

RECONCILIAÇÃO DE DADOS PARA ESTIMAR A VAZÃO DE ÁGUA DE ALIMENTAÇÃO DE UMA USINA NUCLEAR TIPO PWR UTILIZANDO UM ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO COM INSPIRAÇÃO QUÂNTICA

Alexandre Magalhães

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientador: Roberto Schirru

Rio de Janeiro Junho de 2013

RECONCILIAÇÃO DE DADOS PARA ESTIMAR A VAZÃO DE ÁGUA DE ALIMENTAÇÃO DE UMA USINA NUCLEAR TIPO PWR UTILIZANDO UM ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO COM INSPIRAÇÃO QUÂNTICA

Alexandre Magalhães

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

Examinada por:

Prof. Roberto Schirru, D. Sc.

Prof. José Antônio Carlos Canedo Medeiros, D. Sc.

Prof. Antônio César Ferreira Guimarães, D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL JUNHO DE 2013 Magalhães, Alexandre

Reconciliação de Dados para Estimar a Vazão de Água de Alimentação de uma Usina Nuclear Tipo PWR Utilizando um Algoritmo de Otimização com Inspiração Quântica/ Alexandre Magalhães. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XIII, 63 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Roberto Schirru

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 59-63.

Reconciliação de Dados. 2. Erros Aleatórios e Erros
 Grosseiros. 3. Reconciliação Robusta de Dados. 4.
 Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica I.
 Schirru, Roberto. II. Universidade Federal do Rio de
 Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III.
 Título.

DEDICATÓRIA

À memória dos meus pais, Pedro e Cirlene, à minha esposa Renata e à minha filha Luiza.

AGRADECIMENTOS

Finalizar este trabalho foi um grande desafio, pois foi necessário superar os vários obstáculos presentes a cada fase do curso. Foi necessário superar a distância entre Angra e Rio. Foi preciso conciliar os horários do trabalho na Eletronuclear com o do curso. E por fim, lidar com a insegurança de não conseguir finalizá-lo. Porém, devido ao apoio de algumas pessoas com as quais pude contar, foi possível concluir este trabalho. Por isso deixo registrado os meus agradecimentos:

Ao professor Roberto Schirru, que foi meu orientador e dispensou toda atenção da qual precisei para concluir este trabalho. E me ensinou que devo persistir sempre e jamais desistir.

Aos amigos e também alunos de mestrado, Douglas Ribeiro Salmon e Frederico Guilherme Roedel, pelo companheirismo, parceria e incentivo em todas as fases do curso.

A colega e aluna de doutorado, Andressa dos Santos Nicolau, pelo apoio, incentivo e paciência que demonstrou sempre que precisei de sua ajuda.

Aos funcionários e todo corpo docente do Programa de Energia Nuclear da COPPE pelo apoio e incentivo.

Aos amigos da I&C de Angra 1 que sempre me incentivaram.

E por fim, a minha esposa Renata e a minha filha Luiza que sempre me incentivaram, que foram pacientes e compreensivas quando estive ausente.

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

RECONCILIAÇÃO DE DADOS PARA ESTIMAR A VAZÃO DE ÁGUA DE ALIMENTAÇÃO DE UMA USINA NUCLEAR TIPO PWR UTILIZANDO UM ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO COM INSPIRAÇÃO QUÂNTICA

Alexandre Magalhães

Junho/2013

Orientador: Roberto Schirru

Programa: Engenharia Nuclear

A reconciliação de dados é uma técnica usada para estimar os valores verdadeiros das variáveis medidas de um processo que satisfaçam o modelo matemático que o representa. Neste trabalho é apresentada uma metodologia de reconciliação de dados baseada no Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica (QEA) para minimizar a função objetivo constituída do somatório da diferença quadrática entre os valores medidos e os valores estimados. Esta metodologia foi utilizada para resolver o exemplo do Apêndice A da norma alemã VDI-2048. Este exemplo consiste de um problema de balanço de massas de um sistema linear, cujo objetivo é estimar o valor verdadeiro da vazão de água de alimentação do circuito secundário de uma usina nuclear tipo PWR através da técnica de reconciliação de dados clássica considerando a presença de erros sistemáticos em algumas variáveis. A técnica de reconciliação de dados clássica é realizada através da utilização de cálculos matemáticos complexos como, por exemplo, inversão de matrizes e derivadas parciais. Neste trabalho, o problema foi resolvido considerando a presença de erros aleatórios e o algoritmo proposto foi capaz de obter a solução correta, satisfazendo as restrições do processo e fechando o balanco de massas, demonstrando assim sua viabilidade para ser utilizado em casos reais de reator PWR.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M. Sc.)

DATA RECONCILIATION TO ESTIMATE THE FEEDWATER FLOW OF THE NUCLEAR POWER PLANT TYPE PWR USING AN OPTIMIZATION ALGORITHM WITH QUANTUM INSPIRATION

Alexandre Magalhães

June/2013

Advisor: Roberto Schirru

Department: Nuclear Engineering

The data reconciliation is a technique used to estimate the true values of the measured variables of a process that satisfying mathematical model that represents it. This work presents a methodology for data reconciliation based on Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm (QEA) to minimize the objective function that consists of the sum of the square difference between the measured values and estimated values. This methodology was used to solve the example of Appendix A of the VDI-2048 standard. This example consists of a mass balance problem of a linear system, whose aim is to estimate the true value of feed water flow of the Nuclear Power Plant type PWR using the technique of classical data reconciliation is accomplished through the use of complex mathematical calculations such as, matrix inversion and partial derivatives. In this work, the problem was solved considering the presence of random errors and the proposed algorithm was able to get the right solution, satisfying the constraints of the process and closing the mass balance, thus demonstrating its feasibility for use in real applications in PWR reactor.

SUMÁRIO

Capítulo 1 – Introdução1
1.1 – Motivação e Objetivo1
1.2 – Estrutura
Capítulo 2 – Fundamentação Teórica10
2.1 – Reconciliação de Dados10
2.1.1 – Formulação Geral da Técnica de Reconciliação de Dados 12
2.1.2 – Classificação das Variáveis
2.1.3 – Erro Aleatório
2.1.4 – Erros Grosseiros
2.1.5 – Detecção de Erros Grosseiros
2.1.6 – Reconciliação Robusta de Dados
Capítulo 3 – Correção da Vazão de Água de Alimentação
3.1 – Cálculo da Potência Térmica do Reator
3.2 – Exemplo do Apêndice A da Norma VDI-2048
3.3 - Reconciliação de Dados Modelo Clássico usada no Exemplo da
Norma VDI 2048
Capítulo 4 – Metodologia 41
4.1 – Considerações
4.2 – Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica
4.2.1 – Fundamentos do Algoritmo Evolucionário com Inspiração
Quântica
4.2.2 – Forma Canônica do Algoritmo Evolucionário com Inspiração
Quântica
4.2.3 – Operador Portão Quântico
4.2.4 – Operador Portão Quântico H_{ε} 49
4.3 – Modelagem dos Parâmetros do QEA 50

Capítulo 5 – Análise e Resultados	52
5.1 – Considerações	52
5.2 – Estratégia de Parametrização do QEA	53
5.3 – Resultado do Primeiro Teste	54
5.4 – Resultado do Segundo Teste	55
Capítulo 6 – Conclusões	57
Capítulo 7 – Referências Bibliográficas	59

NOMENCLATURA

Símbolos Descrição

f	Condições auxiliares
σ	Desvio padrão
h_{FW}	Entalpia da água de alimentação
h_{BD}	Entalpia da purga do GV
h _{ST}	Entalpia do vapor principal
g	Equação de desigualdade
h	Equação de igualdade
e _r	Erro aleatório
e_s	Erro sistemático
f	Função densidade de probabilidade
Fo	Função objetivo
i, j, k	Índices de contagem
V_x	Intervalo de confiança
L	Limite inferior
U	Limite superior
S_v	Matriz de covariância dos valores de correção
$S_{\overline{X}}$	Matriz de covariância dos valores estimados
\boldsymbol{S}_X	Matriz empírica de covariância das variáveis medidas
F	Matriz funcional das condições auxiliares
Σ_X	Matriz real de covariância das variáveis medidas
r	Número de condições auxiliares
т	Número de bits e Q-bits de uma string
т	Número de valores medidos das variáveis medidas
n	Número de indivíduos de uma população
n	Número de variáveis medidas
p	Parâmetros do processo
\dot{Q}_{GV}	Potência térmica do gerador de vapor
\dot{Q}_M	Potência térmica do moderador

\dot{Q}_R	Potência térmica do reator
\dot{Q}_P	Potência térmica do sistema de purificação
t	Tempo
\dot{Q}_{const}	Termo constante
v	Valores de correção
σ_i^2	Variância da i-ésima medida
\bar{x}	Variáveis estimadas
x	Variável medida
u	Variável não medida
μ	Variável verdadeira
\dot{m}_{A5}	Vazão da extração A5
\dot{m}_{A6}	Vazão da extração A6
\dot{m}_{A7}	Vazão da extração A7
\dot{m}_{BD}	Vazão da purga do GV
\dot{m}_D	Vazão da turbina de alta para a turbina de baixa pressão
ṁ _{SpI}	Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 1
ṁ _{SpII}	Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 2
\dot{m}_{FW}	Vazão de água de alimentação para o GV
\dot{m}_{HK}	Vazão de condensado
\dot{m}_{HD-NK}	Vazão de retorno de condensado
\dot{m}_{FD-Kel}	Vazão de vapor do gerador de vapor 1
$\dot{m}_{FD-KeII}$	Vazão de vapor do gerador de vapor 2
\dot{m}_{ST}	Vazão de vapor principal do GV
\dot{m}_V	Vazão total das perdas
р	Valor da função de probabilidade
f	Vetor das condições auxiliares
k	Vetor dos multiplicadores de Lagrange
\overline{x}	Vetor das variáveis estimadas
X	Vetor da variável aleatória multidimensional
x	Vetor das variáveis medidas
u	Vetor das variáveis não medidas
μ	Vetor das variáveis verdadeiras

- *p* Vetor dos parâmetros do processo
- *v* Vetor dos valores de correção

Siglas Descrição (descrição original) AICR Critério de Informação de Akaike Robusto PSO Algoritmo de Otimização por Enxames de Partículas (*Particle Swarm Optimization*)

- EA Algoritmo Evolucionário (Evolutionary Algorithm)
- QEA Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica (*Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm*)
- GA Algoritmo Genético (Genetic Algorithm)
- BRR Bomba de Refrigeração do Reator
- DEG Detecção de Erros Grosseiros
- EDF Électricité de France
- GV Gerador de Vapor
- MQP Mínimos Quadrados Ponderados
- PWR Reator a Água Pressurizada (*Pressurized Water Reactor*)
- RD Reconciliação de Dados
- FSAR Relatório Final de Análise de Segurança (Final Safety Analysis Report)
- UBET Técnica de Estimação Não Desviada (Unbiased Estimation Technique)

Capítulo 1 – Introdução

1.1 – Motivação e Objetivo

Em qualquer instalação industrial a medição precisa e exata das variáveis envolvidas nos processos é de primordial importância para garantir a segurança e a eficiência da planta, tornando-a mais produtiva.

A medição das variáveis envolvidas nos processos é realizada através de malhas de instrumentação e controle, que são responsáveis por disponibilizar os valores medidos para supervisão, controle e avaliação do desempenho da planta.

A crescente evolução tecnológica tem permitido realizar projetos de instrumentação e controle capazes de monitorar e controlar de forma integrada um número cada vez maior de variáveis, o que gera uma quantidade enorme de dados. No entanto, o uso de grandes quantidades de dados pode requerer a aplicação de técnicas adequadas para aumentar a sua precisão (WANG e ROMAGNOLI, 2003).

Como as medições das variáveis são realizadas por instrumentos físicos e rotinas de medição que apresentam precisão finita, os valores medidos são inevitavelmente corrompidos por erros aleatórios, além das naturais variabilidades inerentes ao processo causadas por perturbações não controladas nas muitas variáveis envolvidas na operação da planta (PRATA, 2009).

Geralmente, a redução da variação gerada pelos erros aleatórios (ou ruídos aleatórios) nas medições das variáveis dos processos é realizada por um procedimento conhecido como filtragem ou suavização. Porém, quando as estimativas devem satisfazer restrições físicas, o procedimento passa a se chamar reconciliação de dados (RD) (DEVANATHAN *et al.*, 2000).

Entende-se por erros aleatórios aqueles normalmente distribuídos com média igual a zero e variância conhecida, o que permite definir uma base estatística para este tipo de erro. Geralmente este tipo de erro tem pequena magnitude e sua presença está associada com a precisão dos instrumentos de medição e com fatores inerentes ao processo que determinarão a variância da variável medida.

A presença deste tipo de erro gera uma diferença entre o valor medido e o valor verdadeiro de uma variável impedindo que a equação de balanço feche, ou seja, o modelo matemático que representa o modelo físico do processo não é satisfeito. A técnica de RD permite ajustar os valores das medidas realizadas para que a equação de balanço feche.

O objetivo principal da técnica de RD é reduzir a variância das variáveis do processo, aumentando a precisão e fechando a equação de balanço. Isto significa tratar especificamente o erro aleatório presente nas medidas.

A técnica de RD atinge o objetivo definido acima minimizando a função objetivo do erro sujeita às restrições do processo, ou seja, trata-se de um problema de otimização. A maioria dos trabalhos descritos na literatura sobre as técnicas de RD usa a função dos mínimos quadrados ponderados (MQP) como função objetivo.

KUHEN e DAVIDSON (1961) aplicaram uma técnica de RD baseada no uso de multiplicadores de Lagrange, um método usado na resolução de problemas de otimização, para resolver um problema representado por um modelo linear de um processo em estado estacionário.

Além dos erros aleatórios, outros fatores interferem na precisão e exatidão das medidas das variáveis, causando incerteza nas mesmas. São os chamados erros grosseiros. De acordo com CHEN e ROMAGNOLI (1998), estes tipos de erros têm maior magnitude e se apresentam de duas maneiras: sistemáticos (*bias*) e espúrios (*outlier*).

O erro grosseiro do tipo sistemático pode ser definido como a diferença entre a média de um determinado número de medições e o valor verdadeiro da variável. Este erro é caracterizado por um valor acima ou abaixo do que deve ser o valor verdadeiro da variável medida. Desta forma, a presença do erro sistemático faz com que a média de um conjunto de medições se afaste do valor verdadeiro da variável medida, afetando a exatidão do resultado. Geralmente este erro ocorre em função de uma causa constante, como por exemplo, instrumento de medição descalibrado ou instalação inadequada do mesmo (LIEBMAN *et al.*, 1992, McBRAYER e EDGAR, 1995).

