(CC BY 4.0) | ISSN 2525-3409 | DOI: http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v9i8.6335 Aplicação do método de análise dos componentes principais (*PCA*) para detecção de falhas em plantas químicas

Research, Society and Development, v. 9, n. 8, e957986335, 2020

Application of principal component analysis method (*PCA*) for fault detection in chemical plants

Aplicación del método de análisis de componentes principales (*PCA*) para la detección de fallas en plantas químicas

Recebido: 05/07/2020 | Revisado: 17/07/2020 | Aceito: 21/07/2020 | Publicado: 03/08/2020

Thessa Fuzaro Mendes

ORCID: https://orcid.org/0000-0002-7540-4347 Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Brasil E-mail: thessafuzaro@gmail.com **Davi Leonardo de Souza** ORCID: https://orcid.org/0000-0002-1995-9057 Universidade Federal do Triângulo Mineiro, Brasil E-mail: davi.souza@uftm.edu.br

Resumo

Sistemas de controle são usados na indústria química para reduzir o desvio do valor das variáveis de processo em relação ao valor desejado, conhecido como setpoint. Mesmo que os controladores convencionais ajudem a reduzir esses erros, ainda existe a possibilidade de ocorrerem falhas, que são um desvio não permitido devido a alguma propriedade característica ou parâmetros do sistema. O desenvolvimento de novas técnicas de detecção de falhas é fundamental para atender a demanda da crescente complexidade dos sistemas industriais e suas performances que visam atingir uma melhor eficiência. O objetivo desse trabalho foi aplicar o método de análise dos componentes principais ou *PCA* (*Principal Component Analysis*) para detectar falhas em plantas químicas. O *PCA* coleta os dados históricos do processo e constrói um modelo estatístico baseado neles, bem como permite a redução da ordem de modelos multivariável para facilitar sua implementação. Foram feitos dois estudos de caso envolvendo reator tanque agitado contínuo ou *CSTR* (*Continuously Stirred Tank Reactor*) com jaqueta de aquecimento e *CSTR* não-isotérmico de modo a verificar a eficiência do método proposto na detecção de falhas em sistemas de controle monitorado. Avaliaram-se falhas em sensores e sistemas submetidos a perturbações tipo

degrau, mediante o *PCA* e as estatísticas T^2 de *Hotelling* e Q. O método *PCA* mostrou-se eficiente para detectar as falhas existentes nos estudos de caso apresentados, o que indica seu potencial para aplicação em controladores da indústria química.

Palavras-chave: Monitoramento; Detecção de falhas; PCA.

Abstract

Control systems are used in chemical industries to reduce the value of process variable deviations from the desired value known as setpoint. Even if conventional controllers contribute to reduce those errors, there is a possibility to occur system faults, which are a not allowed deviation due to some characteristic property or system parameters. Developing new fault detection techniques is the key to meet a demand growing complexity of industrial systems and their performances that aim to achieve better efficiency. This work aims to apply the Principal Component Analysis (*PCA*) method to detect faults in chemical plants. *PCA* collects historical process data and constructs a statistical model from them, besides allowing the order reduction of multivariable models to facilitate its implementation. Two case studies were performed involving *CSTR* (*Continuously Stirred Tank Reactor*) with heating jacket and a non-isothermic *CSTR* in order to verify the efficiency of the proposed method in detecting failures in monitored control systems. Both failures in sensors and systems submitted to step disturbances were assessed using *PCA* and T² of *Hotelling* and Q statistics. The *PCA* proved to be an efficient method in fault detections involving the case studies presented, which indicates its potential to be applied in chemical industry controllers.

Keywords: Monitoring; Fault detection; PCA.

Resumen

Los sistemas de control se utilizan en las industrias químicas para reducir el valor de las desviaciones variables del proceso del valor deseado conocido como punto de ajuste. Incluso si los controladores convencionales contribuyen a reducir esos errores, existe la posibilidad de que ocurran fallas del sistema, que son una desviación no permitida debido a algunas propiedades características o parámetros del sistema. El desarrollo de nuevas técnicas de detección de fallas es la clave para satisfacer la creciente demanda de la complejidad de los sistemas industriales y sus rendimientos que apuntan a lograr una mayor eficiencia. Este trabajo tiene como objetivo aplicar el método de Análisis de Componentes Principales o *PCA* (*Principal Component Analysis*) para detectar fallas en plantas químicas. *PCA* recopila datos de procesos históricos y construye un modelo estadístico a partir de ellos, además de permitir

la reducción del orden de modelos multivariables para facilitar su implementación. Se realizaron dos estudios de caso que involucraron *CSTR* con camisa de calentamiento y un *CSTR* no isotérmico para verificar la eficiencia del método propuesto en la detección de fallas en los sistemas de control monitoreados. Ambas fallas en sensores y sistemas sometidos a perturbaciones escalonadas se evaluaron utilizando *PCA* y T^2 de las estadísticas de *Hotelling* y Q. El *PCA* demostró ser un método eficiente en la detección de fallas que involucra los estudios de caso presentados, lo que indica su potencial para ser aplicado en los controladores de la industria química.

Palabras clave: Supervisión; Detección de fallas; PCA.

1. Introdução

A crescente complexidade dos sistemas industriais e suas performances relativas para atingir uma melhor eficiência, seja ela econômica ou ambiental, exigem um desenvolvimento de novas técnicas de detecção de falhas (Tidriri et al., 2016). Por outro lado, existem comportamentos indesejados em sistemas que não são capazes de corrigi-los por uma ação de controle padrão. Por essa razão, foi necessária a introdução do conceito de falha. Isermann (1997) define falha como um desvio não permitido por no mínimo uma propriedade característica ou parâmetros do sistema. Essas falhas podem ser provocadas por diversos motivos, tais como uma leitura errada de um sensor ou o descalibramento desse; um vazamento em um tanque que provoca uma oscilação no seu nível; ou as variáveis medidas que estejam fora dos limites pré-estabelecidos, dessa forma, consideradas falhas.

