



ANÁLISE DE TÉCNICAS DE CARACTERIZAÇÃO DE DINÂMICA CAÓTICA EM PROBLEMAS DE MONITORAMENTO DE PROCESSOS

Nayher Andres Clavijo Vallejo

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

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto
Príamo Albuquerque Melo
Junior

Rio de Janeiro

Abril de 2022

ANÁLISE DE TÉCNICAS DE CARACTERIZAÇÃO DE DINÂMICA CAÓTICA
EM PROBLEMAS DE MONITORAMENTO DE PROCESSOS

Nayher Andres Clavijo Vallejo

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

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto
Príamo Albuquerque Melo Junior

Aprovada por: Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto
Prof. Príamo Albuquerque Melo Junior
Prof. Argimiro Resende Secchi
Prof. Reinaldo Giudici
Eng. André Domingues Quelhas

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

ABRIL DE 2022

Vallejo, Nayher Andres Clavijo

Análise de técnicas de caracterização de dinâmica caótica em problemas de monitoramento de processos/Nayher Andres Clavijo Vallejo. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XXXVII, 311 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto

Príamo Albuquerque Melo Junior

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 218 – 249.

1. Monitoramento de processos. 2. Diagnóstico e detecção de falhas. 3. Dinâmica caótica. I. Pinto, José Carlos Costa da Silva *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

*She... The brightest light in the
darkest night*

Agradecimentos

Há uma pequena cidade, a mais de 4000 quilômetros de distância, escondida entre montanhas que coleta as memórias da primeira parte da minha vida. A memória acredita antes de o conhecimento lembrar. Acredita um tempo maior do que recorda, um tempo maior até do que o conhecimento imagina. Conhece, lembra, e acredita uma casinha; com algumas paredes de cimento e outras de telhas de zinco, chão de madeira úmida e um jardim de terra preta e fria. Conhece, lembra, e acredita num caminho de alguns quilômetros que conduzia a um conjunto de prédios pintados de verde e branco, cheios de ecos, uniformes sujos, e alvoroços repentinos. E, aí, dentre desses lugares, aparece a minha imagem, expectante, que ignorava o mundo de fora e ignorava o que estava por vir. As vezes, essas visões furtivas desaparecem da memória mas aparecem de forma nítida no conhecimento, assim como a sensação das paredes frias, a fascinação pela névoa e os rostos protagonistas das melhores cenas ou fotogramas dessa a primeira parte da minha vida.

Hoje, gosto de observar a dinâmica temporal inverossímil desses lugares, sabendo que nunca mais irei a estar imerso dentro dela, mesmo que por momentos o anseie. Gosto desses lugares, lugares com pessoas de vida lenta, que não se vem envelhecer, adoecer ou morrer, mas que aos poucos se desvanecem em seu tempo, tornando-se lembranças, brumas de outro tempo, até que o esquecimento as assimila.

Todos os objetos, até os mais insignificantes, despertam uma certa ressonância na memória das pessoas, foi Proust quem disse, nas primeiras páginas de *Em busca do tempo perdido*. As vezes essa ressonância se apaga para sempre. Outras vezes, repentinamente, sai do seu letargo e reaparece no presente com a mesma força que tinha no passado. Foi em 2017, impossível uma situação mais metafórica; Eu caminhava perdido numa estrada sem luz, imerso num bloco de ar quente e carregando uma mala velha e uma garrafa de água. Não iria, ver aquela estrada de novo até 15 anos depois. Houve momentos nos que a água parecia se evaporar, e outros em que parecia se renovar para se evaporar de novo, mas a estrada não terminava. A partir, daquela noite, as miles de estradas e ruas se estenderam até não ser mais do que uma, com suas esquinas imperceptíveis, mudanças de placas de rua em diferentes

línguas que se quebravam de vez em quando por trajetos em bicicleta ou ônibus. A estrada passou através de vários estados, atravessou o Atlântico para me regressar aos abraços da família e desceu ao sul onde uma nova vida continua. E sempre, mais tarde ou mais cedo, a estrada acaba atravessando cidades e bairros idênticos e quase intermináveis, de nomes esquecidos onde sob diferentes céus observo a mesma lua. Para todos os que conhecem ou participaram desta primeira parte da minha vida, meus mais sinceros agradecimentos.

À Segunda metade da minha vida: as vezes espero com impaciência esse sonho, sonhar que era uma criança, sentir-me feliz sabendo que tenho tudo por diante, que ainda tudo é possível, que um novo mundo é tão possível como o mundo anterior. Obrigado ao Brasil e sua gente por me devolver essa sensação.

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

ANÁLISE DE TÉCNICAS DE CARACTERIZAÇÃO DE DINÂMICA CAÓTICA EM PROBLEMAS DE MONITORAMENTO DE PROCESSOS

Nayher Andres Clavijo Vallejo

Abril/2022

Orientadores: José Carlos Costa da Silva Pinto
Príamo Albuquerque Melo Junior

Programa: Engenharia Química

Apresenta-se um estudo sobre a adaptação de técnicas de caracterização de dinâmicas caóticas em problemas de monitoramento de processos. Neste trabalho foram validadas técnicas de análise não linear de séries temporais usadas frequentemente para a obtenção de medidas invariantes em atratores caóticos. Foi mostrado que grande parte dessas técnicas apresenta um potencial importante para o uso na área de monitoramento de processos, uma vez que essas métricas refletem mudanças dinâmicas de sistemas multidimensionais que no contexto avaliado podem ser atribuídas a falhas. Durante o estudo foram considerados diversos sistemas dinâmicos teóricos e dois casos de estudo correspondentes de escala industrial relacionados à indústria do petróleo. No primeiro caso de estudo, correspondente a uma estação de medição fiscal de gás-óleo, foram estudadas as métricas do conjunto invariante como alternativa às métricas estatísticas tradicionais de monitoramento, explorando a capacidade para detectar as falhas analisadas. Esse caso de estudo também foi empregado nas técnicas de causalidade que foram usadas para fazer inferências sobre rotas causais de falhas e o problema de seleção de variáveis na construção de modelos de detecção. No segundo caso de estudo, correspondente à dinâmica de golfadas numa plataforma offshore, foram analisados os diferentes comportamentos dinâmicos do sistema, análise de métricas da análise de séries temporais, e a reconstrução do diagrama de bifurcação via aprendizado de máquinas e equação de Fokker-Planck.

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

ANALYSIS OF CHAOTIC DYNAMICS CHARACTERIZATION TECHNIQUES IN PROCESS MONITORING PROBLEMS

Nayher Andres Clavijo Vallejo

April/2022

Advisors: José Carlos Costa da Silva Pinto

Príamo Albuquerque Melo Junior

Department: Chemical Engineering

A study on the adaptation of chaotic characterization techniques to process monitoring is presented. In the present work, nonlinear time series analysis techniques were validated to obtain invariant measures of dynamic trajectories. It has been shown that most of these techniques can be potentially used in the analyzed field since these metrics reflect dynamic changes in multidimensional systems that in the specific context can be attributed to failures. In the present work, several theoretical dynamical systems and two case studies related to the oil industry were studied. In the first case study corresponding to the fiscal gas-oil metering station, the metrics of the invariant set were studied as an alternative to the statistical monitoring metrics and their ability to detect the failures considered in this work. This case study was also employed in the causality techniques analysis that was used to make inferences about causal routes of failures and the problem of variable selection in the build of detection models. In the second case study, corresponding to the dynamics of slugging phenomena on an offshore platform, the different dynamic behaviors, nonlinear time series analysis, and reconstruction of the bifurcation diagram via machine learning and the Fokker-Planck equation were studied.

Sumário

Agradecimentos	v
Lista de Figuras	xvi
Lista de Tabelas	xxxi
Lista de Símbolos	xxxiii
Lista de Abreviaturas	xxxvi
1 Introdução	1
1.1 Motivação	4
1.2 Objetivos	5
1.3 Estrutura do documento	7
2 Revisão Bibliográfica	9
2.1 Revisão bibliográfica sobre técnicas de monitoramento	9
2.1.1 Métodos de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas .	11
2.2 Sistemas dinâmicos e séries temporais	17
2.2.1 Análise de séries temporais em monitoramento de processos .	24
2.2.1.1 Mapas de recorrência em monitoramento de processos	25
2.2.2 Análise causal em monitoramento de processos	26
2.3 Considerações finais	29

3	Fundamentos teóricos	31
3.1	Marco teórico	31
3.1.1	Definição de sistemas dinâmicos	31
3.1.1.1	Classificação de órbitas	34
3.1.2	Transporte de vizinhanças pelo fluxo	37
3.1.2.1	Matriz A	37
3.1.2.2	Matriz J	38
3.1.3	Estabilidade local	40
3.1.3.1	Equilíbrio	41
3.1.3.2	Órbita periódica	41
3.1.4	Mapeamento de Poincaré	44
3.1.4.1	Secção de Poincaré	44
3.1.4.2	Borda da Secção	46
3.1.4.3	Escolha da melhor secção de Poincaré	47
3.1.4.4	Cálculo da secção de Poincaré	47
3.1.4.5	Informação nos mapas de Poincaré	48
3.1.5	Definição de caos	50
3.1.6	Expoentes de Lyapunov	52
3.1.6.1	Espectro de Lyapunov	55
3.2	Análise não linear de séries temporais	57
3.2.1	Parâmetros de imersão	58
3.2.1.1	Função de autocorrelação	58
3.2.1.2	Informação mútua	58
3.2.1.3	Falsos vizinhos	59
3.2.1.4	Componentes Principais	60
3.2.1.5	Mapas ou secções de Poincaré	61
3.2.1.6	Mapas de recorrência	61

3.2.1.7	Expoentes de Lyapunov a partir da série temporal	64
3.2.1.8	Dimensão de correlação	65
3.2.1.9	Entropias	66
3.2.2	Decomposição em modo dinâmico	67
3.3	Técnicas de seleção de variáveis	70
3.4	Técnicas não paramétricas	72
3.4.1	Estimativa de densidade kernel	72
3.4.1.1	Estimativa de densidade e histogramas	72
3.4.1.2	Definição	73
3.4.1.3	Seleção do parâmetro h	75
3.5	Causalidade	75
3.5.1	Informação mútua condicional	78
3.5.2	Informação de interação	79
3.5.3	Entropia de transferência	81
3.5.3.1	Entropia de transferência decomposta	82
3.5.4	Definições causais	82
3.5.5	Transferência momentânea de informação e entropia de origem	83
3.6	Equações estocásticas	86
3.7	Considerações finais	89
4	Metodologia	91
4.1	Metodologia em sistemas dinâmicos determinísticos	91
4.1.1	Caracterização da dinâmica	91
4.1.1.1	Cálculo da matriz de estabilidade A	91
4.1.1.2	Cálculo das secções de Poincaré	92
4.1.1.3	Cálculo matriz Jacobiana J	93
4.1.1.4	Expoentes de Lyapunov	93
4.1.1.5	Análise de mapas de recorrências	93

4.1.2	Construção de diagramas da árvore	94
4.2	Metodologia em sistemas dinâmicos descritos por dados	96
4.2.1	Pre-tratamento de dados	96
4.2.2	Metodologia de monitoramento offline	96
4.2.3	Metodologia para a análise de seleção de variáveis	98
4.2.4	Análise não linear de séries temporais	101
4.2.5	Reconstrução de valores característicos via Equação de Fokker-Planck]	102
4.2.6	Análise de causalidade	103
4.2.6.1	Estagio B1	103
4.2.6.2	Estagio B2	104
4.3	Considerações finais	104
5	Resultados e Discussões	106
5.1	Casos de estudo	106
5.1.1	Estação de monitoramento da Petrobras	106
5.1.1.1	Descrição de falhas	109
5.1.2	Poço de produção offshore	111
5.1.2.1	Modelagem matemática	112
5.1.2.2	Descrição do problema	114
5.2	Caracterização dinâmica do modelo FOWM	116
5.2.1	Caracterização de dinâmica periódica	116
5.2.1.1	Estabilidade local - dinâmica periódica	117
5.2.1.2	Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré	119
5.2.1.3	Análise de transporte de fluxo em trajetórias	120
5.2.1.4	Análise de bifurcações	121
5.2.1.5	Métricas invariantes: Expoentes de Lyapunov	124

5.2.1.6	Métricas invariantes: Entropia de Shannon e Dimensão de Correlação	125
5.2.1.7	Métricas invariantes: Quantificação de recorrências .	125
5.2.2	Efeito da dinâmica do controlador e caracterização de dinâmica caótica	127
5.2.2.1	Reconstrução do espaço de fases via teorema de Takens	136
5.2.2.2	Reconstrução do espaço de fases via DMD	137
5.2.2.3	Comentários Complementares	140
5.3	Resultados: Análise não linear de séries temporais	140
5.3.1	Análise não linear de séries temporais como ferramenta de monitoramento	141
5.3.1.1	Autocorrelação	141
5.3.1.2	Informação mútua	143
5.3.1.3	Expoentes de Lyapunov	145
5.3.1.4	Entropias e dimensões	146
5.3.1.5	Mapas de recorrências	147
5.3.1.6	KDE como ferramenta auxiliar	150
5.3.1.7	Comentários complementares	151
5.3.2	Análise não linear de séries temporais na identificação de <i>Slugging</i>	152
5.3.2.1	Autocorrelação	152
5.3.2.2	Informação mútua e entropia	153
5.3.2.3	Comentários complementares	155
5.4	Reconstrução de diagramas de bifurcação via dados	155
5.4.1	Reconstrução de diagramas de bifurcação via redes neurais . .	155
5.4.1.1	Método	155
5.4.1.2	Reconstrução do diagrama de bifurcação de Rossler .	159
5.4.1.3	Reconstrução do diagrama de bifurcação do modelo FOWM	165

5.4.1.4	Reconstrução do diagrama de bifurcação do modelo FOWM auxiliado por métricas invariantes	167
5.4.1.5	Reconstrução do diagrama de bifurcação usando os dados de poço offshore	170
5.4.1.6	Comentários complementares	178
5.4.2	Reconstrução da matriz Jacobiana via equações estocásticas .	179
5.5	Causalidade	184
5.5.1	Causalidade no benchmark Tennesse-Eastman	184
5.5.2	Causalidade em EFAL	187
5.5.3	Causalidade no problema de seleção de variáveis	190
5.6	Pertinência das técnicas de caracterização dinâmica na detecção de falhas	205
5.7	Considerações finais	209
6	Conclusões	211
6.1	Sugestões para trabalhos futuros	216
	Referências Bibliográficas	218
	A Processo Tennesse-Eastman	250
	B Lista de variáveis EFAL	254
	C Bifurcações e órbitas periódicas	258
C.0.1	Bifurcações	258
C.0.1.1	Bifurcações de codimensão 1	258
C.0.1.2	Bifurcações de codimensão 2	259
C.0.2	Procura de órbitas periódicas curtas	261
	D Caracterização dinâmica de benchmarks	264
D.1	Cálculo de métricas do conjunto invariante	264

D.1.1	Benchmark: Atrator de Rossler	264
D.1.1.1	Estabilidade local	266
D.1.1.2	Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré . .	267
D.1.1.3	Sensibilidade às condições iniciais: Expoentes de Lyapunov	270
D.1.1.4	Análise da estabilidade local de trajetórias: Matriz J	273
D.1.1.5	Análise da recorrências	275
D.1.2	Benchmark: Atrator de Lorenz	279
D.1.2.1	Estabilidade local	280
D.1.2.2	Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré . .	280
D.1.2.3	Sensibilidade às condições iniciais: Expoentes de Lyapunov	282
D.1.2.4	Análise da recorrências	283
D.2	Análise não linear de séries temporais	286
D.2.1	Análise de séries temporais no atrator de Rossler	286
D.2.1.1	Reconstrução do espaço de fases	286
D.2.1.2	Estimação de expoentes de Lyapunov	288
D.2.1.3	Estimação da entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação	291
D.2.1.4	Estimação dos invariantes por recorrências	291
D.2.2	Análise de séries temporais no atrator de Lorenz	293
D.2.2.1	Reconstrução do espaço de fases	293
D.2.2.2	Estimação de expoentes de Lyapunov	297
D.2.2.3	Estimação da entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação	297
D.3	Reconstrução do espaço de fases por DMD	298
D.3.0.1	Reconstrução do espaço de fases via DMD	298

E Descrição do FOWM

301

E.1	Modelagem matemática	301
F	Metodologia de estimação de J	307

Lista de Figuras

2.1	Ciclo de monitoramento de processos	11
2.2	Classificação dos métodos de detecção e diagnóstico de falhas [19] . .	18
3.1	Trajectoria traçada pela lei de evolução f^t . Começando desde um ponto x no espaço de estados, depois de um tempo t , o ponto esta em $f^t(x)$. A lei de evolução f^t pode ser usada para mapear a região $\mathcal{M}_i$ do espaço de estados dentro da região $f^t(\mathcal{M}_i)$	32
3.2	Por um tempo finito a base local formada pelos vetores característicos é transportado ao longo da órbita e deformado pela matriz Jacobiana J^t . Como J^t não é auto-adjunta, uma base ortogonal é mapeada em uma base não ortogonal. Adaptado de [61]	39
3.3	Para um ciclo primário p , a matriz Jacobiana é chamada de <i>matriz de Floquet</i> e representa a vizinhança esférica infinitesimal $x_0 \in \mathcal{M}_p$ esticado dentro de um elipsoide sobreposto ao longo do vetor característico e^j de $J_p(x)$ dado pelo <i>multiplicador de Floquet</i> $ \Lambda_j $. A magnitude do raio do elipsoide é invariante sob reparametrizações não lineares das coordenadas do espaço de estados e é uma propriedade intrínseca do ciclo p	42
3.4	Uma trajetória $x(t)$ que intersecta uma secção de Poincaré $\mathcal{P}$ nos tempos t_1, t_2, t_3 e fecha um ciclo em $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$, $\hat{x}_k = x(t_k) \in \mathcal{P}$ de longitude topológica 3 em relação à secção. Em geral, as intersecções não são normais à secção. Observe-se também que a intersecção z não conta, já que está na direção oposta às outras intersecções [61]. .	45

3.5	(Esquerda) Sequência de secções de Poincaré do atrator estranho do sistema de Rossler. Os planos foram definidos através do eixo z , orientados a: (a) -60° , (b) 0° , (c) 60° e (d) 120° no plano (x-y). (Direita) Vistas das trajetórias típicas do fluxo de Rossler com as secções de Poincaré superpostas. [61]	48
3.6	Mapas de retorno $r_n \rightarrow r_{n+1}$ para distância radial das secções de Poincaré da Figura 3.5. [61]	48
3.7	O fluxo $x(t)$ representado por um mapa de retorno de Poincaré da forma $x_{n+1} = f(x_n)$. Observa-se que a órbita de $\hat{x}_1$ é periódica e contém quatro pontos periódicos $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3, \hat{x}_4)$ [61].	49
3.8	Ilustração esquemática da transformação do padeiro no atrator de Rossler [258]	50
3.9	A dinâmica de um sistema caótico é (a) em qualquer lugar localmente instável e (b) com fluxo globalmente misturado [61].	52
3.10	O cálculo do expoente de Lyapunov representativo para um tempo determinado requer que se mantenha a separação das órbitas próximas dentro do intervalo do fluxo linearizado	54
3.11	Deformação da esfera de condições iniciais através do fluxo linearizado	56
3.12	Histograma normalizado de uma variável aleatória	73
3.13	Histograma normalizado com diferentes posições de bins	73
3.14	Ilustração da construção de um KDE [107].	74
3.15	Diagramas de Venn de (a) informação mútua, (b) informação mútua condicional, (c) informação de interação positiva, (d) informação de interação negativa. No ultimo caso as entropias de X e Z não se sobrepõem [227].	80

3.16	Interações causais num processo $\mathbf{X}$ multivariado (a) plano causal de séries temporais; as caixas ponteadas marcam as condições para a <i>CMI</i> entre $X_{t-\tau}$ em $\tau = 2$ e Y_t (marcados por pontos pretos). O conjunto infinito $\mathbf{X}_t^- \setminus X_t^- \cup X_{t-\tau}^-$ é notado pelas linhas ponteadas cinzas. Só o conjunto finito $\mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ (linhas ponteadas vermelhas) é necessário para satisfazer a Equação 3.86. $\mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ deve ser escolhido de modo que separe as condições infinitas ignoradas $(\mathbf{X}_t^- \setminus X_t^- \cup X_{t-\tau}^-) \setminus \mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ de Y_t no gráfico. O conjunto ainda menor de pais $\mathcal{P}_{Y_t}$ (caixa azul, nós cinzas) separa Y_t do passado do processo inteiro $\mathbf{X}_t \setminus \mathcal{P}_{Y_t}$. (b) No gráfico <i>MIT</i> é a <i>CMI</i> entre $X_{t-\tau}$ em $\tau = 2$ e Y_t (marcado por pontos pretos) condicionada aos parentes $\mathcal{P}_{X_{t-\tau}}$ (vermelho) e $\mathcal{P}_{Y_{t-\tau}}$ (azul) [227]	84
3.17	Diagramas de Venn que representam a entropia $H(Y)$ no tempo t (omitindo t e τ como uma coluna segmentada). É composta pela entropia de origem (cinza) $H(Y \mathcal{P}_{Y_t})$ e parte da entropia de fonte $H(X \mathcal{P}_{X_t})$ (rosa), a entropia $H(\mathcal{P}_{X_t})$ dos parentes de X (laranja), e a entropia $H(\mathcal{P}_{X_t} X_{t-\tau})$ dos parentes restantes de Y (azul). O $I_{X \rightarrow Y}^{MIT}(\tau)$ (segmento de borda sólida) é a diferença entre a entropia $H(Y \mathcal{P}_Y \setminus \{X\}, \mathcal{P}_X)$ (segmento tracejado) que inclui a transferência de X e a entropia de origem de Y que a exclui. [227]	85
3.18	Derivação da equação Master [195].	87
4.1	Workflow e metodologia de caracterização de comportamentos dinâmicos descritos por modelos matemáticos	95
4.2	Workflow e metodologia de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas	98
4.3	Workflow e metodologia de análise não linear de séries temporais . . .	102
5.1	Diagrama da estação de medição fiscal de óleo e gás	108
5.2	Séries temporais de temperatura e vazão de gás fiscal num período com duas falhas. As linhas vermelhas representam o evento de ocorrência, enquanto as linhas verdes representam o evento de detecção. Por sua vez, as linhas sólidas correspondem ao evento de falha B e as linhas tracejadas ao evento de falha A	110
5.3	Metodologia de estimação de valores perdidos ou corrompidos durante falha - ANP [70].	111

5.4	Sistema de produção offshore de petróleo e gás com configuração de controlador PI	113
5.5	Simulação dinâmica de um poço de produção offshore. A linha vertical nota o surgimento de uma bifurcação de Hopf, i.e. o surgimento de golfadas no sistema.	114
5.6	Dados de operação de um poço Petrobras com dinâmica de golfadas. As variáveis nP_{pdg} e nP_{rt} correspondem às pressões na PDG e no topo do <i>riser</i> . As linhas verticais vermelhas denotam as mudanças de operação em relação à abertura de válvula Choke z	115
5.7	Respostas da pressão P_{pdg} em função do parâmetro z	117
5.8	Respostas da pressão P_{rb} em função do parâmetro z	118
5.9	Respostas da pressão P_{rt} em função do parâmetro z . Em zoom a resposta inversa.	118
5.10	Análise de estabilidade do sistema FOWM em regime oscilatório-periódico. A seta preta corresponde à componente real do primeiro valor característico ($Re(\lambda_x)$) e a seta vermelha ortogonal corresponde à componente imaginária do mesmo valor característico ($Im(\lambda_x)$) . .	119
5.11	Trajetória do FOWM (azul) com os pontos de Poincaré (vermelho) que intersectam o plano sobre o eixo z	120
5.12	Vetores característicos da matriz Jacobiana numa órbita periódica $f^t(x_p)$ do sistema FOWM	121
5.13	Diagrama de bifurcação via simulação dinâmica para o sistema FOWM, em respeito a z . Ramos de máximos (vermelho), ramos de mínimos (azul) e equilíbrios instáveis (preto)	123
5.14	Diagrama de bifurcação via simulação dinâmica para o sistema FOWM, em respeito a u_2 . Ramos de máximos (vermelho), ramos de mínimos (azul) e equilíbrios instáveis (preto)	123
5.15	Diagrama de bifurcação via continuação paramétrica para o sistema FOWM, em respeito a z . Ramos de máximos e de mínimos (pontos pretos), equilíbrios estáveis (linha continua preta) e equilíbrios instáveis (linha intermitente preta)	124
5.16	Diagrama de bifurcação para o sistema FOWM e sua relação com os 3 maiores expoentes de Lyapunov	125

5.17	Diagrama de bifurcação e relação com a métrica D2 para o sistema FOWM	126
5.18	Diagrama de bifurcação e relação com a métrica H para o sistema FOWM	126
5.19	Recorrências no ciclo FOWM: (esquerda) mapa de recorrência correspondente à trajetória cíclica do fluxo do FOWM, onde os pontos pretos representam as recorrências; (direita) quantificação de recorrências usando as taxas de recorrência locais para cada região do espaço de fases. O raio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 25$. . .	127
5.20	Desempenho do controlador PI no cenário de controle 1	128
5.21	Desempenho do controlador PI no cenário de controle 2	128
5.22	Desempenho do controlador PI no cenário de controle 3	129
5.23	Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 1	130
5.24	Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 2	130
5.25	Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 3	131
5.26	Distribuição de pontos de bifurcação de Hopf ao longo do espaço paramétrico	132
5.27	Distribuição de pontos de bifurcação de Hopf ao longo do espaço biparamétrico	132
5.28	Séries temporais da trajetória caótica do modelo FOWM $\mathcal{M}_\alpha$. No quadro preto são ressaltados os intervalos com presença de MMOs . .	133
5.29	Trajetoória caótica do modelo FOWM $\mathcal{M}_\alpha$ no espaço de estados. <i>EQ1</i> denota a localização do ponto de equilíbrio	134
5.30	Diagrama de bifurcação (A) e máximo expoente de Lyapunov (B) e entropia de Shannon (C) com respeito ao parâmetro de sintonia do controlador de acordo com a Tabela 5.5	135
5.31	Máximo expoente de Lyapunov λ_{max} do modelo FOWM no espaço paramétrico $K_p - u2$. O mapa de calor e barra de cores representam o valor de λ_{max} . Uma ampla variedade de comportamentos foi identificada, alguns deles representados nos painéis A-B (caótico), C (periódico) e D (ponto fixo estável)	135
5.32	Taxa de recorrência (<i>RR</i>) ao longo da trajetória caótica $\mathcal{M}_\alpha$ do FOWM	137

5.33	Reconstrução do espaço de fases do atrator de Rossler pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $P_{pdg}(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (e) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 5$; (c) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 10$ e (d) e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 15$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do modelo FOWM	138
5.34	Procedimento de atualização de registros durante a previsão de estados pela rede neuronal	139
5.35	Modos de decomposição $\dot{v}(t)$	139
5.36	Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B)	140
5.37	Tempos de atraso τ para obtenção de autocorrelação nula como função do tempo	142
5.38	Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento do tempo de atraso τ para obtenção de autocorrelação nula como função do tempo	143
5.39	Superior:Primeiro mínimo da função de informação mútua vs tempo. Inferior: Entropia de Shanon na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500.	144
5.40	Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da Entropia de Shanon vs tempo.	145
5.41	Superior:Maior expoente de Lyapunov na janela vs tempo. Inferior: Espectro de Lyapunov na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500	146
5.42	Superior:Entropia de Kolmogorov na janela vs tempo. Inferior: Dimensão de correlação na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500.	147
5.43	Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da entropia de Kolmogorov na janela vs tempo.	147
5.44	Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da dimensão de correlação na janela vs tempo.	148

5.45	Carta de controle para o monitoramento de monovariável em um período em torno ao evento de falha C	149
5.46	Matriz de distâncias do conjunto multidimensional de temperaturas do processo. O índices j_{th} correspondem aos mesmos i_{th} expressos como datas.	150
5.47	Função de distribuição de probabilidade para a variável vazão instantânea de gás FIT-3655-002A, média $\bar{x} = 703.218$ e desvio padrão $\mu = 163.55$. (a) Histograma e densidade de probabilidade da variável e regressão da equação de distribuição normal.(b) densidade de probabilidade obtida por KDE.	151
5.48	Tempos de atraso τ na função de autocorrelação nula em função do diagrama de bifurcação	152
5.49	Tempos de atraso τ na função de autocorrelação nula vs tempo. Barra laranja representa, proporcionalmente, o tamanho de janela empregado $w = 200$	153
5.50	Primeiro mínimo de informação mútua e entropia de Shannon em função da abertura da válvula Choke.	154
5.51	Entropia de Shannon em função do tempo. Barra laranja representa, proporcionalmente, o tamanho de janela empregado $w = 200$	154
5.52	Metodologias para a reconstrução do diagrama de bifurcação de um sistema dinâmico via redes neurais LSTM [268].	157
5.53	Procedimento de atualização de registros durante a previsão de estados pela rede neural	159
5.54	Perturbações $p(t)$ via processo estocástico Ornstein-Uhlenbeck e respostas dinâmicas	160
5.55	Arquitetura da rede neural usada para a reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler	161
5.56	Métricas estatísticas durante o treinamento da rede neural	161
5.57	Reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler pela metodologia de única série: (a) diagrama de bifurcação de referência via equações.(b) diagrama de bifurcação de reconstruído.	162
5.58	Reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler pela metodologia de múltiplas séries.	162

5.59	Realizações dos iterados de b pela abordagem estocástica e pela abordagem de cópia de distribuição. Histograma de funções de probabilidade.	164
5.60	Comparação entre o diagrama de bifurcação do fluxo de Rossler e os diagramas reconstruídos pelas abordagens estocástica e de cópia de função de probabilidade.	164
5.61	Séries temporais do modelo FOWM empregadas na predição do diagrama de bifurcação	165
5.62	Métricas de aprendizado durante o treinamento da rede neural	166
5.63	Curva de aprendizagem durante o treinamento da rede neural. No caso o valor de perda <i>loss</i> corresponde ao próprio EQM.	166
5.64	Diagrama de bifurcação do modelo FOWM reconstruído pela rede neural LSTM	167
5.65	Séries temporais do modelo FOWM empregadas na predição do diagrama de bifurcação. O conjunto inclui as métricas invariantes: τ autocorrelação nula, τ de mínimo de informação mútua, entropia de Shannon, entropia amostral, máximo expoente de Lyapunov e dimensão de correlação.	167
5.66	Métricas de aprendizado durante o treinamento da rede neural usando métricas invariantes	168
5.67	Curva de aprendizagem durante o treinamento da rede neural usando métricas invariantes	169
5.68	Diagrama de bifurcação do modelo FOWM reconstruído pela rede neural LSTM usando as métricas invariantes	169
5.69	Dados do processo do período I e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).	170
5.70	Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período I (Normalização robusta [216]).	171
5.71	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período I (Normalização robusta [216]).	172
5.72	Dados do processo do período II e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).	172

5.73	Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).	173
5.74	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).	173
5.75	Dados do processo do período II e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).	174
5.76	Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).	174
5.77	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).	175
5.78	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 9$	176
5.79	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 12$	177
5.80	Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 29$	178
5.81	Representação esquemática da rede ecossistêmica food-web e seus nichos.	180
5.82	Comparação entre os autovalores analíticos do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana.	181
5.83	Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando a como parâmetro de bifurcação.	182
5.84	Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando c como parâmetro de bifurcação.	182
5.85	Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo modificado e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando c como parâmetro de bifurcação.	183

5.86	Mapa de causalidade do processo Tennessee-Eastman em condição normal de operação. Conexões entre variáveis são representadas por setas e podem ser diretas $\rightarrow$ ou indiretas $-$. Os nós representam as variáveis e suas próprias autocorrelações. Conexões em vermelho representam uma correlação positiva enquanto as conexões em azul representam correlações negativas. Autocorrelações em branco representam uma autocorrelação nula da variável enquanto autocorrelações em vermelho significam uma alta autocorrelação da variável.	186
5.87	Mapa de causalidade das variáveis do processo EFAL. Conexões entre variáveis são representadas por setas e podem ser diretas $\rightarrow$ ou indiretas $-$. Os nós representam as variáveis e suas próprias autocorrelações. Conexões em vermelho representam uma correlação positiva enquanto as conexões em azul representam correlações negativas. Autocorrelações em branco representam uma autocorrelação nula da variável enquanto autocorrelações em vermelho significam uma alta autocorrelação da variável.	189
5.88	Predição dos regressores para a vazão de gás no medidor fiscal 02B (Section A) na falha - FI quando empregado o algoritmo PCMCI (correlação parcial) como método de seleção de variáveis.	197
5.89	Índice de detecção SPE na falha - FI quando empregado o algoritmo PCMCI (correlação parcial) como método de seleção de variáveis.	198
5.90	Predição dos regressores para a temperatura no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.	199
5.91	Índice de detecção SPE na falha - FII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.	200
5.92	Predição dos regressores para a temperatura no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FIII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.	201
5.93	Índice de detecção SPE na falha - FIII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.	202

5.94	Predição dos regressores para a Temperatura de gás no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FII sem seleção de variáveis.	206
5.95	Índice de detecção SPE na falha - FII sem seleção de variáveis.	207
A.1	Diagram PFD do processo Tenesse-Eastman [55]	253
D.1	Séries temporais do atrator de Rossler obtidas pela integração do conjunto de Equações 3.2 com condições iniciais $x_0 = 9.64832079329$ $y_0 = -3.51977184351$ e $z_0 = 0.811107128559$, parâmetros $a = b = 0.2$, $c = 5.7$ e um vetor temporal $t = [0, 200, 10000]$	265
D.2	Análise de estabilidade avaliada no ponto de equilíbrio da base de atração do fluxo do atrator de Rossler. A seta preta corresponde à componente real do primeiro valor característico ($Re(\lambda_x)$) e a seta vermelha ortogonal corresponde à componente imaginária do mesmo valor característico ($Im(\lambda_x)$). O atrator foi obtido usando as mesmas condições da figura D.1	267
D.3	Atrator de Rossler (azul) com os pontos de Poincaré(vermelho) que intersectam o plano sobre o eixo z	268
D.4	Mapeamento de Poincaré do atrator de Rossler, que indica a posição coordenada dos pontos de Poincaré	268
D.5	Mapa de retorno do atrator de Rossler, a linha diagonal auxilia a visualização do ponto periódico do primeiro iterado	269
D.6	Máximo expoente de Lyapunov numa malha paramétrica B-C multi-dimensional	271
D.7	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Rossler com ($a = 0.1$ e $b = 0.1$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando b . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação	272
D.8	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Rossler com ($a = 0.2$ e $c = 5.7$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando c . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação	273
D.9	Vetores característicos da matriz Jacobiana numa órbita periódica do sistema Rossler, o vetor característico sobreposto à trajetória corresponde ao multiplicado de Floquet marginal ($\Lambda = 0$).	274

D.10	Recorrências no atrator de Rossler: (D.10a) mostra o mapa de recorrência correspondente à trajetória caótica do fluxo de Rossler, onde os pontos pretos representam as recorrências. (D.10b) corresponde à quantificação de recorrências (Usando a taxa de recorrência RR) locais para cada região do espaço de fases. O radio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 1$	276
D.11	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Determinismo (DET); Taxa de recorrência (RR) e Laminaridade (LAM)	277
D.12	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Entropia de linhas diagonais (DENTR) e Entropia de linhas verticais (VENTR)	278
D.13	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Tempo de retenção (TT) e média de linhas verticais (AVE)	278
D.14	Séries temporais do atrator de Lorenz obtidas pela integração do conjunto de Equações 3.1.1 com condições iniciais $x_0 = 10.0$, $y_0 = -1.0$ e $z_0 = 0.0$, parâmetros $\sigma = 10$, $\beta = 28$, $\rho = 8/3$ num vetor temporal $t = [0, 200, 10000]$	279
D.15	Análise de estabilidade avaliada no ponto de equilíbrio $x_q = (0, 0, 0)$ do atrator de Lorenz. As setas correspondem aos três vetores característicos do sistema . O atrator foi obtido usando as mesmas condições da figura D.14	280
D.16	Atrator de Lorenz (azul) com os pontos que são intersectados pelos planos $x = y$ e $x = -y$. Os pontos de equilíbrio são notados como EQ_0 , EQ_1 e EQ_2	281
D.17	Mapeamento de Poincaré do atrator de Lorenz, que indica a posição coordenada dos pontos de Poincaré	281
D.18	Máximo expoente de Lyapunov numa malha paramétrica $\rho - \sigma$ multidimensional	282
D.19	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Lorenz com ($\sigma = 10$ e $\beta = 8/3$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando ρ . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Lorenz nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação	283

D.20	Recorrências no atrator de Lorenz: (D.20a) mostra o mapa de recorrência correspondente à trajetória caótica do fluxo de Lorenz, onde os pontos pretos representam as recorrências. (D.20b) corresponde à quantificação de recorrências (Usando a taxa de recorrência RR) locais para cada região do espaço de fases. O radio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 7$	284
D.22	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Determinismo (DET); Taxa de recorrência (RR) e Laminaridade (LAM)	285
D.23	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Entropia de linhas diagonais (DENTR) e Entropia de linhas verticais (VENTR)	285
D.21	Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Tempo de retenção (TT) e média de linhas verticais (AVE)	286
D.24	Função de autocorrelação vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal, onde autocorrelação é zero corresponde a $\tau = 8$	287
D.25	Função de informação mútua vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal corresponde ao primeiro mínimo da função de informação mútua a $\tau = 7$ (inteiro mais próximo)	287
D.26	Fração de falsos vizinhos vs dimensão de imersão. A dimensão ideal, indicada pelo mínimo da fração de falsos vizinhos é $m = 3$, (mesma dimensão do espaço de fases origina $\mathcal{M}$)	288
D.27	Reconstrução do espaço de fases do atrator de Rossler pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $x(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (e) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 3$; (c) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 7$ e (d) e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 25$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do Rossler	289
D.28	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler estimado a partir da série temporal $x(t)$	290

D.29	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura inferior: Maior expoente de Lyapunov do fluxo de Rossler estimado a partir da série temporal $x(t)$	291
D.30	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura intermédia: Entropia de Kolmogorov estimada a partir da série temporal $x(t)$. Figura inferior: Dimensão de correlação estimada a partir da série temporal $x(t)$	292
D.31	Comparação na quantificação de recorrências. (A) Invariantes de quantificação RQA obtidos usando a totalidade de séries do espaço de fases $\mathcal{M}$ (a partir das equações). (B) Mapa de recorrências do atrator (a partir das equações). (C) Invariantes de quantificação RQA obtidos usando as técnicas de reconstrução (a partir da série temporal $x(t)$). (D) Mapa de recorrências do atrator (a partir da série temporal $x(t)$). Foram considerados $\epsilon = 10$, $l_{min} = 30$ e $v_{min} = 30$	292
D.32	Função de autocorrelação vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal, onde autocorrelação é zero corresponde a $\tau = 143$	293
D.33	Função de informação mútua vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal corresponde ao primeiro mínimo da função de informação mútua a $\tau = 16$ (inteiro mais próximo)	294
D.34	Fração de falsos vizinhos vs dimensão de imersão. A dimensão ideal, indicada pelo mínimo da fração de falsos vizinhos é $m = 3$, (mesma dimensão do espaço de fases origina $\mathcal{M}$)	294
D.35	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Lorenz estimado a partir da série temporal $x(t)$	295
D.36	Reconstrução do espaço de fases do atrator de Lorenz pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $x(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (e) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 16$; (c) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 64$ e (d) e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 143$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do Lorenz .	296
D.37	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura inferior: Maior expoente de Lyapunov do fluxo de Lorenz estimado a partir da série temporal $x(t)$	297

D.38	Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura intermédia: Entropia de Kolmogorov estimada a partir da série temporal $x(t)$. Figura inferior: Dimensão de correlação estimada a partir da série temporal $x(t)$	298
D.39	Modos de decomposição $\dot{v}(t)$ do fluxo de Rossler	299
D.40	Modos de decomposição $\dot{v}(t)$ do fluxo de Lorenz	299
D.41	Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B) para o fluxo de Rossler	299
D.42	Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B) para o fluxo de Lorenz	300

Lista de Tabelas

3.1	Medidas para quantificação de recorrências	64
3.2	Tipos de kenels frequentemente utilizados em KDE	76
4.1	Interpretação visual de padrões num mapa de recorrências [6]. LOI corresponde à diagonal principal.	94
4.2	Métodos de seleção de variáveis aplicados	99
4.3	Falhas analisadas no processo TEP (ver Apêndice A)	100
4.4	Descrição de falhas processo FAL (ver Seção 5.1.1)	100
5.1	Tipos de variáveis medidas na estação fiscal de monitoramento	109
5.2	Tipos de variáveis medidas na plataforma de produção offshore	116
5.3	Ponto de equilíbrio, valores característicos de estabilidade local, ponto periódico e expoentes de Floquet do comportamento periódico FOWM.	119
5.4	Intervalos de parâmetros de bifurcação do grupo A	122
5.5	Parâmetros do controlador PI na trajetória caótica $\mathcal{M}_\alpha$	133
5.6	Valores característicos de estabilidade	134
5.7	Períodos de dados usados na reconstrução do diagrama de bifurcação via rede neural artificial.	170
5.8	Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur	179
5.9	Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur modificado	183
5.10	Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur modificado	183
5.11	Performance de referência quando nenhum procedimento de seleção de variáveis foi empregado-FAL	190

5.12	Desempenho quando os métodos de filtro de seleção de variáveis foram empregados - FAL	192
5.13	Desempenho quando os métodos wrapper de seleção de variáveis foram empregados - FAL	193
5.14	Desempenho quando os métodos embutidos de seleção de variáveis foram empregados - FAL	195
5.15	Desempenho quando os métodos causais de seleção de variáveis foram empregados - FAL	196
5.16	Desempenho dos métodos de seleção de variáveis empregados na detecção de falhas do processo TEP	204
5.17	Comparação de desempenho na falha F-II entre modelos ML e métricas invariantes	208
A.1	Descrição de variáveis manipuladas no processo Tennessee-Eastman . .	251
A.2	Descrição de variáveis medidas no processo Tennessee-Eastman	251
A.3	Medidas amostradas na corrente de alimentação do reator (corrente 6) no processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)	252
A.4	Medidas amostradas na corrente de purga (corrente 9) no processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)	252
A.5	Medidas amostradas na corrente 11 do processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)	252
B.1	Variáveis do EFAL na análise de causalidade.	257
D.1	Autovalores obtidos via análise da matriz A para os fluxos Benchmarks	266
D.2	Espectros de Lyapunov obtidos vs espectros de Lyapunov em [286] . .	271
D.3	Multiplicadores de estabilidade da matriz J dos fluxos de estudo . . .	274
E.1	Parâmetros do modelo para um caso real	305
E.2	Parâmetros de ajuste do FOWM	305

Lista de Símbolos

A_{ij}	Matriz de estabilidade, p. 37
$\mathbf{A}$	Operador linear, p. 66
$C(\epsilon)$	Coeficiente de soma de correlação, p. 64
$C(\tau)$	Medida de correlação linear, p. 57
C_{ij}	Matriz de covariâncias, p. 60
CR_{ij}	Matriz de recorrência cruzada, p. 62
D	Dimensão de correlação, p. 65
d_B	dimensão boxcounting, p. 56
$\det J^t$	Determinante da matriz Jacobiana, p. 37
$e^{(j)}$	Vetor característico j, p. 38
f^t	Lei de velocidade, p. 31
$H(X)$	Entropia de informação da variável X, p. 58
$\tilde{H}_q$	Entropia de Renyi, p. 65
$H(X Y)$	Entropia de condicional das variáveis X e Y, p. 58
$\mathbf{H}$	Matriz de Hankel, p. 68
h	Comprimento de banda, p. 73
h_{ks}	Entropia de Kolmogorov-Sinai, p. 65
$I(X, Y)$	Informação mútua, p. 58
$I(X : Y Z)$	Informação mútua condicional, p. 77
$I(X_t^-; Y_t \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-)$	Entropia de transferência decomposta, p. 81

$I_{X \rightarrow Y}^{MIT}(\tau)$	Entropia momentânea de informação, p. 84
$I_{X \rightarrow Y}^{TE}$	Entropia de transferência, p. 80
Imj	Parte imaginária do valor j , p. 38
JR_{ij}	Matriz de recorrência conjunta, p. 63
J^t	Matriz Jacobiana, p. 37
K	Kernel, p. 73
k_B	constante de Boltzmann, p. 86
M_{ij}	Matriz de recorrência, p. 61
m	dimensão de imersão, p. 56
N_s	Número de neurônios na camada oculta da rede neural, p. 155
$p(x, y)$	Função de densidade de probabilidade conjunta, p. 58
R_τ	Número de <i>rolls</i> de atraso ou passos atrás da rede neural, p. 155
R_i	Fração de falsos vizinhos, p. 59
R_n	Ponto no mapa de Poincaré, p. 48
Rej	Parte real do valor j , p. 38
$\mathbb{R}^d$	Espaço d-dimensional dos números reais, p. 32
$S_{(\Delta n)}$	Fator de estreitamento, p. 64
s_n	Série temporal de tamanho n , p. 56
T_{av}	Media do período de oscilação do atrator, p. 155
T_p	Período de uma órbita periódica, p. 33
$U(x)$	potencial de interação da partícula, p. 86
Ux	Função de Poincaré, p. 45
$v(x)$	Campo de velocidades, p. 35
W_t	processo de Wiener, p. 85
$\mathbf{X}_t$	Processo multivariado com passado infinito, p. 79

$X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$	Link direcionado de subprocessos, p. 79
$X_t - Y_t$	Link contemporâneo entre dois processos, p. 80
ξ_i	ruído gaussiano (branco), p. 88
x_t	Ponto no espaço de estados, p. 31
z_n	Ponto no mapa de retorno, p. 48
Ω_{ij}	taxas de transição, p. 87
Θ	Função degrau ou Heaviside, p. 61
ϵ	Raio da vizinhança, p. 61
γ	coeficiente de fricção Langevin, p. 86
$\hat{x}$	Ponto de Poincaré, p. 44
λ	Expoente de Lyapunov (Bits/s), p. 52
λ^j	Expoente de estabilidade, p. 38
$\mathcal{M}$	Espaços de fases, p. 31
$\mathcal{P}$	Função de Poincaré, p. 44
$\mathcal{I}(X; Y; Z \mid W)$	Informação de interação condicional, p. 78
$\mathcal{N}$	Vizinhos contemporâneos, p. 84
μ	Espaços de drift, p. 85
σ	Desvio padrão, p. 57
σ	Espaços de difusão estocástico, p. 85
τ	tempo de atraso, p. 56
$\theta_T(x)$	Função de imersão, p. 56
Γ	matriz de covariância, p. 88
Λ_j	Multiplicador de estabilidade, p. 38
Ω	Conjunto não errante, p. 34
φ	difeomorfismo, p. 56
$\vartheta(s_{n_0})$	Vizinhança do vetor de imersão, p. 64

Lista de Abreviaturas

ANP	Agencia Nacional do Petróleo, p. 109
ARMAX	Modelo auto-regressivo de média móvel com modelo de entradas exógenas, p. 23
ARMA	Modelo auto-regressivo de média móvel, p. 23
BSW	Água e sedimentos de fundo, p. 107
CM	Manutenção corretiva, p. 1
CPS	sistema físico cibernético, p. 3
CVA	Análise de variáveis canônicas, p. 4
DBN	Rede dinâmica bayesiana, p. 27
DDF	Deteção e diagnóstico de falhas, p. 2
DMD	Decomposição em modo dinâmico, p. 67
DPCA	Análise dinâmica de componentes principais, p. 16
DTE	Entropia de transferência decomposta, p. 82
DTF	Funções de transferência direcionada, p. 27
EFAL	Estação fiscal de medição, p. 95
EGG	Electro-encefalogramas, p. 21
EMA	Erro médio absoluto, p. 165
EQM	Erro quadrático médio, p. 165
Eq	Equação, p. 39
FDA	Análise discriminante de Fisher, p. 16

FTC	Controle tolerante à falhas, p. 9
KDE	Estimativa de densidade Kernel, p. 72
LOI	Diagonal principal da matriz de recorrências, p. 94
LSTM	Long short-term memory, p. 156
M2M	máquina para máquina, p. 3
PCA	Análise de componentes principais, p. 4
PCA	Principal Components Analysis, p. 60
PDC	Coerência parcial direcionada, p. 27
PDEs	Partial Differential Equations, p. 33
PLS	Mínimos quadrados parciais, p. 16
PM	Manutenção preventiva, p. 1
RNN	Rede neural recorrente, p. 156
RQA	Análise de quantificação de recorrências, p. 62
RTE	Entropia de transferência de Renyi, p. 28
SDE	Equação diferencial estocástica, p. 86
SPE	Erro médio de predição, p. 99
SVM	Máquina de vetores de suporte, p. 26
TEP	Processo de Tenesse-Eastman, p. 100
TE	Entropia de transferência, p. 28, 82

Capítulo 1

Introdução

Nas últimas décadas, as funções de manutenção evoluíram drasticamente com o desenvolvimento da tecnologia e a relevância cada vez maior da revolução digital nos processos industriais. Manutenção pode ser definida como um conjunto de atividades ou tarefas usadas para restaurar um item a um estado no qual ele pode executar suas funções designadas. Estratégias de manutenção podem ser classificadas como estratégias de Manutenção Corretiva (CM) e Manutenção Preventiva (PM) [7]. A manutenção corretiva, também conhecida como manutenção reativa, é uma estratégia usada para restaurar (consertar ou substituir) alguns equipamentos para sua função exigida depois de ter apresentado falha. Esta estratégia leva a altos níveis de custos por paradas não programadas de equipamentos (perda de produção) e manutenção (reparo ou substituição) devido a falhas repentinas [7]. Uma alternativa para a estratégia de CM é a estratégia de gerenciamento de projetos por PM, que envolve o desempenho de atividades de manutenção antes da falha do equipamento.

A aplicação da PM com auxílio da experiência acumulada constitui uma prática convencional. Na maioria dos casos, é realizada em intervalos de tempo regulares. Por conta do uso da experiência, nenhum procedimento padrão precisa ser seguido, de forma que o conhecimento de técnicos e engenheiros para fins de manutenção constitui um ativo valioso para a empresa. Técnicos e engenheiros neste cenário aprendem com erros anteriores e, com base na sua experiência, são capazes de detectar as condições anormais de um equipamento. Eles podem, então, decidir quais as medidas de PM devem ser aplicadas para evitar a quebra do equipamento.

No entanto, essa estratégia está sujeita a vários problemas, tais como o fato de que cada equipamento trabalha em um ambiente potencialmente diferente e, portanto, demanda diferentes agendamentos de PM. Além disso, os projetistas de máquinas geralmente não experimentam falhas de máquinas e têm menos conhe-

cimento sobre a prevenção de falhas em comparação com aqueles que operam e mantêm tais máquinas funcionando [7].

A área de pesquisa operacional tem introduzido ao longo das últimas décadas a aplicação da PM com base em uma abordagem científica que envolve processos e princípios específicos e que empregam várias técnicas analíticas, estatísticas, de programação matemática, inteligência artificial, etc. Isso constitui uma resposta às crescentes e exigentes demandas do mercado moderno nas indústrias, uma vez que são requeridos produtos de maior qualidade, lotes de produção com características homogêneas e existem limitações operacionais ditadas pelas cada vez mais rigorosas legislações ambientais [136].

Os processos químicos industriais devem ser monitorados continuamente para produzir produtos finais com a qualidade demandada pelos mercados. Os sistemas de monitoramento de processos auxiliam os operadores de plantas a observar as falhas com a maior antecipação possível, em vez de só descobrir a qualidade deficiente do produto no final da operação. O monitoramento de processo poderia estar relacionado a qualquer característica mensurável, a fim de ter reações oportunas para a correção e removendo as causas anormais. Isso poderia impedir não apenas os impactos econômicos e ambientais, mas também fornecer ambientes de trabalho mais seguros para os operadores. É importante notar que muitas das anormalidades nos processos químicos industriais, também referidas como falhas, são responsáveis por grande parte de acidentes industriais [156].

Em termos gerais de acidentes ocorridos em indústrias químicas, 25% deles estão relacionados a explosões ou incêndios e 71% estão relacionados a liberações de gases tóxicos na atmosfera, principalmente amônia e hidrocarbonetos. As causas gerais mais frequentes desses eventos indesejados estão relacionados a falhas em equipamentos (29%), falhas operacionais (21%), cálculos inadequados de material (16%), problemas no processo (11%) e problemas na mecânica dos materiais (9%) [156].

Ao longo do tempo, diversas metodologias para a detecção e diagnóstico de falhas (DDF) têm sido desenvolvidas. A pertinência do uso de uma ou outra técnica de monitoramento depende em grande medida das características do processo a ser monitorado. No entanto, na grande maioria de processos químicos industriais encontra-se que os sistemas de detecção e diagnóstico de falhas são baseados em técnicas estatísticas multivariáveis [19]. Isso responde às características dos processos químicos atuais, que são de grande dimensão e impossibilitam a construção de modelos matemáticos fenomenológicos exatos e de rápida execução. Além disso, deve-se ressaltar a facilidade da obtenção de medições por sensores distribuídos ao

longo do processo e construção dos modelos empíricos de correlação.

De acordo com KHAN e ABBASI (1999), o mercado global de instrumentação foi avaliado em aproximadamente 17,12 bilhões de dólares por ano e espera-se um crescimento continuado desse mercado, chegando no 2024 a 21.62 bilhões de dólares. Isso constitui essencialmente uma resposta às adaptações dos processo nas indústrias 4.0.

Novas mudanças ocorreram na indústria no final do século XX, em que o computador se tornou mais poderoso e barato. As máquinas que até agora estavam aumentando o poder dos músculos dos humanos, agora começaram a amplificar e substituir a força do cérebro humano, que está sendo chamado de quarta revolução industrial (Indústria 4.0), introduzida primeiramente durante a feira de Hannover em 2011 e anunciada oficialmente na Alemanha em 2013 [252]. Inteligência artificial, robótica, internet das coisas (IoT), veículos autônomos, impressão 3D, big data, nanotecnologia, máquina para máquina (M2M), sistema físico cibernético (CPS), sensores, computação móvel, dentre muitas outras tecnologias, estão dando às indústrias de manufatura um novo visual para desenvolver fábricas inteligentes, sistema inteligente de gerenciamento de estoque e gestão inteligente da cadeia de suprimentos [192]. Essas tecnologias vão ajudar a transformar a tecnologia existente que já pode ter suporte para automatização, não só em termos de produtividade, mas também em termos de processos e também em termos de monitoramento do ambiente de trabalho de fabricação. Nesse contexto, a Indústria 4.0 está se posicionando em uma nova era de sistema e processo de produção industrial descentralizada e está completamente reestruturando processos de produção. A digitalização abrangente diminuirá o custo de produção e os sistemas de produção monitorados por sensores controlados pela internet e autocontrolados moldarão o futuro da máquina e do sistema de manufatura. Sistemas de produção baseados na indústria 4.0 poderão diminuir os custos de produção em 30%, os custos logísticos em 10% a 30% e os custos de gestão de qualidade em 10% a 20% [223]. ROJKO discutiu vários custos associados a sistemas mecânicos, como custo total, custo logístico, custo de inspeção e assim por diante, e concluíram que a digitalização e o sistema de manufatura inteligentes reduzirão o erro e a intervenção humana, o desperdício de produto e o custo unitário do produto.

Esse grandes desafios levam à crescente necessidade de transformar também as técnicas de monitoramento de processos, onde todas as decisões e mecanismo de funcionamento estarão baseados 'exclusivamente' ¹em dados. Além disso, o cresci-

¹Embora não usem qualquer modelo fenomenológico, muitas técnicas de monitoramento que se dizem *Data-driven* usam leis matemáticas para seu funcionamento. Por exemplo, a técnica Random Forest usa uma lei matemática preestabelecida para uma fase do algoritmo denominada

mento da demanda por técnicas de ciência dos dados e de aprendizado de máquina (*machine learning*) tem se manifestado de forma cada vez mais enfática em segmentos da sociedade que vão muito além do industrial. Essas características desta nova revolução digital abriram campo para o paradigma *Data-based* que, particularmente para o caso de monitoramento de processos químicos, pretende interpretar e intuir as lógicas, leis fenomenológicas e dinâmicas imersas no comportamento dos dados coletados durante a operação industrial, restringindo o uso de modelos matemáticos no mínimo.

Por outra parte, a análise não linear de séries temporais é uma área do conhecimento que surgiu paralelamente à Teoria do Caos, Teoria da Informação e análise de sistemas complexos. A análise não linear de séries temporais tem como objetivo revelar as características mais importantes de um sistema dinâmico usando as observações de uma série temporal. Pode-se dizer então que todas as técnicas da análise não linear de séries temporais envolvem métodos *Data-driven* para a caracterização de dinâmicas de alta complexidade. No entanto, as técnicas de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas clássicas não usam as metodologias da análise não linear de séries temporais, sendo que em muitos casos os comportamento dinâmicos dos processos químicos apresentam claras tendências complexas e não lineares [37].

1.1 Motivação

Grande parte dos métodos atuais de detecção de falhas está baseada em técnicas estatísticas que visam à projeção das medidas multidimensionais em espaços onde é possível distinguir comportamentos e tendências do processo a partir do fluxo de dados. Nesse sentido, técnicas como a análise de componentes principais (PCA) e a análise de variáveis canônicas (CVA), constituem o estado da arte em grande parte das estratégias de monitoramento de processos, uma vez que permitem extrair e construir uma hierarquia dos componentes mais importantes (principais responsáveis pela variância das medidas) no conjunto multidimensional de dados analisado. No entanto, esse tipo de técnicas obedece a critérios lineares e tem se mostrado limitada em cenários em que os dados apresentam condições de não linearidade, como autocorrelação e não-estacionariedade [113].

Por outra parte, a análise não linear de séries temporais constitui uma disciplina fundamental na área de dinâmica não linear para o entendimento dos processos dinâmicos em diversas áreas multidisciplinares [149]. A análise não linear de séries temporais engloba uma variedade de metodologias numéricas que permitem a iden-

de *bagging*[9]

tificação de estruturas dinâmicas imersas nos dados analisados, incluindo aquelas de natureza não linear e oferecendo um melhor entendimento sobre o processo a partir da análise de dados.

Dado o interesse crescente pelo estudo de novas metodologias de detecção de falhas e a falta de inclusão de conceitos derivados da análise não linear de séries temporais, é justificado e relevante um estudo sobre o potencial uso de técnicas de caracterização de dinâmicas não lineares em metodologias de detecção e diagnóstico de falhas. Além disso, este tipo de estudo pode determinar as condições ou limitações da inclusão de métricas do conjunto invariante de um sistema dinâmico para a caracterização do desempenho dos modelos estatísticos na predição e identificação de falhas no processo.

De acordo com tudo o que foi anteriormente argumentado, pode-se dizer que o foco de presente pesquisa pode ser muito importante para a indústria moderna.

Além disso, o estudo destes sistemas envolve a necessidade de desenvolver técnicas numéricas e metodologias que permitam estudar a natureza destes fenômenos e caracterizar as principais propriedades dessas dinâmicas com auxílio de modelos matemáticos do processo e técnicas *data-driven*.

1.2 Objetivos

Os principais desafios modernos na projeção de sistemas de monitoramento é a construção de técnicas com capacidade de operar em tempo real, identificando quedas de desempenho, prevendo cenários de falhas, detectando e diagnosticando falhas e sugerindo atividades de manutenções corretivas ou gerando ações de controle.

Ao longo do trabalho será explorado o potencial das técnicas de análise não linear de séries temporais para a caracterização de dinâmicas complexas. No entanto, o uso dessas metodologias na formulação de sistemas de monitoramento em processo químicos é raramente usada, como mencionado anteriormente. Por outra parte, a representatividade das dinâmicas imersas nos dados coletados pela medição de variáveis de processo constitui um desafio que pode ser enfrentado usando o conhecimento de dinâmicas complexas e suas metodologias de caracterização.

Outro aspecto importante é o estudo da causa raiz das falhas e suas propagações ao longo da trajetória dinâmica, que neste trabalho pretende ser abordado com auxílio da análise de causalidade contemporânea e dinâmica apresentada na Seção 3.5.

Assim, o objetivo principal desta tese em particular é desenvolver e implementar sistemas de monitoramento de processos químicos industriais, utilizando adaptações dos métodos de análise não linear de séries temporais, visando à construção de uma ferramenta que permita a identificação, máxima previsão, e diagnóstico causal de falhas de processo.

Alguns objetivos secundários também perseguidos nesta tese são:

- Apresentar uma introdução e um ferramental da área de análise não linear de séries temporais;
- Desenvolver metodologias de monitoramento baseadas na caracterização de atratores caóticos, bifurcações e outras dinâmicas complexas;
- Determinar métricas para o monitoramento multivariável que representem as principais características dos processos industriais reais;
- Desenvolver índices de monitoramento compatíveis com as métricas não lineares estudadas;
- Aplicar técnicas de programação de alto desempenho nas técnicas desenvolvidas visando à melhora no uso dos recursos computacionais e permitindo a aplicabilidade em tempo real;
- Desenvolver uma metodologia baseada em análise causal que seja auxiliar aos métodos de monitoramento, que permita identificar causas originárias de falhas e suas propagações;
- Oferecer ideias e referências para pesquisas futuras.

As etapas descritas a seguir no presente trabalho focam na avaliação das métricas não lineares usadas em relação aos parâmetros de desempenho de detecção de falhas, tais como: tempo de antecipação de falha, número de falsos alarmes, tempo computacional consumido, dentre outras. São também formuladas outras métricas de monitoramento baseadas na força causal entre conexões de variáveis contemporâneas e atrasadas no tempo. Também é formulada uma estratégia para o rastreamento do origem e propagação das falhas baseada na análise de causalidade.