O erro grosseiro do tipo espúrio normalmente tem maior magnitude e ocorre com menor frequência em comparação com o erro aleatório A presença deste tipo de erro nas medições das variáveis de um processo compromete a correta estimativa da média e da variância, e também dificulta a determinação de uma base estatística para a distribuição da amostra de dados. Geralmente este tipo de erro tem sua origem determinada por eventos esporádicos causados por problemas na instrumentação ou no processo. Este tipo de erro não tem nenhuma relação com a precisão do instrumento de medição.

A utilização da técnica de RD para estimar os valores verdadeiros das variáveis de um processo sujeitos apenas a erros aleatórios resulta em pequenos ajustes nos valores medidos dentro de um limite considerado aceitável. Já na presença de erros grosseiros, os ajustes tornam-se expressivos, e os valores reconciliados podem não representar a realidade do processo, pois possivelmente estão sob a influência de falhas de instrumentos ou do próprio processo. Esses ajustes excessivos podem ser refletidos nas outras medições, em um efeito conhecido como *smearing*, ou contaminação das medições (FELDMAN, 2007).

Para evitar o efeito *smearing* é utilizada a técnica de detecção do erro grosseiro (DEG), que é uma etapa a ser realizada antes da efetiva aplicação da técnica de RD. Como a presença do erro espúrio dificulta a determinação de uma base estatística conhecida para a distribuição dos dados das medições das variáveis e invalida a distribuição Normal geralmente considerada para os erros aleatórios, a detecção deste tipo de erro tem sido o foco de inúmeros trabalhos realizados sobre reconciliação de dados (FELDMAN, 2007).

O método comumente usado para detecção de valores espúrios é o teste estatístico de hipótese, o qual requer a seleção de uma base estatística com uma distribuição conhecida (ou assumida) para a realização do teste. A detecção de um valor espúrio ocorre quando o teste estatístico calculado excede um valor crítico, o qual é selecionado de uma tabela de valores para a distribuição assumida, dado um nível de confiança (PRATA, 2009).

De acordo com McBRAYER *et al* (1995), poucos pesquisadores têm se importado em desenvolver técnicas para detectar desvios sistemáticos. Para detectar medidas com desvio sistemático, ROLLINS e DAVIS (1992) propuseram a Técnica de Estimação Não Desviada (UBET). Esta técnica é restrita à hipótese de estado estacionário e restrições lineares. No exemplo do Apêndice A da norma alemã VDI-2048, usado como referência para este trabalho, os erros sistemáticos presentes em algumas variáveis foram tratados como erro aleatório e o problema de reconciliação de dados foi resolvido utilizando o método de multiplicadores de Lagrange associado com um teste de hipótese baseado na distribuição Chi-Quadrado (VDI-2048, 2000).

Outros métodos para DEG são relatados na literatura. Tais como o método de Broyden proposto por PAI e FISHER (1988), que evita calcular o Jacobiano várias vezes e o método utilizado por TJOA e BIEGLER (1991), que utiliza programação quadrática adaptada para utilizar a estrutura da função objetivo, tornando-a uma função de distribuição bivariada.

Uma etapa importante antes de aplicar a técnica de RD é a classificação das variáveis do processo. Por questões técnicas e até mesmo econômicas, não é possível medir todas as variáveis. Sendo assim, é importante saber se as variáveis não medidas podem ser estimadas através das medidas, ou se em caso de falha de algum instrumento de medição, a variável pode ser estimada (CABRAL, 2009). Outro fator importante em relação à classificação das variáveis é quanto à redundância. Visto que, quanto maior for o número de fontes de medição da mesma variável, mais fácil será identificar os erros grosseiros do tipo sistemático, usando a redundância como condição auxiliar.

Muitos pesquisadores têm se dedicado à pesquisa de funções objetivo que sejam pouco influenciadas pela presença dos erros grosseiros do tipo espúrio quando minimizadas. Este tipo de função objetivo permite que a técnica de RD seja realizada simultaneamente com a DEG. Nestes casos, a reconciliação de dados é chamada de robusta.

Uma função objetivo baseada na distribuição Normal Contaminada foi proposta por TJOA e BIEGLER (1991) para a simultânea reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros. Neste caso, os erros grosseiros são ignorados durante a minimização e as estimações são baseadas apenas em valores definidos como corretos pelo método.

YAMAMURA *et al.* (1988) propuseram uma técnica de RD com simultânea DEG baseada no Critério de Informação de Akaike combinado com a função dos mínimos quadrados ponderados. Este método utiliza a função dos mínimos quadrados ponderados modificada pela adição explícita do número de erros grosseiros. Este método divide as variáveis medidas em duas classes: com erros aleatórios e com erros grosseiros.

Baseando-se nos trabalhos prévios de HUBER (1981) e HAMPEL (1974), relacionados com estimação robusta, regressão robusta e função de influência, JOHNSTON e KRAMER (1995) propuseram uma abordagem para RD e DEG denominada retificação por máxima verossimilhança.

Segundo ARORA e BIEGLER (2001), quando a função objetivo é um estimador robusto, a mesma pode ser não linear e não convexa. Sendo assim, a solução obtida com um algoritmo de otimização determinístico pode ser um mínimo local. Para evitar esta situação, é necessário utilizar um método de otimização global.

Desta maneira, algoritmos de otimização baseados na teoria evolucionária, como Algoritmo Genético (GA), têm se tornado uma ferramenta viável quando aplicados à Reconciliação Robusta de Dados e DEG devido as suas características simples como o uso de equações algébricas e a ausência do cálculo do Jacobiano, como nos métodos precursores (VALDETARO, 2012).

Normalmente, os métodos de minimização utilizados nas técnicas tradicionais de RD são métodos determinísticos de otimização em que uma boa estimativa inicial das variáveis define a trajetória de busca para o mínimo da função objetivo. Esta característica influencia na convergência da função objetivo, levando-a prematuramente para um ótimo local em alguns casos (PRATA, 2009).

As principais vantagens dos métodos determinísticos são a rápida convergência e a boa precisão na busca pela solução do problema. Entretanto, este tipo de método apresenta algumas desvantagens, como por exemplo, necessidade de cálculo de derivadas, podem apresentar mínimos locais e grande dificuldade de implementação em problemas práticos.

Em função das dificuldades apresentadas pelos métodos determinísticos na solução de problemas práticos, surgiram os métodos não determinísticos, também conhecidos como probabilísticos ou exploratórios, que apresentam um caráter aleatório na busca da solução ótima do problema. Estes métodos são caracterizados por realizarem uma busca global em toda a região de interesse e por apresentarem um grande número de avaliações da função objetivo. Isto resulta em um custo e tempo computacionais muito maiores em comparação como os métodos de otimização tradicionais. Além disto, estes métodos não requerem o cálculo de derivadas (PRATA, 2009).

Desta maneira, o uso da técnica de RD com simultânea detecção de erros grosseiros do tipo espúrio, baseada no uso de funções objetivo oriundas da estatística robusta e combinadas com algoritmos de otimização não determinísticos, tem se tornando uma nova tendência. Sendo assim, é possível que métodos baseados na teoria evolucionária, como por exemplo, Algoritmo Genético (GA) entre outros, possam ser um caminho a ser seguido no desenvolvimento de novas técnicas para RD com simultânea DEG.

Alguns trabalhos já demonstram esta tendência. WONGRAT *et al.* (2005) utilizaram o método de otimização não determinístico do Algoritmo Genético (GA) (GOLDBERG, 1989) para minimizar os efeitos dos erros grosseiros sobre um sistema estacionário com restrições não lineares, utilizando o estimador robusto de Hampel. VALDETARO (2012) propôs o uso do algoritmo de otimização por enxame de partículas (PSO) em substituição ao algoritmo genético, usando também o estimador robusto de Hampel e obtive um resultado melhor em relação ao tempo de execução. PRATA (2009) também utilizou o algoritmo por exame de partículas (PSO) combinado com o estimador robusto de Welsch para aplicar a técnica de RD em um reator industrial de produção de polipropileno.

Como a aplicação da técnica de RD diminui a incerteza das medidas das variáveis, aumentando a exatidão e precisão das mesmas, tornou-se interessante utilizar esta técnica na determinação da potência térmica de reatores nucleares. Na usina nuclear de Angra 1 o limite de segurança é de 102 % de potência (capítulo 15 do FSAR – Final Safety Analysis Report). Este limite é estabelecido pelas condições de resfriamento do núcleo em emergência. Além de garantir a segurança da planta, existe a questão econômica, que advém do fato de que após a aplicação da técnica de RD, é possível que se possa elevar a potência da planta em alguns percentuais.

A maior dificuldade para o cálculo da potência térmica de um reator nuclear está em medir com precisão e exatidão a variável vazão de água de alimentação do circuito secundário. Geralmente a instrumentação empregada para medição da variável vazão de água de alimentação usa como elemento primário de medição uma placa de orifício, um tubo de Venturi ou um bocal de vazão. Estes elementos geram uma pressão diferencial proporcional à velocidade da vazão da água de alimentação na tubulação. No entanto, estão sujeitos a vários problemas, tais como: corrosão nas tubulações, incrustação, perda de carga e excessivo desvio de calibração.

De acordo com o NUREG/CR-6895 (NRC, 2006), a Électricité de France (EDF) tem investigando o uso da técnica de RD para correção da medição de vazão de água de alimentação. Uma vez que a incerteza da medida da vazão de água de alimentação representa 80% da incerteza da medida da potência térmica, sua redução pode ter benefícios de custos diretos e significativos. Estudos realizados pela EDF mostraram que o uso da técnica de reconciliação de dados resultou numa potência térmica com 0,3% de incerteza.

Como apresentado acima, para determinar a potência térmica de um reator nuclear com uma redução de cerca de 80% na incerteza do valor medido, basta estimar com exatidão e precisão a variável vazão de água de alimentação para os geradores de vapor (GV).

O foco deste trabalho está na afirmação acima, cujo objetivo é corrigir a medição de vazão de água de alimentação do circuito secundário de uma usina nuclear tipo PWR.

Foi utilizado como referência o exemplo do Apêndice A da norma alemã VDI-2048. Neste exemplo é demonstrada a utilização da técnica de RD clássica para estimar a vazão de água de alimentação de um modelo com restrições lineares. Nesta técnica, a função dos mínimos quadrados ponderados (MQP) é utilizada como função objetivo, a qual, no modelo clássico, é minimizada pelo método de multiplicadores de Lagrange. No exemplo, algumas variáveis apresentam erro sistemático, o qual é avaliado através de um teste estatístico de hipótese baseado na distribuição Chi-quadrado.

Como já definido anteriormente, a técnica de RD é um problema de otimização que tem como objetivo minimizar uma determinada função objetivo, ou seja, encontrar o vetor solução que satisfaça as restrições impostas pelo modelo matemático do processo. Neste sentido, algoritmos de busca têm se apresentado como uma alternativa viável para solução do problema de reconciliação de dados. Desta forma, neste trabalho é apresentada uma metodologia para estimar o valor da medida de vazão de água de alimentação que utiliza a função dos mínimos quadrados como função objetivo do erro, a qual é minimizada por um algoritmo de otimização evolucionário, usando-se apenas equações algébricas. Foi escolhido o algoritmo evolucionário com inspiração quântica (QEA) por se tratar de um algoritmo de otimização de busca global que tem demonstrado excelente desempenho, com baixo custo computacional, em várias aplicações como em NICOLAU (2010). Como o foco desta pesquisa é demonstrar a viabilidade da metodologia proposta, neste trabalho não foi abordada a presença de erros grosseiros. Apenas algumas variáveis foram geradas com certo nível de ruído para caracterizar o erro aleatório.

1.2– Estrutura

Este trabalho está organizado conforme a apresentação a seguir:

Capítulo 2: Neste capítulo será apresentada a fundamentação teórica que serviu de base para a elaboração deste trabalho. Primeiramente será feita uma revisão bibliográfica sobre a técnica de reconciliação de dados, com ênfase nos principais tópicos relativos ao tema. Será apresentada a formulação geral da técnica de RD, que fundamenta o desenvolvimento deste trabalho. Também serão apresentados os aspectos referentes à etapa de classificação das variáveis, categorização e detecção de erros grosseiros e reconciliação robusta de dados. Porém, estes tópicos serão abordados sucintamente, pois neste trabalho não será abordada nenhuma técnica referente a estes assuntos.

Capítulo 3: Neste capítulo serão apresentados os aspectos que motivaram o desenvolvimento deste trabalho. Será apresentada a sistemática envolvida no cálculo da potência térmica de um reator nuclear tipo PWR com ênfase no cálculo da vazão de água de alimentação. Também será apresentado o exemplo do Apêndice A da norma VDI-2048, que foi utilizado como referência para o desenvolvimento deste trabalho.

Capítulo 4: Neste capítulo será apresentada a metodologia empregada no desenvolvimento deste trabalho. Serão apresentadas as considerações necessárias para a modelagem do problema, como a definição da função objetivo, os valores usados como referência e o algoritmo de otimização escolhido (QEA – Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm). Será apresentada a formulação teórica do QEA, referente à sua fundamentação, forma canônica e a modelagem para resolver o problema proposto.

Capítulo 5: Neste capítulo serão apresentadas as considerações necessárias para a realização dos testes de validação e avaliação do desempenho do método proposto. Será apresentada a estratégia de parametrização do QEA. Serão apresentados os testes realizados com os respectivos valores obtidos.

Capítulo 6: Neste capítulo serão apresentadas as conclusões finais e as sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros

Capítulo 7: Referências Bibliográficas

Capítulo 2 – Fundamentação Teórica

2.1 - Reconciliação de Dados

Atualmente, em qualquer instalação industrial, a maioria das variáveis envolvidas nos processos é monitorada através de algum meio digital. Desta forma, um tratamento estatístico adequado para estas variáveis pode ser realizado com o objetivo de estimar um valor mais exato e preciso do valor verdadeiro.

Ao longo do tempo, desde que o método de RD foi proposto por KUEHN e DAVIDSON (1961), várias técnicas de RD têm sido utilizadas. Para citar algumas:

- Multiplicadores de Lagrange
- Programação quadrática
- Reconciliação robusta
- Algoritmos genéticos

E a utilização de cada técnica dependerá das restrições dos modelos do processo, que podem ser:

- Lineares
- Não lineares

E estes podem ser estacionários ou dinâmicos.