Baseado nisso, atualmente existe uma busca de novos métodos para que essas falhas sejam detectadas com maior agilidade a fim de manter o funcionamento operacional e evitar danos. Assim, para gerenciar eventos anormais ou *AEM (Abnormal Event Management)* é necessário fazer um monitoramento das falhas e possíveis soluções devem ser criadas para contornar a situação (Venkatasubramanian et al., 2003). Com isso em vista, diversos métodos têm sido empregados para a detecção de falhas e a grande diferença entre eles é o conhecimento usado para o diagnóstico de formulação. Para Yang et al. (2011), os métodos de detecção de falhas podem ser separados em modelos quantitativos ou qualitativos baseados em dados históricos. Cada método possui seus pontos fortes e fracos, mas nenhum deles é genérico e perfeito para abranger diversos casos.

Esses métodos de detecção de falhas evidenciam a importância de uma supervisão nos sistemas industriais, pois há uma grande quantidade de informações que estão sob análise de

operadores. Isso acarreta um atraso na detecção de falhas e um remanejo do sistema para o comportamento normal. A exemplo disso, Britto (2014) propõe o quanto é desejável que o problema, isto é, a falha, seja detectada o quanto antes, porque desta forma a recuperação do sistema poderá ser mais rápida e eficiente, e evita, assim, um possível estado crítico de operação. O aparecimento de falhas no processo pode causar vários problemas na planta, tais como paradas no processo industrial, riscos de acidentes e comprometimento com a qualidade do produto final.

Entretanto, é muito difícil gerenciar as falhas de um processo pelos operadores humanos. Consequentemente, se faz necessário o desenvolvimento de controles de processos que facilitam o monitoramento e a resposta de eventos anormais para os operadores de processos. Dentre os métodos de detecção de falhas existem os métodos baseados em histórico de processos, os quais necessitam de uma grande quantidade de dados para serem monitorados. Por tanto o sistema precisa extrair as informações importantes dos dados históricos do processo para detectar e diagnosticar a falha existente.

A análise dos componentes principais ou *PCA* (*Principal Component Analysis*) é empregada para construção de modelos estatísticos baseados em dados históricos do processo (Sánchez-Fernández, et al., 2018). Essa técnica de modelagem transforma o conjunto de dados originais em um conjunto simplificado de dados retendo a maior parte das informações dos dados de referência (Li, Peng & Wang, 2018).

O método *PCA* foi desenvolvido com base em abordagens de monitoramento estatísticos de uma única variável, nas quais são aplicados limites inferior e superior como parâmetros da variável. Esses limites mostram as condições normais de operação do processo sem falhas. Entretanto, para métodos mais complexos, que possuem multivariáveis, empregase métodos como o *PCA* ou mínimos quadrados parciais ou *PLS (Partial Least Squares)*. Esses métodos diminuem a dimensão do espaço das variáveis de processo e absorvem uma quantidade significativa de dados correlacionados entre as variáveis (Britto, 2014). Os dados históricos produzidos pelo processo passam por tratamentos estatísticos e geram uma reprodução generalizada dos dados do processo em um espaço dimensional menor.

Para o método *PCA* ser aplicado, necessita-se resolver o problema de valor característico, no qual um conjunto de vetores característicos ortogonais é correlacionado pela quantidade de variância explicita pelas direções desses vetores (Reis, 2008). Assim, considerando-se uma matriz X que contenha os dados históricos de processo, em que $X \in \mathbb{R}^{nxm}$; n é o número de amostras e m é o número de variáveis de processo. Os vetores

característicos podem ser calculados por meio da solução dos pontos estacionários do problema de otimização, como pode ser visto na equação 1, em que $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$.

$$\max_{\mathbf{v}\neq\mathbf{0}} = \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{x}^T \mathbf{x} \mathbf{v}}{\mathbf{v}^T \mathbf{v}} \tag{1}$$

Utilizando a decomposição dos valores singulares (SVD), de $\frac{1}{\sqrt{n-1}}X$, determina-se os valores dos pontos estacionários da equação 1, por meio da equação 2, em que U $\in \mathbb{R}^{nxn}$ e V $\in \mathbb{R}^{mxm}$ são matrizes unitárias.

$$\frac{1}{\sqrt{n-1}}X = U\Sigma V^T \tag{2}$$

A matriz $\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times m}$ possui valores singulares reais positivos com magnitudes decrescentes por toda diagonal principal ($\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge ... \ge \sigma_{min(m,n)} \ge 0$) e os outros elementos iguais a zero. A matriz V é constituída por vetores colunas ortogonais, e a variação do conjunto de dados experimentais projetada pela i-ésima coluna de V é o mesmo que σ_i^2 . Para encontrar a solução da equação 2 é necessário utilizar a decomposição em valores característicos da matriz de covariância amostral *S* (equação 3), onde a matriz diagonal $\Lambda = \Sigma^T \Sigma \in \mathbb{R}^{m\times m}$ possui os valores característicos reais positivos de magnitude decrescente ($\lambda_1 \ge \lambda_2 \ge ... \ge \lambda_m \ge 0$) e o i-ésimo valor característico (λ_i) é o quadrado do i-ésimo valor singular (λ_i^2) (Bastidas,2018).

$$S = \frac{1}{n-1} X^T X = V \wedge V^T \tag{3}$$

A principal função do *PCA* é capturar as variações dos dados e reduzir o efeito da existência de possíveis ruídos imprevisíveis, pois eles prejudicam a representação do método *PCA*. Por essa razão, utilizam-se os *a* (número do componente principal) maiores valores característicos para assegurar o principal objetivo da técnica. A diminuição de dimensão é efetuada para preservar sistemas de detecção de falhas que separem as partes do processo que contêm ruídos imprevisíveis de maneira a monitorar, então, de forma independente esses dois tipos de situação. Logo, gera-se a matriz $P \in \mathbb{R}^{mxa}$, por meio dos valores característicos para da matriz V. A matriz T é constituída pela projeção das observações

em X num espaço de dimensão reduzida, como é mostrado na equação 4 e a projeção de T, novamente no espaço de observação *m*-dimensional (equação 5) (Souza et al,2014).

$$T = XP$$
(4)
$$\hat{X} = T P^{T}$$
(5)

A matriz residual E pode ser determinada pela diferença entre X e \hat{X} . Essa matriz captura as variações que acontecem no interior do espaço de observações expandidas pelos vetores característicos associados com o *m-a* menores valores característicos. A escolha de a é muito importante pelo fato de TP^T representar a principal fonte de variabilidade do processo e E representar a variabilidade correspondente ao ruído no processo. Definindo t_i como a i-ésima coluna de T do conjunto de dados experimentais, quatro propriedades podem ser demonstradas:

- variância $(t_1) \ge$ variância $(t_2) \ge ... \ge$ variância (t_a) ;
- média de $t_i=0$; \forall_i ;
- $t_i^T t_k = 0; \forall \neq k;$
- não há outra expansão ortogonal de a componente que capture mais variações dos dados.

