

**Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”
Instituto de Química - Câmpus de Araraquara**

William Tonello da Silva Borges

**Monitoramento de um reator tubular com escoamento pistonado utilizando um
sistema híbrido Imuno-Wavelet**

**Araraquara
2023**

William Tonello da Silva Borges

Monitoramento de um reator tubular com escoamento pistonado utilizando um sistema híbrido Imuno-Wavelet

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado a Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como parte dos requisitos para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Fábio Roberto Chavarette

Araraquara

2023

B732m Borges, William Tonello da Silva

Monitoramento de um reator tubular com escoamento pistonado utilizando um sistema híbrido imuno-wavelet / William Tonello da Silva Borges. -- Araraquara, 2023

87 f. : il.

Trabalho de conclusão de curso (Bacharelado - Engenharia Química) - Universidade Estadual Paulista (Unesp), Instituto de Química, Araraquara

Orientador: Fabio Roberto Chavarette

1. Monitoramento da integridade estrutural. 2. Immune systems. 3. Modelagem de processos. 4. Reatores químicos. 5. Computação natural. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca do Instituto de Química, Araraquara. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

William Tonello da Silva Borges

MONITORAMENTO DE UM REATOR TUBULAR COM ESCOAMENTO
PISTONADO UTILIZANDO UM SISTEMA HÍBRIDO IMUNO-WAVELET

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado a Universidade Estadual
Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como parte
dos requisitos para obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Química.

Araraquara, 12 de dezembro de 2023.

Banca examinadora

Documento assinado digitalmente
 **FABIO ROBERTO CHAVARETTE**
Data: 12/12/2023 16:23:45-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. Fábio Roberto Chavarette

Documento assinado digitalmente
 **ERICA REGINA FILLETTI NASCIMENTO**
Data: 12/12/2023 16:29:48-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof^a. Dr^a. Érica Regina Filletti Nascimento

Documento assinado digitalmente
 **LEANDRO PIERRONI MARTINS**
Data: 12/12/2023 19:58:00-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. Leandro Pierroni Martins

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais por todo suporte, apoio, ajuda e amor que me deram ao longo da minha vida.

Àqueles que estiveram ao meu lado e sempre me fortaleceram, Ellen e Cristal.

A todos os meus amigos e amigas que fizeram e fazem parte da minha vida durante o período de faculdade, em especial Yves, Bruna, Giulia, Clo e Tito.

A todos os professores que passaram pela minha vida, os quais tive a oportunidade de receber conhecimento, ajuda e direcionamento quando necessitei.

Ao meu orientador por toda ajuda e orientação para desenvolver este trabalho e por estar sempre presente.

A Deus por me guiar nesse caminho e me manter sempre de pé.

“Existe uma única luz da ciência, e iluminá-la em qualquer lugar é iluminá-la em todos os lugares”

“There is a single light of Science, and to brighten it anywhere is to brighten it everywhere”

Isaac Asimov

RESUMO

Com o passar do tempo a computação e a programação atingiram níveis cada vez mais elevados de sofisticação e de aplicação, permitindo grandes avanços na modelagem matemática de sistemas. O uso de simulações, modelagem e computação inteligente são algumas das diversas técnicas que a indústria 4.0 vem utilizando para gerar produtos e serviços cada vez melhores e de qualidade mais alta. Na indústria química a modelagem e simulação são de enorme importância, pois o uso delas não interfere diretamente no sistema operante, desta forma diversos equipamentos e operações do processo podem ser simulados com uso de softwares próprios para isso ou por meio de modelagem numérica. Enquanto isso uso crescente da computação inteligente vem tornando os processos industriais cada vez mais seguros e eficientes. Uma das abordagens a se utilizar da computação inteligente na indústria e em diversas áreas é o monitoramento de integridade estrutural (SHM) com uso de algoritmos para detecção de falhas. Uma ferramenta muito utilizada para isso são os Sistemas Imunológicos Artificiais (SIA), que são um conjunto de técnicas que aplicam princípios e metáforas do sistema imunológico biológico em ferramentas computacionais e criação de algoritmos. Neste trabalho será feito um modelo numérico de um reator PFR para análise do comportamento frente a mudança de parâmetros de entrada, para em seguida ser desenvolvido um sistema de monitoramento de falhas Imuno-Wavelet, composto por uma ferramenta do SIA: o algoritmo de seleção negativa (NSA) proposto por Forrest et al. (1994); em conjunto com uma transformada de wavelet para detectar mudanças de comportamento no reator.

Palavras-chave: sistemas imunes artificiais; seleção negativa; monitoramento de falhas; Imuno-Wavelet; simulação.

ABSTRACT

Over time, computing and programming reached increasingly higher levels of sophistication and application, allowing great advances in the mathematical modeling of systems. The use of simulations, modeling and intelligent computing are some of the various techniques that industry 4.0 is using to generate increasingly better and higher quality products and services. In the chemical industry, modeling and simulation are of enormous importance, as their use does not directly interfere with the operating system. Therefore, various equipment and process operations can be simulated using specific software or through numerical modeling. Meanwhile, the increasing use of intelligent computing is making industrial processes increasingly safer and more efficient. One of the approaches to using intelligent computing in industry and in various areas is structural health monitoring (SHM) using algorithms for fault detection. A widely used tool for this is Artificial Immune Systems (AIS), which are a set of techniques that apply principles and metaphors of the biological immune system to computational tools and the creation of algorithms. In this work, a numerical model of a PFR reactor will be created to analyze the behavior when changing input parameters, and then an Immuno-Wavelet failure monitoring system will be developed, composed of an SIA tool: the negative selection algorithm. (NSA) proposed by Forrest et al. (1994); in conjunction with a wavelet transform to detect changes in behavior in the reactor.

Keywords: artificial immune systems; negative selection; fault detection; Immuno-Wavelet; simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 –	Reator Tubular de Escoamento Pistonado (PFR).....	21
Figura 2 –	Balanço molar para a espécie j no volume ΔV	21
Figura 3 –	Tabela de Balanços Molares em Reatores.....	23
Figura 4 –	Mecanismo de Defesa e Seus Principais Mediadores.....	26
Figura 5 –	União entre receptores e epítomos.....	27
Figura 6 –	Processo de Maturação de Afinidade.....	28
Figura 7 –	Fluxograma do sensoriamento a esquerda e monitoramento a direita.....	31
Figura 8 –	Equações do reator PFR no software.....	40
Figura 9 –	Método RK4 aplicado ao modelo.....	41
Figura 10 –	Função Tabelar.....	42
Figura 11 –	Parâmetros ideais do processo.....	43
Figura 12 –	Função principal vazão – Comportamento normal.....	43
Figura 13 –	Função principal vazão – Comportamento anormal.....	44
Figura 14 –	Função principal temperatura – Comportamento normal.....	45
Figura 15 –	Função principal temperatura – Comportamento anormal.....	46
Figura 16 –	Função principal concentração – Comportamento normal.....	46
Figura 17 –	Função principal concentração – Comportamento anormal.....	47
Figura 18 –	Função principal fração de inerte – Comportamento normal.....	48
Figura 19 –	Função principal fração de inerte – Comportamento anormal.....	49
Figura 20 –	Censoriamento e Monitoramento.....	50
Figura 21 –	Gráfico do reator em funcionamento normal.....	53
Figura 22 –	Gráfico da conversão e temperatura do reagente A em função do volume.....	54
Figura 23 –	Análise da taxa de reação com variação da vazão.....	55
Figura 24 –	Análise da temperatura com variação da vazão.....	55
Figura 25 –	Análise da conversão com variação da vazão.....	56
Figura 26 –	Quantificação das falhas de vazão pelo sistema Imuno-Wavelet.....	57
Figura 27 –	Quantificação das falhas de vazão pelo sistema sem wavelet.....	58
Figura 28 –	Análise da taxa de reação com variação da temperatura de entrada.....	59
Figura 29 –	Análise da temperatura com variação da temperatura de entrada.....	59

Figura 30	–	Análise da conversão com variação da temperatura de entrada.....	60
Figura 31	–	Quantificação das falhas de temperatura pelo sistema Imuno-Wavelet.....	61
Figura 32	–	Quantificação das falhas de temperatura pelo sistema sem wavelet..	62
Figura 33	–	Análise da taxa de reação com variação da concentração de entrada.....	63
Figura 34	–	Análise da temperatura com variação da concentração de entrada....	64
Figura 35	–	Análise da conversão com variação da concentração de entrada.....	64
Figura 36	–	Quantificação das falhas de concentração pelo sistema Imuno-Wavelet.....	65
Figura 37	–	Quantificação das falhas de concentração pelo sistema sem wavelet.....	66
Figura 38	–	Análise da taxa de reação com variação da fração de inerte.....	67
Figura 39	–	Análise da temperatura com variação da fração de inerte.....	67
Figura 40	–	Análise da conversão com variação da fração de inerte.....	68
Figura 41	–	Quantificação das falhas de fração de inerte pelo sistema Imuno-Wavelet.....	69
Figura 42	–	Quantificação das falhas de fração de inerte pelo sistema sem wavelet.....	70
Figura 43	–	Transformada de Wavelet.....	77
Figura 44	–	SHM – Carrega os dados para análise.....	78
Figura 45	–	SHM – Início do sensoriamento com sinais padrão.....	79
Figura 46	–	SHM – Início do monitoramento e definição dos seus parâmetros.....	80
Figura 47	–	SHM – Carregamento do conjunto de detectores de falhas.....	80
Figura 48	–	SHM – Comparação e classificação dos sinais analisados.....	81
Figura 49	–	SHM – Quantificação da falha quanto a severidade e probabilidade...	82
Figura 50	–	SHM – Continuação da quantificação da falha.....	83
Figura 51	–	SHM – Impressão dos resultados obtidos.....	84
Figura 52	–	SHM – Continuação da impressão dos resultados obtidos.....	85
Figura 53	–	Criação de detectores de falha de vazão.....	85
Figura 54	–	Criação de detectores de falha de temperatura.....	86
Figura 55	–	Criação de detectores de falha de fração de inerte.....	86
Figura 56	–	Criação de detectores de falha de concentração de reagente.....	87

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 –	Parâmetros e condições do processo.....	37
Tabela 2 –	Resumo dos resultados do sistema Imuno-Wavelet.....	71

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BR	Reator em Batelada
CSTR	Reator de Tanque Agitado Contínuo
EDO	Equação Diferencial Ordinária
NSA	Algoritmo de Seleção Negativa
PBR	Reator de Leito de Recheio
PFR	Reator Tubular com Escoamento Pistonado
RK4	Runge-Kutta de Quarta Ordem
SHM	Monitoramento de Integridade Estrutural
SIA	Sistemas Imunológicos Artificiais
SIB	Sistema Imunológico Biológico

LISTA DE SÍMBOLOS

Δ	Variação
$\int$	Integração
ϵ_A	Fração de conversão volumétrica do sistema
Σ	Somatório
Θ_i	Razão entre a fração das espécies na entrada

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	17
2 OBJETIVOS.....	19
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
3.1 REATORES.....	20
3.2 REATORES TUBULARES DE ESCOAMENTO PISTONADO – PFR.....	20
3.3 OUTROS REATORES	22
3.3.1 Reator Batelada – BR.....	23
3.3.2 Reator de Tanque Agitado Contínuo – CSTR	23
3.3.3 Reator de Leito de Recheio – PBR	24
3.4 SISTEMAS IMUNOLÓGICOS	24
3.4.1 Sistema Imunológico Biológico.....	25
3.4.1.1 Sistema Imunológico Adaptativo	26
3.4.1.2 Mecanismo de Seleção Negativa	29
3.4.2 Sistema Imunológico Artificial.....	30
3.5 ALGORITMO DE SELEÇÃO NEGATIVA.....	30
3.6 TRANSFORMADA DE WAVELET	33
4 MODELAGEM DO REATOR	35
4.1 MATEMÁTICA DA MODELAGEM UTILIZADA.....	35
4.2 ESTUDO DE CASO PARA MODELAGEM DO REATOR	36
5 SISTEMA HÍBRIDO: IMUNO-WAVELET.....	50
6 APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS E DISCUSSÃO	53
6.1 COMPORTAMENTO NORMAL	53
6.2 ALTERAÇÃO DE COMPORTAMENTO	54
6.2.1 Variação da Vazão de Entrada.....	54
6.2.2 Variação da Temperatura de Entrada	58
6.2.3 Variação da Concentração de Entrada do Reagente	62
6.2.4 Variação da Fração de Inerte	66
6.3 RESUMO DOS RESULTADOS.....	71
7 CONCLUSÃO	73
APÊNDICE A – ALGORITMOS DO SISTEMA IMUNO-WAVELET	77

1 INTRODUÇÃO

Reatores são o coração das indústrias químicas, sendo peças fundamentais onde ocorre a modificação de uma substância de entrada para um produto desejado. Devido à sua importância única na indústria, é necessário conhecer o comportamento das reações ao longo do processo dentro do reator. Para isso, o avanço na área de cálculo de reatores se deu com maior relevância ao longo do tempo e se fundiu com o advento da computação, permitindo a criação de modelos computacionais mais precisos que possibilitam a análise do comportamento dos reatores em diferentes parâmetros, a fim de aumentar sua eficiência e segurança na planta industrial (FROMENT et al., 2011).

Reatores tubulares de escoamento pistonado, em inglês, *Plug Flow Reactor* - PFR, são reatores de escoamento contínuo geralmente operados em regime estacionário e de grande importância na indústria química em diversas áreas (FOGLER, 2014). Devido à sua importância e participação nas reações e no processo industrial, é necessária uma análise detalhada de seu funcionamento e da ocorrência de possíveis falhas. Os reatores PFR têm sua conversão favorecida com o uso de altas temperaturas, no entanto, a manutenção dessa temperatura de forma constante e uniforme radialmente ao longo do comprimento do tubo é desafiadora (PITANGA, 2017). Qualquer alteração nessa temperatura, que poderia resultar em falhas, pode ser analisada e detectada por meio de algoritmos inteligentes e simulações. Com o advento da computação inteligente e o desenvolvimento de softwares e algoritmos, torna-se cada vez mais fácil a detecção dessas falhas por meio de modelagem e simulação dos reatores, permitindo a análise sem interferir no processo e antes mesmo de um possível acidente ocorrer (SCHULTZ et al., 2014).

Dentro da computação inteligente, o desenvolvimento dos sistemas imunológicos artificiais permitiu uma ampla aplicação nas mais diversas situações como segurança computacional, reconhecimento de padrões, aprendizagem de máquina, entre outras a utilizada neste trabalho: detecção de falhas e anomalias (CASTRO, 2001). O monitoramento da integridade estrutural (SHM, do inglês, *Structural Health Monitoring*) é uma importante linha de pesquisa da atualidade com o objetivo de se detectar falhas em estados iniciais para que se impeça acidentes

(LIMA, 2014). A aplicação de algoritmos inteligentes para detectar falhas estruturais é de fundamental importância para evitar danos causados pelas falhas.

É de fundamental importância também compreender a estrutura e a forma com que o algoritmo de seleção negativa é desenvolvido para que se possa aplicá-lo de maneira correta e eficiente no caso estudado. Para isso é necessário compreender a origem de seu comportamento no mecanismo de seleção negativa no sistema imunológico biológico. Compreender isso também permite compreender o potencial das ferramentas dos sistemas imunológicos artificiais.

2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é a realização de uma modelagem numérica de um reator tubular de escoamento pistonado para captação de dados. Após isso é desenvolvido um sistema inteligente para monitoramento de comportamentos nesse modelo com o uso de um sistema híbrido composto pelo algoritmo de seleção negativa e pela transformada de wavelet. Sistema chamado Imuno-Wavelet.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesta seção é feita uma revisão bibliográfica sobre os temas pertinentes ao trabalho. Primeiro o foco se dará nos reatores e sua modelagem e em seguida em toda base teórica necessária para a criação do sistema híbrido Imuno-Wavelet.

3.1 REATORES

Reatores químicos são os recipientes projetados, com base em diversos parâmetros cinéticos e termodinâmicos, para que ocorra uma reação química desejada em seu interior de forma controlada e em pequena ou larga escala (FERRARI et al., 2022). Como citado, é de fundamental importância o cuidado com os parâmetros cinéticos e termodinâmicos para a construção do reator, ao mesmo tempo deve se considerar conceitos de transferência de massa e calor da reação química (FOGLER, 2014).

Para o projeto de um reator deve-se conhecer também qual o reator mais adequado para o processo que ele está sendo inserido, para isso é feita uma divisão dos tipos de reatores que podem ser empregados, cada um possuindo vantagens e desvantagens em diferentes operações. Pode-se classificar os reatores químicos quanto ao seu formato (vaso ou tanque, tubo), idealidade (reatores reais ou ideais) e tipo de processo (batelada, semi-contínuo ou contínuo):

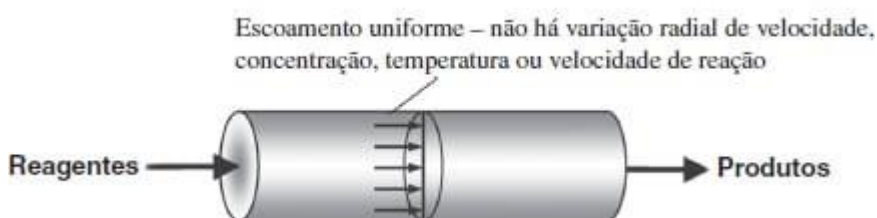
- Reator Batelada – BR
- Reatores Contínuos, que são classificados em:
 - Reator de Tanque Agitado Contínuo – CSTR
 - Reator Tubular de Escoamento Pistonado – PFR
 - Reator de Leito de Recheio – PBR

3.2 REATORES TUBULARES DE ESCOAMENTO PISTONADO – PFR

Esta seção inteira deste trabalho é reservada para os reatores tubulares de escoamento pistonado com maior descrição deste, devido ao reator modelado ser desse tipo. Os reatores PFR são tubos cilíndricos nos quais a reação ocorre em seu interior de forma contínua durante todo seu comprimento. O escoamento é

considerado uniforme, os reagentes são consumidos durante todo o percurso e considera-se apenas a existência de velocidade axial. Desta forma a temperatura, a concentração, e por consequência a taxa de reação, variam apenas axialmente, sendo desprezível qualquer alteração radial (FOGLER, 2014).