A *priori*, o valor verdadeiro das variáveis de um processo não é conhecido. Portanto, este deve ser estimado através do valor medido destas variáveis. Este valor medido é obtido através do tratamento estatístico de uma amostra de dados obtida da medição das variáveis. Inevitavelmente esta amostra de dados apresenta erros. Principalmente um tipo de erro aleatório e independente, que geralmente segue uma distribuição normal. Outro tipo de erro que pode estar presente nesta amostra, é do tipo grosseiro, que pode ser sistemático ou espúrio. A presença destes erros na amostra de dados caracteriza a incerteza do valor medido.

Como regra geral, o valor verdadeiro da variável medida em cada uma das medições é sobreposto por uma soma de influências aleatórias e independentes e, sobretudo pela soma de desconhecidos erros sistemáticos na medição (VDI–2048, 2000). A norma alemã VDI–2048 que trata de incertezas de medições durante testes de aceitação em usinas de geração de energia e usada como referência neste trabalho, não menciona a presença de erro espúrio no exemplo abordado no Apêndice A. Como será visto adiante, os erros sistemáticos presentes em algumas variáveis do exemplo do Apêndice A são tratados como erros aleatórios.

Para estimar o valor verdadeiro das variáveis de um processo é utilizada a técnica de RD. Esta técnica consiste na utilização de equações de conservação das Leis Físicas, tais como: balanço de massa, balanço de energia, entre outras. Estas equações devem reproduzir as restrições impostas pelo processo, de acordo com um modelo matemático que pode ser fenomenológico ou empírico. No entanto, os erros aleatórios presentes nas variáveis medidas evitam que as equações de balanço fechem.

O objetivo principal da técnica de RD é estimar o valor verdadeiro das variáveis do processo com o menor grau de incerteza que sejam capazes de fechar as equações de balanço. No entanto, para que a técnica de RD seja aplicada, é necessário tratar os erros grosseiros presentes nas amostras das variáveis medidas, sejam estes sistemáticos e/ou espúrios. Este tratamento consiste em identificar e eliminar os erros grosseiros e pode ser feito antes da técnica de RD ser aplicada ou simultaneamente, como será visto posteriormente.

Se os erros grosseiros não forem identificados e eliminados, serão distribuídos por todas as variáveis do processo quando a técnica de RD for aplicada. Os valores estimados desta maneira podem até fechar as equações de balanço. Porém, podem não ser uma boa estimativa dos valores verdadeiros.

2.1.1 – Formulação Geral da Técnica de Reconciliação de Dados

O objetivo da técnica de RD é obter uma estimativa mais exata e precisa para os valores das variáveis medidas de um processo de forma que as restrições impostas pelo modelo matemático deste processo sejam satisfeitas. Este objetivo é atingido através da minimização da função objetivo. Sendo assim, a técnica de RD pode ser definida como um problema de otimização, ou seja, obter o melhor vetor solução que minimize a função objetivo.

A forma geral desta técnica pode ser representada da seguinte maneira:

$$\min_{\overline{\mathbf{x}}} F_o\left(\overline{\mathbf{x}}, \mathbf{x}\right) \tag{2.1}$$

Sujeita a

$$h(\overline{x}, u, p, t) = 0$$

$$g(\overline{x}, u, p, t) \le 0$$

$$\overline{x}^{L} \le \overline{x} \le \overline{x}^{U}$$

$$p^{L} \le p \le p^{U}$$

$$u^{L} \le u \le u^{U}$$

Onde F_o é a função objetivo a ser minimizada, \bar{x} é o vetor dos valores estimados das variáveis do processo e x é o vetor das variáveis medidas. O vetor u representa as variáveis não medidas e o vetor p representa os parâmetros do processo, sendo que ambos podem ser estimados. As restrições do processo podem ser expressas na forma de equações de igualdade (h) ou equações de desigualdade (g), que relacionam as variáveis estimadas (\bar{x}), as variáveis não medidas (u), os parâmetros (p), o tempo (t) e representam os limites operacionais e de validade que as estimativas devem satisfazer. Os limites inferior e superior das variáveis e dos parâmetros são indicados por L e U, respectivamente.

A função objetivo F_o , apresentada na Equação 2.1, geralmente é representa pela função soma dos mínimos quadrados ponderados na maioria dos trabalhos encontrados na literatura. Nestes trabalhos, a técnica de RD assume que a distribuição de

probabilidades do erro das variáveis medidas segue uma distribuição normal, ou seja, apresenta média igual a zero e variância conhecida. Esta função é representada da seguinte maneira:

$$F_o = \sum_{i=1}^{n} \frac{(\bar{x}_i - x_i)^2}{\sigma_i^2}$$
(2.2)

Onde *n* representa o número de variáveis medidas e σ_i^2 representa a variância da i-ésima medida.

A Equação 2.2 também pode ser representada de uma maneira mais geral por:

$$F_o = (\overline{\mathbf{x}} - \mathbf{x})^T \cdot \mathbf{S}_X^{-1} \cdot (\overline{\mathbf{x}} - \mathbf{x})$$
(2.3)

Onde S_X é a matriz empírica de covariância das variáveis medidas.

Como dito anteriormente, os erros aleatórios associados às medições das variáveis apresentam uma distribuição normal com média igual a zero e variância conhecida. Desta forma, considera-se que os erros de medição seguem uma densidade de probabilidade de distribuição normal multivariada representada pela seguinte equação:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\boldsymbol{\Sigma}_X|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})^T \cdot \boldsymbol{\Sigma}_X^{-1} \cdot (\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})\right)$$
(2.4)

Onde Σ_X é a matriz real (e desconhecida) de covariância e μ é o vetor do valor verdadeiro (e desconhecido) da média das medições das variáveis do processo.

O princípio da máxima verossimilhança é um método para estimar os parâmetros de um modelo estatístico, como por exemplo, a média e a variância. De modo geral, dado um conjunto de dados e um modelo estatístico, o método de máxima verossimilhança estima os valores dos diferentes parâmetros do modelo estatístico de maneira a maximizar a probabilidade dos dados observados. O método de máxima verossimilhança apresenta-se como um método geral para estimação de parâmetros, principalmente no caso de distribuições normais.

Sendo assim, maximizar a Equação 2.4 é o mesmo que minimizar o seu expoente. Portanto,

$$max \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |\boldsymbol{\Sigma}_X|^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})^T \boldsymbol{\Sigma}_X^{-1} \cdot (\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})\right)$$
(2.5)

equivale a

$$\min(\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})^T \cdot \boldsymbol{\Sigma}_X^{-1} \cdot (\boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{x})$$
(2.6)

Comparando as Equações 2.3 e 2.6, percebe-se que ambas são semelhantes. Conclui-se então, que a técnica de RD se propõe a estimar o valor médio real da medição a partir de uma estimativa da matriz de covariância dos valores medidos. (FELDMAN, 2007)

A grande maioria dos trabalhos relacionados à técnica de RD descritos na literatura está direcionada ao estudo de definição de funções objetivo e proposição de metodologias para minimizá-las (FELDMAN, 2007).

Outras formas de funções objetivo têm sido apresentadas e testadas em problemas de reconciliação de dados. Principalmente as funções baseadas em distribuições que sofrem pouca influência de erros grosseiros de tipo espúrio (*outlier*) têm despertado interesse. Nestes casos, a técnica de RD é chamada de robusta.

Como dito anteriormente, o problema de reconciliação de dados é um problema de otimização e a melhor forma de resolvê-lo depende da natureza do conjunto das restrições do problema.

2.1.2 – Classificação de Variáveis

As variáveis envolvidas em qualquer processo industrial se relacionam umas com as outras. Porém, por questões de custo, conveniência e viabilidade técnica, algumas variáveis são medidas e outras não. A etapa de classificação das variáveis determina a observabilidade e redundância do sistema, que são atributos desejáveis para as variáveis do processo. Desta forma, é possível prever se algumas dessas variáveis não medidas e parâmetros podem ser obtidos a partir das outras medidas disponíveis, usando para isso o modelo do processo (PRATA, 2009).

Plantas industriais modernas e automatizadas geram, em função da complexidade dos processos, um enorme volume de dados provenientes da medição das variáveis. Sendo assim, algoritmos de classificação são utilizados com frequência (ROMAGNOLI E SÁNCHEZ, 2000).

Várias metodologias para classificação de variáveis foram propostas na literatura. VÁCLAVEK (1969) apresentou uma metodologia para classificação baseada em grafos, posteriormente desenvolvida por MAH *et al.* (1976).

SÁNCHEZ e ROMAGNOLI (1996) apresentaram um método baseado na transformação ortogonal da matriz de projeção e sua decomposição, podendo ser utilizado em problemas com restrições lineares e bilineares.

MADRON e VERVEKA (1992) usaram com êxito o método de eliminação de Gauss-Jordan para classificar as variáveis em sistemas lineares, sendo proposta uma representação topológica do problema de reconciliação.

CROWE *et al.* (1983) propuseram a obtenção de uma matriz de projeção a partir da fatoração da matriz de incidência, de modo a separar as variáveis reconciliáveis, observáveis e não observáveis.

De forma geral, em um dado sistema é possível propor a seguinte classificação das variáveis:

 Variável Reconciliável (ou Redundante): é a variável medida, que pode ser calculada com o modelo (observável) mesmo que sua medição seja removida.

- Variável Medida não-Reconciliável: é a variável medida, que não pode ser calculada com o modelo se sua medição for removida.
- Variável Observável: é a variável não medida que pode ser estimada com o auxílio das medições e restrições de processo.
- Variável não-Observável: é a variável que não é medida e não pode ser estimada com o auxílio das demais medições e com o modelo do processo.

2.1.3 – Erro Aleatório

De modo geral, o valor verdadeiro de uma variável medida a cada medição está sobreposto pela soma de erros aleatórios e independentes. Esta condição de aleatoriedade é justificada pelo fato de não ser possível determinar a magnitude e nem o sinal deste erro. Isto significa que, caso uma variável seja medida com o mesmo instrumento de medição e sob as mesmas condições externas, valores diferentes serão obtidos em todas as medições.

Geralmente este tipo de erro tem pequena magnitude e sua presença está associada com a precisão do instrumento de medição e com fatores inerentes ao processo que determinarão a variância da variável medida. Este tipo de erro, com boa aproximação do teorema do limite central, segue uma distribuição normal. Esta consideração somente é justificável se um número significativo de contribuições aleatórias for considerado.

O erro aleatório pode ser definido como uma variável aleatória da seguinte maneira:

$$e_r = x - \mu \tag{2.7}$$

Onde e_r é o erro aleatório, x é o valor medido e μ é o valor verdadeiro. Sendo assim, o valor medido da variável na presença de erros aleatórios pode ser definido da seguinte maneira:

$$x = \mu + e_r, \quad e_r \sim N(0, \Sigma_X) \tag{2.8}$$

Onde o erro aleatório é caracterizado pela matriz de covariância Σ_X .

A probabilidade para cada medida x_i da variável x é definida da seguinte maneira:

$$p_{i} = \frac{1}{\sigma_{i}(2\pi)^{1/2}} exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x_{i} - \mu_{i}}{\sigma_{i}}\right)^{2}\right)$$
(2.9)

Onde σ_i^2 são os elementos da diagonal principal da matriz Σ_X e p_i é a função distribuição de probabilidade normal. Desta forma, os erros aleatórios seguem uma distribuição normal com média igual a zero e variância conhecida, também chamada de Gaussiana. Como consequência, as variáveis medidas também seguem esta distribuição. A Figura 2.1 ilustra uma distribuição normal padrão N(0,1).



Figura 2.1 – Curva normal padrão N(0,1)

A justificativa de que os erros aleatórios seguem uma distribuição normal é fundamentada por MADRON (1992) através das seguintes afirmações:

- A distribuição normal aproxima bem o comportamento das medidas nas ciências naturais, particularmente dentro da faixa média de ± 3σ.
- Um erro geralmente é um somatório de um grande número de erros elementares. De acordo com o teorema do limite central, em certas condições aceitáveis e para um grande número de erros elementares, a distribuição deste tipo de somatório aproxima-se da distribuição normal.
- A função de distribuição normal tem um modelo teórico bem desenvolvido e fácil de tratar matematicamente. Os valores para a função de probabilidade de uma distribuição normal são tabelados para facilitar a resolução de problemas práticos.

A Figura 2.2 exemplifica o comportamento do erro aleatório presente na medida de uma variável. Este gráfico foi construído através de uma sequência de cem números gerados no Excel de forma aleatória e com uma distribuição normal, sendo a média igual a 50 e o desvio padrão igual a 1.



Figura 2.2 – Exemplo de erros aleatórios

2.1.4 – Erros Grosseiros

Detectar e tratar os erros grosseiros tem sido o foco de inúmeros trabalhos sobre reconciliação de dados. Sendo assim, uma etapa importante antes de qualquer técnica ser utilizada, é a categorização correta deste tipo de erro. Normalmente estes erros são classificados em dois tipos: erro grosseiro do tipo espúrio (*outlier*) e erro grosseiro do tipo sistemático (*bias*).

Neste trabalho o erro sistemático será tratado como um erro grosseiro. No entanto, alguns autores como LIEBMAN *et al.* (1992) classificam este tipo de erro em uma terceira categoria.

Os erros grosseiros do tipo espúrio têm maior magnitude e ocorrem com menor frequência em comparação com os erros aleatórios A presença deste tipo de erro nas medições das variáveis de um processo compromete a correta estimativa da média e da variância, e também dificultam a determinação de uma distribuição estatística da amostra de dados. Geralmente este tipo de erro tem sua origem determinada por eventos aleatórios causados por problemas na instrumentação ou no processo. Este tipo de erro não tem nenhuma relação com a precisão do instrumento de medição.

A Figura 2.3 exemplifica o comportamento do erro grosseiro do tipo *outlier*. Para representar este tipo de erro foram alterados quatro valores da sequência de cem números que foi gerada para construir o gráfico da Figura 2.2. Estes valores ficaram fora da faixa média de $\pm 3\sigma$. A presença destes valores alterou a média e o desvio padrão da sequência de dados.



Figura 2.3 – Exemplo de erros grosseiros do tipo outlier

O erro grosseiro do tipo sistemático pode ser definido como a diferença entre a média de um determinado número de medições e o valor verdadeiro da variável. Este erro é caracterizado por um valor acima ou abaixo do que deve ser o valor verdadeiro da variável medida. Desta forma, a presença do erro sistemático faz com que a média de um conjunto de medições se afaste do valor verdadeiro da variável medida, afetando a exatidão do resultado. Geralmente este erro ocorre em função de uma causa constante, como por exemplo, instrumento de medição descalibrado.