Portanto, quando um novo vetor coluna de observações no conjunto teste, $X \in \mathbb{R}^{m}$, é projetado dentro do espaço de pontos de dimensão reduzida, $t_i=X^Tp_i$, em que p_i é o i-ésimo vetor característico, obtém-se o i-ésimo componente principal de X, t_i . A análise do componente principal é fundamentada em uma quantidade menor de componentes do modelo, conhecidos como componentes principais. O monitoramento de processos pode ser feito por meio de técnicas de estatísticas multivariáveis e representada graficamente T^2 e Q para monitoramento das diversas variáveis simultaneamente. Ao diminuir o dimensionamento do espaço da matriz X, em que sistemas possuem mais de dois componentes principais, o monitoramento do processo pode ser realizado por meio de dois monitoramentos estatísticos citados anteriormente (Bin Shams, Budman & Duever, 2011).

Utilizando a técnica de redução de ordem com objetivo de desacoplar as variações de estado das alterações inesperadas. Por essa razão, ela determina o número adequado de valores característicos que precisam ser mantidos no modelo *PCA*. Depois que o modelo é

encontrado, é possível analisar duas partes: os maiores valores característicos que descrevem a maior parte das variações sistemáticas ou de estado de um processo e os menores valores característicos que descrevem os ruídos inesperados. Um dos métodos para obter o número do componente principal *a* é o procedimento da variância percentual cumulativa ou *CPV* (*Cumulative Percentual Variance*). Ele é constituído pelo valor da variância percentual (*CPV(a)* \geq 90%), capturado pelos a componentes principais adotados. Esse valor é calculado usando o "*eighenvalues*" através da equação 6 que está relacionada aos dados da matriz *X* (Alkaya & Eker, 2011).

$$CPV(a) = \frac{\sum_{i=1}^{a} \lambda_i}{traço(S)} \ 100 \tag{6}$$

Pode-se aplicar um algoritmo para calcular *a* por meio de 5 etapas (Reis,2008; Souza et al, 2014):

1. Criar um conjunto de dados normalmente distribuídos com média zero e variância unitária, possuindo mesma dimensão do conjunto de treinamento (m variáveis e n amostras).

2. Efetuar uma análise do componente principal (*PCA*).

3. Obter os valores característicos classificados em ordem decrescente.

4. Plotar os valores característicos dos dados de referência normalmente distribuídos.

5. Obter a redução de ordem por meio do cruzamento entre os perfis.

Para realizar a detecção de falhas em processos contendo multivariaveis é comumente utilizada estatísticas como T² de *Hotelling* e Q. Depois de gerados dados experimentais através da criação da matriz X, que é constituída dos dados normais (sem falhas), com m variáveis e n amostras para cada variável, realiza-se o tratamento estatístico prévio desses dados (Awhangbo, et al., 2020). O tratamento estatístico é por meio da normalização dos dados, no qual aplica a diferença entre as n observações e a média, para cada uma destas. Em seguida divide-se cada uma dessas diferenças pelo desvio padrão de cada m variável e, em seguida, calcula-se a matriz de covariância amostral através da equação 7 que por sua vez permite calcular a estatística T² de *Hotelling* (equação 8) (Jackson, 1959 *Apud* Souza, 2011). Research, Society and Development, v. 9, n. 8, e957986335, 2020 (CC BY 4.0) | ISSN 2525-3409 | DOI: http://dx.doi.org/10.33448/rsd-v9i8.6335 $z = \wedge^{-1/2} V^T x$ (7) $T^2 = z^T z$ (8)

Para aplicar a estatística T² de *Hotelling* para a detecção de falhas em processos de multivariáveis é preciso obter um conjunto de dados experimentais sem falhas, ou seja, dados históricos normais de operação. Por meio dos dados experimentais, aplica-se *PCA* para gerar a estrutura de correlação dos dados, e no instante em que novas informações do processo forem adicionadas, *x*, simultaneamente, supondo que $\Lambda = \Sigma^T \Sigma$ admita inversa, é capaz de calcular a estatística T² diretamente pela equação 9 e pode ser representada pelo cálculo do número do componente principal *a* (equação 10).

$$T^{2} = x^{T} V (\Sigma^{T} \Sigma)^{-1} V^{T} x$$

$$\tag{9}$$

$$T^2 = x^T P \tag{10}$$

Em que Σ_a são os valores característicos arranjados na diagonal principal das a primeiras linhas e colunas de Σ (Jing & Hou, 2015). Além disso, no qual a média amostral e a matriz de covariância são conhecidas, o limite para a estatística T² consegue ser calculado por meio da equação 11.

$$T_{\alpha}^2 = x_{\alpha}^2(a) \tag{11}$$

Entretanto, se a matriz de covariância real não for conhecida, mas se a mesma for estimada pela matriz covariância amostral de acordo com a equação 3, então o limite para a estatística T² pode ser calculado pela equação 12 (Bastida, 2018).

$$T_{\alpha}^{2} = \frac{a(n-1)(n+1)}{n(n-a)} F_{\alpha}(a, n-a)$$
(12)

Em que $F_{\alpha}(a, n - a)$ é a distribuição de Fisher com *a* e *n*-*a* graus de liberdade. Para o conjunto de dados experimentais, o limite deve ser calculado por meio da equação 13.

$$T_{\alpha}^{2} = \frac{(n-1)^{2} \left(\frac{a}{n-a-1}\right) F_{\alpha}(a,n-a-1)}{n \left(1 + \left(\frac{a}{n-a-1}\right)\right) F_{\alpha}(a,n-a-1)}$$
(13)

Como os menores valores característicos não são analisados, então a estatística T^2 é uma medida menos afetada pelos ruídos do processo. No entanto, ela pode expressar o comportamento normal do processo através da equação 10, enquanto todos os valores característicos e o ruído são expressos por meio da equação 11. Logo, para essa situação a aplicação da estatística Q é mais adequada por monitorar de forma satisfatória a parte do espaço de amostras contidas nos *m-a* valores característicos, pois esta mensura as variações aleatórias do processo (Souza, 2011).

