,001	1

D.1.3 Problema 3

Tabela D.5: Resultados do Problema 3 para erros em medições.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
x1	189,980	2,141	0,900	0,994	0,058	1,000	1,436	0,963
x2	174,600	1,948	0,875	0,000	-6,660	1,000	1,218	0,973
x3	3,139	0,034	0,045	0,017	7,821	1,000	0,980	0,981
x4	32,770	0,345	0,183	0,000	-	-	7,526	-
x5	33,470	0,400	0,212	0,000	-	-	7,406	-
x6	7,250	0,087	0,046	0,000	-	0,793	1,854	1,000
x7	0,316	0,004	0,002	0,000	-	1,000	0,448	1,000
x8	92,376	1,059	0,560	0,000	-	1,000	0,131	1,000
x9	28,629	0,361	0,452	0,000	-	1,000	1,030	0,987
x10	23,800	0,300	0,400	0,405	0,246	1,000	0,821	1,000
x11	18,526	0,200	0,090	0,000	-	1,000	0,246	0,987
x12	55,568	0,645	0,810	0,000	-	1,000	1,299	1,000

Tabela D.6: Resultados do Problema 3 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1,00	1,000	0,033	1	0,007	1
2	1,00	1,000	0,026	1	0,004	1
3	1,00	1,000	0,019	1	0,001	1

D.1.4 Problema 3 - Incerteza-Padrão = 5 t/h

Tabela D.7: Resultados do Problema 3 para erros de medição com incerteza-padrão padrão igual a 5.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza-Padrão	Detectabilidade	OP MT	GLR	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
x1	189,980	2,141	0,900	0,996	0,058	1,000	0,789	1,000	
x2	174,600	1,948	0,875	0,000	-	1,000	1,387	1,000	
x3	3,139	0,034	0,045	0,015	7,648	1,000	0,654	1,000	
x4	32,770	0,345	0,183	0,000	-	1,000	0,249	1,000	
x5	33,470	0,400	0,212	0,000	-	1,000	-0,072	1,000	
x6	7,250	0,087	0,046	0,000	-	1,000	1,296	1,000	
x7	0,316	0,004	0,002	0,000	-	1,000	0,791	1,000	
x8	92,376	1,059	0,560	0,000	-	1,000	1,315	0,995	
x9	28,629	0,361	0,452	0,000	-	1,000	0,556	1,000	
x10	23,800	0,300	0,400	0,386	0,238	1,000	1,272	1,000	
x11	18,526	0,200	0,090	0,000	-	1,000	1,654	0,989	
x12	55,568	0,645	0,810	0,000	-	1,000	0,243	0,997	

Tabela D.8: Resultados do Problema 3 para vazamentos com incerteza-padrão padrão igual a 5.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1,00	1,000	0,033	1	0,007	1
2	1,00	1,000	0,026	1	-0,008	1
3	1,00	1,000	0,019	1	-0,001	1

D.1.5 Problema 4

Tabela D.9: Resultados do Problema 4 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	100	1	0,816	0,985	0,081	1	0,602	0,988
2	64	1	0,816	0,988	0,085	1	0,003	1
3	36	1	0,816	0,989	0,084	1	1,010	1
4	64	1	0,816	0,988	0,083	1	1,037	1
5	36	1	0,816	0,991	0,084	1	0,859	1
6	100	1	0,816	0,990	0,084	1	0,970	1

Tabela D.10: Resultados do Problema 4 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1	1,000	0,048	1,000	0,0001	1
2	1	1,000	0,061	1,000	-0,001	1
3	0,984	0,995	0,113	1,000	-0,001	1
4	1	1,000	0,047	1	-0,0003	1

D.1.6 Problema 5

Tabela D.11: Resultados do Problema 5 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	98,7	0,993	0,846	0,99	0,074	0,98	1,195	0,993
2	41,1	0,641	0,650	0,93	0,132	1	0,543	1,000
3	78,9	0,888	0,836	0,99	0,081	1	0,840	0,988
4	30,2	0,550	0,424	0,00	-	1	0,348	1,000
5	109,1	1,045	0,806	0,00	-	0,98	1,916	1,000
6	19,8	0,445	0,504	0,74	0,185	1	1,039	0,998
7	57,6	0,759	0,774	0,96	0,095	0,98	1,096	1,000
8	37,8	0,615	0,693	0,94	0,115	1	0,901	0,980

Tabela D.12: Resultados do Problema 5 para vazamentos.

Equipmento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1	1	0,030	1,000	-0,004	1,000
2	1	1	0,038	1,000	-0,004	1,000
3	1	1	0,025	1,000	0,001	1,000
4	1	1	0,041	1,000	-0,023	1,000

D.1.7 Problema 6

Tabela D.13: Resultados do Problema 6 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	5	1	0,787	0,977	0,092	1	0,830	0,998
2	15	1	0,787	0,978	0,093	1	0,984	1,000
3	15	1	0,787	0,976	0,092	1	0,743	1,000
4	5	1	0,690	0,952	0,121	1	1,298	0,996
5	10	1	0,756	0,964	0,102	1	1,183	1,000
6	5	1	0,690	0,943	0,119	1	1,017	0,975
7	5	1	0,787	0,978	0,091	1	0,519	1,000

Tabela D.14: Resultados do Problema 6 para vazamentos.

Equipmento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,29	0,5216	0,2413739	1	-0,00032	1
2	0,524	0,7664	0,2137069	1	0,00008	1
3	0,37	0,6532	0,2491131	1	0,00062	1
4	0,1592	0,2924	0,2078744	1	0,00056	1

D.1.8 Problema 7

Tabela D.15: Resultados do Problema 7 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	50	1,000	0,810	0,985	0,086	1,000	0,648	1,000
2	75	1,000	0,815	0,984	0,084	1,000	1,066	1,000
3	75	1,000	0,815	0,984	0,084	1,000	0,996	0,971
4	48	1,000	0,802	0,988	0,087	1,000	1,166	0,971
5	30	1,000	0,805	0,983	0,088	1,000	0,978	0,971
6	25	1,000	0,810	0,988	0,087	1,000	1,188	1,000
7	5	0,387	0,806	0,981	0,088	1,000	1,460	0,996
8	5	0,387	0,806	0,982	0,086	1,000	1,303	0,971
9	3	0,316	0,617	0,735	0,140	1,000	1,289	1,000
10	2	0,316	0,623	0,753	0,135	1,000	0,921	0,971

Tabela D.16: Resultados do Problema 7 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	1	1,000	0,062	1	0,002	0,971
2	1	1,000	0,052	1	-0,001	0,971
3	1	1,000	0,061	1	-0,0003	0,971
4	0,9336	0,982	0,141	1,000	0,000	0,971
5	0,37	0,512	0,158	1,000	-0,001	0,972
6	0,3252	0,438	0,141	0,000	1,200	0,000

D.1.9 Problema 8

Tabela D.17: Resultados do Problema 8 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	3600	111,210	0,915	0,995	0,052	1,000	1,784	0,984
2	1850	57,000	0,595	0,000	-	1,000	1,393	1,000
3	1750	54,210	0,566	0,000	-	1,000	0,813	1,000
4	2837	87,300	0,859	0,987	0,070	1,000	1,518	1,000
5	730	22,110	0,748	0,802	0,103	1,000	1,886	1,000
6	25	0,780	0,009	0,000	-	0,640	5,508	0,973
7	8	0,228	0,003	0,000	-	0,960	4,510	0,989
8	137	3,150	0,032	0,000	-	1,000	4,938	0,960
9	2700	84,960	0,850	0,000	-	1,000	2,013	0,984
10	58	1,710	0,058	0,000	-	1,000	4,794	0,955
11	672	20,04	0,682	0,000	-	1,000	1,733	0,989