Figura 1 – Reator Tubular de Escoamento Pistonado (PFR)



Fonte: FOGLER, 2014.

Na indústria, o uso destes reatores apresenta diversas vantagens como o fato de operarem continuamente sem a necessidade de pausas excessivas, possuem um baixo custo operacional e possuem uma conversão de volume maior (PIRES, 2019). Ilustra-se a seguir o funcionamento do reator tubular para uma espécie j . Pode-se realizar um balanço molar com a espécie e encontrar, desta forma, uma equação para o seu funcionamento.

Figura 2 – Balanço molar para a espécie j no volume ΔV



Fonte: FOGLER, 2014.

Considera-se o sistema em estado estacionário, apenas com velocidade axial durante o comprimento e assume-se que ΔV é suficientemente pequeno para que não haja variações de velocidade no seu interior.

Pelo balanço molar:

$$\text{Entra} - \text{Sai} - \text{Consumido} = \text{Acúmulo}$$

$$F_j|_V - F_j|_{V+\Delta V} - (-r_j)\Delta V = 0 \quad (1)$$

$$F_j|_{V+\Delta V} - F_j|_V = r_j\Delta V$$

$$\frac{F_j|_{V+\Delta V} - F_j|_V}{\Delta V} = r_j \quad (2)$$

Como considerado inicialmente, ΔV é suficientemente pequeno, aplicando limite com ΔV tendendo a zero na Equação 2, terá a definição de derivada, logo:

$$\lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{F_j|_{V+\Delta V} - F_j|_V}{\Delta V} = \frac{dF_j}{dV} \quad (3)$$

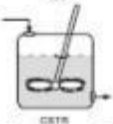
$$\frac{dF_j}{dV} = r_j \quad (4)$$

A equação obtida transmite como a taxa de reação varia em relação a vazão molar e o volume. Esta mesma equação pode ser rearranjada para modelagem dos reatores PFR, como será apresentado à frente no trabalho.

3.3 OUTROS REATORES

Como citado anteriormente, existem outros reatores químicos que atuam de forma diferente do PFR. Estes reatores, devido ao seu formato ou tipo de operação em que participam, demandam cálculos e deduções diferentes do apresentado anteriormente para o PFR. A seguir estão apresentados alguns dos reatores mais utilizados.

Figura 3 – Tabela de Balanços Molares em Reatores

<i>Reator</i>	<i>Comentário</i>	<i>Balanço Molar na Forma Diferencial</i>	<i>Forma Algébrica</i>	<i>Forma Integral</i>
 BR	Sem variações espaciais	$\frac{dN_A}{dt} = r_A V$		$t_1 = \int_{N_{A1}}^{N_{A0}} \frac{dN_A}{-r_A V}$
 CSTR	Sem variações espaciais, regime estacionário	—	$V = \frac{F_{A0} - F_A}{-r_A}$	—
 PFR	Regime estacionário	$\frac{dF_A}{dV} = r_A$		$V_1 = \int_{F_{A1}}^{F_{A0}} \frac{dF_A}{-r_A}$
 PBR	Regime estacionário	$\frac{dF_A}{dW} = r'_A$		$W_1 = \int_{F_{A1}}^{F_{A0}} \frac{dF_A}{-r'_A}$

Fonte: FOGLER, 2014.

3.3.1 Reator Batelada – BR

Reator batelada é um reator utilizado, conforme seu nome diz, em processos em bateladas ou lotes. Geralmente são utilizados em operações com produtos de alto valor agregado e baixa produção e/ou em processos que exigem análises em cada lote produzido. Devido ao seu processo ser em batelada, a produção em larga escala com grandes quantidades produzidas é inviabilizada, porém possui a vantagem de obtenção de conversões mais elevadas de acordo com o período de tempo que os reagentes são mantidos em seu interior (FOGLER, 2014). Como é possível notar na Figura 3 seu balanço molar não apresenta variação espacial e apresenta seu número de mols (N_A) variando com o tempo.

3.3.2 Reator de Tanque Agitado Contínuo – CSTR

É um reator muito utilizado em processos industriais, também é chamado de reator de mistura perfeita quando assumida a idealidade. Opera em regime permanente, contínuo. É composto de um vaso com entrada e saída e um agitador em seu interior para homogeneização do meio (FOGLER, 2014). Neste caso, o reator apresenta comportamento diferente do reator batelada e do PFR, ele não possui

variação espacial, logo seu volume é considerado constante e por atuar em regime estacionário não possui variações com o tempo. Desta forma este reator não apresenta um balanço na forma diferencial ou integral com o tempo ou espaço.

3.3.3 Reator de Leito de Recheio – PBR

Este reator possui seu funcionamento parecido com os reatores PFR, porém possui em seu interior um recheio sólido com catalisador que serve de parâmetro para que sua modelagem seja feita, ou seja, substitui-se a coordenada volume no PFR por massa de catalisador no PBR. Também atua em regime estacionário (FOGLER, 2014). Como pode ser observado na Figura 3 o seu balanço molar é similar ao do PFR mudando apenas o volume por massa de catalisador (W).

3.4 SISTEMAS IMUNOLÓGICOS

Os sistemas imunológicos artificiais possuem em seu funcionamento metodologias baseadas em técnicas utilizadas pelo sistema imunológico biológico (DASGUPTA, 2012). O sistema imunológico biológico (SIB) possui dois mecanismos essenciais para a engenharia e todas as aplicações dos sistemas imunológicos artificiais (SIA): aprendizagem e memória (CASTRO, 2001). Logo, para entendimento dos SIA é importante o conhecimento do funcionamento do SIB.

Almeida et al. (2007) apresentam em seu trabalho características fundamentais do SIB sobre uma perspectiva da engenharia. Tais características evidenciam a motivação pelo desenvolvimento de ferramentas e técnicas baseadas no sistema imune:

- Unicidade: cada animal possui seu próprio SIB, com suas capacidades e vulnerabilidades particulares;
- Reconhecimento de Padrões Internos e Externos: as células e moléculas que não pertencem ao organismo (agentes externos ou ainda "não-próprio") são reconhecidas e eliminadas enquanto as células e moléculas pertencentes ao organismo (agentes internos, "próprio") são preservadas;

- Detecção de Anomalias: O SIB pode detectar e reagir a agentes patogênicos que o organismo nunca havia sido exposto anteriormente;
- Detecção Imperfeita (tolerância a ruídos): um reconhecimento perfeito não é necessário para que o SIB reaja contra um agente externo;
- Diversidade: Existe uma quantidade limitada de células e moléculas no SIB que são utilizadas para se obter o reconhecimento de um número praticamente infinito de elementos, incluindo os sintetizados em laboratório;
- Aprendizagem por reforço: A cada encontro com o mesmo patógeno, o sistema imunológico melhora a qualidade de sua resposta;
- Memória: Os componentes do SIB bem-sucedidos no reconhecimento e combate às patologias são armazenados para uma resposta futura mais intensa e efetiva.

A seguir, na seção Sistema Imunológico Biológico será descrito como algumas dessas características aparecem no sistema biológico e como suas ferramentas funcionam, com ênfase no sistema imunológico adaptativo e no mecanismo de seleção negativa.

3.4.1 Sistema Imunológico Biológico

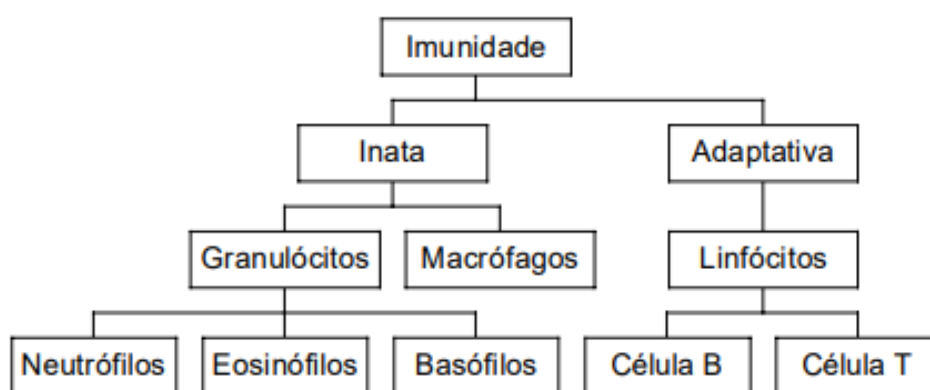
O sistema imune tem como sua principal função combater infecções, fungos e parasitas conseguindo identificá-los com eficiência e distingui-los de células do próprio corpo (LEVINSON, 2016).

Para evitar ou prevenir essas infecções, o sistema imune possui dois tipos de imunidade: Imunidade Adaptativa e Imunidade Inata. A imunidade inata é uma imunidade existente previamente a ocorrência de uma infecção. Ela possui efetividade imediata após exposição a um agente externo ao longo da vida e não se altera melhorando a cada exposição visto que não possui memória imunológica, além disso ela apresenta baixa especificidade. Quando se trata da imunidade adaptativa (ou imunidade adquirida), sua resposta demora um tempo maior para se tornar efetiva contra infecções, entretanto ela apresenta memória imunológica e sua eficiência

aumenta após o combate a infecção, além disso ela é altamente específica. Desta forma a imunidade adaptativa se torna extremamente eficiente em reinfecções (LEVINSON, 2016).

A diferença entre as imunidades se justifica pelas formas diferentes com que atuam no combate e limitações de infecções.

Figura 4 – Mecanismo de Defesa e seus Principais Mediadores



Fonte: CASTRO, 2001.

A imunidade inata utiliza-se de granulócitos (que se dividem em neutrófilos, eosinófilos e basófilos) e macrófagos gerados constantemente no corpo para combate de infecções fagocitando e absorvendo invasores. Já a imunidade adaptativa utiliza-se de linfócitos divididos em células B e células T. As células B tem a função de produzir anticorpos. Já as células T são divididas em dois tipos: Células T auxiliares e Células T citotóxicas (LEVINSON, 2016).

3.4.1.1 Sistema Imunológico Adaptativo

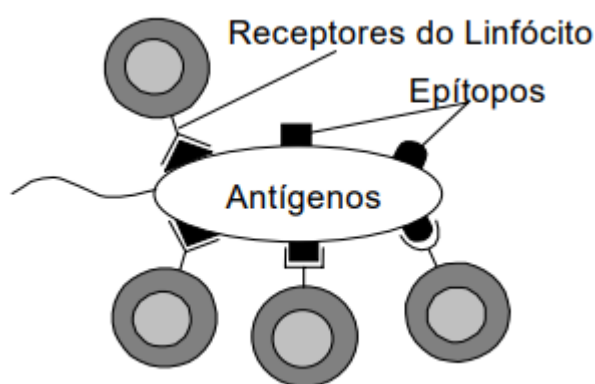
É importante ressaltar a importância do sistema imune adaptativo devido aos seus mecanismos de aprendizagem, reconhecimento de padrões e memória. Os linfócitos são responsáveis pelo reconhecimento dos patógenos por meio de receptores de antígenos. Os linfócitos virgens que não tiveram contatos prévios com nenhum patógeno possuem seus receptores de antígenos com uma única

especificidade. Entretanto a especificidade desses receptores é determinada por rearranjo gênico durante o desenvolvimento do linfócito na medula óssea e no timo. Desta forma mesmo cada linfócito tendo uma especificidade única e aleatória, um elevado número de linfócitos apresenta um elevado número de especificidade juntos. Já quanto a replicação, os linfócitos que serão replicados são apenas os que tiveram contato e interação de seus receptores com algum antígeno, eliminando-se os demais (CASTRO, 2001).

O reconhecimento feito pelo sistema imune se dá por meio da interação entre os receptores do linfócito com o antígeno e a distinção entre o que é próprio (elementos do organismo) e não-próprio (agentes externos). Essa distinção é importante para que não ocorra resposta imune contra o próprio organismo e possível destruição deste. Logo é importante esse reconhecimento ser o mais preciso possível, para identificar as possíveis ameaças e não combater o próprio corpo (AMARAL, 2006).

A interação do receptor do linfócito com o antígeno se dá por meio de uma região deste chamada epítipo. O antígeno possui diversos epítopos diferentes, enquanto o linfócito possui diversos receptores iguais, logo, um mesmo antígeno pode ter interação de seus epítopos com diversos linfócitos diferentes como mostrado na figura a seguir.

Figura 5 – União entre receptores e epítopos

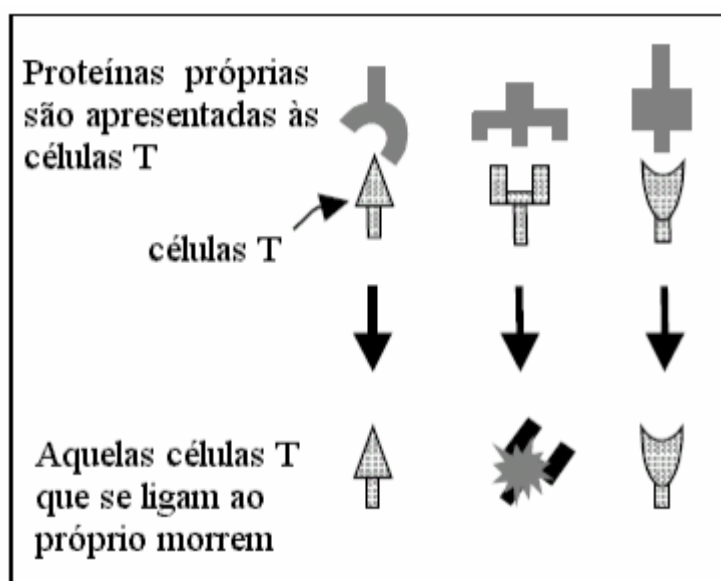


Fonte: AMARAL, 2006.

O número de linfócitos interagindo com os epítomos de um antígeno é o que determina a afinidade do linfócito ao patógeno. Essa afinidade com o patógeno deve ultrapassar um limiar para que se ative os linfócitos. É importante ressaltar que os receptores dos linfócitos não se ligam perfeitamente aos epítomos de um antígeno, a compatibilidade entre eles é apenas próxima, o que permite um mesmo receptor identificar diferentes epítomos, o que é vantajoso para o sistema imune, visto que a diversidade de patógenos é muito superior a diversidade de receptores dos linfócitos (AMARAL, 2006).

Como já dito anteriormente, são gerados receptores nos linfócitos por rearranjo gênico, o que gera padrões aleatórios. Para que não ocorra criação de linfócitos que interajam com padrões próprios do organismo e criem respostas autoimunes há a tolerância ao próprio feita pelos linfócitos T auxiliares. Os linfócitos T auxiliares amadurecem no timo e lá são apresentadas diversas proteínas do próprio organismo. Quando os linfócitos se ligam a essas proteínas eles são eliminados por um processo chamado deleção clonal (seleção negativa), restando apenas os linfócitos que são tolerantes às proteínas do próprio organismo (AMARAL, 2006).

Figura 6 – Processo de Maturação de Afinidade



Fonte: AMARAL, 2006.

Porém, quando se trata dos linfócitos B, eles são maturados de forma distribuída no organismo, logo para que ocorra tolerância ao próprio do sistema imune os linfócitos T auxiliares realizam a co-estimulação. Os linfócitos B são ativados quando recebem co-estimulação por duas formas: primeiro quando os seus receptores interagem com patógenos acima do limiar e segundo quando os linfócitos T auxiliares emitem sinais. Estes por sua vez emitem sinais apenas quando reconhecem o patógeno capturado pelos linfócitos B. Assim os linfócitos B são ativados e emitem anticorpos que se ligam aos antígenos e os eliminam (AMARAL, 2006).

No caso de o sistema imunológico adaptativo ter funcionado perfeitamente combatendo uma infecção, os linfócitos B armazenam informações sobre o patógeno combatido em uma subpopulação adaptada de linfócitos B. Desta forma, no caso de uma reinfecção pelo mesmo agente, a resposta imunológica é tão mais rápida e específica que o organismo não chega nem a ter conhecimento da infecção (AMARAL, 2006). De uma forma parecida ocorre com a aplicação de vacinas de vírus inativados. A CoronaVac por exemplo é uma vacina com objetivo de gerar resposta imunológica contra o coronavírus (SARS-CoV-2), assim ela possui fragmentos do novo coronavírus apenas para reconhecimento do antígeno, sem ação patológica. Desta forma o sistema imune reconhece e armazena a informação para que futuras infecções por patógenos iguais ou semelhantes sejam combatidas rapidamente (OLIVEIRA et al., 2021).

3.4.1.2 Mecanismo de Seleção Negativa

Como já apresentado, a seleção negativa se dá para que não ocorra um combate contra o próprio organismo criando uma tolerância contra o próprio. Ocorre dentro do timo durante a geração dos linfócitos T. Seus receptores são criados de forma aleatória por rearranjo gênico e em grandes quantidades (estima-se 10^8 a 10^{12} receptores diferentes num dado instante de tempo), assim é de se esperar que alguns deles reconhecessem células próprias. Para criar a tolerância ao próprio ocorre a seleção negativa no timo: os linfócitos são apresentados a diversas proteínas do corpo e os que se ligam a elas, ou seja, possuem afinidade por elas são eliminados, restando

assim apenas os linfócitos com detectores não próprios que deixam o timo para circular pelo organismo (AMARAL, 2006).