A estatística Q, também é conhecida como Erro de Predição ao Quadrado ou *SPE* (*Squared Prediction Error*). Ela pode ser calculada pela soma dos quadrados residuais, assim, o valor escalar Q é medido de forma satisfatória para ajustar na amostra do modelo e é diretamente associado com o ruído, onde r e x são os vetores resíduo de observações respectivamente (equações 14 e 15).

$$Q = r^T r \tag{14}$$

em que:

$$r = (I - PP^T)x \tag{15}$$

O limite superior para essa estatística pode ser calculado através da equação 16:

$$Q_{\alpha} = \theta_1 \left[\frac{h_0 c_{\alpha} \sqrt{2\theta_2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right]^{\frac{1}{h_0}}$$
(16)

em que:

$$\theta_i = \sum_{j=a+1}^m \lambda_j^i \tag{17}$$

$$h_0 = 1 - \frac{2\theta_1 \theta_3}{3\theta_2^2}$$
(18)

em que c_{α} é o valor da distribuição normal com α sendo o nível de significância. Quando um evento imprevisto ocorre e é produzido uma mudança no modelo estrutural de covariância, ele é detectado por um alto valor de Q (Awhangbo, et al., 2020; Alvarez, 2009). Sendo assim, a detecção de falhas em um sistema de controle é obtida por meio do cálculo estatístico T² e Q

(equações 10 e 14) utilizando os dados do processo e comparando com os respectivos limites através das equações 12 e 16. Portanto, se os valores das estatísticas T^2 e Q monitorados forem menores que seus limites, então o sistema opera em condições normais. Caso contrário, existe falha naquele momento.

Com o embasamento teórico até agora discutido, nota-se que a técnica *PCA* para monitoramento de sistemas de controle considera apenas observações em um dado instante de tempo, não levando em consideração possíveis dependências estatísticas de observações anteriores. Em processos industriais, tal dependência torna-se relevante quando o intervalo de tempo de amostragem é de 2 a 12 horas (Chiang et al., 2001). Por essa razão, uma maneira para estimar o efeito dessa dependência para processos com intervalos de tempo de amostragem curtos, considerando as correlações temporais, tornando, assim, o método de *PCA* ampliado com as g observações anteriores em cada vetor de observação e que pode ser encontrado pela equação 19.

$$X(k-g,:) = \left[x_k^T x_{k-1}^T x_{k-2}^T \dots x_{k-g}^T \right]$$
(19)

Em que k=1,2,...,n com x_k^T o vetor de observação de dimensão m no instante de amostragem k. Esse método foi proposto por Reis (2008) e é também chamado de PCA dinâmico. O valor de g pode ser adquirido de maneira automática, podendo ser g=1 ou 2 quando se utiliza *PCA* no monitoramento de processos (Souza et al, 2014).

Assim sendo, o objetivo deste trabalho foi detectar falhas em plantas químicas por meio da aplicação do método de análise dos componentes principais (*PCA*) em dois estudos de caso: tanque de aquecimento e *CSTR* não-isotérmico. O *PCA* é derivado de dados históricos baseado em modelos estatísticos e utiliza T^2 e Q.

2. Metodologia

Foram realizados dois estudos de casos: tanque de aquecimento e *CSTR* não isotérmico, utilizando o método baseado em dados históricos, qualitativos estatísticos de análise do componente principal. Esse método depende, principalmente, da quantidade e qualidade dos dados gerados. Nesse caso foi empregado o método estatístico de múltiplas variáveis, o qual foi desenvolvido por abordagens de monitoramento estatístico de uma única

variável que adotava limites superior e inferior para parâmetros da variável, no qual o processo operava em condições nominais e permitindo assim a detecção de falhas.

Para os dois estudos de casos foi utilizada a metodologia apresentada por Souza (2014). Para o sistema do CSTR, não isotérmico, o autor usou em seu trabalho a metodologia dos métodos PCA e mínimos quadrados parciais para detecção e diagnostico de falhas, entretanto no trabalho presente foi aplicado apenas o método PCA. Por essa razão, algumas falhas distintas foram adicionadas para avaliar se as técnicas de detecção eram eficazes e, após isso, comparou as metodologias de detecção de falhas para um CSTR com jaqueta.

Foi utilizada como plataforma de programação para obtenção dos resultados o software livre Scilab 5.3.3.

2.1 Tanque de aquecimento

O modelo do tanque de aquecimento é apresentado na Figura 1.

Figura 1 - Tanque de aquecimento.





A Figura 1 mostra um reator tanque agitado contínuo revestido de uma jaqueta de para o controle de temperatura. Nesse sistema, como pode ser visto, existe um transmissor de temperatura (TT) e um controlador de temperatura (TC).

$$\frac{dT}{dt} = \frac{F}{V} \left(T_i - T \right) + \frac{UA}{V \rho C_p} \left(T_j - T \right)$$
(20)

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_j}{V_j} \left(T_{ji} - T_j \right) + \frac{UA}{V_j \rho_j C_{pj}} \left(T_j - T \right)$$
(21)

As equações diferenciais 20 e 21 seguintes descrevem o comportamento processual. Como pode ser visto o sistema é linear. As descrições das variáveis empregadas nas equações 20 e 21 estão expostas na Tabela 1.

Variáveis	Descrição
Т	Temperatura do CSTR
T_i	Temperatura de entrada no CSTR
F	Vazão volumétrica
U	Coeficiente de transferência de calor
C_p	Capacidade calorífica do líquido no CSTR
А	Área de troca térmica
V	Volume do CSTR
ρ	Densidade do líquido no CSTR
\mathbf{V}_{j}	Volume da jaqueta
\mathbf{F}_{j}	Vazão da jaqueta
T_{j}	Temperatura da jaqueta
$ ho_j$	Densidade do fluido da jaqueta
C_{pj}	Capacidade calorífica do fluido da jaqueta
t	Tempo

Tabela 1 - Variáveis e descrições.