Tabela D.18: Resultados do Problema 8 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,991	0,995	0,066	1,000	-0,040	1,000
2	0,998	0,999	0,086	1,000	0,074	1,000
3	0,988	0,987	0,028	1,000	-0,038	1,000
4	0,981	0,993	0,095	1,000	0,027	1,000

D.1.10 Problema 9

Tabela D.19: Resultados do Problema 9 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	230	37,575	0,998	0,000	-	1,000	1,103	1,000
2	21	1,08	0,029	0,000	-	1,000	1,491	1,000
3	209	5	0,890	0,665	0,060	1,000	1,511	1,000
4	35	1,825	0,327	0,237	0,367	1,000	1,164	1,000
5	174	2	0,522	0,725	0,174	1,000	1,433	0,999
6	15	0,88	0,193	0,095	1,060	1,000	1,877	0,993
7	159	7,245	0,967	0,997	0,031	1,000	1,677	1,000
8	50	1	0,349	0,370	0,320	1,000	1,288	0,999
9	209	5	0,916	0,974	0,052	1,000	1,501	0,999
10	94	2	0,616	0,548	0,145	1,000	0,928	0,991
11	115	18,1	0,991	0,999	0,016	1,000	1,363	1,000
12	44	2,385	0,733	0,638	0,105	1,000	1,144	0,999

Tabela D.20: Resultados do Problema 9 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,159	0,161	0,033	1,000	0,014	1,000
2	1,000	1,000	0,020	1,000	0,040	1,000
3	0,973	0,996	0,135	1,000	0,008	1,000
4	0,976	0,993	0,134	1,000	0,004	1,000
5	0,994	0,994	0,014	1,000	0,033	1,000
6	0,546	0,568	0,065	1,000	0,021	1,000

D.1.11 Problema 10

Tabela D.21: Resultados do Problema 10 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	28	0,275	0,865	0,976	0,070	1,000	0,729	0,959
2	5	0,050	0,753	0,842	0,100	1,000	0,862	0,940
3	5	0,172	0,911	0,995	0,054	1,000	0,821	1,000
4	7	0,145	0,873	0,985	0,067	1,000	0,918	0,954
5	11	0,372	0,935	0,996	0,045	1,000	1,395	1,000
6	4	0,127	0,904	0,991	0,056	1,000	1,027	0,959
7	3	0,136	0,919	0,991	0,050	1,000	0,908	0,998
8	5	0,045	0,690	0,811	0,117	1,000	1,433	0,959
9	5	0,095	0,663	0,916	0,129	1,000	0,725	0,995
10	4	0,073	0,661	0,927	0,126	1,000	1,082	0,959
11	3	0,064	0,538	0,767	0,164	1,000	1,335	1,000
12	14	0,147	0,541	0,754	0,164	1,000	1,292	0,964
13	14	0,131	0,790	0,974	0,089	1,000	1,017	0,959

Tabela D.22: Resultados do Problema 10 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	1	1	0,055	1	-0,0006	1
2	1	1	0,012	1	-0,0002	1
3	0,977	0,992	0,080	1	0,0001	0,98
4	0,994	0,999	0,108	1	-0,0001	0,96
5	0,999	0,999	0,081	1	0,0002	1
6	0,988	0,997	0,092	1	1,2300	0
7	0,920	0,970	0,127	1	1,1211	0
8	1	1	0,021	1	0,0004	1

D.1.12 Problema 11

Tabela D.23: Resultados do Problema 11 para erros de medição.

Corrente	Valor	Incerteza-	Detecta-	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
	Nominal	Padrão	bilidade	MT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	690	20,750	0,862	0,994	0,071	1,000	1,566	1,000
2	725	21,826	0,876	0,995	0,066	1,000	1,615	0,999
3	700	20,981	0,865	0,994	0,069	1,000	1,470	0,977
4	685	20,615	0,860	0,995	0,070	1,000	0,932	1,000
5	35	1,076	0,884	0,559	0,064	1,000	1,728	0,998
6	15	0,375	0,308	0,200	0,410	1,000	2,133	0,983
7	25	0,836	0,877	0,995	0,066	1,000	1,960	0,999
8	20	0,701	0,819	0,987	0,084	1,000	1,777	1,000
9	30	0,680	0,803	0,984	0,089	1,000	1,651	1,000
10	5	0,144	0,438	0,401	0,215	1,000	1,519	1,000
11	5	0,136	0,416	0,386	0,230	1,000	1,430	0,999
12	10	0,279	0,823	0,816	0,079	1,000	1,676	1,000

Tabela D.24: Resultados do Problema 11 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta or	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,978	0,992	0,098	1,000	0,048	1,000
2	0,973	0,994	0,123	1,000	0,012	1,000
3	0,974	0,988	0,097	1,000	0,041	1,000
4	0,984	0,994	0,062	1,000	-0,016	1,000
5	0,996	0,999	0,081	1,000	-0,017	1,000
6	0,988	0,995	0,069	1,000	-0,008	1,000
7	0,994	0,996	0,040	1,000	0,004	1,000

D.1.13 Problema 12

Tabela D.25: Resultados do Problema 12 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	100	1	0,931	0,996	0,046	1,000	1,050	1,000
2	30	0,3	0,687	0,913	0,118	1,000	1,566	0,942
3	40	0,4	0,624	0,900	0,139	1,000	1,855	0,999
4	30	0,3	0,578	0,792	0,150	1,000	1,343	1,000
5	15	0,3	0,652	0,000	-	0,960	2,063	0,998
6	5	0,1	0,217	0,000	-	0,920	2,345	0,997
7	10	0,2	0,435	0,000	-	0,980	1,029	1,000
8	70	0,7	0,889	0,996	0,061	1,000	1,423	1,000
9	10	0,3	0,569	0,756	0,156	1,000	1,460	1,000
10	20	0,4	0,712	0,862	0,114	1,000	1,488	1,000
11	80	0,8	0,887	0,997	0,060	1,000	1,196	1,000
12	100	1	0,931	0,998	0,045	1,000	0,813	1,000

Tabela D.26: Resultados do Problema 12 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
1	1,000	1,000	0,017	1,000	-0,0002	1,000
2	1,000	1,000	0,029	1,000	0,0013	1,000
3	1,000	1,000	0,034	1,000	0,0008	1,000
4	1,000	1,000	0,030	1,000	0,0010	1,000
5	1,000	1,000	0,039	1,000	0,0005	1,000
6	1,000	1,000	0,030	1,000	0,0003	1,000

D.1.14 Problema 13

Tabela D.27: Resultados do Problema 13 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	25	1	0,913	0,996	0,054	1,000	1,246	1,000
2	27	1,325	0,943	0,987	0,041	1,000	0,856	1,000
3	22	1,460	0,957	0,994	0,036	1,000	1,398	1,000
4	2	0,200	0,184	0,074	1,305	1,000	1,523	1,000
5	20	0,916	0,906	0,993	0,056	1,000	1,080	0,947
6	24	1,101	0,924	0,990	0,050	1,000	1,160	1,000
7	14	1,040	0,934	0,986	0,046	0,980	1,498	1,000
8	10	0,472	0,601	0,815	0,143	1,000	1,256	1,000
9	10	0,401	0,567	0,770	0,150	1,000	1,437	1,000
10	4	0,207	0,243	0,145	0,781	1,000	1,311	0,999
11	5	0,300	0,815	0,973	0,083	1,000	1,449	1,000
12	7	0,328	0,756	0,000	-	0,980	1,474	0,999
13	1	0,052	0,120	0,000	-	0,980	1,327	0,922
14	8	0,369	0,815	0,977	0,083	1,000	0,911	1,000
15	5	0,250	0,719	0,932	0,111	1,000	1,563	1,000
16	3	0,385	0,779	0,972	0,095	0,980	1,811	1,000

Tabela D.28: Resultados do Problema 13 para vazamentos.