3.4.2 Sistema Imunológico Artificial

Os sistemas imunológicos artificiais, SIA, são um conjunto de ferramentas e técnicas computacionais de grande interesse devido a suas diversas aplicações nas mais variadas áreas. Castro (2001) compila em seu trabalho algumas definições formais para o SIA:

- *Definição 1.1:* Um sistema imunológico artificial é um sistema computacional baseado em metáforas do sistema imunológico natural (TIMMIS, 2000).
- *Definição 1.2:* Os sistemas imunológicos artificiais são compostos por metodologias inteligentes, inspiradas no sistema imunológico biológico, para a solução de problemas no mundo real (DASGUPTA, 2012).

Devido a eficiência, acurácia e otimização do sistema imunológico biológico e suas características (unicidade, reconhecimento de padrões internos e externos ao sistema, detecção de anomalias, detecção imperfeita, diversidade, aprendizagem por reforço e memória), ferramentas e métodos computacionais baseados nele poderiam atuar em diversas áreas como aprendizado de máquina, reconhecimento de padrões, aproximação de funções, clusterização, otimização e a utilizada neste trabalho: detecção de falhas e anomalias (CASTRO, 2001).

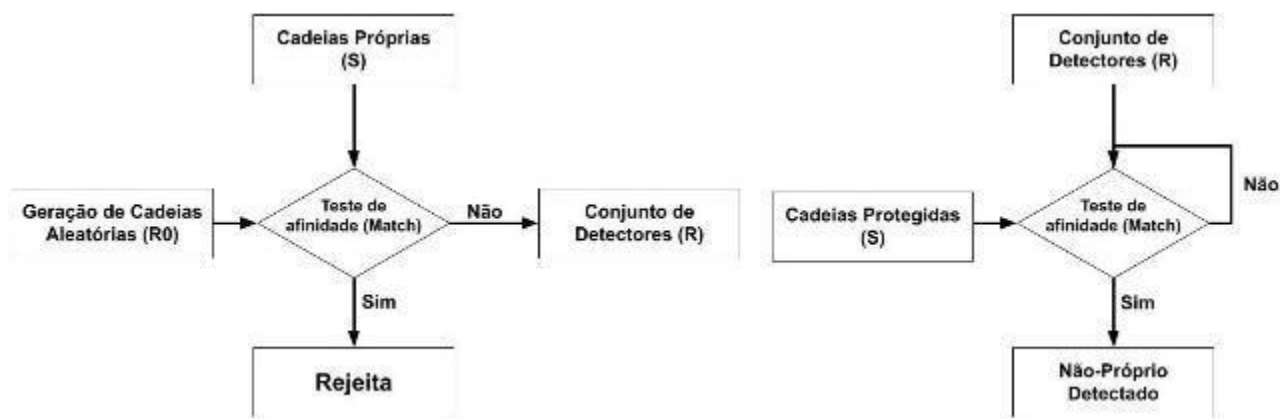
3.5 ALGORITMO DE SELEÇÃO NEGATIVA

O algoritmo de seleção negativa proposto por Forrest et al. (1994) é inspirado pelo mecanismo de seleção negativa realizado no timo com os linfócitos T. Como explicado na seção Mecanismo de Seleção Negativa, ela tem a função de se treinar os linfócitos T para que detectem apenas o não-próprio, eliminando-se os linfócitos que detectam as células próprias do organismo. O algoritmo tem por objetivo criar um

conjunto de detectores próprio com sinais a serem protegidos e um conjunto de detector não-próprio com uso de sinais aleatórios que não combinam com os sinais próprios. Desta forma utiliza-se o conjunto de detectores não-próprio para detecção de anomalias (AMARAL, 2006).

O algoritmo é descrito por duas fases: Censoriamento e Monitoramento (LIMA, 2012). O censoriamento é a seleção dos detectores não-próprios gerados aleatoriamente. Pode ser ilustrado pelo fluxograma da esquerda na Figura 7.

Figura 7 – Fluxograma do censoriamento a esquerda e monitoramento a direita



Fonte: Adaptado de Forrest et al., 1994

O funcionamento do censoriamento se dá pelos seguintes passos:

- Primeiro define-se um conjunto de cadeias próprias (S) que serão protegidas e monitoradas, no sistema imunológico biológico elas equivalem as proteínas do organismo.
- Em seguida geram-se cadeias aleatórias (R_0), equivalentes aos receptores aleatórios dos linfócitos gerados por rearranjo gênico.
- A seguir realiza-se o *match*, avaliando a afinidade entre as cadeias aleatórias e as cadeias próprias dentro de um determinado limiar pré-estabelecido.
- As cadeias aleatórias de R_0 que tiverem sua afinidade maior que o limiar serão rejeitadas e excluídas pois houve um reconhecimento do próprio. As cadeias que tiverem sua afinidade menor que o limiar serão armazenadas

em um conjunto de detectores (R). No sistema imunológico biológico equivalem aos linfócitos T maturados (AMARAL, 2006; LIMA et al., 2014).

A fase seguinte ao sensoriamento é o monitoramento. Nele analisa-se os sinais a serem protegidos (S) e verifica-se anomalias nesse sinal comparando-os com detectores não-próprios (R) pré-selecionados na etapa anterior.

O funcionamento do monitoramento se dá pelos seguintes passos:

- Primeiro definem-se as cadeias a serem protegidas (S).
- A seguir realiza-se o *match*, avaliando a afinidade entre as cadeias protegidas (S) e o conjunto de detectores (R) gerados no sensoriamento dentro de um limiar pré-estabelecido.
- Se a afinidade for alta um sinal não-próprio foi detectado nas cadeias protegidas (S) pois os detectores criados reconhecem apenas o não-próprio, ou seja, uma anomalia nas cadeias que devem ser protegidas (AMARAL, 2006).

É essencial ressaltar a importância de um bom limiar de afinidade a ser estabelecido, a sensibilidade da detecção e a redução do risco de falsos positivos podem ser feitas por meio da escolha do limiar de afinidade. Se este for muito alto os detectores criados serão extremamente sensíveis a qualquer mínima anomalia. Se o limiar for muito baixo se torna difícil a obtenção de um número razoável de detectores a partir do conjunto próprio (AMARAL, 2006).

Para avaliar essa afinidade entre as cadeias é utilizado um critério conhecido como casamento. O critério casamento pode ser da forma parcial ou perfeito. O casamento perfeito é quando as duas cadeias da análise possuem todas as variáveis com o mesmo valor. Já no casamento parcial, utiliza-se a taxa de afinidade para definir apenas uma quantidade de variáveis das cadeias que devem possuir o mesmo valor (LIMA, 2013).

A taxa de afinidade pode ser definida da seguinte forma:

$$TAf = \left(\frac{An}{At} \right) 100 \quad (5)$$

- TAf : Taxa de afinidade
- An : Número de cadeias próprias

- At : Número de cadeias totais (próprias e não-próprias)

Já a equação a seguir representa a afinidade entre os padrões analisados:

$$Af_T = \frac{\sum_{i=1}^L V_C}{L} 100 \quad (6)$$

- Af_T : Afinidade entre os padrões analisados
- V_C : Variáveis casadas
- L : Número total de variáveis

Assim, se afinidade entre os dois padrões Af_T for maior que a taxa de afinidade total Taf haverá casamento entre os dois padrões (LIMA, 2013). Desta forma, se estiver na fase de censuriamento, o casamento é seguido de rejeição da corrente aleatória R_0 e se for na fase de monitoramento um sinal não-próprio seria detectado.

Também é necessário a criação de um desvio associado ao padrão detector (anticorpo) para que se crie uma tolerância superior e inferior ao valor da variável para que se haja uma combinação entre os padrões. Isso melhora a eficiência e a dinamicidade do processo (BRADLEY E TYRRELL, 2002). Assim, é feito um cálculo do desvio para cada posição da cadeia seguindo a equação a seguir (SANTOS, 2020).

$$\underline{Ab}_i \leq Ag_i \leq \overline{Ab}_i \quad (7)$$

- $\underline{Ab}_i$: Valor nominal da posição i menos o desvio associado no anticorpo (padrão detector)
- Ag_i : Valor nominal da posição i (padrão analisado)
- $\overline{Ab}_i$: Valor nominal da posição i mais o desvio associado no anticorpo (padrão detector)

3.6 TRANSFORMADA DE WAVELET

As transformadas de wavelets, ou onduletas, são uma família de funções capaz de decompor determinados sinais em diferentes escalas com diferentes níveis de resolução (FERREIRA, 2009). Logo, permite que pequenas mudanças sejam mais facilmente identificadas, tal característica é fundamental para aprimorar a eficiência do sistema híbrido Imuno-Wavelet tornando-o mais poderoso.

Existem diversos campos da ciência aplicada que utilizam transformadas de wavelet como a astronomia, acústica, computação gráfica, engenharia, processamento de sinais e imagens, sendo o último um dos campos que mais utiliza-se. Pode-se distinguir as transformadas de wavelet em duas versões: contínua e discreta. A contínua é utilizada geralmente em análise de sinais enquanto a discreta é mais utilizada para compressão de dados e reconstrução de sinais (LIMA, 2004).

4 MODELAGEM DO REATOR

Para modelagem numérica do reator foi utilizado o software interativo de alta performance MATLAB R2016a. O software possui as características desejadas para aplicação do modelo e visualização dos resultados. Nas seções a seguir é apresentada a forma com que foi inserido o modelo no software.

4.1 MATEMÁTICA DA MODELAGEM UTILIZADA

A modelagem do reator é feita com uso de equações diferenciais ordinárias (EDO) que descrevem o comportamento desejado. Estas EDOs são resolvidas por métodos numéricos por meio do software interativo. Para obtenção das EDOs que descrevem o comportamento do reator são utilizadas leis de conservação de massa e energia em balanços molares, balanços de massa e balanços de energia (SCHULTZ et al., 2014). Essas leis e os balanços realizados permitem a obtenção de variáveis que interferem diretamente no comportamento do reator. Quando efetuadas as resoluções por método numérico iterativo obtém-se curvas de comportamento do volume em relação a taxa de reação, temperatura durante a reação e conversão de reagente.

O método utilizado para resolução das EDOs será o método de Runge-Kutta de quarta ordem (RK4). Entre os métodos de Runge-Kutta, os de quarta ordem são os mais populares e utilizados (CHAPRA, 2016). O método de Runge-Kutta de quarta ordem clássico pode ser escrito por:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (8)$$

Onde:

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_1h\right)$$

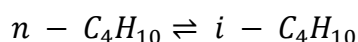
$$k_3 = f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}k_2h\right)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + k_3h)$$

Em que h é o tamanho do passo utilizado. Como k_1, k_2, k_3, k_4 são cálculos da função, o uso do método em softwares computacionais se torna eficientes (CHAPRA, 2016). O método será aplicado no software MATLAB na resolução da EDO do reator.

4.2 ESTUDO DE CASO PARA MODELAGEM DO REATOR

Para a modelagem do PFR foi feito um estudo de caso descrito por Fogler (2014) da reação reversível de isomerização do n-butano em isobutano. É considerada uma reação elementar reversível conduzida adiabaticamente em fase líquida sob alta pressão com uso de i-pentano como inerte. Será analisada a variação da conversão, da temperatura e da taxa de reação química em função do volume para processar uma quantidade de 100.000 gal/dia (em vazão molar: 163 kmol/h).



Lei de taxa da reação:

$$-r_A = k \left(C_A - \frac{C_B}{K_C} \right) \quad (9)$$

As demais condições iniciais e do processo estão descritas a seguir retiradas do estudo de caso apresentado por Fogler (2014):

Tabela 1 – Parâmetros e condições do processo

Parâmetros	Variável	Valor	Unidade
Vazão Volumétrica	w	100.000	gal/dia
Vazão Molar	F	163	kmol/h
Fração de entrada de A	X_A	90	%mol
Fração de entrada de inerte	X_i	10	%mol
Constante Cinética da Reação	k_0	31,1	h^{-1}
Temperatura de Alimentação	T_0	330	K
Temperatura da Constante Cinética	T_1	360	K
Temperatura da Constante de Equilíbrio	T_2	333	K
Variação da Entalpia	ΔH_R	-6900	K/mol.K
Energia de Ativação	E_a	65,7	kJ/mol.K
Constante de Equilíbrio	K_C	3,03	-
Concentração Molar Inicial de A	C_A	9,3	kmol/m ³
Calor Específico de A	C_{pA}	141	J/mol.K
Calor Específico de B	C_{pB}	141	J/mol.K
Calor Específico do Inerte	C_{pi}	161	J/mol.K

Fonte: FOGLER, 2014.

É importante ressaltar que os valores da constante cinética e da constante de equilíbrio são para as temperaturas de 360 K e 60 °C (333 K) respectivamente. A importância de enfatizar esse ponto se dá pelo fato de que o sistema está em temperaturas diferentes da temperatura das constantes, logo, elas devem ter a variação de seu comportamento analisado com a temperatura e conversão.

Para a modelagem parte-se da Equação 4 já demonstrada anteriormente. Ela pode ser combinada com a equação a seguir para obtenção da taxa de variação da conversão com o volume. Primeiro pode-se relacionar F_A com a conversão de A (X_A):

$$F_A = F_{A0}(1 - X_A)$$

$$dF_A = d[F_{A0}(1 - X_A)] = -F_{A0}dX_A$$

$$dF_A = -F_{A0}dX_A \quad (10)$$

Combinando a Equação 4 e a Equação 10:

$$\frac{-F_{A0}dX_A}{dV} = r_A$$

$$\frac{dX_A}{dV} = -\frac{r_A}{F_{A0}} \quad (11)$$

Também é possível escrever a concentração em função da conversão:

$$C_A = C_{A0} \frac{1-X_A}{1+\epsilon_A X_A}$$

$$C_B = C_{A0} \frac{X_A}{1+\epsilon_A X_A}$$

Como descrito anteriormente, a reação ocorre em fase líquida, considera-se densidade constante ($\epsilon_A = 0$), dessa forma pode-se escrever a concentração em função da conversão de A da seguinte forma:

$$C_A = C_{A0}(1 - X_A)$$

$$C_B = C_{A0}X_A$$

Ambas as equações acima podem ser combinadas com a Equação 9 para obtenção da taxa de reação em função da conversão:

$$\begin{aligned} -r_A &= k \left(C_{A0}(1 - X_A) - \frac{C_{A0}X_A}{K_C} \right) \\ -r_A &= kC_{A0} \left(1 - \left(1 + \frac{1}{K_C} \right) X_A \right) \end{aligned} \quad (12)$$

Agora para obtenção da temperatura em função da conversão é necessário a realização de um balanço de energia do reagente A:

$$\dot{Q} - \dot{W}_S - F_{A0} \sum \theta_i C p_i (T - T_0) - F_{A0} X_A [\Delta H_{Rx}^0(T_R) + \Delta C p (T - T_R)] = 0$$

Supondo um reator em processo adiabático ($\dot{Q} = 0$) e sem realização de trabalho de eixo ($\dot{W}_S = 0$). Além disso, sabe-se que:

$$C p_A = C p_B = 141$$

Logo:

$$\Delta C p = 0$$

Voltando ao balanço de energia com todas as considerações:

$$-F_{A0} \sum \theta_i C p_i (T - T_0) - F_{A0} X_A \Delta H_{Rx}^0 = 0$$

$$\sum \theta_i C p_i (T - T_0) = -X_A \Delta H_{Rx}^0$$

$$\sum \theta_i C p_i (T - T_0) = (-\Delta H_{Rx}^0) X_A$$

$$T - T_0 = \frac{(-\Delta H_{Rx}^0) X_A}{\sum \theta_i C p_i}$$

$$T = T_0 + \frac{(-\Delta H_{Rx}^0) X_A}{\sum \theta_i C p_i} \quad (13)$$

Dessa forma obtém-se a temperatura em função da conversão. Agora é necessário realizar o ajuste citado anteriormente das constantes cinéticas e de equilíbrio, pois ambas são dependentes da temperatura. Por meio da equação de Arrhenius e de Van't Hoff pode-se avaliar como ambas variam com a temperatura (SCHULTZ et al., 2014).

Inicialmente para a constante cinética:

$$k = k(T_1) e^{\left[\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right]} \quad (14)$$

Agora para a constante de equilíbrio:

$$K_C = K_C(T_2) e^{\left[\frac{\Delta H_{Rx}^0}{R} \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T} \right) \right]} \quad (15)$$

Os valores da constante universal dos gases perfeitos foram de 0,008314 kJ/mol.K para a constante cinética, visto que foi utilizada uma energia de ativação em kJ/mol.K e para a constante de equilíbrio foi de 8,314 J/mol.K pois foi utilizada a variação da entalpia em J/mol.K.