Fonte: Adaptado, Bequette (1998).

As equações 20 e 22 podem ser compreendidas através da Tabela1. Sendo assim, temse um modelo matemático descrevendo a variação da temperatura do tanque e a variação da temperatura da jaqueta.

F=1 (ft ³ /min)	Vj=1(ft ³)
T _i =50 (°F)	H _c A= 183,9 (Btu/°F.min)
T _{ji} =200 (°F)	$F_j = 1,5$ (ft ³ /min)
$\rho C_p = 61,3 \text{ (Btu/°F. ft}^3)$	$T = 125^{o}F$
$\rho_j C_{pj} = 61,3 \text{ (Btu/°F. ft}^3)$	T _j =150°F
$V = 10 (ft^3)$	

Tabela 2 - Valores das variáveis no estado estacionário.

Fonte: Adaptado, Bequete (1998).

A Tabela 2 expõe os valores de cada uma das variáveis no estado estacionário. Portanto, as variáveis de estado e de saída são: temperatura do *CSTR* (T) e a temperatura da jaqueta (T_i), enquanto a variável manipulada é a temperatura inicial (T_i).

Neste trabalho foi feita a sintonia de um controlador de temperatura (T), como pode ser observado na Figura 1. O sistema de controle é do tipo proporcional integral (PI) e possui os seguintes parâmetros: Kc = 62,053009 e τ_I =0,44 min. Para melhor compreensão do método de análise dos componentes principais (*PCA*) foi gerada uma falha, na qual o sensor de temperatura faz uma leitura errônea. O sensor, após 30 minutos, mediu o valor da temperatura 25% menor do que o valor nominal.

O *PCA* foi utilizado como descrito anteriormente para realizar a detecção de falha, a qual depende de dados experimentais resultantes das condições operacionais normais - em outras palavras, sem falha. Tais dados foram tratados para originar as informações principais para detecção da falha em tempo real. O conjunto de dados experimentais era composto pelas variáveis: temperatura do líquido no *CSTR* (T), temperatura do fluido refrigerante na jaqueta (Tj) e temperatura inicial (Ti). Para determinar o número de dimensões a serem removidas pelo modelo *PCA* foi utilizada a técnica da análise paralela. Ao empregar essa técnica para redução de ordem de dimensão, calculou-se a variância percentual cumulativa por meio da equação 6. A matriz de dados foi gerada com atrasos de acordo com a equação 19 que utiliza o método PCA dinâmico, o que causou o aumento da dimensão da matriz X. Esse sistema é inicialmente composto por três variáveis medidas, que adiciona o atraso e 1001 amostras para cada dado de operação normal.

Para detectar a falha, foram empregados os métodos estatísticos T^2 conforme a equação 10. Todavia, foi aplicado o atraso (g), como foi apresentado na equação 22, que considera apenas os maiores valores característicos. Além disso, foi aplicada a estatística Q por meio das equações 14 e 15, pois essa estatística faz o monitoramento das variáveis aleatórias, que leva em conta os valores característicos que são desprezados pela análise paralela.

$$T^2 = x_g^T P \sum_a^{-2} P^T x_g$$

(22)

2.2 CSTR não isotérmico

Figura 2 - CSTR não isotérmico.



Fonte: Souza et al. (2014).

A Figura 2 exibe um *CSTR* não-isotérmico, esse estudo de caso foi descrito por Souza (2014). O sistema é constituído de um reator revestido por uma jaqueta e ele possui controles de nível, concentração e temperatura do reator.

$$\frac{dh}{dt} = \frac{q_F - q}{A} \tag{23}$$

$$\frac{dC_A}{dt} = \frac{1}{Ah} \left(q_F C_{AF} - q C_A \right) - K_0 C_A e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)}$$
(24)

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{Ah} \left(q_F T_F - qT \right) + \frac{UA_c}{\rho C_p Ah} \left(T_C - T \right) + \frac{-\Delta H}{\rho C_p} K_0 C_A e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)}$$
(25)

$$\frac{dT_{C}}{dt} = \frac{q_{C}}{V_{c}} (T_{CF} - T_{C}) + \frac{UA_{C}}{\rho_{c} C_{pc} V_{c}} (T - T_{C})$$
(26)

As equações 23 a 26 descrevem o processo matematicamente não linear que possibilita a simulação dos tipos de falhas do *CSTR* não-isotérmico.

Tabela 3 - Variáveis do CSTR não isotérmico.

h = Nível no CSTR			
$q_F = Vazão de entrada no CSTR$			
q = Vazão de saída no CSTR			
$q_{\rm C} = Vazão$ de liquido refrigerante na jaqueta			
A = Área de seção transversal do CSTR			
T = Temperatura do CSTR			
T_F = Temperatura da corrente de entrada no CSTR			
$\Delta H = Entalpia de reação$			
C _p = Capacidade calorífica do líquido no CSTR			
C_{pc} = Capacidade calorífica do líquido na jaqueta			
C _A = Concentração de A no CSTR			
C _{AF} = Concentração de A na alimentação			
$K_0 = Fator de reação$			
E = Energia de ativação			
R = Constante universal dos gases			
U = Coeficiente de transferência de calor			
$A_C = A$ rea de troca térmica			
$T_{\rm C}$ = Temperatura do fluido de resfriamento na jaqueta			
T_{CF} = Temperatura de alimentação do fluido refrigerante			
ρ = Densidade do líquido no CSTR			
ρ_c = Densidade do fluido de resfriamento			
V _c = Volume do fluido refrigerante			

Fonte: Adaptado, Souza (2014).