Equipamento	OP NT beta	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,799	0,934	0,167	1	0,0015	1
2	0,668	0,936	0,251	1	0,0015	1
3	0,604	0,899	0,263	1	0,0011	1
4	0,802	0,962	0,200	1	0,0012	1
5	0,739	0,955	0,245	1	0,0008	1
6	0,593	0,854	0,200	1	0,0005	1
7	0,663	0,893	0,202	1	-0,0003	1
8	0,812	0,940	0,174	1	-0,0017	1
9	0,641	0,892	0,215	1	0,0002	1

D.1.15 Problema 14

Tabela D.29: Resultados do Problema 14 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	50	0,533	0,173	0,000	-	1,000	0,057	0,996
2	150	1,460	0,473	0,000	-	1,000	0,416	0,993
3	140	1,541	0,499	0,000	-	0,000	9,000	0,000
4	140	1,451	0,470	0,000	-	0,000	8,000	0,000
5	480	7,611	0,983	0,997	0,022	1,000	2,058	1,000
6	480	7,611	0,983	0,999	0,022	1,000	1,975	0,993
7	480	8,335	0,986	1,000	0,020	1,000	1,918	1,000
8	220	2,136	0,810	0,974	0,085	1,000	2,090	0,994
9	260	2,865	0,949	0,996	0,039	1,000	2,528	0,999
10	260	2,865	0,949	0,998	0,039	1,000	1,976	0,996
11	85,8	0,827	0,745	0,927	0,105	1,000	2,144	0,996
12	15,8	0,441	0,735	0,895	0,103	1,000	3,154	0,988
13	70	0,772	0,701	0,897	0,113	1,000	2,655	0,996
14	15,8	0,441	0,735	0,882	0,104	0,960	3,460	0,987
15	174,2	2,038	0,918	0,996	0,051	1,000	2,711	1,000
16	3,484	0,095	0,708	0,573	0,117	1,000	3,686	0,993
17	3,484	0,095	0,708	0,573	0,113	1,000	3,517	1,000
18	73,484	2,852	0,981	0,997	0,023	1,000	2,508	0,993
19	170,716	1,858	0,900	0,994	0,058	1,000	2,402	0,996
20	170,716	1,999	0,914	0,998	0,053	1,000	2,143	1,000
21	55	0,532	0,292	0,000	-	1,000	2,425	0,996
22	115,716	1,467	0,804	0,000	-	1,000	1,924	0,991
23	200	1,977	0,773	0,000	-	0,960	2,636	0,987
24	20	0,160	0,062	0,000	-	0,860	3,308	1,000

Tabela D.30: Resultados do Problema 14 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
M1	1	1	0,061	0,0	-0,013	0,996
F1	1	1	0,086	0,0	-0,015	0,996
T1	1	1	0,089	0,0	0,003	0,996
S1	1	1	0,069	0,0	0,000	0,996
F2	1	1	0,049	0,0	-0,004	0,996
M2	1	1	0,044	0,0	0,005	0,996
S3	1	1	0,022	0,0	-0,002	0,996
F3	0,9764	0,982	0,041	0,0	0,003	0,996
F4	1	1	0,049	0,0	-0,030	0,996
F5	0,9804	0,9836	0,007	0,0	-0,003	0,996
S5	0,97	0,9756	0,028	0,0	-0,003	0,996
T2	1	1	0,050	0,0	0,007	0,996
S4	1	1	0,040	0,0	-0,003	0,996
S2	1	1	0,024	0,0	0,011	0,996

D.1.16 Problema 14 - Incerteza- Padrão = 2 t/h

Tabela D.31: Resultados do Problema 14 para erros de medição com incerteza-padrão padrão igual a 5 t/h.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	50	0,533	0,173	0,000	-6,660	1,000	1,062	0,997
2	150	1,460	0,473	0,000	-6,660	0,989	0,987	0,988
3	140	1,541	0,499	0,000	-6,660	1,000	1,109	0,990
4	140	1,451	0,470	0,000	-6,660	1,000	0,876	0,991
5	480	7,611	0,983	0,997	0,022	1,000	1,974	0,999
6	480	7,611	0,983	0,999	0,022	1,000	1,716	0,996
7	480	8,335	0,986	1,000	0,020	1,000	1,825	0,988
8	220	2,136	0,810	0,974	0,085	1,000	1,745	0,995
9	260	2,865	0,949	0,996	0,039	1,000	2,291	0,988
10	260	2,865	0,949	0,998	0,039	1,000	1,718	0,992
11	85,8	0,827	0,745	0,927	0,105	1,000	1,343	1,000
12	15,8	0,441	0,735	0,895	0,103	1,000	1,667	0,999
13	70	0,772	0,701	0,897	0,113	1,000	1,703	0,996
14	15,8	0,441	0,735	0,882	0,104	1,000	2,109	0,984
15	174,2	2,038	0,918	0,996	0,051	1,000	2,050	0,988
16	3,484	0,095	0,708	0,573	0,117	1,000	1,619	0,996
17	3,484	0,095	0,708	0,573	0,113	1,000	1,744	1,000
18	73,484	2,852	0,981	0,997	0,023	1,000	1,507	0,990
19	170,716	1,858	0,900	0,994	0,058	1,000	2,001	1,000
20	170,716	1,999	0,914	0,998	0,053	1,000	1,657	0,988
21	55	0,532	0,292	0,000	-6,660	1,000	2,216	0,995
22	115,716	1,467	0,804	0,000	-6,660	1,000	1,735	0,994
23	200	1,977	0,773	0,000	-6,660	1,000	1,747	0,992
24	20	0,160	0,062	0,000	-6,660	0,820	2,227	0,992

Tabela D.32: Resultados do Problema 14 para vazamentos e incerteza-padrão padrão de 5 t/h.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
M1	1	1	0,061	1,0	-0,002	0,992
F1	1	1	0,086	1,0	0,002	0,992
T1	1	1	0,089	1,0	-0,002	0,992
S1	1	1	0,069	1,0	-0,001	0,992
F2	1	1	0,049	1,0	-0,003	0,992
M2	1	1	0,044	1,0	-0,002	0,992
S3	1	1	0,022	1,0	0,000	0,992
F3	0,9764	0,982	0,041	0,0	1,186	0,000
F4	1	1	0,049	1,0	-0,002	0,992
F5	0,9804	0,9836	0,007	0,0	1,100	0,000
S5	0,97	0,9756	0,028	1,0	-0,001	0,992
T2	1	1	0,050	1,0	-0,003	0,992
S4	1	1	0,040	1,0	-0,002	0,992
S2	1	1	0,024	1,0	-0,001	0,992