A formulação geral para o valor medido da variável, acrescentando à Equação 2.8 a parcela relativa ao erro grosseiro do tipo sistemático e_s , pode ser representada por:

$$x = \mu + e_r + e_s, \ e_r \sim N(0, \Sigma_X)$$
 (2.10)

Esta formulação é utilizada na resolução do problema proposto na norma VDI-2048. A técnica de RD considera a parcela referente ao erro sistemático como erro aleatório.

A Figura 2.4 exemplifica uma distribuição de valores medidos de uma variável que teve um acréscimo permanente na média, caracterizando a presença do erro sistemático.



Figura 2.4 – Exemplo de erro sistemático acima do valor verdadeiro

2.1.5 – Detecção de erros grosseiros

Como o foco principal desta dissertação não é abordar a detecção de erros grosseiros, nesta seção serão apresentadas de maneira sucinta algumas técnicas desenvolvidas na literatura para detecção de erros grosseiros, tanto do tipo sistemático quanto do tipo espúrio.

A maioria dos trabalhos, cujo foco principal é a detecção de erros grosseiros, apresentam técnicas para detectar erro grosseiro do tipo espúrio. O erro grosseiro do tipo espúrio presente em uma distribuição de dados dificulta a determinação de uma base estatística conhecida. A presença deste tipo de erro também invalida a base estatística adotada para a caracterização do erro aleatório, que normalmente segue uma distribuição normal.

O princípio fundamental para se aplicar a técnica de RD nas variáveis medidas de um processo é apenas a presença de erros do tipo aleatórios. No entanto, a presença de erros grosseiros ocorre e, detectá-los ajuda a identificar possíveis falhas nas malhas de instrumentação e no processo, e até mesmo no modelo matemático que o representa. Estes erros poderão ainda introduzir ajustes expressivos nas variáveis reconciliadas afastando-as do valor verdadeiro da medida. (FELDMAN, 2007)

Caso os erros grosseiros não sejam identificados, tratados ou até mesmo eliminados, estimativas errôneas serão feitas caso a reconciliação de dados seja aplicada na presença destes erros. Ocorrerá o efeito *smearing*, ou seja, o espalhamento dos erros grosseiros presentes em algumas variáveis por todas as variáveis envolvidas no processo. Os valores reconciliados podem até satisfazerem as Leis Físicas de Conservação, porém não serão as estimativas corretas.

O método comumente usado para detectar a presença de erros grosseiros do tipo espúrio é o teste estatístico de hipótese, o qual requer que uma base estatística com uma distribuição conhecida seja utilizada. Um valor espúrio é detectado se o teste estatístico calculado excede o valor crítico obtido da tabela referente à distribuição assumida, de acordo com um intervalo de confiança (PRATA, 2009).

Os primeiros trabalhos sobre detecção de erros grosseiros em processos industriais foram publicados por REILLY e CARPANI (1963) e RIPPS (1965). A partir de então, vários outros autores, realizaram considerável esforço para o desenvolvimento de métodos de DEG. A maioria das técnicas combina critérios de estimação de parâmetros e critérios de inferência estatística para identificar erros grosseiros entre os dados do processo, como analisado por MAH (1990).

Os primeiros métodos para detecção de erros grosseiros baseados em testes estatísticos são eficientes apenas em sistemas estacionários. Isto ocorre com o Teste Global (REILLY e CARPANI, 1963), que traz apenas a informação de que existe pelo menos um erro grosseiro nos dados analisados sem apontar em que medição ele está. Outros testes estatísticos foram desenvolvidos, tais como o Teste Nodal (MAH *et al.*, 1976) e o Teste de Medição (MAH e TAMHANE, 1982, CROWE *et al.*, 1983).

De acordo com McBRAYER *et al* (1995), poucos pesquisadores têm se importado em desenvolver técnicas para detectar desvios sistemáticos. Para detectar medidas com desvio sistemático, ROLLINS e DAVIS (1992) propuseram a Técnica de Estimação Não Desviada (UBET).

2.1.6 – Reconciliação Robusta de Dados

Como dito anteriormente, a função objetivo mais utilizada na técnica de RD é a função dos mínimos quadrados ponderados. No entanto, esta função sofre forte influência dos erros grosseiros do tipo espúrio. Com o objetivo de resolver este problema, outras funções objetivo têm sido testadas, em particular funções baseadas em distribuições que sofrem pouca influência dos erros grosseiros. Nestes casos, a reconciliação de dados é chamada de robusta.

TJOA e BIEGLER (1991) propuseram o uso de uma função objetivo baseada na distribuição Normal Contaminada para a simultânea reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros. Neste caso, os erros grosseiros são ignorados durante a minimização e as estimações são baseadas apenas em valores definidos como bons pelo método.

DENNIS e WELSCH (1976) usaram uma estratégia baseada no estimador robusto de Welsch para eliminar o efeito negativo dos erros grosseiros, evitando estimativas errôneas e procedimentos iterativos. Como este estimador possui forma não convexa, foi necessário utilizar um método global de otimização.

YAMAMURA *et al.* (1988) propuseram uma técnica de RD com simultânea DEG baseada no Critério de Informação de Akaike combinado com a função dos mínimos quadrados ponderados. Este método utiliza a função dos mínimos quadrados ponderados modificada pela adição explícita do número de erros grosseiros. Este método divide as variáveis medidas em duas classes: com erros aleatórios e com erros grosseiros.

Baseando-se nos trabalhos prévios de HUBER (1981) e HAMPEL (1974), relacionados com estimação robusta, regressão robusta e função de influência, JOHNSON e KRAMER (1995) propuseram uma abordagem para RD e DEG denominada retificação por máxima verossimilhança.

ALBUQUERQUE e BIEGLER (1996) usaram a função Fair como função objetivo, cujas propriedades matemáticas reduzem a influência dos erros grosseiros espúrios que são determinados por meio de análise exploratória.

ARORA e BIEGLER (2001) compararam o estimador robusto de três partes de Hampel com a função Fair e concluíram que o primeiro é mais robusto, e possui um
ponto de corte que permite a aplicação do método simultaneamente com a técnica RD dispensando o uso de análise exploratória.

Segundo ARORA e BIEGLER (2001), quando a função objetivo é um estimador robusto, a mesma pode ser não linear e não convexa. Sendo assim, a solução obtida com um algoritmo de otimização determinístico pode ser um mínimo local. Para evitar esta situação, é necessário utilizar um método de otimização global.

PRATA (2009) utilizou o algoritmo evolucionário baseado no enxame de partículas (PSO) associado com o estimador robusto de Welsch, para desenvolver um método de RD robusta aplicado em sistemas dinâmicos para monitoramento *on-line*.

VALDETARO (2012) desenvolveu um método de RD robusta com simultânea DEG baseado na minimização do Critério de Akaike Robusto que utiliza o estimador de três partes de Hampel associado com o algoritmo evolucionário de otimização por exame de partículas (PSO)

Desta maneira, algoritmos de otimização baseados na teoria evolucionária, como Algoritmos Genéticos (GA), têm se tornado uma ferramenta viável quando aplicados à Reconciliação Robusta de Dados e DEG devido a suas características simples como o uso de equações algébricas e a ausência do cálculo do Jacobiano, como nos métodos precursores (VALDETARO, 2012).

Capítulo 3 – Correção da Vazão de Água de Alimentação

3.1 – Cálculo da Potência Térmica do Reator

A licença de operação para cada usina nuclear, concedida pelo órgão fiscalizador, leva em consideração a quantidade máxima de potência nuclear que pode ser produzida pelo núcleo do reator especificada no FSAR. Esta limitação é estabelecida em função da capacidade de resfriamento do núcleo do reator em situação de emergência. Por questões de segurança, este limite não deve ser excedido e a medição da potência nuclear deve ser confiável para que seja possível controlar o reator.

Uma vez que a potência nuclear é difícil de ser medida com precisão e exatidão, a mesma é estimada com base nas leituras de corrente dos detectores de fluxo de nêutrons do sistema de instrumentação nuclear externa, as quais são periodicamente compensadas pela potência térmica calculada através do balanço térmico em torno dos geradores de vapor, num procedimento conhecido como calorimetria do secundário. A potência nuclear é inferida através da potência térmica dos geradores de vapor com a adição ou subtração de pequenos termos, tais como calor nas bombas, nas tubulações e perdas no sistema de purificação.

Calcular de forma exata e confiável a potência térmica do reator nuclear é essencial para se certificar que o reator está operando dentro dos limites das análises de segurança e que a potência nuclear indicada na licença de operação não seja ultrapassada. Sendo assim, melhorias no cálculo da potência térmica do reator através do aumento da precisão da instrumentação instalada ou a implementação de algoritmos de cálculo mais sofisticados são mecanismos que podem reduzir a margem de incerteza identificada na licença original e consequentemente aumentar a potência de saída.

O cálculo da potência térmica do reator é realizado através do balanço térmico, que consiste em avaliar a quantidade de energia térmica produzida pelo reator nuclear. Para se efetuar o balanço térmico é necessário quantificar todos os dissipadores de calor e todas as fontes de calor dentro de um pacote constituído pelo circuito primário e secundário de uma usina nuclear. A Figura 3.1 ilustra de forma simplificada o circuito primário e o circuito secundário de uma usina nuclear do tipo PWR.



Figura 3.1 – Esquema gráfico de uma usina PWR (http://www.cnen.gov.br/ensino/energ-nuc.asp)

Na usina nuclear Angra 1, o balanço térmico é feito manualmete. Os físicos de reator inserem manualmente, em um programa com processamento *off-line*, os parâmetros relevantes para o cálculo da potência térmica do reator que foram obtidos pelo pessoal operacional da usina através de registradores, indicadores e outros meios de medição.

Normalmente, a potência térmica é avaliada através da Equação 3.1:

$$\dot{Q}_R = \dot{Q}_{GV} + \dot{Q}_M + \dot{Q}_P + \dot{Q}_{const}$$
(3.1)

Onde:

- \dot{Q}_R Potência térmica do reator;
- \dot{Q}_{GV} Potência térmica do gerador de vapor;
- \dot{Q}_M Potência térmica do moderador (refrigerante);
- \dot{Q}_P Potência térmica do sistema de purificação;
- \dot{Q}_{const} Termo constante.

Com o intuito de aumentar a exatidão e precisão da medição da potência térmica total do reator, será apresentada a seguir, uma avaliação de cada termo da Equação 3.1 com o objetivo de identificar qual dos termos contribui de maneira mais expressiva para o cálculo da potência térmica total do reator.

O termo constante (\dot{Q}_{const}) representa cerca de 1% da potência térmica total do reator e incorpora contribuições de vários dissipadores e fontes de calor fora do núcleo do reator. A maior contribuição para esse termo vem do calor produzido pelas bombas de refrigeração do reator (BRR). Outras contribuições incluem o calor produzido por bombas menores e perdas de calor nas tubulações. Como o própio nome sugere, o valor do termo constante é fixo e é obtido a partir de informações do projeto da planta.

O termo (\dot{Q}_P) referente ao sistema de purificação do circuito primário representa as perdas de calor do reator para o exterior devido a uma pequena vazão de líquido de arrefecimento, cujo objetivo é manter as especificações químicas do refrigerante. Este termo também equivale a uma fração de 1% da potência térmica total do reator. A precisão deste termo pode ser melhorada através da melhoria da precisão do escoamento da purificação e medições de temperatura, porém o efeito líquido sobre o cálculo da potência térmica total do reator será quase insignificante.

O termo (\dot{Q}_M) representa o calor removido pelo sistema moderador do reator. Este termo também equivale a uma pequena porcentagem do valor total da potência térmica do reator, mas é a segunda maior contribuição para o cálculo da potência térmica total do reator. O valor deste termo é normalmente obtido a partir de cálculos de projeto e é assumido ser constante a um nível de energia particular.

O termo (\dot{Q}_{GV}) referente à potência térmica do gerador de vapor é a maior contribuição para o cálculo da potência térmica total do reator e é constituído pelas contribuições da potência térmica do vapor, potência térmica da água de alimentação e algumas contribuições menores, como a potência térmica da purga dos geradores de vapor. Cada contribuição é um produto da vazão pela entalpia, sendo esta obtida a partir das tabelas de vapor baseadas em medidas de temperaturas e pressões. A Equação 3.2 representa de forma resumida, o somatório para cada gerador de vapor.

$$\dot{Q}_{GV} = \Sigma (\dot{m}_{ST} \cdot h_{ST} - \dot{m}_{FW} \cdot h_{FW} + \dot{m}_{BD} \cdot h_{BD})$$
 (3.2)

Onde:

- \dot{m}_{ST} Vazão de vapor principal do GV;
- h_{ST} Entalpia do vapor principal;
- *m*_{FW} Vazão de água de alimentação para o GV;
- h_{FW} Entalpia da água de alimentação;
- \dot{m}_{BD} Vazão da purga do GV;
- h_{BD} Entalpia da purga do GV.

Deve-se notar que, em vez de uma medição direta, a vazão de vapor principal pode ser obtida através da subtração da vazão da purga da vazão de água de alimentação. Portanto, a equação para a potência térmica do gerador de vapor pode ser reescrita como:

$$\dot{Q}_{GV} = \Sigma [(\dot{m}_{FW}(h_{ST} - h_{FW}) - \dot{m}_{BD}, h_{BD}]$$
(3.3)

Como a vazão do sistema de purga dos geradores de vapor é pequena em comparação com a vazão de água de alimentação principal, e eventualmente este sistema pode ser retirado de operação, o segundo termo da Equação 3.3 será desconsiderado por questões práticas. Sendo assim, a Equação 3.3 terá sua forma simplificada para:

$$\dot{Q}_{GV} = \Sigma[(\dot{m}_{FW}(h_{ST} - h_{FW})]$$
 (3.4)

A instrumentação nuclear externa, que mede o fluxo de nêutrons, é calibrada em função da potência térmica total do núcleo. Conforme descrição anterior, a potência térmica total do núcleo é determinada através do cálculo do balanço de energia entre o circuito primário e o secundário da usina. Desta maneira, uma medição precisa da vazão de água de alimentação principal, e da temperatura e pressão do vapor principal e da água de alimentação, resultarão em uma determinação exata da potência térmica do núcleo, e, assim, uma calibração precisa da instrumentação nuclear.