Por fim, pode ser criada uma função no software MATLAB R2016a com a Equação 11, Equação 12, Equação 13, Equação 14, e Equação 15 como demonstrado na imagem a seguir:

Figura 8 – Equações do reator PFR no software

```

1      %Reator PFR operando adiabaticamente A <-> B (1a ordem)
2      function [T,k,Kc,ra,DxDv]=PFR(v,x,F,XA,XI,T0,Ca0)
3
4      %Condições iniciais:
5      Fa0=(XA/100)*F;
6
7      %Equações:
8      %Temperatura em função da conversão:
9      T=T0+((-6900)*x)/((x*(141-141)+(141+(XI/XA)*161)));
10
11     %Constante cinética em função da temperatura:
12     k=31.1*exp((65.7/0.008314)*(T-360)/(T*360));
13
14     %Constante de equilíbrio em função da temperatura:
15     Kc=3.03*exp((-6900)/8.314*((T-333)/(T*333)));
16
17     %Equação da velocidade da reação:
18     ra=-k*Ca0*(1-(1+1/Kc)*x);
19
20     %Equação do balanço molar:
21     DxDv=-ra/Fa0;
22     end

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Na linha 2 inicia-se a declaração da função que exige parâmetros de entrada de volume (v), conversão inicial (x), vazão (F), porcentagem de reagente (XA) e de inerte na entrada (XI), temperatura de entrada (T0) e concentração inicial do reagente (Ca0). Dessa forma a função retorna valores de saída de temperatura (T), constante cinética (k), constante de equilíbrio (Kc), taxa de reação química (ra) e valores de dX/dV .

Logo, ainda é necessário a resolução da EDO, para isso utiliza-se o método numérico de Runge-Kutta de 4ª ordem aplicado ao software. É criada uma função rk para resolução da EDO:

Figura 9 – Método RK4 aplicado ao modelo

```

1  function [T,k,Kc,ra,V,X] = rk(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,Ca0)
2  -     i=1;
3  -     h=abs(vn-v0)/n;
4  -     [T_0,k_0,Kc_0,ra_0,DxDv]=PFR(v0,x0,F,XA,XI,T0,Ca0);
5  -     x1=x0;
6  -     V(i)=v0;
7  -     X(i)=x0;
8  -     T(i)=T_0;
9  -     k(i)=k_0;
10 -     Kc(i)=Kc_0;
11 -     ra(i)=-ra_0;
12 -     while (i<= n)
13 -         i=i+1;
14 -         [T_0,k_0,Kc_0,ra_0,DxDv]=PFR(v0,x0,F,XA,XI,T0,Ca0);
15 -         k1=h*DxDv;
16 -         [T_0,k_0,Kc_0,ra_0,DxDv]=PFR(v0+h/2,x0+k1/2,F,XA,XI,T0,Ca0);
17 -         k2 = h * DxDv;
18 -         [T_0,k_0,Kc_0,ra_0,DxDv]=PFR(v0+h/2,x0+k2/2,F,XA,XI,T0,Ca0);
19 -         k3=h*DxDv;
20 -         [T_0,k_0,Kc_0,ra_0,DxDv]=PFR(v0+h,x0+k3,F,XA,XI,T0,Ca0);
21 -         k4=h*DxDv;
22 -         x1=x0+(k1+2*k2+2*k3+k4)/6;
23 -         v0=v0+h;
24 -         V(i)=v0;
25 -         X(i)=x1;
26 -         T(i)=T_0;
27 -         k(i)=k_0;
28 -         Kc(i)=Kc_0;
29 -         ra(i)=-ra_0;
30 -         x0=x1;
31 -     end
32 - end

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

A função recebe os parâmetros iniciais do processo, além de x_0 , v_0 , v_n e n que são respectivamente a conversão inicial, o volume inicial, volume final e o número de subintervalos entre o volume inicial e final $[v_0, v_n]$. Desta forma é criado um loop com os valores iniciais calculados pela função PFR. O número de passo da função RK é calculado na linha 4. Na linha 5 a função obtém os valores fornecidos pela função PFR e então cria vetores para armazenar os valores obtidos. O loop é criado na linha 13 e os valores obtidos pelo método numérico em cada subintervalo é armazenado nos vetores V , X , T , k , Kc e ra , para ao fim ser analisado o comportamento.

Em seguida é criada uma terceira função. A função tabelar, que tem por objetivo criar uma matriz com os resultados obtidos da função anterior.

Figura 10 – Função Tabelar

```

1  function M = tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,Ca0)
2  -     [T,k,Kc,ra,V,X]=rk(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,Ca0);
3  -     M=[V',X',T',k',Kc',ra'];
4  -     end

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Em seguida, é feita a função principal que tem por objetivo a obtenção do comportamento em condições normais, onde os parâmetros de entrada estão próximos aos valores apresentados no estudo de caso, e de condições anormais onde os parâmetros de entrada estão em valores distantes das condições normais. Dessa forma é possível analisar o comportamento do reator em diferentes situações.

São criadas 4 funções, cada uma com objetivo de se analisar o comportamento variando um parâmetro de entrada:

- Vazão de Entrada (kmol/h)
- Temperatura de Entrada do Reagente A (K)
- Concentração de Entrada do Reagente A (kmol/m³)
- Fração de Entrada do Reagente A (%mol)

Como apresentado anteriormente, os parâmetros ideais do processo estão dispostos a seguir no software:

Figura 11 – Parâmetros ideias do processo

```

%Parâmetros do Processo
x0=0; %Conversão Inicial
v0=0; %Volume inicial [m³]
vn=3.5; %Volume final [m³]
n=50; %Número de Subintervalos
XA=90; %Fração Inicial de A (n-butano) [%mol]
XI=100-XA; %Fração de Inerte [%mol]
T0=330; %Temperatura de Alimentação [K]
Ca0=9.3; %Concentração Molar Inicial de A [kmol/m³]
F=163; %Vazão Molar [kmol/h]

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

A seguir, o algoritmo da obtenção do comportamento em situação normal do reator variando-se a vazão de entrada. Para isso foi considerado um desvio de 5% dentro da normalidade.

Figura 12 – Função principal vazão – Comportamento normal

```

18      %Definição de vazão normal = 163 +- 5% de variação
19 -   for ii=154.85:0.1:171.15
20 -       M=tabelar(x0,v0,vn,n,ii,XA,XI,T0,Ca0);
21 -       dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
22 -       dado_X(kk,:)=M(:,2)';
23 -       dado_T(kk,:)=M(:,3)';
24 -       kk=kk+1;
25 -   end
26
27      %Criação da matriz de comportamento normal
28 -       MN_rA=dado_rA;
29 -       MN_X=dado_X;
30 -       MN_T=dado_T;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Na linha 19 é criado o loop considerando um desvio de 5% no valor de vazão em situação normal (163 kmol/h). Na linha 20 é utilizada a função tabelar para obtenção do comportamento em cada subintervalo de vazão variando 0,1 kmol/h por loop. A seguir, na linha 21, 22 e 23 são criadas as matrizes dado, com objetivo de se

armazenar determinados valores da matriz M. dado rA armazena os valores de taxa de reação, dado X armazena os valores de conversão do reagente e dado T, armazena os valores de temperatura, todos em função do volume. Dessa forma após o loop, nas linhas 28, 29 e 30 são criadas as matrizes com os resultados em comportamento normal.

Figura 13 – Função principal vazão – Comportamento anormal

```

32      %Entrada Anormal dos Parâmetros
33      kk=1;
34      for ii=82:1:154
35          M=tabelar(x0,v0,vn,n,ii,XA,XI,T0,Ca0);
36          dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
37          dado_X(kk,:)=M(:,2)';
38          dado_T(kk,:)=M(:,3)';
39          kk=kk+1;
40      end
41      for ii=172:1:245
42          M=tabelar(x0,v0,vn,n,ii,XA,XI,T0,Ca0);
43          dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
44          dado_X(kk,:)=M(:,2)';
45          dado_T(kk,:)=M(:,3)';
46          kk=kk+1;
47      end
48
49      %Criação da matriz de comportamento anormal
50      MF_rA=dado_rA;
51      MF_X=dado_X;
52      MF_T=dado_T;
53      x=M(:,1);

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Para a situação de comportamento anormal foram definidos valores de 50% de desvio na situação de 50% a mais e 50% a menos da vazão do que o ideal. O funcionamento do algoritmo é idêntico ao do caso de obtenção dos valores em condições normais. Na linha 53 há a definição da variável x, com os valores de volume, apenas para facilitar a visualização da montagem dos gráficos com resultados.

Em seguida o mesmo procedimento foi repetido para os outros parâmetros:

Figura 14 – Função principal temperatura – Comportamento normal

```

18      % definição de temperatura normal = 330 +- 1% de variação
19 -   □   for ii=326.7:0.06:333.3
20 -       M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,ii,Ca0);
21 -       dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
22 -       dado_X(kk,:)=M(:,2)';
23 -       dado_T(kk,:)=M(:,3)';
24 -       kk=kk+1;
25 -   end
26
27      %Criação da matriz de comportamento normal
28 -       MN_rA=dado_rA;
29 -       MN_X=dado_X;
30 -       MN_T=dado_T;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Devido as constantes cinéticas e de equilíbrio variarem exponencialmente com a temperatura, é importante que este seja um parâmetro bem controlado, pois pequenas variações na temperatura de entrada afetam demasiadamente o comportamento do reator. Desta forma, foi atribuído um desvio de 1% na temperatura de entrada para as condições normais. Já para a situação anormal foram utilizadas entradas com desvio de 3%.

Figura 15 – Função principal temperatura – Comportamento anormal

```

32 -         kk=1;
33 -         for ii=320.1:0.25:326.6
34 -             M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,ii,Ca0);
35 -             dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
36 -             dado_X(kk,:)=M(:,2)';
37 -             dado_T(kk,:)=M(:,3)';
38 -             kk=kk+1;
39 -         end
40 -         for ii=333.4:0.25:339.9
41 -             M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,ii,Ca0);
42 -             dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
43 -             dado_X(kk,:)=M(:,2)';
44 -             dado_T(kk,:)=M(:,3)';
45 -             kk=kk+1;
46 -         end
47
48         %Criação da matriz de comportamento anormal
49         MF_rA=dado_rA;
50         MF_X=dado_X;
51         MF_T=dado_T;
52         x=M(:,1);

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 16 – Função principal concentração – Comportamento normal

```

18         %Definição de concentração normal = 9.3 +- 2% de variação
19 -         for ii=9.114:0.004:9.486
20 -             M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,ii);
21 -             dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
22 -             dado_X(kk,:)=M(:,2)';
23 -             dado_T(kk,:)=M(:,3)';
24 -             kk=kk+1;
25 -         end
26
27         %Criação da matriz de comportamento normal
28 -         MN_rA=dado_rA;
29 -         MN_X=dado_X;
30 -         MN_T=dado_T;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

No algoritmo da concentração foram atribuídos desvios de 2% para a condição de comportamento normal e de 20% para as condições com anormalidade.

Figura 17 – Função principal concentração – Comportamento anormal

```

32 -     kk=1;
33 -     for ii=7.44:0.024:9.114
34 -         M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,ii);
35 -         dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
36 -         dado_X(kk,:)=M(:,2)';
37 -         dado_T(kk,:)=M(:,3)';
38 -         kk=kk+1;
39 -     end
40 -     for ii=9.486:0.024:11.16
41 -         M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,XA,XI,T0,ii);
42 -         dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
43 -         dado_X(kk,:)=M(:,2)';
44 -         dado_T(kk,:)=M(:,3)';
45 -         kk=kk+1;
46 -     end
47
48     %Criação da matriz de comportamento anormal
49 -     MF_rA=dado_rA;
50 -     MF_X=dado_X;
51 -     MF_T=dado_T;
52 -     x=M(:,1);

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 18 – Função principal fração de inerte – Comportamento normal

```

18      %Definição de fração normal = 90 +- 5 de variação
19 -   for ii=85:0.1:95
20 -       M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,ii,100-ii,T0,Ca0);
21 -       dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
22 -       dado_X(kk,:)=M(:,2)';
23 -       dado_T(kk,:)=M(:,3)';
24 -       kk=kk+1;
25 -   end
26
27      %Criação da matriz de comportamento normal
28 -       MN_rA=dado_rA;
29 -       MN_X=dado_X;
30 -       MN_T=dado_T;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Por fim foi analisada também situações em que a fração de entrada de reagente se altera. Foi atribuído valor de 5% (de fração de reagente) de desvio para a condição normal e 30% de desvio inferior enquanto o desvio superior foi contabilizado como o limite dos 5% do normal, até o máximo de entrada de reagente puro (fração de 100% de reagente e 0% de inerte). Em diversas reações, como por exemplo a síntese da amônia, o inerte pode ser utilizado para controle da temperatura, removendo calor e evitando que a temperatura ultrapasse algum valor pré-estabelecido de operação (JORQUEIRA, 2018). Com a modelagem realizada será possível analisar o comportamento da temperatura ao longo do reator com maiores e menores concentração de inerte.

Figura 19 – Função principal fração de inerte – Comportamento anormal

```

32      %Entrada Anormal dos Parâmetros
33      kk=1;
34      for ii=65:1:85
35          M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,ii,100-ii,T0,Ca0);
36          dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
37          dado_X(kk,:)=M(:,2)';
38          dado_T(kk,:)=M(:,3)';
39          kk=kk+1;
40      end
41      for ii=95:1:100
42          M=tabelar(x0,v0,vn,n,F,ii,100-ii,T0,Ca0);
43          dado_rA(kk,:)=M(:,6)';
44          dado_X(kk,:)=M(:,2)';
45          dado_T(kk,:)=M(:,3)';
46          kk=kk+1;
47      end
48
49      %Criação da matriz de comportamento anormal
50      MF_rA=dado_rA;
51      MF_X=dado_X;
52      MF_T=dado_T;
53      x=M(:,1);

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

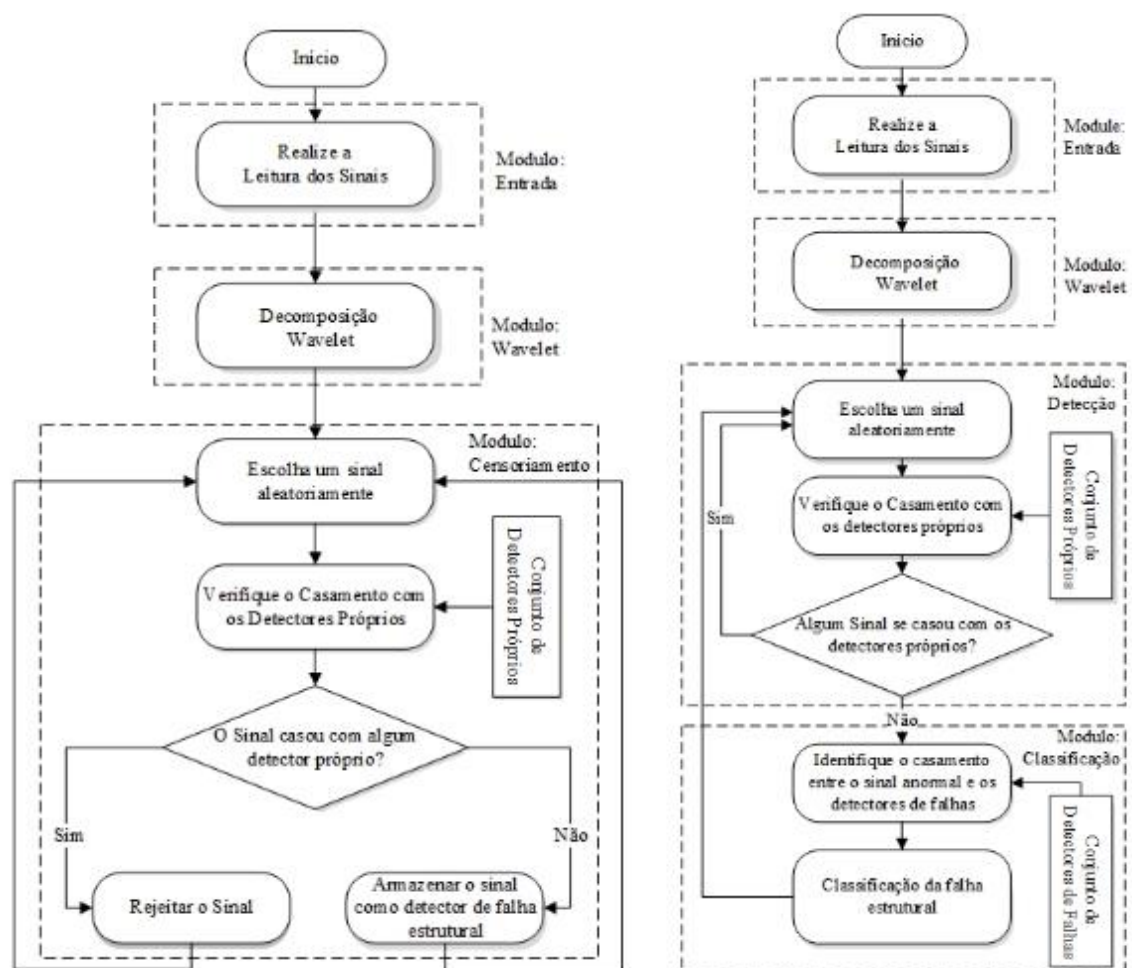
5 SISTEMA HÍBRIDO: IMUNO-WAVELET

O sistema híbrido imuno-wavelet é composto da junção de um algoritmo de seleção negativa com uma transformada de wavelet.

O objetivo de se utilizar a transformada de wavelet é para se aprimorar a eficiência do algoritmo devido a capacidade da transformada em se realçar pequenas mudanças do sinal.

Um sinal com anormalidade baixa teria um certo valor de afinidade com um sinal na normalidade. Quando se utiliza a transformada de wavelet nesses sinais, é esperado que esse valor de afinidade diminua drasticamente devido ao realce de pequenas mudanças permitindo assim uma melhor eficiência em se detectar sinais fora do padrão.

Figura 20 – Censoriamento e Monitoramento



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Inicialmente é feito o censuriamento, a fase em que haverá treinamento do sistema para criar um conjunto de detectores de falha. O primeiro passo do censuriamento é realizar a leitura dos sinais obtidos do modelo numérico do reator feito anteriormente. Nesses sinais estarão presentes sinais em condição normal e com falhas. Em seguida os sinais passam pela decomposição wavelet onde é aplicada uma transformada wavelet discreta por meio da função do software MATLAB dddtree. Os algoritmos utilizados estão apresentados no Apêndice A – Algoritmos do Sistema Imuno-Wavelet ao fim do trabalho. Os sinais, agora transformados, são escolhidos um a um aleatoriamente para verificar o casamento, afinidade, com os detectores próprios. Os detectores próprios são os sinais em condição normal.