D.1.17 Problema 15

Tabela D.33: Resultados do Problema 15 para erros de medição.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,86	0,022	0,015	0,0032	32,642	1,000	1,871	1,000
2	1	0,025	0,010	0,0024	47,814	1,000	1,477	1,000
3	111,82	2,796	0,831	0,973	0,076	1,000	2,081	1,000
4	109,96	2,749	0,825	0,971	0,079	1,000	1,536	1,000
5	53,27	1,332	0,829	0,950	0,077	1,000	1,522	1,000
6	112,27	2,807	0,886	0,990	0,062	1,000	1,286	1,000
7	2,32	0,058	0,027	0,0040	17,861	1,000	1,679	1,000
8	164,05	4,101	0,946	0,993	0,041	1,000	1,892	1,000
9	0,83	0,021	0,008	0,00240	53,678	1,000	1,530	1,000
10	52,41	1,310	0,823	0,980	0,079	1,000	1,772	1,000
11	14,86	0,372	0,242	0,118	0,847	1,000	1,830	1,000
12	67,27	1,682	0,887	0,982	0,062	1,000	1,508	0,998
13	111,27	2,782	0,884	0,976	0,063	1,000	1,275	1,000
14	91,86	2,297	0,792	0,942	0,089	1,000	1,357	0,982
15	60	1,500	0,791	0,864	0,091	1,000	1,323	0,986
16	23,64	0,591	0,295	0,177	0,565	1,000	1,624	1,000
17	32,73	0,818	0,255	0,148	0,779	1,000	0,244	0,982
18	16,23	0,406	0,241	0,089	0,801	1,000	2,166	0,999
19	7,85	0,196	0,103	0,010	3,188	1,000	1,195	1,000
20	10,5	0,263	0,121	0,018	2,973	1,000	1,554	1,000
21	87,32	2,183	0,768	0,931	0,096	1,000	1,546	1,000

Continua

Tabela D.34: Resultados do Problema 15 para erros de medição. Continuação

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
22	5,45	0,136	0,092	0,011	3,697	1,000	1,437	1,000
23	2,59	0,065	0,044	0,005	9,511	1,000	1,519	1,000
24	46,63	1,166	0,639	0,685	0,129	1,000	1,146	0,997
25	85,46	2,137	0,905	0,961	0,054	1,000	1,213	1,000
26	81,32	2,033	0,816	0,969	0,083	1,000	1,589	0,998
27	70,79	1,770	0,747	0,920	0,103	1,000	1,022	1,000
28	72,23	1,806	0,647	0,825	0,130	1,000	1,847	0,999

Tabela D.35: Resultados do Problema 15 para vazamentos.

Equipamento	OP NT	OP GLR NT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
1	0,994	0,997	0,073	1,000	0.0028	1,000
2	0,996	0,999	0,103	1,000	0.0016	1,000
3	0,993	0,999	0,081	1,000	0.0021	1,000
4	0,996	1,000	0,086	1,000	0.0098	1,000
5	1,000	1,000	0,064	1,000	- 0.0018	1,000
6	0,988	0,998	0,107	1,000	0.0011	1,000
7	0,997	1,000	0,056	1,000	0.0024	1,000
8	0,998	1,000	0,041	1,000	0.0022	1,000
9	0,999	1,000	0,064	1,000	0.0010	1,000
10	0,998	0,999	0,062	1,000	0.0017	1,000
11	0,999	1,000	0,098	1,000	- 0.0005	1,000

D.1.18 Problema 16

Tabela D.36: Resultados de erros grosseiros de medição para o Problema 16.

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
S319	225,45	2,06	0,117	0,000	-	0,469	4,520	0,999
S316	167,89	1,31	0,074	0,000	-	0,921	1,861	0,899
S312	1332,00	11,12	0,629	0,000	-	1,000	0,316	0,996
S378	1332,00	11,16	0,632	0,000	-	1,000	0,017	0,996
S336	2276,90	18,61	0,942	0,995	0,042	1,000	2,463	1,000
S357	137,50	1,22	0,520	0,543	0,179	1,000	1,975	1,000
S346	917,89	7,81	0,896	0,985	0,060	1,000	2,579	1,000
S359P1	532,38	4,74	0,699	0,914	0,112	1,000	2,035	0,995
S347	385,51	3,32	0,928	0,991	0,048	1,000	2,848	1,000
S352	385,51	3,32	0,928	0,997	0,048	0,980	2,965	1,000
S356	385,51	3,32	0,928	0,996	0,047	1,000	2,835	0,991
S358	100,32	0,85	0,344	0,332	0,388	1,000	2,302	0,999
S357P	285,19	2,26	0,857	0,985	0,073	0,960	2,913	0,994
S359P2	147,69	1,34	0,576	0,618	0,154	1,000	2,342	1,000
S359	680,07	6,35	0,842	0,983	0,075	1,000	2,330	0,999
S338P	683,07	6,35	0,749	0,908	0,103	1,000	2,550	1,000
S338	683,07	6,24	0,738	0,897	0,102	0,980	2,815	0,999
S341P	1593,80	14,97	0,894	0,989	0,058	1,000	2,858	1,000
S341	1593,80	14,97	0,894	0,991	0,060	1,000	2,767	1,000
S414	582,60	5,28	0,902	0,991	0,058	1,000	2,776	0,998
S502	582,60	5,28	0,902	0,991	0,058	1,000	2,999	0,999
S411	1178,20	9,27	0,571	0,801	0,145	1,000	2,571	1,000
S401	2872,50	23,76	0,940	0,996	0,043	1,000	2,172	1,000

Continua

Tabela D.37: Resultados de erros grosseiros de medição para o Problema 16. Continuação

Corrente	Valor Nominal	Incerteza- Padrão	Detecta- bilidade	OP GLR MT	AEE GLR	OP PMGEI	AEE PMGEI	Seletividade PMGEI
S415	3,84	0,03	0,002	0,001	225,0	1,000	2,448	1,000
S402	2876,30	25,96	0,950	0,999	0,039	1,000	3,153	0,999
S404	2870,00	25,96	0,950	0,999	0,050	0,940	3,216	0,995
S405	2876,30	25,96	0,950	0,994	0,039	1,000	3,109	1,000
S407	2876,30	25,96	0,950	0,998	0,039	1,000	3,045	1,000
S408	3098,20	25,87	0,892	0,000	-	0,960	2,984	0,997
S453	1400,00	11,46	0,395	0,000	-	0,740	3,557	0,997
S460	1337,70	12,20	0,842	0,000	-	0,880	2,585	0,998
S456	11,36	0,10	0,007	0,000	-	0,920	2,702	0,998
S452	349,07	2,98	0,206	0,000	-	0,735	3,422	0,967
S511	501,44	4,37	0,978	0,992	0,026	1,000	2,289	1,000
S503	392,10	3,34	0,844	0,978	0,071	1,000	2,628	1,000
S384P	33,80	0,29	0,088	0,008	4,534	1,000	2,264	0,999
S52P	535,24	1,00	0,472	0,537	0,199	1,000	2,662	0,996
S592	244,46	2,15	0,599	0,000	-	0,980	2,718	0,994
S581	147,64	1,20	0,334	0,000	-	0,920	2,956	0,996
S525	31,13	1,00	0,400	0,354	0,282	0,920	3,291	0,994
S524	504,11	4,43	0,966	0,995	0,031	1,000	2,717	1,000
S536	7,00	0,06	0,022	0,003	17,359	1,000	2,816	0,999
S527	497,11	4,18	0,961	0,992	0,034	0,900	3,251	0,999
S549	233,72	1,93	0,616	0,000	-	0,980	2,586	0,999
S550	247,55	2,12	0,677	0,000	-	0,920	3,079	0,995
S537	15,84	0,12	0,703	0,438	0,118	1,000	2,207	1,000
S598	13,37	0,12	0,703	0,283	0,114	0,980	2,877	0,999
S599	2,47	0,02	0,117	0,008	2,367	1,000	2,604	1,000
S267	308,47	2,86	0,780	0,951	0,089	0,980	2,240	0,999
S538	310,94	2,74	0,757	0,937	0,097	1,000	2,559	0,999

Tabela D.38: Resultados de vazamentos para o Problema 16.