De acordo com o NUREG/CR-6895 (NRC, 2006), a Électricité de France (EDF) tem investigando o uso da técnica de RD para correção da medição de vazão de água de

alimentação. Uma vez que a incerteza da medida da vazão de água de alimentação representa 80% da incerteza da medida da potência térmica total do reator, sua redução pode ter benefícios de custos diretos e significativos. Estudos realizados pela EDF mostraram que o uso da técnica de reconciliação de dados resultou numa potência térmica com 0,3% de incerteza.

Nas próximas seções será apresentada uma metodologia para estimar a vazão de água de alimentação principal usando o balanço de massa, que é o foco deste trabalho.

3.2 – Exemplo do Apêndice A da norma VDI-2048

Como dito anteriormente a medida da vazão de água de alimentação é o foco deste trabalho, pois influencia de modo significativo no cálculo da potência térmica, e de modo a demonstrar a viabilidade do método proposto, usaremos o exemplo simplificado da norma VDI-2048.

A Figura 3.2 a seguir é um diagrama simplificado do circuito secundário de uma usina nuclear do tipo PWR utilizado no exemplo do Apêndice A da norma VDI 2048 (2000) com indicação dos pontos de medidas, e das perdas na tubulação, nos geradores de vapor e nas turbinas. As perdas no circuito secundário são contabilizadas através da variação de nível no tanque de água de alimentação e são indicadas pela variável \dot{m}_V .



Figura 3.2 – Diagrama simplificado do circuito secundário de uma usina nuclear do tipo PWR (VDI-2048, 2000).

As variáveis medidas são:

- Vazão de vapor do gerador de vapor 1 (\dot{m}_{FD-Kel})
- Vazão de vapor do gerador de vapor 2 ($\dot{m}_{FD-KeII}$)
- Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 1 (m
 _{spl})
- Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 2 (m
 _{SpII})
- Vazão total das perdas (\dot{m}_V)
- Vazão de condensado (\dot{m}_{HK})
- Vazão das extrações A7, A6, A5 (\dot{m}_{A7} , \dot{m}_{A6} , \dot{m}_{A5})
- Vazão de retorno de condensado (\dot{m}_{HD-NK})
- Vazão da turbina de alta para a turbina de baixa pressão (\dot{m}_D)

As variáveis medidas estão resumidas a partir de uma variável aleatória multidimensional

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} X_{1} = \dot{m}_{FD-KeI} \\ X_{2} = \dot{m}_{FD-KeII} \\ X_{3} = \dot{m}_{SpI} \\ X_{4} = \dot{m}_{SpII} \\ X_{5} = \dot{m}_{V} \\ X_{5} = \dot{m}_{V} \\ X_{6} = \dot{m}_{HK} \\ X_{7} = \dot{m}_{A7} \\ X_{8} = \dot{m}_{A6} \\ X_{9} = \dot{m}_{A5} \\ X_{10} = \dot{m}_{HD-NK} \\ X_{11} = \dot{m}_{D} \end{bmatrix}$$
(3.5)

De acordo com norma DIN 1943, a vazão mássica de vapor vivo no ponto de entrada da turbina de alta pressão pode ser determinada de três maneiras diferentes:

$$\dot{m}_{FD1} = \dot{m}_{FD-KeI} + \dot{m}_{FD-KeII} - 0,2\dot{m}_V \tag{3.6}$$

$$\dot{m}_{FD2} = \dot{m}_{SpI} + \dot{m}_{SpII} - 0.6 \dot{m}_V \tag{3.7}$$

$$\dot{m}_{FD3} = \dot{m}_{HK} + \dot{m}_{A7} + \dot{m}_{A6} + \dot{m}_{A5} + 0_{,4} \dot{m}_{V}$$
(3.8)

A norma DIN 1943 também especifica que 40% das perdas ocorrem no gerador de vapor, 20% nas linhas de vapor e 40% nas turbinas. Presume-se que metade da parte atribuída à turbina é perdida antes e a outra metade após o reaquecimento.

Desta forma, a Equação 3.6 representa a vazão mássica de vapor vivo que chega à turbina de alta pressão descontada as perdas nas linhas de vapor (20%). Já a Equação 3.7 representa a vazão mássica de vapor vivo que deve ser equivalente à vazão de água de alimentação para ambos geradores de vapor menos as perdas no gerador de vapor (40%) e nas linhas de vapor (20%). E a Equação 3.8 representa a vazão mássica de vapor vivo que deve ser equivalente à vazão mássica de vapor vivo que deve ser equivalente à vazão mássica de vapor ser equivalente a vazão mássica de vapor vivo que deve ser equivalente à vazão de condensado considerando as perdas pelas extrações e nas turbinas.

A Equação 3.9 indica que a vazão que entra no tanque de água de alimentação pela linha de retorno deve ser igual à soma da vazão das extrações.

$$\dot{m}_{HDAnz} = \dot{m}_{A7} + \dot{m}_{A6} + \dot{m}_{A5} \tag{3.9}$$

Através das equações relativas à vazão mássica de vapor vivo na entrada da turbina de alta pressão e da equação relativa à vazão que entra no tanque de água de alimentação pela linha de retorno é possível estabelecer as condições auxiliares representadas abaixo:

$$\dot{m}_{FD1} - \dot{m}_{FD2} = 0 \tag{3.10}$$

$$\dot{m}_{FD2} - \dot{m}_{FD3} = 0 \tag{3.11}$$

$$\dot{m}_{HDAnz} - \dot{m}_{HD-NK} = 0 \tag{3.12}$$

Os valores calculados das vazões \dot{m}_{FD1} , \dot{m}_{FD2} , \dot{m}_{FD3} e \dot{m}_{HDAnz} utilizando os valores das variáveis medidas do exemplo do Apêndice A da norma VDI 2048 são:

$$\dot{m}_{FD1} = 91,804 \pm 1,232 \tag{3.13}$$

$$\dot{m}_{FD2} = 88,579 \pm 0,859 \tag{3.14}$$

$$\dot{m}_{FD3} = 88,687 \pm 0,875 \tag{3.15}$$

$$\dot{m}_{HDAnz} = 18,499 \pm 0,187 \tag{3.16}$$

Estes valores são contraditórios e não satisfazem as Equações 3.10, 3.11 e 3.12, pois foram obtidos através das medidas de variáveis que apresentam algum tipo de erro. Desta forma, o balanço de massas não fecha.

No exemplo, foi utilizada a técnica de reconciliação de dados clássica baseado no multiplicador de Lagrange para solucionar o problema. Os erros grosseiros do tipo sistemáticos foram identificados através do teste estatístico de hipótese baseado na distribuição Chi-quadrado. Os valores reconciliados das variáveis medidas satisfizeram as restrições do problema, eliminando as contradições e fechando o balanço de massas. Os valores calculados para as vazões passaram a ser iguais a:

$$\dot{m}_{FD1} = 88,714 \pm 0,613 \tag{3.17}$$

$$\dot{m}_{FD2} = 88,714 \pm 0,613 \tag{3.18}$$

$$\dot{m}_{FD3} = 88,714 \pm 0,613 \tag{3.19}$$

$$\dot{m}_{HDAnz} = 18,499 \pm 0,137 \tag{3.20}$$

Os valores de \dot{m}_{FD1} , \dot{m}_{FD2} , \dot{m}_{FD3} e \dot{m}_{HDAnz} estão expressos em kg/s.

Desta maneira, foi encontrada uma estimativa melhor para a medida da variável vazão de água de alimentação principal que poderá ser usada para calcular a potência térmica do gerador de vapor com menor incerteza utilizando a Equação 3.4. Consequentemente, o valor obtido do cálculo da potência térmica total do reator terá sua incerteza reduzida em torno de 80%.

Na seção seguinte será apresentada a técnica utilizada neste exemplo.

3.3 – Reconciliação de Dados Modelo Clássico usada no Exemplo da Norma VDI 2048

Foi utilizado um método de estimativa baseado nos princípios da matemática estatística (princípio da correção Gaussiana) e no cálculo de correção utilizando condições auxiliares, adequado para avaliar as variáveis medidas.

O valor de cada variável medida é obtido através da média da amostra de cada uma destas variáveis através da Equação 3.21.

$$x_i = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m x_{ij}$$
(3.21)

Os valores obtidos através da Equação 3.21 são as componentes do vetor multidimensional das variáveis, X, representado pela Equação 3.22.

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix}$$
(3.22)

Pressupõe-se que as variáveis medidas estão contaminadas por um ruído, conhecido como erro aleatório que possui uma distribuição estatística conhecida, e que neste caso é a distribuição Normal.

Este método de estimação permite fazer correções (v) nas variáveis medidas (x) para aproximá-las de seus valores estimados (\overline{x}) utilizando a Equação 3.23

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{v} \tag{3.23}$$

Estas correções devem ser feitas de maneira que a forma quadrática do princípio da correção Gaussiana representado pela Equação 3.24 seja minimizada.

$$F_0 = \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\nu} \Rightarrow Min. \tag{3.24}$$

Onde S_X é a matriz de variância das variáveis medidas determinada pela Equação 3.25.

$$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} S_{X_1}^2 & \dots & S_{X,1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{X,n1} & \dots & S_{X_n}^2 \end{bmatrix}$$
(3.25)

As componentes da matriz de variância são calculadas através da Equação 3.26.

$$S_{X_{i,i}}^2 = \left(\frac{1}{m}\right) \left(\frac{1}{m-1}\right) \sum_{j=1}^m (x_{ij} - \bar{x}_i)^2$$
(3.26)

Caso haja uma dependência estocástica, ou seja, uma correlação entre as variáveis do vetor X, as componentes da matriz de variância são determinadas pela Equação 3.27.

$$S_{X_{i,k}}^{2} = \left(\frac{1}{m}\right) \left(\frac{1}{m-1}\right) \sum_{j=1}^{m} (x_{ij} - \bar{x}_{i}) (x_{kj} - \bar{x}_{k})$$
(3.27)

Se não houver dependência estocástica entre as variáveis x_i e x_k o valor da covariância entre elas $(S_{x_{i,k}})$ será nulo.

A medida da dependência estocástica das variáveis X_i e X_k é a variância ou o coeficiente de correlação calculado pela Equação 3.28.

$$\rho(X_i, X_k) = \frac{Cov(X_i, X_k)}{\sqrt{Var(X_i)Var(X_k)}}$$
(3.28)

De outra forma, o valor estimado para a covariância entre as variáveis X_i e X_k pode ser obtido através do coeficiente de correlação empírico (estimado) conforme a Equação 3.29.

$$S_{X_{i,k}} = r_{X,ik} \times S_{X_i} \times S_{X_k} \tag{3.29}$$

Considerando que as variáveis medidas estão contaminadas com um ruído aleatório que possui uma distribuição normal, é necessário definir um intervalo de confiança para os valores medidos. Este intervalo é definido em função da probabilidade de ocorrência dos valores medidos

$$P(X_i - \lambda_p \sigma_{X_i} \le \mu_i \le X_i + \lambda_p \sigma_{X_i}) = p \tag{3.30}$$

Para aplicações industriais é utilizada uma certeza estatística de 95%, sendo o intervalo de confiança para valores distribuídos normalmente é definido pela Equação 3.31.

$$x_i \pm V_{X_i} = x_i \pm \lambda_{95\%} S_{X_i} = x_i \pm 1,96 S_{X_i}$$
(3.31)

Na prática, a variância pode ser calculada através da Equação 3.32 utilizando o intervalo de confiança definido na Equação 3.31.

$$S_{X_i}^2 = \left(\frac{V_{X_i}}{1,96}\right)^2 \tag{3.32}$$

As *r* condições auxiliares são estabelecidas com todos os valores medidos juntamente com suas incertezas:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ f_r(\boldsymbol{x}) \end{bmatrix}$$
(3.33)

Estas r condições auxiliares são simples Leis da Física, como o princípio de conservação de massa ou energia.

Os valores medidos não satisfazem as r condições auxiliares devido aos inevitáveis desvios aleatórios nos valores das medidas, levando a contradições. Já os valores verdadeiros das variáveis satisfazem as r condições auxiliares. Sendo assim, os valores estimados (\bar{x}) também devem satisfazer as r condições auxiliares:

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{0} \tag{3.34}$$

Um sistema de equações lineares é obtido através da linearização da Equação 3.34:

$$f(\mathbf{x}) + \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}}\right) \cdot \mathbf{v} = \mathbf{0}$$
(3.35)

Supondo que as linhas da matriz funcional não são linearmente dependentes, obtém-se r equações lineares para n incógnitas v:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_r}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_r}{\partial x_n} \end{bmatrix}$$
(3.36)

Introduzindo a Equação 3.35 na Equação 3.24 e utilizando os multiplicadores de Lagrange \boldsymbol{k} , as correções \boldsymbol{v} obtidas com o auxílio dos cálculos de correção devem ser soluções da Equação 3.34:

$$F_0 = \boldsymbol{\nu} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}^{-1} \cdot \boldsymbol{\nu} - 2\left(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + \left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}}\right) \cdot \boldsymbol{\nu}\right) \cdot \boldsymbol{k} \Rightarrow Min.$$
(3.37)

Derivando a Equação 3.37 em relação à correção \boldsymbol{v} e igualando a zero:

$$\left(\frac{\partial F_0}{\partial \boldsymbol{v}}\right) = 2\left(\boldsymbol{S}_X^{-1} \cdot \boldsymbol{v} - \left(\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^T \cdot \boldsymbol{k}\right) = \boldsymbol{0}$$
(3.38)

Após algumas manipulações algébricas com a Equação 3.38, obtém-se uma fórmula para o vetor de correção v:

$$\boldsymbol{v} = -\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^T \cdot (\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^T)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$
(3.39)

Da Equação 3.37, tendo em vista o desaparecimento da Equação 3.35 e a simetria da matriz de covariância empírica S_X , obtém-se após algumas manipulações algébricas uma fórmula para a matriz de covariância S_V :

$$\boldsymbol{S}_{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^{T} \cdot (\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^{T})^{-1} \cdot \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}$$
(3.40)

Por uma questão de simplificação a notação F é usada para designar a matriz funcional de acordo com a Equação 3.36.

Após a obtenção do vetor de correção e da matriz de covariância do erro, a etapa seguinte é avaliar a qualidade dos valores medidos obtidos e detectar os erros grosseiros.

O vetor de correção elevado ao quadrado é uma variável aleatória com distribuição chi-quadrado que depende do grau de liberdade r, que é o número de condições auxiliares, e do intervalo de probabilidade desejado, neste caso 95%.