Parte dessa pesquisa foi feita em parceria com a Petrobras no projeto de medidores fiscais e análise dinâmica, permitindo o teste de algumas das técnicas aqui desenvolvidas. Estes projetos contaram com a colaboração de diversos profissionais, que também contribuíram de forma significativa para a obtenção de resultados, associados às experiências e dados mais próximos da realidade industrial.

1.3 Estrutura do documento

Este primeiro capítulo discute alguns aspectos importantes a respeito das metodologias clássicas de monitoramento de processos e o potencial uso das técnicas de análise não linear de séries temporais para a caracterização de fenômenos não lineares, como o caos. Além disso, são apresentados os fatores que motivam a realização deste trabalho e os impactos na indústria moderna. Em seguida, no Capítulo 2 apresenta-se a revisão da literatura em torno a três tópicos determinantes:

- Métodos estabelecidos para monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas;
- Sistemas dinâmicos e análise de séries temporais;
- Análise causal em monitoramento de processos;

No Capítulo 3 é apresentada a fundamentação teórica sobre a teoria de sistemas dinâmicos não lineares e as respectivas técnicas numéricas de caracterização; conceitos e métodos de análise não linear de séries temporais; técnicas de seleção de variáveis e a fundamentação teórica da análise de descoberta causal. Posteriormente, no Capítulo 4 são apresentados a metodologia e os algoritmos de cálculos das mencionadas técnicas numéricas.

Os resultados obtidos e a respectiva discussão são apresentados no Capítulo 5. Os resultados são discutidos em diferentes seções, relacionados a:

- Apresentação dos casos de estudo;
- Caracterização dinâmica do modelo FOWM para a descrição da dinâmica oscilatória numa plataforma de produção offshore;
- Resultados obtidos pela análise não linear de séries temporais nos conjuntos de dados industriais;
- Reconstrução de diagramas de bifurcação a partir de séries temporais;
- Uso da ferramenta causal no contexto de detecção de falhas para o diagnóstico de anormalidades e seleção de variáveis.

Finalmente, no Capítulo 6 são apresentadas as principais conclusões do trabalho, com uma análise mais global dos resultados obtidos.

A presente tese de doutorado foi desenvolvida integralmente no Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos do Programa de Engenharia Química do

Instituto Alberto Luis de Coimbra de Pós-Graduação de Engenharia (COPPE) da Universidade Federal do Rio de Janeiro. Várias implementações em ambientes reais de produção foram feitas nas dependências da Petrobras, na forma de colaboração, como comentado ao longo do texto.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Revisão bibliográfica sobre técnicas de monitoramento

Durante as ultimas décadas a indústria química e outras indústrias relacionadas têm sido cada vez mais desafiadas a aumentar a qualidade dos seus produtos, fazendo um uso ótimo dos recursos envolvidos na produção, reduzindo as taxas de produtos defeituosos ou fora de especificação e satisfazendo as regulações ambientais e de segurança crescentemente mais rigorosas. Essa urgente demanda tem criado a necessidade de detectar durante a operação dos processos as condições de anormalidade e as perturbações que as geram. Para distinguir esses diferentes tipos de perturbações, neste trabalho são adotadas as seguintes definições [128]:

- Perturbação: É uma entrada desconhecida (e não controlável) que atua sobre o sistema;
- Falha: É um desvio não permitido (não tolerável) de uma condição aceitável/normal/padrão de operação em pelo menos uma das propriedades, características ou parâmetro do sistema;

Os sistemas tradicionais de controle de processos estão projetados para retornar o sistema à condição normal de operação sob presença de perturbações, mas não de falhas. Algumas técnicas modernas de controle chamadas FTC (*Fault-tolerant control*) são projetadas para operar explicitamente, considerando algumas classes de falhas específicas dentro da malha fechada [56].

Contudo, as falhas na indústria química constituem eventos extremos, havendo vários tipos de falhas que podem ser manifestadas dentro das seguintes categorias:

mudanças em parâmetros do processo, mudanças em parâmetros de perturbações, problemas nos atuadores e problemas nos sensores. Desativação de catalisadores ou incrustação em trocadores de calor são exemplos na categoria mudanças em parâmetros do processo. Uma mudança no parâmetro de perturbação pode ser uma mudança extrema na concentração de uma corrente de alimentação ou na temperatura ambiente. Um exemplo de problema de atuador é um bloqueio de válvula e um exemplo de problema de sensor é um sensor que produz um sinal com medidas corrompidas por desvios permanentes (bias) [55].

O propósito no monitoramento de processos é garantir o sucesso da operação planejada, fornecendo informações, reconhecendo e indicando anomalias no comportamento. A informação não só mantém o operador da planta e o pessoal de manutenção melhor informados sobre o estado do processo, mas também os auxilia a tomar as medidas corretivas apropriadas para remover o comportamento anormal do processo. Como resultado do monitoramento adequado do processo, o tempo de inatividade é minimizado, a segurança das operações da planta é aprimorada e os custos de processo são reduzidos [168].

Dado o constante crescimento e integração dos processos químicos modernos, as falhas apresentadas nestes processos estabelecem desafios na área de monitoramento, uma vez que as estratégias convencionais de controle univariado tem se mostrado inapropriadas para sistemas altamente multivariados [98]. Daí tem surgido um crescente interesse na pesquisa e desenvolvimento de tecnologias que permitam realizar um monitoramento eficiente em sistemas multivariados. Além disso, os processos químicos são cada vez mais instrumentados, resultando em uma quantidade enorme de dados disponíveis para monitoramento do processo. No entanto, essa grande quantidade de dados impõe outro desafio relacionado a aspectos computacionais, demandando cada vez maior capacidade de armazenamento de dados, maior velocidade de processamento e algoritmos mais eficientes.

RAICH e ÇINAR 1996 relacionam os seguintes procedimentos chaves no monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas (também resumidos na Figura 2.1):

- Detecção de falhas: determina se uma falha ocorreu. A detecção antecipada pode fornecer um aviso inestimável sobre problemas emergentes, que com ações apropriadas permite evitar transtornos mais graves no processo.
- Identificação de falhas: identifica as variáveis de observação mais relevantes para o diagnóstico da falha. O objetivo deste procedimento é focar a atenção do operador e engenheiro da planta nos subsistemas mais pertinentes ao diagnóstico da falha, para que o efeito da falha possa ser eliminado de maneira

mais eficiente.

- Diagnóstico de falhas: determina qual falha ocorreu; ou seja, determina a causa do estado fora de controle observado. ISERMANN 1995 define mais especificamente o diagnóstico de falhas como a determinação do tipo, localização, magnitude e tempo da falha [127]. O procedimento de diagnóstico de falhas é essencial para a neutralização ou eliminação da falha.
- Recuperação do processo: é uma intervenção em que é removido o efeito da falha e é o procedimento necessário para fechar o ciclo de monitoramento do processo.

Os procedimentos descritos acima podem ser implementados na sua totalidade num esquema de monitoramento, mas nem sempre isso é necessário. Por exemplo, uma falha pode ser diagnosticada sem que se identifiquem as variáveis imediatamente afetadas (identificação de falhas).

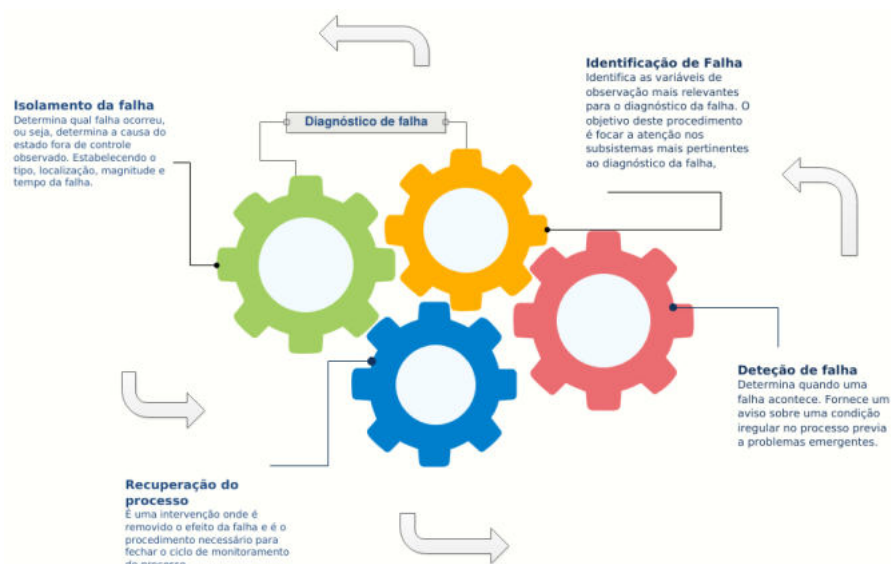


Figura 2.1: Ciclo de monitoramento de processos

2.1.1 Métodos de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas

Frequentemente os métodos de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas incorporam métricas baseadas em teorias estatísticas, teorias de classificação de padrões, teoria da informação e fenomenologia dos processos. Essas métricas são calculadas diretamente dos dados, as quais tentam representar o estado do processo. A ideia principal é converter um grande volume de dados coletados em linha em umas

poucas medidas ou métricas significantes, com o propósito de auxiliar o operador na determinação do estado do processo e eventualmente diagnosticar as falhas. Para a detecção de falhas, os limites podem ser colocados em algumas das medidas, e uma falha é detectada sempre que uma das medidas é avaliada fora dos limites. Dessa forma, as medidas são capazes de definir o comportamento do processo com controle e, consequentemente, o status do processo que está fora de controle. Ao desenvolver medidas que caracterizem com precisão o comportamento de cada variável de observação, o valor da medida de uma variável pode ser comparado com o valor da medida para outras variáveis para determinar qual variável é mais afetada pela falha. As falhas também podem ser diagnosticadas desenvolvendo e comparando medidas que representam com precisão as diferentes falhas do processo [245].

O método de monitoramento deve propor métricas que consigam ser ao mesmo tempo sensíveis e robustas a todas as falhas. As falhas se manifestam de várias maneiras; no entanto, é altamente improvável que todas as falhas que ocorrem em um processo possam ser efetivamente detectadas e diagnosticadas com apenas algumas métricas ou medidas. Cada medida caracteriza uma falta de maneira diferente, sendo uma medida mais sensível a certas falhas e menos sensível a outras falhas em comparação a outras medidas [168]. Isso motiva o uso de várias medidas de monitoramento de processo, com a proficiência de cada medida determinada para o processo específico e as possíveis falhas disponíveis.

L. RUSSELL *et al.* (2000) classifica os métodos de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas em três grandes grupos; **analíticos**, **data-driven** (baseados em dados) e **baseados em conhecimento**. Os métodos data-driven são derivados diretamente dos dados disponíveis, de forma que a detecção e o diagnóstico de falhas não empregam modelos matemáticos fenomenológicos, em contraste aos métodos analíticos que usam modelos matemáticos construídos a partir da base fenomenológica derivada dos princípios físico-químicos envolvidos. A abordagem **data-driven** é útil em casos nos quais existe uma suficiente quantidade de sensores e os modelos matemáticos descrevem satisfatoriamente as diferentes fases da operação. Por outra parte, os métodos baseados em conhecimento são aplicáveis em sistemas com pouca informação fenomenológica e baixa quantidade de sensores. Os procedimentos de estimação de estados ou estimação de parâmetros são exemplos de métodos analíticos, enquanto análises de causalidade são exemplos de métodos baseados em conhecimento.

Os métodos analíticos, também conhecidos como métodos baseados em modelos (*model-based methods*) são aplicáveis em sistemas que são satisfatoriamente descritos por modelos matemáticos fenomenológicos. Muitas das medidas analíticas estão baseadas em estimação de parâmetros, projeto de observadores e relações de

paridade. Tem sido observado que a eficiência desses métodos requer a implementação de modelos matemáticos precisos e detalhados [74, 129, 299] e como consequência tem sido motivada a pesquisa voltada ao desenvolvimento de métricas analíticas mais robustas em relação às incertezas dos modelos matemáticos [84, 98, 176]. As principais aplicações dos métodos analíticos dizem ao respeito de sistemas com uma quantidade de entradas, saídas e estados relativamente pequena. No entanto, quando são considerados sistemas de grande escala (i.e., sistemas que possuem um elevado número de entradas, saídas e estados), apresentam-se dificuldades relacionadas ao desenvolvimento de modelos eficientes, já que existe uma alta complexidade principalmente atribuída aos acoplamentos cruzados das múltiplas variáveis do sistema [125]. Tem sido observado também que características associadas com a identificação e controle de sistemas modelados inexatamente geram complicações no projeto dos esquemas de detecção e diagnóstico robusto de falhas [36, 88, 179, 233]. A principal vantagem dos métodos analíticos é a capacidade de incorporar bases fenomenológicas que inserem um significado físico nas métricas do sistema de monitoramento.

Vários trabalhos relacionados à detecção e diagnóstico de falhas usando métodos analíticos têm sido desenvolvidos ao longo das últimas décadas. Alguns deles são resumidos e revistos nas referências [132], [94], [99], [154], [279], [246] e [173].

Os métodos analíticos também são frequentemente referidos como métodos quantitativos. Mais especificamente, os métodos analíticos que usam resíduos são conhecidos como métodos de redundância analítica. Os resíduos são os resultados das verificações de consistência entre as observações da planta e um modelo matemático. Na situação preferida, os resíduos ou transformações dos resíduos são relativamente grandes quando as falhas estão presentes, e pequenos na presença de perturbações, ruído e / ou erros de modelagem. Isto permite a definição de limites para detectar as ocorrências de falhas [265].

As três principais formas de gerar resíduos fazem o uso das técnicas de estimação de parâmetros, definição de observadores e relações de paridade [55], como definido a seguir.

- Estimação de parâmetros: os resíduos são a diferença entre os parâmetros nominais do modelo e os parâmetros estimados do modelo. Os desvios nos parâmetros do modelo servem como base para detectar e isolar as falhas ([158], [131]);
- Observadores: o método baseado em observadores reconstrói a saída do sistema a partir das medições ou de um subconjunto de medições com o auxílio de observadores. A diferença entre as saídas medidas e as saídas estimadas é

usada como vetor de resíduos ([69],[90];

- Relações de paridade: este método verifica a consistência das equações matemáticas do sistema com as medições. As relações de paridade são submetidas a uma transformação linear e os resíduos transformados são usados para detectar e isolar falhas [99].

A abordagem baseada no conhecimento (*knowledge base methods*) utiliza modelos qualitativos para desenvolver medidas de monitoramento de processos. A abordagem baseada no conhecimento é especialmente adequada para sistemas para os quais não estão disponíveis os modelos matemáticos detalhados. A maioria das medidas baseadas no conhecimento é baseada na análise de causalidade (*causal analysis*), sistemas especialistas (*expert systems*) ou reconhecimento de padrões (*pattern recognition*). Como na abordagem analítica, a maioria das aplicações dos métodos baseados no conhecimento tem sido feita em sistemas com um número relativamente pequeno de entradas, saídas e estados. Construir os modelos de falha para um sistema de larga escala pode exigir um grande esforço [13].

As técnicas de análise de causalidade estão baseadas na modelagem causal das relações de sintomas de falhas. Relações qualitativas e semiquantitativas nesses modelos causais podem ser obtidas sem o uso de princípios fenomenológicos. As técnicas de análise causal, incluindo gráficos de direções causais (mapas causais) e a árvore causal, são usadas principalmente para diagnosticar falhas. Por outra parte, os sistemas especialistas são usados para mimetizar os raciocínios de operadores e especialistas no diagnóstico de falhas. A experiência de um especialista pode ser formulada em termos de regras, que podem ser combinadas com o conhecimento de princípios fenomenológicos da operação ou uma descrição estrutural do sistema para diagnosticar falhas. Os sistemas especialistas são capazes de capturar associações de diagnóstico humano que não são prontamente traduzidas em modelos matemáticos ou causais. Por último, as técnicas baseadas em reconstrução de padrões usam associações entre padrões de dados e classes de falhas sem fazer uso de uma modelagem explícita de estados ou estruturas internas do processo. Exemplos incluem redes neurais artificiais e mapas auto-organizados. Essas técnicas estão relacionadas às técnicas baseadas em dados (PCA, PLS, FDA e CVA) em termos da modelagem da relação entre padrões de dados e classes de falhas. As técnicas baseadas em dados são técnicas de redução de dimensionalidade baseadas em rigorosas estatísticas multivariadas. Por outro lado, as redes neurais e os mapas de auto-organização são métodos de caixa preta que aprendem o padrão baseado inteiramente nas sessões de treinamento. [55]

Alguns trabalhos que fazem uso de métodos baseados no conhecimento ou mé-

todos qualitativos são destacados a seguir; no caso das técnicas que reconstroem relações causa-efeito [49, 100, 171, 295]; no métodos que empregam reconhecimento de padrões [214] e nos métodos que capturam associações humanas para o diagnóstico de falhas [16, 178, 211, 271, 278].

Os processos industriais modernos contam com grande quantidade de instrumentos; assim, processos de grande escala produzem quantidades apreciáveis de dados. No entanto, embora essa grande quantidade de informação dos processos esteja disponível, está além das capacidades de um operador ou engenheiro avaliar efetivamente as operações do processo simplesmente observando os dados. Além disso, os modelos fenomenológicos detalhados e precisos são difíceis de desenvolver, de forma que a maioria dos métodos de monitoramento de processos aplicados a processos industriais é baseada em dados (métodos *data-driven*) [19]. Os métodos de monitoramento baseados em dados, também conhecidos como métodos baseados em história, usam os dados do processo coletados durante condições normais de operação para desenvolver as medidas que detectam e identificam falhas, além dos dados coletados durante falhas específicas para desenvolver as medidas do diagnóstico de falhas. Como esses métodos são orientados por dados, a proficiência desses métodos é altamente dependente da quantidade e da qualidade dos dados do processo. Há casos, em que embora exista disponível uma grande quantidade de dados dos processos, apenas uma pequena parte é útil; por exemplo em casos em que uma parte dos dados foi de algum modo corrompida ou casos em que ocorreram falhas desconhecidas no processo. A principal característica dos métodos baseados em dados (*data-driven*) é que permitem transformar dados de alta dimensionalidade a dados de baixa dimensionalidade em que se torna possível extrair informações relevantes do processo. No entanto, como já foi advertido acima, o desempenho destas técnicas é fortemente dependente da quantidade e qualidades dos dados do processo.

Os métodos de diagnóstico de falhas baseados em dados e de caráter estatístico encontram uso na maioria dos sistemas de monitoramento dos processos industriais atuais [19] [56]. A seguir são apresentadas algumas das principais técnicas desse tipo:

- Análise de componentes principais (*principal components analysis, PCA*). É uma técnica de redução de dimensionalidade muito estudada e amplamente aplicada durante as últimas décadas em sistemas de monitoramento de processos industriais. PCA é uma técnica de redução de dimensionalidade que procura capturar a variância dos dados e as correlações entre variáveis [134]. As representações de menor dimensão dos dados produzidos pelo PCA podem melhorar a proficiência de detectar e diagnosticar falhas usando estatísticas

multivariadas. A estrutura abstraída por PCA pode ser útil para identificar as variáveis responsáveis pela falha ou as variáveis mais afetadas pela falha. Independentemente de quantas dimensões são necessárias no espaço dos componentes principais, podem ser usadas métricas (por exemplo, estatística de Hotelling (T2) e a estatística chi (Q)) que são semelhantes aos gráficos de controle univariados, mas são baseadas em estatísticas multivariadas. Esses gráficos de controle podem ajudar os operadores e engenheiros a interpretar tendências significativas nos dados do processo [161].

- Análise discriminante de Fisher (*Fisher discriminant analysis*, FDA). É uma técnica de redução de dimensionalidade desenvolvida e estudada dentro da comunidade de classificação de padrões [78]. A FDA determina a porção do espaço de observação que é mais eficaz para discriminação entre várias classes de dados. A análise discriminante é aplicada a essa parte do espaço de observação para diagnóstico de falhas. A técnica de redução de dimensionalidade é aplicada aos dados em todas as classes simultaneamente. Assim, todas as informações das classes de falha são utilizadas quando a função discriminante é avaliada para cada classe [117].
- Mínimos quadrados parciais (*partial least squares*, PLS). São métodos de decomposição de dados para maximizar a covariância entre o bloco preditor (independente) e o bloco predito (dependente) para cada componente. A técnica de PLS tenta encontrar vetores de carga e pontuação (*loading and score vectors*) que estão correlacionados com o bloco previsto X , enquanto descreve a variação no bloco preditor Y [285]. Uma aplicação popular do PLS é selecionar X para conter os dados do sensor e Y para conter apenas os dados de qualidade do produto [181]. Semelhante ao PCA, esses modelos inferenciais (também conhecidos como *soft sensors*) podem ser usados para detectar, identificar e diagnosticar falhas [181], [207]. Outra aplicação do PLS que foca principalmente no diagnóstico de falhas procura definir Y como membros da classe, em cujo caso é nomeado como mínimos quadrados parciais discriminantes (*discriminant partial least squares*).

Partindo dos métodos mencionados acima, foram derivados outros métodos muito usados nos sistemas de identificação de falhas, tais como CVA (*canonical variate analysis*), DPCA (*dynamic principal components analysis*), entre outros. Na Figura 2.2 apresenta-se a classificação dos diferentes tipos de métodos de identificação e diagnóstico de falhas. Alguns trabalhos que apresentam métodos baseados em dados para o diagnóstico de falhas são resumidos nos seguintes trabalhos [97, 126, 130, 187, 200, 212, 278, 292].

De uma forma mais geral, os métodos tradicionais de monitoramento podem ser também classificados de acordo com as características de detecção como: (1) detecção por limite, que gera um alarme quando as observações cruzam limites predefinidos e é muito aplicado por conta da fácil implementação; o limite de detecção, no entanto, não tem sensibilidade para algumas perturbações do processo porque pode ignorar as interações entre as variáveis do processo [74]; (2) detecção de discrepância, em que se gera um alarme que compara os valores simulados aos valores reais observados. Deve-se observar que a detecção de discrepância depende muito da precisão do modelo, e as imprecisões do modelo são inevitáveis na prática. Como é difícil distinguir falhas genuínas de erros no modelo, a detecção de discrepâncias normalmente pode apresentar sérios problemas de robustez [74].

A detecção por limite determina as tolerâncias para cada variável de observação sem usar qualquer informação das outras variáveis e, dessa forma, é filosoficamente idêntica às técnicas estatísticas univariadas. Esses métodos ignoram as correlações entre as variáveis de observação (correlações espaciais) e as correlações entre as medidas da mesma variável, tomadas em momentos diferentes (correlações em série). (Note que as correlações espaciais também se referem a correlações entre diferentes medidas tomadas essencialmente na mesma localização física.)

Os dados do processo são correlacionados espacialmente porque muitas vezes há um grande número de leituras do sensor tomadas ao longo do processo e a variabilidade das variáveis do processo é restrita a uma dimensão menor (por exemplo, devido a equilíbrios de fases ou leis de conservação, como os balanços de materiais e energia) [79]. Além disso, os dados do processo são serialmente correlacionados porque os intervalos de amostragem são relativamente pequenos e os controladores de processo padrões são incapazes de remover todas as tendências sistemáticas devidas a componentes inerciais, como os associados a tanques de mistura e linhas de reciclagem. Como o sensor de limite não leva em conta as correlações espaciais, ele não tem sensibilidade para identificar algumas falhas que ocorrem nos processos químicos [134], e como o sensor de limite também ignora as correlações em série, ele pode não apresentar robustez [115]. A necessidade de lidar com correlações espaciais levou ao desenvolvimento e ao emprego de estatísticas de monitoramento de processos com base na técnica de PCA para monitorar processos químicos.

2.2 Sistemas dinâmicos e séries temporais

Avanços recentes das tecnologias de sensores, computação e comunicação e a consequente disponibilidade de abundantes fontes de dados na forma de séries temporais

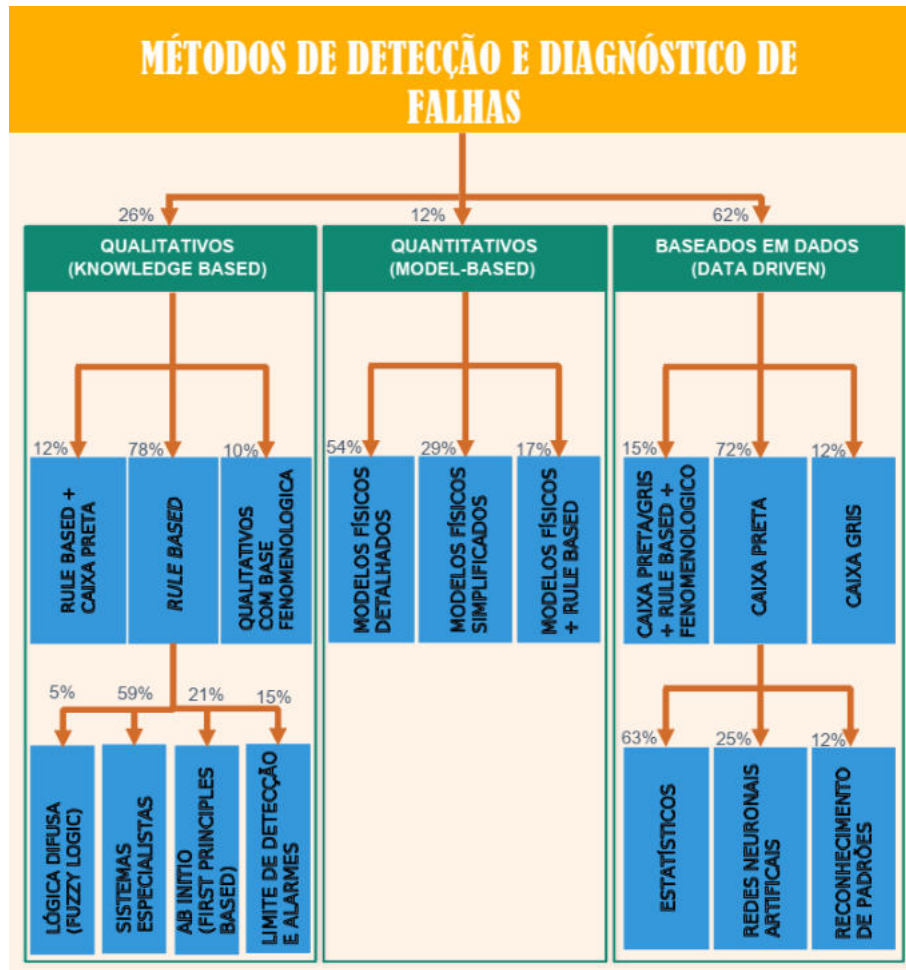


Figura 2.2: Classificação dos métodos de detecção e diagnóstico de falhas [19]

podem transformar a forma como os sistemas complexos do mundo real são monitorados e controlados. Nesse contexto, as indústrias são constantemente desafiadas a melhorar e otimizar seus processos, de maneira que alguns processos industriais têm começado a atualizar o projeto e controle do seus sistemas de manufatura para *prevenir*, ao invés de somente *mitigar* perdas de qualidade (i.e. produtos fora de especificação ou defeituosos) ou integridade na produção (i.e. falhas em equipamentos, sensores ou qualquer outro que faça parte do processo produtivo). De maneira similar, recentes políticas de saúde pública tem acolhido metodologias de prevenção baseadas na *predição* do surgimento de doenças em certas populações [266]. Essa mudança de detecção-diagnóstico-mitigação de anomalias para prevenção-prognóstico-prevenção é vista em vários domínios da engenharia, além da manufatura e da saúde, incluindo redes de telecomunicações e serviços públicos e infraestrutura. Em particular, a rica informação causal e dinâmica perceptível a partir de dados de séries temporais tornou possível a previsão da evolução de dinâmicas de sistemas biológicos, físicos e de engenharia [169, 198, 282] (crucial para o seu controle preventivo). Assim, a análise preditiva está emergindo como um dos ramos mais importantes da

informática moderna e do *big data*. De fato, a previsão de séries temporais relacionadas à evolução de sistemas complexos é considerada um dos desafios emergentes da ciência moderna [165].

A previsão efetiva de estados futuros de um sistema complexo a partir de séries temporais continua sendo um desafio, principalmente devido às diversas combinações dos comportamentos dinâmicos não-lineares e não-estacionários exibidos por esses sistemas. Estatisticamente falando, séries temporais podem ser consideradas emergentes de um sistema dinâmico não-linear se forem marcadas por características distintas de sinais ruidosos convencionais, como não-normalidade, aperiodicidade, presença de ciclos assimétricos, multimodalidade, relações causais não-lineares entre variáveis defasadas e variação do desempenho de previsão ao longo do tempo no espaço de estados, entre outros [85].

A reconstrução do espaço de fases é a base teórica que suporta a análise não linear de séries temporais. Nesse contexto, são determinantes os trabalhos desenvolvidos inicialmente por PACKARD *et al.*(1980) e formalizados logo por TAKENS(1981) que permitiram reconstruir a dinâmica completa de um sistema a partir de uma única serie temporal. A reconstrução não é, é claro, idêntica à dinâmica interna (ou esse procedimento seria uma solução geral para o problema do observador da teoria de controle: como identificar todas as variáveis de estado internas de um sistema e inferir seus valores a partir dos sinais que podem ser observados). Mesmo assim, essas reconstruções ainda podem ser extremamente úteis, porque são garantidas como idênticas topologicamente. E, uma vez que muitas propriedades importantes de sistemas dinâmicos são invariantes sob difeomorfismos, isso significa que as conclusões obtidas sobre a dinâmica reconstruída também são válidas para a dinâmica real do sistema [37].

Dados de séries temporais multivariadas possuem uma utilidade que se expande além da comprovação que é fornecida por meio das análises individuais dos diferentes componentes. Também é possível realizar reconstruções de múltiplos elementos que combinam as informações desses componentes. Em particular, PACKARD *et al.* (1980) conjecturaram que qualquer dimensão que rotulem singular e suavemente os estados do atrator poderia servir como elementos efetivos de um vetor do espaço de reconstrução.

Os objetivos principais relacionados ao estudo de uma série temporal em geral são [149]:

- análise e modelagem da série temporal: descrever a série, verificar suas características mais relevantes e as possíveis relações com outras séries;

- previsão na série temporal: a partir de valores históricos da série (e possivelmente de outras séries também), procuram-se fazer previsões de curto prazo (*forecast*), sendo que o número de instantes à frente para o qual é feita a previsão é chamado de horizonte de previsão.

A forma tradicional de analisar uma série temporal é por meio da sua decomposição em componentes de tendência, ciclo e sazonalidade. A tendência de uma série indica o comportamento de longo prazo; isto é, se ela cresce, decresce ou permanece estável, além de indicar a velocidade destas mudanças. Os ciclos são caracterizados pelas oscilações nas séries temporais, que se apresentam de forma suave e repetida ao longo da componente de tendência. Por exemplo, esse é o caso dos ciclos relacionados à atividade econômica ou ciclos meteorológicos. A sazonalidade corresponde às oscilações que sempre ocorrem em um determinado período do ano, do mês, da semana ou do dia. A diferença essencial entre as componentes sazonal e cíclica é que a primeira apresenta movimentos facilmente previsíveis, ocorrendo em intervalos regulares de tempo, enquanto os movimentos cíclicos podem ser irregulares [119].

Grande parte das metodologias atuais usadas para a análise de séries temporais não lineares está baseada no paradigma teórico descrito em dois trabalhos representativos, o primeiro desenvolvido por ABARBANEL e GOLLUB(1996 e o segundo por KANTZ e SCHREIBER(2004). Enquanto o primeiro trabalho considera uma definição de caos rigorosa para a análise das séries, o segundo trabalho dá mais ênfase a aplicações práticas em séries temporais admitindo a existência de caos determinístico a priori. A partir da segunda abordagem, HEGGER *et al.*(1999) desenvolveram uma estrutura metodológica para o estudo e análise não linear de séries temporais baseada no paradigma do caos determinístico. Uma ampla quantidade de algoritmos para representação de dados, predição, redução de ruído, estimação de dimensões e expoentes de Lyapunov e testes de não linearidade foram discutidos com particular ênfase na resolução dos principais problemas de implementação e seleção de parâmetros dos algoritmos. As rotinas resultantes da implementação das estratégias discutidas foram publicadas no software *TISEAN* [119]. A partir desse trabalho, uma grande quantidade de trabalhos tem sido desenvolvida (aproximadamente 1653 citações em 02/12/2021), tendo sido o trabalho aplicado em diversos estudos de análise não linear de séries temporais, mostrando o caráter multidisciplinar e relevância desta área de pesquisa.

A análise das séries temporais tem uma grande importância para a caracterização dos processos dinâmicos, quantificação do caos (usando expoentes de Lyapunov e entropias Kolmogorov-Sinai) e pesquisa da rota do caos. De forma geral, pode-se dizer que existe um grande número de referências em relação à análise de séries em

sistemas dinâmicos. Num nível introdutório destacam-se os trabalhos de KAPLAN e GLASS(1995), que está dirigido para um âmbito mais interdisciplinar e proporciona um bom entendimento dos fundamentos de dinâmica não linear. O referencial teórico é completamente descrito em [30, 202, 243]. Material mais avançado pode ser encontrado no trabalho de KATOK e HASSELBLATT(1997). A sequência de artigos de pesquisa resumidos em [203] aborda alguns dos aspectos mais relevantes para a Teoria do Caos, como a sincronização do caos, o controle do caos e análise de séries temporais caóticas.

Outras referências relacionadas à área de análise de séries temporais na caracterização de dinâmicas podem ser encontradas nas referências [3, 5, 109, 164, 172]. Aplicações de análise de séries temporais sobre medidas de sistemas dinâmicos reais, em que o determinismo é mais improvável no senso estrito, são revisados em [241]. Além dos trabalhos anteriores, destacam-se ainda os textos das referências [29, 44, 149, 188].

Os trabalhos descritos acima foram fundamentais para o desenvolvimento de diferentes trabalhos de caráter multidisciplinar, mostrando a alta aplicabilidade da análise não linear de séries temporais em diversos sistemas, como físicos, financeiros e fisiológicos. Por exemplo, no trabalho de MICHAEL(2005) são estudadas séries temporais para o diagnóstico e controle da arritmia cardíaca em humanos, caracterização e identificação de respiração anômala em crianças, simulação e reconhecimento de padrões de vocalização, interpretação e predição de séries temporais financeiras e assistência no controle governamental de Hong Kong no controle da crise SARS. Dinâmicas relacionadas ao sono foram estudadas em [180] via análise não linear de séries temporais de electro-encefalogramas (EGG) usando métodos baseados em geometria fractal e entropia. De forma semelhante, SHAHBAZ *et al.*(2015) estudaram sob análise de séries temporais os efeitos de urbanização e abertura comercial sobre o consumo energético da Malásia. Além disso, os modelos não lineares de mudanças eleitorais, comportamentos de massas políticas e as implicações da dinâmica não linear sobre esses estudos foram discutidos em [284].

Grande e diversa quantidade de trabalhos sobre análise não linear de séries temporais reais pode ser encontrada na literatura. No entanto, e como será abordado mais adiante (Seção 2.2.1.1), há poucas referências de sistemas de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas em processos industriais que usem as metodologias propostas pela análise não linear de séries temporais.

Por outra parte, as estratégias de previsão de séries temporais que trabalham com modelos de espaço de estado têm uma longa história - e uma rica tradição - na dinâmica não linear. Em 1969, por exemplo, LORENZ(1969) propôs seu “Método de

Análogos”, que busca a trajetória no espaço de estados para o vizinho mais próximo de um determinado ponto e toma a trajetória desse vizinho como a previsão. Não muito tempo depois do trabalho original ser publicado, PIKOVSKY(1986) mostrou que o Método dos Análogos também funciona em espaços de estado reconstruídos.

Um exemplo destacado de previsão canônica na dinâmica não-linear determinística é o trabalho de roleta da *Chaos Cabal* na Universidade da Califórnia em Santa Cruz [24], um projeto que não apenas catalisou a ciência não-linear (incluindo o importante trabalho do Teorema de imersão [204]), mas também o interesse no campo das comunidades científicas que continua até hoje [255]. Nas últimas décadas, desde o Método dos Análogos de Lorenz e o projeto da roleta, um grande número de estratégias criativas foi desenvolvido para prever o curso futuro de um sistema dinâmico não-linear. A maioria desses métodos foi inspirada num espaço de estado reconstruído que, em seguida, usa esse modelo para fazer a previsão do próximo ponto. Exemplos iniciais incluem as referências [43, 86, 201, 259].

O Método dos Análogos não é aplicável apenas à dinâmica determinística. A densidade de probabilidade de transição de curto prazo de um processo de Markov depende apenas do estado atual, que pode ser aproximado por um vetor de atraso. Os “futuros” dos vetores de atraso de uma pequena vizinhança podem ser vistos como uma amostra da distribuição, um passo à frente. Essa abordagem foi usada para modelar e prever processos estocásticos não-lineares [37]. Em particular, as reconstruções que não satisfazem os requisitos teóricos da dimensão de integração m podem fornecer desempenho suficiente aos métodos de previsão para igualar ou até mesmo exceder a precisão dos mesmos métodos trabalhando sob condições de dimensão ideal, especialmente quando os dados são ruidosos [96].

Todos os sinais reais estão contaminados pelo ruído de medição. Mais comumente, o ruído é tratado como um processo aleatório aditivo no sinal verdadeiro. Contudo, o ruído pode assumir diversas formas (ruído estático, ruído dinâmico, ruído intermitente, dentre outras). Muitos estudos na literatura estão preocupados com a questão fundamental de distinguir o caos e o ruído [46]. Isso pode constituir um verdadeiro desafio. Ambos os tipos de sinais exibem flutuações temporais irregulares, com um rápido decaimento da função de autocorrelação, e ambos são difíceis de prever. Eles diferem em relação à origem dinâmica dessas características: o caos é um processo determinístico, o ruído não. Em um sistema determinístico, os futuros de curto prazo de dois estados quase idênticos devem ser semelhantes; em um processo ruidoso isso é improvável. As estratégias mais comuns para a remoção de ruído passam pelos filtros tradicionais de classificação de frequências (removendo todos os componentes de alta frequência do sinal), mas no caso de sinais complexos, como sinais caóticos, as estratégias fazem uso das propriedades não lineares do sis-

tema (estratégias baseadas na geometria nativa das variedades estáveis e instáveis do atrator [87], modelos locais do atrator [110] e métodos baseados em topologia das trajetórias [222]).

Além da complexidade da dinâmica, na maioria dos casos a estrutura das relações não-lineares entre os sinais e estados medidos permanece desconhecida, se não indeterminável, embora seja costume supor que existe uma relação não linear - linear conhecida entre observações passadas e futuras. No entanto, essa suposição não é válida para a maioria de séries temporais que indicam claramente padrões não-lineares ou não-estacionários [283]. Consequentemente, modelos clássicos de séries temporais, como os modelos autoregressivos e média móvel, com ou sem termos cointegrados e entradas externas (ARMA (modelos auto-regressivos de médias móveis), ARMAX (Modelo auto-regressivo de médias móveis com modelo de entradas exógenas)), tendem a apresentar sérias deficiências na previsão da evolução de sistemas complexos. CHENG *et al.*(2015) apresenta uma revisão de diferentes modelos de séries temporais e avalia a capacidade de predição em séries temporais não lineares, mostrando a incapacidade destes modelos para capturar a evolução natural das dinâmicas mais complexas. Os autores mostram ainda que, embora essas técnicas lineares possuam uma grande tradição, sendo bem conhecidas em âmbitos acadêmicos-industriais e facilmente implementáveis, nem sempre produzem resultados satisfatórios ou com alguma significância, especialmente quando se deseja representar o comportamento de sistemas dinâmicos complexos com alta não linearidade.

A maior parte das técnicas usadas nas diferentes comunidades acadêmicas e comerciais que se preocupam com os problemas derivados da análise de séries temporais (mineração de dados, aprendizado de máquina e afins) está baseada em modelos lineares e estatísticos. Técnicas de análise que incluam a não-linearidade e o determinismo poderiam constituir uma arma importante nesse arsenal, mas a análise de séries temporais não-lineares é atualmente subutilizada fora do campo da ciência não-linear. No momento atual, em que o mundo digital tem se manifestado de forma cada vez mais presente, a análise não linear de séries temporais apresenta um alto potencial para se transformar em precursor relevante deste movimento tecnológico. Além disso, e como foi mencionado acima, o alto grau de interdisciplinariedade da análise não linear de séries temporais a torna um ponto convergente de outras áreas do conhecimento que enfrentam diversos desafios dentro do paradigma da ciência dos dados. Dessa forma, espera-se que o estudo de dinâmicas não lineares e ciências da complexidade cresça também como consequência das circunstâncias e exigências atuais da crescente revolução digital.

2.2.1 Análise de séries temporais em monitoramento de processos

A força das técnicas de séries temporais reside principalmente na capacidade de representar uma observação (clusters de um ou vários sinais) em uma estrutura parametrizada invariante no tempo. Tal invariância cria a possibilidade de prever o comportamento do sistema e, portanto, oferece uma visão da dinâmica da condução do sistema. Além disso, a aplicabilidade em sistemas lineares e não lineares aumenta a adequação para o diagnóstico de falhas.

Para sistemas lineares, a representação do sistema em um contexto de média móvel autorregressiva (ARMA), seja no domínio do tempo (modelos parametrizados) ou no domínio da frequência (periodogramas), constitui a principal tendência na literatura. Diferentes métodos são subsequentemente aplicados para extrair um recurso de diagnóstico baseado no erro de previsão (residuais) ou nos parâmetros do modelo [149].

No domínio do tempo, existe uma tendência principal que consiste em construir um modelo de séries temporais paramétricas (ajuste do modelo) para os dados observados considerando uma situação livre de falhas. Em seguida, uma análise é realizada para os resíduos observados entre a previsão do modelo e a observação real em uma abordagem muito semelhante àquela buscada em técnicas baseadas em modelos. Nesse contexto, existe uma extensa literatura de métodos de análise residual. UPADHYAYA e SKORSKA(1983) compararam o erro de predição de um modelo ARMA do sinal multivariado observado, tanto na situação livre de falhas quanto na situação de falha, como uma base de decisão para detectar falhas do sensor. DRON *et al.*(1998) desenvolveram um método para detecção de falhas em sistemas mecânicos de rodas com base na estimativa de um modelo autoregressivo para os sinais de vibração e compararam as propriedades estatísticas de primeira e segunda ordem do erro de estimativa. BETTOCCHI *et al.*(1996) aplicaram um método de comparação de resíduos diretos na identificação de matrizes de falhas. CHEN *et al.*(2005) compararam as propriedades estatísticas de maior ordem (cumulativos ou momentos) como base diagnóstica. DOOLEY *et al.*(1986) usaram gráficos de assinatura de falha padronizados para os resíduos. APLEY e SHI(1999) aplicaram um teste estatístico de razão de verossimilhança para a hipótese diagnóstica.

Outra abordagem no domínio do tempo é a avaliação das variações de tendência nos dados observados e, subsequentemente, na assinatura de falhas [220]. Técnicas de domínio de frequência são baseadas na comparação espectral das observações de um sistema para concluir um diagnóstico. UPADHYAYA *et al.*(1980)

apresentou um método baseado na coerência entre dois sinais de plantas obtidos a partir de um cálculo de densidade espectral. STACK *et al.*(2004) usaram o desvio espectral médio criado por uma representação do sistema de teste como um índice de falta. YESILYURT(2003) usou uma técnica de espectro de potência instantânea suavizada para detectar defeitos em engrenagens. AYHAN *et al.*(2003) compararam o desempenho das transformadas rápidas de Fourier, periodogramas e periodogramas de Welch para detecção de uma falha na barra do rotor do motor.

Para séries temporais não-lineares, as propriedades geométricas do espaço de fase constituem a base principal de muitas técnicas de diagnóstico. Os invariantes extraídos das trajetórias do estado são a ferramenta principal de julgamento sobre se a dinâmica do sistema é consistente ou se o sistema está exibindo alguma anormalidade. NATARAJU *et al.*(2003) propuseram um método para identificar características dinâmicas não-lineares defeituosas de um rotor usando uma técnica de ajuste de modelo numérico. BROWN e ADAMS(2003) exploraram a representação de falhas em um grau múltiplo de liberdade com dinâmicas não-lineares de baixa ordem. MONIZ *et al.*(2005) introduziram a "amplificação caótica da distorção do atrator" como uma nova métrica para avaliar a saúde estrutural em sistemas multivariados. Também, NICHOLS *et al.*(2003) apresentou uma metodologia detalhada sobre a aplicação de características de atratores caóticos para avaliação de saúde estrutural. Analogamente, SUN(2011) desenvolveu uma metodologia de diagnóstico de falhas num motor de indução via análise de expoentes de Lyapunov. Por sua vez, BARANSKI e PIETRZAK(2016) propuseram uma metodologia para detecção de falhas via projeção de funções de assinatura no espaço de fases e VARGA(2008) mostrou a utilidade do cálculo de bases mínimas do espaço nulo para detecção de falhas. Finalmente, TRENDAFILOVA e VAN BRUSSEL(2001) confirmou o aumento das dimensões de imersão (dimensão de reconstrução do espaço de fases), os expoentes de Lyapunovs e as dimensões de correlação em condições de falha em articulações de robôs, mostrando que essas medidas invariantes não lineares eram eficientes para o monitoramento do estado das peças do sistema.

2.2.1.1 Mapas de recorrência em monitoramento de processos

Tradicionalmente, a análise de recorrências é uma técnica amplamente usada na caracterização de séries temporais não lineares [149]. De outra perspectiva, a capacidade de métodos baseados na análise de recorrência de trajetória (ou seja, mapas de recorrência) para representar o comportamento do sistema e analisar dados periódicos e quase periódicos os torna ideais para vários tipos de aplicações. Alguns exemplos incluem a descrição de vibrações moleculares [18], modelagem de tran-

sientes da rede IP [186] e análise da variabilidade da frequência cardíaca e sua relação com níveis de arritmia cardíaca perigosos [184]. Entretanto, a aplicação desses métodos na avaliação de condições de processos é, de certa forma, escassa na literatura, apesar de serem compatíveis com o comportamento desses sistemas. SAMADANI *et al.*(2014) desenvolveu uma metodologia baseada em análise de recorrências e quantificação de recorrências para a detecção de falhas em válvulas *servo* a partir dos módulos de oscilação dos comportamento com e sem falha e suas respectivas representações no mapa de recorrências. Por outra parte, ZHOU e ZHANG(2015) propuseram um monitoramento baseado na combinação das métricas de quantificação de recorrência e as tradicionais cartas de controle de Hotelling T^2 . Finalmente, MOHAMAD *et al.*(2018) desenvolveram uma metodologia por meio da qual criavam novas séries temporais via quantificação de recorrências para alimentar uma estrutura SVM (*Support Vector Machine*) para a resolução de um problema de classificação de falhas num trem de engrenagens.

2.2.2 Análise causal em monitoramento de processos

Depois que uma falha é detectada nos processos industriais, é desejada uma ferramenta de diagnóstico para identificar as variáveis com falha. O método mais popular de diagnóstico de falhas em linha e em tempo real é a análise de gráficos de contribuição [181]. No entanto, as parcelas de contribuição sofrem o efeito *smearing*¹ em muitas situações, o que leva a resultados errados [10]. Embora possa identificar eficientemente as variáveis defeituosas, a análise por contribuição não consegue localizar a causa raiz exata. Isso ocorre porque o método é baseado em correlação, em vez de causalidade entre os dados. Apenas o modelo causal pode fornecer informações de causalidade diretamente, como modelo físico ou modelos empíricos. Modelos de dados baseados em correlações não são indicativos de causalidade entre variáveis. No entanto, os dados temporais reservam a capacidade de revelar causalidade oculta. O problema de diagnóstico de raiz foi abordado no cenário chamado identificação de oscilação de planta completa (*plant-wide oscillation identification*), que visa descobrir o circuito de controle ou dispositivo que excita oscilações indesejáveis em outros *loops* ou variáveis manipuladas. DUAN *et al.*(2014) revisaram métodos recentes para o diagnóstico de causa raiz de oscilações em planta completa, incluindo envelope espectral, matriz de adjacência, análise de causalidade, entropia de transferência e rede bayesiana. Envelope espectral é um método de domínio de frequência, que realiza decomposição de valores singulares no domínio da frequência para detectar oscilações potenciais em toda a planta [142]. Recentemente, um

¹ Acontece quando variáveis em falha incrementam também a contribuição das variáveis que não estão em falha, gerando resultados ambíguos

método de transferência de informação também foi proposto no domínio da frequência para o diagnóstico da causa de oscilações em toda a planta [287]. A matriz de adjacências precisa construir um gráfico de conexão a partir do conhecimento do processo, que não é completamente orientado por dados [143]. A análise de causalidade, incluindo a causalidade de Granger e a entropia de transferência, é um método direto que revela uma causalidade variável baseada em dados temporais [27, 296]. A rede dinâmica bayesiana (DBN) é outro modelo gráfico amplamente utilizado para o raciocínio probabilístico, que pode indicar informações causais para variáveis [294].

Embora muitas abordagens estejam disponíveis para analisar oscilações em toda a planta, elas não são diretamente aplicáveis ao diagnóstico de causa raiz de falhas de processo. Existem dois problemas principais: em primeiro lugar, quase todos os métodos de análise de causalidade são sensíveis ao número de séries candidatas que são analisadas, de forma que quanto maior é o número de séries que um método abrange, menos preciso é o resultado; em segundo lugar, todos os métodos de análise de causalidade acima mencionados admitem que o processo é estacionário, ou mais precisamente que os erros de previsão desses modelos devem ser estacionários. Essa suposição vale para oscilações em toda a planta, mas não para falhas de processo em geral, já que um processo abnormal pode não ter comportamento estacionário para alguns tipos de falhas, como uma falha de degrau. Nesse caso, todos os métodos acima deixam de ser aplicáveis [171].

O modelo de processo qualitativo na forma de dígrafo tem sido amplamente utilizado para a análise de causalidade e de propagação de falhas [196]. Os modelos baseados em dígrafos geralmente expressam as relações causais entre falhas e sintomas e definem as vias de propagação de falhas, incorporando características de métodos especialistas (Seção 2.1.1) no processo [289]. Uma desvantagem é que a extração de informação a partir desses métodos é muito demorada e esse conhecimento nem sempre está facilmente disponível. A modelagem de dígrafos (também conhecidos como mapas causais) também pode ser baseada em equações matemáticas [76], mas para processos complexos de larga escala é difícil estabelecer modelos matemáticos práticos e precisos. Os métodos baseados em dados fornecem outra forma de encontrar relações causais entre as variáveis do processo. Alguns métodos baseados em dados são capazes de detectar as relações causais para processos lineares. No domínio da frequência, as funções de transferência direcionada (DTF) e a coerência parcial direcionada (PDC) são amplamente utilizadas na análise de conectividade cerebral. Com base nos modelos de auto-regressão do processo, a causalidade de Granger tem uma versão no domínio do tempo e uma versão do domínio da frequência (denominada causalidade espectral de Granger) [76].

A previsibilidade baseada em vizinhos mais próximos (*nearest neighbors*) é

proposta como uma medida assimétrica de interdependência em séries temporais lineares ou não lineares e é aplicada para quantificar as influências direcionais entre sinais de processos industriais [26]. O método dos vizinhos mais próximos tem sido usado com sucesso para análise de causa raiz de perturbações em planta completa [28].

A Teoria da Informação fornece uma ampla variedade de abordagens para medir a influência causal entre séries temporais multivariadas [122]. Com base nas probabilidades de transição contendo todas as informações sobre causalidade entre duas variáveis, a abordagem de entropia de transferência (TE) foi proposta para distinguir entre elementos de condução e resposta [242] e é adequada para relações lineares e não lineares; tem sido utilizada com sucesso em processos químicos [27] e neurociências [280]. Mais recentemente, um conceito de entropia de transferência de Renyi (RTE) foi proposto em [144] como uma medida de informação que é transferida apenas entre certas partes de distribuições subjacentes. Os autores mostraram a utilidade do RTE nas séries temporais do mercado de ações.

BARNETT *et al.* (2009) mostraram que, para variáveis com distribuição gaussiana, correlacionadas por meio de relações lineares, a causalidade de Granger e TE são equivalentes. Tem sido demonstrado que tanto o método de causalidade de Granger quanto o método de entropia de transferência são ferramentas eficazes para a detecção de causalidade. O método de causalidade de Granger é baseado em modelos de AR do processo, que é adequado para processos lineares multivariados (como foi mostrado anteriormente, este tipo de modelo não é totalmente satisfatório para processos não lineares). Comparado ao método de causalidade de Granger, o método TE apresenta-se como uma abordagem da Teoria da Informação que não precisa de suposições sobre a estrutura do modelo de processo. O método foi proposto com base no conceito de entropia de Shannon [248] e é adequado para relacionamentos lineares e não-lineares. Semelhante à entropia de Shannon, uma suposição fundamental do método TE é que os dados amostrados devem seguir uma distribuição de probabilidade bem definida. Uma contextualização histórica sobre a causalidade de Granger e métricas causais da Teoria da Informação são revistas em [14].

Por outro lado, a utilidade da TE parcial (definida em [275]) é a detecção unidirecional de causalidades, que é adequado para neurociências; no entanto, nos processos industriais, são comuns retroalimentação e causalidades bidirecionais devido a fluxos de recirculação e controle em cascata. Assim, o método TE parcial não pode ser usado diretamente para detecção de causalidade direta / indireta na indústria de processo [76]. Outros aspectos sobre as limitações das entropias de transferência são revisadas em [137] e [242]

As novas métricas de causalidade propostas em [93, 210] resolvem o problema de bidirecionalidade das conexões causais entre variáveis. Destaca-se também, o trabalho posterior de RUNGE(2015), que define os conceitos de transferência momentânea de informação e o fluxo de informação por intermédio de trajetórias causais, cujas definições consideram os parentes causais das variáveis e seus próprios passados.

Os mais recentes trabalhos sobre esta metodologia de causalidade apresentam diferentes casos de aplicação em séries temporais da área aeroespacial e climática [226–228, 230, 230–232, 260]. Destaca-se também o desenvolvimento do software TIGRAMITE para análise de causalidade desenvolvido ao longo das pesquisas de RUNGE(2015). Outros softwares e pacotes similares são referenciados em [12]

Outros estudos sobre isolamento de falhas e descobrimento de rotas causais em processos químicos podem ser encontradas em [25, 52, 95, 141, 213, 288]. Além disso, estratégias para o uso de análise de causalidade para a detecção direta de falhas são abordadas em [105, 146, 290]

2.3 Considerações finais

Nesta seção foi discutido que as técnicas de monitoramento podem ser classificadas em três grandes categorias: (1) técnicas baseadas em dados, que não usam modelos matemáticos fenomenológicos para representar a operação normal e a falha, mas o histórico das próprias medidas e suas interações estatísticas com a dinâmica; (2) técnicas analíticas, que simulam a dinâmica do processo usando modelos matemáticos, detectando as falhas por desvios oriundos da comparação das medidas com os resultados do modelo; e (3) técnicas baseadas em conhecimento, que usam heurísticas e o conhecimento do operador para determinar leis que permitam identificar desvios e falhas no processo.

Conforme bem discutido na literatura, observa-se que as diferentes técnicas de monitoramento de processos que têm emergido durante as últimas décadas apresentam caráter essencialmente estatístico. Isso ocorre como resposta aos processos de modernização das indústrias e a iminente expansão da instrumentação ao longo das etapas produtivas, além das dificuldades encontradas para modelagem matemática de sistemas de alta dimensionalidade.

Por outra parte, também foi tratada a análise não linear de séries temporais, mostrando que esta disciplina surgiu como uma resposta aos crescentes avanços relacionados à Teoria do Caos e dinâmica não linear, e que tinha como objetivo auxiliar a

caracterização de dinâmicas complexas a partir exclusivamente das observações das séries temporais. Dentre os muitos comportamentos complexos, destaca-se o caos, que representa um comportamento aperiódico, a princípio imprevisível e determinístico. Todas as metodologias da análise não linear de séries temporais estiveram sempre amparadas pelo Teorema de Takens, que permite reconstruir o espaço de fases de um sistema dinâmico sem transformações na topologia do sistema.

Por outro lado, alguns trabalhos teóricos mostram que a análise não linear de séries temporais usa métricas que podem ser de bastante utilidade nas estratégias de monitoramento de processos, sendo que essas métricas conseguem refletir e fazer mais evidente as mudanças temporais (que eventualmente podem ser associadas a falhas) na dinâmica do processo.

A revisão bibliográfica também destacou as técnicas de análise causal, uma vez que constituem um ferramental importante para o diagnóstico e busca de causa raiz de anomalias e falhas nos processos. Foram revistos trabalhos que aplicam metodologias que permitem rastrear as causas de falhas no tempo passado para realizar uma correção mais imediata e exata no processo. Mostraram-se também trabalhos em que a quantificação das forças causais pode ser usada diretamente como métrica de monitoramento.

Capítulo 3

Fundamentos teóricos

O estudo de comportamentos não lineares implica o uso extensivo de metodologias numéricas, em especial quando se trata de sistemas dinâmicos contínuos. Estas ferramentas permitem avaliar os comportamentos dinâmicos e seu nascimento em relação a parâmetros próprios do modelo, sendo possível determinar o papel que exercem determinados efeitos sobre a estabilidade do sistema. Este capítulo tem por objetivo apresentar algumas das técnicas numéricas utilizadas para caracterização e análise de comportamentos dinâmicos não lineares. Inicialmente na Seção 3.1, são descritas a base da análise de sistemas dinâmicos não lineares e as respectivas técnicas numéricas de caracterização analíticas. Posteriormente são apresentadas as ferramentas para a análise não linear de séries temporais na Seção 3.2. Em seguida, as técnicas não paramétricas para a determinação de funções de probabilidade são mostradas na Seção 3.4. Finalmente, os conceitos da Teoria da Informação e causalidade necessários para a construção do ferramental proposto são descritos na Seção 3.5. As considerações e comentários finais são apresentados ao final do capítulo, na Seção 3.7.

3.1 Marco teórico

3.1.1 Definição de sistemas dinâmicos

Em sistemas dinâmicos o mundo é observado como uma evolução no tempo. As observações são expressas matematicamente e guardadas como mudanças ao longo do tempo. Dadas informações suficientemente detalhadas e a compressão das leis naturais subjacentes, é possível observar o futuro a partir do presente como uma bola de cristal.

Para o sistema solar, acompanhar a latitude e longitude na esfera celeste é suficiente para especificar completamente o movimento aparente do planeta. Todos os valores possíveis para as posições e velocidades dos planetas formam o *espaço de fases* do sistema. De modo mais geral, um estado de um sistema físico, no instante de tempo dado, pode ser representado por um único ponto em um espaço abstrato chamado *espaço de estados* $\mathcal{M}$. Quando o sistema muda, o ponto se converte em um *ponto representativo* no espaço de estados. A evolução da totalidade desses pontos é referida como um *fluxo* ou *dinâmica*.

Se existir uma lei f definida que expressa como esse ponto representativo se desloca em $\mathcal{M}$, o sistema dinâmico é determinístico. Para um sistema dinâmico determinístico, a lei de evolução toma um ponto do espaço de estados e o mapeia em exatamente num ponto. O espaço de estados pode ser ampliado, com o objetivo de obter um espaço suficientemente grande para determinar uma regra de evolução.

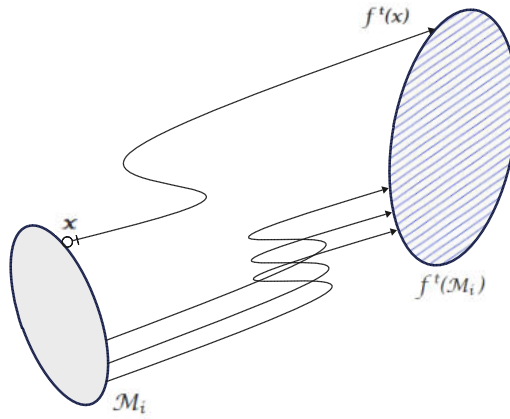


Figura 3.1: Trajetória traçada pela lei de evolução f^t . Começando desde um ponto x no espaço de estados, depois de um tempo t , o ponto está em $f^t(x)$. A lei de evolução f^t pode ser usada para mapear a região $\mathcal{M}_i$ do espaço de estados dentro da região $f^t(\mathcal{M}_i)$

Para um sistema determinístico, quase todos os pontos têm um único futuro, de forma que as trajetórias não podem cruzar. É dito 'quase' porque pode existir um conjunto de medidas singulares (tipos de cunha, cúspides, dentre outros) para os quais a trajetória não é definida. Tais medidas singulares permitem dividir o espaço de estados, de modo que a dinâmica pode ser compreendida melhor. [61]

Localmente, o espaço de estados $\mathcal{M}$ assemelha-se com $\mathbb{R}^d$, que indica que a evolução dinâmica é um problema de valor inicial, com d pontos suficientes para determinar o que acontecerá depois de um tempo determinado t . O espaço local de vetores lineares (espaço tangente) em algum ponto do espaço de estados $x \in \mathcal{M}$

pode ser concebido como uma função contínua. Globalmente, o espaço de estados pode ser mais complicado que uma *variedade* tal como um toro, um cilindro ou algum outro objeto geométrico contínuo. Por *variedade*, entende-se um espaço d -dimensional suave, que parece com um vetor $\mathbb{R}^d$ localmente. Por exemplo em um espaço de estados de um sistema Hamiltoniano autônomo, o fluxo está confinado a uma hiper-superfície curva de energia constante. Considerando que $d > 1$ do $\mathcal{M}$, pode-se referir um ponto $x \in \mathcal{M}$ como x_i onde $i = 1, 2, 3, \dots, d$. Se a dinâmica é descrita por um conjunto de equações diferenciais parciais (PDEs) o espaço de estados é uma função espacial de dimensão infinita. A lei de evolução $f : \mathcal{M} \rightarrow \mathcal{M}$ diz onde um ponto x está em $\mathcal{M}$ depois de um intervalo de tempo t .