Equipamento	OP NT	OP GLR	AEE	OP	AEE	Seletividade
		NT	GLR	PMGEI	PMGEI	PMGEI
DA-301	1	1	0,023	1	0,005	1
Split1	1	1	0,022	1	0,005	1
COMP1	1	1	0,033	1	0,005	1
EA-32X	1	1	0,037	1	0,005	1
FA-309	1	1	0,032	1	0,005	1
Split2	1	1	0,023	1	0,005	1
Mixer 1	1	1	0,016	1	0,005	1
FSPL	1	1	0,036	1	0,005	1
H338	1	1	0,025	1	0,005	1
H341	1	1	0,042	1	0,005	1
DA-401	1	1	0,031	1	0,004	1
PTC	1	1	0,034	1	0,005	1
M1	1	1	0,045	1	0,005	1
448-450	1	1	0,046	1	0,004	1
DC-401	1	1	0,045	1	0,002	1
452-448	1	1	0,045	1	0,003	1
DA-408	1	1	0,032	1	0,007	1
DA-402	1	1	0,033	1	0,007	1
DA-404	1	1	0,029	1	0,005	1
DA-405	1	1	0,021	1	0,005	1
DC-402	1	1	0,022	1	0,005	1
DC-40X	1	1	0,027	1	0,007	1
DA-407	1	1	0,041	1	0,006	1
DA-406	1	1	0,030	1	0,005	1
DA-409	1	1	0,001	0	1,500	0
Mix2	1	1	0,018	1	0,005	1

D.2 Erros Múltiplos

Tabela D.39: Cenário de distúrbios com erros múltiplos e os resultados dos ajustes dos modelos.

Problema	Corrente com Erro Medição	Equipamento com Vazamento	R ² Modelo
P1	1	1	0,97
P2	3	3	0,97
P3	3;10	2	0,96
P4	1	4	0,98
P5	2;4	4	0,95
P6	4;5	2	0,95
P7	6;9	5	0,96
P8	4;11	2	0,94
P9	2;3	5	0,94
P10	3;7;12	8	0,97
P11	6;12	3;7	0,97
P12	3;6;11	2	0,95
P13	2;7;13;15	6	0,97
P14	1;8;9;15;19	4;13;14	0,96
P15	1;13;15;19	1;5;10	0,95
P16	1;6;13;15;19;30;43;46;48	1;12;16;18;26	0,96

D.2.1 Problema 1

Tabela D.40: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 1.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	1	0,382	0,645
E-1	1	0,049	0,609

D.2.2 Problema 2

Tabela D.41: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 2.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	0,221	1
E-3	1	0,033	1

D.2.3 Problema 3

Tabela D.42: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 3.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	2,49	1
C-10	1	1,94	1
E-2	1	0,024	1

D.2.4 Problema 4

Tabela D.43: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 4.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	1	0,510	0,493
E-4	1	0,078	0,444

D.2.5 Problema 5

Tabela D.44: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 5.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-2	1	0,259	1
C-4	0,98	0,490	1
E-4	1	0,005	1

D.2.6 Problema 6

Tabela D.45: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 6.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-4	1	0,647	1
C-5	1	0,216	1
E-2	1	0,019	1

D.2.7 Problema 7

Tabela D.46: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 7.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-6	1	0,268	1
C-9	1	0,245	1
E-5	1	0,030	1

D.2.8 Problema 8

Tabela D.47: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 8.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-4	1	0,060	1
C-11	1	0,018	1
E-2	1	0,030	1

D.2.9 Problema 9

Tabela D.48: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 9.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C2	1	0,848	1
C-3	1	0,211	1
E-5	1	0,031	1

D.2.10 Problema 10

Tabela D.49: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 10.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	0,080	1
C-7	1	0,210	1
C-12	1	0,484	1
E-8	1	0,020	1

D.2.11 Problema 11

Tabela D.50: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 11.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-6	1	0,245	1
C-12	1	0,139	1
E-3	1	0,053	1
E-7	1	0,053	1

D.2.12 Problema 12

Tabela D.51: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 12.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-3	1	0,134	1
C-6	0,91	0,986	1
C-11	1	0,019	1
E-2	1	0,029	1

D.2.13 Problema 13

Tabela D.52: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 13.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-2	0,978	0,150	1
C-7	0,989	0,157	1
C-13	1	0,332	1
C-15	1	0,206	1
E-6	1	-0,016	1

D.2.14 Problema 14

Tabela D.53: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 14.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	0,98	1,442	0,558
C-8	1	1,971	0,614
C-9	1	-0,443	0,614
C-15	1	1,038	0,614
C-19	1	0,846	0,586
E-4	1	-0,014	0,533
E-13	1	-0,014	0,533
E-14	1	-0,014	0,533

D.2.15 Problema 15

Tabela D.54: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 15.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	0,944	0,771	0,673
C-13	0,967	0,503	0,673
C-15	1	0,227	0,685
C-19	0,989	0,452	0,649
E-1	1	0,035	0,649
E-5	1	0,035	0,649
E-10	1	0,035	0,649

D.2.16 Problema 16

Tabela D.55: Resultados dos erros grosseiros múltiplos do Problema 16.

Corrente/Equipamento	OP	AEE	Seletividade
C-1	0.911	5.441	0.525
C-6	0.595	1.708	0.604
C-13	0.932	0.892	0.604
C-15	0.984	0.740	0.604
C-19	0.968	-0.415	0.604
C-30	0.874	4.608	0.569
C-43	0.805	2.560	0.604
C-46	0.984	1.525	0.604
C-48	0.574	2.263	0.604
E-1	1	-0.016	0.544
E-12	1	-0.016	0.544
E-16	1	-0.016	0.544
E-18	1	-0.016	0.544
E-26	1	-0.016	0.544

Referências Bibliográficas

ABIQUIM, A. a. B. d. I. Q. *A Indústria Química Brasileira*. São Paulo, 2013. 9 p.
Disponível em: <<http://www.abiquim.org.br/pdf/indQuimica/AIndustriaQuimica-SobreSetor.pdf>>.

ADAMS, M. J. *Chemometrics in Analytical Spectroscopy*. 2. ed. Cambridge: Royal Society of Chemistry, 2004.

AGUIRRE, L. A. *Introdução À Identificação de Sistemas: Técnicas Lineares e Não-Lineares Aplicadas a Sistemas Reais*. 1. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2000.