Este é um critério objetivo para avaliar a qualidade dos dados adquiridos. Significa que o valor de v^2 não deve ser superior ao valor de chi-quadrado encontrado em tabelas estatísticas. O teste chi-quadrado utiliza a seguinte relação:

$$\boldsymbol{v}^2 \le \frac{\boldsymbol{\chi}^2_{r,95\%}}{r,95\%} \tag{3.41}$$

Se a condição acima não for satisfeita, os dados adquiridos devem ser rejeitados, porque as contradições são grandes demais. Isto pode ocorrer caso haja uma correção excessiva dos valores medidos, fazendo com que fiquem fora do intervalo de confiança.

Na prática, é utilizada a Equação 3.42 para verificar se os valores adquiridos são contraditórios:

$$\frac{F_0}{r} \le F_{r,\infty;95\%} \tag{3.42}$$

Onde $F_{r,\infty;95\%}$ é obtido da Tabela 3.1

Grau de liberdade (número de condições auxiliares)	Valores referentes à probabilidade de 95%						
r	χ ² <i>r</i> ,95%	$F_{r,\infty;95\%}$					
2	5,99	3,00					
3	7,80	2,60					
4	9,49	2,37					
8	15,51	1,94					
16	26,30	1,64					
32	46,15	1,44					
64	83,61	1,31					

Tabela 3.1 – Valores referentes às distribuições $\chi^2_{r,95\%} \in F_{r,\infty;95\%}$

De acordo com $E(v_i) = 0$ (valor esperado para v_i) a magnitude da correção v_i (com uma estatística de p=95% não maior do que o intervalo de confiança) pode ser calculada a partir do elemento associado da diagonal principal da matriz de covariância.

Se a condição

$$\left|\frac{v_i}{\sqrt{max\left(S_{v,ii}, \frac{S_{x,ii}}{10}\right)}}\right| \le 1,96 \tag{3.43}$$

não for satisfeita, os valores medidos associados x_i , ou o valor estimado da variância associada $S_{x_i}^2$, devem ser verificados.

Desta maneira é possível fazer uma avaliação geral dos dados adquiridos e obter indicadores específicos para encontrar os erros grosseiros ou estimativas imprecisas das medições.

Após identificar e eliminar os erros grosseiros, a próxima etapa é calcular os valores corrigidos substituindo a Equação 3.39 na Equação 3.23:

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^T \cdot (\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^T)^{-1} \cdot \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$$
(3.44)

A matriz de covariância dos valores não contraditórios \overline{x} é obtida com:

$$\boldsymbol{S}_{\overline{\boldsymbol{X}}} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} - \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^{T} \cdot (\boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}} \cdot \boldsymbol{F}^{T})^{-1} \cdot \boldsymbol{F} \cdot \boldsymbol{S}_{\boldsymbol{X}}$$
(3.45)

As Equações 3.44 e 3.45 representam, respectivamente, o vetor dos valores estimados e a matriz da variância (covariância) associada. Estas equações foram obtidas através de um desenvolvimento matemático baseado no cálculo de derivadas parciais, produto de matrizes, transposição e inversão de matrizes.

Capítulo 4 – Metodologia

4.1 - Considerações

Neste capítulo será apresentada a metodologia proposta que utiliza um algoritmo de otimização evolucionário com inspiração quântica para obter o vetor solução do problema apresentado no capítulo anterior, que é o exemplo simplificado de uma usina PWR apresentado na norma VDI-2048.

O desenvolvimento deste trabalho foi realizado com base em algumas considerações importantes:

• O vetor solução para o problema é baseado na Equação 3.5, que representa a variável aleatória multidimensional *X*.

$$\boldsymbol{X} = \begin{matrix} X_{1} = \dot{m}_{FD-Kel} \\ X_{2} = \dot{m}_{FD-Kell} \\ X_{3} = \dot{m}_{Spl} \\ X_{4} = \dot{m}_{Spll} \\ X_{5} = \dot{m}_{V} \\ X_{6} = \dot{m}_{HK} \\ X_{7} = \dot{m}_{A7} \\ X_{8} = \dot{m}_{A6} \\ X_{9} = \dot{m}_{A5} \\ X_{10} = \dot{m}_{HD-NK} \\ X_{11} = \dot{m}_{D} \end{matrix} \right]$$

- Somente as quatro primeiras variáveis foram contaminadas com o erro aleatório. O motivo desta escolha deve-se ao fato de que estas variáveis sofreram os maiores ajustes, e serem exatamente as que representam as vazões de interesse para o cálculo da potência térmica do reator.
 - Vazão de vapor do gerador de vapor 1 (\dot{m}_{FD-Kel})
 - > Vazão de vapor do gerador de vapor 2 ($\dot{m}_{FD-KeII}$)
 - > Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 1 (\dot{m}_{Spl})

- > Vazão de água de alimentação para o gerador de vapor 2 (\dot{m}_{SpII})
- Foi considerado que as variáveis de vazão medidas estão contaminadas apenas com erros aleatórios distribuídos normalmente. Sendo assim, nenhuma técnica de DEG foi abordada.
- O vetor solução do problema será aquele que minimiza a função objetivo representada na Equação 4.1.

$$F_o = \left\{ \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{n} \left[\left(x_{ij} - \bar{x}_i \right)^2 \right] + \sum_{i=5}^{11} \left[\left(x_i - \bar{x}_i \right)^2 \right] + |A| + |B| + |C| \right\} Min.$$
(4.1)

Onde:

$$A = \bar{x}_1 + \bar{x}_2 - \bar{x}_3 - \bar{x}_4 + 0.4. \bar{x}_5 \tag{4.2}$$

$$B = \bar{x}_3 + \bar{x}_4 - \bar{x}_5 - \bar{x}_6 - \bar{x}_7 - \bar{x}_8 - \bar{x}_9 \tag{4.3}$$

$$C = \bar{x}_7 + \bar{x}_8 + \bar{x}_9 - \bar{x}_{10} \tag{4.4}$$

A função objetivo definida na equação acima terá um valor mínimo quando os valores estimados para as 11 componentes do vetor solução satisfizerem as restrições do problema. O primeiro termo da Equação 4.1, refere-se ao resíduo mínimo que deve ser obtido com a estimativa das quatro primeiras componentes do vetor solução do problema. Já o segundo termo da função objetivo, refere-se ao resíduo mínimo que deve ser obtido com a estimativa das outras componentes do vetor solução. Além dos valores estimados serem tais que, o resíduo seja mínimo, os mesmos tem que atender as restrições impostas pelos termos |A|, |B|, |C|. Estes termos representam respectivamente, o módulo das Equações 3.10, 3.11 e 3.12, que são as restrições do problema, e cujo valor deve tender a zero. Uma vez que os valores estimados atendam as restrições do problema, o balanço de massas será fechado.

O algoritmo proposto deverá efetuar uma busca no universo das soluções possíveis até que o valor mínimo da função objetivo seja encontrado e as restrições sejam satisfeitas.

De modo a demonstrar a viabilidade do método, e seu potencial uso em aplicações mais complexas, serão executados dois testes para verificar a habilidade do algoritmo proposto em solucionar o problema.

No primeiro teste será usado como vetor das variáveis medidas o vetor dos valores estimados (\overline{x}) representado pela Equação 4.5. Serão gerados aleatoriamente, 100 números com distribuição normal e desvio padrão igual a $\sigma = 1$, para cada uma das quatro primeiras variáveis.

$$\overline{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} 44,696\\44,123\\44,643\\44,386\\0,524\\70,005\\10,364\\3,744\\4,391\\18,499\\2,092 \end{bmatrix}$$
(4.5)

O segundo teste será executado de forma semelhante ao primeiro teste, com a diferença de que será utilizado como vetor das variáveis medidas o próprio vetor dos valores medidos (x) representado pela Equação 4.6.

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 46,241\\45,668\\44,575\\44,319\\0,525\\69,978\\10,364\\3,744\\4,391\\18,498\\2,092 \end{bmatrix}$$
(4.6)

O algoritmo de otimização escolhido foi o QEA (Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm). A escolha por este algoritmo foi feita não só de modo a poder comparar seus resultados em problemas mais complexos e com outras técnicas de Inteligência Artificial como, por exemplo, o PSO (Particle Swarm Optimization) (VALDETARO, 2012), mas também pelo fato deste algoritmo ter demonstrado um resultado eficiente na solução de problemas complexos do tipo abordado em NICOLAU (2010) com um custo computacional relativamente menor em relação a outros algoritmos evolucionários, como por exemplo, Algoritmo Genético (GA) (GOLDBERG, 1989).

4.2 – Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica

A computação quântica (DEUTSCH, 1985) é uma nova área de pesquisa que inclui conceitos como os computadores quânticos e os algoritmos quânticos. Devido sua capacidade superior em solucionar problemas especializados, em comparação com a computação clássica, esta área tem-se desenvolvido bastante nos últimos anos.

Existem algoritmos quânticos, tais como os algoritmos de busca de Grover e algoritmos de Shor (LULA, B., Júnior e FERREIRA, A., de Lima, 2005). Durante as duas últimas décadas, os algoritmos evolucionários têm ganhado muita atenção e amplas aplicações, que são métodos de busca essencialmente estocástica baseados nos princípios da evolução natural (GOLDBERG, 1989). Desde 1990 a investigação sobre a fusão da computação evolutiva e computação quântica vem ganhando a atenção em áreas como a física, matemática e ciência da computação. Um dos temas importantes se concentra na computação evolutiva com inspiração quântica caracterizada por certos princípios da mecânica quântica para um computador clássico (HUANG *et al.*, 2007)

No computador clássico, toda e qualquer operação é realizada com base na menor informação manipulada por este tipo de computador, que é definida como Bit e pode assumir o valor 0 ou 1. Já no computador quântico a menor informação manipulada é definida como Bit Quântico, ou Q-bit, e as operações neste tipo de computador são realizadas com base nos princípios da mecânica quântica, tais como a superposição e a interferência entre estados. Desta maneira, em um computador quântico o Q-bit pode assumir o valor 0, 1, ou uma superposição destes valores, ou seja, pode assumir um valor 0 e 1 ao mesmo tempo.

Os algoritmos evolucionários com inspiração quântica surgiram da combinação entre os conceitos da computação quântica e da inteligência de enxames. Estes algoritmos são clássicos, porém são baseados nos principais paradigmas da teoria quântica, que são a superposição e interferência de estados. Um dos principais algoritmos evolucionários de otimização com inspiração quântica é o QEA que foi proposto por HAN *et al.* (2002). O QEA é baseado nos mais importantes conceitos da computação quântica, o bit quântico (Q-bit) e a superposição de estados quânticos. No QEA, o bit quântico (Q-bit) é definido pelos números complexos [α , β] (DEUTSCH, 1985). Em comparação com outros algoritmos evolucionários, o QEA tem as melhores características de diversidade na população e pode manter o balanço na exploração mais facilmente.

4.2.1 - Fundamentos do Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica

A computação quântica é baseada nos principais conceitos da Teoria Quântica (NIELSEN e CHUANG, 2000), a superposição e a interferência de estados quânticos, os quais tornam possível a execução de operações em paralelo.

Nos computadores clássicos a informação é codificada como uma sequência de bits. Ao contrário dos computadores clássicos, os computadores quânticos processam as informações usando uma sequência de bits quânticos (Q-bits). O Q-bit genérico $|\Psi\rangle$ pode ser representado não por uma representação exata, mas por combinação linear dos vetores $|0\rangle$ e $|1\rangle$, que são representados por:

$$0\rangle = \begin{bmatrix} 1\\0 \end{bmatrix} e |1\rangle = \begin{bmatrix} 0\\1 \end{bmatrix}$$
(4.7)

De tal forma que:

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{4.8}$$

Sendo que α e β são números complexos que satisfazem a seguinte restrição:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \tag{4.9}$$

Na mecânica Quântica, o vetor $|\Psi\rangle$ é também chamado de estado. Assim, a interpretação física do Q-bit (Equação 4.8) é que ele assume simultaneamente os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$. Esta habilidade de assumir simultaneamente dois ou mais estados é conhecida como superposição de estados quânticos. Em outras palavras, a informação armazenada em $|\Psi\rangle$ é uma combinação de todos os estados possíveis de $|0\rangle$ e $|1\rangle$.

Para tornar a informação contida em $|\Psi\rangle$ acessível de forma clássica, é necessário fazer uma observação, isto é, uma medição. Esta medição tem como resultado um único valor contido na superposição de estados. Embora exista uma superposição de estados, quando o Q-bit é observado (medido), apenas um dos estados será observado. Assim, quando $|\Psi\rangle$ é medido é possível encontrar o estado $|0\rangle$ com a probabilidade $|\alpha|^2$ ou o estado $|1\rangle$ com a probabilidade $|\beta|^2$.

Um conjunto de *m* Q-bits pode ser colocado em uma superposição de 2^m estados, sendo que cada um desses estados corresponde a determinados Q-bits no estado $|0\rangle$ e outros no estado $|1\rangle$, tais como (000 ... 0), (100 ... 0), (010 ... 0), (111 ... 0), ..., (111 ... 1). Estes estados codificaticam todos os possíveis números representados pelos *m* bits. Isto permite a aplicação de uma operação física que corresponde a um cálculo computacional simultaneamente para todos os valores possíveis, com uma consequente computação paralela.

4.2.2 - Forma Canônica do Algoritmo Evolucionário com Inspiração Quântica

No algoritmo evolucionário com inspiração quântica (QEA) a população de soluções é representada por indivíduos, ou cromossomos na linguagem dos algoritmos genéticos, representados por $Q(t) = \{q_1(t), q_2(t), ..., q_n(t)\}$ na geração t, onde n representa o tamanho da população, m é o número de Q-bits e $q_i(t)$ é o cromossomo quântico definido pela Equação 4.10:

$$q_{i}(t) = \begin{bmatrix} \alpha_{i1}(t) & \alpha_{i2}(t) & \cdots & \alpha_{im}(t) \\ \beta_{i1}(t) & \beta_{i2}(t) & \cdots & \beta_{im}(t) \end{bmatrix}, i = 1, 2, \dots n$$
(4.10)

Onde

$$|\alpha_{ij}(t)|^{2} + |\beta_{ij}(t)|^{2} = 1$$
 (4.11)

O pseudocódigo para a forma canônica do algoritmo é apresentado abaixo:

 $t \leftarrow 0$

Inicializar Q(t)

Repita até o critério de parada ser satisfeito

Gerar P(t) observando os estados de Q(t)Para *i* variando de 1 até *n* avaliar $f((X_i(t))$ Armazenar a melhor solução de P(t) em B(t)Atualizar Q(t) usando o portão quântico $t \leftarrow t + 1$

Fim

Onde P(t) é a população clássica representada por:

$$P(t) = \{X_1(t), X_2(t), \dots, X_n(t)\},\$$

e as soluções candidatas $X_i(t)$ com *m* bits, as quais serão avaliadas pela função *fitness*, são representadas por:

$$X_{i}(t) = \{x_{i1}(t) \ x_{i2}(t) \dots x_{im}(t)\},\$$

sendo $x_{ij}(t)$ o bit observado.