A Tabela 3 mostra a descrição das variáveis utilizadas para demonstrar o processo do CSTR não isotérmico referente as equações 23 a 26. O conjunto de dados experimentais do modelo é composto pelas variáveis de estado: nível do líquido do CSTR (h), concentração de A no CSTR (C_A), temperatura do CSTR (T) e temperatura da jaqueta (T_C); e pelas variáveis manipuladas: vazão de saída (q) e vazão do fluido refrigerante (q_c). O nível do líquido do CSTR (h) e a temperatura do CSTR (T) eram as variáveis de saída.

h = 6,0 dm	$\rho_C C_{pc} = 4175 \ J/L/K$
$q_F = 100 \text{ L/min}$	$C_A = 0,0372 \text{ mol/L}$
q = 100 L/min	$C_{AF} = 1,0 \text{ mol/L}$
$q_C = 15 \text{ L/min}$	$K_0 = 7,2 \ x \ 10^{10} \ min^{-1}$
$A = 16,66 \text{ m}^2$	E/R = 8750 K
T = 402,35 K	$UA_C = 5 \ x \ 10^4 \ J/min/K/dm^2$
$T_{\rm F} = 320 \ {\rm K}$	$T_{\rm C} = 345,44 \ {\rm K}$
$\Delta H = -5 \ x \ 10^4 \ J/mol$	$T_{CF} = 300 \text{ K}$
$\rho C_p = 239 \text{ J/L/K}$	$V_{\rm C} = 10L$

Tabela 4 – Valores das variáveis no estado estacionário para o CSTR não isotérmico.

Fonte: Souza et al. (2014).

A Tabela 4 apresenta os valores das variáveis no estado estacionário que permitem a simulação do processo. Como pode ser visto na Figura 2, o sistema de controle de nível (h) e de temperatura (T) é do tipo proporcional integral (PI) e possui os seguintes parâmetros: $K_C = -3$, $\tau_I = 1,5$ min para a vazão manipulada da saída do tanque (q) e $K_C = -0,2$, $\tau_I = 0,3$ para a vazão manipulada da jaqueta (q_c) (Souza et al., 2014).

Foram geradas duas falhas para verificar a sua detecção pelo método de análise dos componentes principais (PCA):

- Falha 1 A concentração de entrada do reagente (C_{AF}) no CSTR era, inicialmente, de 1,0 mol/L. Ela sofreu uma perturbação de carga tipo degrau depois de 20 minutos. Após a perturbação, a concentração de entrada no CSTR passou para 0,92 mol/L.
- Falha 2 O sensor de nível do CSTR experimentou uma falha depois de 20 minutos e causou danificação do instrumento, o que provocou uma medida de 3% a menos em relação a medida correta.

Com o intuito de adquirir os dados necessários para a detecção de uma falha em tempo real foi realizado um tratamento dos dados gerados estatisticamente pelo PCA. Para o caso do CSTR não isotérmico, os dados foram originados por meio do sistema controlado por um proporcional integrativo (PI) regulador ao redor dos pontos estacionários projetados. O conjunto de dados experimentais foi formado pelas variáveis de nível de líquido no CSTR (h), temperatura do CSTR (T), concentração do composto A no CSTR (C_A), temperatura na jaqueta (T_C), vazão de saída do CSTR (q) e vazão de fluido refrigerante na jaqueta (q_C).

Da mesma maneira que o exemplo anterior, no qual foi utilizada a técnica da análise paralela para redução de ordem de dimensão. Para esse sistema, a variância percentual

cumulativa (CPV) foi calculada por meio da equação 6. A matriz de dados foi gerada com atrasos conforme a equação 19 que usa o método PCA dinâmico, fato que que causou o aumento da dimensão da matriz X. Esse sistema possuía inicialmente seis variáveis medidas, no qual foi adicionado o atraso e 1001 amostras para cada dado de operação normal.

Para detectar as falhas 1 e 2, foram empregados os métodos estatísticos T^2 conforme a equação 10. Foi empregado o atraso (g), como foi apresentado na equação 22, que considerou apenas os maiores valores característicos. Além disso, foi aplicada a estatística Q por meio das equações 14 e 15, pois essa estatística faz o monitoramento das variáveis imprevistas, levando em conta os valores característicos que são desprezados pela análise paralela.

3. Resultados e Discussão

3.1. Tanque de aquecimento

Primeiramente, no estudo de caso do tanque de aquecimento, foram gerados dados normais, especificados os limites superiores e inferiores e posteriormente foi empregue a falha de leitura do sensor de temperatura.



Figura 3 - Comportamento de T e Ti perante a falha.

A Figura 3 mostra o comportamento do sistema perante a falha de leitura do sensor de temperatura, na qual é feita leitura 25% menor que o valor correto no tempo t = 30 min. Como pode ser observado, a falha provocou uma instabilidade na malha de controle, que não pôde

ser controlada em decorrência das leituras errôneas das temperaturas. Assim, não foi possível que a variável manipulada (T_i), mesmo com a realização de um grande esforço, pudesse controlar a temperatura do tanque.

Os dados resultantes das condições operacionais normais foram tratados para originar as informações principais para detectar a falha em tempo real, em que foi empregada a técnica da análise paralela. Foi reduzida a dimensão de um total de três para duas variáveis medidas (a = 7). Assim, a variância percentual cumulativa (CPV) foi de 81,68% por meio da equação 6. A matriz de dados foi gerada com 2 atrasos (g=2) pela equação 19 que utiliza o método PCA dinâmico, o que causou o aumento da dimensão da matriz X. Esse sistema é composto por três variáveis medidas, dois instantes de atraso e 1001 amostras para cada dado de operação normal - consequentemente a matriz X $\in \mathbb{R}^{999x9}$.





A Figura 4 mostra o comportamento do sistema em condições normais, ou seja, sem falha. Esses dados foram gerados em torno dos pontos do estado estacionário projetados para as variáveis controladas (T e T_j) e a variável manipulada (T_i).







Como pode ser visto na Figura 5, tem-se a aplicação das estatísticas T^2 e Q nos dados experimentais sem falha. Em vermelho está representado o alarme de detecção de falha para o sistema, enquanto em azul está representado o limite estabelecido de falha. Como previsto, os valores das estatísticas estão localizados abaixo dos limites de falha e alarme estabelecidos para informar a presença de falha no sistema. Os limites estabelecidos para as estatísticas T^2 de *Hotelling* e Q foram calculados respectivamente mediante as equações 12, 15 e 16. Posteriormente foi previsto uma região de alarme na qual estimou-se 10% do limite superior para ambas. Portanto, os dados originados foram adequados para representar o comportamento do sistema operando em condições normais.