ALBUQUERQUE, J. a. S.; BIEGLER, L. T. Data reconciliation and gross-error detection for dynamic systems. *AIChE Journal*, v. 42, n. 10, p. 2841–2856, out. 1996.

ALHAJ-DIBO, M.; MAQUIN, D.; RAGOT, J. Data reconciliation: A robust approach using a contaminated distribution. *Control Engineering Practice*, v. 16, n. 2, p. 159–170, fev. 2008.

ALMATO, M.; SANMARTI, E.; ESPUNA, A.; PUIGJANER, L. Rationalizing the water use in the batch process industry. *Computers & Chemical Engineering*, v. 21, n. Supplement 1, p. S971–S976, maio 1997.

AQUIM, P. M. D. *Gestão em Curtumes: Uso Integrado e Eficiente da Água*. Tese (Doutorado), 2009.

ARORA, N.; BIEGLER, L. T. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, p. 1585–1599, 2001.

BAGAJEWICZ, M. A review of recent design procedures for water networks in refineries and process plants. *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, n. 9-10, p. 2093–2113, out. 2000.

BAGAJEWICZ, M.; JIANG, Q.; SÁNCHEZ, M. Performance evaluation of PCA tests for multiple gross error identification. *Computers & Chemical Engineering*, v. 23, n. Supplement 1, p. S589–S592, jun. 1999.

BAGAJEWICZ, M.; RODERA, H.; SAVELSKI, M. Energy efficient water utilization systems in process plants. *Computers & Chemical Engineering*, v. 26, n. 1, p. 59–79, jan. 2002.

BIPM, B. I. d. P. e. M. *JCGM 100:2008 Evaluation of Measurement Data - Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*. [S.l.], 2008. Disponível em: <<http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM\100\2008\E.pdf>>.

BIPM, B. I. d. P. e. M. *JCGM 104:2009 - Evaluation of measurement data - An introduction to the 'Guide to the expression of uncertainty in measurement' and related documents*. [S.l.], 2009. Disponível em: <<http://www.bipm.org/utils/common/documents/jcgm/JCGM\104\2009\E.pdf>>.

STATISTICS CANADA. *Canada - Industrial Water Use*. Ottawa, 2009. Disponível em: <<http://www.statcan.gc.ca/pub/16-401-x/16-401-x2012001-eng.pdf>>.

CHARPENTIER, V.; CHANG, L. J.; SCHWENZER, G.; BARDIN, M. C. An On-line Data Reconciliation System for Crude and Vacuum Units. In: *NPRA Computer Conference*. Houston: [s.n.], 1991.

CNTL, C. N. d. T. L. *Implementação de Programas de Produção mais Limpa*. Porto Alegre, 2003.

EUROSTAT EUROPEAN COMMISSION. *Environmental statistics and accounts in Europe*. Luxembourg, 2010. Disponível em: <http://epp.eurostat.ec.europa.eu/cache/ITY_OFFPUB/KS-32-10-283/EN/KS-32-10-283-EN.PDF>.

CROWE, C. M. Recursive identification of gross errors in linear data reconciliation. *AIChE Journal*, v. 34, p. 541–555, 1988.

CROWE, C. M. Observability and Redundancy of Process Data for Steady State Data Reconciliation. v. 44, n. 12, p. 2909–2917, 1989.

CROWE, C. M. Data reconciliation - progress and challenges. *Journal of Process Control*, v. 6, n. 2/3, p. 89–98, 1996.

CROWE, C. M.; CAMPOS, Y. G.; HRYMAK, A. Reconciliation of Process Flow Rates by Matrix Projection, Part I: Linear Case. *AIChE Journal*, v. 29, n. 6, p. 881–888, 1983.

CUNHA, E.; PESSOA, C. L. P.; COSTA, C. L. V.; SIQUEIRA, R. A.; KALID, R. D. A. Em Busca do Efluente Zero. In: KIPERSTOK, A. (Ed.). *Prata da casa. Construindo a produção limpa na Bahia*. Primeira e. Salvador: Teclim/UFBA, 2008. p. 175–192.

DEVANATHAN, S.; VARDEMAN, S. B.; Rollins Sr., D. K.; ROLLINS, D. K. Likelihood and Bayesian Methods for Accurate Identification of Measurement Biases in Pseudo Steady-State Processes. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 83, n. 12, p. 1391–1398, dez. 2005.

EL-HALWAGI, M. *Pollution Prevention through Process Integration: Systematic Design Tools*. 1. ed. London: Academic Press, 1997.

EL-HALWAGI, M.; MANOUSIOUTHAKIS, V. Synthesis of Mass Exchange Networks. *AIChE Journal*, v. 35, n. 8, p. 1233–1244, 1989.

FARENZENA, M.; FERREIRA, L. S.; TRIERWEILER, J. O.; AQUIM, P. M. Curtumes: do desperdício à sustentabilidade. In: *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Curitiba: [s.n.], 2004.

FARIAS, A. C. *Avaliação de Estratégias para Reconciliação de Dados e Detecção de Erros Grosseiros*. Tese (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.

FEPAM. *Diagnóstico da poluição hídrica industrial na região hidrográfica do Guaíba*. Porto Alegre, 2001.

FIESP. *Prêmio FIESP Conservação e Reúso de Água*. 2013. Disponível em: <<http://hotsite.fiesp.com.br/premioagua/cases.htm>>.

FINKLER, T. F. *Desenvolvimento de uma Ferramenta para Obtenção de Modelos Empíricos*. Tese (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2003.

FINKLER, T. F.; SOARES, R. D. P.; VALLE, E. C. D. *VRAnalyst*. Porto Alegre: VRTech Industrial Technologies, 2006. Disponível em: <http://www.vrtech.com.br/en_us/vranalyst/vranalyst-modules.html>.

FONTANA, D. *Recuperação de águas de processos, desenvolvimento de um problema padrão*. 110 p. Tese (Dissertação (Mestrado em Pesquisa e Desenvolvimento de Processos)) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2002.

FONTANA, D.; KALID, R.; SARTORI, I.; KIPERSTOK, A.; SILVA, M.; SALES, E. A.; FILHO, J. G. P.; OLIVEIRA, S.; PERAZZO, C. Balanço hídrico - uma nova sistemática. In: *XV Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Curitiba: [s.n.], 2004.

FONTANA, D.; KALID, R. D. A.; KIPERSTOK, A.; SILVA, M. Methodology for wastewater minimization in industries in the petrochemical complex 1. In: *2nd Mercosur Congress on Chemical Engineering*. Rio de Janeiro: [s.n.], 2004. p. 1–10.

GOMES, J. *Procedimento para minimização de Efluentes Aquosos*. Tese (Mestrado em em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2002.

AUSTRALIA GOVERNMENT. *Australian Water Resources 2005*. Canberra, 2006. Disponível em: <http://www.water.gov.au/publications/index.aspx?Menu=Level1_9\backslashlevel1>.

GRANDE, M. H. D.; SALES, E. Racionalização do Uso de Água na Indústria de Celulose Bahia Pulp S/A. In: KIPERSTOK, A. (Ed.). *Prata da casa. Construindo a produção limpa na Bahia*. Primeira e. Salvador: Teclim/UFBA, 2008. p. 157–173.

HARIKUMAR, P.; NARASIMHAN, S. A Method to Incorporate Bounds in Data Reconciliation and Gross Error Detection - II. Gross Error Detection Strategies. *Computers & Chemical Engineering*, v. 17, n. 11, p. 1121–1128, 1993.