A melhor solução candidata de P(t) a cada iteração t é armazenada em B(t), que é representado por:

$$B(t) = \{b_1(t), b_2(t), \dots, b_n(t)\},\$$

sendo que $b_i(t)$ representa os bits da melhor solução.

Quando t = 0, $Q(0) = \left[\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}\right]$ para todos $q_i(t)$, com a mesma probabilidade para $\alpha \in \beta$.

Cada bit da sequência binária é obtido observando o passo para a construção da população P(t). Quando todos os estados de Q(t) são observados, o valor $|x_{ij}(t)| = 0$ ou $|x_{ij}(t)| = 1$, de P(t) é determinado pela probabilidade $|\alpha_{ij}(t)|^2$ ou $|\beta_{ij}(t)|^2$.

O pseudocódigo para obter a sequência binária de cada indivíduo da população clássica P(t) através da observação da cada indivíduo quântico da população quântica Q(t) é apresentado a seguir:

```
Iniciar P(t)

Enquanto (i < n), faça

Enquanto (j < m), faça

j = j + 1

Se aleatório [0,1] > |\alpha_{ij}(t)|^2

Então |x_{ij}(t)| = 0

Senão |x_{ij}(t)| = 1

Fim

Fim
```

Fim

Os números complexos α_{ij} e β_{ij} , e, portanto Q(t), são atualizados de acordo com o operador portão quântico, o qual será descrito a seguir.

4.2.3 – Operador Portão Quântico

A atualização da população no QEA é feita pelo operador portão quântico definido pela matriz de rotação $U(\Delta \theta_{ij})$ o qual será aplicado para cada uma das colunas de cada indivíduo Q-bit. Na prática, cada par de valores $\alpha_{ij} \in \beta_{ij}$ é tratado como um vetor bidimensional e girado usando $U(\Delta \theta_{ij})$ da seguinte maneira:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\xi(\Delta\theta_{ij}) & -\sin(\xi(\Delta\theta_{ij})) \\ \sin(\xi(\Delta\theta_{ij}) & \cos(\xi(\Delta\theta_{ij})) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix}$$
(4.12)

onde, $\xi(\Delta \theta_i) = S(\alpha_{ij}, \beta_{ij}) \times \Delta \theta_i$ e o sinal da função $S(\alpha_{ij}, \beta_{ij})$ representam a direção de rotação e o passo $\Delta \theta_i$ representa o ângulo de rotação.

O procedimento de atualização de $\Delta \theta_{ij}$ é descrito a seguir:

```
Iniciar atualização de Q(t)
```

```
Enquanto (i < n) faça

Enquanto (j < m) faça

j = j + 1

Determine \Delta \theta_{ij} com a pesquisa

Obter \begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} como:

\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = U(\Delta \theta_{ij}) \begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t) \\ \beta_{ij}(t) \end{bmatrix}

Fim
```

Fim

Fim

Tanto $\Delta \theta_{ij}$ quanto $S(\alpha_{ij}, \beta_{ij})$ são obtidos inicialmente de acordo WANG *et al.* (2007).

4.2.4 – Operador Portão Quântico H_{ε}

O modelo do QEA aplicado neste trabalho é o mesmo modelo aplicado em NICOLAU *et al.*, 2009, para a identificação de transientes de uma central nuclear, onde, a fim de evitar a convergência prematura do Q-bit, foi aplicado o portão quântico H_{ε} (HAN *et al.*, 2004.) definido por:

$$\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = H\varepsilon(\alpha_{ij}(t), \beta_{ij}(t), \Delta\theta_{ij})$$
(4.13)

Durante a aplicação do portão quântico H_{ε} , a rotação

$$\begin{bmatrix} \alpha_{ij} \\ \beta_{ij} \end{bmatrix} = U(\Delta \theta_{ij}) \begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t) \\ \beta_{ij}(t) \end{bmatrix}$$
(4.14)

é calculada como um passo intermediário e a atualização final depende do valor da constante ε ,

Se
$$|\alpha_{ij}|^2 \le \varepsilon$$
 e $|\beta_{ij}|^2 \le 1 - \varepsilon$ então $\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{\varepsilon} \\ \sqrt{1-\varepsilon} \end{bmatrix}$ (4.15)

Se
$$|\alpha_{ij}|^2 \le 1 - \varepsilon e |\beta_{ij}|^2 \le \varepsilon$$
 então $\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{1-\varepsilon} \\ \sqrt{\varepsilon} \end{bmatrix}$ (4.16)

Caso contrário
$$\begin{bmatrix} \alpha_{ij}(t+1) \\ \beta_{ij}(t+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_{ij} \\ \beta_{ij} \end{bmatrix}$$
 (4.17)

Este tipo de portão quântico foi introduzido com o objetivo de reduzir as chances de estagnação do algoritmo em um mínimo local durante a evolução da população. O valor numérico de ε é definido de acordo com o problema, respeitando o intervalo 0 < ε < 1.

4.3 - Modelagem dos Parâmetros do QEA

De forma a modelar o problema descrito no Capítulo 3 (VDI-2048) para o QEA, foi utilizado um vetor solução composto das variáveis definidas na Equação 3.5, ou seja, o algoritmo deverá encontrar qual a melhor estimativa das componentes do vetor X.

Dentro do problema em questão, as variáveis são definidas por números reais e o QEA opera sobre uma sequência de bits quânticos (Q-bit). Sendo assim, foi utilizada uma sequência de doze bits para representar o valor real (método de escala) com uma codificação do tipo Gray (GRAY, 1953) na parte clássica (vetor observado ou colapsado) do algoritmo. Desta forma, o vetor solução do QEA será representado por uma sequência de $12 \times 11 = 132$ bits quânticos.

Os limites de cada variável que definem o espaço de busca, e são utilizados para a conversão real-binário estão apresentados na Tabela 4.1.

Variável	Limite inferior	Limite superior
x_1, x_2, x_3, x_4	40,000	50,000
<i>x</i> ₅	0,400	0,600
<i>x</i> ₆	69,000	71,000
<i>x</i> ₇	9,000	11,000
<i>x</i> ₈	2,000	4,000
<i>X</i> 9	3,000	5,000
<i>x</i> ₁₀	18,000	20,000
<i>x</i> ₁₁	1,900	2,100

Tabela 4.1 – Limites das variáveis do problema

Os parâmetros do QEA utilizados com os testes realizados serão apresentados juntamente com os resultados de cada teste no próximo capítulo.

Capítulo 5 – Análise e Resultados

5.1 - Considerações

Neste capítulo serão apresentados os resultados obtidos com a implementação do método baseado no QEA para resolver o problema de RD do exemplo do Apêndice A da VDI-2048, cujo diagrama simplificado foi apresentado na Figura 3.2.

A utilização deste exemplo tem a finalidade de permitir a validação e a avaliação do método proposto neste trabalho.

As condições auxiliares do problema foram determinadas nas Equações 3.10, 3.11 e 3.12, e o vetor da variável multidimensional foi definido na Equação 3.5.

A função objetivo (*fitness* do problema) foi definida pela Equação 4.1, sujeita às restrições 4.2, 4.3 e 4.4.

Foi utilizado o Excel para gerar os 100 números aleatório, com distribuição normal e desvio padrão igual a $\sigma = 1$, para cada uma das quatro primeiras variáveis.

O desvio padrão $\sigma = 1$ foi definido em função do intervalo de confiança das variáveis de vazão nas quais o ruído aleatório foi inserido. Os valores médios e os respectivos intervalos de confiança estão apresentados na Equação 5.1.

$$\dot{m}_{FD-KeI} = 44,696 \pm 1,611$$

$$\dot{m}_{FD-KeII} = 44,123 \pm 1,611$$

$$\dot{m}_{SpI} = 44,643 \pm 0,425$$

$$\dot{m}_{SpII} = 44,386 \pm 0,424$$
(5.1)

Na norma VDI-2048, o intervalo de confiança é definido como:

$$V_{X_i} = \pm \lambda_{95\%} S_{X_i} = \pm 1,96 S_{X_i}$$
(5.2)

Para uma distribuição normal, significa que 95% dos valores estão compreendidos dentro do intervalo de aproximadamente $\pm 1,96\sigma$.

Desta maneira, os valores das variáveis de vazão gerados para o primeiro teste são representados são representados da seguinte maneira:

$$\dot{m}_{FD-KeI} = 44,696 \pm 1,960$$

$$\dot{m}_{FD-KeII} = 44,123 \pm 1,960$$

$$\dot{m}_{SpI} = 44,643 \pm 1,960$$

$$\dot{m}_{SpII} = 44,386 \pm 1,960$$

(5.3)

5.2 – Estratégia de Parametrização do QEA

Todos os testes foram executados com o parâmetro do QEA, nGerações (número de gerações), igual a 10000. Os parâmetros Npop (número de indivíduos) e Delta (ângulo de rotação do portão quântico) do QEA foram definidos de acordo com a Tabela 4.2. Para construir a Tabela 5.1, o código foi executado 9 vezes conforme o primeiro teste.

Execução	Npop	Delta	Fitness
1	150	0,00065	426,3724
2	150	0,00075	426,3718
3	150	0,00085	426,3732
4	200	0,00065	426,3656
-		0.000	10 (0 (0 (
5	200	0,00075	426,3636
5 6	200 200	0,00075	426,3636 426,3659
5 6 7	200 200 250	0,00075 0,00085 0,00065	426,3636 426,3659 426,3958
5 6 7 8	200 200 250 250	0,00075 0,00085 0,00065 0,00075	426,3636 426,3659 426,3958 426,3944

Tabela 5.1 – Testes para definir os parâmetros do QEA

Analisando os valores apresentados na Tabela 5.1, observamos que na execução número 5 foi encontrada a menor *fitness* do problema. Sendo assim, os parâmetros do QEA, Npop e Delta, foram ajustados respectivamente, em 200 e 0,00075 do QEA.

5.3 – Resultado do Primeiro Teste

Utilizando os valores reconciliados do exemplo apresentados na Equação 4.5, o QEA encontrou um vetor solução, cujos valores satisfizeram as restrições do problema e fecharam o balanço de massas.

Os valores obtidos foram aplicados nas Equações 3.6, 3.7, 3.8 e 3.9, e os resultados obtidos foram próximos aos apresentados nas Equações 3.15, 3.16, 3.17 e 3.18. A precisão dos valores obtidos foi avaliada através do erro absoluto, definido como a diferença entre os valores da Equação 4.5 considerados como exatos, e os valores obtidos com o método. Também foi avaliado o erro absoluto dos valores calculados.

Foi observado que atribuindo peso aos termos com módulo da função objetivo definidos pelas Equações 4.2, 4.3 e 4.4, ocorreu uma mudança na precisão dos resultados, mantendo o balaço de massas fechado. Com um valor de peso igual a 10, ocorreu melhorou a precisão dos valores calculados pelas Equações 3.6, 3.7 e 3.8, porém a precisão do valor calculado pela Equação 3.9 piorou.

De modo geral, os melhores resultados foram obtidos sem atribuir peso aos termos com módulo da Equação 4.1.

Na Tabela 5.2 estão apresentados os resultados obtidos

Valores Exatos														
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
44,696	44,123	44,643	44,386	0,524	70,005	10,364	3,744	4,391	18,499	2,092	88,714	88,715	88,714	18,499
Valores obtidos com peso 1 - Melhor fitness 426,3646														
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
44,695	44,090	44,689	44,383	0,703	69,954	10,316	3,714	4,385	18,415	2,093	88,645	88,650	88,650	18,415
							Desvio							
0,001	0,033	0,046	0,003	0,179	0,051	0,048	0,030	0,006	0,084	0,001	0,069	0,065	0,064	0,084
				Valores	obtidos	com pe	so 5 - N	Aelhor	fitness 4	426,834	9	-		
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
44,664	44,103	44,689	44,371	0,732	69,468	10,550	3,799	4,510	18,860	2,092	88,620	88,620	88,621	18,860
							Desvio							
0,032	0,020	0,046	0,015	0,208	0,537	0,186	0,055	0,119	0,361	0,000	0,094	0,094	0,093	0,361
				Valores	obtidos	com pes	so 10 - I	Melhor	fitness	427,00	53			
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
44,689	44,127	44,689	44,383	0,633	69,555	10,563	3,741	4,580	18,884	2,093	88,689	88,692	88,692	18,884
Desvio														
0,007	0,004	0,046	0,003	0,109	0,450	0,199	0,003	0,189	0,385	0,001	0,025	0,023	0,021	0,385
			1	Valores	obtidos	com pes	50 15 - 1	Melhor	fitness	427,25	38			
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	FD1	FD2	FD3	HD
44,652	44,066	44,689	44,359	0,798	70,006	9,981	3,574	4,692	18,230	2,159	88,558	88,569	88,571	18,246
	1			r			Desvio			1				
0.044	0.057	0.046	0.027	0.274	0.001	0.384	0.170	0.301	0.269	0.067	0.156	0.146	0.142	0.253

Tabela 5.2 – Valores obtidos no primeiro teste

5.4 - Resultado do Segundo Teste

Utilizando os valores não reconciliados do exemplo apresentados na Equação 4.6, o método proposto não encontrou um vetor solução capaz de satisfazer as restrições do problema e fechar o balanço de massas.

Foi observado que atribuindo peso aos termos com módulo da função objetivo definidos pelas Equações 4.2, 4.3 e 4.4, o método proposto obteve um vetor solução que fechou o balanço, satisfazendo as restrições do problema. No entanto, os valores obtidos apresentaram um erro absoluto muito grande.

Foi observado que mudando o valor do peso, altera a precisão dos valores obtidos pelo método.

Os valores não reconciliados do exemplo estão contaminados com um erro grosseiro do tipo sistemático, principalmente as variáveis x_1 a x_4 . Como não foi adotada nenhuma estratégia para DEG, o que ocorreu foi o efeito *smearing*, ou seja, o erro grosseiro foi espalhado nas outras variáveis.