Em seguida, foram igualmente empregadas as estatísticas T^2 e Q para os dados experimentais na presença da falha no sensor de temperatura.

Figura 6 - Falha no sensor de temperatura para o tanque de aquecimento.





A Figura 6 mostra que no tempo de 30 minutos ocorre a falha e os dados simulados pelas estatísticas T^2 e Q extrapolaram os limites especificados anteriormente. Como resultado, comprova-se a eficiência da técnica PCA dinâmico que indica a presença de falha na leitura do sensor de temperatura.

3.2. CSTR não isotérmico

O segundo estudo de caso foi utilizado apenas o método *PCA* para investigar a eficácia do método na detecção de falhas tanto concentração de entrada do reagente quanto do sensor de nível.





Fonte: Autores.

A Figura 7 apresenta o comportamento do sistema de controle do CSTR nãoisotérmico quando ocorre a falha 1, que consiste em uma perturbação de carga tipo degrau, em que a concentração de entrada do reagente (C_{AF}) depois de 20 minutos sofre uma perturbação que passando de 1,0 mol.L⁻¹ para 0,92 mol.L⁻¹. Como pode ser observado, o controlador da temperatura (T) conseguiu corrigir a mudança na concentração de entrada do reagente A. Entretanto, para compensar a modificação no processo, a variável manipulada q_c foi obrigada a alterar seu valor de operação de 15 para 11 L.min⁻¹.



Figura 8 - Comportamento de h, q, T e qc simulando falha 2.

Fonte: Autores (2016).

A Figura 8 exibe o comportamento do sistema de controle diante da falha 2. Esse comportamento é resultado da leitura errônea do sensor de nível provocado pela danificação do instrumento que afere o nível do tanque mediante a conversão de estímulos físicos ou químicos em um sinal elétrico mensurável, analógico ou digital. A falha no sensor de nível acarretou uma instabilidade no sistema da malha de controle, impedindo que as variáveis manipuladas (q e q_c) operassem em outra região para compensar a falha, como ocorrido em resposta a falha 1. Como é observado, a variável manipulada se esforça drasticamente com intuito de manter o nível do sistema controlado, entretanto, a variável manipulada (q) não consegue corrigir a falha. Da mesma maneira, a variável controlada (T) oscila, enquanto a variável manipulada (q_c) também não consegue reparar a falha existente. Nota-se um comportamento crescente de forma desordenada de (q_c), comprovando assim a instabilidade do sistema.

Assim como no caso do tanque de aquecimento, os dados para o caso do *CSTR* não isotérmico também foram gerados através de um sistema controlador proporcional integrativo regulador e foi utilizada a técnica da análise paralela em que foram reduzidas três de um total

de seis variáveis medidas (a = 12). Assim, a variância percentual cumulativa foi de 72,05% pela equação 6. A matriz de dados foi gerada com 2 atrasos (g=2) conforme a equação 19 que usa o método *PCA* dinâmico, fato que que causou o aumento da dimensão da matriz X. Esse sistema possuía inicialmente seis variáveis medidas, três instantes de atraso e 1001 amostras para cada dado de operação normal, consequentemente a matriz X $\in \mathbb{R}^{999x18}$.



Figura 9 - Comportamento de h, q, T e qc para o sistema em condições normais.

A Figura 9 apresenta os dados gerados ao redor do ponto estacionário projetados para as variáveis controladas (h e T) e manipuladas (q e q_c).



Figura 10 - Comportamento de Ca e Tc para o sistema em condições normais.

Fonte: Autores.

A Figura 10 apresentam os dados gerados ao redor do ponto estacionário projetados para as variáveis de estado ($C_A \ e \ T_c$). Os dados obtidos mediante a matriz de treinamento, em que o laço de controle é executado sem falhas no processo, mostradas pelas Figuras 9 e 10, foram gerados mediante o algoritmo, criado no software Scilab, o qual teve o objetivo de gerar uma quantidade significativa de amostras para efetuar um monitoramento efetivo do processo.



Figura 21 - Dados experimentais sem falha para o CSTR não isotérmico.

A Figura 11 exibe os dados experimentais sem falhas depois de aplicar as estatísticas T^2 e Q para verificar a validade dos dados e o resultado do método *PCA*. Em vermelho está representado o alarme de detecção de falha para o sistema, enquanto em azul está representado o limite estabelecido de falha. Os limites estabelecidos para as estatísticas T^2 de *Hotelling* e Q foram calculados, respectivamente, pelas equações 12 e 16. Ademais, foi prevista uma região de alarme na qual se estimou 10% do limite superior das estatísticas T^2 e Q, como no caso do *CSTR* com jaqueta de aquecimento.

Como eram esperados, os valores das estatísticas estão localizados abaixo dos limites estabelecidos para informar a presença de falha no sistema. Logo, os dados mostrados na Figura 11 estavam adequados para representar o comportamento do modelo em operação na ausência de falhas.



Figura 12 - Detecção da falha de pertubação de Caf.

Outrossim, a Figura 12 apresenta as estatísticas T^2 de *Hotelling* e Q ao serem aplicada nos dados experimentais para registrar o momento da ocorrência da falha 1. Como observado, no tempo de 20 minutos a falha de perturbação da concentração de entrada do reagente pode ser detectada, pois ambas estatísticas ultrapassam os limites previamente calculados.



Figura 13 - Detecção da falha no sensor de nível (h) no CSTR não isotérmico.

Fonte: Autores.

A Figura 13, mostra o momento que ocorre a falha do sensor de nível do *CSTR*, pois os dados simulados pelas estatísticas T^2 e Q extrapolam os limites preestabelecidos. Em ambos os casos, as falhas introduzidas no tempo de 20 minutos, foram detectadas, como pode ser comprovado pelas Figuras 12 e 13. Além das falhas permaneceram acima dos limites

especificados, pode-se dizer que o tempo de detecção das falhas foi instantâneo, no qual os valores registrados após t = 20 min saíssem da faixa de operação normal. Consequentemente, as falhas implementas foram prontamente detectadas pelo método *PCA* dinâmico, comprovando a eficiência da técnica sem o registro de alarmes falsos.