Caso o sinal analisado tenha sua afinidade com o conjunto de detector próprio acima de 66,6% e considerando um critério de casamento parcial proposto por Bradley; Tyrrell (2002), no qual se utiliza um desvio de 3%, esse sinal será descartado. Já no caso de afinidade ser inferior o sinal será armazenado no conjunto de detectores de falha.

Neste trabalho, por meio do censuriamento, foi criado um banco de dados de detectores de falha para cada uma das situações de falha analisadas: falhas na vazão de entrada, temperatura de entrada, concentração de entrada e fração de inerte.

Após isso inicia-se a etapa de monitoramento. Os sinais de entrada serão lidos e decompostos pela transformada wavelet. Essas duas etapas são muito similares a do censuriamento. Após isso será escolhido um sinal aleatório para verificação com o conjunto de detectores próprio. Caso haja afinidade, o sinal é considerado próprio. No caso de a afinidade ser inferior a taxa de afinidade, o sinal será comparado com o conjunto de detectores não-próprio, em cada classe analisada. Dessa forma o sinal com falha será não apenas identificado, mas classificado de acordo com sua classe de falha e com a severidade da falha.

Para classificar de acordo com a severidade e probabilidade da falha é feito durante o monitoramento o cálculo do desvio padrão e da mediana do sinal para criar uma taxa de comparação com o desvio padrão e a mediana dos sinais normais.

$$Taxa\ do\ Desvio = \frac{Desvio\ do\ Sinal}{Desvio\ Geral\ dos\ Sinais\ Padrao} \quad (15)$$

$$Taxa\ da\ Mediana = \frac{Mediana\ do\ Sinal}{Mediana\ Geral\ dos\ Sinais\ Padrao} \quad (16)$$

Dessa forma, a severidade da falha é classificada de acordo com a taxa do desvio, sendo classificadas em até 25% para severidade muito baixa, entre 25% e 50% para severidade baixa, entre 50% e 75% para severidade média e acima de 75% para alta.

Dentro de cada intervalo de severidade a probabilidade é classificada de acordo com a taxa da mediana, sendo classificada com valor até 25% para probabilidade baixa, entre 25% e 50% para probabilidade moderada, entre 50% e 75% para probabilidade alta e acima de 75% para probabilidade muito alta.

Além disso também é contabilizado a quantidade de sinais com falha e sinais normais que foram encontrados. No início do algoritmo, para verificar a eficiência do sistema é pedido o número de sinais com falha e sinais normais que foram inseridos para calcular a taxa de acerto com base nos sinais com falha e sinais normais encontrados.

É possível explicitar todo o processo aplicado aos algoritmos utilizados de fato, que estão apresentados na seção final deste trabalho. Inicialmente é feita a obtenção dos sinais normais e com falha pelo modelo do reator apresentado no relatório anterior. Após isso, os sinais passam pelo algoritmo Transformada de Wavelet, apresentado na Figura 43. Os dados com falha já transformados são então inseridos nos algoritmos da Figura 53 até Figura 56 para criação dos detectores de falha. Em seguida, com o banco de detectores já criados, os sinais são inseridos no Sistema Imuno-Wavelet apresentados na Figura 44 até Figura 52.

Dessa forma, o sistema retorna a quantidades de sinais com falha e sem falha, a taxa de acerto, o tempo de processamento do algoritmo, a quantificação e a classificação da falha.

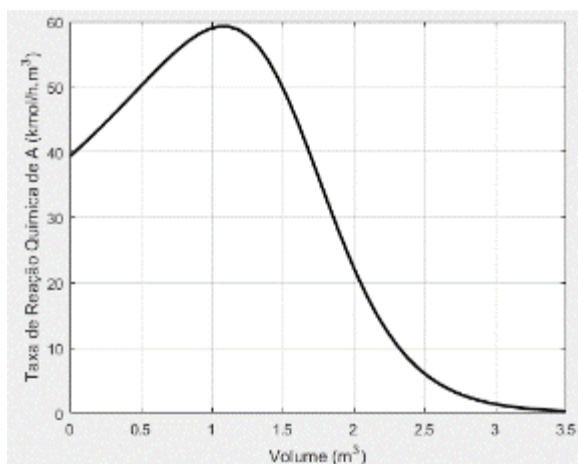
6 APRESENTAÇÃO DOS RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente será apresentado os resultados da modelagem numérica do reator nas condições ideais de funcionamento. Após isso será verificado os resultados de alteração de comportamento de cada tipo de falha analisado.

6.1 COMPORTAMENTO NORMAL

Com a modelagem do PFR foi possível obter, utilizando os parâmetros do estudo de caso, a taxa de reação química do reagente A em função do volume. Valores obtidos nas condições normais do reator por meio do método numérico RK4. Variações nesse sinal representam condições anormais. Um exemplo gráfico do resultado em condição normal pode ser visto na figura a seguir.

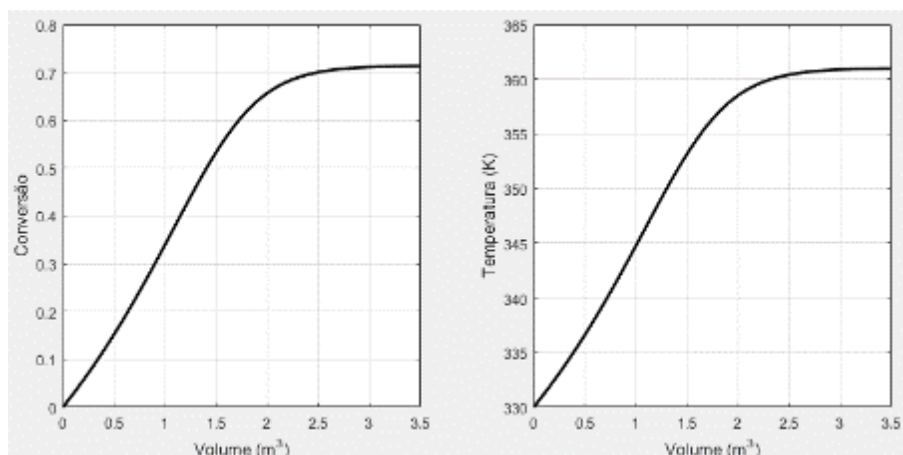
Figura 21 – Gráfico do reator em funcionamento normal



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Com a modelagem utilizada também pode-se obter sinais de condições normais da temperatura do reagente e da conversão do reagente em função do volume.

Figura 22 - Gráfico da conversão e temperatura do reagente A em função do volume



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

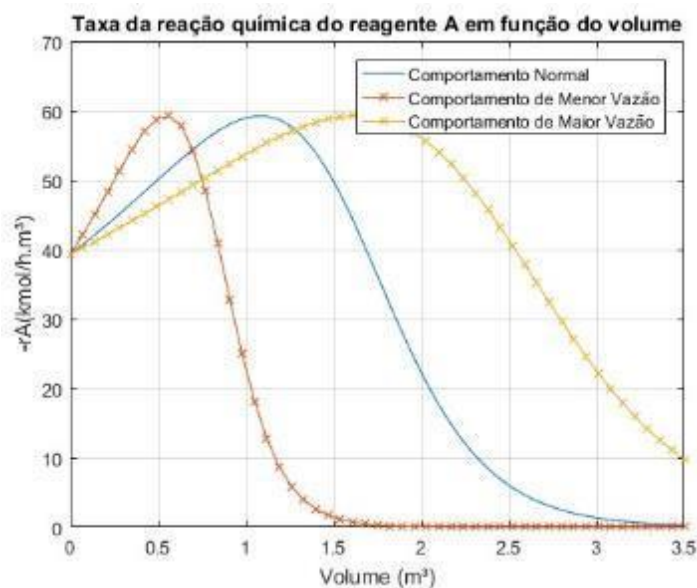
6.2 ALTERAÇÃO DE COMPORTAMENTO

Esta seção será dividida em 5 subseções, uma para cada tipo de falha e uma última unificando todos os dados obtidos.

6.2.1 Variação da Vazão de Entrada

Inicialmente foram obtidas três matrizes de comportamento normal dentro do desvio definido previamente: uma da taxa de reação, outra da temperatura e uma da conversão, todas de 164x51. Para representação gráfica foi utilizado a curva com os parâmetros de entrada ideais igual ao estudo de caso. Também foram obtidas três matrizes de comportamento anormal com os extremos inferior e superior de menores e maiores vazões: todas de 147x51. Para representação gráfica foi utilizado o valor de menor vazão definido previamente e o de maior vazão também definido previamente. A seguir estão apresentados os gráficos com o comportamento da taxa de reação, temperatura ao longo do reator e conversão do reagente.

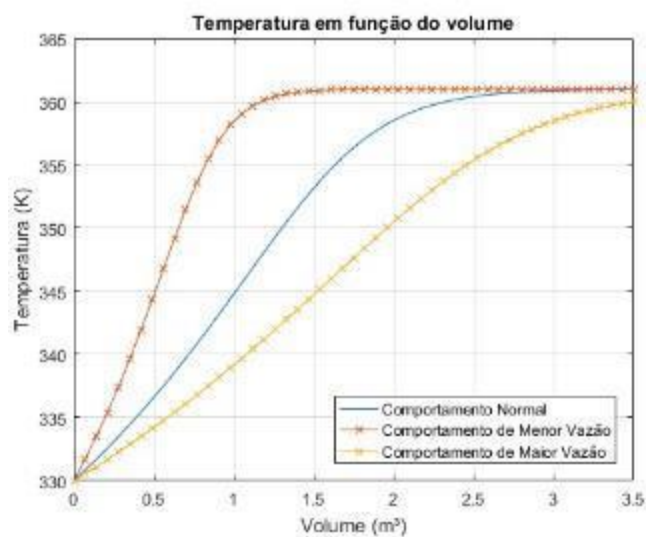
Figura 23 - Análise da taxa de reação com variação da vazão



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Foi possível perceber que, na menor vazão, a taxa de reação atinge seu valor máximo próximo do volume $0,5 \text{ m}^3$ e atinge zero antes de 2 m^3 . O contrário ocorre para o caso de maior vazão, o valor máximo de taxa de reação ocorre posterior ao normal e não atinge zero em um reator de volume igual ao apresentado, de $3,5 \text{ m}^3$.

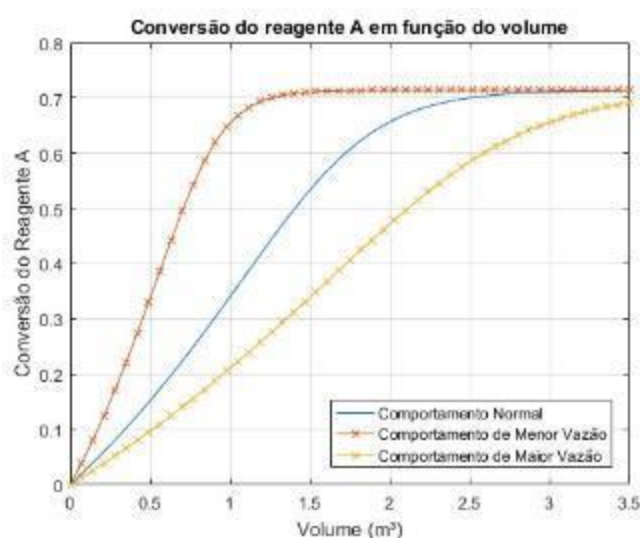
Figura 24 – Análise da temperatura com variação da vazão



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Nos resultados da temperatura, foi possível notar que para menor vazão, a temperatura máxima da reação é atingida anteriormente a situação de normalidade enquanto a maior vazão tarda para atingir este valor de temperatura.

Figura 25 – Análise da conversão com variação da vazão



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

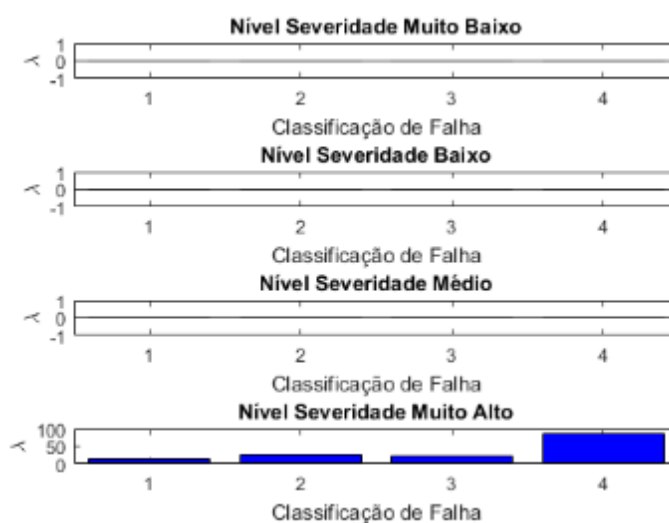
O comportamento visto da conversão de reagente é parecido com o da temperatura, sendo possível perceber que na maior vazão a conversão máxima não é atingida.

Esse é o primeiro conjunto de sinais inserido no Sistema Imuno-Wavelet. Foram duas matrizes, uma com 164 sinais em condição normal e 147 sinais em condição de falha de vazão. Utilizando o sistema Imuno-Wavelet, foi possível se encontrar 164 sinais em condição normal e 147 sinais com falhas, representando uma taxa de acerto de 100%. Não foram encontrados falsos positivos ou falsos negativos.

Além disso, quanto a classificação das falhas, o sistema detectou 147 falhas de vazão e zero falhas de temperatura, concentração ou fração de inerte. Representando também um acerto de 100% na classificação das falhas.

Quanto a quantificação das falhas encontradas, o sistema classificou todas as falhas com nível de severidade muito alto. Dentro desse nível classificou 87 falhas com probabilidade muito alta, 22 com probabilidade alta, 25 com probabilidade moderada e 13 com probabilidade baixa.

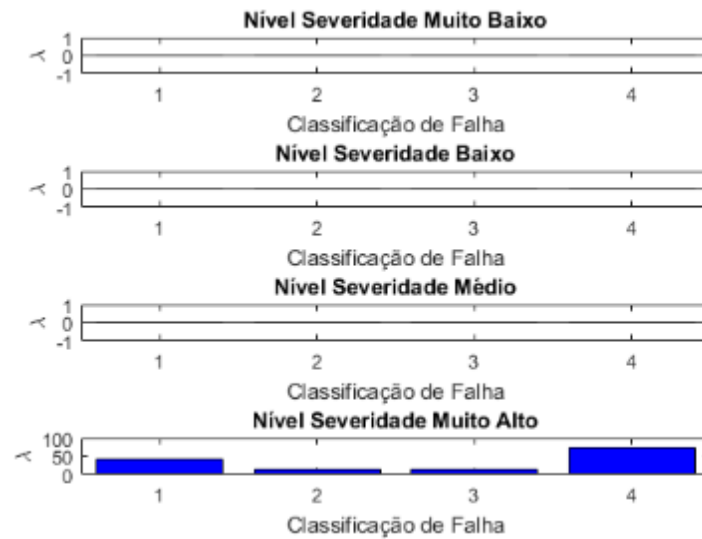
Figura 26 – Quantificação das falhas de vazão pelo sistema Imuno-Wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Para que o sistema se apresente o mais eficiente possível é desejado que quantifique as falhas para o nível de severidade mais alto e maior probabilidade de falha, pois assim, indica que consegue identificar falhas mesmo com pequenas mudanças no sinal. Neste caso, o resultado é satisfatório visto que todas as falhas foram quantificadas no mais alto nível de severidade e a maioria delas foi em probabilidade muito alta de falha. Essa característica da quantificação se espera ser ressaltada pelo uso da transformada de wavelet. Dessa forma foi também aplicado o algoritmo sem utilização da wavelet para efeitos de comparação.

Figura 27 – Quantificação das falhas de vazão pelo sistema sem wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

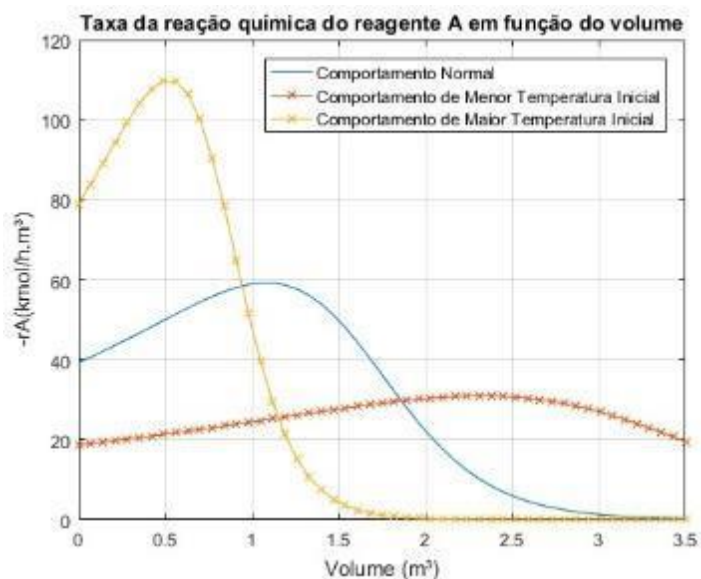
Sem utilização do wavelet, o sistema teve taxa de 100% de acerto e quantificou todas as falhas em nível de severidade muito alto. Já quanto as probabilidades, ele quantificou 76 falhas com probabilidade muito alta, 14 falhas com probabilidade alta, 16 com probabilidade moderada e 41 com probabilidade baixa.

Pode-se concluir nesse caso que o uso do wavelet de fato ressaltou pequenas mudanças e aumentou a taxa da mediana entre os sinais, que quantifica quanto a probabilidade de falha.