HEYEN, G.; MARECHÁL, E.; KALITVENTZEFF, B. Sensitivity calculations and variance analysis in plant measurement reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, n. 96, p. S539–S544, 1996.

HOINKIS, J.; PANTEN, V. Wastewater recycling in laundries-From pilot to large-scale plant. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, v. 47, n. 7, p. 1159–1164, jul. 2008.

INMETRO, I. N. d. M. Q. e. T. *VIM - Vocabulário Internacional de Metrologia - 2012*. Duque de Caxias - Rio de Janeiro, 2012. Disponível em: <http://www.inmetro.gov.br/infotec/publicacoes/vim/_2012.pdf>.

INRIA. *Scilab*. Domaine de Voluceau: Claude Gomez, 2010. Disponível em: <<http://www.scilab.org/>>.

IODACHE, C.; MAH, R. S. H.; TAMHANE, A. C. Performance Studies of the Measurement Test for Detecting Gross Errors in Process Data. *AIChE Journal*, v. 31, p. 1187–1201, 1985.

JODICKE, G.; FISCHER, U.; HUNGERBUHLER, K. Wastewater reuse: a new approach to screen for designs with minimal total costs. *Computers & Chemical Engineering*, v. 25, n. 2-3, p. 203–215, mar. 2001.

JOLLIFFE, I. T. *Principal Component Analysis*. 2. ed. New York: Springer-Verlag, 2002.

JUNIOR, C. A. V.; MEDEIROS, J. L. D.; O. Q. F. Araújo. Ferramentas de Detecção de Anomalias Baseadas em Classificadores Hierárquicos e Teoria dos Protótipos. In: *XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Recife - Brazil: [s.n.], 2008.

KELLER, J. Y.; DAROUACH, M.; KRZAKALA, G. Fault detection of Multiple Biases or process leaks in Linear Steady State Systems. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 18, p. 1001–1004, 1994.

- KELLY, J. Reconciliation of process data using other projection matrices. *Computers & Chemical Engineering*, v. 23, n. 6, p. 785–789, jun. 1999. ISSN 00981354.
- KENNY, J.; BARBER, N.; HUTSON, S.; LINSEY, K.; LOVELACE, J.; MAUPIN, M. *Estimated Use of Water in the United States in 2005*. Reston, 2009. Disponível em: <<http://pubs.usgs.gov/circ/1344/pdf/c1344.pdf>>.
- KHOR, C. S.; SHAH, N.; MAHADZIR, S.; ELKAMEL, A. Optimisation of petroleum refinery water network systems retrofit incorporating reuse, regeneration and recycle strategies. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 90, n. 1, p. 137–143, fev. 2012.
- KIPERSTOK, A.; ESQUERRE, K.; KALID, R.; SALES, E.; OLIVEIRA, G. Rationalizing the Use of Water in Industry-Part 2: Instruments Developed by the Clean Technology Network in the State of Bahia. *Journal of Environmental Protection*, v. 4, p. 497–507, 2013.
- KIPERSTOK, A.; ESQUERRE, K.; KALID, R. A.; SALES, E.; OLIVEIRA, G. Rationalizing the Use of Water in Industry-Part 1: Summary of the Instruments Developed by the Clean Technology Network in the State of Bahia and Main Results Obtained. *Journal of Environmental Protection*, v. 4, p. 486–496, 2013.
- KONGSJAHRU, R.; ROLLINS, D. K.; ANA, M. B. B. Accurate Identification of Biased Measurements Under Serial Correlation. *Trans IChemE*, v. 78, n. Part A, p. 1010–1018, 2000.
- KRETZOVALIS, A.; MAH, R. S. H. Effect of redundancy on estimation accuracy in process data reconciliation. *Chemical Engineering Science*, v. 42, n. 9, p. 2115–2121, 1987.
- MADRON, F. A New Approach to the Identification of Gross Error in Chemical Engineering Measurements. *Chemical Engineering Science*, v. 40, p. 1855–1860, 1985.
- MADRON, F. *Process Plant Performance: Measurement and Data for Optimization and Retrofits*. 1. ed. West Sussex: Ellis Horwood Limited Co, 1992.

- MAH, R. S. H.; STANLEY, G. M.; DOWNNING, D. M. Reconciliation of Process Flow and Inventory Data. *Ind. & Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol.*, v. 15, n. 1, p. 175–183, 1976.
- MAH, R. S. H.; TAMHANE, A. C. Detection of gross errors in process data. *AIChE Journal*, v. 28, p. 828–830, 1982.
- MANN, J.; LIU, Y. *Industrial water reuse and wastewater minimization*. 1. ed. New York: McGraw-Hill Professional, 1999. ISBN 978-0071348553.
- MARK, H.; WORKMAN, J. *Chemometrics in Spectroscopy*. 1. ed. London: Academic Press, 2007. ISBN 978-0123740243.
- MARONNA, R.; ARCAS, J. Data reconciliation and gross error diagnosis based on regression. *Computers & Chemical Engineering*, v. 33, n. 1, p. 65–71, 2009.
- MARTINS, M. A.; AMARO, C. A.; SOUZA, L. S.; KALID, R. A.; KIPERSTOK, A. A. New objective function for data reconciliation in water balance from industrial processes. *Journal of Cleaner Production*, p. 1–6, mar. 2010.
- MEI, C.; SU, H.; CHU, J. An NT-MT Combined Method for Gross Error Detection and Data Reconciliation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, v. 14, n. 5, p. 592–596, out. 2006.
- MIRRE, R. C.; YOKOYAMA, L.; PESSOA, F. L. P. Diagrama de Fontes de Água: Uma Ferramenta Sustentável para a P+L na Minimização de Águas e Efluentes Industriais. In: *2nd International Workshop Advances in Cleaner Production*. São Paulo: [s.n.], 2009.
- MITRAS, C. L. Data reconciliation and variable classification by null space methods. *Measurement*, ELSEVIER SCI LTD, v. 43, n. 5, p. 702–707, jun. 2010.
- NARASIMHAN, S.; JORDACHE, C. *Data Reconciliation and Gross Error Detection: An Intelligent Use of Process Data*. 1. ed. Houston: Gulf Publishing, 2000.
- NARASIMHAN, S.; MAH, R. S. H. Generalized Likelihood Ratio Method for Gross Error Identification. *AIChE Journal*, v. 33, p. 1514–1521, 1987.

NARCISO, M. V. A. *Alocação Ótima de Instrumentos de em Sistemas de Medições Aplicados a Plantas Industriais sem Medições*. Tese (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal da Bahia, 2012.

OLIVEIRA, G. L. de. *A Metodologia TECLIM para Uso Racional da Água na Indústria: Uma proposta de sistematização*. Tese (Dissertação de Mestrado) — Universidade Federal da Bahia, 2011.

ÖZYURT, D. B.; PIKE, R. W. Theory and practice of simultaneous data reconciliation and gross error detection for chemical processes. *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, p. 381–402, 2004.

PRATA, D. M.; FREITAS, K. P.; LIMA, E. L. Análise de Clusters para Detecção de Erros Grosseiros e Reconciliação de dados: Aplicação Industrial. In: *XVII Congresso Brasileiro de Engenharia Química*. Recife - Brazil: [s.n.], 2008.