De forma geral, em todos os testes efetuados possuíram êxito na detecção de falhas utilizando o método proposto.

4. Considerações Finais

Neste trabalho foi apresentado um método de detecção de falha e métodos estatísticos de T^2 e Q, através da análise de componentes principais aplicados nos estudos de caso do *CSTR* com jaqueta de aquecimento e do *CSTR* não isotérmico. Como observado no primeiro estudo de caso, foi realizada a simulação de uma falha no sensor de temperatura e pôde demonstrar a eficiência do método utilizado. Já no segundo estudo de caso, a simulação envolveu duas falhas, cuja detecção também comprovou a efetividade do método *PCA*. Uma delas foi a perturbação de carga tipo degrau na concentração da entrada do reagente no *CSTR*, enquanto a segunda foi uma falha no sensor de nível do reator.

A fim de detectar falhas, as ferramentas utilizadas para o monitoramento de plantas foram as estatísticas $T^2 e Q$. Com o intuito de mostrar a técnica para diminuir as dimensões de modelos, em decorrência da grande informação de dados operacionais com origem em processos industriais, este trabalho apresentou a utilização do *PCA*. A aplicação deste foi confirmada nos exemplos demonstrados e o número de componentes principal foi calculado através da análise paralela.

As falhas em sensores de temperatura, sensores de nível, e sistemas submetidos a perturbações tipo degrau foram estimados através do *PCA* e das estatísticas T^2 de *Hotelling* e Q. O método *PCA* mostrou-se eficaz para detecção de falhas existentes nos estudos de caso apresentados, o que indica sua capacidade para ser empregadas em controladores da indústria química.

Como sugestões para trabalhos futuros, pode-se realizar a detecção de falhas no sistema explorando diferentes métodos bem como aplicar métodos para o diagnóstico, localizando as falhas detectadas.

Referências

Alvarez, G. D. (2009). Fault detection using principle component analysis (PCA) in a wastewater treatment plant (WWTP). *In: Proceedings Of The* 62nd *International Student's Scientific Conference* - St Petersburg, Russia.

Alkaya, A., & Eker, I. (2011). Variance sensitive adaptive threshold-based PCA method for fault detection with experimental application. ISA Transactions, 50, 287.

Awhangbo, L., Bendoula, R., Roger, J. M., & Béline, F. (2020). *Fault detection with moving window PCA using NIRS spectra for the monitoring of anaerobic digestion process*. Water Science & Technology. 81, 367.

Bastidas, M. E. H. (2018). *Detecção e diagnóstico de falhas baseado em modelos empíricos no subespaço das variáveis de processo (EMPVSUB)*. Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Rio Grande do Sul – Porto Alegre.

Bequette, B. W. (1998). *Process Dynamics – Modeling, Analysis and Simulation*. New Jersey: Prentice Hall, 471.

Bin Shams, M. A., Budman, H. M., & Duever, T. A. (2011). *Fault detection, identification and diagnosis using CUSUM based PCA*. Chemical Engineering Science. 66, 4488.

Britto, R. S. (2014). *Detecção de falhas com pca e pls aplicados a uma planta didática*. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Sergipe – UFS. São Cristovão.

Chiang, L. H., Russel, E. L., & Braatz, R. D. (2001). Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems. Springer: London.

Isermann, R. (1997). Supervision, fault-detection and fault-diagnosis methods: An introduction. Control Engineering Practice. 15(5), 639.

Jing, C., & Hou, J. (2015). SVM and PCA based fault classification approaches for complicated industrial process. Neurocomputing. 167, 636.

Li, W., Peng, M., & Wang, Q. (2018). *Improved PCA method for sensor fault detection and isolation in a nuclear power plant*. Nuclear Engineering and Technology. 51, 146.

Pereira, A. S., et al. (2018). *Metodologia da pesquisa científica*. [*e-book*]. Santa Maria. Ed. UAB/NTE/UFSM. Disponível em: https://repositorio.ufsm.br/bitstream/handle/1/15824/Lic_Computacao_Metodologia-Pesquisa-Cientifica.pdf?sequence=1.

Reis, L. L. G. (2008). *Controle Tolerante com Reconfiguração Estrutural Acoplado a Sistemas de Diagnóstico de Falhas*. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal de Uberlândia-UFU. Uberlândia.

Sánchez-Fernández, A., Baldán, F. J., Sainz-Palmero, G. I., Benítez, J. M. & Fuente, M. J. (2018). *Fault detection based on time series modeling and multivariante statistical process control.* Chemometrics and Intelligent Laboratory Sistems. 182, 57.

Souza, D. L. (2011). *Metodologia para o Monitoramento de Sistemas de Controle na Indústria Química*. Tese de Doutorado. Universidade Federal de Uberlândia. Uberlândia.

Souza, D. L., Granzotto, M. H., Almeida, G. M., & Lopes, L. C. O. (2014). *Fault detection and diagnosis using support vector machines: A SVC and SVR comparison*. Journal of Safety Engineering. 3, 18.

Tidriri, K., Chatti, N., Verron, S., & Tiplica, T. (2016). *Bridging data-driven and modelbased approaches for process fault diagnosis and health monitoring: A review of researches and future challenges*. Annual Reviews in Control. 42, 63.

Venkatasubramanian, V., Rengaswamy, R., Yin, K., & Kavuri, S. N. (2003). A review of process fault detection and diagnosis Part I: Quantitative model-based methods. Computers and Chemical Engineering. 27, 293.

Venkatasubramanian, V. Rengaswamy, R., Kavuri, S. N., & Yin, K. (2003). A review of process fault detection and diagnosis Part III: Process history based methods. Computers and Chemical Engineering. 27, 327.

Yang, X. B.; Jin, X. Q.; Du, Z. M., & Zhu, Y. H. (2011). A novel model-based fault detection method for temperature sensor using fractal correlation dimension. Building and Environment. 46, 970.

Porcentagem de contribuição de cada autor no manuscrito

Thessa Fuzaro Mendes – 50% Davi Leonardo de Souza – 50%