6.2.2 Variação da Temperatura de Entrada

A seguir estão apresentados os gráficos do comportamento com variação da temperatura de entrada. Foi possível obter a matriz de comportamento normal de 111x51 e a matriz de comportamento anormal de 54x51. De forma similar ao caso anterior, foi escolhido os valores máximos e mínimos da matriz anormal junto do caso ideal para representação gráfica.

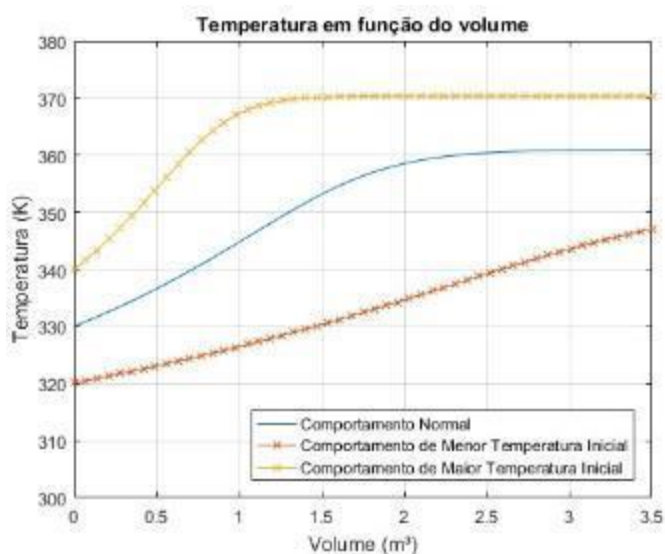
Figura 28 – Análise da taxa de reação com variação da temperatura de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

É possível notar que para o caso com maior temperatura de entrada, a taxa de reação atinge valores maiores e previamente ao comportamento normal, porém atinge o valor zero próximo aos 2 m^3 . O contrário ocorre com o caso de uma temperatura de entrada menor, onde atinge valores menores de taxa de reação, porém não atinge zero no volume do reator definido.

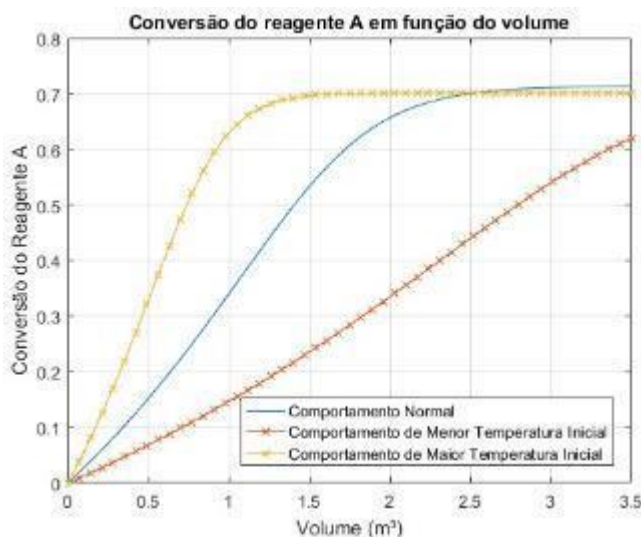
Figura 29 – Análise da temperatura com variação da temperatura de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Como esperado, a mudança da temperatura de entrada altera a temperatura final atingida, no caso de maior temperatura de entrada, foi atingido um valor final de temperatura no reator de aproximadamente 10 K a mais que na situação de comportamento normal. Já no caso de menor temperatura de entrada, o valor máximo de temperatura no reator não foi atingido dentro do volume de 3,5 m³ do reator. Também é possível notar que o caso com valor de temperatura de entrada menor obteve menor variação total de temperatura entre os 3 casos apresentados.

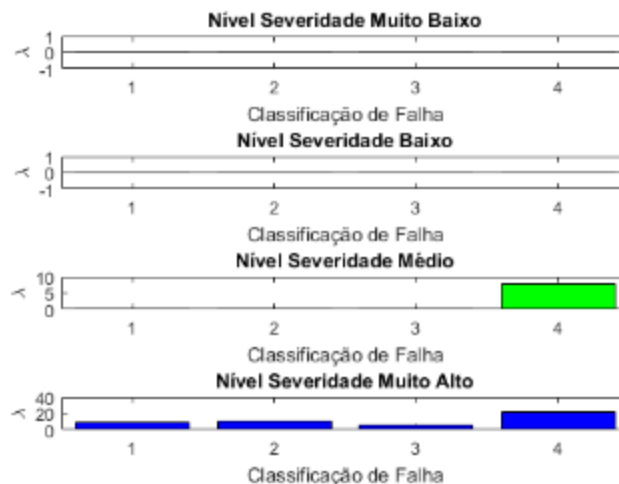
Figura 30 – Análise da conversão com variação da temperatura de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Ao analisar a conversão é possível notar que ambos os casos de maior e menor temperatura de entrada não atingem o valor de conversão que o caso de comportamento normal atinge, ainda que no caso da maior temperatura de entrada o valor obtido no fim seja próximo. Também é possível perceber que o caso de maior temperatura de entrada atinge seu máximo de conversão antes dos outros casos apresentados.

Figura 31 – Quantificação das falhas de temperatura pelo sistema Imuno-Wavelet

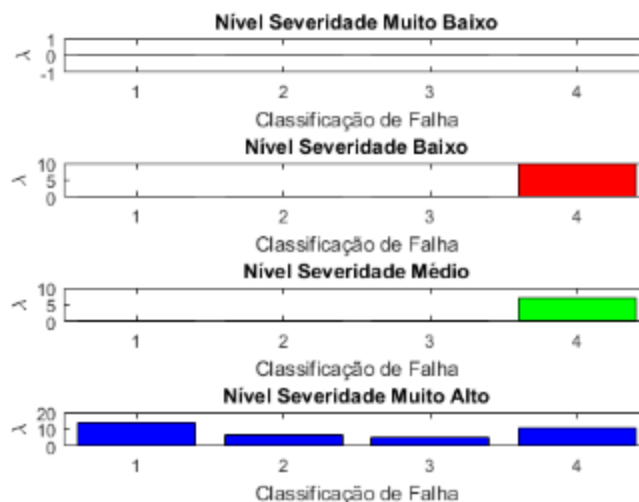


Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Com uso do sistema Imuno-Wavelet foi possível se obter 100% de taxa de acerto entre os sinais com falha e sinais normais. Já quanto a classificação dos sinais foram detectados 50 sinais com falhas de temperatura e 4 sinais com falhas na vazão, obtendo uma taxa de acerto na classificação de 92,6%. Essa taxa se deve a característica do sinal. Os sinais com falha na temperatura onde a temperatura de falha é muito próxima a temperatura normal ocasiona em um tipo de sinal muito parecido com falhas na vazão. Uma forma de se solucionar isso seria analisar mais parâmetros. O sistema criado analisa somente os resultados de taxa de reação química gerados pelo modelo numérico do reator. Caso fossem analisados mais resultados como de temperatura ao longo do reator e conversão simultaneamente, a classificação ocorreria de forma mais aprimorada. Porém a análise feita em relação a classificação de sinal normal ou falha, tem se mostrado 100% eficiente mesmo com somente um parâmetro analisado.

Novamente comparando com o sistema sem uso do wavelet é possível se obter dados diferentes.

Figura 32 – Quantificação das falhas de temperatura pelo sistema sem wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

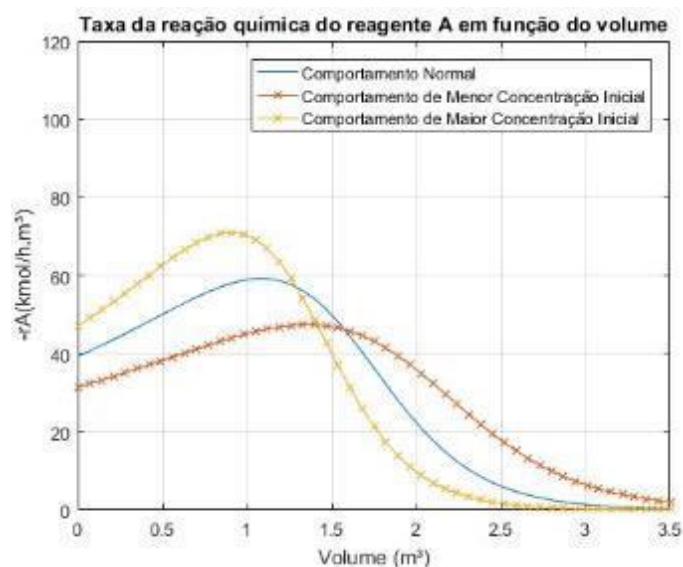
Nesse caso foram quantificados 8 sinais com severidade média sendo todos com probabilidade alta de falha e 46 em severidade muito alta, sendo desses: 9 com probabilidade muito baixa, 11 com probabilidade moderada, 5 com probabilidade alta e 21 com probabilidade muito alta.

Novamente é possível perceber que a transformada de wavelet conseguiu ressaltar as pequenas mudanças no sinal original criando um sinal com mudanças mais elevadas. Assim, no sistema Imuno-Wavelet todas as falhas foram de severidade muito alta e a maioria com probabilidade muito alta.

6.2.3 Variação da Concentração de Entrada do Reagente

Neste caso foram obtidas as matrizes de comportamento normal de 96x51 e as matrizes de comportamento anormal de 140x51. O procedimento da apresentação gráfica se deu da mesma forma das subseções apresentadas anteriormente.

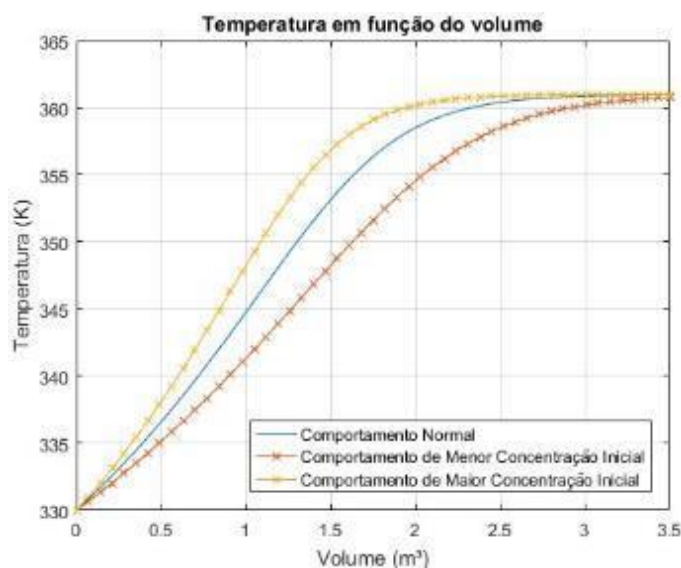
Figura 33 – Análise da taxa de reação com variação da concentração de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Ao analisar o gráfico é possível perceber, como era esperado, que um aumento da concentração do reagente na entrada gera uma taxa de reação maior e anteriormente ao caso de comportamento normal. Assim como o oposto era esperado, uma diminuição da concentração de entrada gera uma taxa de reação menor e posterior ao caso de comportamento normal. Também é possível notar que a taxa de reação do caso com maior concentração de entrada atinge zero próximo ao 2,5 m^3 do reator.

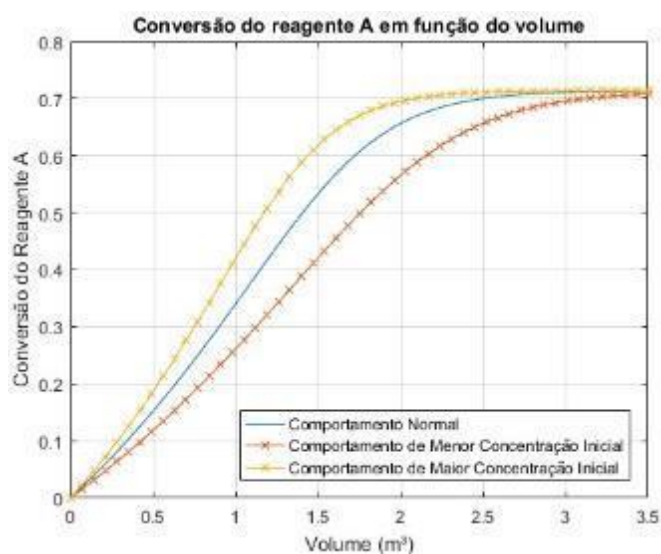
Figura 34 – Análise da temperatura com variação da concentração de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

No gráfico da Figura 34 é possível perceber que os 3 casos apresentados atingem o valor de temperatura máxima e de mesmo valor para todos. As diferenças perceptíveis são que o caso de maior concentração de entrada faz com que a temperatura máxima seja atingida antes do comportamento normal e o caso de menor concentração de entrada ocorre o oposto.

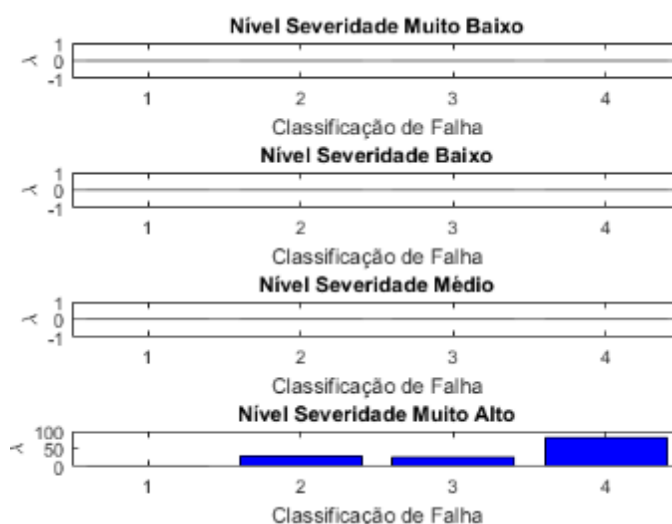
Figura 35 – Análise da conversão com variação da concentração de entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Para a conversão é possível perceber um comportamento muito similar ao da temperatura com o caso de maior concentração de entrada atingindo a máxima conversão antes dos outros casos.

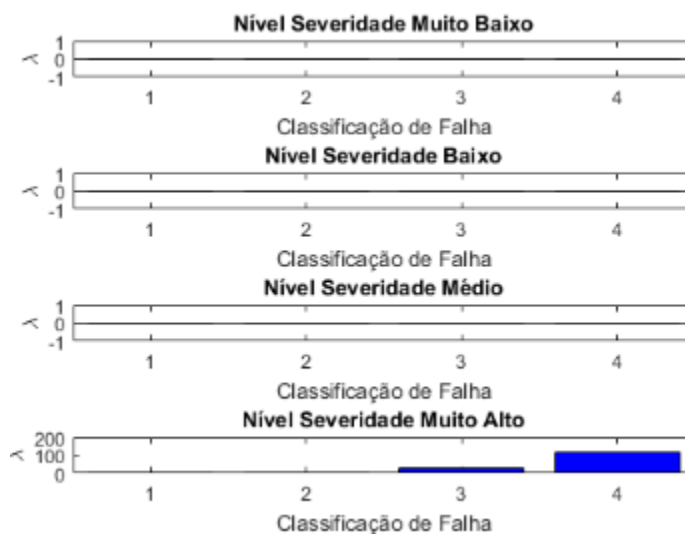
Figura 36 - Quantificação das falhas de concentração pelo sistema Imuno-Wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

O sistema foi capaz de acertar 100% dos casos de falha e normal, sem falsos positivos ou negativos. Em relação a classificação de falhas teve uma taxa de acerto de 95%. Foram classificados 7 sinais como falhas de vazão e 140 sinais como falhas de concentração de reagente. O mesmo problema visto na variação da temperatura parece se repetir aqui, sendo possível aprimorar o resultado com análise de mais parâmetros. Quanto a quantificação, foram quantificados 140 sinais com severidade muito alta, destes, 30 com probabilidade moderada de falha, 28 com probabilidade alta de falha e 82 com probabilidade muito alta de falha.

Figura 37 – Quantificação das falhas de concentração sem wavelet



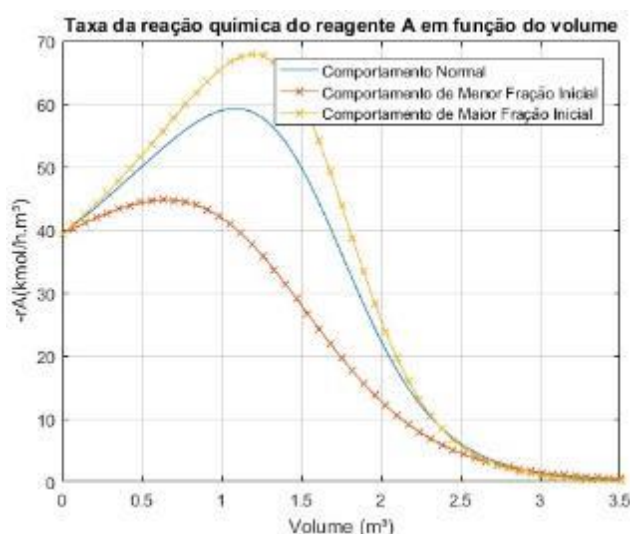
Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Novamente foi feito no sistema sem wavelet e foi possível se obter quantificação de 140 sinais com severidade muito alta, e entre eles, 115 sinais com probabilidade muito alta de falha e 25 com probabilidade alta de falha. Da mesma forma que ocorreu com o caso da fração de inerte, a wavelet não ressaltou as diferenças entre os sinais, sendo que o sinal original apresentou taxa de desvio padrão e mediana maior que com a transformada.

6.2.4 Variação da Fração de Inerte

Para esta análise foram obtidas matrizes de comportamento normal de 101x51 e matrizes de comportamento anormal de 25x51. Os gráficos foram montados de forma similar ao apresentado anteriormente nas outras subseções do trabalho.