O par $(\mathcal{M}, f)$ constitui um sistema dinâmico. Para efeitos de estudo, os sistemas dinâmicos são considerados como suaves. Por suave entenda-se que a lei de evolução f^t pode ser derivada quantas vezes seja preciso. Outras notações indicam o ponto x como $f(x, t)$ para lembrar que f é uma função de duas variáveis: o tempo e a posição no espaço de estados. Note-se que o tempo é relativo e não absoluto, uma vez que só o intervalo de tempo é requerido. Isso decorre do fato de que um ponto no espaço de estados determina completamente toda a evolução futura, e não é necessário saber nada além do intervalo de tempo. O tempo pode ser uma variável real ($t \in \mathbb{R}$), em cujo caso a lei de evolução é chamada de *fluxo*, ou pode ser uma variável inteira ($t \in \mathbb{Z}$) na qual a lei de evolução é chamada de *mapa* (Figura 3.1).

Os sistemas dinâmicos se manifestam geralmente por meio das suas *órbitas*. Dado um estado inicial x_0 em um tempo inicial t_0 , o fluxo ou mapa:

$$f(t) : x_0 \rightarrow x(x_0, t)$$

transporta o estado inicial até o estado $x(t)$ transcorrido um tempo t . Essa evolução traça a sequência de pontos $x(t) = f^t(x_0)$ que definem a *órbita* que passa pelo ponto $x_0 = x(0)$. Analogamente, pode-se referir respeito à evolução da região $\mathcal{M}_i$ do espaço de estados. Considera-se a lei f aplicada em uma região, variedade ou 'objeto geométrico suave' não deformado (referencial o inicial) $\mathcal{M}_i$ até uma região deformada (final) $\mathcal{M}_f = f^t(\mathcal{M}_i)$, como o movimento descrito por: $f^t : \mathcal{M}_i \rightarrow \mathcal{M}_f$ tal que todo x_0 que pertence a $\mathcal{M}_i$ é mapeado em um $x = f^t(x_0)$ que pertence a $\mathcal{M}_f$, como é representado na Figura 3.1, em que x denota um estado na região deformada e x_0 representa um estado na região não deformada.

O subconjunto de pontos $\mathcal{M}_{x_0} \subset \mathcal{M}$ que pertencem à trajetória de tempo infinito de um ponto x_0 é chamado de *órbita* de x_0 . Nos fluxos, as órbitas são curvas contínuas suaves; nos mapas são sequências de pontos. *Trajetória* se refere a um conjunto de pontos ou segmentos de curva traçados de $x(t)$ sobre um intervalo de tempo infinito t . *Órbita* refere-se à totalidade de estados que podem ser atingidos

por x_0 com um espaço de estado $\mathcal{M}$ foliado pela união de tais órbitas. Por exemplo, $\mathcal{M}_{x_0}$ indica a órbita que coleta os pontos ao longo do tempo e que se inicia em $x_0 = x(0)$. Sob evolução temporal, um segmento de trajetória pode ser mapeado em outro segmento de trajetória, mas os pontos dentro de uma órbita só são deslocados; a órbita considerada como um conjunto é inalterada. Assim, uma órbita é uma noção dinamicamente invariante.

São apresentados a seguir alguns exemplos de sistemas dinâmicos contínuos que serão tomados como 'benchmarks' para validar as técnicas de caracterização usadas neste trabalho.

- Sistema de Lorenz [258]:

$$\dot{x} = v(x) = \begin{bmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma(y - x) \\ \rho x - y - xz \\ xy - \beta z \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

- Sistema de Rossler [258]:

$$\dot{x} = -y - z \quad (3.2a)$$

$$\dot{y} = x + ay \quad (3.2b)$$

$$\dot{z} = b + z(x - c) \quad (3.2c)$$

3.1.1.1 Classificação de órbitas

Conforme descrito por [61], as órbitas podem ser classificadas em três tipos básicos:

- i estacionária: $f^t(x) = x$ para todo t ;
- ii periódica: $f^t(x) = f^{t+T_p}(x)$ para um período mínimo T_p ;
- iii aperiódica: $f^t(x) \neq f^{t'}(x)$;

A *órbita periódica* ou *ciclo* p é o conjunto de pontos $\mathcal{M}_p \subset \mathcal{M}$ varrido por uma trajetória que retorna ao ponto inicial em um tempo finito. Um ponto que pertence a uma órbita periódica é chamado de *ponto periódico*.

Órbitas periódicas e pontos de equilíbrio são exemplos de *conjuntos não errantes* preservados na dinâmica. A dinâmica também pode preservar variedades

invariantes compactas de alta dimensão, como toros (comumente associado ao comportamento *quase-periódico*) e famílias de soluções relacionadas com a simetria contínua do sistema. Outros exemplos são proporcionados pelas variedades estáveis e instáveis (varridos por curvas semi-infinitas, originando-se a partir de um equilíbrio ao longo de cada vetor característico de estabilidade) ou as órbitas ergódicas de tempo infinito. [61]

Pode-se redefinir a classificação proposta dividindo os movimentos aperiódicos em dois subtipos: os que nunca retornam e os que retornam a uma região original. Um ponto ($x \in \mathcal{M}$) é chamado de *ponto errante* se existe uma vizinhança aberta $\mathcal{M}_0$ de x para o qual a órbita nunca retorna.

$$f^t(x) \notin \mathcal{M}_0 \quad \forall t > t_{min} \quad (3.3)$$

Em algumas áreas essa dinâmica é referida como *transiente*. Para tempos muito mais longos do que um tempo típico de 'retorno', é útil relaxar a noção de periodicidade exata e substituí-la pela noção de *recorrência*. Um ponto *recorrente* ou *não errante* existe se, para uma vizinhança aberta $\mathcal{M}_0$ de x e algum tempo t_{min} , existe um tempo t tal que:

$$f^t(x) \in \mathcal{M}_0 \quad (3.4)$$

Em outras palavras, a órbita de um ponto não errante retorna à vizinhança $\mathcal{M}_0$ frequentemente. O conjunto não errante de f é denotado por Ω , definido pela união de todos os pontos não errantes de ($x \in \mathcal{M}$). O conjunto não errante é determinante para o entendimento do comportamento ao longo prazo do sistema dinâmico.

Se existe um volume de espaço de estado conectado que se mapeia em si mesmo sob a evolução futura, o fluxo é globalmente contraído dentro de um subconjunto de ($x \in \mathcal{M}$) chamado *atrator*. O atrator pode ser único ou pode coexistir com outros conjuntos atratores, cada um com sua própria *base de atração* (conjunto de todos os pontos que levam ao atrator por evolução temporal futura). O atrator pode ser um *ponto fixo* (nó estável), uma órbita periódica (ciclo limite), uma órbita aperiódica ou uma combinação dos mesmos. Um caso interessante é o atrator aperiódico recorrente chamado de *atrator estranho* (no senso estrito, diagnosticar um atrator de estranho requer testes não triviais de *transitividade* e *cadeias de recorrência*) [149].

De forma inversa, se existe um conjunto não errante Ω encerrado por um volume de espaço de fases $\mathcal{M}_0$ no qual todos os pontos dentro de $\mathcal{M}_0$, mas não dentro de Ω , eventualmente saem de $\mathcal{M}_0$, pode se chamar ao conjunto não errante

Ω como *repulsor*. No senso geral, o conjunto não errante Ω é a união de todos os conjuntos invariantes explicados anteriormente: pontos fixos repulsores/atratores, atratores estranhos, dentre outros [61].

Para um tempo infinitesimal, os fluxos podem ser definidos por equações diferenciais. Uma trajetória representada por uma curva suave imersa no espaço de fases é representada por:

$$x(t + \tau) = f^{t+\tau}(x_0) = f(f(x_0, t), \tau) \quad (3.5)$$

A tangente da curva no ponto $x(t)$ pode ser expressa como a derivada temporal da lei de evolução na forma:

$$\left. \frac{dx}{d\tau} \right|_{\tau=0} = \partial_\tau f(f(x_0, t), \tau) \Big|_{\tau=0} = \dot{x}(t) \quad (3.6)$$

Considerando todas as órbitas possíveis, podem ser obtidos os vetores $\dot{x}(t)$ em qualquer ponto $x \in \mathcal{M}$, gerando um *campo vetorial* que é campo de velocidades:

$$\dot{x}(t) = v(x) \quad (3.7)$$

No caso particular, observa-se que a definição do fluxo foi dada para um campo vetorial que é independente do tempo. Em cada ponto do espaço de estados, indica-se o vetor local para a direção em que a órbita evolui. A magnitude do vetor $v(x)$ é a *velocidade* no ponto x e a direção e magnitude de $v(x)$ pode mudar ponto a ponto. Em alguns casos, quando o espaço de estados é uma variedade complexa, já não se pensa nos campos vetoriais como conjuntos incorporados no espaço de estado. Em vez disso, concebe-se que para cada x no espaço de estados existem planos tangentes diferentes $T\mathcal{M}_0$ ligados entre si. Dessa forma, o campo vetorial existe na união de todos esses planos tangentes, cuja união é chamada de *fibra tangente*.

$$T\mathcal{M} = \bigcup_{x \in \mathcal{M}} T\mathcal{M}_x \quad (3.8)$$

O vetor de velocidades v é sempre tangente à órbita, exceto nos *pontos de equilíbrio*.

$$v(x_q) = 0 \quad (3.9)$$

x_q também é referido como ponto estacionário, ponto fixo, ponto invariante,

zero do vetor v , solução estacionária ou estado estacionário. Por outro lado, a órbita que passa por x_0 no tempo $t = 0$ pode ser obtida pela integração da Equação 3.7.

$$x(t) = f^t(x_0) = x_0 + \int_0^t v(x(\tau))d\tau, \quad x(0) = x_0 \quad (3.10)$$

Nos fluxos ou sistemas autônomos, para os quais o campo vetorial v_i é estacionário, não existe uma dependência explícita a respeito do tempo, sendo notados como:

$$\frac{dy}{d\tau} = w(y) \quad (3.11)$$

3.1.2 Transporte de vizinhanças pelo fluxo

Além de descrever a trajetória de um ponto em particular do sistema dinâmico, é importante determinar o tamanho da vizinhança de $x(t)$ para conhecer a deformação que a vizinhança inicial de x_0 sofre ao longo do tempo. Para isso, deve-se supor que o fluxo é localmente suave e descrever a geometria local da vizinhança, estudando o fluxo linearizado em torno a $x(t)$. Pontos próximos, alinhados ao longo das *direções estáveis* (*direções de contração*), permanecem na vizinhança da trajetória $x(t) = f^t(x_0)$. Outros pontos saem da vizinhança ao longo das *direções instáveis* (*direções de expansão*), que são muito importantes em sistemas hiperbólicos.

À medida que um enxame de pontos representativos avança, ele transporta e distorce as vizinhanças. A deformação de uma vizinhança infinitesimal é melhor compreendida considerando uma trajetória que se origina perto de $x_0 = x(0)$, com um deslocamento infinitesimal inicial $\delta x(0)$. O fluxo então transporta o deslocamento $\delta x(0)$ ao longo da trajetória $x(x_0, t) = f^t(x_0)$.

3.1.2.1 Matriz A

O sistema linear de equações de variação para o deslocamento de uma vizinhança infinitesimal $x + \delta x$ é derivada a partir das equações de fluxo, Equação. (3.7), usando uma expansão em séries de Taylor de ordem linear:

$$\dot{x}_i + \delta \dot{x}_i = v_i(x + \delta x) \approx v_i(x) + \sum_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \delta x_j \quad (3.12)$$

O deslocamento infinitesimal δx é transportado ao longo da trajetória $x(x_0, t)$

com uma variação temporal dada por:

$$\frac{d}{dt}\delta x_i(x_0, t) = \sum_j \frac{\partial v_i}{\partial x_j}(x) \Big|_{x=x(x_0, t)} \delta x_j(x_0, t) \quad (3.13)$$

Notando que ambos os deslocamentos dependem só da posição inicial x_0 e do tempo t , pode-se abreviar a notação a $x(x_0, t) \rightarrow x(t) \rightarrow x$ e $\delta x_i(x_0, t) \rightarrow \delta x_i(t) \rightarrow \delta x$:

$$\dot{x}_i = v_i(x), \quad \delta \dot{x}_i = \sum_j A_{ij}(x) \delta x_j \quad (3.14)$$

O conjunto anterior de equações descreve a dinâmica da fibra tangente (Eq. 3.8) $x(x_0, t) \in T\mathcal{M}$, levando por extensão o espaço tangente d-dimensional $\delta x \in T\mathcal{M}_x$ para cada ponto $x \in \mathcal{M}$ no espaço de estados d-dimensional $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^d$. A *matriz de estabilidade* ou *matriz de gradiente de velocidade* [61]:

$$A_{ij}(x) = \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} \quad (3.15)$$

Descreve a taxa de deformação instantânea de uma vizinhança infinitesimal de $x(t)$ ocasionada pelo fluxo. O enxame de pontos vizinhos de $x(t)$ são instantaneamente deformados pela ação da matriz de estabilidade (especificamente A é uma taxa de deformação tensorial).

3.1.2.2 Matriz J

Expandindo por séries de Taylor um fluxo em um tempo finito até a ordem linear:

$$f_i^t(x_0 + \delta x) = f_i^t(x_0) + \sum_j \frac{\partial f_i^t(x_0)}{\partial x_{0j}} \delta x_j + \dots, \quad (3.16)$$

Encontra-se que a vizinhança linearizada, é transportada pela *Matriz Jacobiana*:

$$\delta x(t) = J^t(x_0) \delta x_0, \quad J_{ij}^t(x_0) = \frac{\partial x(t)_i}{\partial x(0)_j}, \quad J^0(x_0) = 1 \quad (3.17)$$

A matriz Jacobiana é avaliada em um segmento de trajetória que começa no ponto $x_0 = x(t_0)$ e termina no ponto $x_1 = x(t_1)$, $t_1 \geq t_0$. Como a trajetória $x(t)$ é determinística, um ponto inicial x_0 e o tempo t transcorrido são suficientes para determinar J . O mapa ou lei de velocidade f^t é admitido invertível e diferenciável,

de modo que J^t existe. Para tempos muito curtos J^t , se mantém perto de 1, pelo qual $\det J^t > 0$. Por continuidade, $\det J^t$ permanece positivo para todos os tempos t . No entanto, para sistemas ou mapas discretos, $\det J^t$ pode ter mudanças de sinal.

J descreve a deformação de uma vizinhança infinitesimal em um tempo finito t de uma base que se co-desloca ao longo da trajetória. A Figura 3.2 ilustra o transporte das bases ao longo da trajetória. A deformação da base inicial em x_0 em uma base não ortogonal em $x(t)$ é descrita pelos *valores característicos* e *vetores característicos* da matriz Jacobiana do fluxo linearizado [61].

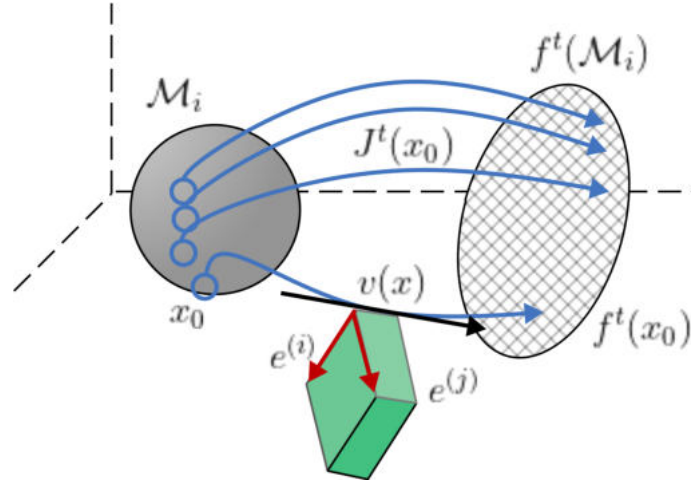


Figura 3.2: Por um tempo finito a base local formada pelos vetores característicos é transportado ao longo da órbita e deformado pela matriz Jacobiana J^t . Como J^t não é auto-adjunta, uma base ortogonal é mapeada em uma base não ortogonal. Adaptado de [61]

$$J^t e^{(j)} = \Lambda_j e^{(j)}, \quad j = 1, 2, \dots, d \quad (3.18)$$

Em que Λ_j representa o k -ésimo *valor característico* (*multiplicador de estabilidade*) da matriz Jacobiana em um tempo finito t . O símbolo $\lambda^{(k)}$ corresponde ao k -ésimo *expoente de estabilidade*, com *parte real* $\mu^{(k)}$ e *fase* $\omega^{(k)}$.

$$\Lambda_k = e^{t\lambda^{(k)}} \quad \lambda^{(k)} = \mu^{(k)} + i\omega^{(k)} \quad (3.19)$$

Como J^t é uma matriz real, os seus vetores característicos são reais ou são pares complexos conjugados. A fase ω^k descreve a velocidade de rotação no plano estendido pelo par de vetores característicos $\{Re(e^{(k)}), Im(e^{(k)})\}$ com um período de rotação dado por $T = \frac{2\pi}{\omega^{(k)}}$. [61]

As trajetórias próximas separam-se exponencialmente com o tempo ao longo das *direções instáveis*, aproximando-se ao longo das *direções estáveis* e mudando sua

distância ao longo das *direções marginais* a taxas mais lentas do que as exponenciais, correspondendo aos autovalores da matriz Jacobiana com magnitude maior que, menor que ou igual a 1, respectivamente. Na literatura, as direções marginais são também chamadas de direções neutras, indiferentes ou centros. Por outro lado, as direções estáveis são chamadas de "assintoticamente estáveis".

Supondo que são conhecidas as equações de fluxo Equação.(3.7), a partir da Equação. (3.15) é conhecida a matriz A . Portanto, é conhecida a velocidade de deformação instantânea da vizinhança. Daqui é preciso relacionar a matriz A com a matriz J para determinar a deformação em um intervalo de tempo finito. Relacionando as derivadas de Equação. (3.14) e Equação. (3.17):

$$\frac{d}{dt}\delta x(t) = \frac{dJ^t}{dt}\delta x_0 = A\delta x(t) = AJ^t\delta x_0 \quad (3.20)$$

Assim, os elementos da matriz Jacobiana $[d x d]$ satisfazem as equações lineares tangentes.

$$\frac{d}{dt}J^t(x_0) = A(x)J^t(x_0), \quad x = f^t(x_0), \quad J^0(x_0) = 1 \quad (3.21)$$

Para fluxos autônomos, a matriz de gradientes de velocidade A depende apenas de x , não do tempo, enquanto J^t depende tanto da posição espacial de estado como do tempo. Dada uma rotina numérica para integrar as equações do movimento, basta estender a integração d-dimensional e integrar d^2 elementos de $J^t(x_0)$ simultaneamente com as equações de fluxo $f^t(x_0)$. Resumindo, para calcular a matriz J^t basta conhecer a matriz A , que providenciará d^2 equações a mais para serem integradas com as equações do fluxo.[61]

3.1.3 Estabilidade local

As características topológicas de um sistema dinâmico (singularidades, órbitas periódicas e as formas pelas quais as órbitas se entrelaçam) são invariantes sob uma mudança contínua de coordenadas. Os equilíbrios e as órbitas periódicas são *conjuntos invariantes*, no sentido de que o fluxo só desloca pontos ao longo de uma órbita periódica, mas a *órbita periódica* como o conjunto de pontos periódicos permanece inalterada no tempo. Também existem quantidades que dependem da noção de distância métrica entre pontos, mas, no entanto, não mudam de valor sob uma mudança pequena de coordenadas. Quantidades locais, tais como os valores característicos de equilíbrios e órbitas periódicas, e quantidades globais, tais como *expoentes de Lyapunov*, *entropia métrica* e *dimensões fractais*, são exemplos de propriedades de sistemas dinâmicos independentes da escolha do sistema de coordenadas [61].

3.1.3.1 Equilíbrio

Inicialmente, considere-se um ponto de equilíbrio x_q (Eq.3.9). Expandindo em torno de x_q , sabendo que a matriz $A = A(x_q)$ é uma constante, e integrando $f^t(x) = x_q + e^{At}(x - x_q)$ obtém-se:

$$J_q^t = e^{At}, \quad J_q^t = J^t(x_q), \quad A_q = A(x_q) \quad (3.22)$$

A equação anterior se aplica não só para pontos de equilíbrio, mas também para fluxos lineares. Como o ponto de equilíbrio é estacionário, o tempo não exerce nenhum papel, e os valores característicos e vetores característicos da matriz A avaliados no ponto de x_q

$$A_q e^{(j)} = \lambda_q^{(j)} e^{(j)} \quad (3.23)$$

descrevem a vizinhança linearizada no ponto de equilíbrio x_q com expoentes de estabilidade $\lambda_q^{(j)} = \mu_q^{(j)} + i\omega_q^{(j)}$ independentes de qualquer escolha de coordenadas:

- se todos os $\mu^{(j)} < 0$ com $\omega = 0$, o equilíbrio é estável (nó estável);
- se algum $\mu^{(j)} < 0$, e outro $\mu^{(j)} > 0$, o equilíbrio é hiperbólico (ponto sela);
- se todos os $\mu^{(j)} > 0$ com $\omega = 0$, o equilíbrio é repulsor (nó instável);
- se algum $\mu^{(j)} = 0$, existe uma singularidade especial (simetria ou bifurcação).

Os vetores característicos da Equação (3.23) são também vetores característicos da matriz Jacobiana $J_q^t e^{(j)} = \exp(t\lambda_q^{(j)}) e^{(j)}$.

3.1.3.2 Órbita periódica

Uma virtude das órbitas periódicas é que elas são topologicamente invariantes. Um ponto fixo continua sendo um ponto fixo para qualquer escolha de coordenadas, e uma órbita periódica permanece periódica em qualquer representação da dinâmica. Qualquer reparametrização de um sistema dinâmico que preserve a topologia, preserve as relações topológicas entre as órbitas periódicas. Assim, a mera existência de órbitas periódicas basta para organizar parcialmente a disposição espacial de um conjunto não-errante. O fato de que os autovalores dos ciclos são *metricamente invariantes* determina os tamanhos relativos das vizinhanças em um conjunto não-errante [61].

Considerando a propriedade de multiplicabilidade da matriz Jacobiana, tem-se que para a repetição r -ésima de um *ciclo primário* (ciclo limite com um período único) p de período T :

$$J^{rT}(x) = J^T(f^{(r-1)T}(x)) \dots J^T(f^T(x)) J^T(x) = J_p(x)^r \quad (3.24)$$

Onde $J_p(x) = J^T(x)$ é a matriz Jacobiana para um único percurso do ciclo primário p , $x \in \mathcal{M}_p$ em qualquer ponto do ciclo, e $f^{rT}(x) = x$ quando $f^t(x)$ volta a x cada T .

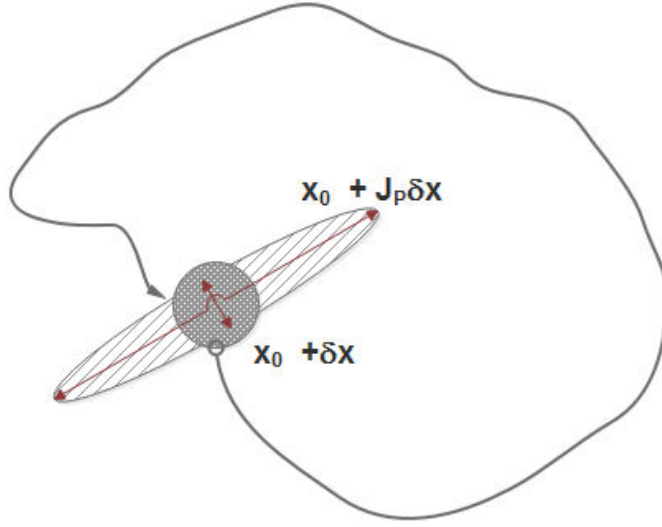


Figura 3.3: Para um ciclo primário p , a matriz Jacobiana é chamada de *matriz de Floquet* e representa a vizinhança esférica infinitesimal $x_0 \in \mathcal{M}_p$ esticada dentro de um elipsoide sobreposto ao longo do vetor característico e^j de $J_p(x)$ dado pelo *multiplicador de Floquet* $|\Lambda_j|$. A magnitude do raio do elipsoide é invariante sob reparametrizações não lineares das coordenadas do espaço de estados e é uma propriedade intrínseca do ciclo p .

A dependência periódica dos campos vetoriais T -periódicos, tal como o fluxo linearizado através de uma órbita periódica, é descrita pela *Teoria de Floquet*. A matriz Jacobiana avaliada na órbita periódica é chamada de *matriz de Floquet* $[d \times d]$ ou *matriz monodrônica* $[(d-1) \times (d-1)]$, em que os seus valores característicos Λ_j são conhecidos como *Multiplicadores de Floquet* e os $\lambda_q^{(j)} = \mu_q^{(j)} + i\omega_q^{(j)}$ são os *Expoentes de Floquet*. A velocidade de contração e expansão (repulsão) por unidade de tempo é dada pelas partes reais dos expoentes de Floquet (é importante notar que um expoente de Floquet não é um expoente de Lyapunov avaliado em um período de um ciclo primário p):

$$\mu_p^{(j)} = \frac{1}{T_p} \ln |\Lambda_{p,j}| \quad (3.25)$$

Quando Λ_j é real, é importante considerar o sinal do j -ésimo multiplicador de Floquet $\sigma^{(j)} = \frac{\Lambda_j}{|\Lambda_j|} \in \{+1, -1\}$. Se $\sigma^{(j)} = -1$ e $|\Lambda_j| \neq 1$ a direção característica correspondente é chamada de *inversamente hiperbólica*. Considerando que os multiplicadores de Floquet estão em ordem decrescente de magnitude $|\Lambda_1| \geq |\Lambda_2| \geq \dots \geq |\Lambda_d|$ e por consequência que os expoentes de Floquet conservam essa mesma ordem, pode-se classificar os multiplicadores de Floquet em três grupos e, m, c (de expansão, marginais, de contração):

$$\text{expansão : } \quad \left\{ \Lambda_e = \Lambda_{p,j} : |\Lambda_{p,j}| > 1 \quad \lambda_e = \lambda_p^{(j)} : \mu_p^{(j)} > 0 \right. \quad (3.26a)$$

$$\text{marginal : } \quad \left\{ \Lambda_m = \Lambda_{p,j} : |\Lambda_{p,j}| = 1 \quad \lambda_e = \lambda_m^{(j)} : \mu_p^{(j)} = 0 \right. \quad (3.26b)$$

$$\text{contração : } \quad \left\{ \Lambda_c = \Lambda_{p,j} : |\Lambda_{p,j}| < 1 \quad \lambda_c = \lambda_m^{(j)} : \mu_p^{(j)} < 0 \right. \quad (3.26c)$$

A estabilidade de uma órbita periódica de um fluxo ou a estabilidade de um ponto fixo de um mapa é dada pelo seguinte critério:

- estável a perturbações tangentes ao ciclo se todos $|\Lambda_j| < 1$. (as partes reais de todos os expoentes de Floquet, exceto o expoente longitudinal ou marginal, são estritamente negativos $0 > \mu^{(1)} > \mu^{(2)}$);
- hiperbólico, sela ou instável a perturbações fora da variedade estável, se algum $|\Lambda_j| > 1$ e outro $|\Lambda_j| < 1$ (um conjunto de $\mu^{(j)} \geq \mu_{(min)} > 0$);
- elíptico, neutro ou marginal, se todos $|\Lambda_j| = 1$ ($\mu^{(j)} = 0$);
- parcialmente hiperbólico, se $\mu^{(j)} = 0$ para um subconjunto de expoentes além do expoente longitudinal;
- repulsor ou instável a qualquer perturbação, se todos $|\Lambda_j| > 1$ (todos os expoentes de Floquet, além do expoente longitudinal, são estritamente positivos $\mu^{(j)} \geq \mu^{(d)} > 0$).

A região de valores de parâmetros para os quais a órbita periódica é estável é chamada de *janela de estabilidade*. O conjunto de pontos iniciais que estão assintoticamente atados a $\mathcal{M}_p$ quando o tempo tende a infinito é chamada de *base de atração* do ciclo limite p . Ciclos repulsores ou hiperbólicos são estáveis a perturbações genéricas. Se todos os expoentes de Floquet (além dos longitudinais) de todas as órbitas periódicas de um fluxo estão afastados de zero, o fluxo é chamado de hiperbólico; caso contrário, é chamado de fluxo não hiperbólico. Um fluxo ou mapa confinado suave é genericamente não-hiperbólico, com elipsoidalidade parcial

ou marginalidade apenas na presença de simetrias contínuas, ou para determinados valores de parâmetros de bifurcação.

A presença de valores característicos marginais indica uma simetria contínua no fluxo (que se deve explorar imediatamente para simplificar o problema), ou uma não hiperbolicidade no fluxo. Nesse caso (típico dos valores dos parâmetros para os quais ocorrem bifurcações), é preciso ir além da estabilidade linear, lidar com *subespaços de Jordan* e taxas de crescimento sub-exponencial. Para soluções invariantes ao fluxo, tais como órbitas periódicas, a evolução do tempo é em si uma simetria contínua; portanto, uma órbita periódica de um fluxo sempre tem um multiplicador marginal de Floquet. A invariância contínua que dá origem a esse multiplicador marginal de Floquet é a invariância de um ciclo sob uma translação temporal de seus pontos ao longo do ciclo [61].

3.1.4 Mapeamento de Poincaré

No método da secção de Poincaré, registram-se as coordenadas de uma trajetória sempre que a trajetória atravessa um espaço prescrito. O mapa pode ser tão complicado quanto a trajetória que corta através de uma hipersuperfície curvada. Uma secção de Poincaré não é uma projeção em um espaço de menor dimensão mas uma mudança local de coordenadas em uma direção ao longo do fluxo, enquanto as coordenadas restantes são transversais a ele. Nenhuma informação sobre o fluxo é perdida, reduzindo-o ao conjunto de pontos na secção de Poincaré e aos mapas de retorno que os conectam. A trajetória espacial completa pode sempre ser reconstruída pela integração a partir do ponto mais próximo da secção. A redução de um fluxo contínuo para uma secção Poincaré é uma poderosa ferramenta de visualização. Mas, o método das secções é mais do que uma visualização; é também uma ferramenta fundamental da dinâmica para desvendar completamente a geometria de um fluxo caótico [61].

3.1.4.1 Secção de Poincaré

Um fluxo de tempo contínuo decompõe o espaço de estado no 'espaguete' Lagrangeano da Figura 3.1, em uma união de órbitas unidimensionais não intersectadas. Qualquer ponto de uma órbita pode ser usado para rotular a órbita. O espaço de estados assim é reduzido a um 'subproduto' de um espaço $\mathcal{P}$ $(d - 1)$ -dimensional, com pontos $\hat{x}_j \in \mathcal{P}$ e as correspondentes órbitas unidimensionais $\mathcal{M}_j$, nas quais o fluxo apresenta uma sequência de translação no tempo. Uma vez que uma secção é definida, uma descrição 'Lagrangeana' do fluxo é substituída pela formulação 'Eule-

riana', com o campo de velocidades de trajetória-tangente $v(\hat{x})$, $\hat{x}_j \in \mathcal{P}$ permitindo passar entre o espaço de tempo discretizado $\mathcal{P}$ e o espaço de estados $\mathcal{M}$. A importância desta *dinâmica transversa* está associada ao fato de que descreve como trajetórias próximas são atraídas/repelidas entre si.

Sucessivas trajetórias são intersectadas com a *secção de Poincaré* (uma hiper-superfície $(d-1)$ -dimensional, imersa no espaço de estados $\mathcal{M}$), tal como é descrito na Figura 3.4. O *Mapa de Retorno de Poincaré* $\mathcal{P}(\hat{x})$, é definido como um mapa $(d-1)$ -dimensional da forma:

$$\hat{x}' = P(\hat{x}) = f^{\tau(\hat{x})}(\hat{x}), \quad \hat{x}', \hat{x} \in \mathcal{P} \quad (3.27)$$

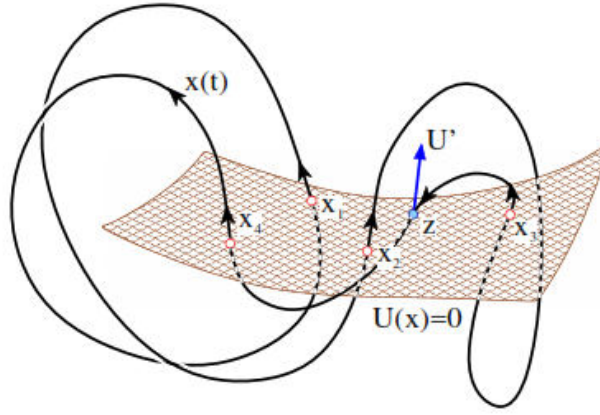


Figura 3.4: Uma trajetória $x(t)$ que intersecta uma secção de Poincaré $\mathcal{P}$ nos tempos t_1, t_2, t_3 e fecha um ciclo em $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3)$, $\hat{x}_k = x(t_k) \in \mathcal{P}$ de longitude topológica 3 em relação à secção. Em geral, as intersecções não são normais à secção. Observe-se também que a intersecção z não conta, já que está na direção oposta às outras intersecções [61].

$\tau(\hat{x})$ é a *função de retorno* dos tempos entre intersecções da trajetória que começa em $\hat{x}$. A escolha da secção da hiper-superfície $\mathcal{P}$ é arbitrária. No entanto, é difícil definir uma secção através da qual cruzem todas as trajetórias de interesse, mas muitas vezes só é necessária uma secção local, uma hiper-superfície finita de codimensão 1, interceptada por um enxame de trajetórias próximas à trajetória de interesse. Tal superfície pode ser especificada implicitamente através da função $U(x)$ que é zero sempre que um ponto x esteja na secção de Poincaré.

$$\hat{x} \in \mathcal{P} \quad \text{iff} \quad U(\hat{x}) = 0 \quad (3.28)$$

O gradiente de $U(x)$ avaliado em $\hat{x} \in \mathcal{P}$ tem uma função dupla. A primeira é que o fluxo deve perfurar a hiper-superfície $\mathcal{P}$, em lugar de ser tangente a ele.

Um ponto próximo $\hat{x} + \delta x$ está na hiper-superfície $\mathcal{P}$ se $U(\hat{x} + \delta x) = 0$. Um ponto próximo na trajetória é dado por $\delta x = v\delta t$; então, um ponto transversal é assegurado pela condição de transversalidade:

$$(v \cdot \nabla U) = \sum_{j=1}^d v_j(\hat{x}) \partial_j U(\hat{x}) \neq 0, \quad \partial_j U(\hat{x}) = \frac{\partial}{\partial x_j} U(\hat{x}), \quad \hat{x} \in \mathcal{P} \quad (3.29)$$

A segunda é que o gradiente ∇U define a orientação da hiper-superfície $\mathcal{P}$. O fluxo é orientado também e uma órbita periódica pode perfurar duas vezes, atravessando-o em qualquer direção, como na Figura 3.4. Então, a secção de Poincaré precisa de uma condição de orientação complementar à sua definição [61]:

$$\hat{x}_{n+1} = P(\hat{x}_n) \quad U(\hat{x}_{n+1}) = U(\hat{x}_n) = 0 \quad n \in \mathbb{Z}^+ \quad \sum_{j=1}^d v_j(\hat{x}_n) \partial_j U(\hat{x}_n) > 0 \quad (3.30)$$

Desta forma, o fluxo em tempo contínuo $x(t) = f^t(x)$ é reduzido a uma sequência de tempo discreto de $\hat{x}_n$ trajetórias orientadas e transversais a $\mathcal{P}$.

3.1.4.2 Borda da Secção

Uma secção capta órbitas vizinhas, desde que as corte transversalmente. O método falha no momento em que o campo de velocidades no ponto $\hat{x}^*$ não perfura a secção. Nesta localização, a velocidade é tangente à secção e, assim, ortogonal ao vetor modelo normal $\hat{n}$:

$$\hat{n} \cdot v(\hat{x}^*) = 0 \quad \hat{x}^* \in S \quad (3.31)$$

Para um fluxo, tais pontos formam uma borda de secção $(d-2)$ -dimensional $S \in \mathcal{P}$. Se um ponto modelo é um ponto de equilíbrio x_q , não existe dinâmica nesse ponto, já que a velocidade desaparece ($v(x_q) = 0$) e não pode ser usada para definir um vetor modelo normal à secção. Em lugar disso, orienta-se $\mathcal{P}$ de modo que os vetores característicos instáveis são transversais à secção. Pelo menos o vetor característico contraente mais lento é tangente à secção, assegurando que o fluxo seja transversal à secção $\mathcal{P}$ em uma vizinhança aberta do ponto modelo [61].

3.1.4.3 Escolha da melhor secção de Poincaré

Uma secção de Poincaré deve ser tal que capture a maior quantidade de órbitas do fluxo no espaço de estados. Não existem leis determinadas que permitam escolher a melhor secção de Poincaré. A escolha depende muito das observações sobre a dinâmica do sistema. CVITANOVIĆ *et al.*(2016) resume algumas dicas heurísticas para escolher a melhor secção de Poincaré. Destaca-se o uso de secções lineares, secções que passem nos pontos de equilíbrio, secções que incorporem os vetores característicos contraentes, secções que consideram simetrias contínuas no fluxo, entre outras.

3.1.4.4 Cálculo da secção de Poincaré

Considere-se um sistema dinâmico contínuo da forma da Equação (3.7), cujo mapa $f^{\tau_n}(x_n) = x_n + \int v(x(\tau))d\tau$ não pode ser integrado analiticamente. A metodologia consiste em integrar numericamente trajetórias transversas à hiper-superfície. Usando um passo pequeno no integrador numérico, é possível observar o valor da função U , à medida que transcorre a integração. Uma mudança de sinal na função U vai indicar que a trajetória atravessou a hiper-superfície (lembrando que $U(x) = 0$ indica a existência de um ponto na secção de Poincaré).

Seja t_a o tempo imediatamente anterior à mudança de sinal de U , e t_b o tempo logo após ele mudar de sinal. O método para pousar exatamente na secção de Poincaré consiste em converter uma das coordenadas espaciais em uma variável de integração na trajetória entre t_a e t_b . Usando:

$$\frac{dx_k}{dx_1} \frac{dx_1}{dt} = \frac{dx_k}{dx_1} v_1(x, t) = v_k(x, t) \quad (3.32)$$

Pode-se reescrever as equações de movimento da Equação (3.7) na forma:

$$\frac{dt}{dx_1} = \frac{1}{v_1}, \dots, \frac{dx_d}{dx_1} = \frac{v_d}{v_1} \quad (3.33)$$

Note-se que x_1 agora é a variável independente de integração e integra a rotina desde $x_1(t_a)$ até o valor de x_1 na hiper-superfície, determinado pela condição de intersecção:

$$U(\hat{x}) = (\hat{x} - \hat{x}') \cdot \hat{n} = 0, \quad \hat{x} \in \mathcal{P} \quad (3.34)$$

Aqui, a secção de Poincaré é um plano $\mathcal{P}$ especificado por um ponto modelo $\hat{x}'$ e um vetor modelo $\hat{n}$ normal, que é perpendicular ao plano. Assim, é garantido

que o ponto final dessa integração é um ponto no plano de Poincaré.

3.1.4.5 Informação nos mapas de Poincaré

Como foi mencionado anteriormente, os mapas de Poincaré oferecem informação relacionada ao comportamento de atração/repulsão de trajetórias próximas entre si. A seguir são apresentadas varias secções de Poincaré para o sistema de Rossler (Eq. 3.2).

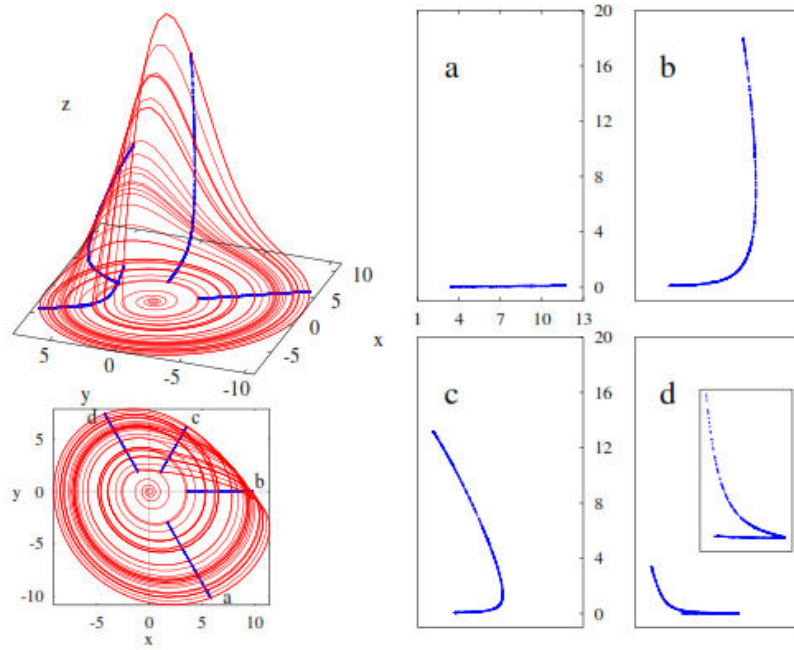


Figura 3.5: (Esquerda) Sequência de secções de Poincaré do atrator estranho do sistema de Rossler. Os planos foram definidos através do eixo z , orientados a: (a) -60° , (b) 0° , (c) 60° e (d) 120° no plano $(x-y)$. (Direita) Vistas das trajetórias típicas do fluxo de Rossler com as secções de Poincaré superpostas. [61]

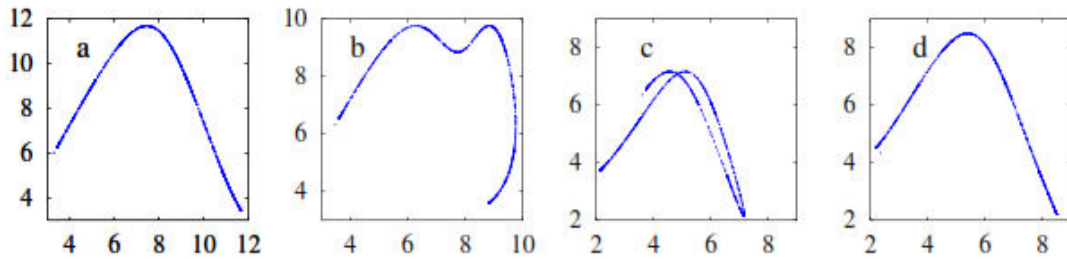


Figura 3.6: Mapas de retorno $r_n \rightarrow r_{n+1}$ para distância radial das secções de Poincaré da Figura 3.5. [61]

Na Figura (3.5) observa-se um processo no qual o fluxo está se expandindo, correspondente aos quadros a e b . Posteriormente segue um processo de dobra do

fluxo descrito no quadro *c*. Por último, um processo de mistura de fluxo *d*. Na Figura 3.6 são apresentados os correspondentes mapas de retorno. Observa-se que os mapas *a* e *d* conformam uma função 1-1 ou injetora. Nos quadros *b* e *c* aparecem modos multimodais e não invertíveis de projeções $(R_n, z_n) \rightarrow (R_{n+1}, z_{n+1})$ dentro do sub-espaço unidimensional $(R_n) \rightarrow (R_{n+1})$.

Obtidos os mapas de retorno do fluxo, estes podem ser interpolados, obtendo funções similares a mapas ou sistemas dinâmicos discretos. Assim, a dinâmica inicialmente contínua pode ser estudada como uma dinâmica unidimensional [61].

Considerando que existe uma função que descreve a dinâmica discreta dos mapas de retorno da forma:

$$x_{n+1} = P(x_n) = f^{\tau(x_n)}x_n, \quad x_{n+1}, x_n \in \mathcal{P} \quad (3.35)$$

Em que $\tau(x_n)$ é o tempo entre uma intersecção e outra. A Equação (3.35) representa a *função de retorno do primeiro iterado*.

Representando o *n*-ésimo-iterado do mapa *f* como:

$$f^n(x) = f \circ f^{n-1}(x) = f(f^{n-1}(x)), \quad f^0(x) = x \quad (3.36)$$

A trajetória de *x* no conjunto finito de pontos no tempo *n* na órbita $\mathcal{M}_x$: $\{x, f(x), f^2(x), \dots, f^n(x)\}$

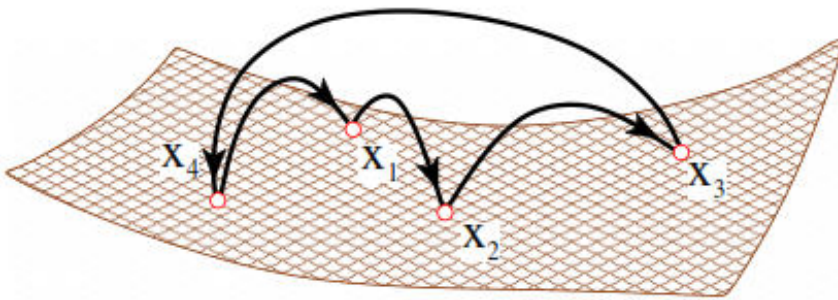


Figura 3.7: O fluxo $x(t)$ representado por um mapa de retorno de Poincaré da forma $x_{n+1} = f(x_n)$. Observa-se que a órbita de $\hat{x}_1$ é periódica e contém quatro pontos periódicos $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3, \hat{x}_4)$ [61].

é o subconjunto de $\mathcal{M}$ que pode ser atingido pelas iterações de *f*. Um ponto periódico (ponto cíclico) x_k que pertence a uma órbita periódica (ciclo) de período

n é a solução de :

$$f^n(x_k) = f(f(\dots f(x_k)\dots)) = x_k, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1 \quad (3.37)$$

Por exemplo na Figura 3.7 a órbita está constituída por quatro pontos periódicos $\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3, \hat{x}_4$.

Na Figura 3.5 é possível observar a propriedade característica de esticar e dobrar que é natural em sistemas caóticos. Esse processo de esticar (para separar exponencialmente as órbitas) e dobrar (para que a região do espaço de estados se mantenha finita) é também conhecido como transformação do padeiro. Além de gerar a condição necessária para um sistema caótico, a transformação do padeiro é também responsável pela estrutura tipo *conjunto de Cantor* do atrator, que faz com que seja um atrator estranho. De fato, esse conjunto invariante que se dobra repetidamente sobre si mesmo está formado por um número infinito de capas de espessura nula para os sistemas dissipativos, já que possuem volume nulo. Esse conjunto infinito de capas é o responsável pela estrutura fractal do atrator [61]. A Figura 3.8 ilustra esquematicamente o processo anteriormente descrito.

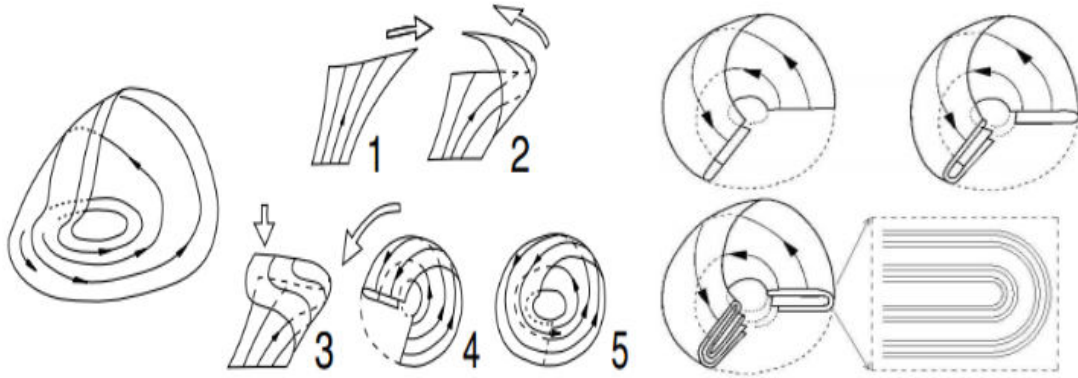


Figura 3.8: Ilustração esquemática da transformação do padeiro no atrator de Rosler [258]

3.1.5 Definição de caos

Matematicamente um sistema dinâmico $(\mathcal{M}, f^t)$ é caótico se possui as seguintes características [64]:

- i É sensível em relação às condições iniciais: pequenos desvios das estimativas iniciais sobre os valores da função podem incrementar consideravelmente os desvios ao iterar a função. $(\mathcal{M}, f^t)$ é sensível às condições iniciais se existe um número

- $\delta > 0$ (chamada constante de sensibilidade) tal que, para todo $x \in \mathcal{M}$ e todo $\varepsilon > 0$, existe $y \in \mathcal{M}$ com $d(x, y) < \varepsilon$ e existe $n \in \mathbb{N}$ tal que $d(f^n(x), f^n(y)) > \delta$
- ii É topologicamente transitivo: se $(\mathcal{M}, f^t)$ é topologicamente transitivo, $\mathcal{M}$ não pode se decompor em dois conjuntos invariantes disjuntos com interior não nulo. Se f^t possui uma órbita densa então $(\mathcal{M}, f^t)$ é topologicamente transitivo. Se dados dois subconjuntos abertos quaisquer U e $V \in \mathcal{M}$, existe $k \in \mathbb{N}$ tal que $f^k(U) \cap V \neq \emptyset$, então $(\mathcal{M}, f^t)$ é topologicamente transitivo.
 - iii Seus pontos periódicos são densos em $\mathcal{M}$: Um sistema caótico deve possuir uma componente de imprevisibilidade, uma componente de irreduzibilidade e uma componente de regularidade (pontos periódicos densos). Os pontos periódicos de $(\mathcal{M}, f^t)$ são densos se para qualquer subconjunto aberto $U \in \mathcal{M}$ sempre existe um ponto periódico em U

Posteriormente foi mostrado que a sensibilidade às condições iniciais se deduz a partir das outras duas propriedades. Depois se mostrou que todo sistema dinâmico definido em um intervalo por uma função f topologicamente transitiva é caótico. Finalmente, a definição mais recente diz que um sistema dinâmico é caótico se, para quaisquer conjuntos abertos U e V , existe uma órbita periódica que visita ambos conjuntos [243].

A definição de caos que melhor se ajusta ao domínio e objetivos deste trabalho é a apresentada por [258]:

"Caos é um comportamento aperiódico ao longo prazo em um sistema dinâmico determinístico que exhibe sensibilidade às condições iniciais."

- i comportamento aperiódico ao longo prazo significa que existem trajetórias em um tempo infinito, mas que não se estabelecem pontos fixos, ciclos limites ou órbitas quase-periódicas;
- ii determinista significa que o sistema não tem aleatoriedade nem ruído; o comportamento irregular aparece unicamente como consequência da não linearidade do conjunto de equações;
- iii sensibilidade às condições iniciais significa que o sistema possui trajetórias próximas que se afastam a uma taxa exponencial; ou seja, o sistema possui pelo menos um expoente de Lyapunov positivo.

Outra propriedade que é característica dos sistemas caóticos é a relacionada com a medida de entropia do sistema. Particularmente, um elemento que também

define a divergência das órbitas é a entropia de Kolmogorov-Sinai, que tem uma relação direta com os expoentes de Lyapunov e a perda de informação do sistema quanto à definição dos estados futuros. O conjunto invariante de trajetórias caracterizadas na dinâmica caótica possui entropias de Kolmogorov-Sinai positivas. Portanto, se um sistema determinístico é localmente instável (expoente positivo de Lyapunov) e o fluxo se mistura globalmente (entropia positiva), pode-se chamar de caótico (Figura 3.9).

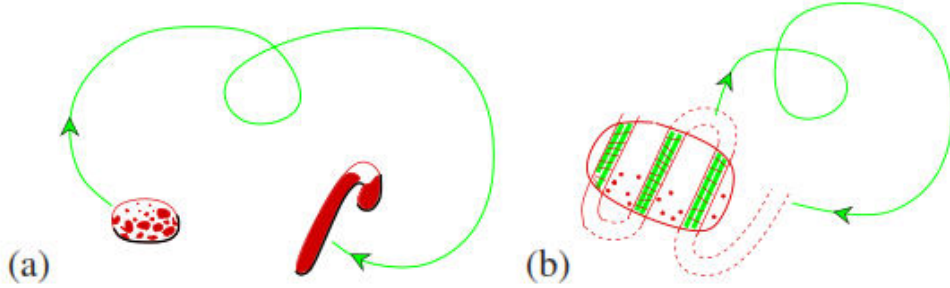


Figura 3.9: A dinâmica de um sistema caótico é (a) em qualquer lugar localmente instável e (b) com fluxo globalmente misturado [61].

A definição de atrator estranho está associada à estrutura geométrica complexa. Um atrator estranho é definido como um atrator que não pode ser construído ou representado pela união de um número finito de variedades topológicas suaves. Em muitos casos, a geometria de um atrator caótico pode satisfazer a definição de atrator estranho, mas também essa definição pode ser satisfeita por atratores não caóticos.

Os atratores estranhos se caracterizam por apresentarem uma dimensão fractal ou dimensão de Hausdorff não inteira. A origem do caos em sistemas dissipativos em muitos casos é semelhante e está relacionado à coexistência de muitas trajetórias periódicas instáveis, como uma parte de eixos heteroclínicos e homoclínicos. Usualmente os atratores caóticos estão associados a séries temporais aperiódicas cuja dinâmica tem forte dependência a perturbações das condições iniciais [61].

3.1.6 Expoentes de Lyapunov

Uma ferramenta que constitui um diagnóstico fundamental para a caracterização da dinâmica de determinado sistema é a observação do comportamento ao longo prazo e a sensibilidade às condições iniciais. Desse modo, se todos os pontos na vizinhança da trajetória convergem para a mesma órbita, o atrator é um ponto fixo ou um ciclo limite. No entanto, se existem duas trajetórias $x(t) = f^t(x_0)$ e

$x(t) + \delta x(t) = f^t(x_0 + \delta x_0)$ inicialmente próximas que se afastam exponencialmente com o tempo, e em um tempo finito sua separação atinge um tamanho acessível dentro do espaço de estados, diz-se que o comportamento é caótico [258].

A sensibilidade às condições iniciais pode ser quantificada por:

$$\|\delta x(t)\| \approx e^{\lambda t} \|\delta x_0\| \quad (3.38)$$

em que λ representa a taxa de separação das trajetórias no sistema, sendo chamado de *expoente de Lyapunov representativo*. No limite, quando o tempo tende a infinito, o expoente de Lyapunov é uma medida global da taxa média com que as trajetórias próximas divergem, em média, sobre o atrator estranho.

A média de crescimento da distância $\frac{\|\delta x(t)\|}{\|\delta x(0)\|}$ entre trajetórias inicialmente próximas é dado pelo *expoente de Lyapunov representativo*, que pode ser estimado para um tempo longo t como:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|\delta x(t)\|}{\|\delta x(0)\|} \quad (3.39)$$

Usando a Equação (3.39), tomando uma separação inicial $\delta x(0)$, medindo a distância entre duas órbitas próximas até $\|\delta x(t_1)\|$ ser significativamente grande, posteriormente salvando $t\lambda = \ln \frac{\|\delta x(t_1)\|}{\|\delta x(0)\|}$, reescalando $\delta x(t_1)$ pelo fator $\frac{\|\delta x(0)\|}{\|\delta x(t_1)\|}$ e repetindo esse processo até finalmente atingir o tempo finito t das integrações das órbitas, obtém-se o expoente de Lyapunov representativo:

$$\lambda = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_i t_i \lambda_i \quad (3.40)$$

A Figura (3.10) ilustra o procedimento descrito anteriormente.

O problema de medir a taxa de crescimento da distância entre dois pontos é que, à medida que os pontos se separam, a medição é cada vez menos uma medida local. No estudo de séries temporais experimentais, esta pode ser a única opção. No caso particular em que são conhecidas as equações de movimento, uma melhor maneira é medir a taxa de crescimento de vetores transversais a uma determinada órbita.

Dadas as equações de movimento, para δx é conhecida a relação $\frac{\delta x_i(t)}{\delta x_j(0)}$ pela definição da matriz Jacobiana:

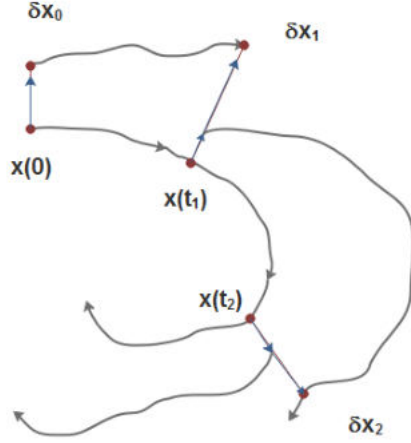


Figura 3.10: O cálculo do expoente de Lyapunov representativo para um tempo determinado requer que se mantenha a separação das órbitas próximas dentro do intervalo do fluxo linearizado

$$\lim_{\delta x(0) \rightarrow 0} \frac{\delta x_i(t)}{\delta x_j(0)} = \frac{\delta x_i(t)}{\delta x_j(0)} = J_{ij}^t(x_0) \quad (3.41)$$

Então, linearizando as equações de variação com que é calculada a matriz J:

$$x(t) = f^t(x_0) \quad \delta x(x_0, t) = J^t(x_0) \delta x(x_0, 0) \quad (3.42)$$

Obtém-se:

$$\lambda(x_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|J^t(x_0) \delta x_0\|}{\|\delta x_0\|} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \ln(\hat{n}^T J^{tT} J^t \hat{n}) \quad (3.43)$$

Nesta formulação, é definido um vetor inicial de orientação $\hat{n} = \frac{\delta x_0}{\|\delta x_0\|}$. Se não se preocupa com a orientação do vetor de separação entre uma trajetória e sua perturbação, mas apenas com a magnitude, pode-se interpretar $\|J^t \delta x_0\|^2 = \delta x_0^T (J^{tT} J^t) \delta x_0$ como um erro de correlação da matriz. Em mecânica do contínuo, o *tensor de Cauchy-Green* $J^T J$ é o objeto natural para descrever como as vizinhanças linearizadas se deformam. Na Teoria dos Sistemas Dinâmicos, os alongamentos característicos são chamados de tempos-limites de Lyapunov ou expoentes característicos [61].

$$\lambda(x_0, \hat{n}, t) = \frac{1}{t} \ln \|J^t \hat{n}\| = \frac{1}{2t} \ln(\hat{n}^T J^{tT} J^t \hat{n}) \quad (3.44)$$

A orientação inicial $\hat{n}$ pode ser expandida na base característica do *tensor de alongamento*. Considerando que para tempos longos $J^t \hat{n}$ é dominada pelo maior

multiplicador de Floquet Λ_i , o expoente de Lyapunov representativo é dado por:

$$\lambda(x_0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \{ \ln \|\hat{n} \cdot e^{(1)}\| + \ln |\Lambda_1(x_0, t)| + O|e^{-2(\lambda_1 - \lambda_2)t}| \} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} |\Lambda_1(x_0, t)| \quad (3.45)$$

em que $\Lambda_1(x_0, t)$ é o maior valor característico de $J^t(x_0)$. As equações podem ser integradas com precisão por um tempo finito. Portanto, o limite de tempo infinito da Equação 3.43 pode ser estimado apenas a partir de um conjunto finito de avaliações de $\frac{1}{2t} \ln(\hat{n}^T J^{tT} J^t \hat{n})$ como uma função do tempo t .

3.1.6.1 Espectro de Lyapunov

Considerando um sistema dinâmico contínuo cujas órbitas estão imersas em um espaço de estados finito, a metodologia do cálculo dos expoentes de Lyapunov consiste em acompanhar o comportamento ao longo prazo de uma esfera infinitesimal de condições iniciais. Por causa das deformações locais próprias do fluxo, a esfera eventualmente se converte em um elipsoide (Figura 3.11). O expoente de Lyapunov é calculado para cada dimensão e depende da longitude do eixo principal do elipsoide. Para obter as trajetórias é preciso considerar o sistema linearizado; de fato, os eixos principais do elipsoide são definidos pela evolução das equações linearizadas Eqs. (3.42) (equações de variação) de um vetor ortonormal alinhado com a trajetória dinâmica.

Para implementar, é necessário integrar o sistema de equações linearizadas de dimensão $d(d+1)$. Com as equações linearizadas na base de vetores ortonormais iniciais, obtém-se o conjunto de vetores $\{v_1, v_2, \dots, v_d\}$. Posteriormente é aplicado um procedimento de Reortonormalização de Gram-Schmidt para obter os seguintes vetores ortonormais, após integração em um intervalo de tempo [286]:

$$v_1' = \frac{v_1}{\|v_1\|}, \quad v_2' = \frac{v_2 - \langle v_2, v_1' \rangle v_1'}{\|v_2 - \langle v_2, v_1' \rangle v_1'\|}, \quad v_n' = \frac{v_n - \langle v_n, v_{n-1}' \rangle v_{n-1}' - \dots - \langle v_n, v_1' \rangle v_1'}{\|v_n - \langle v_n, v_{n-1}' \rangle v_{n-1}' - \dots - \langle v_n, v_1' \rangle v_1'\|} \quad (3.46)$$

em que $\langle, \rangle$ denota o produto interno Euclidiano. O conjunto ortonormal obtido serve como novo conjunto de condições iniciais para a integração seguinte do sistema linearizado. O procedimento de reortonormalização Gram-Schmidt nunca afeta a direção do primeiro vetor em um sistema. Então este vetor tende a seguir na direção que cresce mais rapidamente no espaço tangente. A longitude do vetor v_1 é proporcional a $2^{\lambda_1 t}$, pelo que é possível obter o primeiro expoente de Lyapunov. Baseados na construção de v_2' , a direção de v_2 muda no processo (lembrando que só o primeiro

vetor está alinhado na direção de maior crescimento), notando que v_1' e v_2' estão no mesmo subespaço de v_1 e v_2 . A área definida pelos vetores v_1 e v_2 é proporcional a $2^{(\lambda_1+\lambda_2)t}$. Como v_1' e v_2' são ortonormais, pode-se determinar λ_2 diretamente a partir da taxa média de crescimento da projeção do vetor v_2 no vetor v_2' .