Os valores obtidos com o segundo estão apresentados na Tabela 5.3.

Valores Exatos														
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
44,696	44,123	44,643	44,386	0,524	70,005	10,364	3,744	4,391	18,499	2,092	88,714	88,715	88,714	18,499
Valores obtidos com peso 1 - Melhor fitness 429,3503														
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
46,191	45,629	44,628	44,322	0,442	70,023	10,330	3,744	4,410	18,484	2,091	91,731	88,685	88,684	18,484
							Desvio				-		-	
1,495	1,506	0,015	0,064	0,082	0,018	0,034	0,000	0,019	0,015	0,001	3,017	0,030	0,030	0,015
			V	alores	obtidos o	com pes	o 500 -	Melho	r fitness	672,87	64			
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
45,385	44,823	45,372	45,067	0,584	70,821	10,338	4,035	4,663	19,035	2,093	90,091	90,089	90,089	19,035
						-	Desvio				-		-	
0,689	0,700	0,729	0,681	0,060	0,816	0,026	0,291	0,272	0,536	0,001	1,377	1,375	1,376	0,536
			Va	alores o	btidos c	om peso) 1000 ·	Melho	or fitness	5 690,9	657			
x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
45,617	45,043	45,592	45,287	0,553	72,156	10,340	2,741	5,089	18,171	2,092	90,549	90,548	90,548	18,171
	Desvio													
0,921	0,920	0,949	0,901	0,029	2,151	0,024	1,003	0,698	0,328	0,000	1,835	1,833	1,834	0,328
			Va	alores o	btidos c	om peso) 1500 ·	Melho	or fitness	5 769,0	474			
x1	x2	x3	x4	x5	хб	x7	x8	x9	x10	x11	mFD1	mFD2	mFD3	mHDAnz
45,897	45,067	45,604	45,702	0,848	69,920	12,132	3,058	5,349	20,540	2,221	90,795	90,797	90,798	20,539
						-	Desvio							
1,201	0,944	0,961	1,316	0,324	0,085	1,768	0,686	0,958	2,041	0,129	2,081	2,083	2,085	2,040

Tabela 5.3 - Valores obtidos no segundo teste

Capítulo 6 – Conclusões

Neste capítulo serão apresentadas as conclusões obtidas neste trabalho, cujo objetivo foi demonstrar a viabilidade da utilização de um método de RD baseado em um algoritmo evolucionário de otimização com inspiração quântica.

Utilizou-se para efeito de comparação e validação a norma VDI-2048, e o exemplo simplificado de um PWR apresentado na mesma, onde é utilizada a técnica de RD clássica para estimar a vazão de água de alimentação de um modelo com restrições lineares. Nesta técnica, a função dos mínimos quadrados ponderados (MQP) é utilizada como função objetivo, a qual, no modelo clássico, é minimizada pelo método de multiplicadores de Lagrange.

O foco principal do trabalho foi avaliar o desempenho do método proposto em obter o vetor solução do problema. A proposta foi apresentar uma metodologia capaz de resolver o mesmo problema sem a utilização de cálculos como derivadas parciais, transposição e inversão de matrizes, que podem apresentar restrições em problemas complexos.

Foi escolhido o algoritmo evolucionário com inspiração quântica (QEA) por se tratar de um algoritmo de otimização de busca global que tem demonstrado bom desempenho, com baixo custo computacional, em várias aplicações como em NICOLAU (2010).

A estratégia de comparação e avaliação foi utilizar as variáveis do exemplo que sofreram as maiores correções, após o uso da RD clássica, e contaminá-las com um ruído aleatório normalmente distribuído. Desta forma, foram gerados quatro conjuntos de dados referentes às quatro primeiras componentes do vetor dos valores estimados após a RD, pois são as componentes que representam as vazões que influenciam de modo significativo o cálculo da potência térmica.

O vetor dos valores estimados foi utilizado como referência para o primeiro teste executado. Este teste foi realizado em quatro etapas distintas, onde cada etapa foi executada, atribuindo-se um peso nos termos com módulo da função objetivo representada pela Equação 4.1. Como estes termos representam as restrições do problema, e o objetivo principal é fazê-los tender a zero, esta estratégia surtiu o efeito desejado. Não houve nenhuma estratégia para avaliar a magnitude do valor do peso aplicado, apenas avaliar a sua contribuição para uma melhor solução. Na primeira etapa, executada com peso igual a 1, o método obteve o vetor solução que fechou o balanço de massas com valores próximos aos valores exatos. Nas outras etapas do teste, executadas com pesos iguais a 5, 10 e 15, os valores obtidos fecharam o balanço de massas, no entanto, o valor do desvio da variável calculada \dot{m}_{HDAnz} aumentou significativamente. Sendo assim, a primeira etapa do teste obteve a melhor solução.

O segundo teste foi executado usando como referência o vetor dos valores medidos utilizados no exemplo, cujas quatro primeiras variáveis apresentam um desvio sistemático. Este teste também foi executado em quatro etapas distintas, sendo atribuídos pesos aos termos com módulo da função objetivo. Na primeira etapa do teste, executada com peso igual a 1, os valores obtidos não fecharam o balanço de massas. As etapas seguintes executadas com pesos iguais a 500, 1000 e 1500, os valores obtidos fecharam o balanço de massas, porém com desvios significativos. De modo geral, a etapa executada com peso igual a 500 obteve o melhor resultado. Tal resultado era esperado, uma vez que o erro sistemático necessitaria de uma DEG como préprocessamento.

Utilizando o primeiro teste como referência, que é o objetivo do trabalho, o método proposto demonstrou ser eficiente na resolução do problema.

Como sugestão para trabalhos futuros, o método utilizado neste trabalho pode ser implementado utilizando alguma técnica para DEG, para ser executada simultaneamente ou como uma etapa anterior à RD.

O resultado satisfatório obtido com o exemplo da VDI-2048 demonstra a viabilidade da utilização do método em um caso real de uma usina tipo PWR. De maneira que, modelando apenas o secundário (balanço de massas), é possível estimar valores mais precisos para a vazão de água de alimentação, e consequentemente determinar com maior exatidão a potência térmica.

58

Capítulo 7 – Referências Bibliográficas

- ALBUQUERQUE, J. S., BIEGLER, L. T., 1996, "Data Reconciliation and Gross-Error Detection for Dynamic Systems", *AIChE Journal*, v. 42, pp. 2841-2856.
- ARORA, N., BIEGLER, L. T., 2001, "Redescending Estimators for Data Reconciliation and Parameter Estimation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 25, pp. 1585-1599.
- CABRAL, F., A., 2009, Avaliação de Estratégias para Reconciliação de Dados e Detecção de Erros Grosseiros. Dissertação de M. Sc. DEQUI/UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil.
- CHEN, J., ROMAGNOLI, J. A., 1998, "A Strategy for Simultaneous Dynamic Data Reconciliation and Outlier Detection", *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, pp. 559-562.
- CROWE, C. M., GARCIA CAMPOS, Y.A., HRYMAK, A., 1983, "Reconciliation of Process Flow rates by Matrix Projection. Part I: Linear Case", *AIChE Journal*, v. 29, pp. 881-888.
- DENNIS, J. E., WELSCH, R. E., 1976, "Techniques for Nonlinear Least Squares and Robust Regression", In: *Proceedings of American Statistical Association*, Washington, D.C.
- DEUTSCH, D., 1985, "Quantum Theory, the Church-turing Principle and the universal quantum computer", *Proceedings of the Royal Society*, v. 400, pp. 97-117.
- DEVANATHAN, S., ROLLINS, D. K, VARDEMAN, S. B., 2000, "A new approach for improved identification of measurement bias", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 2755-2764.
- FELDMAN, R. N., 2007, Reconciliação de Dados em Tempo Real para Monitoração e Detecção de Falhas em Terminal de Transporte e Armazenamento de Derivados de Petróleo. Dissertação de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- GOLDBERG, D., 1989, Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning, 2 ed. Addison-Wesley Publishing Company, Reading, MA.
- GRAY, F., Pulse Code Communication, March 17, 1953, U.S. patent nº 2.632.058.
- HAMPEL, F. R., 1974, "The influence Curve and its Role in Robust Estimation", *Journal of American Statistical Association*, v. 69, pp. 383-393.
- HAN, K. -H, KIM, J. -H, 2002, "Quantum-Inspired Evolutionary Algorithm for a Class of Combinatorial Optimization", *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, v. 6, pp. 580–593.
- HAN, K. -H, KIM, J -H, 2004, "Quantum-Inspired Evolutionary Algorithms with a New Termination Criterion, *Hε* Gate, and Two-Phase Scheme", *IEEE Transactions* on Evolutionary Computation, v. 8, pp. 156–169.
- HUANG, H. P., LUO, K. Y., 2007, "On-Line Wavelets Filtering with Application to Linear Dynamic Data Reconciliation", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 46, pp. 8746-8755.
- HUBER, P. J., 1981, Robust Statistics. 2 ed. New York, John Wiley.
- JOHNSON, L. P. M., KRAMER, M. A., 1995, "Maximum Likelihood Data Rectification: Steady-State Systems", *AIChE Journal*, v. 41, pp. 2415-2426.
- KUEHN, D. R., DAVIDSON, H., 1961, "Computer Control. II. Mathematics of Control", *Chemical Engineering Progress*, v. 57, pp. 44-47.

- LIEBMAN, M. J., EDGAR, T. F., LASDON, L. S., 1992, "Efficient Data Reconciliation and Estimation for Dynamic Processes Using Nonlinear Programming Techniques", *Computers and Chemical Engineering*, v. 16, pp. 963-986.
- LULA, B., Júnior e FERREIRA, A. de Lima, 2005. Uma Introdução à Computação Quântica.
 Disponível em:<http://www.dimap.ufrn.br/~sbmac/ermac2005/mccompquantica.pdf>
 Acesso em: 23 nov. 2012
- MADRON, F., 1992, *The Process Plant Performance: measurement and data processing for optimization and retrofits*. 2 ed. Chichester, U.K., Ellis Horwood.
- MADRON, F., VEVERKA, V., 1992, "Optimal Selection of Measuring Points in Complex Plants by Linear Models", *AIChE Journal*, v. 38, pp. 227-236.
- MAH, R. S. H., STANLEY, G. M., DOWNING, D. M., 1976, "Reconciliation and Retification of Process Flow and Inventory Data", *Industrial Engineering and Chemical Process Design Development*, v. 15, pp. 175-183.
- MAH, R. S. H.; TAMHANE, A. C., 1982, "Detection of Gross Errors in Process Data", *AIChE Journal*, v. 28, pp. 828-830.
- MAH, R. S. H., 1990, *Chemical Process Structures and Information Flows*. 1 ed. Butterworth, Stoneham.
- MCBRAYER, K. F., EDGAR, T. F., 1995, "Bias Detection And Estimation In Dynamic Data Reconciliation", *Journal of Process Control.* v. 5, pp. 285-289.
- MCBRAYER, K. F., SODERSTROM, T. A., EDGAR, T. F., YOUNG, R. E., 1998, "The Application of Nonlinear Dynamic Data Reconciliation to Plant Data", *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, pp. 1907-1911.

- NICOLAU, A. dos Santos, 2010, Computação Quântica e Inteligência de Enxames Aplicados na Identificação de Acidentes de uma Usina Nuclear PWR. Dissertação de M. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- NIELSEN, M. A., CHUANG, I. L., 2000. *Quantum Computation and Quantum and Quantum Information*. United Kingdom, Cambridge University
- NRC, Nuclear Regulatory Commission, NUREG/CR-6895 Technical Review of On-Line Monitoring Techniques for Performance Assessment, 2006.
- PAI, C. C. D., FISHER, G. D., 1988, "Application of Broyden's method to reconciliation of nonlinearly constrained data", *AIChE Journal*, v. 34, pp. 873-876.
- PRATA, D. M., 2009, *Reconciliação Robusta de Dados para Monitoramento em Tempo Real*. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- REILLY, P., CARPANI, R., 1963, "Application of statistical theory of adjustment to material balances", In *Proceedings of the 13th Canadian Chemical Engineering Conference*, Montreal, Quebec.
- RIPPS, D. L., 1965, "Adjustment of Experimental Data". *Chemical Engineering Progress Symposium Series*, v. 61, pp. 8-13.
- ROLLINS, D. K., DAVIS, J. F., 1992, "Unbiased Estimation of Gross Error in Process Measurements", *AIChE Journal*, v. 38 pp. 563-572.
- ROMAGNOLI, J. A., SÁNCHEZ, M. C., 2000, *Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations*. 1 ed. San Diego, Academic Press.
- SÁNCHEZ, M., ROMAGNOLI, J. A., 1996, "Use of Orthogonal Transformations in Data Classification – Reconciliation", *Computers and Chemical Engineering*. v. 20, pp. 483-493.

- TJOA, I. B., BIEGLER, L. T., 1991b, "Simultaneous Strategy for Data Reconciliation and Gross Error Detection of Nonlinear Systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 15, pp. 679-690.
- VÁCLAVEK, V., 1969, "Studies on System Engineering III optimal Choice of The Balance Measurements in Complicated Chemical Engineering Systems", *Chemical Engineering Science*, v. 24, pp. 947-955.
- VALDETARO, E. D. ,2012, Reconciliação Robusta de Dados com Seleção de Modelo Simultânea Aplicada ao Cálculo de Potência Térmica de um Reator Nuclear tipo PWR. Tese de D. Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- VDI 2048, Part 1, 2000, Uncertainties of measurement during acceptance tests on energy-conversion and power plants Fundamentals.
- WANG, D., ROMAGNOLI, J. A., 2003, "A framework for robust data reconciliation based on a generalized objective function", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 42, pp. 3075-3084.
- WANG, Y., FENG, X. -Y., HUANG, Y. -X., PU, D. -B., ZHOU, W. -G., LIANG, Y. -C., ZHOU, C. -G, 2007, "A novel quantum swarm evolutionary algorithm and its applications", *Neurocomputing*, v. 70, pp. 633-640.
- WONGRAT, M., SRINOPHAKUN, T. SRINOPHAKUN, P., 2005, "Modified genetic algorithm for nonlinear data reconciliation" *Computers and Chemical Engineering*, v. 29, pp. 1059-1067.
- YAMAMURA, K., NAKAJIMA, M., MATSUYAMA, H., 1988, "Detection of Gross Errors in process data using mass and energy balances", *International Chemical Engineering*, v. 28, pp. 91.