Raghava Rao, J.; CHANDRABABU, N. K.; MURALIDHARAN, C.; NAIR, B. U.; RAO, P. G.; RAMASAMI, T. Recouping the wastewater: a way forward for cleaner leather processing. *Journal of Cleaner Production*, v. 11, n. 5, p. 591–599, ago. 2003.

RAWLINGS, J. O.; PANTULA, S. G.; DICKEY, D. A. *Applied Regression Analysis: A Research Tool*. 2. ed. New York: Springer-Verlag, 1998.

REDDY, V. N.; MAVROVOUNIOTIS, M. L. An Input-Training Neural Network Approach for Gross Error Detection and Sensor Replacement. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 76, n. 4, p. 478–489, maio 1998.

ROLLINS, D. K.; CHENG, Y.; DEVANATHAN, S. Intelligent Selection of Hypothesis Tests to Enhance Gross Error Identification. *Comp. & Chem. Engineering*, v. 20, n. 5, p. 517–530, 1996.

ROLLINS, D. K.; DAVIS, J. F. Unbiased Estimation of Gross Error in Process Measurements. *AIChE Journal*, v. 38, p. 563–572, 1992.

ROMAGNOLI, J.; SÁNCHEZ, M. C. *Process Systems Engineering - Volume 2 - Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations*. [s.n.], 1999. 270 p.

ROMAGNOLI, J.; STEPHANOPOULOS, G. Rectification of Process Measurement Data in the Presence of Gross Errors. *Chemical Engineering Science*, v. 36, n. 11, p. 1849–1863, 1981.

ROSENBERG, J.; MAH, R. S. H.; IORDACHE, C. Evaluation of Schemes for Detecting and Identifying Gross Errors in Process Data. *Ind. & Eng. Chem. Proc. Des. Dev., Vol.*, v. 26, p. 555–564, 1987.

SÁNCHEZ, M.; ROMAGNOLI, J. Use of orthogonal transformations in data classification-reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*, v. 20, n. 5, p. 483–493, 1996.

SÁNCHEZ, M.; ROMAGNOLI, J. J.; JIANG, Q.; BAGAJEWICZ, M.; SA, M. Simultaneous estimation of biases and leaks in process plants. *Computers & Chemical Engineering*, v. 23, n. 7, p. 841 – 857, jul. 1999.

SÁNCHEZ, M. C.; SENTONI, G.; SCHBIB, S.; TONEILI, S.; ROMAGNOLI, J. Gross Measurements Error Detection/Identification for an Industrial Ethylene Reactor. *Comp. & Chem. Eng.*, v. 20, p. S1559–S1564, 1996.

SERTH, R. W.; HEENAN, W. A. Gross error detection and data reconciliation in steam-metering systems. *AIChE Journal*, v. 32, p. 733–747, 1986.

UNITED KINGDOM STATISTICAL SERVICE. *Environmental Statistics: Key Facts*. London, 2011. Disponível em: <<http://www.defra.gov.uk/statistics/files/Environmental-key-statistics-Dec-2011.pdf>>.

SHUKLA, S. K.; KUMAR, V.; YEOM, I. T.; BANSAL, M. C. Recycling of bleach plant effluent of an Indian paper mill using water cascade analysis technique. *Clean Technologies and Environmental Policy*, v. 14, n. 4, p. 677–685, nov. 2011.

SINGTH, S. R.; MITTAL, N.; SEN, P. A Novel Data Reconciliation and Gross Error Detection Tool for the Mineral Processing Industry. *Minerals Engineering*, v. 14, n. 7, p. 809–814, 2001.

SMITH, R. *Chemical Process: Design and Integration*. First. Southern Gate: John Wiley & Sons, 2005. ISBN 978-0471486817.

- SODERSTROM, T. A.; HIMMELBLAU, D. M.; EDGAR, T. F. A mixed integer optimization approach for simultaneous data reconciliation and identification of measurement bias. *Control Engineering Practice*, v. 9, n. 8, p. 869–876, ago. 2001.
- SOUZA, L. S. D.; KALID, R.; KIPERSTOK, A. Propagação da incerteza na reconciliação de dados com restrições lineares. 2010.
- STANLEY, G. M.; MAH, R. S. H. Observability and redundancy estimation in process data estimation. *Chemical Engineering Science*, v. 36, p. 259–272, 1980.
- SWARTZ, C. L. E. Data Reconciliation for Generalized Flowsheet Applications. In: *American Chemical Society National Meeting*. [S.l.: s.n.], 1989.
- THEVENDIRARAJ, S.; KLEMES, J.; PAZ, D.; ASO, G.; CARDENAS, G. J. Water and wastewater minimisation study of a citrus plant. *Resources, Conservation and Recycling*, v. 37, p. 227–250, 2003.
- TOKOS, H.; PINTARIC, Z. N.; YANG, Y.; KRAVANJA, Z. Multilevel Strategies for the Retrofit of Large- Scale Industrial Water System: A Brewery Case Study. *AIChE Journal*, v. 58, n. 3, p. 884–898, 2012.
- TONG, H.; CROWE, C. M. Detection of gross errors in data reconciliation by principal component analysis. *AIChE Journal*, v. 41, p. 1712–1722, 1995.
- VALLE, E. C. *Data Reconciliation and Gross Error Detection Benchmark Problems*. 2011. Disponível em: <<http://code.google.com/p/dr-ged-benchmarks/>>.
- VALLE, E. C. D. *Minimização do Uso de Água e Efluentes com Considerações Econômicas e Operacionais via Programação Matemática*. Tese (MSc) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2005.
- Van Der Leeden, F.; TROISE, F. L.; TODD, D. K. *The Water Encyclopedia*. [S.l.]: Lewis Publishers, 1990. (Geraghty & Miller : Ground-water series).
- VARMUZA, K.; FILZMOSER, P. *Introduction to Multivariate Statistical Analysis in Chemometrics*. First edit. Boca Raton: Taylor & Francis, 2009.

VEVERKA, V.; MADRON, F. *Material and Energy Balancing in the Process Industries: From Microscopic Balances to Large Plants*. First edit. Amsterdam: Elsevier B.V., 1997.

WÄCHTER, A.; BIEGLER, L. T. On the Implementation of a Primal-Dual Interior Point Filter Line Search Algorithm for Large-Scale Nonlinear Programming. *Mathematical Programming*, v. 106, n. 1, p. 25–57, 2006.

WANG, F.; JIA, X.-p.; ZHENG, S.-q.; YUE, J.-c. An improved MT-NT method for gross error detection and data reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*, v. 28, n. 11, p. 2189–2192, out. 2004.

WANG, Y.-P.; SMITH, R. Design of distributed effluent treatment systems. *Chemical Engineering Science*, v. 49, n. 18, p. 3127–3145, set. 1994.

WERKEMA, C.; AGUIAR, S. *Análise de Regressão, Como Entender o Relacionamento entre as Variáveis de um Processo*. 1. ed. Belo Horizonte: Werkema Editora, 2006.

ZHANG, Z.; SHAO, Z.; CHEN, X.; WANG, K.; QIAN, J. Quasi-weighted least squares estimator for data reconciliation. *Computers & Chemical Engineering*, v. 34, n. 2, p. 154–162, fev. 2010.

UFBA
UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA

PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI

Rua Aristides Novis, 02, 6º andar, Federação, Salvador BA
CEP: 40.210-630
Telefone: (71) 3283-9800
E-mail: pei@ufba.br
Home page: <http://www.pei.ufba.br>