Aplicando este procedimento ao longo das d dimensões, pode-se concluir que o subespaço formado pelos d vetores não é afetado pelo processo de reortonormalização. A evolução do volume de dimensão d é proporcional a $2^{\sum_{i=1}^d \lambda_i t}$. A projeção dos vetores evoluídos para a nova base ortonormal atualiza corretamente as taxas de crescimento de cada um dos eixos principais, fornecendo estimativas dos expoentes de Lyapunov [286].

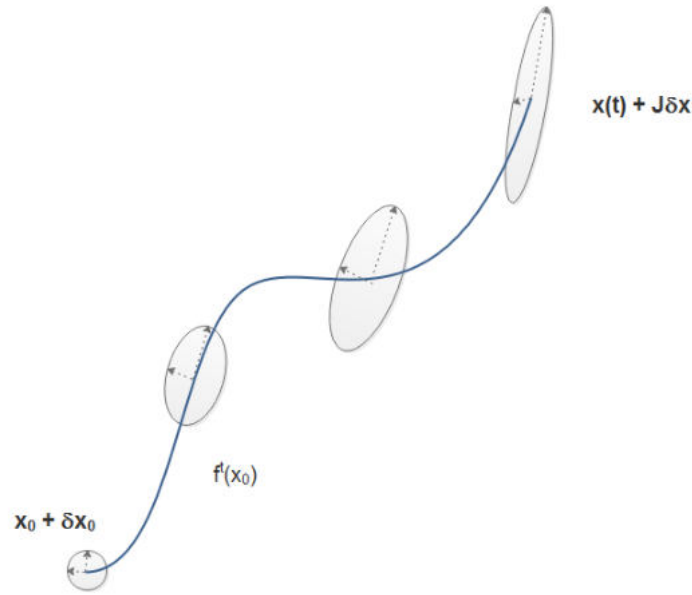


Figura 3.11: Deformação da esfera de condições iniciais através do fluxo linearizado

Para um sistema unidimensional, o espectro de Lyapunov claramente consiste em um único valor de expoente. Para sistemas discretos; o expoente é positivo para regime caótico, zero para órbitas marginais estáveis e negativo para órbitas periódicas. Para um sistema dinâmico contínuo unidimensional, o expoente de Lyapunov sempre será negativo. Para sistemas dinâmicos contínuos pelo menos tridimensionais, os possíveis espectros seguem a forma [61]:

- $(+, 0, -)$ para um atrator estranho
- $(0, 0, -)$ para um toro
- $(0, -, -)$ para um ciclo limite
- $(-, -, -)$ para um ponto fixo

3.2 Análise não linear de séries temporais

Uma série temporal representa a evolução de uma variável de estado (dependente) em função da variável independente (tempo) ($s_n = s(x_n)$). A análise não linear de séries temporais constitui parte importante da caracterização e estudo de comportamentos dinâmicos. De forma diferente à visualização do espaço de estados natural da dinâmica do sistema, essas técnicas sugerem um estudo baseado em um *espaço de estados imerso* que é reconstruído a partir das observações de uma única série temporal. Do ponto de vista experimental ou na prática industrial, este tipo de análise apresenta grandes vantagens, já que implicaria a medição de só uma variável de estado e não demandaria a existência de uma modelagem matemática do processo ou fenômeno [119].

A técnica mais importante de reconstrução de espaços de estados é o *método dos atrasos*. Basicamente, são construídos vetores de medidas em um espaço imerso, que são gerados a partir dos valores do *tempo de atraso* das medidas escalares $\{s_n\}$

$$\{s_n\} = (s_{n-(m-1)\tau}, s_{n-(m-2)\tau}, \dots, s_n) \quad (3.47)$$

em que o número de elementos m é denominado como a *dimensão de incorporação* ou *dimensão imersa* e τ é o *tempo de atraso*. A técnica de reconstrução de espaços de fases se fundamenta no teorema proposto por [264] e [237]. O teorema resumidamente afirma que, se a sequência ou série $\{s_n\}$, consiste de medidas escalares de um sistema dinâmico determinístico, então o atraso de tempo exibe uma imagem 1-1 do conjunto original $\{x\}$, sempre e quando seja garantido uma dimensão m suficiente.

Especificamente o Teorema de Takens proporciona as condições com que um sistema dinâmico caótico pode ser reconstruído a partir uma sequência ou série de observações do estado do sistema. A reconstrução preserva as propriedades topológicas do sistema, que são invariantes sob mudanças nas coordenadas, mas não conserva a forma geométrica das estruturas e variedades no espaço de fases.

Considerando o espaço de estados como uma variedade v -dimensional $\mathcal{M}$, a dinâmica está dada por uma transformação suave $f : M \rightarrow M$. Supondo que a dinâmica f possui um atrator B com *dimensão box-counting* d_B e usando as ideias do Teorema de Imersão de Whitney, B pode ser construído dentro do espaço Euclidiano k -dimensional com : $k > d_B$; ou seja, existe um difeomorfismo φ de mapas B dentro de $\mathbb{R}^k$, tal que todo o derivado de φ cobre todo o espaço. O Teorema de Takens ou Teorema de atraso usa uma função de observação para construir a função de imersão. Uma função de observação α tem que ser duas vezes diferenciável e associar

um número real a qualquer ponto do atrator B . Também, o derivado da função deve ser completo, e não apresentar simetrias especiais dentro dos seus componentes. O Teorema de atraso expressa que a função $\theta_T(x) = (\alpha(x), \alpha(f(x)), \dots, \alpha(f^{k-1}(x)))$ é uma imersão ou incorporação de um atrator estranho.[149]

3.2.1 Parâmetros de imersão

Existe uma ampla bibliografia relacionada à escolha adequada dos parâmetros de imersão m e τ para obter uma reconstrução satisfatória do espaço. Particularmente, neste trabalho são usados os critérios de função de autocorrelação e informação mútua para a escolha do tempo de atraso τ , e o critério de falsos vizinhos para a determinação da dimensão d do espaço imerso.

3.2.1.1 Função de autocorrelação

A autocorrelação é uma medida de correlação linear que guarda uma resposta ou comportamento consigo mesmo. Representa, portanto, a similitude entre as observações como uma função de tempo que transcorre entre cada observação. Normalmente é usada como uma ferramenta matemática para a busca de padrões de repetição e pode ser definida como:

$$C(\tau) = \frac{1}{N - \tau} \frac{\sum_i (x_i - \bar{x})(x_{i+\tau} - \bar{x})}{\sigma^2(x)} \quad (3.48)$$

em que τ é o tempo de atraso, N é o número total de dados na série temporal, $\bar{x}$ é a media dos dados, e σ é o desvio padrão. A função de autocorrelação encontra-se limitada entre os valores -1 e 1 , sendo eles indicativos de correlação perfeita (seja positiva ou negativa). 0 indica a ausência de correlação entre as medidas. Um bom tempo de atraso τ é aquele no qual se apresente correlação aproximadamente nula. Geralmente observa-se que pequenos tempos de atraso levam a elementos vetoriais fortemente correlacionados, enquanto que atrasos grandes levam a dados não correlacionados os quais podem estar aleatoriamente distribuídos no espaço imerso [149].

3.2.1.2 Informação mútua

O tempo de atraso da função de informação mútua foi sugerido como uma ferramenta para estabelecer o atraso adequado para a reconstrução de atratores no espaço de estados. FRASER e SWINNEY(1986) estudaram o método da informação mútua

para a reconstrução do espaço caótico de vários sistemas dinâmicos contínuos e desenvolveram um algoritmo para determinar o tempo de atraso da função baseados nas entropias do sistema. Concluíram que o método da informação mútua permite não só quantificar a coerência do espaço mas também quantificar o caos. Também validaram o *critério de Shaw*, em que o primeiro mínimo da função de informação mútua proporciona o melhor critério para a escolha do tempo de atraso τ .

Na Teoria da Informação, a informação mútua de duas variáveis aleatórias é a quantidade de dependência mútua entre as duas variáveis (a informação mútua se mede em bits quando a escala do logaritmo é 2) e se expressa formalmente para as variáveis X e Y como:

$$I(X, Y) = \int_Y \int_X p(x, y) \log \frac{p(x, y)}{p(x)p(y)} dx dy \quad (3.49)$$

em que $p(x, y)$ é a função de densidade de probabilidade conjunta de X e Y , $p(x)$ e $p(y)$ correspondem às funções de distribuição de probabilidade de X e Y respectivamente. Observe-se que a informação mútua é igual a zero só se X e Y são variáveis independentes, já que $p(x, y)$ seria igual a $p(x)p(y)$. A informação mútua nunca é negativa, mas é simétrica $I(X, Y) = I(Y, X)$.

FRASER(1989) mostraram a relação entre a informação mútua e a entropia informática:

$$I(X, Y) = H(X) - H(X|Y) \quad (3.50)$$

em que $H(X|Y)$ é a entropia condicional das variáveis X e Y . Note-se que informação mútua $I(X, Y)$ é a redução da incerteza de X por conta do conhecimento ou informação de Y . A informação de uma variável consigo mesma é a entropia daquela variável.

3.2.1.3 Falsos vizinhos

O método para determinar a dimensão de imersão mínima m foi proposto por [153], supondo que existe uma dimensão mínima de imersão m_0 para uma determinada série temporal $\{s_i\}$. Isso significa que o atrator reconstruído no espaço imerso m_0 -dimensional é imagem um para um do atrator no espaço original. Assim, os vizinhos de um determinado ponto são mapeados no espaço imerso, e dado que é admitido que a dinâmica é suave, as vizinhanças dos pontos em um espaço são mapeadas nas vizinhanças de novo (a forma e o diâmetro das vizinhanças mudam conforme os ex-

poentes de Lyapunov). Supondo que se deseja incorporar um espaço m -dimensional dentro de um espaço m_0 -dimensional, tal que $m < m_0$, a projeção já não conservaria as propriedades topológicas, Os pontos são projetados em vizinhanças de outros pontos aos quais eles não pertenceriam em dimensões mais altas. Esses pontos são chamados de falsos vizinhos. Se a dinâmica é aplicada, os falsos vizinhos não são mapeados na imagem da vizinhança [149].

O ideia do algoritmo basicamente se resume a seguir: para cada ponto $\vec{s}_i$, procura-se um vizinho próximo $\vec{s}_j$ no espaço m -dimensional. Posteriormente, calcula-se a distância $\|\vec{s}_i - \vec{s}_j\|$, iterando ambos os pontos e calculando:

$$R_i = \frac{|s_{i+1} - s_{j+1}|}{\|\vec{s}_i - \vec{s}_j\|} \quad (3.51)$$

Se R_i excede uma tolerância definida R_{tol} , esse ponto é marcado como um ponto que possui falsos vizinhos. O critério sugere que existe uma dimensão suficiente do espaço imerso se a fração de falsos vizinhos é zero ou suficientemente pequena, tal que $R_i > R_{tol}$.

3.2.1.4 Componentes Principais

Normalmente, séries temporais de dados com alta frequência de amostragem contêm alta redundância por causa da alta correlações lineares entre as medidas. Nesse contexto, a análise de componentes principais (PCA) constitui uma opção para reduzir dados multivariados em uns poucos modos ou conjuntos principais.

O PCA é um procedimento matemático que usa uma transformação ortogonal para converter um conjunto de observações de variáveis possivelmente correlacionadas em um novo conjunto de variáveis independentes não correlacionadas linearmente, considerando que todos os conjuntos de vetores de atraso existem no espaço imerso $\mathbb{R}^m$, formando uma nuvem irregular [149]. Nesse espaço existem direções ao longo das quais a nuvem não se expande substancialmente e o PCA conduz ao cálculo de uma série de sub-espacos unidimensionais ordenados, de acordo com a relevância dos seus dados. A ideia é introduzir um novo conjunto de vetores de base ortonormal no espaço imerso, tal que as projeções em um número dado de direções conserve a máxima fração da variedade dos vetores originais. As direções principais desejadas podem ser obtidas como vetores característicos da matriz simétrica de covariância dos maiores valores característicos [113]. A matriz de covariâncias ($m \times m$) pode ser obtida na forma [119]:

$$C_{ij} = \langle (s)_i, (s)_j \rangle = \frac{1}{N-m+1} \sum_{n=1}^{N-m+1} s_{n-m+i} s_{n-m+j} \quad (3.52)$$

em que C_{ij} é uma matriz simétrica real; ou seja, os valores característicos da matriz são reais e os vetores característicos são ortogonais. Os valores característicos c_i são o quadrado do comprimento dos semieixos do hiper-elipsoide no qual se encaixa a nuvem de pontos. O vetor característico está alinhado à direção dos eixos [149].

3.2.1.5 Mapas ou secções de Poincaré

Mapeamentos de Poincaré também podem ser construídos a partir de uma série temporal. A secção de Poincaré guarda as intersecções das trajetórias no espaço imerso. A determinação da superfície ótima de Poincaré é determinada de um modo aproximado e simples em relação ao apresentado na Seção 3.1.4. A superfície pode ser definida pela derivada temporal da série temporal igualada a zero, que indicaria a coleta de todos os pontos de máximos e mínimos da série temporal, pelo que se poderia construir um mapa de Poincaré representativo com esse pontos. Lembrando que os intervalos de tempo entre intersecções constituem uma medida observável do espaço de estados. Para séries temporais com alta frequência de mínimos e máximos, recorre-se ao estudo dos intervalos de tempo entre picos, de modo que se esses intervalos de tempo sejam construídos de uma forma que gerem os intervalos de tempo de uma secção de Poincaré adequados para refletir a estrutura determinística do processo (se existir).

Consequentemente, no espaço reconstruído a partir dos vetores $(s(t), \dot{s}(t), \ddot{s}(t), \dots)$ as intersecções com a superfície $\dot{s}_t = 0$ estão precisamente dadas a partir dos pontos de máximos e mínimos. Estes pontos podem ser interpretados como uma função de medição especial que se projeta sobre o primeiro componente de um vetor aplicado aos vetores de estado dentro da superfície. A afirmação anterior é possível pelo fato de que o tempo derivado da série temporal pode ser também uma coordenada no espaço de fases reconstruído [149].

3.2.1.6 Mapas de recorrência

Dado um sistema dinâmico determinístico que se encontra em um espaço com uma dimensão de imersão suficiente, define-se uma recorrência como o retorno de uma trajetória do espaço de estados a uma vizinhança em um ponto no qual a trajetória já tinha visitado previamente. Tais recorrências existem para todo tipo de comportamentos dinâmicos que não são transientes. Um ponto fixo é trivialmente

recorrente durante a dinâmica. Um ciclo limite apresenta uma única órbita que é recorrente por cada revolução que realiza; ou seja, cada ponto da órbita retorna para si mesmo depois de uma revolução. Um sistema caótico retorna arbitrariamente a uma pequena vizinhança de alguns dos pontos. Em um sistema transiente, a trajetória nunca retorna a um estado prévio. Daí que as condições iniciais de um sistema dinâmico estão fora do conjunto invariante [149].

Um método para a visualização das recorrências e identificação qualitativa do comportamento são os mapas de recorrência, que podem ser calculados a partir da matriz simétrica:

$$M_{ij} = \Theta(\epsilon - |s_i - s_j|) \quad (3.53)$$

em que Θ é uma função degrau ou Heaviside, ϵ é a tolerância a ser escolhida e s_j é um vetor de atraso de alguma dimensão de imersão. Basicamente, se a trajetória no espaço de fases reconstruído retorna em um tempo i a uma vizinhança de raio ϵ (associada a um ponto qualquer da órbita) em que esteve em um tempo j , a matriz $M_{ij} = 1$; de outra forma (se a trajetória não é recorrente a essa vizinhança) $M_{ij} = 0$, de tal forma que é possível representar um mapa atribuindo, segundo seu valor, pontos pretos ou brancos em todo o plano de índices (i vs j). A rotina de cálculo varre a série temporal completa e marca para cada par de índices um ponto preto quando o par correspondente do vetor de atraso está a uma distância $< \epsilon$, de tal forma que os pontos pretos num mapa representam a recorrência de uma determinada órbita. No caso ergódico, os pontos devem cobrir uniformemente o plano, enquanto que em uma situação de não-estacionariedade, o comportamento se expressa por a concentração de pontos ao longo da diagonal [81].

Em um sistema dinâmico espera-se que dois pontos próximos no espaço tenham imagens também próximas entre elas (embora esta proximidade dependa da instabilidade do sistema), de tal forma que é esperado que no diagrama de recorrência os pontos pretos apareçam em segmentos curtos de linhas que são paralelas à diagonal. No caso que sejam encontrados pontos isolados no diagrama, o mapa pode ser interpretado como uma recorrência associada ao ruído dentro dos dados a uma dimensão de imersão insuficiente. Por outro lado, se existem pontos isolados, pode-se dizer que o caráter determinístico do sistema está ausente ou é muito fraco. Normalmente o número de linhas no mapa de recorrência aumenta com o aumento da dimensão de imersão, ao tempo que os pontos isolados no mapa tendem a desaparecer.

Uma abordagem quantitativa das matrizes de recorrências é desenvolvida pela

RQA (*Recurrence quantitative anaysis*). A RQA foi desenvolvida por ZBILUT e WEBBER(1992, ZBILUT e WEBBER JR(1992)). Medidas que se baseiam em estruturas diagonais são capazes de encontrar transições estacionariedade - caos [270], enquanto medidas baseadas em estruturas verticais (horizontais) são capazes de encontrar transições caos-caos (fase laminar, [184]) .

Essas medidas podem ser calculadas em janelas ao longo da diagonal principal. Isso nos permite estudar a dependência no tempo e pode ser usado para a detecção de transições [270]. Outra possibilidade é definir essas medidas para cada diagonal paralela à diagonal principal separadamente [183]. Essa abordagem permite o estudo de atrasos temporais, órbitas periódicas instáveis [103] e aplicação de mapas de recorrência cruzada na avaliação de semelhanças entre processos [183]. Na Tabela 3.1 são apresentadas algumas medidas de quantificação de recorrência.

A taxa de recorrência é a razão de todos os estados recorrentes (pontos de recorrência) para todos os estados possíveis e é a probabilidade de recorrência de um estado especial. O comportamento estocástico causa diagonais muito curtas, enquanto o comportamento determinístico causa diagonais mais longas. Portanto, a razão de pontos de recorrência que formam estruturas diagonais para todos os pontos de recorrência é uma medida para o determinismo no sistema. Estruturas diagonais mostram o intervalo em que uma parte da trajetória é bastante próxima a outra parte da trajetória em um tempo diferente. O comprimento diagonal é o tempo durante o qual eles estarão próximos um do outro e podem ser interpretados como o tempo médio de previsão. O inverso desta medida está correlacionado com o expoente de Lyapunov [81]. A entropia representa a entropia de Shannon do histograma dos comprimentos dos segmentos de linha e reflete a complexidade da estrutura determinística no sistema. Os sistemas estacionários fornecerão parcelas de recorrência homogêneas, enquanto os sistemas não estacionários causam mudanças na distribuição dos pontos de recorrência. Por exemplo, um desvio simples causa um aumento na área de recorrência da diagonal principal para as bordas. A tendência do valor mede este efeito por meio do cálculo diagonal da densidade de recorrência diagonal e sua relação linear com a distância temporal dessas diagonais à diagonal principal.

O **mapa de recorrência cruzada** compara o comportamento dinâmico de duas séries temporais, que estão no mesmo espaço imerso. Seja uma primeira trajetória $\vec{x}_i(i = 1, \dots, N_x)$ e uma segunda trajetória $\vec{y}_j(i = 1, \dots, N_y)$,

$$CR_{ij} = \Theta(\varepsilon_i - \|\vec{x}_i - \vec{y}_j\|), \quad \vec{x}_i \vec{y}_j \in \mathbb{R}^m \quad (3.54)$$

Medida	Definição	Equação
RR (Taxa de recorrência)	Porcentagem de pontos recorrentes em um mapa de recorrência. Corresponde à soma de correlação	$RR = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N R_{ij}$
DET (Determinismo)	Porcentagem de pontos recorrentes que formam linhas diagonais, onde $P(l)$ é o histograma dos comprimentos l das linhas diagonais	$DET = \frac{\sum_{l=l_{min}}^N lP(l)}{\sum_{l=1}^N lP(l)}$
LAM (Laminaridade)	Porcentagem de pontos recorrentes que formam linhas verticais, onde $P(v)$ é o histograma dos comprimentos l das linhas verticais	$LAM = \frac{\sum_{v=v_{min}}^N vP(v)}{\sum_{v=1}^N vP(v)}$
AVE (Média de comprimento diagonal)	Média dos comprimentos das linhas diagonais	$AVE = \frac{\sum_{l=1}^N lP(l)}{\sum_{l=1}^N P(l)}$
TT (Tempo de aprisionamento)	Média dos comprimentos das linhas verticais	$TT = \frac{\sum_{v=1}^N vP(v)}{\sum_{v=1}^N P(v)}$
ENTR (Entropia)	Entropia de Shanon das diagonais	$ENTR = - \sum_{l=l_{min}}^N p(l) \log p(l)$

Tabela 3.1: Medidas para quantificação de recorrências

Outra abordagem multivariada para gráficos de recorrência é chamado de **mapa de recorrência conjunta**, e é simplesmente o produto de dois (ou mais) gráficos de recorrência da série de dados.

$$JR_{ij} = \Theta(\varepsilon_x - \|\vec{x}_i - \vec{x}_j\|) \Theta(\varepsilon_y - \|\vec{y}_i - \vec{y}_j\|), \quad \vec{x}_i \in \mathbb{R}^m, \vec{y}_i \in \mathbb{R}^n, i, j = 1, \dots, N \quad (3.55)$$

3.2.1.7 Expoentes de Lyapunov a partir da série temporal

O algoritmo de cálculo dos expoentes máximos ou representativos de Lyapunov foi proposto por [224] e [148], sendo obtida uma média do crescimento exponencial das distâncias.

Dado um ponto s_{n0} da série temporal, são selecionados todos os pontos vizinhos com distancia menor que ϵ . Posteriormente, é calculada a média das distâncias de todos os vizinhos à trajetória correspondente como uma função no tempo. O

logaritmo da média da distância ao tempo Δn contém todas as flutuações determinísticas através das projeções e a dinâmica. Repetindo o anterior procedimento para diferentes valores de n_0 , as flutuações das velocidades efetivas de expansão podem ser medidas. Então pode-se calcular:

$$S_{(\Delta n)} = \frac{1}{N} \sum_{n_0=1}^N \ln\left(\frac{1}{\|\vartheta(s_{n_0})\|} \sum_{s_n \in \vartheta(s_{n_0})} |s_{n_0+\Delta n} - s_{n+\Delta n}|\right) \quad (3.56)$$

em que $S_{(\Delta n)}$ é o fator de estreitamento, s_{n_0} é o vetor de imersão, $\vartheta(s_{n_0})$ é a vizinhança de s_{n_0} de diâmetro ϵ . Assim, $S_{(\Delta n)}$ é calculado como uma função da dimensão mínima de imersão e o raio de vizinhança ϵ . Finalmente, o expoente representativo de Lyapunov é obtido como a inclinação da reta do gráfico do fator de estreitamento contra tempo.

O procedimento para o cálculo do espectro de Lyapunov usando as séries temporais é naturalmente mais complexo que o cálculo do expoente representativo de Lyapunov. Uma explicação e detalhes do algoritmo podem ser encontrados por [235] e [81].

3.2.1.8 Dimensão de correlação

Existe uma ampla variedade de métodos para determinar a auto-semelhança de sistemas dinâmicos. Do ponto de vista matemático, a *dimensão de Hausdorff* é o conceito mais natural para caracterizar esse tipo de geometrias. Particularmente, a dimensão de correlação proposta por [108] é a ferramenta mais útil para a caracterização desses sistemas.

Basicamente os quantificadores de dimensão de correlação se baseiam na seguinte ideia: seja uma cobertura de uma parte do conjunto invariante por uma esfera de raio ϵ com peso $p(\epsilon)$ tal que $p(\epsilon) = \epsilon^D$, onde D depende da forma em particular com que é definido o peso da função. Define-se a soma de correlação como o conjunto de dados x_n em algum espaço vetorial de uma fração de todos os pares possíveis de pontos que se encontram a uma distância menor ou igual que ϵ [149].

$$C(\epsilon) = \frac{2}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \Theta(\epsilon - \|x_i - x_j\|) \quad (3.57)$$

em que Θ é uma função Heaviside:

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases} \quad (3.58)$$

A soma só considera os pares x_i e x_j que estão a uma distância menor do que ϵ . No limite, quando $N \rightarrow \infty$ e para valores pequenos de ϵ , é esperado que C se comporte como uma lei de potências $C(\epsilon) \approx \epsilon^D$, pelo que a dimensão de correlação está determinada por:

$$d(N, \epsilon) = \frac{\partial \ln C(\epsilon, N)}{\partial \ln \epsilon} \quad (3.59)$$

$$D = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} d(N, \epsilon) \quad (3.60)$$

Como observação geral, é importante notar que a dimensão de correlação é uma ferramenta para quantificar a auto-semelhança, quando se sabe que essa propriedade existe para o sistema dinâmico em particular.

3.2.1.9 Entropias

Conforme propõe a Teoria da Informação, a entropia fornece um valor sobre a quantidade de informação necessária para localizar um sistema em um determinado estado. Por analogia com o conceito termodinâmico, a entropia pode ser definida como a quantidade de informação que o sistema perde ao longo do tempo [119].

Existem vários tipos de entropia de informação, destacando-se a *entropia generalizada* ou *entropia de Renyi*, que caracteriza a informação que é necessária para especificar x quando é conhecida a densidade de probabilidade $\frac{d\mu}{dx}$. A definição é dada quando o espaço ao qual pertence x é coberto com caixas disjuntas $\wp_i$ de comprimento $< \epsilon$. Tomando $p_j = \int_{\wp_j} d\mu(x)$ como a fração média contida na j -ésima caixa, então define-se a entropia de Renyi como:

$$\tilde{H}_q(\wp_\epsilon) = \frac{1}{1-q} \ln \sum_j p_j^q \quad (3.61)$$

em que q representa a ordem da entropia de Renyi para a partição $\wp_\epsilon$. No caso em que $q = 1$, é obtida a *entropia de Shannon* [149]:

$$\tilde{H}_1(\wp_\epsilon) = - \sum_j p_j \ln p_j \quad (3.62)$$

Outra entropia importante no estudos dos sistemas dinâmicos é a entropia de Kolmogorov-Sinai, que é uma entropia de ordem 1, mas que, diferentemente da entropia de Shanon, define uma distribuição ponderada dos elementos de partição que cobrem o espaço. O algoritmo de cálculo e definição matemática dessa entropia são apresentados por [149]. Destaca-se a relação direta encontrada entre os expoentes de Lyapunov e a entropia de Kolmogorov-Sinai, que pode ser deduzida a partir da Teoria Ergódica e conhecida como a identidade de *Pesin* [149]:

$$h_{ks} = \sum_{i:\lambda_i>0} \lambda_i \quad (3.63)$$

sendo a entropia de Kolmogorov-Sinai definida como a somatória de todos os expoentes de Lyapunov positivos.

3.2.2 Decomposição em modo dinâmico

A decomposição em modo dinâmico (DMD)[272] é uma técnica de redução de dimensionalidade que incorpora a suposição de que as medições são séries temporais geradas por um sistema dinâmico linear no tempo. A técnica foi originalmente introduzida na comunidade de dinâmica de fluidos para decompor grandes conjuntos de dados experimentais ou numéricos em estruturas coerentes espaço-temporais [239].

O método DMD aproxima os modos do chamado operador Koopman [225]. O operador de Koopman é um operador linear de dimensão infinita que representa a ação de um sistema dinâmico não linear no espaço de Hilbert de funções de medida do estado [190]. Essa conexão entre DMD e o operador Koopman foi reforçada e justificada em uma estrutura de regressão dinâmica [51].

No DMD considerá-se uma matriz de dados $X \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gerada por um sistema dinâmico desconhecido de tal forma que as colunas de X , $x(t_k)$ são fotografamas no tempo relacionados ao mapa $x(t_{k+1}) = F(x(t_k))$. A função F pode ter natureza não linear, porém o objetivo do DMD é determinar o melhor operador linear $\mathbf{A} : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^n$ tal que $x(t_{k+1}) \approx \mathbf{A}(x(t_k))$.

Sejam duas matrizes deslocadas no tempo:

$$X = \begin{bmatrix} | & | & | & | \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_{m-1} \\ | & | & | & | \end{bmatrix}; X' = \begin{bmatrix} | & | & | & | \\ x_2 & x_3 & \cdots & x_m \\ | & | & | & | \end{bmatrix} \quad (3.64)$$

Essas matrizes podem ser relacionadas por um operador linear de ajuste A dado por:

$$X' = \mathbf{A}X \implies \mathbf{A} \approx X'X^\dagger \quad (3.65)$$

onde $X^\dagger$ é a pseudo-inversa obtida pela decomposição de valores característicos SVD.

O algoritmo DMD pode ser resumido nas seguintes etapas:

1. Decompor X via método SVD:

$$X = U \sum V^* \quad (3.66)$$

Aqui, $*$ denota transposição conjugada complexa. Muitas vezes, apenas as primeiras r colunas de U e V são necessárias para uma boa aproximação, $X \approx \widetilde{U} \widetilde{\sum} \widetilde{V}$ onde $\widetilde{}$ representa a operação de truncado no rank r .

2. Obter a matriz $\widetilde{\mathbf{A}}$ $r \times r$ projetando $\mathbf{A}$ em $\widetilde{U}$.

$$\widetilde{\mathbf{A}} = \widetilde{U}^* \mathbf{A} \widetilde{U} = \widetilde{U}^* X' \widetilde{V} \widetilde{\sum}^{-1} \quad (3.67)$$

3. Calcular a decomposição em valores característicos de $\widetilde{\mathbf{A}}$:

$$\widetilde{\mathbf{A}}W = W\Lambda \quad (3.68)$$

onde os valores característicos de Λ correspondem aos valores característicos da matriz completa $\widetilde{\mathbf{A}}$

4. Reconstruir os vetores característicos de dimensão completa da matriz $\mathbf{A}$, das as colunas de Φ :

$$\Phi = X' \widetilde{V} \widetilde{\sum}^{-1} W \quad (3.69)$$

O Teorema de Imersão de Takens [264] fornece uma estrutura rigorosa para analisar o conteúdo de informação das medidas de um sistema dinâmico não linear. É possível enriquecer uma medida, $x(t)$, com cópias deslocadas no tempo da mesma, $x(t - \tau)$, que são conhecidas como coordenadas de atraso. Sob certas condições, o

atrator de um sistema dinâmico em coordenadas de atraso é difeomorfo ao atrator original no espaço de estados original. Reconstruções semelhantes do espaço podem ser construídas usando derivadas da medição.

A seguinte matriz de Hankel $\mathbf{H}$ é formada a partir de uma série temporal de uma medida $x(t)$:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} x(t_1) & x(t_2) & \cdots & x(t_p) \\ x(t_2) & x(t_3) & \cdots & x(t_{p+1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x(t_q) & x(t_{q+1}) & \cdots & x(t_m) \end{bmatrix} \quad (3.70)$$

Cada coluna pode ser pensada como um espaço de estados aumentado que inclui uma trajetória m-dimensional curta no tempo. Nossa matriz de dados $\mathbf{H}$ é então essa trajetória q-dimensional medida em p instantâneos no tempo.

A partir da redução de dimensionalidade e as imersões de atraso de tempo, pode ser construída uma alternativa baseada na matriz de Hankel para o algoritmo Koopman (HAVOK) [121] na qual são construídos modelos de baixa dimensão de sistemas dinâmicos [41]. Especificamente, o HAVOK aprende as coordenadas de medição efetivas do sistema e estima sua dimensionalidade intrínseca. Notavelmente, os modelos HAVOK são simples, consistindo em um modelo linear e um termo forçado que pode ser usado para previsão de curto prazo.

O procedimento consiste em construir uma representação dimensional da dinâmica usando imersões de atraso de tempo, produzindo uma matriz de Hankel $\mathbf{H}$ e calcula seu SVD:

$$\mathbf{H} = \mathbf{U} \sum \mathbf{V}^T \quad (3.71)$$

Se $\mathbf{H}$ for de posto suficientemente baixo (com posto r), então é apenas o SVD reduzido

$$\widetilde{\mathbf{H}} = \widetilde{\mathbf{U}} \widetilde{\sum} \widetilde{\mathbf{V}}^T \quad (3.72)$$

onde $\widetilde{\mathbf{U}}$ e $\widetilde{\mathbf{V}}$ são matrizes ortogonais enquanto $\widetilde{\sum}$ é uma matriz diagonal. Rearranjando os termos, $\widetilde{\mathbf{V}}^T = \widetilde{\sum}^{-1} \widetilde{\mathbf{U}}^T \widetilde{\mathbf{H}}$, sendo $\widetilde{\mathbf{V}}^T = [v_1, v_2 \cdots v_n]$ uma representação de baixa dimensão da trajetória de alta dimensão. Para sistemas quasi-periódicos, a decomposição SVD da matriz de Hankel resulta em trajetórias de componentes principais (PCT) [54], que reconstroem trajetórias dinâmicas em termos de órbi-

tas periódicas. Para descobrir a dinâmica linear, aplica-se DMD. Em particular, construímos as matrizes deslocadas no tempo,

$$V_1 = [v_1, v_2 \cdots v_{n-1}] \text{ and } V_2 = [v_2, v_3 \cdots v_n] \quad (3.73)$$

depois é calculada a aproximação linear de $\hat{\mathbf{A}}$ tal que $V_2 = \hat{\mathbf{A}}V_1$, onde $\hat{\mathbf{A}} = V_2V_1^\dagger$, levando ao modelo:

$$\dot{v}(t) = \hat{\mathbf{A}}v(t) \quad (3.74)$$

Alternativamente pode ser proposto um modelo linear mais um termo de forçamento não linear na última componente de v [121].

3.3 Técnicas de seleção de variáveis

Metodologias de seleção de variáveis constituem uma importante abordagem para reduzir a dimensionalidade em problemas de detecção e diagnóstico de falhas. Nos últimos anos tem se tornado mais relevantes devido ao recente aumento significativo de métodos baseados em dados nesta área de pesquisa [218]. Os algoritmos de seleção de variáveis normalmente tentam identificar o subconjunto de *features* ou variáveis medidas que levam ao melhor desempenho analítico nos procedimentos de detecção e diagnóstico de falhas, sendo geralmente dividido em três categorias: métodos baseados em filtro, métodos *wrapper* e métodos embutidos [33, 48].

Os métodos baseados em filtros não dependem do algoritmo de aprendizado empregado e são frequentemente aplicados como uma etapa de pré-processamento onde as variáveis analisadas são classificadas por relevância de acordo com as propriedades intrínsecas dos dados. Essa abordagem pontua características de acordo com um determinado critério estatístico, quase sempre fazendo uso das estatísticas χ^2 , T , correlação de Pearson, correlação de Spearman, critérios de Fisher e métricas derivadas da Teoria da Informação. Alguns desses critérios foram revisados por [101].

Os métodos *wrapper* exploram o espaço de subconjuntos de variáveis e avaliam o desempenho dos modelos construídos com os subconjuntos, conseqüentemente dependendo do algoritmo de aprendizado. Esses métodos geralmente fazem uso de uma das duas abordagens a seguir: um método sequencial, quando a seleção começa com um conjunto vazio (conjunto completo), e adiciona variáveis (remove variáveis) até atingir um determinado desempenho de regressão [219]; e o método heurístico,

quando os subconjuntos de variáveis são gerados com auxílio de um algoritmo estocástico [11].

Métodos embutidos combinam o modelo de aprendizado com um problema de otimização, permitindo que a seleção de variáveis e a construção do modelo sejam realizadas simultaneamente. Diferentemente dos métodos *wrapper*, os métodos embutidos incorporam o conhecimento sobre uma estrutura específica da função de regressão no mecanismo de seleção de variáveis. Duas famílias distintas de métodos embutidos podem ser definidas: os métodos de regularização [267, 302] e os métodos baseados em árvore [261].

Do ponto de vista do custo computacional, os métodos baseados em filtro são mais atraentes devido à sua simplicidade inerente, uma vez que a classificação das variáveis poder ser estabelecida por meio de cálculos simples de pontuação para cada variável. No entanto, o subconjunto de variáveis encontrado por esses métodos pode não corresponder ao subconjunto que, em conjunto, maximiza o desempenho do classificador-regressor, uma vez que a relevância da variável não é afetada pela estrutura do modelo nem pelas demais variáveis do processo [160].

Por outro lado, os métodos *wrapper* são mais computacionalmente intensivos, mas prevalecem sobre os métodos baseados em filtro em termos de precisão de previsão, pois levam em consideração o desempenho do classificador-regressor durante a etapa de seleção de variáveis [33, 101]. Uma possível desvantagem de usar métodos baseados em *wrapper* é que os classificadores-regressores são propensos a apresentar overfitting [159].

Finalmente, os métodos embutidos tentam compensar as desvantagens discutidas anteriormente, incorporando o procedimento de seleção de variáveis como parte do processo de treinamento. No entanto, a aplicação desses métodos pode ser muito complexa e limitada a alguns modelos de aprendizagem específicos [48].

Para todas as estratégias descritas anteriormente, um aspecto importante no procedimento de seleção de variáveis é o critério que define a relevância de uma única variável ou subconjunto de variáveis. Vários critérios foram investigados e podem ser agrupados em uma ou mais das seguintes categorias: distância, informação, dependência, consistência e erro do classificador [62].

3.4 Técnicas não paramétricas

3.4.1 Estimativa de densidade kernel

Kernel Density Estimation (KDE) é uma das abordagens mais conhecidas para estimar a função de densidade de probabilidade subjacente de um conjunto de dados. O KDE é um estimador de densidade não paramétrico que não requer qualquer suposição de que a função de densidade subjacente seja de uma família paramétrica. O KDE irá aprender a forma da densidade a partir dos dados automaticamente. Esta flexibilidade inerente da sua natureza não-paramétrica torna o KDE uma abordagem muito popular para dados extraídos com uma distribuição de probabilidade complexa.

3.4.1.1 Estimativa de densidade e histogramas

Um histograma é uma forma simples de estimação não paramétrica de densidade. O espaço amostral pode ser dividido em categorias disjuntas ou bins (onde o número de bins é expresso por um número inteiro) e a densidade é aproximada pela contagem do número de pontos dos dados que caem dentro de cada bin. Seja B_l o l -ésimo bin e h o comprimento dos bins (todos os bins têm igual comprimento) e seja $\{X_i \in B_l\}$ o número de pontos que caem no correspondente bin B_l de comprimento h . O estimador da função de densidade de probabilidade é:

$$\hat{f}(x) = \frac{\{X_i \in B_l\}}{nh} = \frac{k}{nh} \quad (3.75)$$

Como exemplo, considere-se uma variável aleatória (extraída de duas distribuições normais) e 30 bins para a construção do histograma normalizado representado na Figura 3.12.

Um dos problemas com o uso de um histograma como estimador de densidade é que a escolha do tamanho e localização das caixas pode levar a representações que possuem recursos qualitativamente diferentes. Por exemplo, se olharmos para uma versão desses dados com apenas 20 pontos, a escolha de como desenhar as caixas pode levar a uma interpretação totalmente diferente dos dados. Considere o caso em que dois histogramas são construídos a partir da mesma variável aleatória mas com diferente posicionamento dos bins (Figura 3.13).

À esquerda, o histograma deixa claro que essa é uma distribuição bimodal. À direita, vemos uma distribuição unimodal com cauda longa. O problema com os

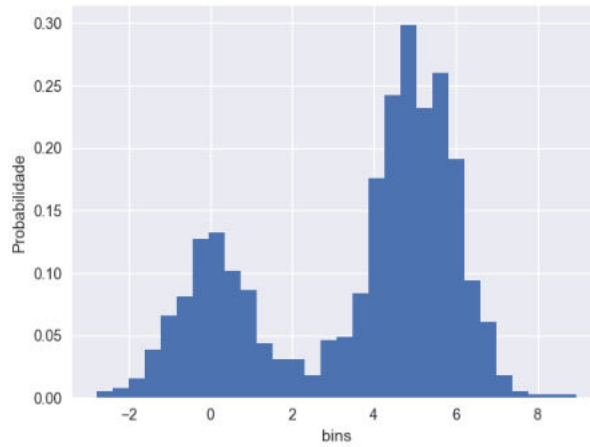


Figura 3.12: Histograma normalizado de uma variável aleatória

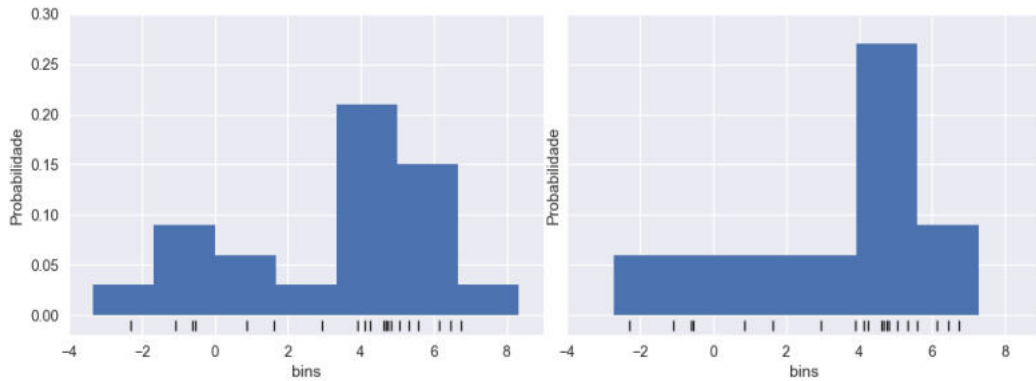


Figura 3.13: Histograma normalizado com diferentes posições de bins

dois grupos de bins deriva do fato de que a altura da pilha de blocos geralmente reflete não a densidade real de pontos próximos, mas sim coincidências de como as caixas se alinham com os pontos de dados. Esse desalinhamento entre os pontos e seus blocos é uma causa potencial dos resultados ruins do histograma vistos aqui. Finalmente a estimação da função de densidade de probabilidade via histogramas é fortemente dependente da posição inicial do primeiro bin, a natureza dos histogramas gera descontinuidades na função de densidade (relacionada ao posicionamento dos bins) e em dimensões superiores (mais de 3 variáveis aleatórias) a representação via histogramas requereria uma grande quantidade de bins.

3.4.1.2 Definição

Seja $X_1, \dots, X_n \in \mathbb{R}^d$ uma amostra independente de dados identicamente distribuídos, de uma distribuição desconhecida P com função de densidade p . KDE é formalmente definido como:

$$\hat{p}_n(x) = \frac{1}{nh^2} \sum_{i=1}^n K\left(\frac{x - X_i}{h}\right) \quad (3.76)$$

em que $K: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ é função kernel e $h > 0$ é o comprimento de banda que funciona como um parâmetro de controle do suavização do ajuste [107]. Intuitivamente, o KDE tem o efeito de suavizar cada ponto de dados em uma sub-curva suave, cuja forma é determinada pela função do kernel $K(x)$. Então, o KDE soma todos esses pontos para obter um estimador de densidade. Em regiões com muitas observações, haverá muitas sub-curvas superpostas e o KDE terá um valor alto. Por outro lado, para regiões com poucas observações, o valor da densidade resultante da soma das sub-curvas é baixo, porque apenas algumas curvas contribuem para a estimativa de densidade.

Na figura 3.14 apresenta-se um exemplo de KDE no caso unidimensional. Há seis observações indicadas por linhas pretas. As observações são suavizadas em sub-curvas (vermelhas) para serem somadas e finalmente ser obtida a forma da função de densidade (azul).

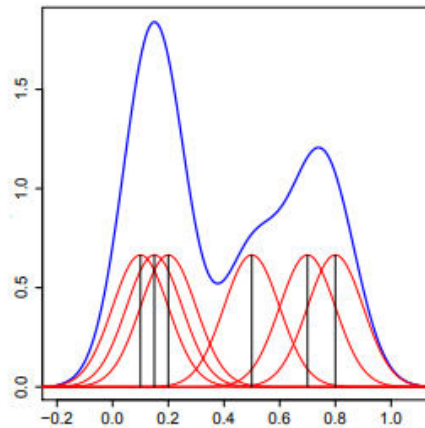


Figura 3.14: Ilustração da construção de um KDE [107].

Dessa forma, é evidente que o KDE pode ser entendido como uma soma ponderada de 'sub-curvas' de densidade centradas em cada ponto de dados X_i . A forma das sub-curvas é determinado pela escolha da função kernel (Tabela 3.2). O comprimento das sub-curvas é determinada pela largura de banda h . O bandwidth funciona como um parâmetro de suavização, controlando a relação entre o bias e a variância do resultado. Um bandwidth grande pode levar a distribuições de densidades muito suavizadas (i.e alto bias). Um bandwidth pequeno leva a distribuições de densidade não suaves (i.e. alta variância) Particularmente, é um fato bem conhecido que o kernel de Epanechnikov é o mais eficiente [145]. A eficiência é proporcional ao tamanho da amostra necessário para obter o mesmo erro de estimativa. Também é bem conhecido que as diferenças de eficiência entre vários tipos de kernel não são

muito grandes. No entanto, o kernel normal gera as curvas de densidade mais suaves e esta é a razão pela qual esse tipo de kernel é mais usado na prática.

3.4.1.3 Seleção do parâmetro h

A precisão do KDE depende muito fortemente do valor da largura de banda h . No caso univariado, a largura de banda é um escalar que controla a quantidade de suavização. No caso multivariado, a largura de banda é uma matriz e controla a quantidade e a orientação da suavização. Uma revisão abrangente e comparação de seletores de largura de banda totalmente automáticos pode ser encontrada em [120] (apenas o caso univariado é descrito). Os três principais tipos de seletores de largura de banda são os seguintes:

- Heurísticas ou métodos que usam fórmulas simples facilmente calculáveis, desenvolvidas para cobrir um determinado intervalo de situações, mas não garante que a largura de banda ótima seja obtida ([251],[244]);
- Métodos baseados na noção de validação cruzada que são baseados em um fundamento matemático mais preciso [35]. Eles exigem muito mais poder computacional, fornecendo, no entanto, as larguras de banda mais precisas para uma classe mais ampla de funções de densidade;
- Métodos baseados em conectar estimativas de algumas quantidades desconhecidas que aparecem em fórmulas para a largura de banda assintoticamente ideal. Eles são frequentemente chamados de plugin(PI), [205].

Uma das aplicações do KDE é referente à análise de discriminantes, que consiste em uma técnica supervisionada para prever (classificar) uma nova observação dentro de M classes. A implementação mais comum usa o Teorema de Bayes, atribuindo uma nova amostra ao conjunto com maior probabilidade a posteriori [80]. Outra metodologia que surge a partir da análise discriminante é o discriminante por clustering, resultando em uma técnica não supervisionada. Finalmente, a regressão não paramétrica de kernel [112] constitui uma metodologia importante para o complemento de processos de regressão linear já bem estabelecidos.

3.5 Causalidade

Na caracterização de sistemas dinâmicos, o conceito de informação mútua é amplamente usado para quantificar a sobreposição do conteúdo de informação de dois (sub)

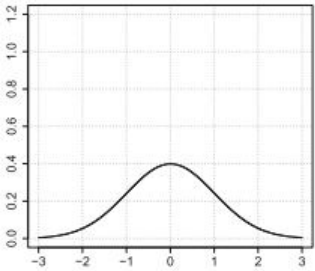
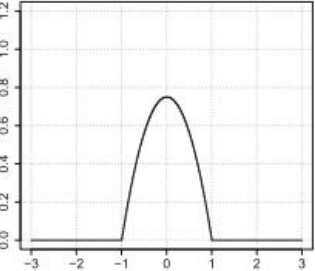
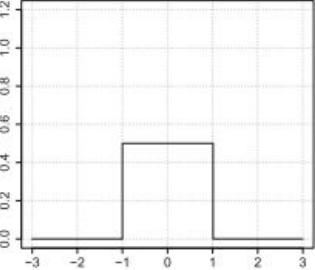
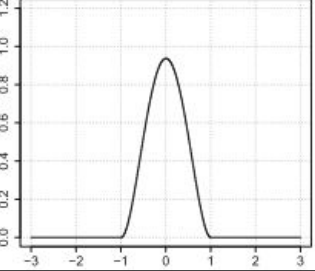
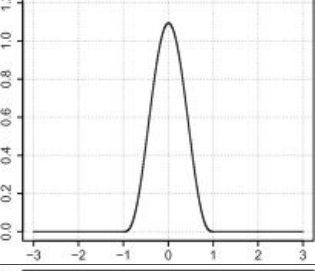
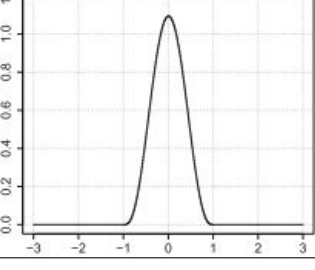
Kernel	Equação	Forma
Normal	$(2\pi)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2x^2}\right)$	
Epanechnikov	$\left(\frac{3}{4}\right)(1 - x^2)\mathbb{I}_{\{ x <1\}}$	
Uniforme	$(1/2)\mathbb{I}_{\{ x <1\}}$	
Biponderada	$\left(\frac{15}{16}\right)(1 - x^2)\mathbb{I}_{\{ x <1\}}$	
Triponderada	$\left(\frac{35}{32}\right)(1 - x^2)^3\mathbb{I}_{\{ x <1\}}$	
Triangular	$(1 - x)\mathbb{I}_{\{ x <1\}}$	

Tabela 3.2: Tipos de kenels frequentemente utilizados em KDE

sistemas. Infelizmente, informações mútuas não contêm informações direcionais do processo. A introdução de um atraso de tempo em uma das observações é uma melhoria importante, ainda que arbitrária, nesse aspecto, mas ainda não distingue explicitamente as informações que são realmente trocadas devido à resposta de um sinal de entrada comum ou a um histórico. Dessa forma, há um especial interesse no desenvolvimento de métodos para quantificar alguma noção de fluxo de informação ou transferência de informação dentro do sistema complexo. Na neurociência [42] e na pesquisa climática [71], tais interpretações têm sido frequentemente baseadas em análises de correlação cruzadas puras. Mas, no sentido de medir a transferência de informação, o método deve, em primeiro lugar, ser geral o suficiente para incluir também associações não-lineares. Isso pode ser alcançado em uma estrutura teórica da informação com medidas como informações mútuas (MI) [59]. Em segundo lugar, redes reconstruídas a partir de medidas de associação cruzada (seja de correlação cruzada ou MI) não permitem avaliar a propagação de informações ou perturbações hipotéticas em um sentido causal.

Associações causais entre subprocessos podem ser visualizadas como links em uma rede de interação complexa. Uma reconstrução causal completa de um link $X \rightarrow Y$ só pode ser alcançada sob a hipótese de que todas as outras possíveis influências em X e Y podem ser incluídas na análise. A inferência causal baseada em métodos de análise de dados, portanto, fornece apenas um primeiro passo e o termo "causal" pode então ser entendido como sendo apenas relativo ao sistema em estudo, isto é, os processos que compreendem os nós da rede [227]. Duas tarefas precisam ser abordadas para medir uma noção causal de transferência de informação de séries temporais de sistemas complexos:

- Reconstrução da rede causal
- Quantificação da transferência de informação causal

Dessa forma, a análise de causalidade aborda questões como: como a informação originada em uma série X se propaga também em caminhos indiretos através da rede de interação causal? Quão forte é e quais processos intermediários em vias causais estão contribuindo para tal mecanismo?.

Comparada à primeira tarefa (reconstrução da rede causal), a segunda tarefa é mais ambígua pela dificuldade de definir universalmente uma 'força de acoplamento causal'. Alguns trabalhos relacionam a transferência de informação com o fluxo de informação que é baseado em intervenções causais. No entanto, essas intervenções causais requerem a existência de um modelo matemático do processo no qual seja possível relacionar a força de acoplamento causal entre duas variáveis com o valor

de um determinado parâmetro do modelo. Daí, se o modelo não consegue representar eficientemente o processo, as estimações das forças de acoplamento causal não descreveriam a transferência de informação própria do sistema [227].

Se não for possível medir “como o acoplamento se manifesta na dinâmica”, os quantificadores da Teoria da Informação podem ao menos ajudar a medir “como o acoplamento causal se manifesta na troca de entropia entre os subprocessos”, capturando quase qualquer forma de associação estatística [232]. Esta abordagem visa distinguir diferentes contribuições baseadas na estrutura de independência condicional de Markov de um processo multivariado como uma abstração da dinâmica [229].

A abordagem das medidas de transferência de informação causal baseia-se no conceito fundamental de entropia de origem, também denominado taxa de entropia [227]. Considere um processo gerador X . A cada t é gerada uma realização x_t . Agora a entropia de origem de X_t mede a incerteza sobre x_t antes de sua observação se todas as observações anteriores $(x_{t-1}; x_{t-2}; \dots)$ são conhecidas [231]. Para um sistema não caótico e determinístico, a entropia origem será sempre zero, mas para um processo do mundo real sempre haverá alguma incerteza decorrente do ruído dinâmico. As referências ([83], [257]) tratam sobre decomposições de informações preditivas com base na entropia de transferência como uma generalização de teoria da informação na causalidade de Granger, o conceito adotado neste trabalho é mais semelhante à causalidade de Sims [89] que considera não apenas os efeitos causais diretos, mas indiretos.

3.5.1 Informação mútua condicional

As métricas mais importantes na teoria causal são desenvolvidas com base no conceito de informação mútua condicional, definida como:

$$I(X : Y | Z) = H(Y | Z) - H(Y | X, Z) = H(X | Z) - H(X | Y, Z) \quad (3.77)$$

$$I(X : Y | Z) = \int p(z) \int \int p(x, y | z) \log \frac{p(x, y | z)}{p(x | z) p(y | z)} dx dy dz \quad (3.78)$$

sendo a entropia de Shannon H (Seção 3.2.1.9)) uma medida da incerteza sobre os resultados de um processo, a informação mútua MI , por sua parte, é uma medida da

redução dessa incerteza se outro processo é medido e a informação mútua condicional CMI pode ser expressada como a MI entre X e Y que não está contida em uma terceira variável Z . Notá-se que a MI , a CMI é não-negativa e simétrica em seus dois primeiros argumentos $I(X, Y | Z) = I(Y, X | Z)$. Além disso, a CMI mede a distância de Kullback-Leibler entre as distribuições $p(x, y | z)$ e a distribuição para o caso independente $p(x | z)p(y | z)$ e é zero se e somente se X e Y são independentes condicionalmente de Z . Esta propriedade torna a CMI especialmente útil para medir a independência condicional conforme necessário na definição e estimativa de gráficos causais.

3.5.2 Informação de interação

O símbolo $\mathcal{I}$ é usado para representar a informação de interação, que é simetricamente definida como

$$\mathcal{I}(X; Y; Z) = I(X; Y) - I(X; Y | Z) \quad (3.79a)$$

$$= I(Y; Z) - I(Y; Z | X) \quad (3.79b)$$

$$= I(Z; X) - I(Z; X | Y) \quad (3.79c)$$

Analogamente, a informação de interação condicional é definida por:

$$\mathcal{I}(X; Y; Z | W) = I(X; Y | W) - I(X; Y | Z, W) \quad (3.80)$$

De forma contrária à CMI , a informação de interação condicional pode ser negativa.

A Figura 3.15 representa via diagrama de Venn as diferentes métricas apresentadas, sendo que no caso (d) X e Y são incondicionalmente independentes, mas condicionalmente dependentes, fazendo com que $I(X; Z | Y) \geq I(X; Z)$ e por consequência conduzindo a uma informação de interação negativa.

Os planos causais de séries temporais visualizam as propriedades de independência condicional de Markov de um processo dinâmico multivariado, isto é, como a densidade conjunta do processo multivariado $\mathbf{X}$, incluindo suas defasagens ¹. As Fi-

¹Dado um processo estacionário multidimensional notado como $\mathbf{X}$, e seus subprocessos notados como X, Y, Z, W , as variáveis aleatórias notadas como $\mathbf{X}_t, X_t, \dots$ e seus passados como $\mathbf{X}_t^{-1} = (\mathbf{X}_{t-1}, \mathbf{X}_{t-2}, \dots)$ e $X_t^{-1} = (X_{t-1}, X_{t-2}, \dots)$. Note-se que X_t^{-1} pode ser um subconjunto de $\mathbf{X}_t^{-1}$. O símbolo $\setminus$ denota a subtração de um conjunto

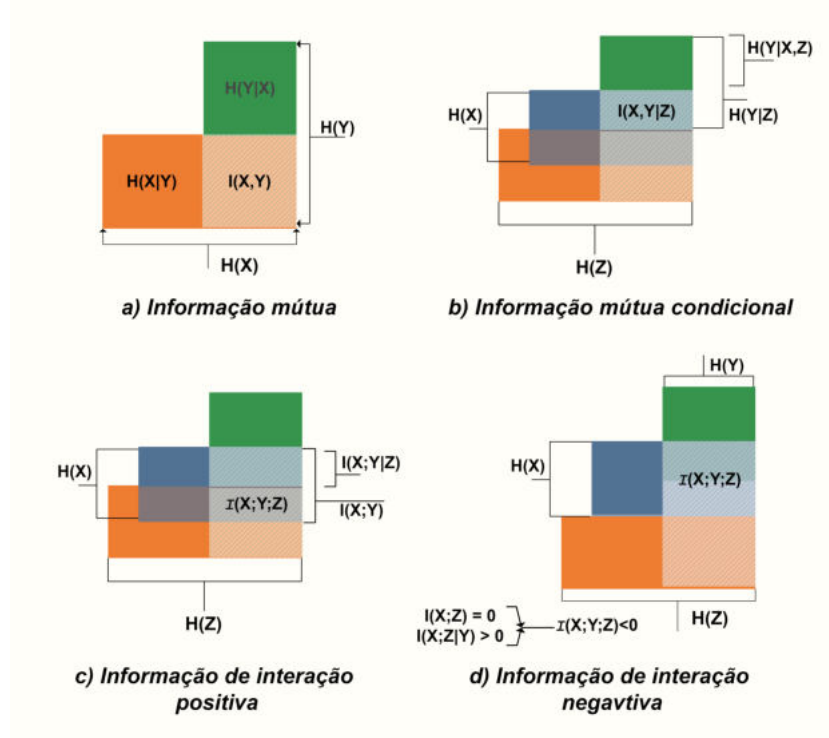


Figura 3.15: Diagramas de Venn de (a) informação mutua, (b) informação mutua condicional, (c) informação de interação positiva, (d) informação de interação negativa. No ultimo caso as entropias de X e Z não se sobrepõem [227].

Figuras 3.16a e 3.16b mostram exemplos de planos causais de séries temporais. Cada nó em um gráfico de série temporal representa um subprocesso de um processo multivariado $\mathbf{X}$ em um determinado tempo t . Links direcionados entre subprocessos (ou nós) $X_{t-\tau}$ e Y_t para $\tau > 0$ são marcados por uma seta e definidos por:

$$X_{t-\tau} \rightarrow Y_t \iff I(\mathbf{X}_{t-\tau}; Y_t \mid \mathbf{X}_t^- \setminus \{X_{t-\tau}\}) > 0 \quad (3.81)$$

com passado infinito $\mathbf{X}_t = (\mathbf{X}_{t-1}; \mathbf{X}_{t-2}; \dots)$, isto é, se eles não são independentes condicionalmente no passado de todo o processo, o que implica uma causalidade de Granger específica de atraso em relação a $\mathbf{X}$. Se $Y \neq X$ dizemos que o link $X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$ representa um acoplamento no atraso τ , enquanto para $Y = X$ ele representa uma autodependência ou um auto-link no atraso τ .

Uma vez que as ligações contemporâneas são de interesse, os links entre X_t e Y_t são definidos como:

$$X_t - Y_t \iff I(X_t; Y_t \mid \mathbf{X}_{t+1}^- \setminus \{X_t Y_t\}) > 0 \quad (3.82)$$

em que também o presente contemporâneo $\mathbf{X}_t^- \setminus \{X_t Y_t\}$ é incluído na condição. Note que a estacionariedade implica que $X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$ sempre que $X_{t'-\tau} \rightarrow Y_t$ para

qualquer t' e correspondentemente para links contemporâneos. Outra versão de links contemporâneos (marcada por linhas tracejadas) é definida, como:

$$X_t - - - Y_t \iff I(X_t; Y_t | \mathbf{X}_t^-) > 0 \quad (3.83)$$

Um problema com a Equação 3.82 é que ela pode potencialmente causar links espúrios se, por exemplo, X_t e Y_t forem independentes (também do passado), mas ambos causalmente dirigirem outro processo Z_t instantaneamente, ou seja, ao mesmo tempo t , o que poderia não ser resolvido devido a um intervalo de amostragem de tempo muito grosseiro. Dessa forma, $I(X_t; Y_t) = 0$, mas $I(X_t; Y_t | Z_t)$ seria não nulo por causa do condicionamento de um 'filho' comum [227], como é mostrado na Figura 3.15d. Normalmente os efeitos causais instantâneos não são considerados, mas para resolver esse problema na prática, pode considerar efeitos contemporâneos somente se ambas as Equações 3.82 e 3.83 são satisfeitas.