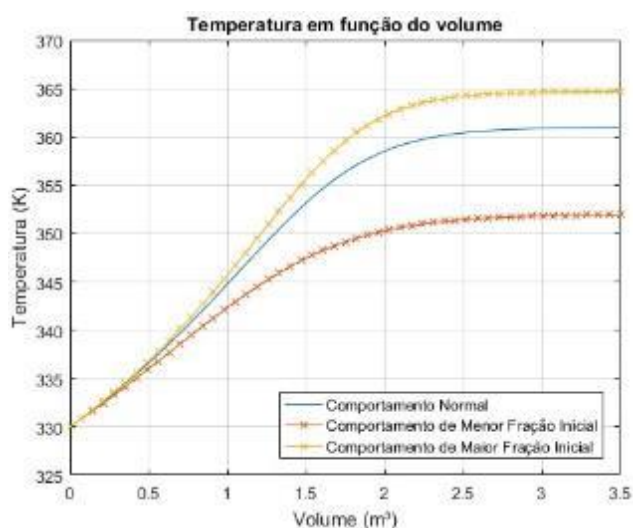
Figura 38 – Análise da taxa de reação com variação da fração de inerte na entrada



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

É possível perceber um comportamento diferente das demais análises. Para o caso com maior fração de reagente na entrada (100%) foi obtida uma taxa de reação maior que nos outros casos, como era esperado, e todos os casos apresentaram valor zero na taxa de reação no fim do volume do reator. De forma contrária, o comportamento do caso de menor fração de reagente na entrada (consequentemente maior fração de inerte na entrada) teve um valor menor de máximo da taxa de reação.

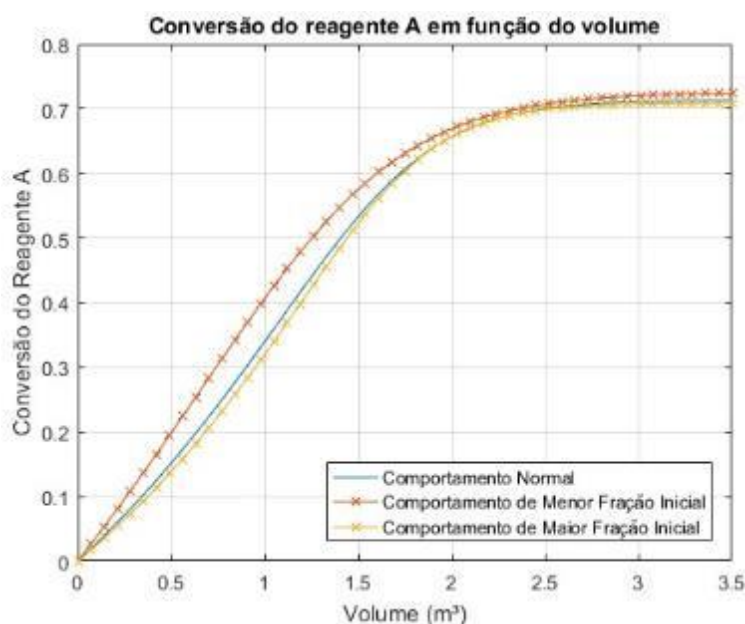
Figura 39 – Análise da temperatura com variação da fração de inerte



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Quando se trata da temperatura, assim como era esperado, o caso com maior fração de reagente na entrada, com zero inerte, obteve um valor máximo de temperatura maior que os outros casos. Assim como o caso com menor fração de reagente na entrada, e maior de inerte, obteve um valor menor de máximo de temperatura. É possível perceber também que o crescimento das curvas ocorre de forma similar, com todas atingindo os seus valores máximos em volumes próximos, como era esperado pelo equacionamento do modelo.

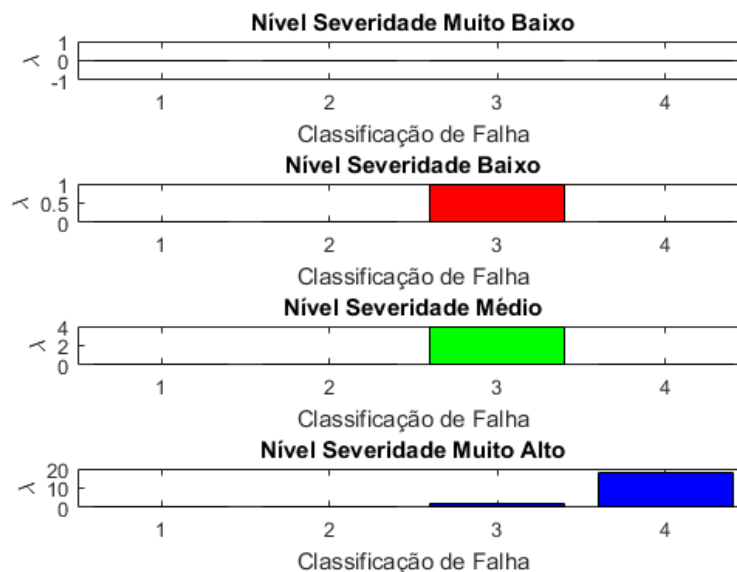
Figura 40 – Análise da conversão com variação da fração de reagente



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Analisando a conversão obtida com a variação da fração de reagente na entrada, foi vista uma mudança pequena de comportamento, menor do que ocorre na taxa de reação e na temperatura. O caso com menor fração de reagente na entrada, atingiu o máximo de conversão anteriormente aos outros casos e no fim obteve uma conversão ligeiramente maior. O caso com 100% de reagente na entrada, zero inerte, atingiu o valor máximo de conversão após os outros casos e atingiu um valor ligeiramente menor de máxima conversão.

Figura 41 – Quantificação das falhas de fração de inerte pelo sistema Imuno-Wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Foram encontrados todos os sinais com falhas e normais apresentando uma taxa de acerto de 100%. A classificação de falhas detector 17 sinais com falha de fração de inerte e 25 sinais com falhas na concentração de reagente. Tal classificação, embora apresente uma taxa de acerto de apenas 68% e parece apresentar falsos positivos, não é o que parece. O sistema identificou 25 sinais com falhas na concentração, embora o parâmetro alterado seja a fração de inerte, fisicamente tal alteração influencia diretamente na concentração do reagente, já que são variáveis correlacionadas. Quanto maior ou menor a fração de inerte, menor ou maior será a concentração do reagente no meio. Dessa forma é possível dizer que o sistema classificou corretamente que os 25 sinais são falhas na concentração do reagente. Além disso, não são falsos positivos pois o algoritmo foi feito para que um sinal pudesse ser analisado em todas as classes diferentes, podendo ser identificado pertencendo a cada uma delas. Porém o sistema classificou apenas 17 sinais entre os 25 como falha na fração de inerte.

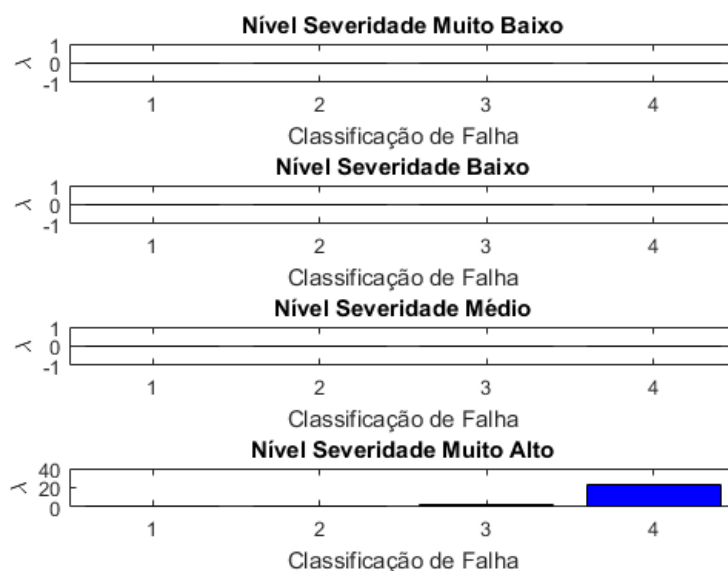
Quanto a quantificação: 1 sinal apresentou severidade baixa com probabilidade de falha alta, 4 sinais apresentaram severidade média, com probabilidade de falha alta, 20 sinais apresentaram severidade muito alta sendo 2 sinais com probabilidade alta e 18 sinais com probabilidade muito alta de falha.

Ainda que a maioria dos sinais esteja na severidade e probabilidade muito alta (72%), pode-se identificar uma mudança em relação aos demais tipos de falhas analisados, há uma possível explicação para isso. A característica do sinal da taxa de reação química variando a fração de inerte é diferente dos demais casos analisados. Enquanto a curva da taxa de reação química da variação da vazão, temperatura e concentração apresente translação com a variação dos seus parâmetros, a fração não apresenta tal característica.

Dessa forma, uma possível solução para aprimorar esses resultados seria a mesma apresentada anteriormente, analisar mais comportamentos como a temperatura ao longo do reator e a conversão. Além de aprimorar a quantificação, aprimoraria também a classificação.

Também foi feito no sistema sem wavelet e foi encontrado que todos os 25 sinais foram quantificados com severidade muito alta, dentro disso 2 com probabilidade alta de falha e 23 com probabilidade muito alta.

Figura 42 - Quantificação das falhas de fração de inerte pelo sistema sem Wavelet



Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Diferente dos demais casos, o sistema sem wavelet foi capaz de quantificar muito bem em nível de severidade e probabilidade de falha. Dessa forma, neste caso específico a transformada de wavelet acabou por reduzir a taxa da mediana e do desvio padrão entre os sinais analisados e os sinais padrão, devido a características do sinal analisado, as mudanças entre os sinais normais e com falhas já eram por padrão maiores que aplicando a transformada de wavelet.

6.3 RESUMO DOS RESULTADOS

Tabela 2 – Resumo dos resultados do sistema Imuno-Wavelet

Parâmetro da Falha	Acerto (%)	Classificação (%)	Sinais com severidade muito alta (%)
Vazão	100	100	100
Temperatura	100	92,6	85,2
Concentração	100	95	100
Fração de Inerte	100	68	80

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Por fim é possível ver que o sistema Imuno-Wavelet teve 100% de taxa de acerto identificando sinais com falhas e sinais normais independente do caso analisado. Além disso também teve uma ótima eficiência para a maioria dos casos em se classificar o tipo de falha mesmo analisando somente um único parâmetro (taxa de reação química). Por fim também foi extremamente eficaz em se quantificar os sinais sendo 2 dos 4 casos analisados com 100% dos sinais em severidade muito alta.

Além disso, há uma importante observação quanto ao menor valor de classificação no caso da fração de inerte. O sistema identificou 100% dos sinais como falhas na concentração, o que está de fato correto, toda falha da fração de inerte gera uma mudança na concentração de reagente. Ainda que o sistema tenha classificado apenas 17 das 25 falhas como falha na fração de inerte, ele conseguiu identificar que 25 das 25 falhas são falhas de concentração também, classificando os sinais em duas classes, corretamente.

Por fim, também é visto que todos os casos analisados tiveram o processamento realizado em menos de 0,1 segundo, explicitando sua eficiência no processamento.

7 CONCLUSÃO

Neste trabalho, foi possível realizar uma revisão bibliográfica sobre os reatores mais usuais com foco no reator de estudo, PFR. Além disso foi efetuada a criação do modelo numérico no software MATLAB, utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Então foram modificados os parâmetros de entrada para verificação de alteração do comportamento do reator. Tais mudanças geraram alterações esperadas no comportamento base do reator seguindo princípios físico-químicos e cinéticos, tais como o aumento da temperatura de entrada aumentar a temperatura ao longo do reator, diminuir a fração de inerte de entrada aumentou a temperatura final de saída do reator, aumentar a concentração de entrada elevou o valor máximo da taxa de reação, entre outros comportamentos descritos na seção Apresentação dos Resultados e Discussões.

O sistema Imuno-Wavelet se apresentou 100% eficaz em se detectar sinais com falhas, além de se demonstrar extremamente eficaz para se classificar e quantificar as falhas detectadas mesmo analisando somente um parâmetro do conjunto de dados. Como dito anteriormente, a classificação e quantificação podem ser melhoradas analisando mais de um parâmetro simultaneamente. No modelo do reator criado é possível se obter resultados de taxa de reação química, temperatura ao longo do reator e conversão do reagente ao longo do reator. Foram feitos os testes somente com a taxa de reação química e o sistema já se mostrou extremamente eficaz em todos os casos, analisando-se os demais parâmetros simultaneamente seria possível aprimorar ainda mais o sistema criado.

REFERÊNCIAS

ABREU, Cleyde Evangelista Maia et al. **Indústria 4.0: Como as empresas estão utilizando a simulação para se preparar para o futuro**. Revista de Ciências Exatas e Tecnologia, v. 12, n. 12, p. 49-53, 2017.

ALMEIDA, Tiago Agostinho; YAMAKAMI, Akebo; TAKAHASHI, Márcia Tomie. **Sistema imunológico artificial para resolver o problema da árvore geradora mínima com parâmetros fuzzy**. Pesquisa Operacional, v. 27, n. 1, p. 131-154, 2007.

BRADLEY, Daryl W.; TYRRELL, Andrew M. **Immunotronics-novel finite-state-machine architectures with built-in self-test using self-nonsel self differentiation**. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, v. 6, n. 3, p. 227-238, 2002.

CASTRO, L.N., **Engenharia Imunológica: Desenvolvimento e Aplicação de Ferramentas Computacionais Inspiradas em Sistemas Imunológicos Artificiais**, Tese (Doutorado) - Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, (2001).

CHAPRA, Steven C.; CANALE, Raymond P. **Métodos Numéricos para Engenharia** 7ª Edição. McGraw Hill Brasil, 2016.

DASGUPTA, Dipankar. **Artificial immune systems and their applications**. Springer Science & Business Media, 2012.

FERRARI, Tatiane C.; WEBER, Andressa C. H.; DALBERTO, Bianca T. et al. **Cinética e Projeto de Reatores Homogêneos**. Porto Alegre: SAGAH, 2022

FERREIRA, Julio Cesar et al. **Utilização da transformada de Wavelet para detectar variações anormais de frequência em sistemas de geração distribuída**. 2009.

FOGLER, H. S. **Cálculo de Reatores - O Essencial da Engenharia das Reações Químicas**. 1 Ed. Rio de Janeiro: LTC, 2014.

FORREST, S. A., PERELSON, A. L., CHERUKURI, R., **Self-nonsel Discrimination in a Computer**, In: Proceedings of the IEEE Symposium on Research in Security and Privacy, Oakland: IEEE, pp. 202-212, (1994).

FROMENT, Gilbert F.; BISCHOFF, Kenneth B.; DE WILDE, Juray. **Chemical reactor analysis and design**. 3 Ed. New York: Wiley, 1990.

JORQUEIRA, Diogo Silva Sanches. **Investigação de modelo pseudo-homogêneo para síntese da amônia: uso de uma abordagem composicional**. 2018. (142 p.) Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP.

LEVINSON, Warren. **Microbiologia Médica e Imunologia**. Porto Alegre: Grupo A, 2016.

LIMA, Fernando P.A.; MINUSSI, Carlos R. **Análise de distúrbios de tensão em sistemas de distribuição de energia elétrica usando o algoritmo de seleção negativa**. BRACIS-2012, ENIA, p. 1-12, 2012.

LIMA, Fernando PA et al. **Diagnóstico clínico de amostras de câncer de mama utilizando sistemas imunológicos artificiais com seleção negativa**. Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 1, n. 1, 2013.

LIMA, Fernando PA et al. **Reconhecimento de Caracteres Manuscritos Utilizando Sistemas Imunológicos Artificiais**. Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 2, n. 1, 2014.

LIMA, Fernando PA et al. **Monitoramento da Integridade de Estruturas Aeronáuticas Utilizando um Método Inteligente Baseado em Sistemas Imunológicos Artificiais**. Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 2, n. 1, 2014.

LIMA, Fernando Parra dos Anjos. **Monitoramento e identificação de falhas em estruturas aeronáuticas e mecânicas utilizando técnicas de computação inteligente**. 2014. 72 f. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, Faculdade de Engenharia de Ilha Solteira, 2014.

LIMA, Paulo Cupertino. **Wavelets: teoria, algoritmos e aplicações**. Belo Horizonte: Departamento de Matemática-ICEX–UFMG, 2004.

de OLIVEIRA, Andresa Moura, et al. **Mecanismo de ação das vacinas utilizadas para Covid-19 atualmente como uso emergencial no Brasil**. Revista Ibero-Americana de Humanidades, Ciências e Educação 7.11 (2021): 1087-1106.

PIRES, João Felipe de Moraes. MARTINS, Daiane Micaelly. COELHO, Filipe Alves. **Construção de reatores contínuos: Tanque agitado e Reator Tubular para avaliação de desempenho na reação de saponificação do Acetato de Etila**. Revista Científica Multidisciplinar Núcleo do Conhecimento. Ano 04, Ed. 10, Vol. 02, pp. 176-200. Outubro de 2019.

PITANGA, L.; DELUCA, F.; SILVA, M. B. **FUNCIONAMENTO DE UM REATOR PFR**. Anuário Pesquisa e Extensão Unoesc Videira, [S. l.], v. 2, p. e16267, 2017.

SANTOS, Driely Candido. **Método inteligente baseado em sistemas imunológicos artificiais aplicado ao monitoramento de falhas em um quadro de bicicletas**. 2020.

SCHULTZ, Guilhermina, et al. **Modelagem e simulação dos reatores químicos BR e PFR no EMSO e GNU Octave**. Enciclopédia Biosfera 10.18 (2014).

STEPHANOPOULOS, G. **Chemical process control: an introduction to theory and practice**. New Jersey: Prentice Hall, 19

TIMMIS, Jonathan Ian. **Artificial immune systems: A novel data analysis technique inspired by the immune network theory**. Diss. University of Wales, 2000.