3.5.3 Entropia de transferência

A entropia de transferência (TE), introduzida por [242], e é o análogo teórico informacional da causalidade de Granger que para processos Gaussianos multivariados, pode-se mostrar equivalente [22]. A ideia chave para se chegar a uma noção causal de transferência de informação é medir o conteúdo de informação do passado de um processo X a tempos $t' < t$ sobre a variável alvo Y no tempo t e excluir informações da história comum compartilhada por X e Y . Em sua versão multivariada, TE é definido como:

$$I_{X \rightarrow Y}^{TE} = I(X_t^-; Y_t^- | \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-) \quad (3.84)$$

Pode-se interpretar a TE como a redução da incerteza sobre Y_t quando se aprende o passado de X_t , se o resto do passado de $\mathbf{X}_t$ é já conhecido, dado por $\mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-$ (onde $\setminus$ denota a subtração de um conjunto). Note que, por causa da estacionariedade assumida, $I_{X \rightarrow Y}^{TE}$ é independente de t .

A TE mede a influência agregada de X em todas as defasagens anteriores, isto é, não é específico do atraso e leva ao problema de que as densidades de alta dimensão têm que ser estimadas, o que é comumente chamado de “maldição da dimensionalidade”. Na referência [230] este problema é superado por uma fórmula de decomposição. Na prática, no entanto, é usada uma versão truncada em algum atraso máximo.

3.5.3.1 Entropia de transferência decomposta

A decomposição de TE nas suas contribuições de atraso de X via regra da cadeia é expressa como:

$$I(X_t^-; Y_t | \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-) = \sum_{\tau=1}^{\infty} I(X_{t-\tau}^-; Y_t | \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-, X_{t-\tau}^-) \quad (3.85)$$

Olhando para a Figura 3.16a, a ideia principal deriva de uma propriedade de Markov que relaciona a separação de nós no gráfico com as independências condicionais no processo. Isso implica que:

$$I(X_{t-\tau}^-; Y_t | \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^-, X_{t-\tau}^-) = I(X_{t-\tau}; Y_t | \mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}) \quad (3.86)$$

A partir da Equação 3.86 é possível definir a entropia de transferência decomposta (DTE) como:

$$I_{X \rightarrow Y}^{TE} \approx I_{X \rightarrow Y}^{DTE} \equiv \sum_{\tau=1}^{\tau^*} I(X_{t-\tau}; Y_t | \mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}) \quad (3.87)$$

para um certo conjunto finito $\mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}} \subset \mathbf{X}_t^- \setminus X_t^- \cup X_{t-\tau}^-$ (Figura 3.16b), com τ^* estimado conforme [229] e [82]. Os termos na Equação 3.87 podem ser vistos como as contribuições de diferentes atrasos para TE.

3.5.4 Definições causais

O mapa causal de séries temporais codifica a causalidade específica do atraso em relação ao processo observado. Como representado na Figura 3.16, cada nó nesse gráfico representa uma única variável aleatória, isto é, um subprocesso, num determinado instante t . Os nós $X_{t-\tau}$ e Y_t estão conectados por um link direto apontando para frente no tempo $X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$ (visualizado por uma seta), se e somente se $\tau > 0$ e:

$$I_{X \rightarrow Y}^{LINK}(\tau) \equiv I(X_{t-\tau}; Y_t | \mathbf{X}_t^- \setminus \{X_{t-\tau}\}) > 0 \quad (3.88)$$

isto é, se eles não são independentes condicionalmente ao passado de todo o processo, o que implica uma causalidade específica por atraso em relação a $\mathbf{X}$. Se $Y \neq X$ dizemos que o link $X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$ representa um acoplamento no atraso τ , enquanto para $Y = X$ representa uma autodependência no atraso τ . Nós X_t e Y_t estão conectados

por um link contemporâneo não direcionado (visualizado por uma linha) se:

$$I_{X-Y}^{LINK}(\tau) \equiv I(X_t; Y_t \mid \mathbf{X}_{t+1}^- \setminus \{X_t\}\{Y_t\}) > 0 \quad (3.89)$$

em que o presente contemporâneo $\mathbf{X}_t \setminus \{X_t\}\{Y_t\}$ está também presente na condição. Note-se que estacionariedade implica que $X_{t-\tau} \rightarrow Y_t$ sempre que $X_{t'-\tau} \rightarrow Y_{t'}$ para algum t' . Como foi observado, *TE* e *CMI* envolvem vetores dimensionalmente infinitos, daí que não podem ser calculados diretamente a não ser que seja usada alguma regra de truncamento. Essas medidas, portanto, sofrem com o problema de alta dimensionalidade e também teoricamente não cumpre a propriedade de autonomia da força de acoplamento [229].

Por outra parte, explorando a propriedade de Markov e usando um conjunto finito de pais de Y_t , representados na Figura 3.16b pela caixa azul e definidos como:

$$\mathcal{P}_{Y_t} \equiv \{Z_{t-\tau} : Z \in \mathbf{X}, \tau > 0, Z_{t-\tau} \rightarrow Y_t\} \quad (3.90)$$

Esses pais $\mathcal{P}_{Y_t}$, separam Y_t do passado do processo inteiro $\mathbf{X}_t^- \setminus \mathcal{P}_{Y_t}$. Os pais de todos os subprocessos em $\mathbf{X}$, juntamente com os links contemporâneos, compõem o plano causal de séries temporais.

A determinação de uma força de acoplamento causal agora é um procedimento em duas etapas. Na primeira etapa, o gráfico de séries temporais é estimado como detalhado em [230], que determina a existência ou ausência de um link e, portanto, de uma causalidade entre componentes atrasados de $\mathbf{X}$. A segunda etapa é a determinação de um peso significativo para cada link existente no gráfico. O *MIT* apresentado na próxima seção destina-se a servir a esse objetivo, atribuindo uma força de acoplamento bem interpretável somente aos links inferidos do plano causal de séries temporais.

3.5.5 Transferência momentânea de informação e entropia de origem

Os pais de um subprocesso Y em um determinado tempo t são fundamentais para entender o conceito subjacente de entropia de origem. Cada sub-processo univariado X de um processo estocástico $\mathbf{X}$ temporal e multivariado irá, a cada momento, produzir uma realização x_t . A entropia de X_t mede a incerteza acerca de x_t antes da sua própria observação e, em geral, será reduzida se os pais são conhecidos $\mathcal{P}_{X_t} \subset \mathbf{X}_t^-$.

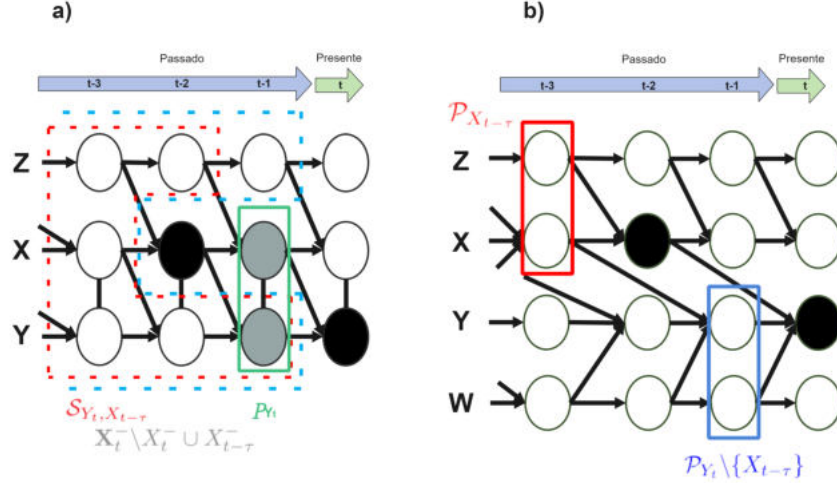


Figura 3.16: Interações causais num processo $\mathbf{X}$ multivariado (a) plano causal de séries temporais; as caixas ponteadas marcam as condições para a *CMI* entre $X_{t-\tau}$ em $\tau = 2$ e Y_t (marcados por pontos pretos). O conjunto infinito $\mathbf{X}_t^- \setminus X_t^- \cup X_{t-\tau}^-$ é notado pelas linhas ponteadas cinzas. Só o conjunto finito $\mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ (linhas ponteadas vermelhas) é necessário para satisfazer a Equação 3.86. $\mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ deve ser escolhido de modo que separe as condições infinitas ignoradas $(\mathbf{X}_t^- \setminus X_t^- \cup X_{t-\tau}^-) \setminus \mathcal{S}_{Y_t, X_{t-\tau}}$ de Y_t no gráfico. O conjunto ainda menor de pais $\mathcal{P}_{Y_t}$ (caixa azul, nós cinzas) separa Y_t do passado do processo inteiro $\mathbf{X}_t \setminus \mathcal{P}_{Y_t}$. (b) No gráfico *MIT* é a *CMI* entre $X_{t-\tau}$ em $\tau = 2$ e Y_t (marcado por pontos pretos) condicionada aos parentes $\mathcal{P}_{X_{t-\tau}}$ (vermelho) e $\mathcal{P}_{Y_t}$ (azul) [227]

Mas para um processo não-determinístico, a maioria dos dados reais conterà pelo menos algum ruído aleatório e sempre haverá alguma anormalidade quando se observa x_t . Essa anormalidade dá uma nova informação chamada de entropia de origem $H(X_t | \mathcal{P}_{X_t})$ de X .

A transferência momentânea de informação (*MIT*) entre X em algum tempo de atraso $t - \tau$ e Y no tempo t é a *CMI* que mede a parte da entropia de origem de Y que é compartilhada com a entropia de origem de X :

$$I_{X \rightarrow Y}^{MIT}(\tau) \equiv I(X_{t-\tau}; Y_t | \mathcal{P}_{Y_t} \setminus \{X_{t-\tau}\}, \mathcal{P}_{X_{t-\tau}}) = H(Y_t | \mathcal{P}_{Y_t} \setminus \{X_{t-\tau}\}, \mathcal{P}_{X_{t-\tau}}) - H(Y_t | \mathcal{P}_{Y_t}) \quad (3.91)$$

Uma interpretação gráfica da *MIT* é apresentada na Figura 3.17. O termo momentâneo é usado porque a *MIT* mede a informação do 'momento' $t - \tau$ em X que é transferido para Y_t . Analogamente, à Equação 3.89 pode ser definida como uma *MIT* contemporânea:

3.6 Equações estocásticas

Uma Equação diferencial estocástica ou *SDE* é essencialmente uma equação diferencial clássica que é perturbada por um ruído aleatório. Essa perturbação pode existir em um ou mais termos da equação, e geralmente é representada por um processo estocástico. Dessa forma, a solução de uma equação diferencial estocástica é também um processo estocástico. Uma SDE pode ser expressa mediante a seguinte forma [195]:

$$dX_t = \mu(X_t, t) dt + \sigma(X_t, t) dW_t \quad (3.94)$$

cuja solução é:

$$X_t = X_0 + \int_0^t \mu(X_t, t) dt + \int_0^t \sigma(X_t, t) dW_t \quad (3.95)$$

em que W_t representa um processo de Wiener (movimento Browniano padrão).

Da equação acima, distingue-se o termo determinístico descrito por uma integral ordinária de Lebesgue [106]; e o termo estocástico descrito pela integral de Itô [151]. Uma interpretação heurística da equação diferencial estocástica é que em um pequeno intervalo de tempo de comprimento δ o processo estocástico X_t muda seu valor por uma quantidade que é normalmente distribuída com expectativa $\mu(X_t, t) \delta$ e variância $\sigma(X_t, t)^2 \delta$ e é independente do comportamento passado do processo [123]. Isso ocorre porque os incrementos de um processo Wiener são independentes e normalmente distribuídos. A função μ é chamada de coeficiente de drift, enquanto σ é chamada de coeficiente de difusão.

Equação de Langevin: É uma SDE que descreve a evolução temporal de um subconjunto de graus de liberdade que correspondem a variáveis colectivas macroscópicas (dinâmica lenta) e variáveis microscópicas (dinâmica rápida - de natureza estocástica). A equação descreve o movimento Browniano considerando os efeitos de fricção de solventes/médio e perturbações por colisões de partículas em alta velocidade [276].

$$M \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = -\nabla U(x) - \gamma \frac{\partial x}{\partial t} + 2\sqrt{2\gamma k_B T} R(t) \quad (3.96)$$

em que γ é o coeficiente de fricção, $U(x)$ é potencial de interação da partícula, $-\nabla U(x)$ corresponde à força calculada a partir dos potenciais de interação, T é a temperatura, k_B é a constante de Boltzmann e $R(t)$ é p delta-correlação de um processo estacionário Gaussiano com média zero.

No movimento Browniano o termo de aceleração é desprezível:

$$0 = -\nabla U(x) - \gamma \frac{\partial x}{\partial t} + 2\sqrt{2\gamma k_B T} R(t) \quad (3.97)$$

Usando a relação de Einstein (relação entre a difusividade macroscópica e propriedades atômicas da matéria) $D = (k_B T / \gamma)$:

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{D}{k_B T} \nabla U(x) + \sqrt{2D} R(t) \quad (3.98)$$

Em resumo, a equação de Langenvin pode ser reescrita como uma SDE:

$$dX_t = -\nabla U(X_t) + \sqrt{2D} dW_t \quad (3.99)$$

Equação Master: A equação Master é derivada a partir da diferenciação da equação de Chapman-Kolmogorov para um processo estocástico Markoviano [276].

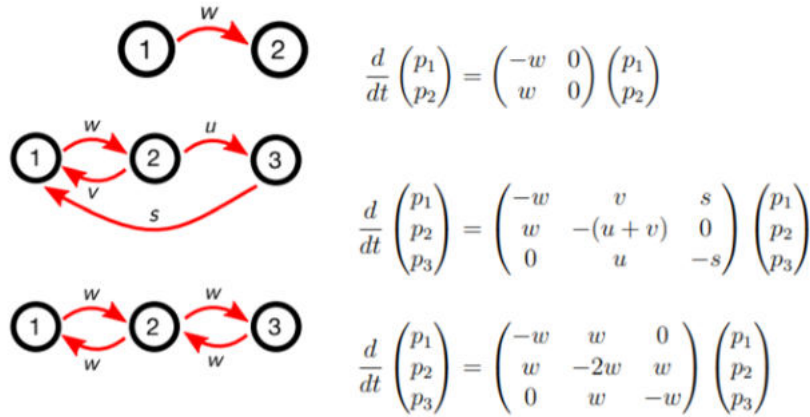


Figura 3.18: Derivação da equação Master [195].

Considere-se a primeira interação descrita na Figura 3.18. A seta vermelha nomeada w representa um sistema que se encontra no estado 1 num tempo t , cuja probabilidade de salto-transição para o estado 2 entre o tempo t e $t + \delta t$ é $w\delta t$. Note que a probabilidade $w\delta t$ está condicionada a que o sistema se encontre no estado 1 no tempo t . Então, a probabilidade de observar a transição $1 \rightarrow 2$ entre os tempos $t \rightarrow t + \delta t$ é $w p(1)\delta t$. No geral $\Omega_{ij}\delta t$ corresponde à probabilidade de observar a transição $i \rightarrow j$ entre os tempos $t \rightarrow t + \delta t$. Num sistema n -dimensional os valores Ω_{ij} são chamados taxas de transição e Ω é a matriz de taxas de transições.

Escrevendo as equações dinâmicas para $p(1)$ e $p(2)$ como um balanço de massa de forma que a fração de tentativas no estado 1 em $t + \delta t =$ fração de tentativas no estado 1 em t - fração de tentativas onde ocorreu uma transição $1 \rightarrow 2$ entre os

tempos $t + \delta t$. resultando em:

$$p1(t + \delta t) = p1(t) - wp(1)\delta t \quad (3.100)$$

e:

$$p2(t + \delta t) = p2(t) - wp(1)\delta t \quad (3.101)$$

A equação Master é descrita por dois tipos de contribuições: (a) chegando a i a partir de $j \neq i$, gerando um factor positivo $\Omega_{ij}p_j$ (b) ou saindo de i a partir $j \neq i$, gerando um fator negativo $-\Omega_{ij}p_i$.

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \Omega_{ij}p_j - \sum_{j \neq i} \Omega_{ji}p_i \quad (3.102)$$

em que os elementos diagonais da matriz $\Omega_{ii} = \sum_{j \neq i} \Omega_{ji}$:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_{j \neq i} \Omega_{ij}p_j + \sum_{j \neq i} \Omega_{ii}p_i = \sum_j \Omega_{ij}p_j = \Omega p \quad (3.103)$$

Equação de Fokker-Planck: É uma equação diferencial parcial que descreve a evolução no tempo da função de densidade de probabilidade da velocidade de uma partícula sob a influência de forças de arrasto e forças aleatórias, como no movimento Browniano. Esta equação é obtida a partir da expansão Kramers-Moyal da Equação Master [221].

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \sum_{j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} a_j(x)p + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} b_{ij}(x)p \quad (3.104)$$

Para $t > 0, x \in \mathbb{R}, p(x, 0)$.

Em geral, balanços de massa e populacionais de reações químicas e ecossistemas são sujeitos a flutuações que seguem a forma da equação de Langevin [276]:

$$\frac{dx}{dt} = \sum_j J_{ij}x_j + \sqrt{2D_i}\xi_i(t) \quad (3.105)$$

em que J é a matriz Jacobiana e ξ_i é o ruído gaussiano (branco) com média zero e variância unitária. A equação de Fokker-Planck corresponde a:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \sum_{ij} J_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} x_j p + \sum_{ij} D_{ij} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.106)$$

Para obter a matriz de covariância Γ é usada a equação Fokker-Planck estacionária:

$$0 = - \sum_{ij} J_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} x_j p + \sum_{ij} D_{ij} \frac{\partial^2 p}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.107)$$

em que $D_{ij} = \delta_{ij} D$ é uma matriz diagonal. Definindo o produto interno:

$$\langle x_k, x_l \rangle = \int x_k x_l P(x) dx \quad (3.108)$$

Multiplicando a Equação 3.107 por $x_k x_l$ e integrando:

$$0 = \sum_j J_{kj} \langle x_l x_j \rangle + \sum_j J_{lj} \langle x_k x_j \rangle + 2D_{kl} \quad (3.109)$$

Reescrevendo em termos de matriz de covariância:

$$J\Gamma + \Gamma J^T = -2D \quad (3.110)$$

em que J^T é a matriz Jacobiana transposta e D é conhecida como a matriz de flutuações.

3.7 Considerações finais

Neste capítulo, apresentou-se um resumo dos principais fundamentos teóricos em dinâmica não linear, análise de séries temporais e análise de causalidade.

Dadas as propriedades características dos diferentes comportamentos dinâmicos não lineares que os sistemas a monitorar podem exibir, é importante empregar uma metodologia que permita uma caracterização adequada. Ao longo do capítulo, foram apresentadas duas abordagens para a caracterização. A primeira considera técnicas numéricas que usam diretamente as equações dos modelos matemáticos, com características obtidas diretamente a partir do espaço original do sistema. A segunda considera o estudo a partir das observações de uma série temporal de uma variável de estado. Com o auxílio de ferramentas numéricas e matemáticas, foram construídos procedimentos que permitem determinar as principais características dinâmicas de um sistema a partir do estudo de um espaço de estados reconstruído. O fundamento teórico usado para a construção das técnicas numéricas de caracterização e análise dos comportamentos dinâmicos também foi resumido neste capítulo.

Foram ainda abordadas as definições da teoria causal requeridas no desenvolvimento da metodologia deste trabalho. Foi resumido um bloco de definições originais da Teoria da Informação, destacando a importância do conceito da informação mútua condicional e seu papel na derivação de outras propriedades importantes nos métodos de descobrimento causal. Além disso, foram introduzidos os conceitos de sistemas dinâmicos causais e as relações matemáticas que vinculam a matriz de covariância à matriz Jacobiana de um sistema dinâmico a partir de medidas observáveis.

Finalmente é importante ressaltar as seguintes considerações que [61] faz a respeito da notação matemática usada em sistemas dinâmicos e que é adotada neste trabalho: (i) a matriz Jacobiana J Eqs. (3.21) descreve a deformação de uma vizinhança infinitesimal ao longo de um tempo finito t ; (ii) a matriz de estabilidade A descreve a deformação instantânea da vizinhança e é o objeto natural para o estudo de estabilidade de um ponto de equilíbrio ou um ponto invariante no espaço de estados; e (iii) a estabilidade de trajetórias é descrita pela matriz Jacobiana J . Frequentemente em muitas áreas a matriz A é referida como "Matriz Jacobiana", um uso particularmente desafortunado quando se considera a estabilidade linearizada de um ponto de equilíbrio segundo mostrado na Equação (3.22). A matriz A não é a matriz Jacobiana: A é um gerador de passos de deformação de tempo infinitesimal $J^{\delta t} \cong 1 + A\delta t$. Quando *Jacobi* desenvolveu o trabalho dos determinantes, considerou transformações entre as diferentes bases coordenadas [135]. Além disso, os determinantes que *Jacobi* considerou eram adimensionais, enquanto A_{ij} possui unidades de $1/\text{tempo}$.

Capítulo 4

Metodologia

Ao longo do presente trabalho faz-se uso de diversos sistemas dinâmicos de natureza determinística (descritos por modelos matemáticos fenomenológicos) e sistemas dinâmicos representados a partir de observações (conjunto de dados multidimensionais-séries temporais). De forma geral, os sistemas dinâmicos descritos com base a modelos matemáticos são empregados para a validação das técnicas e conceitos da análise não linear de séries temporais.

4.1 Metodologia em sistemas dinâmicos determinísticos

4.1.1 Caracterização da dinâmica

A caracterização dos comportamentos dinâmicos encontrados, em especial o comportamento caótico, estão baseados nas estratégias e metodologias propostas por CVITANOVIĆ *et al.*[61]. Todas as rotinas de cálculo desta seção foram validadas mediante a implementação nos sistemas dinâmicos usados como 'benchmarks' e definidos na Seção 3.1.1, cujos relatos e estudos na literatura são amplos.

4.1.1.1 Cálculo da matriz de estabilidade A

Inicialmente foi desenvolvida uma rotina de cálculo para avaliar a estabilidade local de um comportamento específico do sistema dinâmico. A implementação do método foi realizada conforme explicado na Seção 3.1.2.1. A matriz A foi obtida usando as ferramentas de cálculo simbólico do módulo *Sympy – Python*, sendo possível providenciar uma expressão de A na rotina de cálculo principal, que foi escrita em

Python 3.8. A estabilidade local foi avaliada no correspondente ponto de equilíbrio mais próximo da base de atração do atrator. O cálculo do ponto de equilíbrio foi determinado conforme definido na Equação (3.9) e usando a função *fsolve* da biblioteca *Scipy* v.017 – 02. Para a matriz A avaliada no ponto de equilíbrio, foram determinados os valores e vetores característicos que descrevem a estabilidade local do sistema.

Posteriormente, a estabilidade local foi avaliada como função dos parâmetros de bifurcação, sendo possível identificar as mudanças características nos valores característicos e a localização aproximada dos pontos de bifurcação de Hopf.

4.1.1.2 Cálculo das secções de Poincaré

Com o objetivo de conseguir analisar o comportamento dinâmicos dos fluxos dos sistemas, foi feita a análise usando as secções de Poincaré, que basicamente é uma técnica de discretização de fluxos para a identificação de comportamentos de determinadas trajetórias. A rotina usada para o cálculo das secções de Poincaré foi escrita em *Python* 3.8 e a metodologia usada foi conforme explicado na Seção 3.1.4.

A construção do vetor $\hat{n}$ da Equação (3.31) foi definida em termos do vetor modelo de estado rotacionado $\frac{\pi}{2}$ em respeito ao eixo z do sistema de coordenadas cartesiano (vetor normal ao plano corresponde ao vetor modelo de estado rotacionado $\frac{\pi}{2}$). O vetor modelo de estado foi definido a partir do vetor unitário em x , ou seja $(x, y, z) = (1, 0, 0)$ rotacionado com um ângulo θ que representa o ângulo entre a secção (para o caso um plano) de Poincaré e o eixo x [61].

As rotações foram determinadas mediante o produto ponto com a Matriz de rotação em torno do eixo z .

$$\begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) & 0 \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

em que o ângulo θ é dado em radianos. A função $U(x)$ foi calculada conforme a Eq. (3.31). As equações de fluxo foram integradas para as condições iniciais e o vetor de tempo estipulados. Os pontos que pertencem à secção de Poincaré devem satisfazer a condição da Equação (3.28), de forma que a função foi avaliada para cada um dos vetores de estado obtidos na integração do fluxo. Uma mudança de sinal da função $U(x)$ indicava a presença de um ponto de Poincaré $U(x) = 0$. Depois de identificada a mudança de sinal, seguia-se uma etapa de refinamento da solução, que incluiu a definição de uma função *lambda* (recurso de Python para a definição de funções não

explícitas) e o uso de *fsolve* para achar a solução exata.

Uma vez identificados, os pontos de Poincaré foram projetados na base do vetor modelo $\hat{n}$ e o vetor unitário no eixo z . Os mapas de retorno foram obtidos pelo cálculo preliminar das distâncias radiais entre os pontos de Poincaré. Particularmente, as distâncias radiais r_n foram determinadas pela projeção dos pontos anteriormente descrita. Finalmente, os mapas de retorno surgem ao plotar r_n vs r_{n+1} . Adicionalmente, foi realizada uma interpolação polinomial dos vetores com a finalidade de obter a equação do mapa de retorno dos sistemas.

4.1.1.3 Cálculo matriz Jacobiana J

A análise da estabilidade local foi acoplada ao cálculo da matriz Jacobiana, particularmente com o interesse de identificar os multiplicadores de Floquet marginais, que provam a existência de simetrias invariantes nos atratores. O cálculo dos multiplicadores de Floquet foi realizado conforme o procedimento descrito nas Seções 3.1.2.2 e 3.1.3.2 e a integração da Equação (3.21). A programação da rotina de cálculo foi realizada em *Python*3.8.

4.1.1.4 Expoentes de Lyapunov

Com o objetivo de identificar e quantificar os comportamentos caóticos nos sistemas dinâmicos de estudo, foi desenvolvida a rotina de cálculo para determinar o Espectro de Lyapunov. O procedimento foi realizado conforme foi explicado na Seção 3.1.6.1 e tomando em conta as considerações propostas por [286] e [236]. Adicionalmente, foi desenvolvida uma rotina de cálculo para determinar o tempo mínimo de integração, para o qual o espectro de Lyapunov se mantém constante (condição necessária, dada a natureza invariante da medida). O espectro de Lyapunov foi também avaliado em função de parâmetros operacionais dos modelos. A programação das rotinas de cálculo do Espectro de Lyapunov também foi realizada em *Python*3.8.

4.1.1.5 Análise de mapas de recorrências

A análise dos padrões nos mapas de recorrências seguem as guias descritas na tabela a seguir.

Observação	Interpretação
Homogeneidade	O processo é estacionário
Desbotando para os cantos superiores esquerdo e inferior direito	Não estacionariedade; o processo possui uma tendência
Rupturas (faixas brancas)	Não estacionariedade; alguns estados são raros ou estão longe do normal; transições podem ter ocorrido
Padrões periódicos / quase periódicos	Ciclicidades no processo; a distância temporal entre padrões periódicos (por exemplo, linhas) corresponde ao período; longas linhas diagonais com diferentes distâncias entre si revelam um processo quase periódico
Pontos isolados	Flutuação forte no processo; se apenas pontos isolados isolados ocorrerem, o processo pode ser um processo aleatório ou não correlacionado
Linhas diagonais (paralelas à LOI)	A evolução dos estados é semelhante em tempos diferentes; o processo pode ser determinista; se essas linhas diagonais ocorrerem ao lado de pontos isolados isolados, o processo pode ser caótico (se essas linhas diagonais forem periódicas pode se tratar de órbitas periódicas instáveis)
Linhas diagonais (ortogonais à LOI)	A evolução dos estados é semelhante em tempos diferentes, mas com tempo inverso; às vezes isso é um sinal de espaço imerso insuficiente
Clusters de linhas verticais e horizontais	Alguns estados não mudam ou mudam lentamente por algum tempo; indicação de estado laminar
Estruturas de linhas compridas	A evolução dos estados é semelhante em tempos diferentes, mas com velocidade diferente; a dinâmica do sistema pode estar mudando (mas note: isso não é totalmente válido para estruturas de linhas curtas)

Tabela 4.1: Interpretação visual de padrões num mapa de recorrências [6]. LOI corresponde à diagonal principal.

4.1.2 Construção de diagramas da árvore

Os diagramas da árvore são uma classe de diagrama de bifurcação em que são apresentadas todas as bifurcações de uma variável de estado em relação a um parâmetro de bifurcação. É importante notar que esse diagrama só considera as soluções está-

veis do sistema dinâmico, uma vez que a metodologia de cálculo só usa simulações dinâmicas. Consideradas faixas específicas do parâmetro nos cálculos dos valores mínimos ou máximos de algum estado do modelo, os diagramas exibem uma sequência de bifurcações dinâmicas que ocorrem no sistema. Neles estão apresentados os valores extremos da variável de estado escolhida, à medida que se varia o parâmetro. O diagrama permite visualizar bifurcações que podem eventualmente explicar o surgimento de comportamentos mais complexos, como caos, os quais podem ser originados pelas sucessivas duplicações de período em cascata [238].

A rotina para construir os diagramas de árvore foi desenvolvida em *FORTRAN*[®], sendo que os cálculos são computacionalmente demandantes.

Como conclusão pode-se dizer que a estratégia de caracterização de comportamentos dinâmicos baseia-se na determinação das métricas do conjunto invariante as quais estabelecem a evolução da dinâmica do sistema. Na Figura 4.1 apresenta-se um resumo da metodologia apresentada nesta subseção.

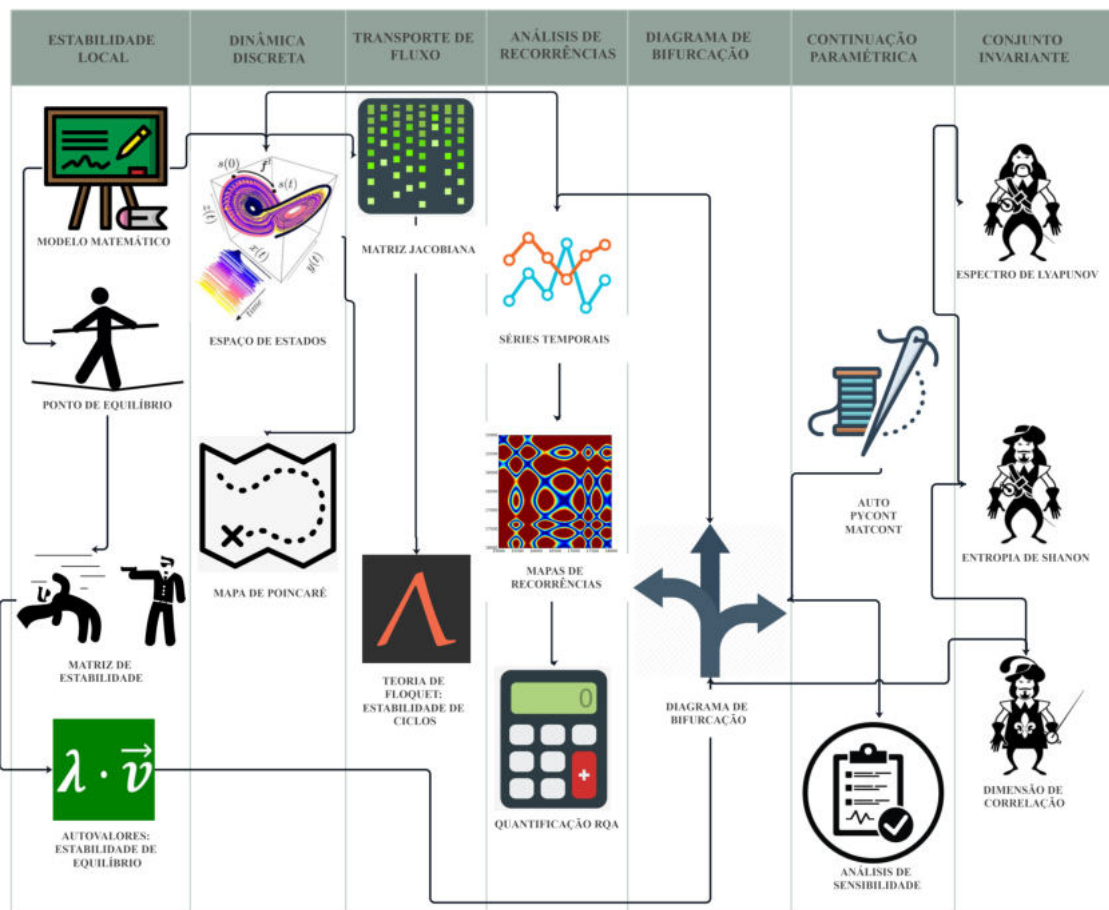


Figura 4.1: Workflow e metodologia de caracterização de comportamentos dinâmicos descritos por modelos matemáticos

4.2 Metodologia em sistemas dinâmicos descritos por dados

4.2.1 Pre-tratamento de dados

No caso em particular do caso de estudo de medidores fiscais da estação fiscal de medição (EFAL) foi necessária uma etapa de processamento de dados. Os dados brutos encontram-se na forma de arquivos CSV (comma separated values). Cada um dos arquivos contém dados relativos a seis meses de processo, medidos de cinco em cinco minutos. O objetivo do pré-processamento foi realizar a leitura dos arquivos originais e armazená-los no formato DataFrame, da biblioteca Pandas de Python. Também foi necessário transformar a codificação dos dados, que inicialmente estava no formato ISO-8859-1, informalmente chamado de Latin-1, para a codificação UTF-8 ou UNICODE, que é compatível com a linguagem Python.

Após a análise dos dados, foi necessário transformar os elementos 'Bad', 'Calc Failed', 'Scan 0' que na prática correspondem a dados faltantes, por tanto foram substituídos por NaN (Not a Number). Caracteres como 'On' e 'Off foram transformados em variáveis de caráter booleano. As colunas das datas registradas foram utilizadas como índices do conjunto de dados.

Foi realizada uma análise quantitativa de dados faltantes. Variáveis com alta quantidade de dados faltantes foram eliminadas do conjunto de dados de análise, assim como variáveis de variância muito baixa $< 10^{-6}$. Em outros casos, os dados faltantes foram estimados por interpolações lineares.

4.2.2 Metodologia de monitoramento offline

O monitoramento offline dos sistemas estudados neste trabalho foi aplicado principalmente nos dados de planta do processo EFAL (Seção 5.1.1.1) e segue as seguintes etapas metodológicas:

1. Aquisição de dados: nesta etapa os dados são diretamente fornecidos pelo operador do processo, normalmente por meio de sistemas de gerenciamento de dados tipo *PI* ou *SCADA* que coletam e organizam o fluxo de dados provenientes dos diferentes sensores na planta.
2. Processamento de dados: nesta etapa os dados brutos são pela primeira vez analisados e a função principal é estabelecer um conjunto de dados representativos que possam ser usados na construção dos modelos de regressão.

- (a) Formatação de dados: os dados podem ter origem de diversas fontes de arquivos ou base de dados. Adicionalmente existem diversos formatos de codificação. Esta etapa tem como objetivo unificar os dados extraídos e estabelecer uma formatação única para o conjunto completo.
 - (b) Tratamento de dados: os dados podem ter origem de diversas fontes de arquivos ou base de dados. Adicionalmente existem diversos formatos de codificação. Esta etapa tem como objetivo unificar os dados extraídos e estabelecer uma formatação única para o conjunto completo.
 - (c) Pré-tratamento de dados: consiste na remoção de variáveis associadas a séries temporais que apresentam baixa variância ($< 10^{-6}$) bem como daquelas que não apresentam valores válidos. Além disso, para variáveis que apresentam valores faltantes, os mesmos foram preenchidos preferencialmente pela propagação para frente (*ffill*, *forward filling*) dos respectivos últimos valores válidos.
 - (d) Tratamento de *outliers*: consiste na remoção de registros com valores totalmente fora da tendência do histórico observado. Os métodos empregados para esta etapa consistem em análise de *boxplots* e o método Inter Quantile Range(IQR) [157].
 - (e) Seleção de variáveis: no contexto de construção de modelos que visem à predição do estado do processo, não necessariamente devem ser empregadas todas as variáveis medidas. Esta etapa consiste na remoção de variáveis irrelevantes ou redundantes, permitindo reduzir a complexidade da construção do modelo e obtendo maior representatividade do processo. Os métodos de seleção de variáveis incluem os métodos filtro, métodos *wrapper*, métodos embutidos e de forma inédita neste trabalho, métodos baseados em causalidade.
3. Detecção de falha: normalmente em plantas de processos químicos as falhas são eventos raros, mas com alto potencial de provocar acidentes ou danificar os equipamentos do processo. Tendo em vista isso, o emprego de modelos *machine learning* do tipo classificador é limitado. Dessa forma, os modelos *machine learning* do tipo regressor apresentam-se como uma melhor alternativa. A estratégia baseia-se na construção dos modelos regressores com dados de planta em condição normal, ou seja, sem conter algum tipo de falha. Posteriormente, o modelo faz previsões sucessivas que são comparadas com medidas ou dados da planta. Assim, ante uma eventual falha no processo, a metodologia acusaria uma discrepância entre a previsão do modelo (condição normal) e o status de falha do processo.

4. Diagnóstico de falha: Posteriormente à etapa de detecção e identificação da falha, corresponde a busca da(s) causa(s) que geraram tal anormalidade. Tipicamente, o processo de diagnóstico obedece a uma análise estatística em que são estabelecidas as contribuições em termos de variabilidade das diferentes variáveis do processo. Dessa forma, variáveis com maior participação na variabilidade do processo durante a falha são vinculadas como possíveis responsáveis pela falha. Por outra parte, neste trabalho é estudado o uso de métodos de descoberta causal no contexto de diagnóstico de falha.

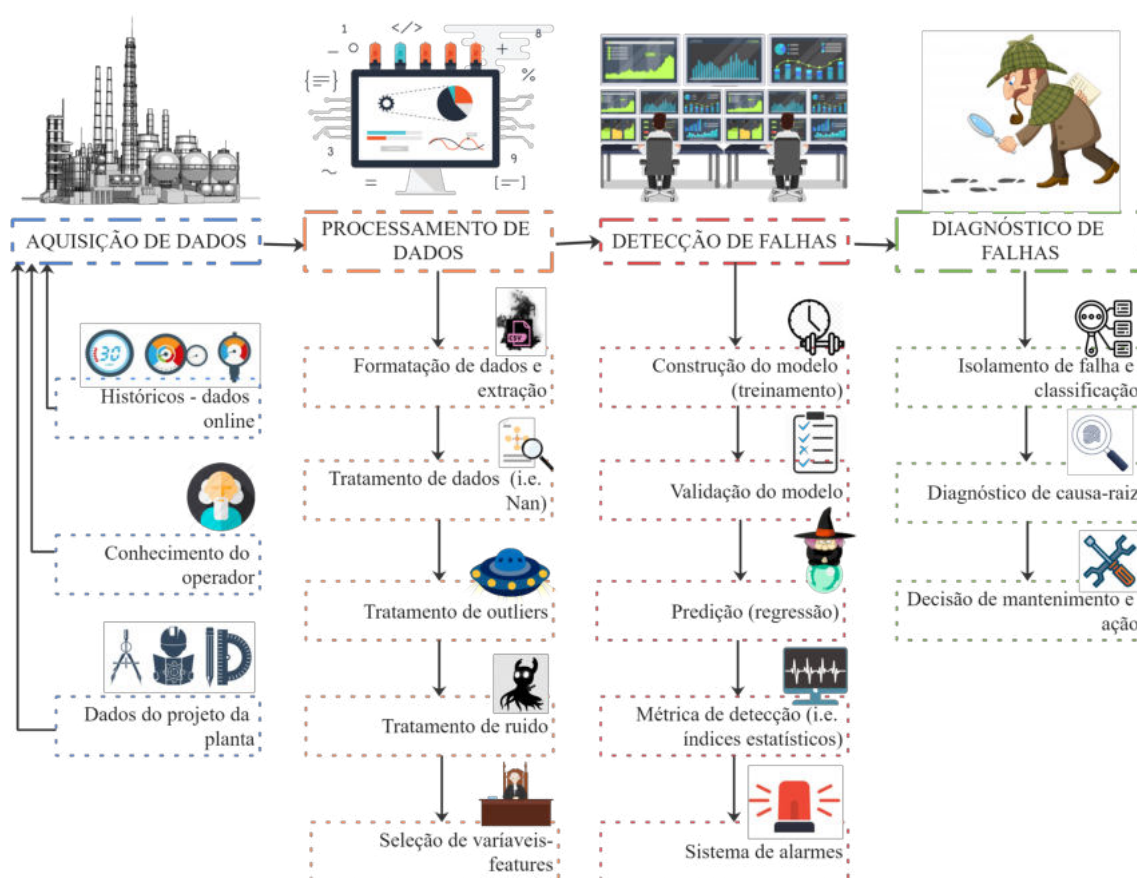


Figura 4.2: Workflow e metodologia de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas

Na Figura 4.2 apresentam-se de forma resumida as etapas empregadas para detecção e diagnóstico de falhas em processos químicos.

4.2.3 Metodologia para a análise de seleção de variáveis

A abordagem de detecção de falhas utilizada no presente trabalho é baseada em discrepâncias, em que o padrão de falha é reconhecido usando uma medida residual calculada como a diferença entre as leituras dos sensores do processo e os valores

esperados obtidos, usando as previsões de um modelo que representa o processo em condições sem falha. No presente trabalho, a construção do modelo é baseada em técnicas de aprendizado não supervisionado (modelos de regressão), uma vez que o número de falhas em cada sensor e a constante evolução do processo inviabilizam o uso de técnicas supervisionadas (modelos de classificação). A finalidade das técnicas não supervisionadas é modelar, com base nos conjuntos de dados de entrada e saída (X e Y , respectivamente), o comportamento dinâmico do processo em condições normais (sem falha). O monitoramento da condição do processo é baseado em um cálculo de métrica residual. No presente caso, foi utilizado o *Square Prediction Error* (SPE), que é um índice de detecção de falhas que permite a identificação de condições anormais ao longo do gráfico de controle.

Aqui, os modelos de detecção de falhas foram configurados considerando uma única saída Y como a variável de falha observada (veja a variável monitorada nas Tabelas 4.3 e 4.4). Por outro lado, a variável de entrada (conjunto X) foi gerada aplicando os procedimentos de seleção de variáveis (listados na Tabela 4.2) no conjunto de dados completo original. Além disso, o número de variáveis no conjunto de entrada X foi previamente estabelecido como o número de componentes principais necessários para descrever 95% da variância acumulada no respectivo conjunto de treinamento.

Tabela 4.2: Métodos de seleção de variáveis aplicados

Método de seleção	Classe de método
Baseado em correlação de Pearson	Filtro
Baseado em correlação de Spearman	Filtro
Baseado em informação mútua	Filtro
Forward feature elimination (Lasso)	Wrapper
Forward feature elimination (Random Forest)	Wrapper
Backward feature elimination (Lasso)	Wrapper
Backward feature elimination (Random Forest)	Wrapper
Baseado em L1-Regularization Lasso	Embutido
Baseado em importancias de Random Forest	Embutido
PCMCI (correlação parcial)	Filtro
PCStable (correlação parcial)	Filtro
PCStable (correlação parcial) + MCI (informação mútua condicional)	Filtro

Os métodos de detecção de falhas e seleção de variáveis são aplicados em dois casos de estudo: o processo de produção de óleo - EFAL que constitui um conjunto

de dados de planta real, e o processo de Tenesse-Eastman (TEP), que é considerado como benchmark na análise. As falhas dos casos de estudo são descritas nas Tabelas 4.3 e 4.4.

Tabela 4.3: Falhas analisadas no processo TEP (ver Apêndice A)

Falha	Variável de processo	Tipo	Variável monitorada
IDV(1)	A/C vazão alimentação, B composição constante	Degrau	XMEAS(23)
IDV(5)	Temperatura de entrada da água de resfriamento no condensador	Degrau	XMEAS(22)

Tabela 4.4: Descrição de falhas processo FAL (ver Seção 5.1.1)

Falha	Tamanho do conjunto de treino (pontos)	Tamanho do conjunto de validação (pontos)	Tamanho do conjunto de teste (pontos)	Variável monitorada
F-I	20161	120056	42660	Vazão de Gás em B
F-II	44581	106620	41760	Temperatura do Gás em A
F-III	44581	74727	2880	Temperatura do Gás em A

Para avaliar o desempenho da detecção de falhas nos estudos de caso relatados acima, foram considerados os seguintes regressores de aprendizado de máquina:

- Canonical correlation analysis (CCA)
- Ridge regression (RR)
- Multilayer perceptron regressor (MLPR)
- Random forest regressor (RF)

Esses modelos são avaliados para cada subconjunto de entrada X gerado pelos métodos de seleção de variáveis. A arquitetura e respectivos hiperparâmetros foram definidos de acordo com heurísticas relatadas na literatura, também resumidas no artigo [58]. Assim, as eficiências dos algoritmos de seleção de variáveis foram diretamente associadas ao desempenho de detecção de falhas dos modelos treinados com os mesmos valores de hiperparâmetros, permitindo observar o efeito de seleção de variáveis com pequena influência dos valores dos hiperparâmetros.

4.2.4 Análise não linear de séries temporais

A análise de séries temporais é uma ferramenta de grande valor nos aspectos relacionados com a caracterização de sistemas dinâmicos, quando se conhece pouca informação ou existem poucas observações das variáveis que governam o fenômeno. A metodologia consiste basicamente na construção de um espaço imerso, a partir de um conjunto finito de medidas numa variável de estado. As caracterizações do sistema são realizadas baseadas nas propriedades do espaço reconstruído. Os procedimentos numéricos e matemáticos foram explicados na Seção 3.2.

Todos os procedimentos discutidos para a análise não linear de séries temporais foram programados em Python 3.7, constituindo uma biblioteca similar ao software *TISEAN* 3.0.1 [242][119]. Os códigos desses procedimentos foram programados sob a filosofia de programação orientada a objetos. A classe principal considera dois casos de análises: estático, que considera um volume fixo de dados; e dinâmico, que considera uma janela móvel em que o conjunto de dados evolui com o tempo também. As classes secundárias correspondem às próprias técnicas de análise não linear de séries temporais:

- Função de autocorrelação e estimação de τ (Seção 3.2.1)
- Função de informação mútua, entropias de Shanon e estimação de τ (Seção 3.2.1)
- Função de falsos vizinhos e estimação de m (Seção 3.2.1)
- Reconstrução de espaços de fases e visualização em até 3 dimensões
- Estimação do maior expoente de Lyapunov (conforme [224, 286])
- Estimação do espectro de Lyapunov (conforme [148, 286])
- Cálculo dos mapas de recorrências (Seção 3.2.1.6)
- Análise de quantificação de recorrências (Seção 3.2.1.6)

- Cálculo de entropias de Kolmogorov e dimensão de correlação (Seções 3.2.1.9 e 3.2.1.8)

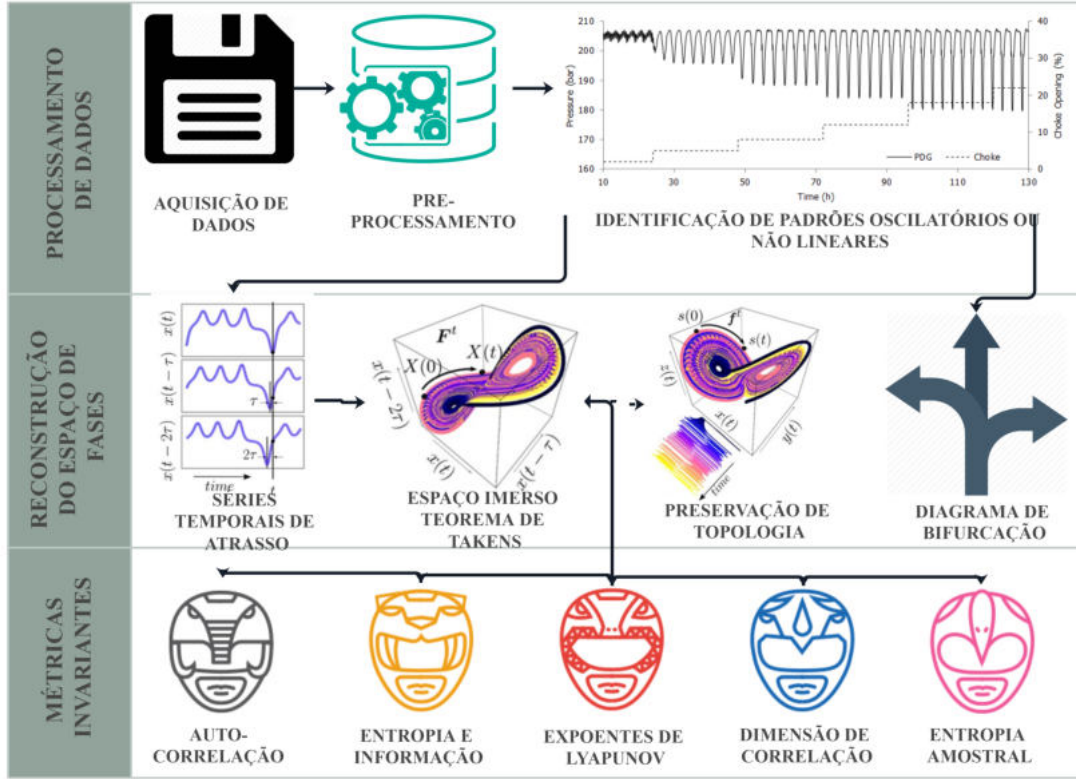


Figura 4.3: Workflow e metodologia de análise não linear de séries temporais

A Figura 4.3 resume a metodologia e etapas na análise não linear de séries temporais.

4.2.5 Reconstrução de valores característicos via Equação de Fokker-Planck]

A reconstrução dos valores característicos e a matriz Jacobiana segue a resolução da Equação 3.110. A dedução completa da metodologia é descrita no Apêndice F e pode ser resumida nas seguintes etapas:

1. Calcular a matriz de covariância dos dados da série temporal, $\Gamma_{ij} = \langle X_i X_j \rangle$.
2. Construir a matriz de flutuações diagonais D e calcular $d = \text{vec}(D)$. Em alguns sistemas, essas flutuações podem ser medidas diretamente.
3. Construir a matriz de permutações C de acordo com o Apêndice F.

4. Calcular a matriz $B = (\Gamma \otimes I) + (I \otimes \Gamma)C$, em que I é a matriz identidade $N \times N$
5. Definir $j = \text{vec}(J)$ e identificar pelo menos $N(N-1)/2$ elementos de j que devem ser zero devido a restrições estruturais. Depois construir a matriz U . A dimensão da coluna de U é a dimensão da linha de j , e a dimensão da linha de U é idêntica ao número de restrições estruturais.
6. Construir $\hat{B} = \begin{pmatrix} B \\ U \end{pmatrix}; \hat{d} = \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix}$
7. Calcular $j = \left(\hat{B}^T B\right)^{-1} \hat{B}^T \hat{d}$ e obter a matriz J a partir da sua vetorização j .
8. Definir os elementos de J governados por restrições estruturais explicitamente como zero

4.2.6 Análise de causalidade

A técnica de descobrimento causal a partir de séries temporais é inspirada nos procedimentos do pacote Tigramite [232] e está fundamentada nos seguintes passos:

- Seleção de condições (parentes): Definir inicialmente o super-conjunto $\hat{\mathcal{P}}(X_t^j)$ de parentes $\mathcal{P}(X_t^j)$ para todas as variáveis $X_t^j \in \mathbf{X}_t = (X_t^1, X_t^2, \dots, X_t^N)$ (estágio B1).
- Uso desses parentes como condições para o algoritmo MCI (estágio B2), no qual todos os pares $(X_{t-\tau}^i, X_t^j)$ são testados, onde $i, j \in \{1, \dots, N\}$ e o tempo de atraso $\tau \in \{1, \dots, \tau_{max}\}$ e estabelece uma conexão $X_{t-\tau}^i \rightarrow X_t^j$ se :

$$MCI : \quad X_{t-\tau}^i \not\perp\!\!\!\perp X_t^j \mid \hat{\mathcal{P}}(X_t^j) \setminus \{X_{t-\tau}^i\}, \mathcal{P}_{PX}(X_{t-\tau}^i) \quad (4.2)$$

em que $\not\perp\!\!\!\perp$ denota a ausência de dependência condicional, $\mathcal{P}_{PX}(X_{t-\tau}^i) \subseteq \hat{\mathcal{P}}(X_{t-\tau}^i)$ denota os px parentes mais fortes de acordo ao algoritmo B1. Esse parâmetro é uma escolha opcional que restringe o número de parentes usados.

4.2.6.1 Estágio B1

Para cada variável $X_t^j \in \mathbf{X}_t$ o algoritmo começa por inicializar os parentes preliminares $\hat{\mathcal{P}}(X_t^j) = (\mathbf{X}_{t-1}, \mathbf{X}_{t-2}, \dots, \mathbf{X}_{t-\tau_{max}})$. Depois, num processo iterativo, a variável $X_{t-\tau}^i$ é removida de $\hat{\mathcal{P}}(X_t^j)$ se a hipótese nula: $PC : \quad X_{t-\tau}^i \perp\!\!\!\perp X_t^j$ é aceita num nível de significância α . O algoritmo converge para o link $X_{t-\tau}^i \rightarrow X_t^j$ quando sejam

avaliados todos os parentes e a hipótese nula seja rejeitada (se a hipótese nula é aceita a conexão é removida).

Os testes de independência executados nesta etapa são determinados pela correlação parcial das variáveis.

4.2.6.2 Estagio B2

Dado um conjunto de variáveis $\mathbf{X}_t = (X_t^1, X_t^2, \dots, X_t^N)$, um nível de significância α , conjunto de parentes ordenados $\hat{\mathcal{P}}(X_t^j)$ para todas as variáveis X^j e um atraso máximo τ_{max} é calculado um novo teste de independência:

$$p - value, I \leftarrow MCI(X_{t-\tau}^i, X_t^j, \mathbf{Z} = \{\hat{\mathcal{P}}(X_t^j), \hat{\mathcal{P}}_{PX}(X_{t-\tau}^i)\}) \quad (4.3)$$

As metodologias para o cálculo de informação mútua condicional MCI foram já discutidas na Seção 3.5.

A principal diferença entre a metodologia proposta e o pacote Tigramite reside no estagio B2. Tigramite usa duas variações para a determinação do teste de independência: correlação linear parcial e uma estimativa da informação mútua condicional por KNN [228]. Neste trabalho, são consideradas as técnicas de correlação parcial e a informação mútua condicional (conforme a definição da Equação 3.77) via cálculo de funções de densidade de probabilidade por KDE (Seção 3.4.1). Outra grande diferença entre as duas metodologias é que Tigramite usa uma abordagem de análise estática, enquanto a metodologia aqui estudada considera abordagens estática e deslizante (janela móvel).

4.3 Considerações finais

Neste capítulo, foram apresentadas as metodologias empregadas para a caracterização analítica (usando as equações do fluxo), considerando numa primeira instância a análise e caracterização de sistemas dinâmicos bem definidos, como o atrator de Rosler e o atrator de Lorenz. O objetivo é obter as medidas invariantes dos atratores que servirão como ponto de referência ou comparação nas posteriores análises.

Por outra parte, foram definidas as metodologias empregadas nos sistemas dinâmicos descritos por dados, incluindo a estratégia de monitoramento, detecção e diagnóstico de falhas. Posteriormente foram definidas as metodologias para a caracterização dos sistemas dinâmicos de estudo via análise não linear de séries temporais.

Obtidos os invariantes, estes poderão ser comparados com os resultados da caracterização analítica e assim validar as técnicas de análise não linear de séries temporais. A importância de validar esses procedimentos reside em que estes serão utilizados, e alguns casos adaptados, para formular novas estratégias de monitoramento em sistemas dinâmicos reais.

Por outra parte, dois aspectos foram destacados da análise de causalidade. O primeiro está relacionado com a capacidade de reconstrução das leis de interação fenomenológicas dos processos, ou seja, de modo genérico é possível visualizar o diagrama do processo no mapa causal. O segundo aspecto destacado é a capacidade de rastrear a causa raiz das falhas via reconstrução causal das conexões entre variáveis afetadas pela falhas.

Por fim, foram apresentados detalhes sobre o uso da equação de Fokker-Planck para a reconstrução da matriz Jacobiana sob a abordagem de sistemas dinâmicos estocásticos representados por séries temporais.

Capítulo 5

Resultados e Discussões

No presente capítulo apresenta-se os principais resultados deste trabalho. Na subseção D.1.1 foi introduzido o atrator de Rossler e obtidas todas as medidas invariantes por caracterização analítica, utilizando as técnicas de estabilidade local, análise da dinâmica discreta por mapas de Poincaré, expoentes de Lyapunov, análise de estabilidade pela matriz J e análise de recorrências. Na subseção D.1.2 apresentam-se as mesmas análises mas para o atrator de Lorenz.

Na subseção 5.1.1 é apresentado o problema de monitoramento real a ser tratado neste trabalho.

Por outra parte, na Seção 5.3 são mostrados os resultados da caracterização dos sistemas dinâmicos de referência usando a análise não linear de séries temporais. Adicionalmente são apresentados os resultados desta metodologia como ferramenta de monitoramento aplicado no caso real.

Finalmente, os resultados de reconstrução causal são apresentados na Seção 5.5 para um caso Benchmark (Processo Tennessee-Eastman) e o caso de estudo real considerado neste trabalho.

5.1 Casos de estudo

5.1.1 Estação de monitoramento da Petrobras

Fazenda Alegre é um campo de óleo e gás que opera desde 1996, localizado numa região da bacia do Espírito Santo no estado homônimo, aproximadamente a $25km$ ao sul da cidade de São Mateus. A estação de monitoramento EFAL (Estação Fazenda Alegre) é composta por quatro estações satélites distribuídas ao longo do campo. A

estação possui uma capacidade nominal de processamento de óleo de $7800m^3/dia$ e uma capacidade de compressão de gás de $45Mm^3/dia$.

O processo é descrito na Figura 5.1, onde operam constantemente três estações de monitoramento fiscal (duas estações de monitoramento de gás e uma de óleo). Inicialmente, uma corrente de petróleo é recebida e distribuída pelos *manifolds* de produção e teste para as respectivas unidades de processamento. A corrente de petróleo é separada num separador horizontal, produzindo gás, mistura de óleo e correntes de resíduo. Depois, as correntes de gás entram ao separador vertical de gás-condensado, obtendo uma corrente de gás purificado e uma corrente residual que é disposta na caixa de resíduos (API-box). A corrente de saída de gás do separador gás-condensado de teste é conduzida à primeira estação de medidores fiscais, onde são obtidas as seguintes informações da corrente:

- Vazão instantânea
- Pressão diferencial
- Pressão estática
- Temperatura

A corrente de gás de entrada no separador de produção gás-condensado é composto pela corrente de saída de gás do separador primário, uma corrente de gás do *manifold* e uma corrente de saída de gás do separador teste de gás-condensado. A corrente de saída purificada é medida na segunda estação de medidores fiscais, onde são obtidas as mesmas propriedades listadas acima.

A mistura de óleo do separador primário é conduzida a uma etapa de lavagem. Posteriormente, uma corrente desemulsificadora é injetada no óleo e depois separada num separador eletrostático. A corrente produzida nesta etapa é resfriada e medida na terceira estação de medidores fiscais, medindo vazão, pressão, temperatura, BSW e densidade relativa. Por fim, as correntes residuais aquosas são conduzidas para a unidade de tratamento de água.

As medidas são coletadas constantemente e os dados são ordenados e armazenados por um sistema *PI*, resultando num conjunto de dados composto por 112 variáveis (apresentadas na Tabela 5.1)

Tabela 5.1: Tipos de variáveis medidas na estação fiscal de monitoramento

Tipo de variable	Número de variáveis	Unidades
Vazões	40	m^3/h
Temperaturas	11	C
Sinal de Controlador	2	%
Diferencial de pressão	8	kPa
Pressão	21	kPa
Nível	2	m
Densidade relativa	9	-
BSW	6	%
Corrente elétrica	9	mA
Abertura de válvula	4	%

5.1.1.1 Descrição de falhas

Os medidores fiscais da estação são constantemente supervisionados e regulados de acordo aos estatutos da Agencia Nacional do Petróleo (ANP). As políticas da ANP concernentes à falhas nos medidores fiscais providencia protocolos para a notificação de eventos de falha. Essas anormalidades podem ser detectadas durante a operação por monitoramento ou calibração de instrumentos, e são classificadas como:

- Erro de configuração
- Impossibilidade de calibração
- Alta discrepância entre calibrações
- Ausência de medição
- BSW maior do que o valor permitido
- Medida incorreta
- Falha no arquivo xml
- Outros

A Figura 5.2 apresenta as séries temporais da vazão de gás e temperatura de gás na segunda estação de medição fiscal durante um período com falha. O relato do operador classificou a falha como do tipo medida incorreta, uma vez que os valores de temperatura foram menores do que a média histórica. A série temporal

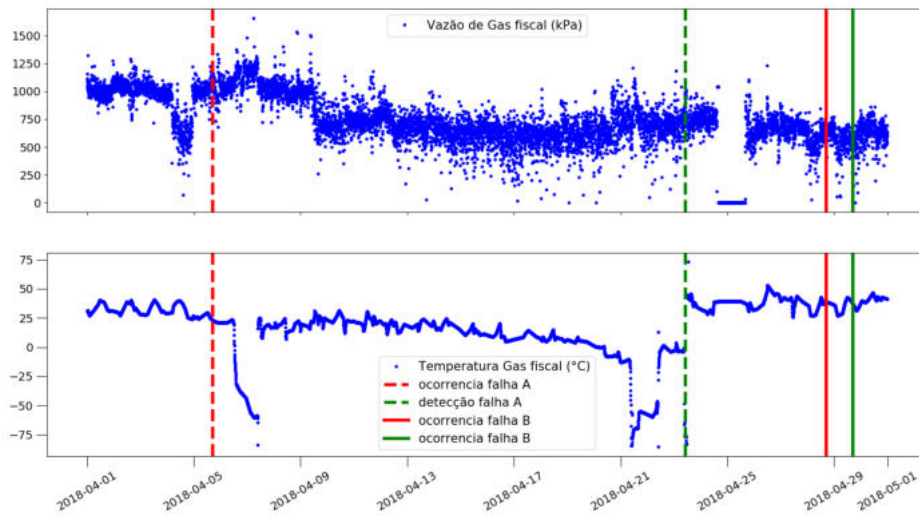


Figura 5.2: Séries temporais de temperatura e vazão de gás fiscal num período com duas falhas. As linhas vermelhas representam o evento de ocorrência, enquanto as linhas verdes representam o evento de detecção. Por sua vez, as linhas sólidas correspondem ao evento de falha B e as linhas tracejadas ao evento de falha A

de temperatura apresenta quedas súbitas em tempos próximos aos eventos de falha (representados pelas linhas vermelhas). Além disso, a medição da vazão de gás usa uma correção pelos efeitos de temperatura, daí que os erros próprios do medidor de temperatura são propagados à série temporal de vazão de gás. Os eventos de detecção (linhas verdes) mostram quando as falhas foram notificadas visualmente pelos operadores. Tomando esses pontos como referência, são determinados os eventos de ocorrência de falhas por inspeção visual das cartas de controle. Após a detecção, os relatos são enviados à ANP de acordo aos prazos estabelecidos. O tempo entre as ocorrências e as detecções são uma medida direta da eficiência do sistema de monitoramento e diagnóstico de falhas.

Note-se que esse intervalos de tempo podem ser maiores que 15 dias. No entanto, a ANP estabelece que estações de medição fiscal que operam em falha por mais de 240 horas devem ser interrompidas, fechadas ou substituídas. Dessa forma, uma falha deve ser considerada como uma causa potencial de parada não programada no processo. Ademais, a ANP impõe sanções econômicas por falhas com essa duração.

Dadas as características descritas acima, a metodologia de monitoramento e detecção de falhas neste processo deve ser capaz de executar o diagnóstico de falhas e recuperar o processo no máximo 240 horas após o início da falha.

Outras implicações relacionadas a falhas no processos podem ser consideradas; quando uma falha no medidor fiscal acontece, a estimação da medida nesse perío-

dos de falha é obtida usando os dados coletados previamente pelo medidor fiscal, balanços de massa ou pela medição direta do operador. A ANP estabelece uma metodologia para determinar as medidas corruptas por um evento de falha (figura 5.3)

O uso dessas metodologias para a estimação desses valores de medidas pode causar consequências drásticas na confiabilidade da cadeia de custódia. No caso em que os valores são sobreestimados é gerado um incremento de massa artificial de óleo e gás e como consequência valores inexatos de produção são propagados ao longo de futuras etapas na cadeia de custódia, até que as discrepâncias sejam percebidas por uma outra estação de medição. Daí, a diferença de massas é carregada dentro de um índice de perdas. Por outra parte, quando os valores são subestimados, as discrepâncias detectadas posteriormente são assumidas como permissíveis. Outro aspecto relevante é relacionado com o critério empregado nessa estimação, uma vez que é considerada uma média sobre os dados coletados antes da falha. No entanto, e como foi mencionado acima, as datas de ocorrência podem ser reportadas com alta imprecisão (por exemplo, a falha B da Figura 5.2), levando a casos em que o intervalo de dias usado para a estimação do valor perdido ou corrupto está em condição de falha também.



Figura 5.3: Metodologia de estimação de valores perdidos ou corruptos durante falha - ANP [70].

5.1.2 Poço de produção offshore

As instalações upstream de produção de petróleo e gás natural em ambientes offshore consistem em sistemas tubing-pipeline-riser comumente empregados para o transporte do fluido multifásico desde o reservatório para as plantas de processamento em superfície. Particularmente, a tecnologia de injeção gás-lift corresponde ao método de elevação artificial mais utilizado em poços de produção offshore devido à robustez e simplicidade [208].

Um fenômeno de padrão de escoamento muito indesejável e comumente obser-

vado em sistemas de produção offshore são as golfadas (*slugging*). Esse fenômeno se caracteriza pelo grande acúmulo de líquido na seção do *riser* e *pipeline*, resultando no bloqueio periódico do fluxo de gás. Consequentemente, a compressão da fase gasosa e o aumento da pressão podem, eventualmente, empurrar uma grande massa líquida para cima do *riser*, resultando em grandes oscilações de pressão e fluxo [68].

O surgimento de *slugging* potencialmente conduz a situações prejudiciais para os equipamentos da plataforma, como transbordamento de líquido em separadores, instabilidades de carga em compressores de gás e bombas, aumento de corrosão, fadiga mecânica devido a impactos de fluxo recorrentes, queda de produção de processo e até mesmo desligamento não programados de planta (*shutdown*), o que pode causar prejuízos econômicos e operação não segura do processo [1, 104, 138].

A dinâmica oscilatória do *slugging* representa o caráter instável desse padrão de fluxo que surge frequentemente como consequência da estrutura geométrica do sistema de produção *pipeline-riser* [263]; baixa produção de gases e líquidos associada ao estágio de vida de produção do poço [240]; e determinadas condições operacionais de injeção de gas-lift [217].

O *slugging* severo é distinguido pelo surgimento de um comportamento dinâmico oscilatório auto-sustentado [68, 139, 253], comumente observado através de medições de pressão. Matematicamente, esse comportamento dinâmico é caracterizado pela bifurcação de Hopf, que ocorre quando um sistema dinâmico perde estabilidade devido a mudanças em uma variável independente (parâmetro de bifurcação), indicando o nascimento de um ciclo limite [166]. Particularmente, nos sistemas de produção offshore têm sido identificado como parâmetros de bifurcação variáveis do processo como abertura de válvula Choke e vazão de gás injetado.

5.1.2.1 Modelagem matemática

O presente trabalho considera o estudo das dinâmicas oscilatórias em sistemas de produção offshore representadas pelo modelo FOWM (Fast Offshore Well Model) [66].

O FOWM foi desenvolvido com base na arquitetura completa do sistema de produção mostrado na Figura 5.4, que é composto por quatro subsistemas: Reservatório, Anular, *Tubbing* e *Flowline-Riser*. As equações que descrevem o modelo são apresentadas no Apêndice E.

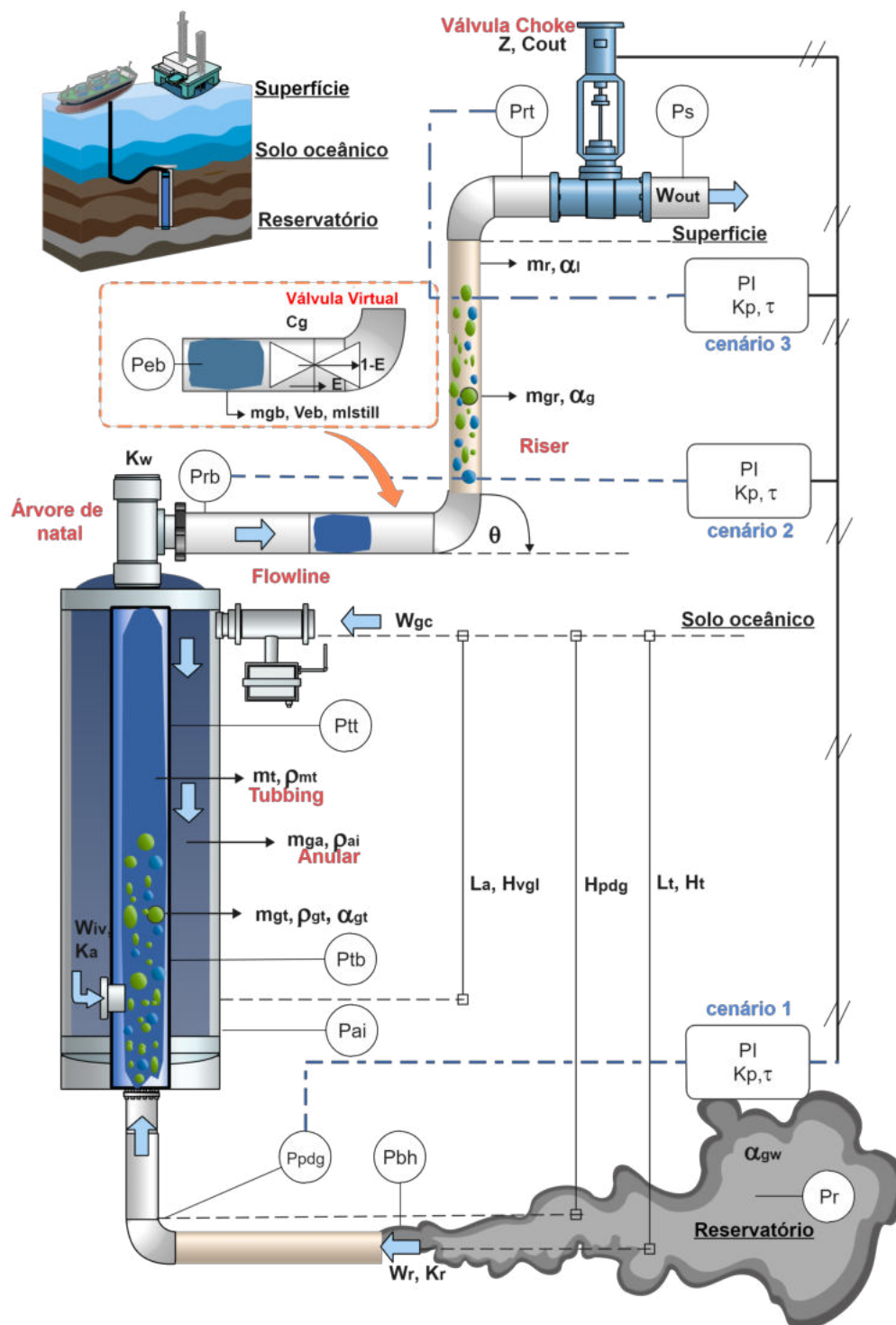


Figura 5.4: Sistema de produção offshore de petróleo e gás com configuração de controlador PI

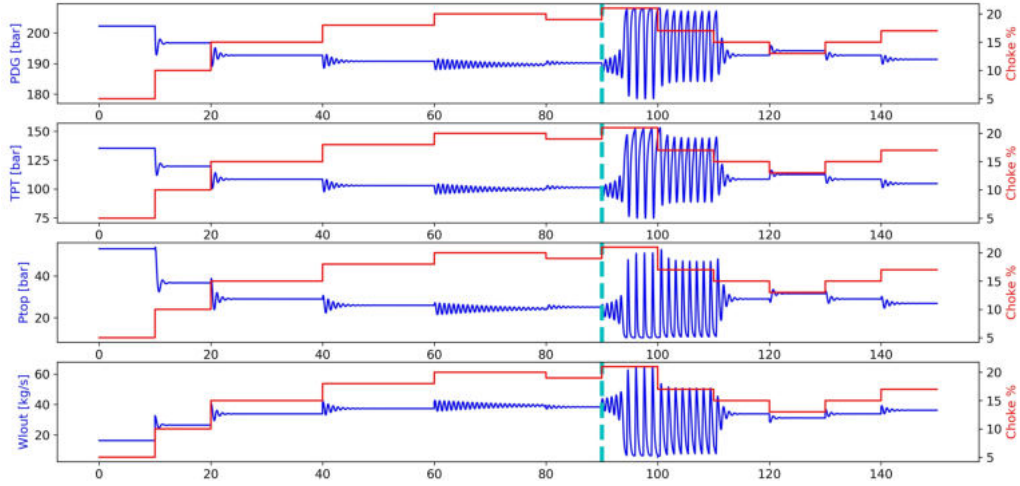


Figura 5.5: Simulação dinâmica de um poço de produção offshore. A linha vertical nota o surgimento de uma bifurcação de Hopf, i.e. o surgimento de golfadas no sistema.

5.1.2.2 Descrição do problema

A Figura 5.5 corresponde a uma simulação dinâmica obtida via modelagem matemática apresentada na Seção E.1. Observam-se as respostas de três pressões do sistema (P_{pdg} , P_{rb} e P_{rt} como mostrado na Figura 5.4) e a vazão de produção de óleo Wl_{out} em função de diferentes regimes de abertura de válvula Choke z .

A simulação descreve o procedimento de uma operação real, onde inicialmente o processo é inicializado em baixas aberturas de válvula Choke (i.e. baixa produtividade e altas pressões) e posteriormente, de forma gradativa, a válvula Choke é aberta evitando o surgimento de oscilações. Nota-se que até $t = 60h$ onde $z < 20\%$, as oscilações se amortizavam com o decorrer do tempo. No entanto, após levar a operação a $z = 21\%$ (em $t = 90h$) o processo apresenta oscilações de amplitude muito maior, caracterizando um regime de golfada severa. Observá-se que, embora o processo retorna a patamares de abertura de válvula Choke menores que o crítico, o sistema continua oscilando, e essa dinâmica só é completamente amortizada após reduções drásticas na abertura de válvula Choke $t \approx 115$, o que caracteriza perda de produção.

Adicionalmente, pode-se entender que o surgimento de golfadas caracteriza o limite máximo permitido de operação segura do processo, ou seja, o ponto de bifurcação de Hopf do sistema caracteriza o limite máximo de operabilidade e produção da planta. Dessa forma, a identificação e prognóstico do ponto de bifurcação nos processos de produção offshore resultam em tarefas imperativas para a definição de políticas de operação e projeto de plantas de produção offshore.

A Figura 5.6 corresponde a dados de operação real de um poço da Petrobras.

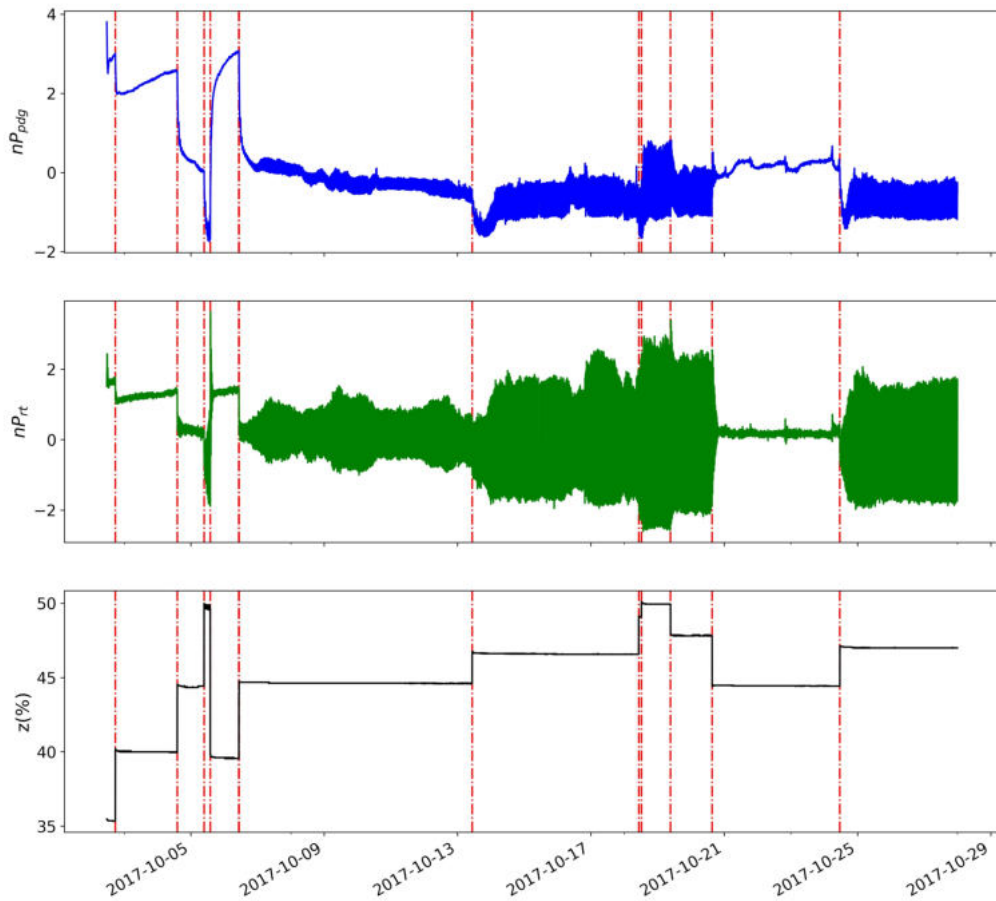


Figura 5.6: Dados de operação de um poço Petrobras com dinâmica de golfadas. As variáveis nP_{pdg} e nP_{rt} correspondem às pressões na PDG e no topo do *riser*. As linhas verticais vermelhas denotam as mudanças de operação em relação à abertura de válvula Choke z .

Observam-se as respostas das pressões na PDG e no topo do *riser* (ver Figura 5.4) em função de variações na válvula Choke. Nota-se que o regime oscilatório auto-sustentado que caracteriza o fenômeno de *slugging* surge em posições de válvula $z > 45\%$ e a amplitude das oscilações aumenta com a abertura da válvula.

O conjunto de dados deste caso de estudo contém aproximadamente 3 anos de operação, em que medições das variáveis listadas na Tabela 5.2 são coletadas com frequência de 1 minuto. Destaca-se a presença de medidas ao longo do *riser* como P_{rb} (ou TPT), P_{rt} e P_{pdg} que configuram a medição feita no nível mais profundo no sistema.

Tabela 5.2: Tipos de variáveis medidas na plataforma de produção offshore

Tipo de variável	Número de variáveis	Unidades
Vazões	5	m^3/h
Temperaturas	6	C
Pressões	8	bar
Choke	1	%
BSW	1	%
Abertura de válvulas	26	%

Por outra parte, diferentemente do caso apresentado na Secção 5.1.1, no surgimento de golfadas não há registro de falhas ou eventos por parte do operador, embora seja um comportamento indesejável e nocivo ao processo. Assim, a identificação de períodos com dinâmica golfante cabe ao próprio analista de dados.

5.2 Caracterização dinâmica do modelo FOWM

Conforme apresentado na Secção 4.1.1 a estratégia para a caracterização de sistemas dinâmicos reside na obtenção das métricas invariantes [61]. A Secção D.1 contém os resultados de caracterização dinâmica dos modelos benchmark, permitindo estabelecer uma referência e validar as diversas metodologias numéricas implementadas neste trabalho.

5.2.1 Caracterização de dinâmica periódica

De acordo com DIEHL *et al.* [66], o comportamento dinâmico oscilatório produzido pelo fenômeno de escoamento *slugging* no sistema de produção offshore é represen-

tado pelo modelo FOWM (Apêndice E). Dessa forma, o sistema dinâmico contínuo é constituído pelas Equações E.1, E.2, E.3, E.4, E.5 e E.6; e os parâmetros do sistema e de ajuste definidos nas Tabelas E.1 e E.2.

A simulação dinâmica do modelo FOWM para uma sequência de valores de abertura de válvula Choke z permite identificar a evolução dos comportamentos dinâmicos em função do dito parâmetro. As Figuras 5.7, 5.8, 5.9 apresentam as respostas dinâmicas do modelo em função das perturbações tipo degrau no parâmetro z . Observa-se que após um valor crítico de abertura da Choke $z \approx 68\%$ (ponto de bifurcação de Hopf) as respostas deixam de ser estacionárias-estáveis e passam a ter um caráter oscilatório-periódico.

Outra característica importante corresponde ao surgimento de resposta inversa na dinâmica de P_{rt} . O termo de resposta inversa refere-se ao fenômeno onde a resposta inicial de uma variável está em direção oposta à resposta do estado estacionário, o que traz limitações drásticas nas implementações de controle automático retroalimentado [254]. É importante notar que, embora as variáveis de estado do modelo FOWM correspondem às massas multifásicas do sistema, a saída do modelo é expressa em termos de pressão, visando à comparação com as medidas coletadas no processo.

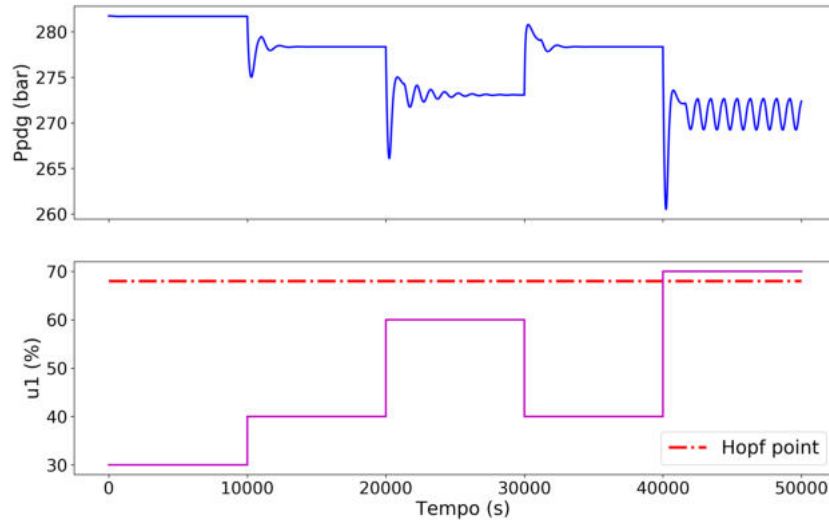


Figura 5.7: Respostas da pressão P_{pdg} em função do parâmetro z

5.2.1.1 Estabilidade local - dinâmica periódica

Conforme descrito nas Seções 3.1.2, 3.1.3 e 4.1.1.1 foi determinada a estabilidade local do ponto de equilíbrio x_q mais próximo à base de atração do modelo FOWM, numa condição oscilatória em relação à abertura da válvula Choke ($u1 = 80\%$).

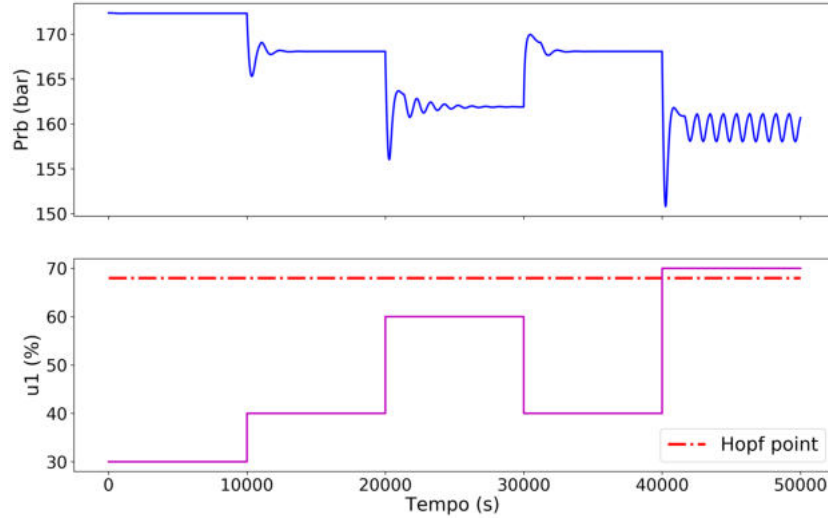


Figura 5.8: Respostas da pressão P_{rb} em função do parâmetro z .

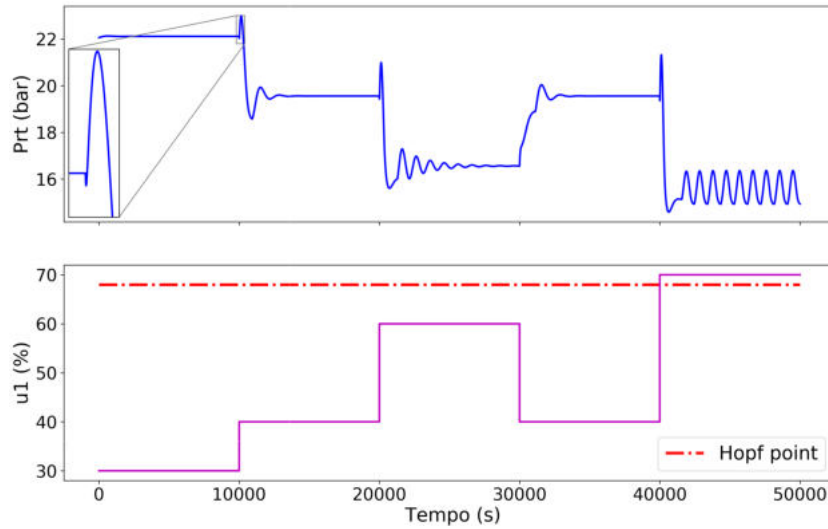


Figura 5.9: Respostas da pressão P_{rt} em função do parâmetro z . Em zoom a resposta inversa.

A análise de valores e vetores característicos da matriz de estabilidade A avaliada no ponto de equilíbrio único x_{eq} na Tabela 5.3 mostrou a existência de um par complexo conjugado com parte real positiva, indicando a hiperbolicidade do equilíbrio (tipo sela) e a própria característica instável do ponto de equilíbrio.

A Figura 5.10 mostra o espaço de fases do sistema dinâmico. Nota-se que o ponto de equilíbrio é concêntrico em relação ao ciclo atrator e às trajetórias que partem do ponto de equilíbrio convergem para essa órbita fechada. Além disso, foram plotadas as componentes reais e imaginárias do vetor característico mais representativo, sendo possível observar a propriedade de ortogonalidade entre as partes.

Tabela 5.3: Ponto de equilíbrio, valores característicos de estabilidade local, ponto periódico e expoentes de Floquet do comportamento periódico FOWM.

Invariante Componente	1	2	3	4	5	6
x_{eq}	6107.069	592.166	17874.758	2263.951	731.495	22080.469
λ_i	-1.845	-2.797	$-9.877 \cdot 10^{-2}$	$-1.015 \cdot 10^{-2}$	$9.16 \cdot 10^{-4} + 0.0073j$	$9.16 \cdot 10^{-4} - 0.0073j$
x_q	6175.347	585.024	18317.470	2279.647	746.113	22019.041
$\Lambda^{(j)}$	$-2.8^{-1} + 2.9j$	$-2.8^{-1} - 2.9j$	1.4^{-5}	9.0^{-14}	5.4^{-15}	2.6^{-15}

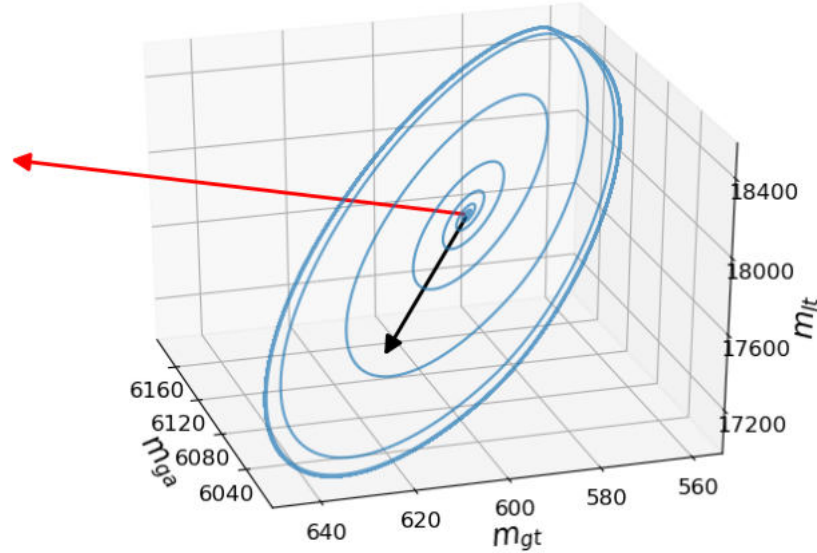


Figura 5.10: Análise de estabilidade do sistema FOWM em regime oscilatório-periódico. A seta preta corresponde à componente real do primeiro valor característico ($Re(\lambda_x)$) e a seta vermelha ortogonal corresponde à componente imaginária do mesmo valor característico ($Im(\lambda_x)$)

5.2.1.2 Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré

A análise de dinâmica discreta segue os fundamentos e metodologias apresentados nas Seções 4.1.1.2, 3.1.4 e 4.1.1.2. Neste trabalho, as secções de Poincaré estudadas foram todas definidas como secções lineares, portanto chamadas de planos de Poincaré.

A Figura apresenta a trajetória do sistema dinâmico FOWM. A secção de Poincaré foi definida conforme o plano com maior número de interseções que satisfazem as condições de transversalidade e orientação, consistindo em um plano em z com orientação θ em relação ao plano $x - y$. O plano foi rotacionado em torno do eixo z , usando a matriz de rotação, de forma que o ângulo entre o plano de Poincaré e o eixo x correspondeu a $\theta = 0.031\pi$. Os pontos de Poincaré $\hat{x}$ (vermelhos) foram obtidos como os pontos do espaço de fases $x \in \mathcal{M}$ que satisfaziam $\mathcal{U}(\hat{x}) = 0$.

Nota-se que numa órbita livre de transiente, o ciclo limite seria intersectado

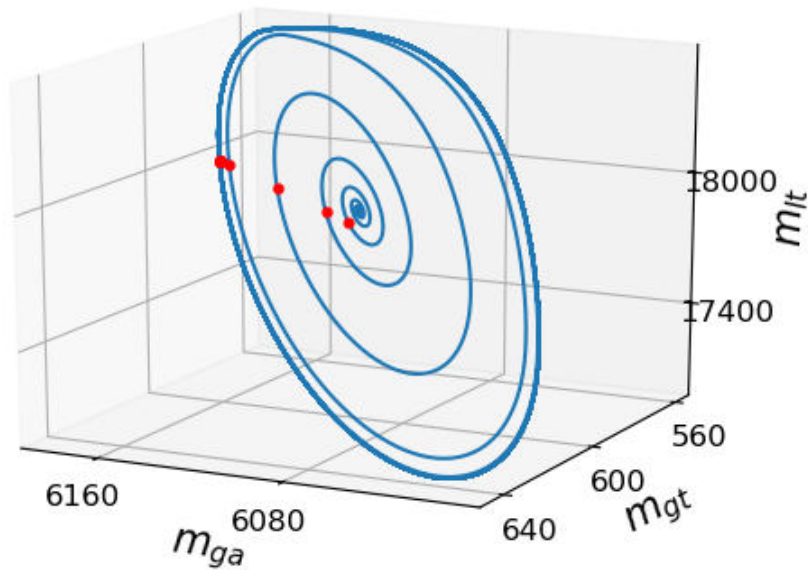


Figura 5.11: Trajetória do FOWM (azul) com os pontos de Poincaré (vermelho) que intersectam o plano sobre o eixo z

numa única vez, obtendo no mapa de Poincaré um único ponto, caracterizando dinâmicas oscilatórias de período único.

Uma animação sobre o funcionamento da metodologia do cálculo de secções de Poincaré em função da definição do plano é apresentada no material suplementar¹.

5.2.1.3 Análise de transporte de fluxo em trajetórias

Os cálculos da matriz Jacobiana foram realizados conforme explicado na Seções 3.1.2.2 e 4.1.1.3.

A análise de estabilidade de uma trajetória no sistema dinâmico foi realizada pela avaliação dos valores característicos ou multiplicadores da matriz Jacobiana J para uma trajetória que passa pelo ponto de equilíbrio x_{eq} mais próximo à região de atração. Considere-se a órbita periódica simples (de único período) do fluxo do sistema FOWM para um ponto periódico x_p e período de ciclo $T = 1100s$ apresentada na Figura 5.12. As setas representam os três vetores característicos da matriz Jacobiana projetados no espaço tridimensional.

Observa-se a existência de mais de um expoente de Floquet marginal na trajetória do sistema FOWM. De forma gráfica, dita marginalidade não é evidente, uma vez que o sistema possui naturalmente seis dimensões e é representado num espaço tridimensional. Na Tabela 5.10 apresentam-se os correspondentes expoentes de estabilidade (valores característicos da matriz J) e o ponto periódico x_p .

¹A versão digital apresenta-se em 

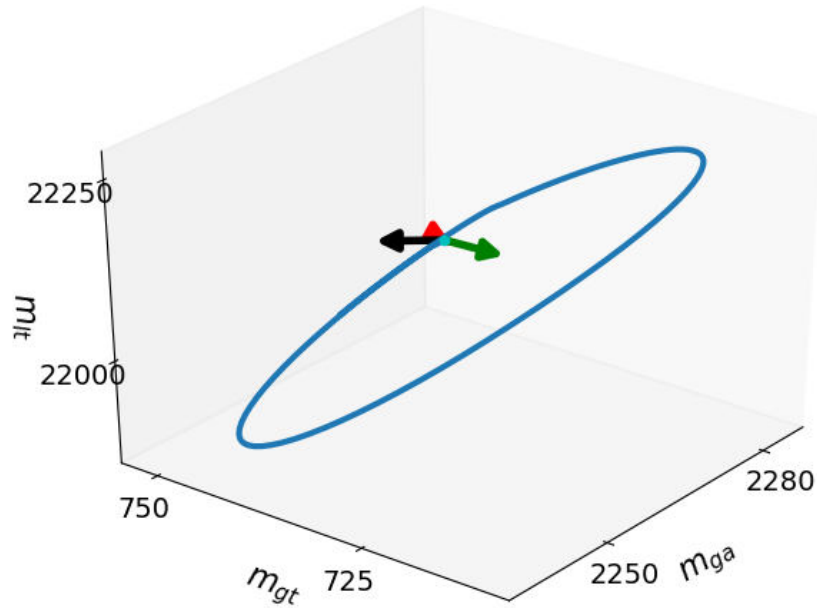


Figura 5.12: Vetores característicos da matriz Jacobiana numa órbita periódica $f^t(x_p)$ do sistema FOWM

Particularmente no caso do sistema FOWM, podem ser observados vários expoentes de Floquet iguais a zero sendo um deles o expoente marginal. Considerando o critério de estabilidade de ciclos, pode-se classificar a trajetória periódica como estável, uma vez que todos $|\Lambda_i| < 1$.

Uma animação mostrando a evolução da vizinhança deformada ao longo do fluxo é apresentada no material suplementar².

5.2.1.4 Análise de bifurcações

O estudo de mudanças dinâmicas estruturais e topológicas nos sistemas dinâmicos segue a metodologia de análise de bifurcações, que visa identificar a influência de um dado parâmetro na resposta de um sistema dinâmico. Em particular, o diagrama de bifurcação apresenta a observação estroboscópica da resposta do sistema a partir de uma variação lenta de um dado parâmetro. Desta forma, tem-se uma visão global sobre os efeitos da variação deste parâmetro na resposta do sistema.

Para construção dos diagramas de bifurcação, foi considerada uma única condição inicial para dois estágios de varredura, correspondentes aos máximos e mínimos das trajetórias dinâmicas. Os pontos relacionados ao transiente nos diagramas foram eliminados sob suposição de que, alcançado 60% do vetor temporal na integração numérica, o comportamento dinâmico corresponde à expressão do equilíbrio

²A versão digital apresenta-se em 

Tabela 5.4: Intervalos de parâmetros de bifurcação do grupo A

Parâmetro	Descrição	Intervalo recomendado
$z(\%)$	Abertura da válvula Choke	0-100
$u2(Sm^3/d)$	Vazão de gas lift	0-300.000
$P_s(bar)$	Pressão de descarga do poço no topside	5-20

correspondente. Os ramos de equilíbrio instáveis foram construídos empregando um estágio adicional algorítmico de soluções usando o método de Newton-Raphson [238].

Tal como descrito no Apêndice E, o modelo FOWM é constituído por parâmetros de diversas naturezas, os quais podem ser classificados em três grupos:

- Grupo A: Parâmetros de dinâmica rápida: mudam ao longo da operação do processo em tempos típicos na escala de minutos;
- Grupo B: Parâmetros de dinâmica lenta: mudam ao longo da operação do processo em tempos típicos na escala de semanas;
- Grupo C: Parâmetros com relação à arquitetura submarina do poço (refere-se às linhas de transporte dos fluidos e, uma vez definidos, não mudam mais ao longo do tempo de vida útil do campo).

Particularmente, a análise sobre os parâmetros do grupo A (Tabela 5.4) é importante, uma vez que estes correspondem a condições de operação mais viáveis de manipulação na planta real e que são usadas tipicamente como variáveis manipuladas em sistemas de controle automático.

A Figura 5.13 mostra o diagrama de bifurcação do sistema FOWM em relação ao parâmetro z (abertura de válvula %). Nota-se o surgimento de uma bifurcação (aparentemente de Hopf) em $z \approx 68\%$. Nota-se que antes da bifurcação os ramos de equilíbrios instável, máximos e mínimos coincidem. Após a bifurcação acontecer, as amplitudes de oscilação (separação entre ramos máximos e mínimos) tendem a aumentar com o valor do parâmetro.

Analogamente, na Figura 5.14, apresenta-se o diagrama de bifurcação em relação ao parâmetro $u2$, mostrando a existência de uma bifurcação para um valor $u2 \approx 3.0^5(Sm^3/d)$. Por outra parte, não foram encontradas bifurcações dentro da faixa definida para o parâmetro P_s .

A análise e identificação de singularidades nos pontos de equilíbrio é frequentemente realizada com o auxílio de técnicas de continuação paramétrica. Para os

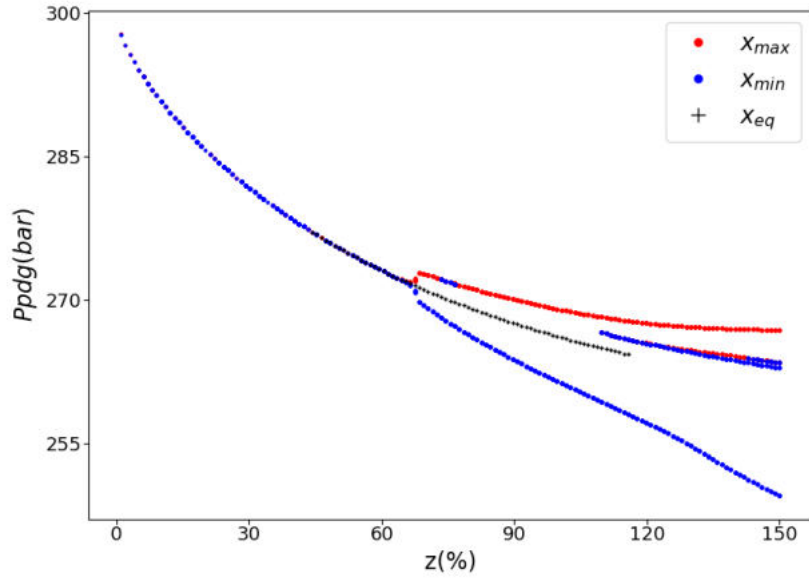


Figura 5.13: Diagrama de bifurcação via simulação dinâmica para o sistema FOWM, em respeito a z . Ramos de máximos (vermelho), ramos de mínimos (azul) e equilíbrios instáveis (preto)

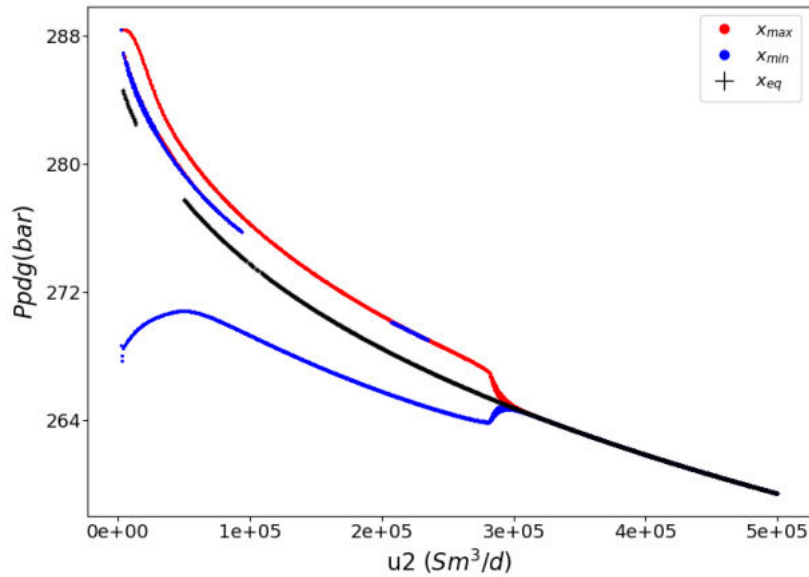


Figura 5.14: Diagrama de bifurcação via simulação dinâmica para o sistema FOWM, em respeito a u_2 . Ramos de máximos (vermelho), ramos de mínimos (azul) e equilíbrios instáveis (preto)

propósitos deste trabalho, esta técnica permite identificar bifurcações de codimensão 1 e 2, comportamentos estáveis e instáveis do sistema dinâmico em função de um ou mais parâmetros do modelo. Além disso, a continuação paramétrica permite validar os resultados anteriores e verificar a natureza da bifurcação.

Na Figura 5.15 apresenta-se a curva de equilíbrio obtida via continuação paramétrica usando o software PyCont, sendo que a construção deste diagrama implica

no fornecimento de um equilíbrio do sistema como valor inicial. Observa-se que o procedimento de continuação paramétrica identificou uma singularidade H , correspondendo a uma bifurcação de Hopf. Nota-se que a estabilidade dos equilíbrios muda após o surgimento da bifurcação de Hopf.

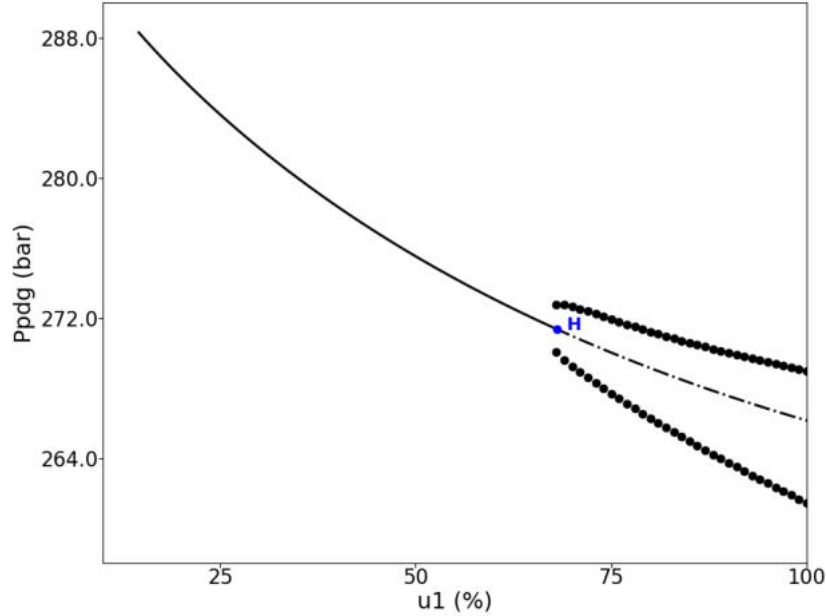


Figura 5.15: Diagrama de bifurcação via continuação paramétrica para o sistema FOWM, em respeito a z . Ramos de máximos e de mínimos (pontos pretos), equilíbrios estáveis (linha continua preta) e equilíbrios instáveis (linha intermitente preta)

Uma animação mostrando a distribuição das bifurcações de Hopf no espaço z - u_2 , período e amplitude da oscilação é apresentada no material suplementar³.

5.2.1.5 Métricas invariantes: Expoentes de Lyapunov

Nesta subseção foram avaliados os espectros de Lyapunov, os quais contêm os d expoentes de Lyapunov do sistema em estudo. A metodologia empregada para calcular os espectros de Lyapunov foi explicada na Seções 4.1.1.4 e 3.1.6.1.

No caso do sistema FOWM o espectro de Lyapunov é constituído por $d = 6$ expoentes de Lyapunov. A Figura 5.16 apresenta os expoentes de Lyapunov que descrevem as mudanças dinâmicas observadas ao longo do diagrama de bifurcação. Em tese todos os expoentes devem ser menores ou iguais a zero para estas órbitas, mas problemas numéricos devidos à rigidez do sistema dinâmico interferem justamente no intervalo $z = (60, 120)$ onde as oscilações acontecem. No entanto, mostram uma tendência sobre a estabilidade (importante na antecipação da bifurcação em si),

³A versão digital apresenta-se em 

caracterizando um comportamento dos expoentes de Lyapunov conforme se aproximam do ponto Hopf.

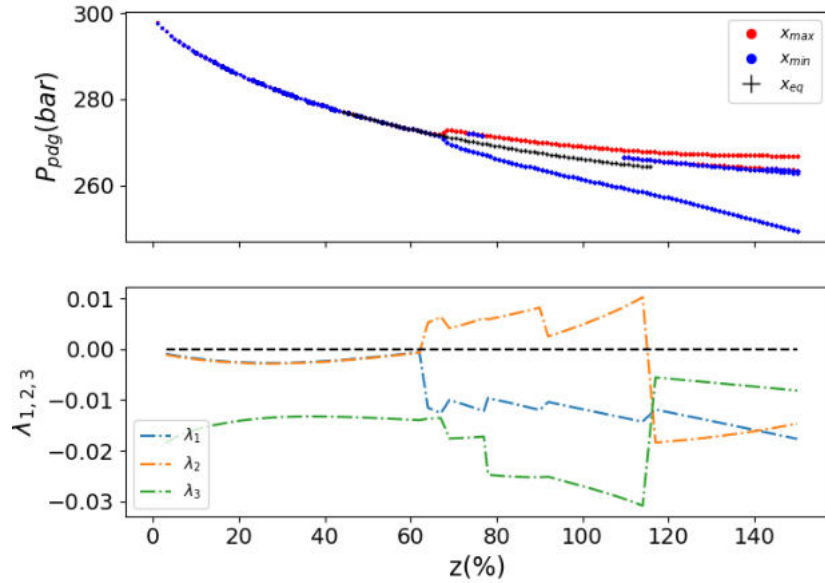


Figura 5.16: Diagrama de bifurcação para o sistema FOWM e sua relação com os 3 maiores expoentes de Lyapunov

5.2.1.6 Métricas invariantes: Entropia de Shannon e Dimensão de Correlação

Conforme discutido nas Secções 3.2.1.9 e 3.2.1.8 outras métricas invariantes importantes na caracterização dos sistemas dinâmicos são a entropia de Shannon H e a dimensão de correlação D_2 , uma vez que medem a perda de informação e, por consequência, a previsibilidade da evolução temporal de uma trajetória.

Observa-se que a dimensão de correlação e entropia de Shannon (Figura 5.17 e Figura 5.18) descrevem as mudanças dinâmicas observadas ao longo do diagrama de bifurcação. Observa-se um patamar inferior relacionado à faixa paramétrica estável (antes da bifurcação de Hopf em $z \approx 68\%$); outro patamar surge a partir da bifurcação de Hopf. Nota-se que o comportamento segue uma tendência que permite antecipar a própria bifurcação de Hopf.

5.2.1.7 Métricas invariantes: Quantificação de recorrências

Visando à identificação de padrões de estacionariedade, intermitência e transitoriedade das trajetórias no espaço de fases, foram calculados os mapas de recorrências e métricas de quantificação de recorrências para a trajetória periódica do sistema FOWM ($z = 68\%$). As Secções 3.2.1.6 e D.1.1.5 apresentam a metodologia de cálculo

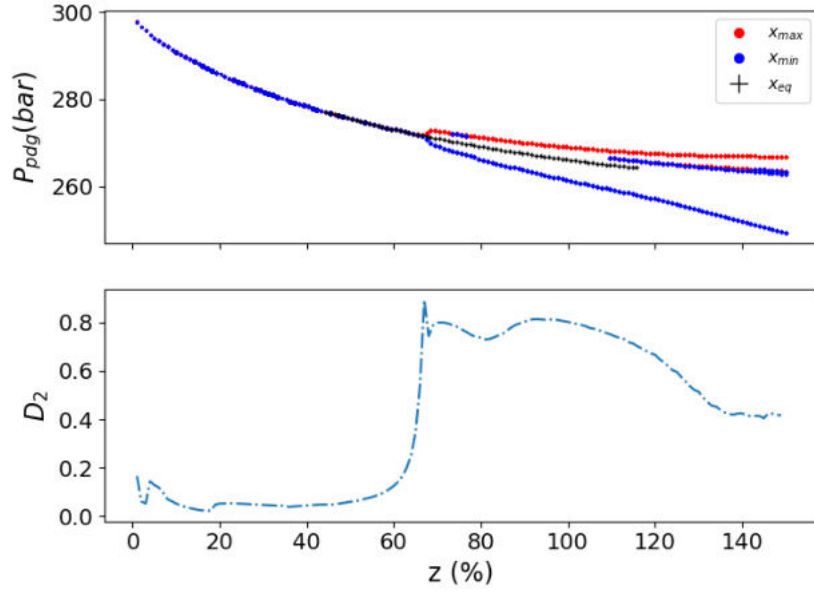


Figura 5.17: Diagrama de bifurcação e relação com a métrica D_2 para o sistema FOWM

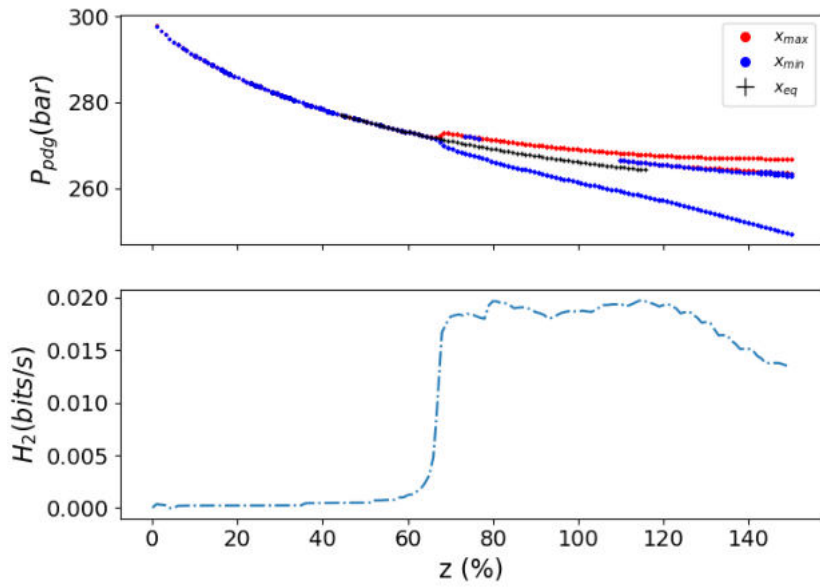


Figura 5.18: Diagrama de bifurcação e relação com a métrica H para o sistema FOWM

e aplicação da técnica nos sistemas dinâmicos Benchmark usados como referência neste trabalho.

A Figura 5.19 corresponde à análise de recorrências da órbita periódica do modelo FOWM. Observa-se um mapa não preenchido de recorrências, indicando não estacionariedade. O baixo comprimento das linhas verticais mostra que os estados mudam rapidamente. Por outra parte, o espaço de fases mostra um mapeamento da taxa de recorrência ao longo do fluxo, indicando quais são as regiões no espaço

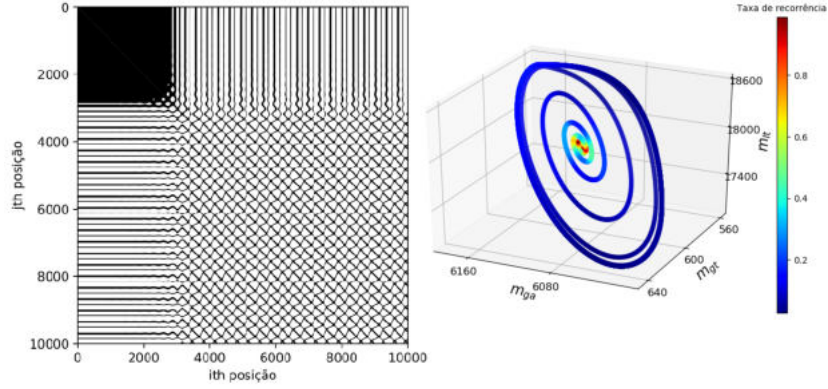


Figura 5.19: Recorrências no ciclo FOWM: (esquerda) mapa de recorrência correspondente à trajetória cíclica do fluxo do FOWM, onde os pontos pretos representam as recorrências; (direita) quantificação de recorrências usando as taxas de recorrência locais para cada região do espaço de fases. O raio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 25$

de fases mais recorrentes, sendo o ciclo limite estável uma variedade trivialmente recorrente. Uma análise adicional sobre as métricas de quantificação de recorrências são discutidas em torno dos sistemas dinâmicos benchmark na Seção D.1.1.5.

5.2.2 Efeito da dinâmica do controlador e caracterização de dinâmica caótica

No contexto do problema descrito na Seção 5.1.2, em particular, interessam estratégias de controle ativas, uma vez que as unidades de produção existentes já foram projetadas e instaladas, dificultando qualquer tipo de modificação mais incisiva sobre os equipamentos ou sobre o processo.

Além disso, é importante ressaltar outra restrição operacional relacionada à dificuldade ou impossibilidade da manipulação de vazão de gás lift em grande parte dos poços de produção, relegando toda estratégia de controle à abertura de válvula Choke como única variável manipulada. Dessa forma, qualquer esquema de controle automático será SISO, já que as pressões ao longo do sistema são dependentes entre si, conforme observado no modelo matemático. No Apêndice E e Figura 5.4 descreve-se o modelo matemático e cenários de controle quando considerada a presença de um controlador PI. As Equações E.1, E.2, E.3, E.4, E.5, E.6, E.30 e E.32 formam o sistema de ODEs que modela o sistema de produção com o controlador PI.

A principal motivação do uso de sistemas de controle para a eliminação de golfadas corresponde ao deslocamento de condições operacionais favoráveis ao surgimento do fenômeno e que permitam operar em condições de maior produtividade.

Conforme observado em [67], as golfadas severas tendem a aparecer em condições de abertura de choke elevada, as quais correspondem também às condições de maior produtividade do poço. Matematicamente, o sistema de controle tem como objetivo o deslocamento do ponto de bifurcação de Hopf, que é associado ao surgimento do comportamento oscilatório auto-sustentado.

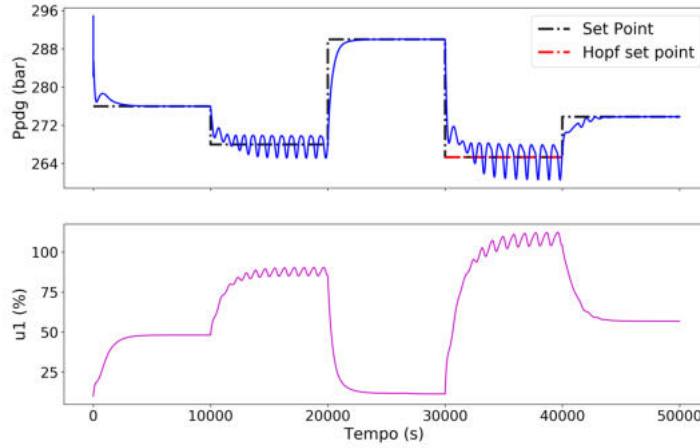


Figura 5.20: Desempenho do controlador PI no cenário de controle 1

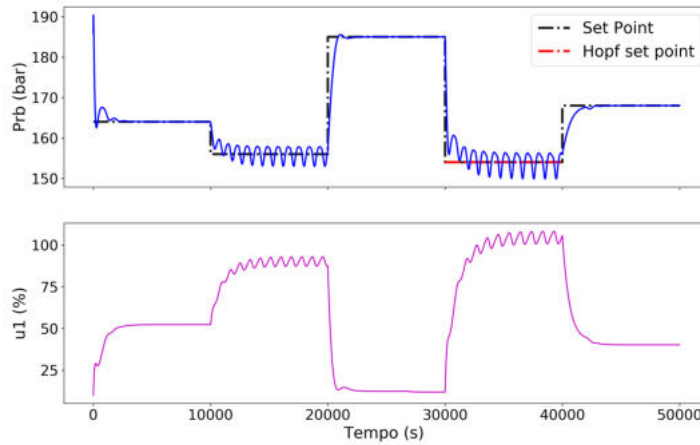


Figura 5.21: Desempenho do controlador PI no cenário de controle 2

Considerando um procedimento iterativo para determinar os valores das constantes do controlador K_p e τ . A Figura 5.20 refere-se ao cenário de controle 1, quando considerados 5 diferentes set points para a $Ppdg$ (bar) [276; 268; 290; 265; 274]. Observa-se que o sistema consegue atingir os valores de set points especificados adequadamente pelo processo de sintonia de controle aplicado. Nota-se, ainda, que o sistema consegue operar a aberturas de válvula superiores a 70%, o que indica que houve um deslocamento do ponto de bifurcação de Hopf.

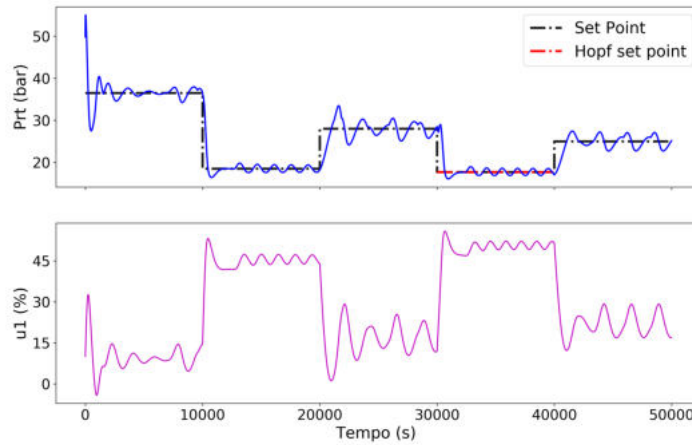


Figura 5.22: Desempenho do controlador PI no cenário de controle 3

A Figura 5.21 corresponde ao cenário de controle 2, onde foram considerados 5 diferentes set points para a $P_{rb}(TPT)$ (bar) [164; 156; 185; 154; 168] . De forma geral, as respostas do sistema conseguem atingir os set points impostos. No entanto, é importante destacar o surgimento do comportamento oscilatório para aberturas de válvula superiores a 80%, indicando a presença de uma bifurcação de Hopf no sistema de controle. Nota-se também que, em relação ao caso de malha aberta, onde o ponto de bifurcação era 68%, houve um deslocamento importante, permitindo operar o sistema em condições de maior produção. Além disso, nos cenários 1 e 2 de controle as respostas sempre apresentaram respostas diretas, nunca inversas.

Por outra parte, o cenário 3 mostra o comportamento do sistema de controle em relação à P_{rt} (bar) quando impostos os seguintes set points: [36.5; 18.5; 28; 17; 25] . É possível notar uma grande dificuldade para atingir as especificações de set points, ao tempo que ações abruptas na variável manipulada (abertura válvula choke) são presenciadas. Além disso, a presença do comportamento oscilatório é constante ao longo do perfil de controle. A principal causa deste comportamento é atribuída à resposta inversa observada na pressão P_{rt} , a qual gera mais não linearidades que são retroalimentadas inerentemente pelo sistema de controle ao sistema dinâmico. Na Figura 5.22 é apresentado o respectivo perfil temporal de controle para o cenário 3, que mostra as já mencionadas características.

O esquema de controle PI visa alterar ou suprimir as condições operacionais que levam à dinâmica de slugging. Para determinar quanto a localização da bifurcação Hopf (em termos de abertura da válvula de estrangulamento) é deslocada em função da sintonia do controlador, uma busca intensiva da bifurcação de Hopf usando continuações paramétricas foi realizada dentro do espaço paramétrico. Este procedimento foi aplicado para cada cenário de controle e a faixa de set-points foi

obtida diretamente dos valores de estado estacionário em $z = 100\%$ e $z = 5\%$ em regime de malha aberta.

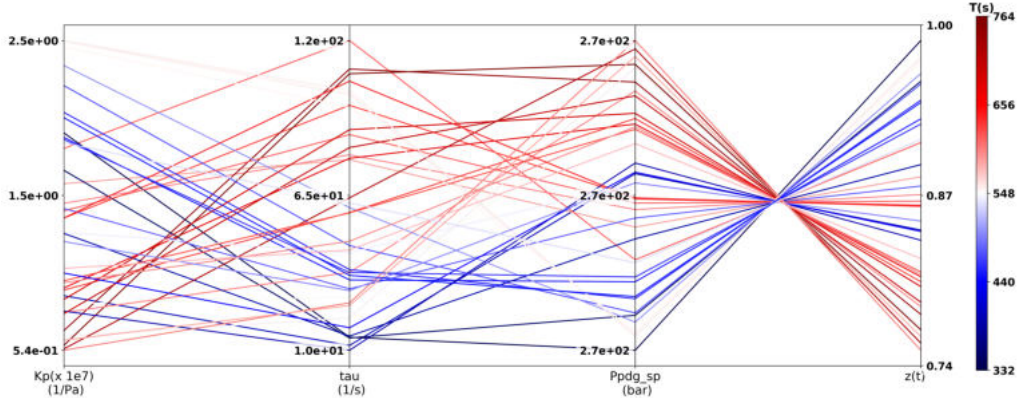


Figura 5.23: Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 1

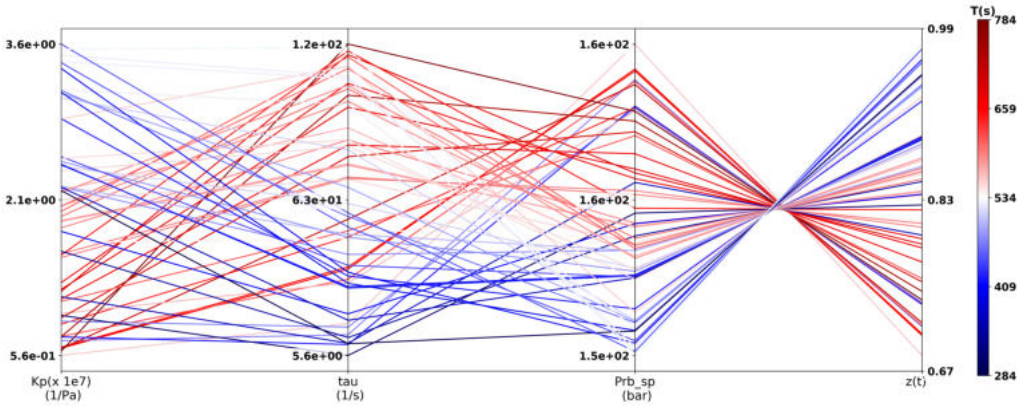


Figura 5.24: Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 2

As Figuras 5.23 e 5.24 mostram a distribuição de bifurcação de Hopf no espaço paramétrico definido pelas constantes de controle PI considerando os Cenários 1 e 2. Como se pode ver, o deslocamento do ponto de bifurcação de Hopf em frações altas de abertura da válvula $z(t)$ está relacionado a set-points de baixa pressão nos quais, em geral, podem ser alcançados usando valores de constantes proporcionais altos K_p e valores de constantes de tempo integral baixos τ . Além disso, quando consideradas ações de controle mínimas ou valores de K_p baixos, foram alcançados deslocamentos mínimos da bifurcação de Hopf, sendo $z(t) \approx 0,74$ e $z(t) \approx 0,68$ para os Cenários 1 e 2, respectivamente. Além disso, pode-se observar que ciclos limite com alto período T foram encontrados em valores baixos de abertura da válvula, mostrando o efeito das ações de controle do PI na frequência das oscilações.