APÊNDICE A – Algoritmos do Sistema Imuno-Wavelet

Figura 43 – Transformada de Wavelet

```

1 - clear all;
2 - clc;
3
4     %Carrega a matriz de dados normais
5 - load MN_rA;
6 - MN=MN_rA;
7 - J=1;
8 - t=size(MN);
9 - linha=t(1);
10 - coluna=t(2);
11 - for i=1:linha
12 -     dado=MN(i,1:16);
13 -     dtDWT1 = dddtree('dwt',dado,1,'farras');
14 -     MNF(i,:)=[dtDWT1.cfs{1} MN(i,t(2))];
15 - end
16
17     %Cria e salva a matriz transformada dos dados normais
18 - save MNF MNF;
19 - save MN_rA;
20
21
22     %Carrega a matriz de dados com falha
23 - load MF_rA;
24 - MF=MF_rA;
25 - J=1;
26 - t=size(MF);
27 - linha=t(1);
28 - coluna=t(2);
29 - for i=1:linha
30 -     dado=MF(i,1:16);
31 -     dtDWT1 = dddtree('dwt',dado,1,'farras');
32 -     MFF(i,:)=[dtDWT1.cfs{1} MF(i,t(2))];
33 - end
34
35     %Cria e salva a matriz transformada dos dados com falha
36 - save MFF MFF;
37 - save MF_rA;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 44 – SHM – Carrega os dados para análise

```

1 - clear all;
2 - clc;
3
4 %Carrega a matriz de dados com falha e dados normais com wavelet
5 - load MNF;
6 load MFF;
7
8 %Carrega a matriz de dados com falha e normal sem wavelet
9 %load MN_rA;
10 %load MF_rA;
11
12 %Apresenta a quantidade de dados normais e com falha que espera-se encontrar
13 - fprintf('Total de sinais normais...: %d \n', length(MNF));
14 - fprintf('Total de sinais com falhas: %d\n', length(MFF));
15 - x = length(MNF);
16 - y = length(MFF);
17 - fprintf('\n');
18
19 %Definida uma pausa de 3 segundos antes de começar o processamento apenas
20 %para visualizar a quantidade de sinais que estão sendo inputados no sistema
21 - pause(3)
22
23 %Marcação do tempo de processamento para análise
24 - tic;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 45 – SHM – Início do sensoriamento com sinais padrão

```

22  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
23  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%FASE DE CENSORIAMENTO%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
24  %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
25
26  %Início do Vetor de Detector padrao
27 - a = zeros(1,size(MNF,2));
28
29  %Primeiro vetor padrao finalizado com o numero de colunas iguais ao da
30  %matriz com dados da baseline
31 - cont = 0;
32 - for ii = 1:size(MNF,1)
33 -     for jj = 1:size(MNF,2)
34 -         v(jj) = MNF(ii,jj);%Vetor comparacao
35 -     end
36     %Retorna 0 se a for inteiramente diferente de v
37 -     t = verificacao(a,v);
38
39     if t == 0
40         cont = cont+1;
41 -         for kk = 1:size(MNF,2)
42 -             a(cont,kk) = v(kk);
43 -         end
44     end
45 - end
46
47  %FIM DO CENSORIAMENTO
48 - nivel125=0;
49 - nivel225=0;
50 - nivel325=0;
51 - nivel425=0;
52 - nivel150=0;
53 - nivel250=0;
54 - nivel350=0;
55 - nivel450=0;
56 - nivel175=0;
57 - nivel275=0;
58 - nivel375=0;
59 - nivel475=0;
60 - nivel1100=0;
61 - nivel2100=0;
62 - nivel3100=0;
63 - nivel4100=0;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 46 – SHM – Início do monitoramento e definição dos seus parâmetros

```

65      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
66      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%FASE DE MONITORAMENTO%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
67      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
68
69      %Transpoe a matriz de dados com falha
70 -    TMF=MFF';
71
72      %Calcula a mediana e o desvio dos dados da matriz
73 -    MedianaGeral=median(median(TMF));
74 -    DesvioGeral=std(std(TMF));
75
76      %Desvio dos receptores fixado em 3%
77 -    D = 0.03;
78
79      %calcula da taxa de afinidade em porcentagem
80 -    taf = (x)*100/(x+y);
81      %taf = input('Digite a taxa de afinidade (%):'); %Para teste com diferentes taf
82 -    if taf < 66.66
83 -        taf = 66.66;
84 -    end
85 -    taf=taf/100;
86
87      %Matriz com os vetores a serem analisados no total
88 -    for ii = 1:x %quantidade de dados em condicao normal
89 -        for jj = 1:size(MNF,2)
90 -            ma(ii,jj) = MNF(ii,jj);
91 -        end
92 -    end
93 -    for ii = 1:y %quantidade de dados em condicao de falha
94 -        for jj = 1:size(MNF,2)
95 -            ma(ii+x,jj) = MFF(ii,jj);
96 -        end
97 -    end
98      %Fim da matriz com os vetores a serem analisados.

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 47 – SHM – Carregamento do conjunto de detectores de falhas

```

100      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
101      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%COMPARACAO DOS SINAIS%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
102      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
103
104 -    normal = 0;
105 -    falha = 0;
106 -    falha_vazao = 0;
107 -    falha_temp = 0;
108 -    falha_conc = 0;
109 -    falha_frac = 0;
110
111      %Carrega o banco de dados de detectores de não-próprio
112 -    load vaz_dec
113 -    load temp_dec
114 -    load conc_dec
115 -    load frac_dec

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 48 – SHM – Comparação e classificação dos sinais analisados

```

117 - for ii = 1:size(ma,1)
118 -     %cria um vetor de cada linha da matriz geral de dados
119 -     for jj = 1:size(MNF,2)
120 -         ve(jj)= ma(ii,jj);
121 -     end
122 -
123 -     %função que retorna 0 se o sinal for normal
124 -     r = verificacaol(ve,a,D,taf);
125 -
126 -     %função que retorna 0 se o sinal for anormal nas 4 seguintes classes
127 -     vaz = verificacaol(ve,vaz_dec,D,taf);
128 -     temp = verificacaol(ve,temp_dec,D,taf);
129 -     conc = verificacaol(ve,conc_dec,D,taf);
130 -     frac = verificacaol(ve,frac_dec,D,taf);
131 -
132 -     %calcula o desvio e da mediana do sinal
133 -     DesvioSinal=std(ve(1,:));
134 -     MedianaSinal=median(ve(1,:));
135 -
136 -     %Taxa entre o desvio e da mediana do sinal e da matriz geral
137 -     TaxaDesvio = (DesvioSinal/DesvioGeral)*100;
138 -     TaxaMediana = (MedianaSinal/MedianaGeral)*100;
139 -
140 -     %Contabiliza quantos sinais com falha e quantos sinais normais
141 -     if r==0
142 -         normal = normal+1;
143 -     elseif r==1
144 -         falha = falha+1;
145 -         if vaz==0
146 -             falha_vazao = falha_vazao+1;
147 -         elseif temp==0
148 -             falha_temp = falha_temp+1;
149 -         elseif conc==0
150 -             falha_conc = falha+conc+1;
151 -         elseif frac==0
152 -             falha_frac = falha_frac+1;
153 -         end

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 49 – SHM - Quantificação da falha quanto a severidade e probabilidade

```

154 %Quantificação de Falha %
155 %Severidade Muito Baixa
156 if TaxaDesvio<25
157     %Probabilidade de falha baixa
158     if TaxaMediana<25
159         nivel125 = nivel125+1;
160     %Probabilidade de falha moderada
161     elseif TaxaMediana<50
162         nivel225 = nivel225+1;
163     %Probabilidade de falha alta
164     elseif TaxaMediana<75
165         nivel325 = nivel325+1;
166     %Probabilidade de falha muito alta
167     else
168         nivel425 = nivel425+1;
169     end
170 %Severidade Baixa
171 elseif TaxaDesvio<50
172     %Probabilidade de falha baixa
173     if TaxaMediana<25
174         nivel150 = nivel150+1;
175     %Probabilidade de falha moderada
176     elseif TaxaMediana<50
177         nivel250 = nivel250+1;
178     %Probabilidade de falha alta
179     elseif TaxaMediana<75
180         nivel350 = nivel350+1;
181     %Probabilidade de falha muito alta
182     else
183         nivel450 = nivel450+1;
184     end
185 end
186

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 50 – SHM – Continuação da quantificação da falha

```

195 %Severidade Media
196 elseif TaxaDesvio<75
197
198 %Probabilidade de falha baixa
199 if TaxaMediana<25
200     nivel175 = nivel175+1;
201
202 %Probabilidade de falha moderada
203 elseif TaxaMediana<50
204     nivel275 = nivel275+1;
205
206 %Probabilidade de falha alta
207 elseif TaxaMediana<75
208     nivel375 = nivel375+1;
209
210 %Probabilidade de falha muito alta
211 else
212     nivel475 = nivel475+1;
213 end
214
215 %Severidade Alta
216 else
217
218 %Probabilidade de falha baixa
219 if TaxaMediana<25
220     nivel1100 = nivel1100+1;
221
222 %Probabilidade de falha moderada
223 elseif TaxaMediana<50
224     nivel2100 = nivel2100+1;
225
226 %Probabilidade de falha alta
227 elseif TaxaMediana<75
228     nivel3100 = nivel3100+1;
229
230 %Probabilidade de falha muito alta
231 else
232     nivel4100 = nivel4100+1;
233 end
234 end
235 end
236 end

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 51 – SHM – Impressão dos resultados obtidos

```

238      %Fim comparacao
239 -    tempo = toc;
240 -    z = 100-(normal-x)*100/(x+y);
241
242      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
243      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%RESULTADOS%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
244      %%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
245
246      clc;
247 -    fprintf('\n##### SISTEMA DE SHM #####\n');
248 -    fprintf('Sinais da estrutura em condicao normal.: %d \n',normal);
249 -    fprintf('Sinais da estrutura em condicao de falha.: %d \n',falha);
250 -    fprintf('Sinais com falha de vazão de entrada: %d\n', falha_vazao);
251 -    fprintf('Sinais com falha na temperatura de entrada: %d\n', falha_temp);
252 -    fprintf('Sinais com falha na concentração de entrada: %d\n', falha_conc);
253 -    fprintf('Sinais com falha na fração de inerte de entrada: %d\n', falha_frac);
254
255 -    fprintf('===== \n');
256 -    fprintf('Tempo de processamento.: %8.6f \n', tempo);
257 -    fprintf('Acerto em porcentagem.: %5.2f \n',z);
258 -    fprintf('Taxa de afinidade.: %6.4f \n',taf);
259
260 -    fprintf('\nClassificação dos dados\n');
261 -    fprintf('===== \n');
262 -    fprintf('\tSinais Sem Falha.....: %d \n',normal);
263 -    fprintf('\tSinais Com Falha.....: %d \n',falha);
264
265 -    fprintf('\tNivel Severidade Muito Baixo \n');
266 -    fprintf('\t\tProbabilidade de falha baixa.....: %d \n', nivel125);
267 -    fprintf('\t\tProbabilidade de falha moderada...: %d \n',nivel225);
268 -    fprintf('\t\tProbabilifade de falha alta.....: %d \n',nivel325);
269 -    fprintf('\t\tProbabilifade de falha muito alta.: %d \n',nivel425);
270
271 -    fprintf('\tNivel Severidade Baixo \n');
272 -    fprintf('\t\tProbabilidade de falha baixa.....: %d \n', nivel150);
273 -    fprintf('\t\tProbabilidade de falha moderada...: %d \n',nivel250);
274 -    fprintf('\t\tProbabilifade de falha alta.....: %d \n',nivel350);
275 -    fprintf('\t\tProbabilifade de falha muito alta.: %d \n',nivel450);
276

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 52 – SHM - Continuação da impressão dos resultados obtidos

```

277 - fprintf('\t\tNivel Severidade Médio \n');
278 - fprintf('\t\tProbabilidade de falha baixa.....: %d \n', nivel175);
279 - fprintf('\t\tProbabilidade de falha moderada....: %d \n', nivel275);
280 - fprintf('\t\tProbabilifade de falha alta.....: %d \n', nivel375);
281 - fprintf('\t\tProbabilifade de falha muito alta.: %d \n', nivel475);
282
283 - fprintf('\t\tNivel Severidade Alto \n');
284 - fprintf('\t\tProbabilidade de falha baixa.....: %d \n', nivel1100);
285 - fprintf('\t\tProbabilidade de falha moderada....: %d \n', nivel2100);
286 - fprintf('\t\tProbabilifade de falha alta.....: %d \n', nivel3100);
287 - fprintf('\t\tProbabilifade de falha muito alta.: %d \n', nivel4100);
288
289
290 - figure(1)
291 - grafico = [nivel125,nivel225,nivel325,nivel425,nivel150,nivel250,nivel350,nivel450,nivel175,nivel275,nivel375,nivel475,nivel1100,nivel2100,nivel3100,nivel4100];
292 - subplot(4,1,1), bar(grafico(1:4),'black'), colormap(cool)
293 - title('Nivel Severidade Muito Baixo');
294 - ylabel('\lambda');
295 - xlabel('Classificação de Falha');
296 - subplot(4,1,2), bar(grafico(5:8),'red'), colormap(cool)
297 - title('Nivel Severidade Baixo');
298 - ylabel('\lambda');
299 - xlabel('Classificação de Falha');
300 - subplot(4,1,3), bar(grafico(9:12),'green'), colormap(cool)
301 - title('Nivel Severidade Médio');
302 - ylabel('\lambda');
303 - xlabel('Classificação de Falha');
304 - subplot(4,1,4), bar(grafico(13:16),'blue'), colormap(cool)
305 - title('Nivel Severidade Muito Alto');
306 - ylabel('\lambda');
307 - xlabel('Classificação de Falha');
308 - set(gcf, 'Color', 'white');
309 - box on;

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 53 – Criação de detectores de falha de vazão

```

1 - clear all
2 - clc
3
4 - load MFF;
5
6 - %Início do Vetor de Detector Não-Próprio
7 - vaz_dec = zeros(1,size(MFF,2));
8
9 - %Primeiro vetor padrao finalizado com o numero de colunas iguais ao da
10 - %matriz com dados da baseline
11 - cont = 0;
12 - for ii = 1:size(MFF,1)
13 -     for jj = 1:size(MFF,2)
14 -         v(jj) = MFF(ii,jj); %Vetor comparacao
15 -     end
16 -     %Retorna 0 se vaz_dec for inteiramente diferente de v
17 -     t = verificacao(vaz_dec,v);
18
19 -     if t == 0
20 -         cont = cont+1;
21 -         for kk = 1:size(MFF,2)
22 -             vaz_dec(cont,kk) = v(kk);
23 -         end
24 -     end
25 - end
26
27 - %Salva o conjunto de detectores de falha de vazao
28 - save vaz_dec vaz_dec;
29
30 - %FIM DO CENSORIAMENTO

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 54 – Criação de detectores de falha de temperatura

```

1 - clear all
2 - clc
3
4 - load MFF;
5
6 %Início do Vetor de Detector Não-Próprio
7 - temp_dec = zeros(1,size(MFF,2));
8
9 %Primeiro vetor padrao finalizado com o numero de colunas iguais ao da
10 %matriz com dados da baseline
11 - cont = 0;
12 - for ii = 1:size(MFF,1)
13 -     for jj = 1:size(MFF,2)
14 -         v(jj) = MFF(ii,jj);%Vetor comparacao
15 -     end
16     %Retorna 0 se vaz_dec for inteiramente diferente de v
17     t = verificacao(temp_dec,v);
18
19     if t == 0
20         cont = cont+1;
21         for kk = 1:size(MFF,2)
22             temp_dec(cont,kk) = v(kk);
23         end
24     end
25 - end
26
27 - save temp_dec temp_dec;
28 %FIM DO CENSORIAMENTO

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 55 - Criação de detectores de falha de fração de inerte

```

1 - clear all
2 - clc
3
4 - load MFF;
5
6 %Início do Vetor de Detector Não-Próprio
7 - frac_dec = zeros(1,size(MFF,2));
8
9 %Primeiro vetor padrao finalizado com o numero de colunas iguais ao da
10 %matriz com dados da baseline
11 - cont = 0;
12 - for ii = 1:size(MFF,1)
13 -     for jj = 1:size(MFF,2)
14 -         v(jj) = MFF(ii,jj);%Vetor comparacao
15 -     end
16     %Retorna 0 se vaz_dec for inteiramente diferente de v
17     t = verificacao(frac_dec,v);
18
19     if t == 0
20         cont = cont+1;
21         for kk = 1:size(MFF,2)
22             frac_dec(cont,kk) = v(kk);
23         end
24     end
25 - end
26
27 - save frac_dec frac_dec;
28 %FIM DO CENSORIAMENTO

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.

Figura 56 - Criação de detectores de falha de concentração de reagente

```

1 - clear all
2 - clc
3
4 - load MFF;
5
6 %Início do Vetor de Detector Não-Próprio
7 - conc_dec = zeros(1,size(MFF,2));
8
9 %Primeiro vetor padrao finalizado com o numero de colunas iguais ao da
10 %matriz com dados da baseline
11 - cont = 0;
12 - for ii = 1:size(MFF,1)
13 -     for jj = 1:size(MFF,2)
14 -         v(jj) = MFF(ii,jj);%Vetor comparacao
15 -     end
16     %Retorna 0 se vaz_dec for inteiramente diferente de v
17     t = verificacao(conc_dec,v);
18
19     if t == 0
20         cont = cont+1;
21         for kk = 1:size(MFF,2)
22             conc_dec(cont,kk) = v(kk);
23         end
24     end
25 end
26
27 - save conc_dec conc_dec;
28 %FIM DO CENSORIAMENTO

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2023.