Finalmente, a Figura 5.25 mostra a distribuição de bifurcação Hopf no espaço paramétrico de controle em relação ao Cenário 3. Como se pode ver, a maioria dos pontos de bifurcação Hopf está localizada em valores baixos de abertura da válvula

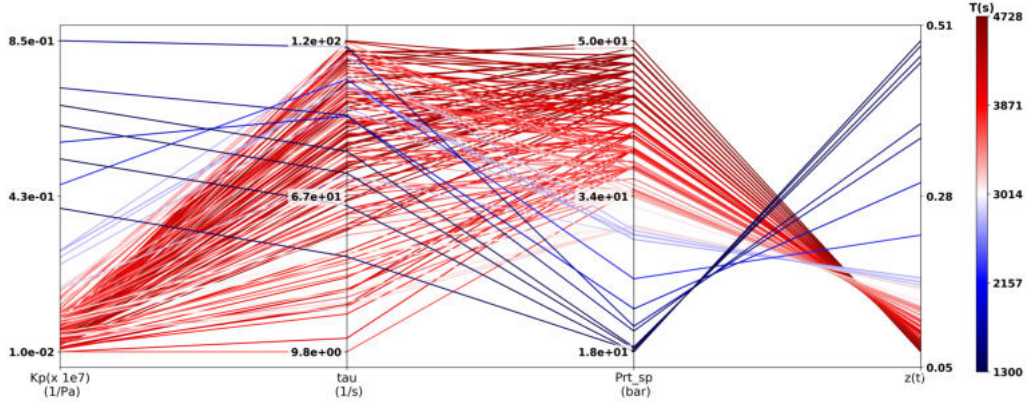


Figura 5.25: Distribuição de bifurcações de Hopf em relação ao cenário 3

de estrangulamento z , ainda mais baixos do que a localização da bifurcação de Hopf no regime de malha aberta. Particularmente, a presença elevada em valores baixos de z implica o surgimento de dinâmicas oscilatórias ao longo de toda a amplitude de abertura da válvula. Além disso, há uma independência do deslocamento da bifurcação de Hopf em relação à constante de tempo integral. De forma geral, é possível afirmar que este cenário não consegue a eliminação de golfadas no sistema, senão que apresenta desempenhos ainda piores em relação ao caso de malha aberta. No entanto, a vasta riqueza de comportamentos oscilatórios no espectro completo do espaço paramétrico abre uma oportunidade para o estudo de comportamentos dinâmicos mais complexos.

Dado um valor fixo de bias ($z_{bias} = 10\%$, ver modelo no Apêndice E), a distribuição de soluções não mostra uma dependência direta de τ , notando-se que a distribuição de planos quase forma um plano 2D no espaço 3-dimensional (Figura 5.26). A curva de Hopf se mostra então para os parâmetros $Ppdg_{sp}$ e K_p como representada na Figura 5.27. Nota-se que essa curva representa, para o uso prático na operação do processo, o caso limite de sintonia do controlador em função do set-point. Dessa forma, mostra que para um dado valor de sintonia K_p existe um valor mínimo de pressão $Ppdg$ para o qual o sistema oscila auto-sustentadamente ou de forma inversa. E analogamente, para um valor de set point, a $Ppdg$ determina um valor mínimo de sintonia K_p para o qual o sistema oscila.

Em particular, o Cenário 3 constitui um sistema dinâmico interessante em que, além da não linearidade relacionada à descrição matemática do fenômeno de slug-ging, existe uma fonte externa de feedback positivo fornecido pela resposta inversa da variável controlada que enriquece a variedade de comportamentos dinâmicos não lineares no sistema.

Uma trajetória caótica dinâmica $\mathcal{M}_\alpha$ foi obtida considerando os valores dos parâmetros de ajuste do PI na Tabela 5.5. Este comportamento se distingue por

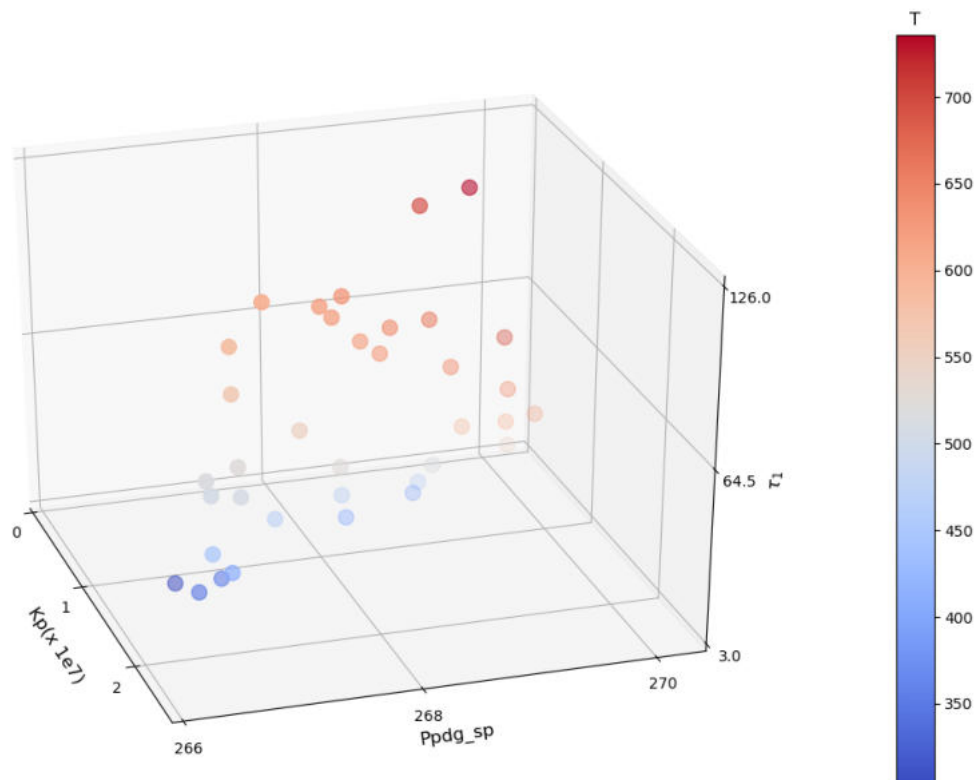


Figura 5.26: Distribuição de pontos de bifurcação de Hopf ao longo do espaço paramétrico

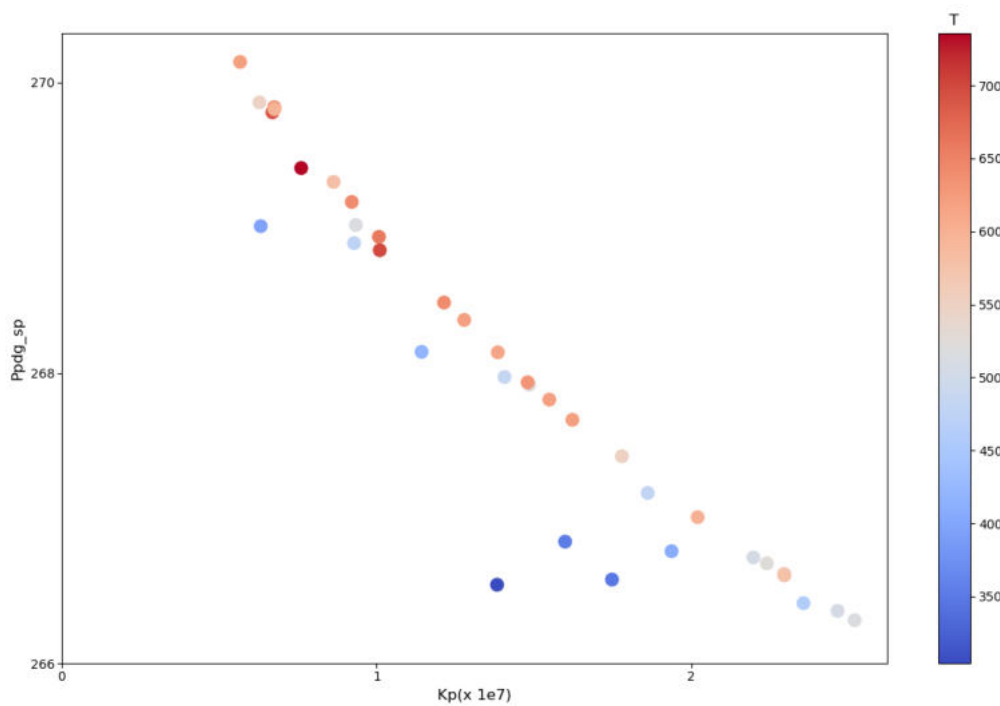


Figura 5.27: Distribuição de pontos de bifurcação de Hopf ao longo do espaço biparamétrico

Tabela 5.5: Parâmetros do controlador PI na trajetória caótica $\mathcal{M}_\alpha$

Parâmetro	Valor
K_p (1/Pa)	$1.0153e^{-7}$
τ (s)	90.255
P_{rt} (bar)	39.9951
u_{ss} (%)	18.4865

uma dinâmica oscilante auto-sustentada onde as oscilações não são mais periódicas e sim irregulares, como apresentado na Figura 5.28. Apesar disso, padrões específicos na forma de onda se repetem em intervalos irregulares.

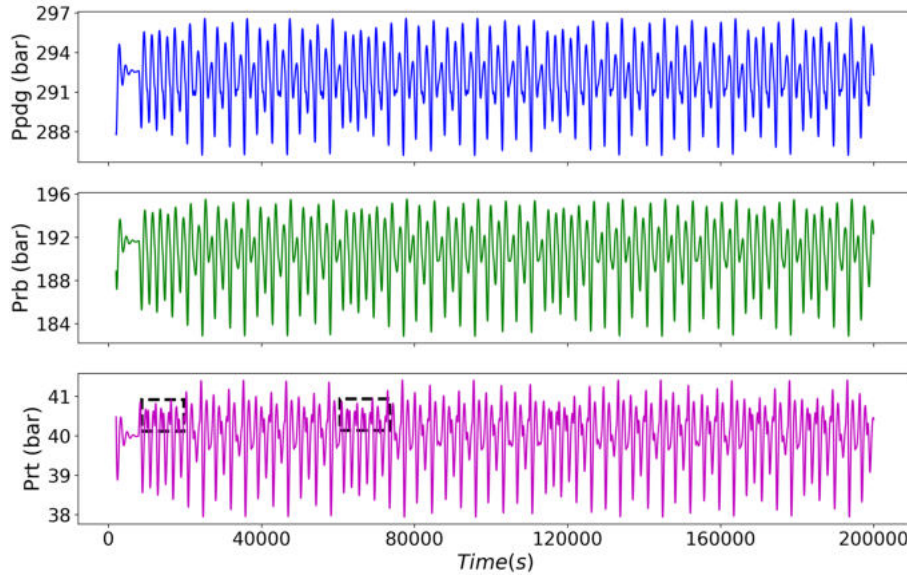


Figura 5.28: Séries temporais da trajetória caótica do modelo FOWM $\mathcal{M}_\alpha$. No quadro preto são ressaltados os intervalos com presença de MMOs

A Figura 5.29 mostra a trajetória oscilatória irregular $\mathcal{M}_\alpha$ no espaço de estados, onde a órbita de fase alterna entre dois lóbulos de atração, semelhante ao atrator de Lorenz [175]. No entanto, no sistema Lorenz, os lóbulos de atração são determinados pela coexistência de três pontos de equilíbrio, enquanto o sistema FOWM possui um equilíbrio único no espaço de estados de significado físico. Em geral, a trajetória $\mathcal{M}_\alpha$ concentra-se em mais de um lóbulo devido à presença de oscilações de modo misto (MMOs), onde há alternância entre oscilações de amplitudes grandes e pequenas distintas. Esses MMOs são comumente associados à propriedade de dobramento dos sistemas dinâmicos multi-escala de tempo [63] e ao aparecimento da bifurcação singular Hopf onde conjuntos invariantes caóticos aparecem localmente em sua vizinhança [111].

De acordo com a análise de estabilidade local, o ponto de equilíbrio $EQ1$, que constitui o atrator FOWM $\mathcal{M}_\alpha$, corresponde a um equilíbrio tipo sela, uma vez que é caracterizado pelos autovalores de estabilidade na Tabela 5.6.

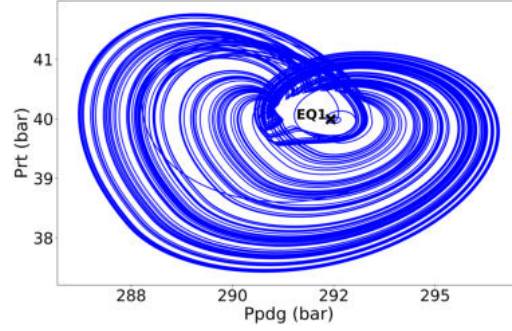


Figura 5.29: Trajetória caótica do modelo FOWM $\mathcal{M}_\alpha$ no espaço de estados. $EQ1$ denota a localização do ponto de equilíbrio

Tabela 5.6: Valores característicos de estabilidade

Point	K_p	$\lambda_{eq}^{(1)}$	$\lambda_{eq}^{(2)}$	$\lambda_{eq}^{(3)}$	$\lambda_{eq}^{(4)}$	$\lambda_{eq}^{(5)}$	$\lambda_{eq}^{(6)}$	$\lambda_{eq}^{(7)}$
$EQ1$	$1.0153e^{-8}$	$-6.6085e^1$	$-3.0897e^{-1}$	$-9.3306e^{-2}$	$1.618e^{-3} + 0.0035j$	$1.618e^{-3} - 0.0035j$	$-1.1312e^{-2}$	$-4.6144e^{-2}$
EQ_H	$7.7990e^{-9}$	$-6.6083e^1$	$-3.0596e^{-1}$	$-8.8009e^{-2}$	$0.0 + 0.0035j$	$0.0 - 0.0035j$	$-1.1332e^{-2}$	$-2.1942e^{-2}$

O diagrama de bifurcação foi plotado na Figura 5.30, representando os extremos locais de P_{rt} e as métricas do conjunto invariante; maior expoente de Lyapunov λ_{max} e entropia de Shannon H_s , onde o parâmetro K_p pode variar no intervalo $[0.01e^{-7}; 2.2e^{-7}]$ e os outros parâmetros de ajuste do PI foram definidos conforme a Tabela 5.5.

Especificamente, o diagrama de bifurcação apresentado na Figura 5.30A mostra um comportamento não oscilatório até $K_p \approx 0.078e^{-7}$, em que uma bifurcação de Hopf EQ_H surge provocando oscilações de período único. Como pode ser visto, ao aumentar o parâmetro K_p , foi identificada uma rota de duplicação de período para oscilações caóticas ($K_p \in [1.0e^{-7}; 1.18e^{-7}]$, $[1.22e^{-7}; 1.26e^{-7}]$, $[1.29e^{-7}; 1.53e^{-7}]$) alternando com janelas periódicas ($K_p \in [1.18e^{-7}; 1.22e^{-7}]$, $[1.26e^{-7}; 1.28e^{-7}]$, $[1.53e^{-7}; 1.57e^{-7}]$). Além disso, para $K_p > 2.02e^{-7}$ o sistema mostra ciclos limite de período duplo.

Além disso, o comportamento caótico foi devidamente confirmado tanto pelo maior expoente positivo de Lyapunov quanto pela entropia. Como pode ser observado, essas métricas são capazes de representar a transição de comportamentos dinâmicos no sistema. Assim, quando a dinâmica é estacionária $K_p < 0.078e^{-7}$, o expoente de Lyapunov é negativo e a entropia é próxima de zero. Então, nas regiões periódicas $K_p \in [0.078e^{-7}; 0.70e^{-7}]$ e $K_p \in [2.02e^{-7}; 2.20e^{-7}]$, o maior expoente de Lyapunov é aproximadamente zero. Finalmente, nas regiões caóticas, o expoente de Lyapunov (Figura 5.30B) e a entropia (Figura 5.30C) atingem valores máximos.

Uma varredura biparamétrica, computando o maior expoente de Lyapunov para cada trajetória dinâmica quando são variados dois parâmetros do modelo, K_p e u_2 , foi obtida e apresentada na Figura 5.31. Observa-se que, para $u_2 < 1e^5$ o

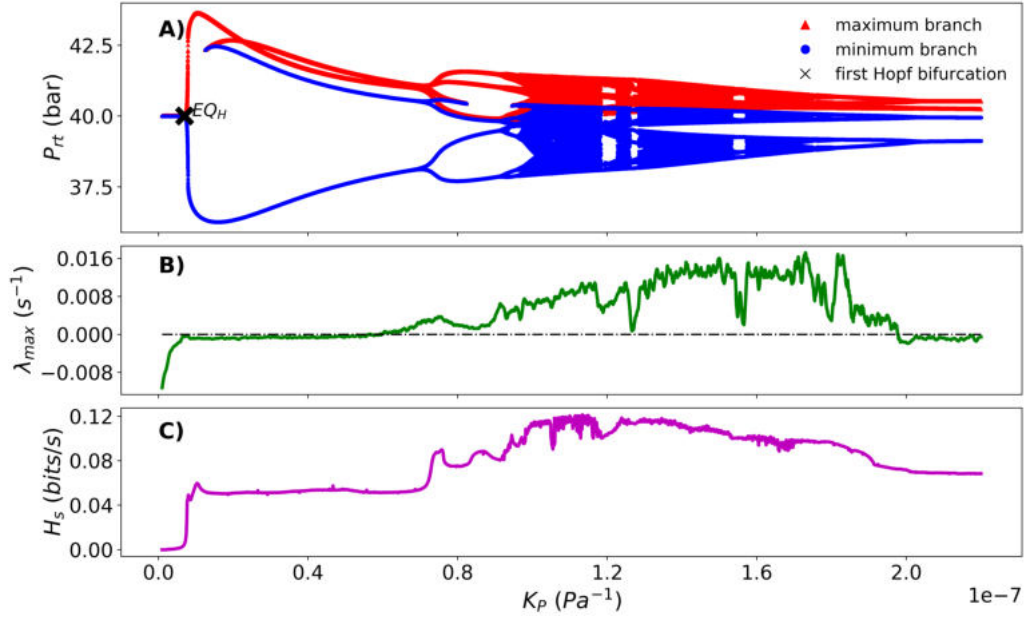


Figura 5.30: Diagrama de bifurcação (A) e máximo expoente de Lyapunov (B) e entropia de Shannon (C) com respeito ao parâmetro de sintonia do controlador de acordo com a Tabela 5.5

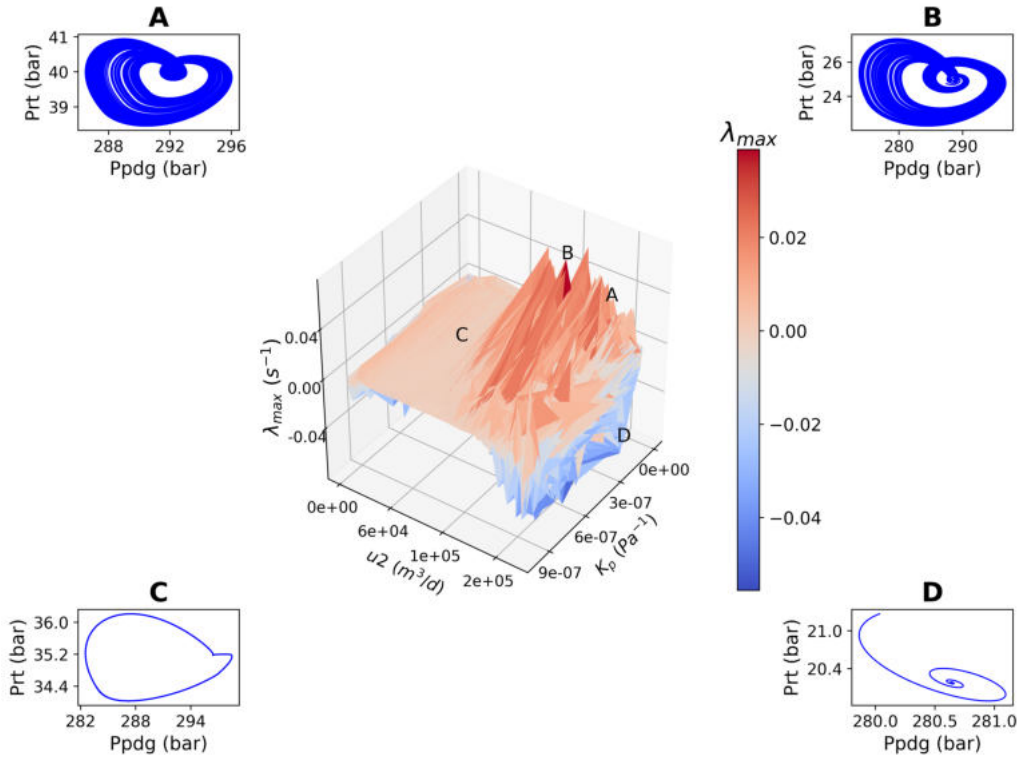


Figura 5.31: Máximo expoente de Lyapunov λ_{max} do modelo FOWM no espaço paramétrico $K_p - u_2$. O mapa de calor e barra de cores representam o valor de λ_{max} . Uma ampla variedade de comportamentos foi identificada, alguns deles representados nos painéis A-B (caótico), C (periódico) e D (ponto fixo estável)

espaço é descrito por um plano em $\lambda_{max} \approx 0$, indicando que os comportamentos dinâmicos nesta região são predominantemente oscilatórios periódicos. Por outro lado, para $u_2 > 1e^5$ existem sequências de regiões locais com λ_{max} positivos e negativos, mostrando que comportamentos caóticos e estáveis estão embutidos na mesma região paramétrica. Os painéis A-B da Figura 5.31 mostram dois espaços de estados caóticos relacionados a dois casos com $\lambda_{max} > 0$, enquanto o painel C exibe um comportamento oscilatório periódico com $\lambda_{max} \approx 0$ e o painel D mostra uma trajetória estável de ponto fixo em relação a $\lambda_{max} < 0$.

Como foi mencionado na Seção 3.2.1.6, a recorrência é uma característica fundamental de vários comportamentos dinâmicos e é frequentemente representada em mapas de recorrências (RPs), o que constitui uma técnica conveniente para o estudo de sistemas de alta dimensão a partir das séries temporais observadas. MARWAN *et al.* (2007) apresentaram uma metodologia para identificar padrões em RPs que caracterizam diversos comportamentos dinâmicos, até mesmo o caos. No entanto, no presente trabalho as recorrências são quantificadas usando a métrica de taxa de recorrência (RR) (Equação 5.1), que é uma medida de densidade do RP.

$$RR = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N R_{ij} \quad (5.1)$$

em que N é o número de pontos que constituem a trajetória dinâmica.

A Figura 5.32 mostra a RR local no espaço de fase da trajetória caótica do FOWM. O valor de Θ foi escolhido de forma que a densidade de recorrência global seja de aproximadamente 1% [185]. Além disso, a RR local foi calculada usando uma janela deslizante de tamanho $w = 50$ ao longo da trajetória integrada ($N = 20000$). Como esperado, a alta densidade de trajetória apresenta um alto RR, ou seja, a trajetória é altamente recorrente em regiões próximas ao ponto de equilíbrio, revelando a propriedade atrativa do comportamento. Por outro lado, as órbitas externas exibem uma baixa taxa de recorrência, indicando que o sistema passa mais tempo nos estados próximos às vizinhanças de equilíbrio. Nota-se que o processo fundamental caótico (expansão de fluxo e mistura de fluxo) pode ser intuído a partir da medida RR no comportamento apresentado, uma vez que seus caracteres repulsivo (instável) e atrativo (estável) podem ser distinguidos no mapa de calor.

5.2.2.1 Reconstrução do espaço de fases via teorema de Takens

Na secção 3.2 apresentou-se o fundamento teórica e metodologia para a reconstrução do espaço de fases de um sistema dinâmico a partir de uma série temporal de

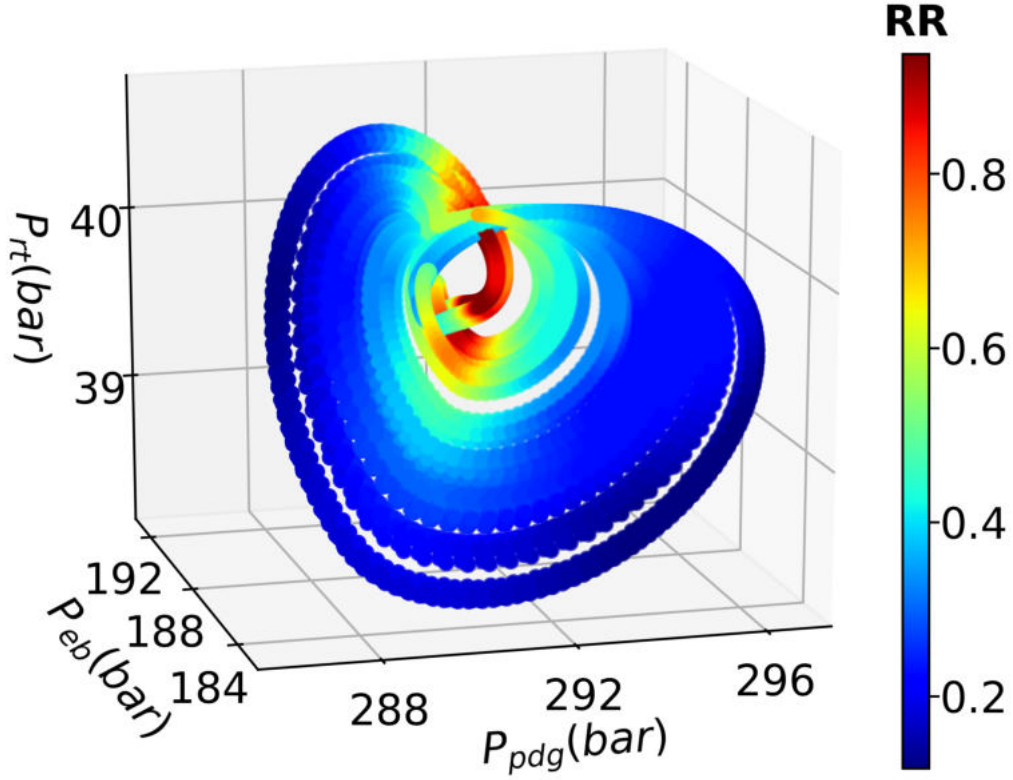


Figura 5.32: Taxa de recorrência (RR) ao longo da trajetória caótica $\mathcal{M}_\alpha$ do FOWM

medidas observáveis. Por sua vez os apêndices D.2.1 e D.2.2 mostram os resultados de reconstrução dos correspondentes atratores caóticos considerados neste trabalho como casos *benchmark*.

Considerando a série temporal da pressão P_{pdg} descrita na figura 5.28, apresentá-se as reconstruções dos espaços de fases do sistema dinâmico FOWM na figura D.27 junto com os espaços de fases originais. É importante destacar que o teorema de reconstrução garante que as propriedades topológicas são preservadas mas não necessariamente a geometria. Os valores de m e τ foram obtidos de acordo aos critérios descritos na seção 3.2. De modo geral, observou-se sempre trajetórias contínuas e suaves (sinônimos de uma boa reconstrução).

5.2.2.2 Reconstrução do espaço de fases via DMD

Análoga à reconstrução de espaços de fases via teorema de Takens foi apresentada na seção 3.2.2 a metodologia de reconstrução via decomposição dinâmica de modos. É importante destacar que em comparação à reconstrução via teorema de Takens, a reconstrução por DMD não requer análises preliminares (informação mútua, falsos vizinhos ou autocorrelação) para a obtenção dos parâmetros de imersão. A análises por DMD retorna os modos de um conjunto de séries unidimensionais ou multidi-

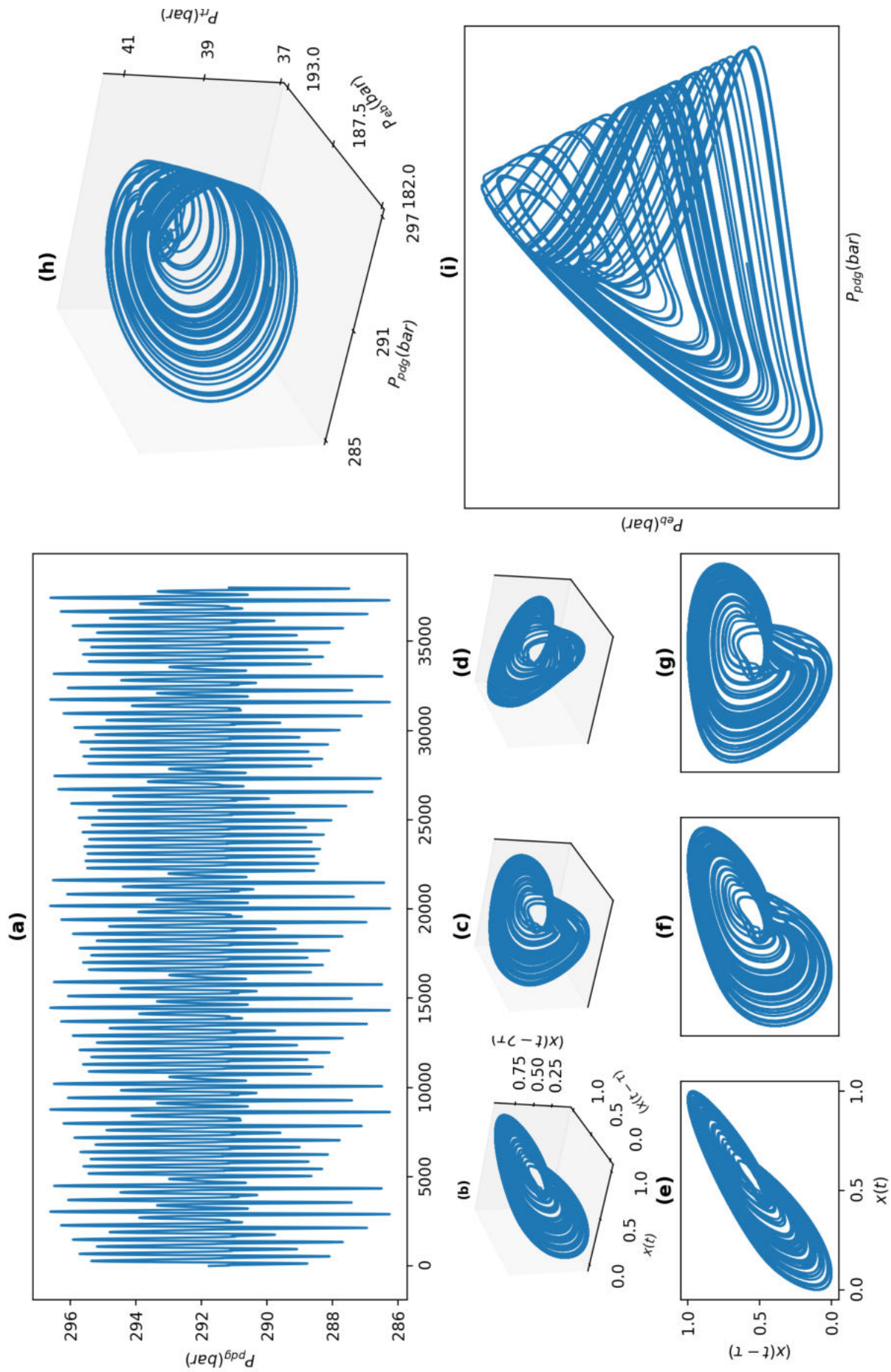


Figura 5.33: Reconstrução do espaço de fases do atrator de Rossler pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $P_{pdg}(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (c) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 5$; (d) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 10$ e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 15$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do modelo FOWM

mensionais sendo requerido o fornecimento só do fator de truncamento r . Por outra parte, faz-se relevante notar que ambos procedimentos exploram as propriedades dos vetores dinâmicos de atraso.

Na figura 5.34 apresenta-se a importância decrescente dos autovalores da matriz de Hankel construída com as séries temporais P_{pdg} , P_{eb} e P_{rt} . Observa-se que os primeiros 2 vetores característicos representam aproximadamente o 90% da dinâmica do sistema.

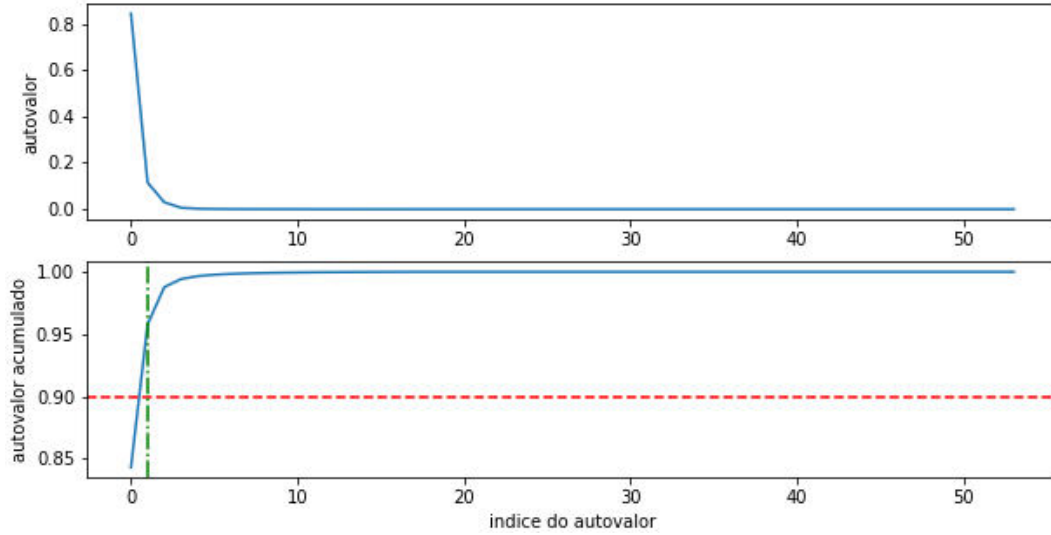


Figura 5.34: Procedimento de atualização de registros durante a previsão de estados pela rede neuronal

Na figura 5.35 apresentam-se os 3 primeiros modos de decomposição relacionados aos 3 vetores característicos mais importantes encontrados na decomposição. Por sua vez, a figura 5.36 mostra o espaço de fases reconstruído.

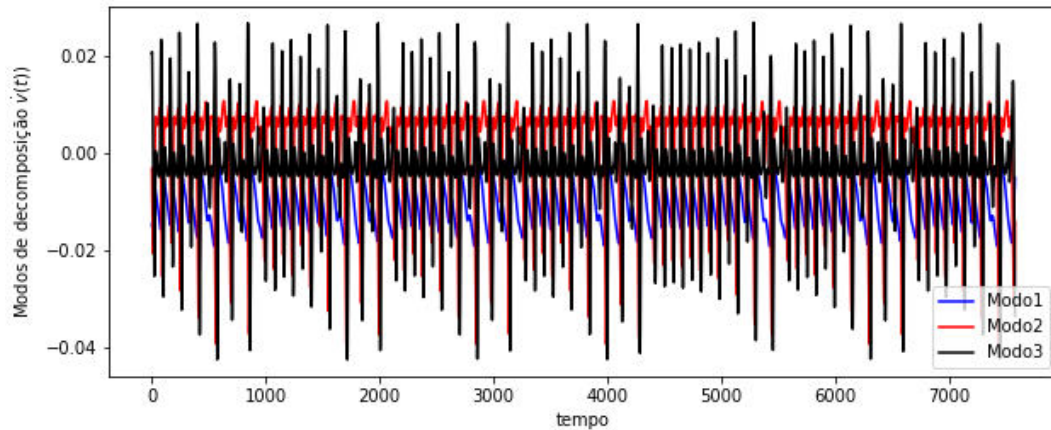


Figura 5.35: Modos de decomposição $\dot{v}(t)$

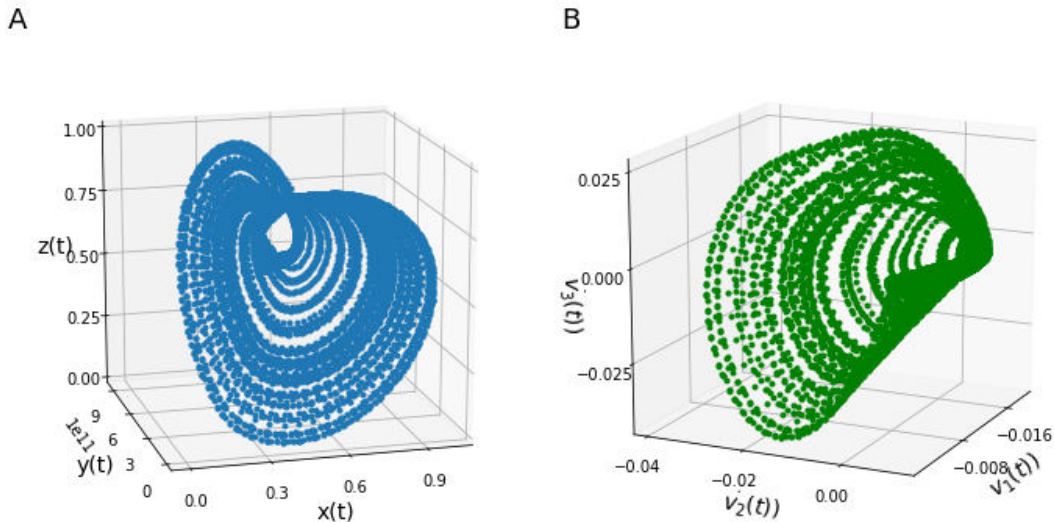


Figura 5.36: Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B)

5.2.2.3 Comentários Complementares

Nessa seção foi feita uma análise original do modelo FOWM, que representa a produção em plataformas de exploração de petróleo. A análise proposta mostrou que a produção pode estar sujeita a regimes operacionais oscilatórios, gerando regimes de golfada, e que essas oscilações podem apresentar caráter caótico se um controlador PI for usado para estabilizar a pressão P_{rt} . Fenômenos oscilatórios podem comprometer a segurança da operação no campo, embora possam ser caracterizados por grandezas dinâmicas (como expoentes de Lyapunov e a entropia de Shanon) que estão sujeitas a grandes variações nas proximidades dos pontos de bifurcação de Hopf, onde nascem as soluções oscilatórias. Portanto, parece bastante razoável admitir que essas variáveis possam ser usadas para caracterizar a possibilidade de evolução de comportamentos dinâmicos complexos em sistemas reais de operação, justificando o estudo desenvolvido nas próximas seções.

5.3 Resultados: Análise não linear de séries temporais

As análises dinâmicas e caracterizações dos sistemas dinâmicos de Rossler e Lorenz (ver Apêndice D) mostrou que a evolução temporal das trajetórias complexas pode ser totalmente descrita mediante a obtenção de grandezas invariantes, tais como a estabilidade do processo descrita pelas matrizes A e J , expoentes de Lyapunov, mapeamentos de Poincaré e índices de recorrências. No entanto, em sistemas reais

e de alta dimensionalidade, a construção de modelos confiáveis numericamente e altamente representativos pode ser muito complicada. Dessa forma, a caracterização dinâmica por análise não linear de séries temporais surge como uma abordagem que permite estimar os invariantes dos sistemas dinâmicos sem a necessidade de conhecer os modelos matemáticos que os representam. Na Seção 3.2 apresentaram-se as metodologias baseadas no Teorema de Takens [264], que permitem reconstruir o espaço de fases e a dinâmica de um sistema a partir da observação de uma única série temporal característica. Assim, todos os invariantes obtidos nas Seções D.1.1 e D.1.2 serão estimados usando uma única série temporal (sem usar as equações de fluxo). Além disso, algumas metodologias de análise não linear de séries temporais serão adaptadas para atender o problema de monitoramento proposto na Seção 5.1.1. De fato, a caracterização das grandezas invariantes dinâmicas a partir de sequências temporais disponibilizadas no campo pode ser muito mais efetiva e prática para a identificação de mudanças de comportamento (e portanto, também falhas operacionais) que o cálculo feito a partir de modelos de processo, mesmo que eventualmente identificados a partir desses mesmos dados, por conta das incertezas de modelagem dos fenômenos dinâmicos complexos em plantas reais.

5.3.1 Análise não linear de séries temporais como ferramenta de monitoramento

Nos Apêndices D.2.1 e D.2.2 foi desenvolvida a análise não linear de séries temporais visando a obtenção dos invariantes para a caracterização das respectivas dinâmicas. No entanto, foi possível também observar que as métricas invariantes respondem a mudanças do comportamento dinâmico (i.e. bifurcações, caos, intermitências e periodicidade) que no contexto do problema de monitoramento podem ser relacionadas a falhas de processo. Assim sendo, a seguir são apresentadas as respostas das diferentes métricas obtidas via análise não linear de séries temporais, quando aplicadas no contexto do problema descrito na Seção 5.1.1 e seguindo uma abordagem de janela móvel.

5.3.1.1 Autocorrelação

Considerando a falha descrita na Figura 5.2, foi calculada a autocorrelação numa estratégia de janela móvel (tamanho 500, equivalente a aproximadamente 8 horas de operação) ao longo da série temporal, obtendo-se um valor de atraso τ com autocorrelação zero para cada janela.

A Figura 5.37 mostra a evolução do tempo de atraso τ para a obtenção de

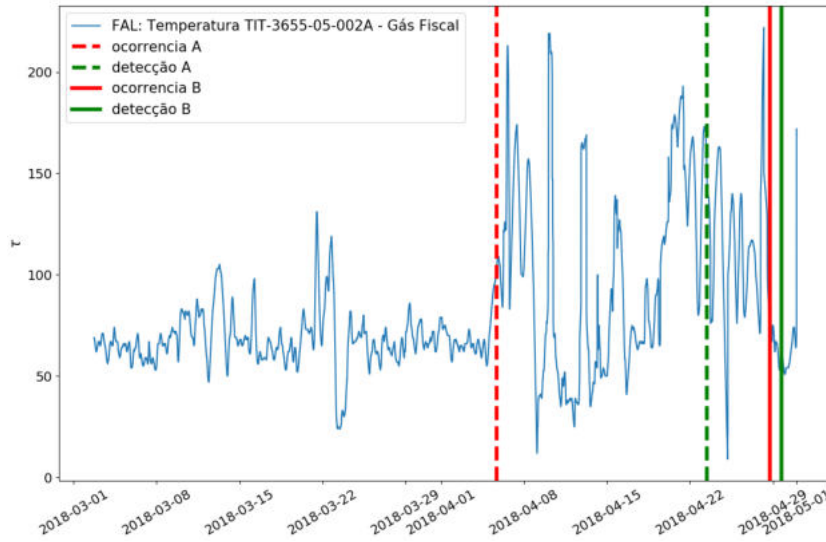


Figura 5.37: Tempos de atraso τ para obtenção de autocorrelação nula como função do tempo

autocorrelação zero como função do tempo. Deve-se lembrar que esse atraso τ estabelece o limite para o qual os pontos de uma mesma série temporal não apresentam correlação linear, ou seja, o valor de τ pode ser interpretado como uma medida de tempo necessário para que os sinais atrasados possam ser considerados independentes. Observa-se que no evento da falha o padrão de oscilação de τ é mais expressivo, oscilando com maior amplitude, permitindo identificar a anormalidade durante a falha. A falha é identificada por τ porque a existência de um conjunto de maior heterogeneidade na janela móvel faz com que a autocorrelação nula seja alcançada com maiores atrasos. É muito importante perceber na Figura 5.37 a grande sensibilidade do tempo de atraso da informação à ocorrência da falha, que permite identificar a existência de um problema com antecedência significativa em relação ao momento em que o problema foi de fato percebido pela operação em dois momentos distintos. Isso parece mostrar que as mudanças das características dinâmicas da trajetória afetam esse invariante, permitindo seu uso como indicador de normalidade da operação do processo.

É importante ressaltar que os valores de τ dependem da escolha do tamanho de janela móvel da análise. Janelas muito grandes tendem a suavizar o comportamento e diminuir a expressividade da identificação de mudança, enquanto janelas muito pequenas tendem a apresentar indicadores mais ruidosos e dificultar a identificação. Deste modo, a seleção do tamanho de janela constitui um importante procedimento de sintonização da técnica e que pode ser abordado por meio da análise clássica de validação cruzada.

Na Figura 5.38 apresentá-se o comportamento do tempo de atraso τ para



Figura 5.38: Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento do tempo de atraso τ para obtenção de autocorrelação nula como função do tempo

a obtenção de autocorrelação nula como função do tempo. Observa-se que para $w = 100$ não é possível discriminar o período de falha a partir da observação da métrica. No entanto, para $w = 300$ e $w = 500$ foi possível identificar os períodos com e sem falha.

Por outra parte, esta técnica de monitoramento é computacionalmente econômica e permite fazer análises com amostragens de 2000 pontos em 6 ± 0.5 segundos (sendo que a frequência de dados é de 60 segundos), pelo que é potencialmente viável para abordagens de monitoramento em linha e em tempo real.

5.3.1.2 Informação mútua

O gráfico superior da Figura 5.39 mostra os atrasos τ no primeiro mínimo da função de informação mútua, mostrando que as condições de reconstrução do atrator mudam ao longo do processo. Por outro lado, o gráfico inferior da Figura 5.39 mostra a entropia de Shannon (correspondente à informação mútua da série temporal com $\tau = 0$) como uma variável representativa da dinâmica observada e suas mudanças. Deve ser observado que a entropia de Shannon apresenta também boa expressividade para descrever a primeira transição entre intervalos sem falha e com falha. No entanto, essa identificação acontece nos instantes posteriores à falha (linha tracejada

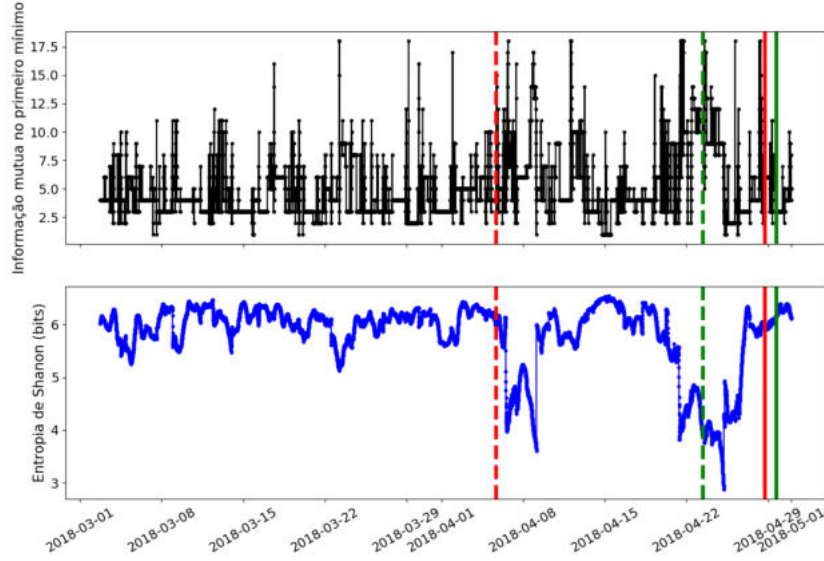


Figura 5.39: Superior:Primeiro mínimo da função de informação mútua vs tempo. Inferior: Entropia de Shanon na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500.

vermelha), enquanto a função de autocorrelação parece ser sensibilizada mais rapidamente durante evento da falha. A entropia de Shanon indica a perda de informação de um sistema ao longo da trajetória dinâmica, dando uma ideia da facilidade de prever o comportamento do sistema. Por conseguinte, o período de falha é a região temporal mais imprevisível da série temporal, uma vez que nessa região o sistema requer de mais informação (bits) para descrever o sistema.

O procedimento desta análise é computacionalmente mais demandante do que a abordagem baseada em autocorrelação, obtendo-se para a mesma amostragem de 20000 pontos um tempo computacional em torno de 175 ± 4 segundos. A despeito disso, parece óbvio na Figura 5.39 que o usuário pode se beneficiar do monitoramento de medidas de entropia, que indicam mudanças da natureza do movimento dinâmico, como aquelas discutidas na Seção 5.2 e aquelas que ocorrem durante as falhas de operação.

Por fim, na Figura 5.40 observá-se que para $w = 100$ há um padrão de antecipação da falha, embora a própria tendência dentro do período de falha não é tão discriminante como nos casos de tamanho de janela maior. Nota-se que para tamanhos de janela $w > 100$ as quedas de informação (bits) nos intervalos de falha são mais expressivos.

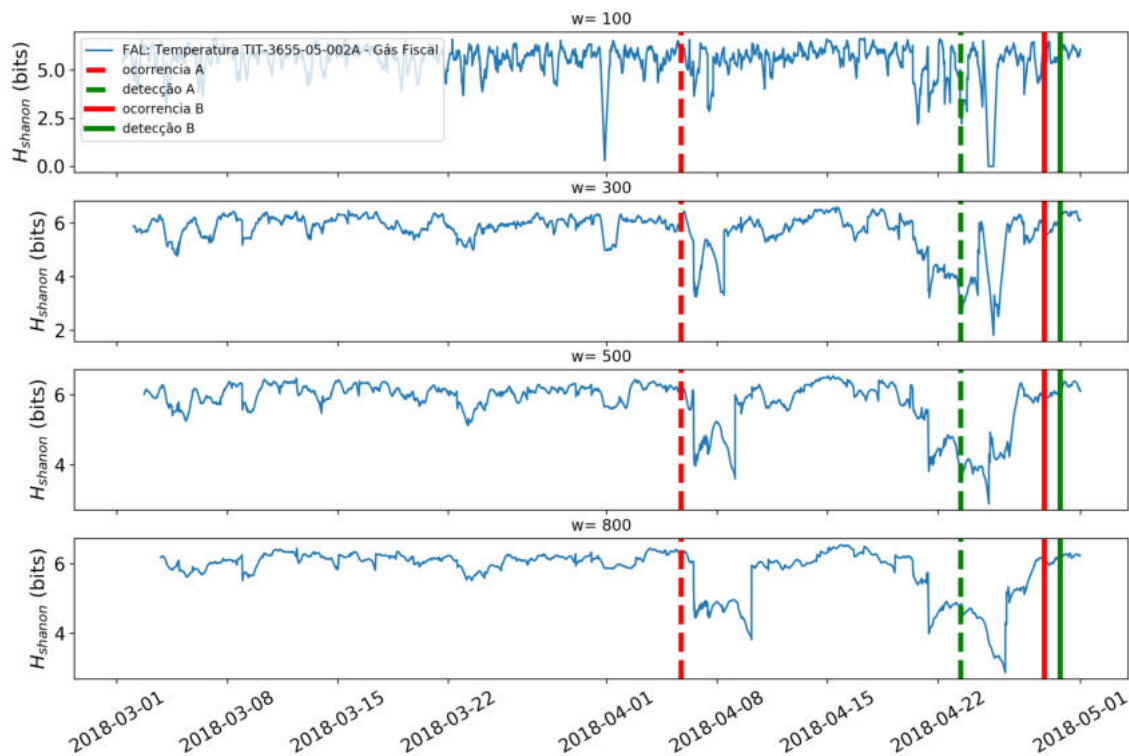


Figura 5.40: Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da Entropia de Shanon vs tempo.

5.3.1.3 Expoentes de Lyapunov

No caso das análises por expoentes de Lyapunov, considerou-se para o espectro de Lyapunov que o espaço de imersão para o sistema reconstruído era $m = 3$ (de acordo ao critério de falsos vizinhos discutido na Seção 4.2.4). A Figura 5.41 mostrou que os expoentes de Lyapunov não apresentam uma boa capacidade de discriminação da série temporal. Isso pode ser explicado em primeiro lugar pela deficiência na reconstrução do espaço de fases e em segundo lugar porque a divergência de trajetórias dentro da janela móvel é muito baixa, comprometendo a expressividade na identificação e detecção das falhas. Além disso, o procedimento de cálculo de expoentes de Lyapunov computacionalmente intensivo (aproximadamente $10min$ por amostragem de 20000 pontos). Essas características são devidas essencialmente a dois fatos. Em primeiro lugar, o expoente de Lyapunov é uma média da estabilidade dinâmica ao longo de um período longo de amostragem. Em segundo lugar, as trajetórias usuais são usualmente bem comportadas e não apresentam os modos expansivos característicos da dinâmica caótica. Dessa forma, os expoentes de Lyapunov acabam informando pouco, ao ponto de vista prático, sobre a natureza do movimento que se estabelece e é pouco sensível a uma falha no curto prazo.

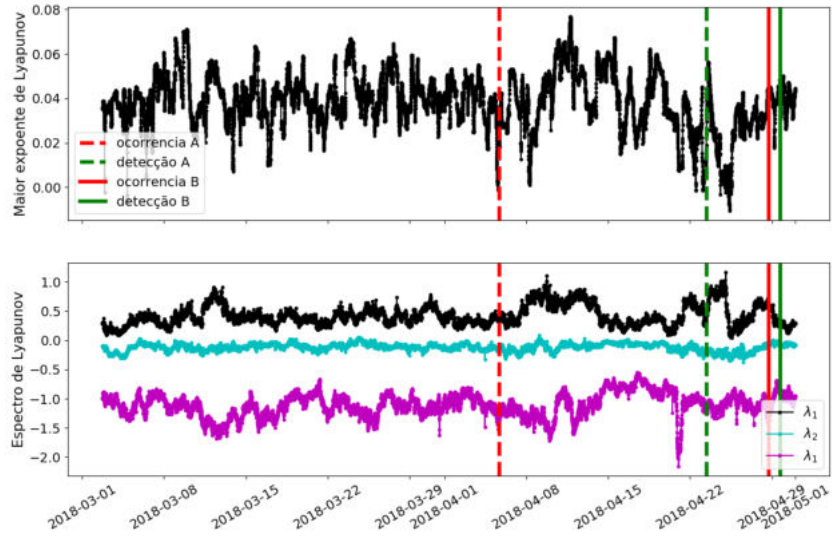


Figura 5.41: Superior: Maior expoente de Lyapunov na janela vs tempo. Inferior: Espectro de Lyapunov na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500

5.3.1.4 Entropias e dimensões

A entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação foram outras medidas invariantes dos sistemas dinâmicos que foram tratadas ao longo deste trabalho. Na Figura 5.42 apresentam-se os comportamentos da entropia de Kolmogorov e da dimensão de correlação, obtendo-se em ambos os casos identificações expressivas das falhas alguns instantes depois da ocorrência. Esta abordagem computacional é também computacionalmente demandante, requerendo tempos de processamento aproximados de 7 minutos por amostragem de 20000 pontos.

Deve ser observado que a entropia e Kolmogorov tende a apresentar um comportamento mais acentuado do que a entropia de Shannon (Figura 5.39). Desta maneira, a ordem das entropias (Seção 3.2.1.9) pode constituir uma variante a ser explorada nos procedimentos. Uma vez mais, parece claro que o usuário pode se beneficiar da disponibilidade desses invariantes dinâmicos para a análise de trajetórias dinâmicas no ambiente de operação.

Por fim, nas Figuras 5.43 e 5.44 apresenta-se o efeito do tamanho de janela w na capacidade discriminante dos regimes dinâmicos das métricas entropia de Kolmogorov e dimensão de correlação. Nota-se que para tamanhos de janela $w > 100$ as métricas são mais sensíveis ao intervalo de falha.

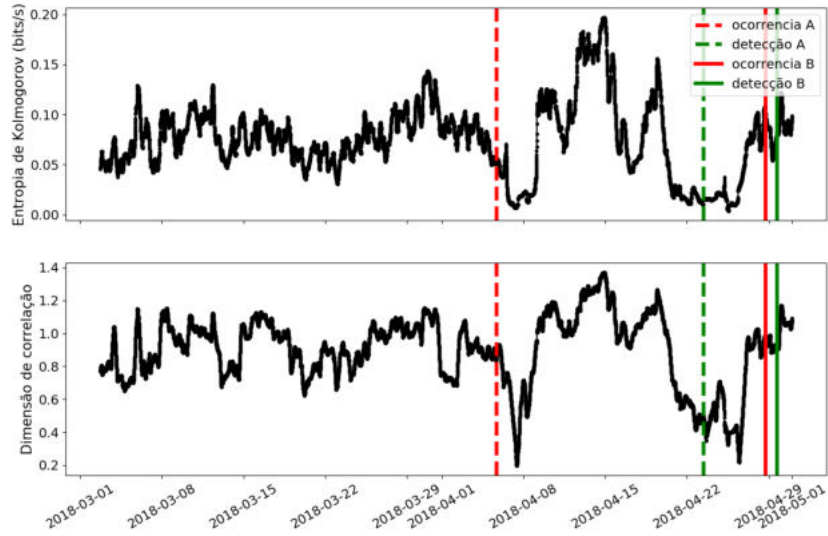


Figura 5.42: Superior: Entropia de Kolmogorov na janela vs tempo. Inferior: Dimensão de correlação na janela vs tempo. O tamanho de janela foi fixado em 500.

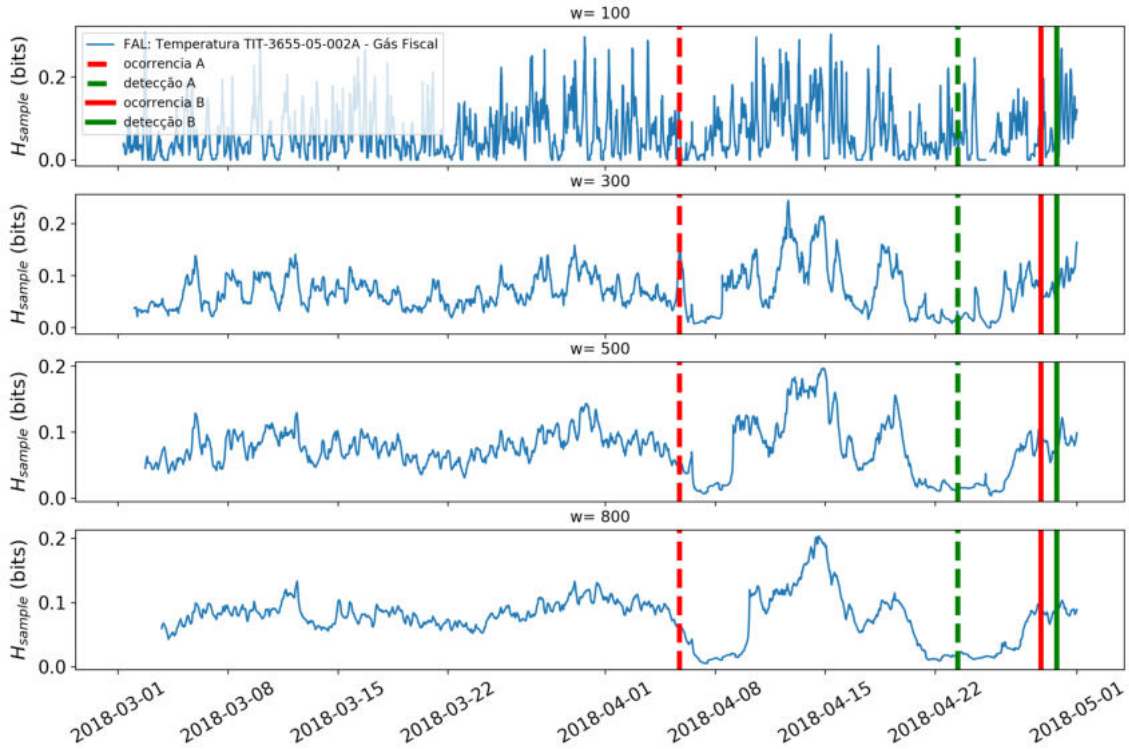


Figura 5.43: Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da entropia de Kolmogorov na janela vs tempo.

5.3.1.5 Mapas de recorrências

Todas as técnicas descritas acima descrevem métricas que podem eventualmente ser usadas para a detecção de falhas e foram aplicadas em contexto monovariável. No entanto, essa abordagem não é suficientemente efetiva em casos de monitoramento multivariável. Por isso, considerou-se um outro período de falha no caso de estudo

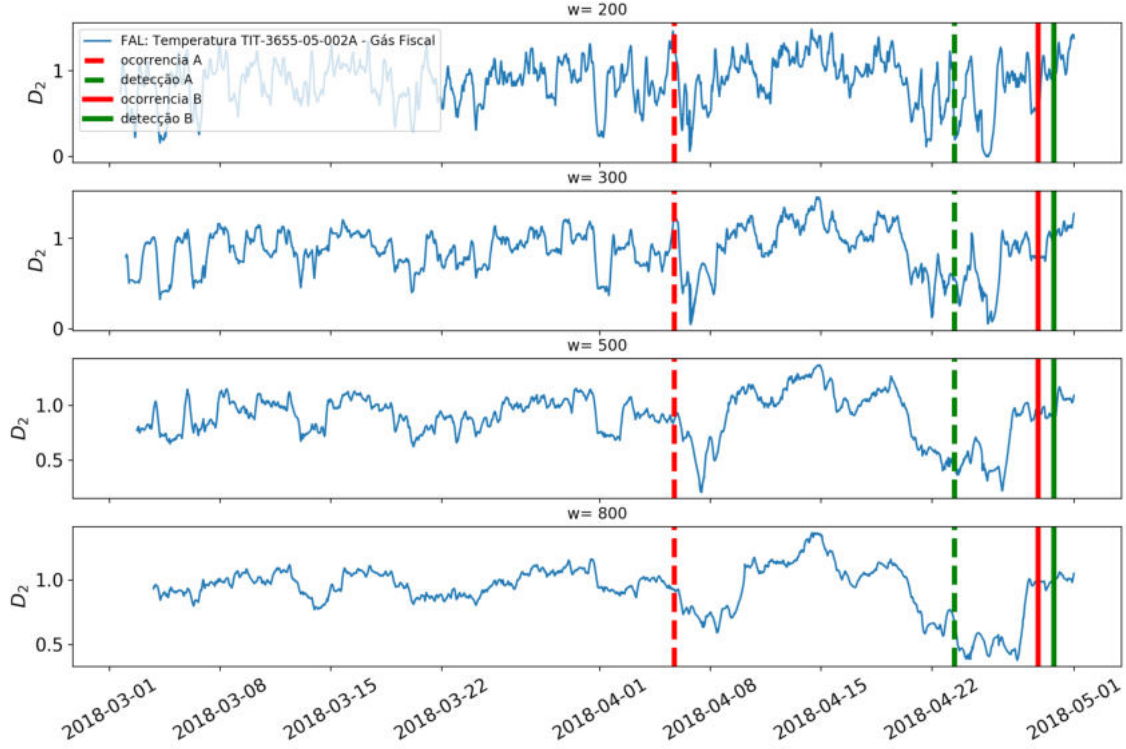


Figura 5.44: Sensibilidade do tamanho da janela w no comportamento da dimensão de correlação na janela vs tempo.

EFAL (Seção 5.1.1), uma estratégia de monitoramento baseada na construção de uma carta de controle é apresentada na Figura 5.45.

Observa-se que a variável de temperatura de gás fiscal apresentou uma mudança brusca de comportamento no evento sinalizado (linha vermelha grossa). No entanto, esse evento de falha não se manifestou drasticamente na série temporal de vazão. Por conseguinte, a falha não foi detectada na planta, uma vez que a variável monitorada era a vazão de gás e todos os pontos estiveram majoritariamente dentro dos limites de detecção (determinados como $\bar{x} \pm 3\sigma$). Assim sendo, embora as séries temporais de vazão e temperatura apresentem alguma interação entre si (lembrando que a medida de vazão no medidor é corrigida por efeitos de temperatura), não necessariamente todas as falhas apresentadas no medidor de temperatura serão refletidas na série temporal de vazão de gás.

Os mapas de recorrência constitui uma alternativa para tratar problemas de monitoramento de alta dimensionalidade, uma vez que o espaço de fases inteiro $\mathcal{M}$ é representado numa matriz. No entanto, a definição da vizinhança de raio ϵ é uma sobreposição ao mesmo índice de detecção de falhas. Por conseguinte, a abordagem considera a matriz de recorrência com $\epsilon = 0$ (conhecida também como matriz de distâncias) no problema de monitoramento multidimensional por janela móvel.

A abordagem usada considera um conjunto de análise incluindo todas as variá-

veis de temperatura de medidores fiscais do processo para fins didáticos. A mesma abordagem pode ser usada para conjunto distinto ou maior de variáveis de processo, como indicado nos materiais suplementares descritos abaixo. O importante aqui é perceber que a carta de controle monovariável (ou multivariável) pode ser transformada em um padrão com auxílio da medida de recorrência usada para caracterizar sistemas dinâmicos.

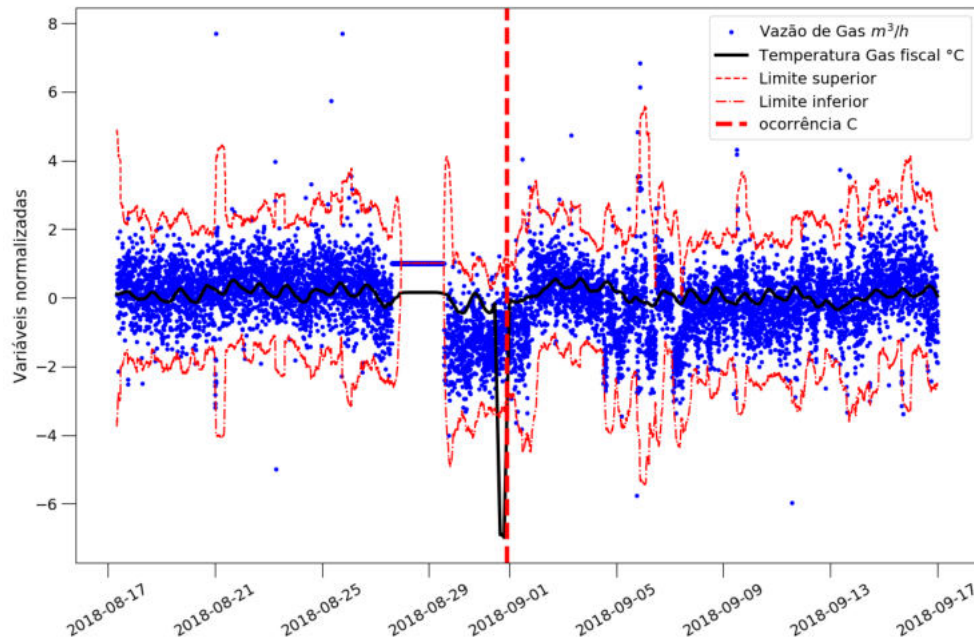


Figura 5.45: Carta de controle para o monitoramento de monovariável em um período em torno ao evento de falha C

Na Figura 5.46 apresenta-se a matriz de distâncias do espaço de fases multidimensional de temperaturas nos medidores fiscais. Observa-se que ao longo da dinâmica ocorrem variações leves em torno das variáveis normalizadas, embora o período de falha esteja claramente identificado pelo segmento amarelo (maior variação de distâncias). Note-se que esta metodologia é particularmente útil neste tipo de falhas, uma vez que elas apresentam uma clara separabilidade do conjunto normal de dados.

Uma visão dinâmica do funcionamento da metodologia de recorrências é apresentada no material suplementar⁴. Também é apresentada a mesma implementação considerando matrizes de recorrências conjuntas em [YouTube](#), ou no arquivo *File04 Multidimensional monitoring by JQA.mp4* do material multimídia suplementar.

⁴A versão digital apresenta-se em [YouTube](#)

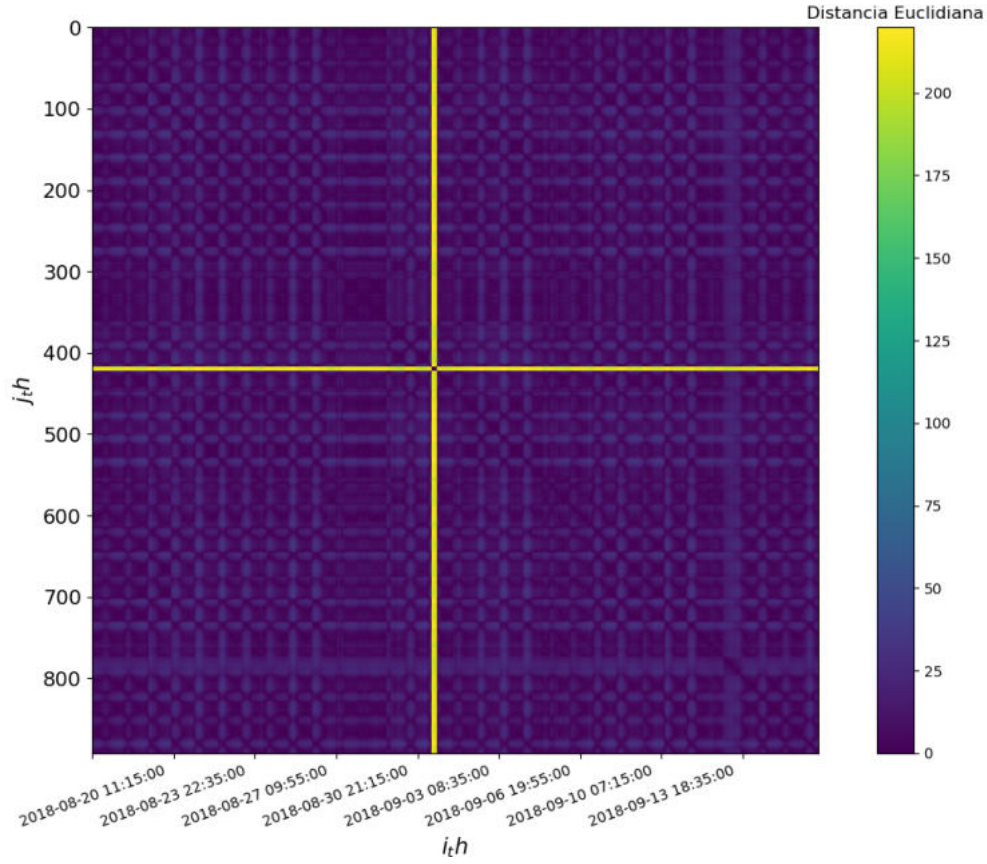


Figura 5.46: Matriz de distâncias do conjunto multidimensional de temperaturas do processo. O índices j_{th} correspondem aos mesmos i_{th} expressos como datas.

5.3.1.6 KDE como ferramenta auxiliar

Após estabelecer períodos de tempo com um comportamento supostamente normal, como indicado pela operação, foram feitas análises de ajuste estatístico para a variável “FAL-Vazão instantânea FIT-3655-05-002 A – Gás Fiscal”. A Figura 5.47a apresenta o histograma de variabilidade dessa variável no período considerado, em que é possível observar que a priori a função de distribuição de probabilidade é bimodal. Adicionalmente, apresenta-se o ajuste da curva normal sobre o conjunto inteiro de dados, observando-se que tal ajuste não é representativo dos dados. Na Figura 5.47b apresenta-se a curva de função de densidade de probabilidade obtida via ajuste KDE com kernel Gaussiano e $bandwidth = 5.3$. Observa-se que neste caso o procedimento KDE permite obter um ajuste mais adequado em relação ao caso da curva normal no histograma, reproduzindo a característica bimodal dos dados.

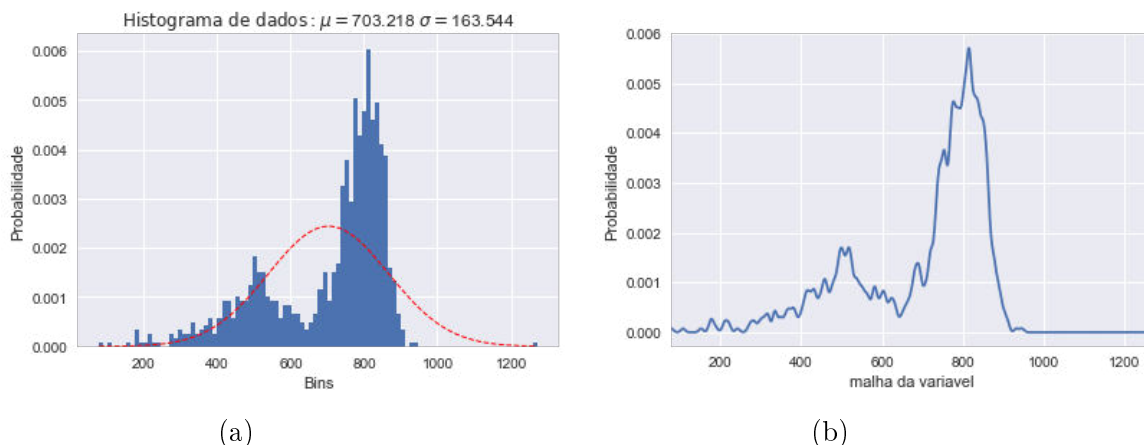


Figura 5.47: Função de distribuição de probabilidade para a variável vazão instantânea de gás FIT-3655-002A, média $\bar{x} = 703.218$ e desvio padrão $\mu = 163.55$. (a) Histograma e densidade de probabilidade da variável e regressão da equação de distribuição normal. (b) densidade de probabilidade obtida por KDE.

Dessa forma, o ajuste por KDE permite obter distribuições de probabilidade mais confiáveis, auxiliando a implementação de outra metodologias de monitoramento de processos. Além disso, a técnica de KDE pode ser usada junto com uma implementação Naives-Bayes para tratar o problema de identificação e detecção de falhas como um problema de classificação de aprendizado de máquinas ([8, 140, 300]). Uma visão dinâmica do funcionamento da metodologia de distâncias auxiliada por KDE para os monitoramentos das falhas $A - B$ e C é apresentada no material suplementar⁵.

5.3.1.7 Comentários complementares

Variáveis usadas para caracterizar a qualidade e a estabilidade de sistemas dinâmicos não tem sido usadas para identificar o estado das trajetórias para fins de monitoramento, a despeito da importância e tradição de uso na área de dinâmica complexa. Como visto na presente seção, que fez uso de dados reais de processo que apresentavam algum tipo de falha, algumas dessas técnicas podem ser muito úteis no ambiente de produção, por serem sensíveis a mudanças das características dessas trajetórias (e de falhas) a serem computacionalmente eficientes. Dentro as técnicas avaliadas preliminarmente, destacam-se as de caracterização de tempo de resposta (por meio de funções de autocorrelação), de entropia do movimento dinâmico e os mapas de recorrência (por permitirem fácil extensão para o problema multidimensional). Em todos esses casos, o tamanho da janela móvel constitui um importante hiper-parâmetro de sintonia da técnica. Com base nos resultados obtidos, foi enco-

⁵A versão digital apresenta-se em  e  respectivamente

raçado o uso desses procedimentos para caracterização do *slugging* em plataformas de produção, como avaliado a seguir.

5.3.2 Análise não linear de séries temporais na identificação de *Slugging*

Na Seção 5.3.1 foi mostrada a utilidade das métricas do conjunto invariante que foram obtidas a partir de sequências temporais de medidas disponíveis na planta. Observou-se que algumas dessas métricas são capazes de discriminar qualitativamente as transições e mudanças abruptas (falhas) no sistema dinâmico. Na presente secção a abordagem da análise não linear de séries temporais é discutida em torno da identificação das bifurcações de Hopf no sistema de produção offshore. Deve-se notar que embora o fenômeno de *slugging* não seja caracterizado como uma falha, este constitui uma mudança topológica na dinâmica do sistema que deve ser evitada, podendo ser analisada pelos métodos do espaço reconstruído.

5.3.2.1 Autocorrelação

Considerando o período de operação do poço de produção apresentado na Figura 5.6, foi determinada a autocorrelação da série temporal de pressão PDG usando uma estratégia de janela móvel ($w = 500$), obtendo-se um valor de atraso $\tau_{corr=0}$ com autocorrelação zero para cada janela.

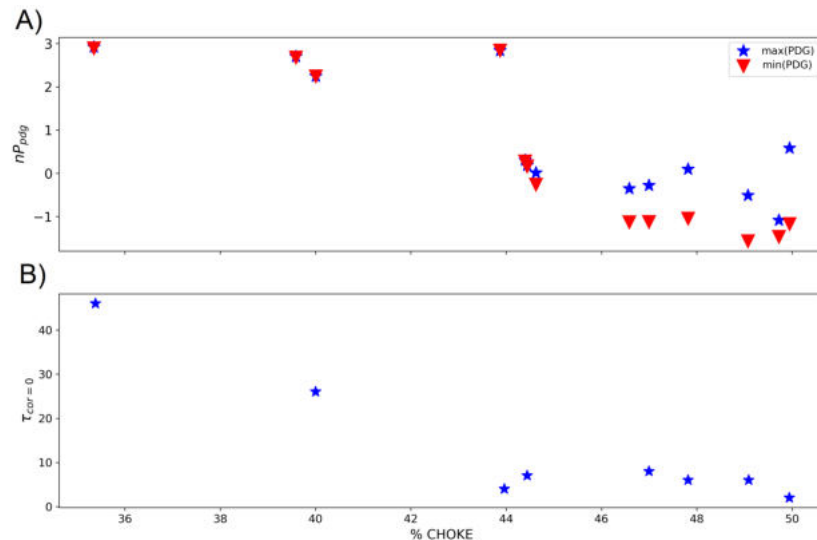


Figura 5.48: Tempos de atraso τ na função de autocorrelação nula em função do diagrama de bifurcação

A Figura 5.48(A) mostra o diagrama de bifurcação experimentalmente cons-

truído usando a pressão na PDG no período de operação previamente referido. Por outra parte, a Figura 5.48(B) corresponde ao comportamento do tempo de atraso com correlação nula $\tau_{corr=0}$ em função do regime de operação determinado pela abertura de válvula Choke. Deve ser observado que os tempos de autocorrelação nula caem notoriamente, a medida que se aproxima da bifurcação de Hopf. Por tanto, o risco de ingressar na região oscilatória parece ser de alguma forma capturado pela função de atraso. Logo, a autocorrelação pode ser usada não apenas como uma medida de normalidade, mas como uma medida de risco da operação.

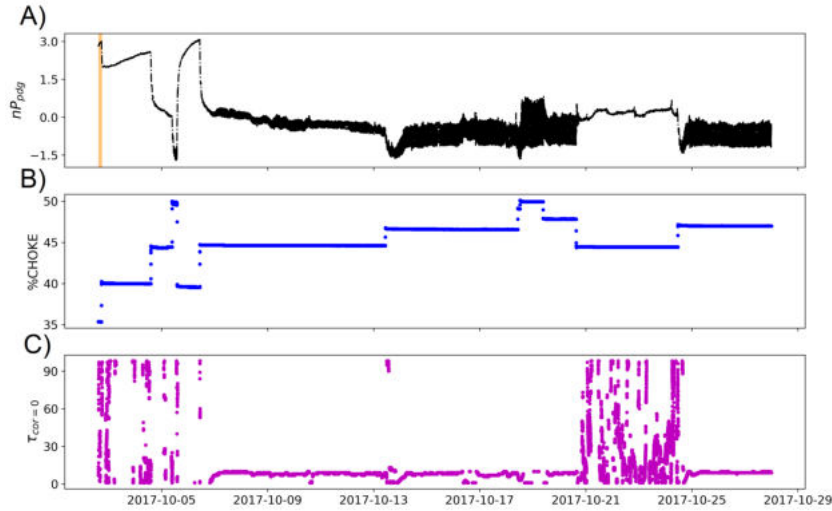


Figura 5.49: Tempos de atraso τ na função de autocorrelação nula vs tempo. Barra laranja representa, proporcionalmente, o tamanho de janela empregado $w = 200$.

Paralelamente, foi desenvolvida uma análise que avalia o comportamento de $\tau_{corr=0}$ por uma metodologia de janela móvel. A Figura 5.49(A-B) apresenta as respostas da pressão na PDG como função das mudanças na válvula Choke, enquanto a Figura 5.49(C) mostra o comportamento dinâmico de $\tau_{corr=0}$. Destaca-se o comportamento diferenciado dos diagramas na presença da dinâmica oscilatória e nas proximidades do surgimento do comportamento oscilatório (abertura de Choke $> 40\%$).

5.3.2.2 Informação mútua e entropia

A métrica de informação mútua como medida de independência constitui uma ferramenta alternativa à determinação do tempo de atraso τ via autocorrelação. Neste caso, considerou-se a série temporal de pressão no *top-riser* no mesmo período de operação descrito na Figura 5.6.

Na Figura 5.50 apresenta-se (A) o diagrama de bifurcação reconstruído a partir da série temporal em comparação ao comportamento do (B) primeiro mínimo de informação mútua e (C) a entropia de Shannon. Pode ser observado que essas

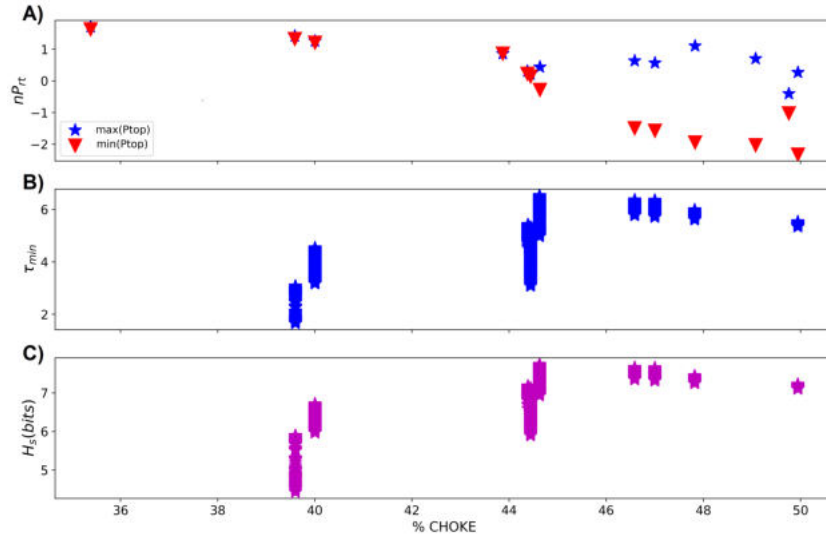


Figura 5.50: Primeiro mínimo de informação mútua e entropia de Shannon em função da abertura da válvula Choke.

medidas de entropia se mostram claramente maiores após a ocorrência da bifurcação de Hopf.

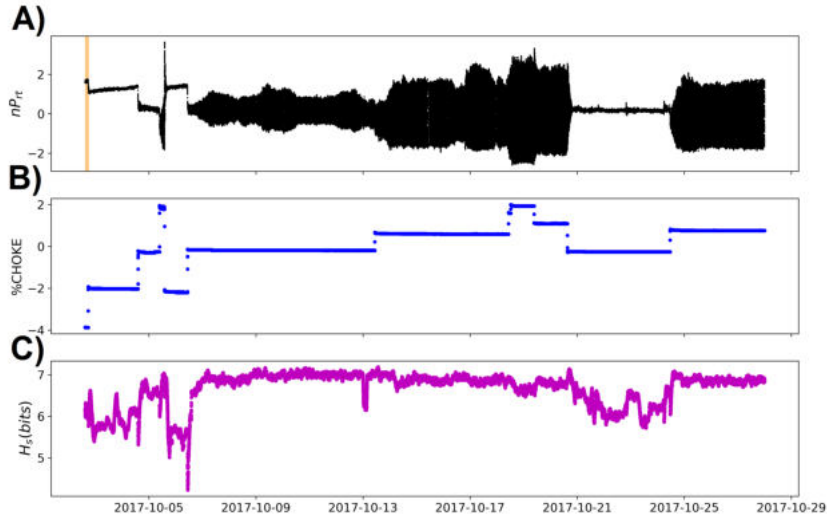


Figura 5.51: Entropia de Shannon em função do tempo. Barra laranja representa, proporcionalmente, o tamanho de janela empregado $w = 200$

De forma análoga, a Figura 5.51 mostra o comportamento da entropia de Shanon calculada usando a abordagem de janela móvel, em que se confirma o comportamento mais entrópico nos intervalos oscilatórios. Portanto, assim como no caso anterior, o risco de ingressar na região oscilatória parece ser de alguma forma capturado pela medida de entropia. Logo, assim como a autocorrelação, a entropia pode ser usada não apenas como uma medida de normalidade, mas como uma medida de risco da operação. Essas observações são completamente inéditas na literatura de monitoramento em geral e de monitoramento de poços de petróleo em particular.

5.3.2.3 Comentários complementares

De forma original, observa-se que medidas invariantes das trajetórias dinâmicas, como o atraso de autocorrelação e a entropia de Shannon, podem caracterizar a normalidade da operação e o risco de ingressar na região oscilatória. Essa observação não é apenas conveniente para o usuário do ponto de vista prático, mas também corrobora expectativas de que esses valores exprimem o estado dinâmico das trajetórias e, portanto, de alguma forma caracterizam a propensão para o movimento oscilatório (a ser evitado no presente caso).

5.4 Reconstrução de diagramas de bifurcação via dados

Ao longo das Seções 5.1.2 e 5.2.1 foi observado que a determinação dos pontos de bifurcação são de grande importância para a identificação e prognóstico de transições dinâmicas nos processos produtivos. Particularmente, a construção do diagrama de bifurcação no problema de golfadas ou *slugging* constitui uma tarefa imperativa no projeto do processo, planejamento de produção e o estabelecimento de protocolos de segurança.

Embora a abordagem via modelo fenomenológico fortaleça a representatividade do processo [66], existem limitações inerentes, como a custo computacional necessário para o ajuste do modelo e o subemprego do histórico de dados do processo. Por outra parte, tendências tecnológicas atuais e de mercado promovem o uso de estratégias baseadas em dados, as quais visam à reconstrução do diagrama de bifurcação apenas com uso intensivo dos dados disponíveis.

5.4.1 Reconstrução de diagramas de bifurcação via redes neurais

5.4.1.1 Método

Considere-se um sistema dinâmico da forma $x(t) = f^t(x_0)$, alterado por uma perturbação externa (paramétrica) $p(t) \in \mathbb{R}^N$. Supondo que $n_x \geq 1$ medidas temporais correspondentes aos estados $x = (x_1, x_2, \dots, x_{n_x})$ estão disponíveis, assim como a série temporal da perturbação $p = (p_1, p_2, \dots)$. A abordagem [47] usa uma rede neural recorrente (RNN) [60, 293] para reconstruir a dinâmica do sistema e a respectiva resposta em função do vetor de perturbação $p(t)$. De acordo com a literatura, as RNN

são frequentemente empregadas para detecção de anomalias [182, 268] e previsão de séries temporais. [20, 65, 102, 114]

A rede neural RRN é treinada para receber os valores históricos de $x(t)$ e $p(t)$ e retorna o estado evoluído no tempo $x(t + \delta t)$. A RNN em cada passo de tempo pode ser representada como uma cópia separada da mesma rede, em que as conexões recorrentes ligam cada cópia com seu sucessor. Dessa forma, essa cadeia de redes é truncada em um número finito de *rolls* (cópias de rede). A inclusão dos valores históricos do sistema dinâmico refletem propriedades do Teorema de Imersão, permitindo a RNN inferir o estado do sistema. O número de *rolls*, portanto, corresponde à dimensionalidade da imersão. A partir do Teorema de Takens, sabe-se que o número de *rolls* a serem considerados deve ser $R > 2N + 1$, onde N é a dimensionalidade do sistema. Por outra parte, a amostragem δt deve ser menor que a escala de tempo onde acontecem os comportamentos dinâmicos de interesse. Por fim, estabelecidos o número de cópias (*rolls*) da RNN e uma resolução de tempo adequada, pode-se construir o modelo de inferência estatística a partir do treinamento da rede neural.

No caso particular do atrator de Rossler, o parâmetro de bifurcação b coincide com a escala do vetor de perturbação $p(t)$. Deve-se observar que tal parâmetro não gera qualquer termo não linear no conjunto de equações, pelo que a dinâmica estocástica afeta unicamente o parâmetro de bifurcação.

$$\dot{x} = -y - z \quad (5.2a)$$

$$\dot{y} = x + ay \quad (5.2b)$$

$$\dot{z} = b + z(x - c) + p(t) \quad (5.2c)$$

Os parâmetro $a = 0.2$; $c = 5.7$ correspondem à dinâmica caótica. Assim, o parâmetro b é explorado a partir do termo de perturbação $p(t)$ que segue o processo estocástico Ornstein-Uhlenbeck:

$$q(t) = -\frac{q}{\tau} + \epsilon \sqrt{\frac{2}{\tau}} \varepsilon(t) \quad (5.3)$$

Em que ε é o ruído Gaussiano, $\epsilon = 0.5$, $\tau = 5$ são a amplitude e tempo de correlação de q . O processo estocástico é integrado com o método Euler-Muyarama [47].

$$p(t) = \frac{1}{2} e^{q(t)} \quad (5.4)$$

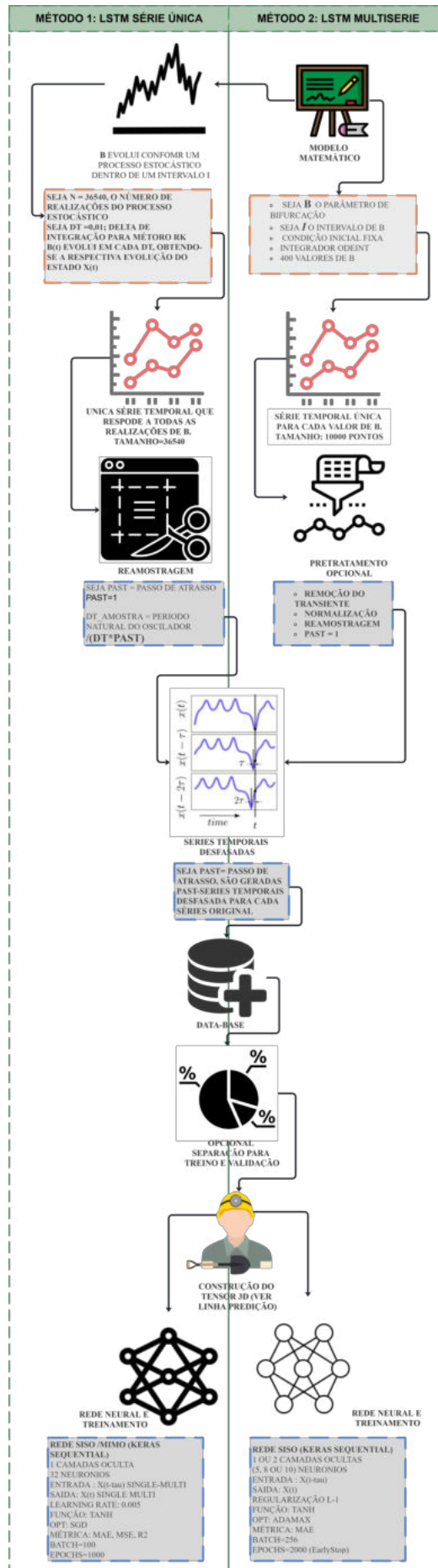


Figura 5.52: Metodologias para a reconstrução do diagrama de bifurcação de um sistema dinâmico via redes neurais LSTM [268].

A Figura 5.52 resume as metodologia empregada para a reconstrução de diagramas de bifurcação nas suas duas variantes. Na reconstrução do diagrama de Rossler, foi considerada uma rede LSTM com 1 camada oculta de 32 nós e 36 rolls (ou seja 36 atrasos de tempo). A função de ativação correspondeu a $\tanh$ para todas as camadas, exceto a camada de saída, onde foi empregada uma ativação linear visando a produção do sinal contínuo.

Os hiper-parâmetros da rede neural foram estabelecidos conforme as seguintes heurísticas:

- Número de camadas ocultas: problemas de regressão que requerem duas ou mais camadas ocultas raramente são encontrados. Arquiteturas de rede com uma camada oculta podem aproximar qualquer função que contenha um mapeamento contínuo de um espaço finito para outro [118].
- Número de neurônios nas camadas ocultas: Baseados nos procedimentos estabelecidos nas referências [34, 249].
- Função de ativação: $\tanh$ e ReLU são funções de ativação amplamente utilizada em problemas de regressão [32, 209].

A geração de dados consistiu na simulação do sinal de perturbação usando o esquema de integração estocástico de Euler-Maruyama. Posteriormente, foram integradas as equações dinâmicas com um método de passo fixo tipo Runge Kutta de quarta ordem [47].

A resolução é escolhida de forma que o número de valores históricos considerados R (tempo de atraso) correspondam a um período natural do oscilador. No caso dos osciladores caóticos, este foi calculado como o período médio.

A metodologia de cálculo pode ter as seguintes variantes:

- A geração de dados considera uma única realização dos estados do sistema dinâmico para cada valor de perturbação $p(t_i)$;
- A geração de dados considera uma $N_i > 1$ realizações dos estados do sistema dinâmico para cada valor de perturbação $p(t_i)$.

Após o treinamento da rede neural com os dados gerados conforme as abordagens descritas acima, o diagrama de bifurcação pode ser reconstruído segundo a mesma metodologia introduzida na Seção 4.1.2. Em resumo:

1. Definição de um intervalo de parâmetro de bifurcação p para o qual será feita a varredura;

2. Para cada valor de parâmetro p e uma janela de tempo w suficiente para a observação da dinâmica, é realizada a predição do estado(s) usando a rede neural treinada;
3. Busca de valores máximos e mínimos na série temporal predita de tamanho w .

Um importante ponto de destaque nas predições da rede e na abordagem aqui apresentada é a necessidade de incorporar um mecanismo de atualização dos estados em cada passo de predição. Considere-se o esquema apresentado na Figura 5.53: dado um valor de parâmetro p , a rede neural recebe um tensor composto pelos registros de um vetor de tempo t_n de 3 variáveis x, y, z e os respectivos atrasos temporais (desfasados) em τ_m (neste caso $n = w$ e $m = R$). Posteriormente, a rede neural realiza o procedimento de predição de $\hat{t}_1$ ao receber o primeiro sub-bloco (verde) correspondente às observações no tempo t_0 . Dado que já existe um sub-bloco associado a t_1 , este precisa ser atualizado com a predição $\hat{t}_1$. Consequentemente, o processo de predição/atualização percorre cada um dos registros do vetor de tempo t_n . Deve ser observado que em $n > m$, as novas predições devem ser feitas a partir de atrasos que foram obtidos também como previsões.

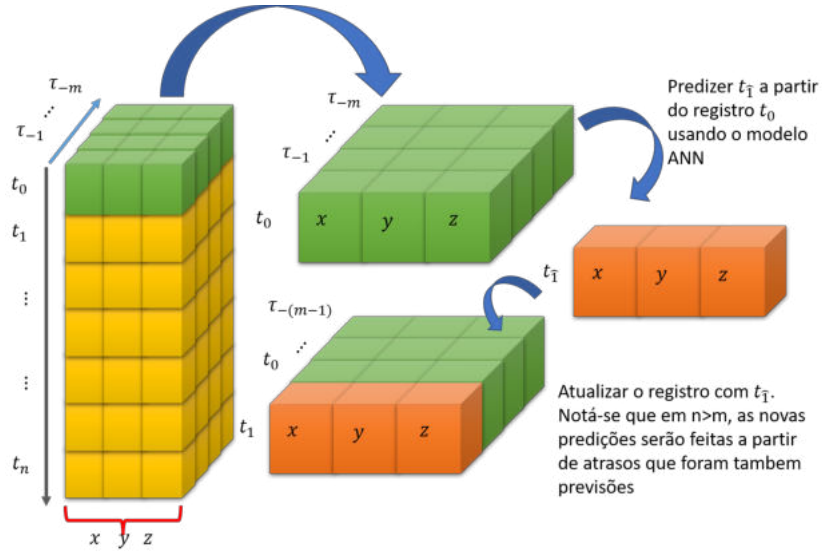


Figura 5.53: Procedimento de atualização de registros durante a previsão de estados pela rede neural

5.4.1.2 Reconstrução do diagrama de bifurcação de Rossler

A reconstrução do diagrama de bifurcação para o benchmark do sistema dinâmico de Rossler foi realizada considerando as metodologias discutidas na Seção 5.4.1.1.

A geração de dados e construção da rede neural considerou as heurísticas definidas acima, correspondendo aos seguintes parâmetros:

- $R_\tau = 36$: valores históricos (atrasos) considerados para a previsão de um passo;
- $\delta t = 0.01$: passo de tempo constante na integração Runge Kutta;
- $Ns = 32$: neurônios em cada camada;
- $Data-Sampling = 17$: escolhido de tal forma que: $data_sampling * R * dt = T_{av}$

Onde T_{av} é a média do período de oscilação do atrator caótico (para o caso do atrator de Rossler corresponde a 6.2). Assim, um período de oscilação seria coberto por um registro e seus correspondentes 36 tempos de atraso.

Na Figura 5.54 apresentam-se as séries temporais obtidas para o treinamento da rede neural, onde as perturbações no parâmetro $p(t)$ seguem o processo estocástico Ornstein-Uhlenbeck. Observa-se também a proporção para de separação dos conjuntos de treino e validação.

O treinamento da rede neural foi realizado no API Keras [57] de TensorFlow [2] via interface com linguagem Python 3.8.

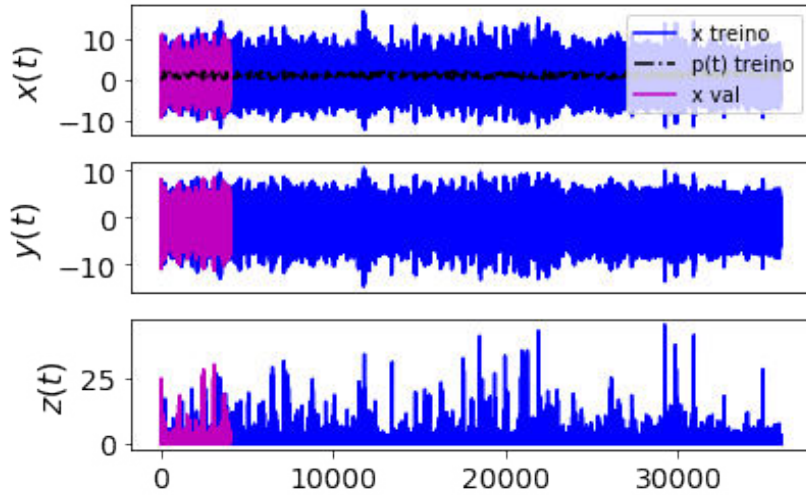


Figura 5.54: Perturbações $p(t)$ via processo estocástico Ornstein-Uhlenbeck e respostas dinâmicas

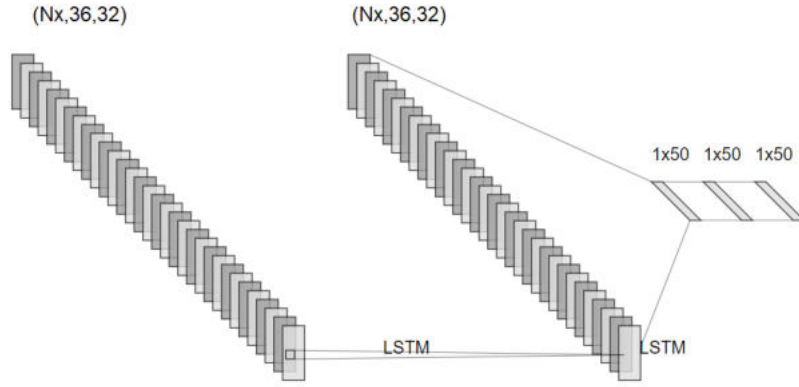


Figura 5.55: Arquitetura da rede neural usada para a reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler

A rede neural é constituída por uma camada oculta LSTM que é alimentada por entradas na forma tensorial com tamanho de série temporal $Nx = 36000$, $Nos = 32$ e $R = 36$. A saída de rede neural corresponde a uma camada densa, gerando as previsões das três variáveis de estado do sistema dinâmico. Um esquema simplificado da arquitetura da rede neural é apresentado na Figura 5.55.

Na Figura 5.56 apresentam-se as métricas estatísticas durante o treinamento da rede neural, em que é possível observar que os erros são reduzidos como função das *epochs* (etapas de procedimento iterativo) empregadas, descartando problemas de sobre-ajuste durante o treinamento.

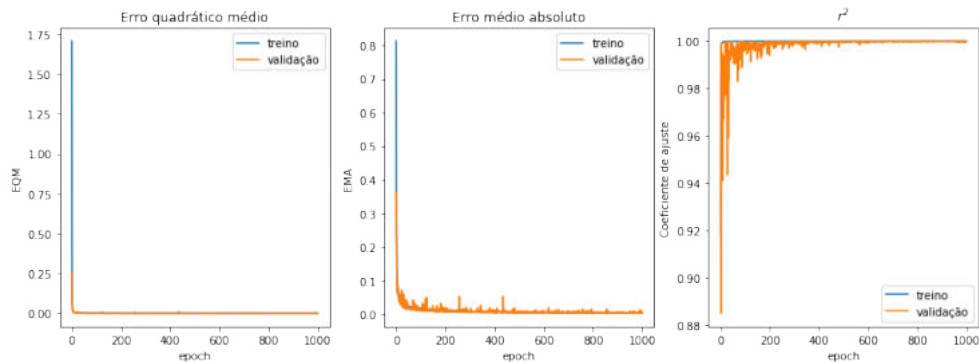


Figura 5.56: Métricas estatísticas durante o treinamento da rede neural

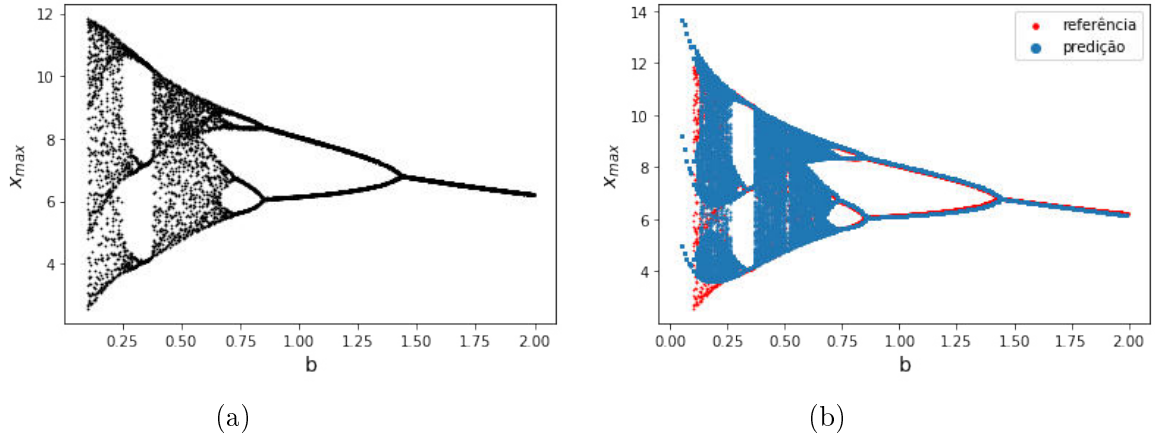


Figura 5.57: Reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler pela metodologia de única série: (a) diagrama de bifurcação de referência via equações.(b) diagrama de bifurcação de reconstruído.

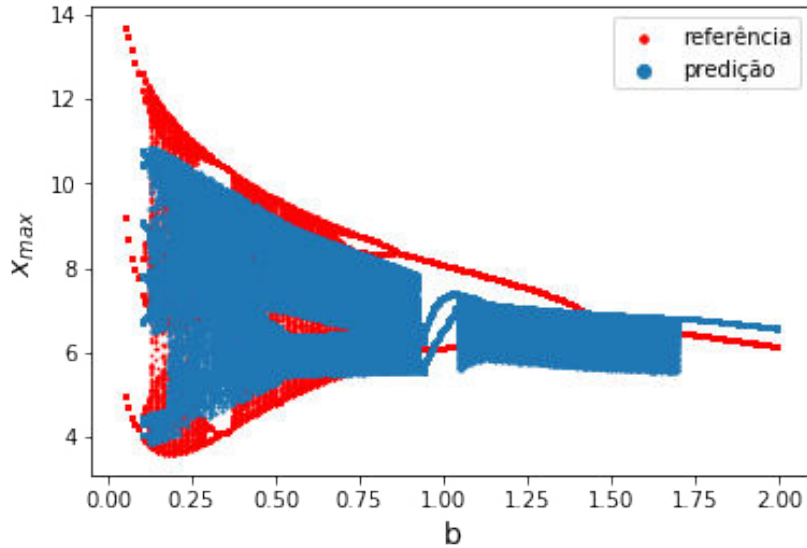


Figura 5.58: Reconstrução do diagrama de bifurcação do sistema Rossler pela metodologia de múltiplas séries.

Na Figura 5.57 é apresentado o resultado de reconstrução do diagrama de bifurcação usando a metodologia com série temporal única. Deve ser observado que a reconstrução foi satisfatória para altos valores do parâmetro b e tende a divergir em valores baixos de b onde se encontram as oscilações caóticas de alta amplitude do sistema.

Por outra parte, a Figura 5.58 mostra o diagrama de bifurcação reconstruído usando a metodologia com múltiplas séries, quando considerado um tamanho de janela $w = 100$ (suficiente para cobrir uma oscilação de alto período). Nota-se que a estrutura dos lóbulos do diagrama são mais ruidosos, o que indica deficiências na identificação dos máximos e mínimos de oscilação. Essa característica é inerente

à metodologia, uma vez que por cada valor de parâmetro b são relacionados w valores diferentes de estado. No entanto, a metodologia de séries múltiplas gera $NIteraes/w$ -valores diferentes do parâmetro b , enquanto a metodologia de série única gera $NIteraes$ -valores do parâmetro, representando mais intensivamente a dinâmica na região paramétrica.

A despeito das deficiências comentadas acima, a metodologia de séries múltiplas permite a geração dos dados para o treino da rede neural sem necessidade de usar a abordagem estocástica Ornstein-Uhlenbeck, sendo aplicável a qualquer sistema dinâmico independentemente das relações não lineares do parâmetro de bifurcação. Além disso, é importante notar que em grande parte das aplicações estudadas neste trabalho o objetivo principal é a previsão da primeira bifurcação, sendo menos relevante a previsão de estruturas dinâmicas posteriores. Dessa forma, a metodologia de séries múltiplas constitui uma ferramenta importante para a reconstrução de diagramas de bifurcação no contexto de estudo.

Em termo comparativos com outras abordagens de reconstrução de diagramas de bifurcação via redes neuronais pode-se ressaltar:

- A presente metodologia não requiriu o uso de abordagens com múltiplas camadas ocultas (deep learning) nem configurações de rede mais complexas como auto-encoders tal como foi apresentado na referência [177].
- A presente metodologia foi capaz de reconstruir o diagrama de bifurcação de dinâmicas contínuas complexas. Enquanto, na referência , embora tenha sido usada uma arquitetura semelhante só foram reconstruídos diagramas de bifurcação de mapas discretos [162].
- A presente abordagem considera o problema de reconstrução do diagrama de bifurcação como não supervisionado, enquanto na referência o problema é considerado como um problema de classificação (usando uma rede LSTM com auto-encoders) [116] gerando etapas adicionais na engenharia de *features* e rotulação de registros.
- A presente metodologia considerou um treinamento com só duas variáveis ($x(t)$ e $p(t)$) enquanto a técnica sugerido na referência [133] emprego métricas adicionais como expoentes de Lyapunov numa rede neural ELM (Extreme learning machine).

Um questionamento natural surge ao relacionar ou não a geração dos valores do parâmetro b via processo estocástico na reconstrução satisfatória do diagrama de bifurcação. Dessa forma, um procedimento alternativo ao proposto na figura 5.52

onde foi mimetizada a distribuição de probabilidade do processo Ornstein-Uhlenbeck e ajustada a uma função de probabilidade log-normal. Na figura 5.59 apresentá-se as realizações do parâmetro b pelas duas abordagens e o histograma de ambas funções de probabilidade.

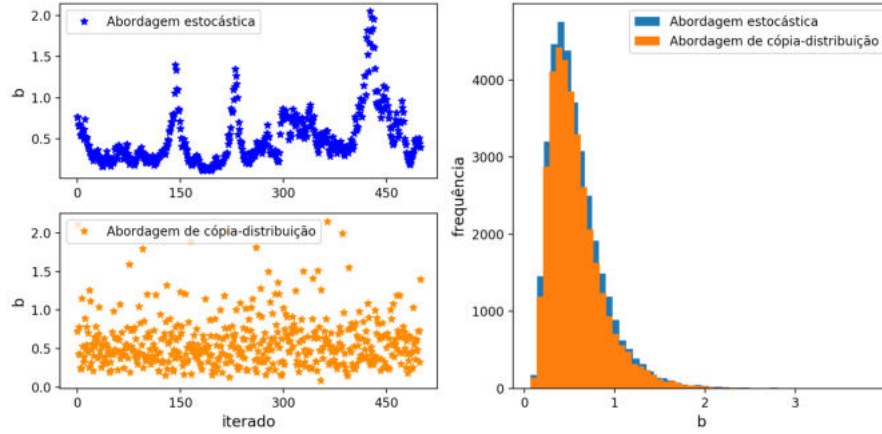


Figura 5.59: Realizações dos iterados de b pela abordagem estocástica e pela abordagem de cópia de distribuição. Histograma de funções de probabilidade.

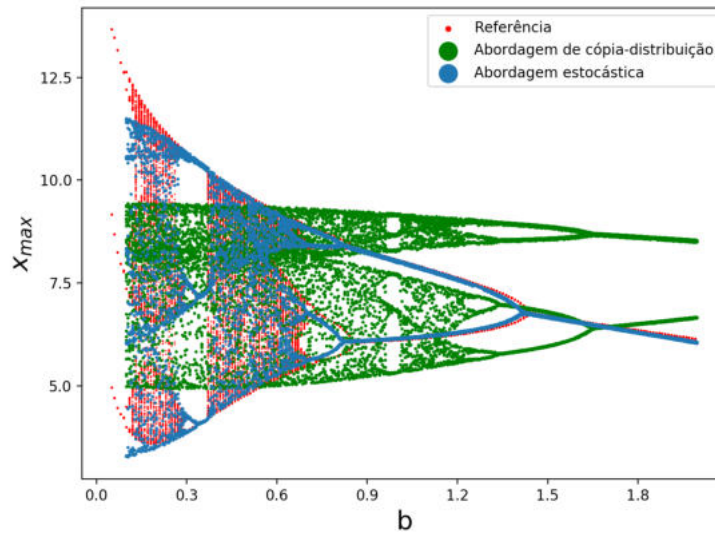


Figura 5.60: Comparação entre o diagrama de bifurcação do fluxo de Rossler e os diagramas reconstruídos pelas abordagens estocástica e de cópia de função de probabilidade.

Na figura 5.60 observá-se que enquanto o diagrama reconstruído pela abordagem estocástica apresenta um ajuste satisfatório, o diagrama reconstruído pela abordagem de cópia de distribuição apresenta um padrão desfasado do referencial. Notá-se que embora as duas abordagens admitiam a mesma arquitetura de rede neural e garantiam a mesmos valores de realizações de b pela semelhança das dis-

tribuições de probabilidade, a reconstrução só foi satisfatória no caso da abordagem estocástica, tal comportamento explicá-se na dinâmica intrínseca nas realizações do parâmetro b . A figura 5.59 mostra que as realizações de b na abordagem estocástica segue um padrão oscilatório e suave (semelhante às variáveis de estado do sistema dinâmico) enquanto as realizações da segunda abordagem são de carácter mais acidentado, mostrando que não basta com garantir a mesma distribuição de probabilidade do parâmetro de bifurcação senão também a ordem ou sequência em que as realizações acontecem.

5.4.1.3 Reconstrução do diagrama de bifurcação do modelo FOWM

Dado que a abertura de de válvula Choke no modelo FOWM consiste em um parâmetro não livre (apresenta combinações não lineares com variáveis de estado), impossibilita-se o uso do processo estocástico para a geração da função de probabilidade estatística do dito parâmetro. Neste cenário, considerou-se o emprego da metodologia multi-série previamente descrita na Figura 5.52, em que as realizações do parâmetro de bifurcação são realizadas de forma sequencial e ordenada. O conjunto de dados gerados pelo modelo e usados no treinamento da rede neural são apresentados na Figura 5.61.

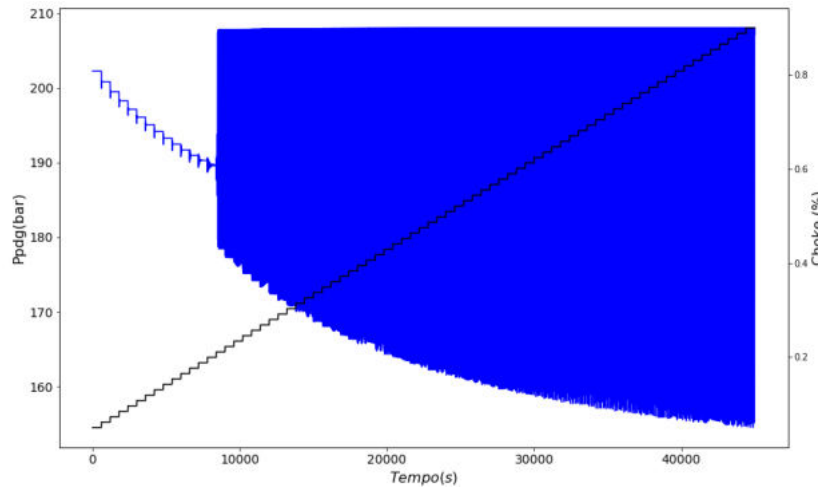


Figura 5.61: Séries temporais do modelo FOWM empregadas na predição do diagrama de bifurcação

A arquitetura de rede neural empregada consiste numa análoga à apresentada na Figura 5.55, com 50 neurônios na camada oculta. Os critérios para a definição de hiper-parâmetros seguiram as heurísticas definidas na subseção acima. A rede neural foi treinada considerando três diferentes métricas de desempenho (Erro quadrático médio (EQM), Erro médio absoluto (EMA) e o fator de ajuste r^2), as quais são apresentadas na Figura 5.62. Deve ser observado que o modelo apresenta boa capacidade

de ajuste conforme são adicionadas mais amostras de treino. Além disso, a Figura 5.63 mostra que as curvas de aprendizagem para o conjunto de treino e validação diminuem até um ponto de estabilidade, mantendo uma faixa de generalização baixa. Esses resultados mostram que o modelo permitiu obter um ajuste adequado uma vez que não foram observados padrões de sobreajuste ou baixa representatividade.

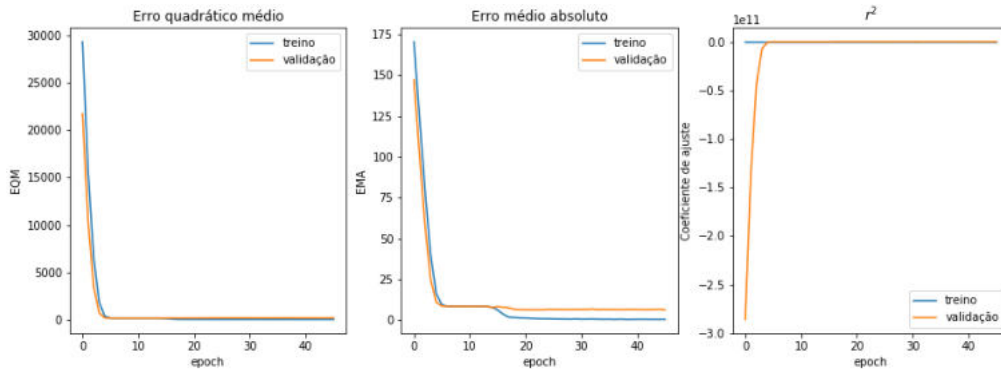


Figura 5.62: Métricas de aprendizado durante o treinamento da rede neural

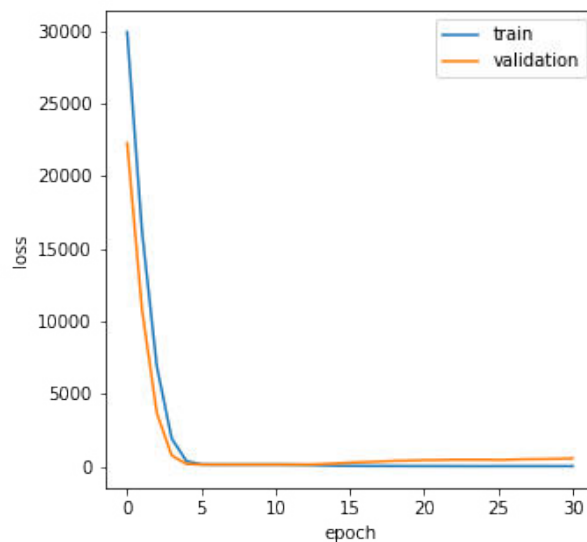


Figura 5.63: Curva de aprendizagem durante o treinamento da rede neural. No caso o valor de perda *loss* corresponde ao próprio EQM.

O diagrama de bifurcação reconstruído a partir do modelo obtido pela rede neural é apresentado na Figura 5.64. Observa-se que a reconstrução é satisfatória para condições de operação com abertura de válvula choke após o ponto de bifurcação. No entanto, para condições de abertura de válvula choke menores que a do ponto de bifurcação, a reconstrução do diagrama não é representativa. Essa observação é justificada pelo fato de que a rede neural foi treinada com um conjunto de dados predominantemente oscilatórios, dificultando a sua capacidade de discriminação nos cenários em que a dinâmica do sistema é estacionária.

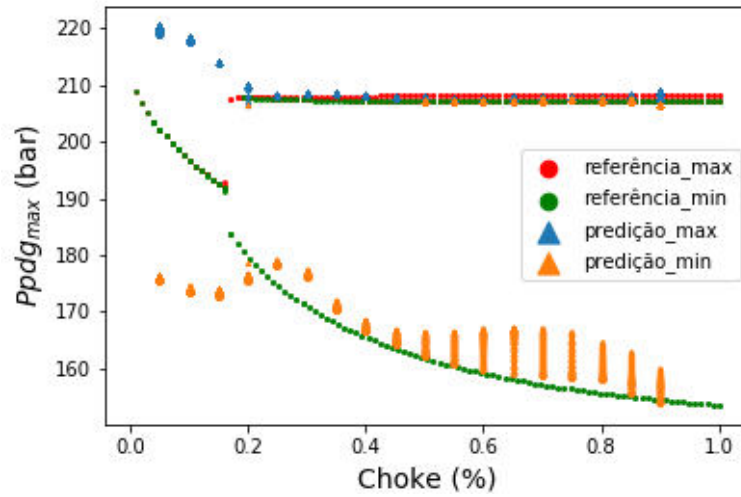


Figura 5.64: Diagrama de bifurcação do modelo FOWM reconstruído pela rede neural LSTM

5.4.1.4 Reconstrução do diagrama de bifurcação do modelo FOWM auxiliado por métricas invariantes

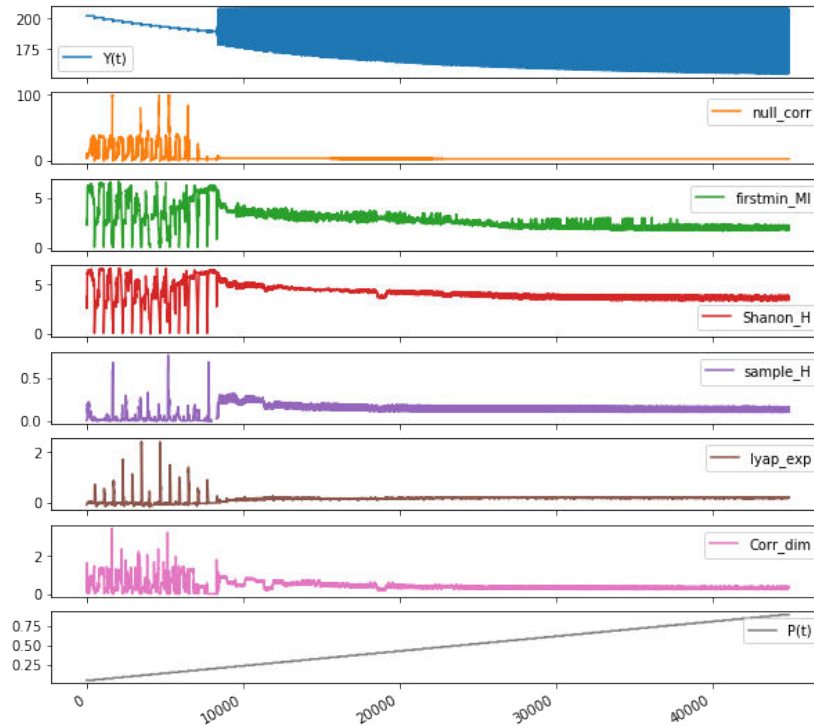


Figura 5.65: Séries temporais do modelo FOWM empregadas na predição do diagrama de bifurcação. O conjunto inclui as métricas invariantes: τ autocorrelação nula, τ de mínimo de informação mútua, entropia de Shanon, entropia amostral, máximo expoente de Lyapunov e dimensão de correlação.

Ao longo das Seções 5.2 e 5.3 foi observada e discutida a relevância das métricas

do conjunto invariante na caracterização das bifurcações de Hopf, uma vez que essas métricas apresentam padrões muito diferentes em função da presença da bifurcação. A abordagem empregada neste caso consistiu na inclusão das referidas métricas no conjunto de treinamento da rede neural. Como foi notado na Seção 5.4.1.1 o processo de atualização da rede exige que a arquitetura tenha o mesmo número de variáveis na entrada e na saída. Dessa forma, as previsões são executadas tanto para a variável de processo (pressão na PDG) quanto para as métricas derivadas dela.

Na Figura 5.65 apresenta-se o conjunto de treinamento completo. As métricas do conjunto invariante foram calculadas conforme a Seção 5.3 e considerando uma abordagem de janela deslizante de tamanho $w = 100$ (parâmetro definido baseado nas observações da Seção 5.3.1). Da mesma forma que no caso anterior, a rede neural foi treinada considerando uma única camada oculta com 50 neurônios. As correspondentes curvas das métricas de desempenho e a curva de aprendizagem são apresentadas nas Figuras 5.66 e 5.67 observando-se a capacidade de ajuste e grau de generalização do modelo.

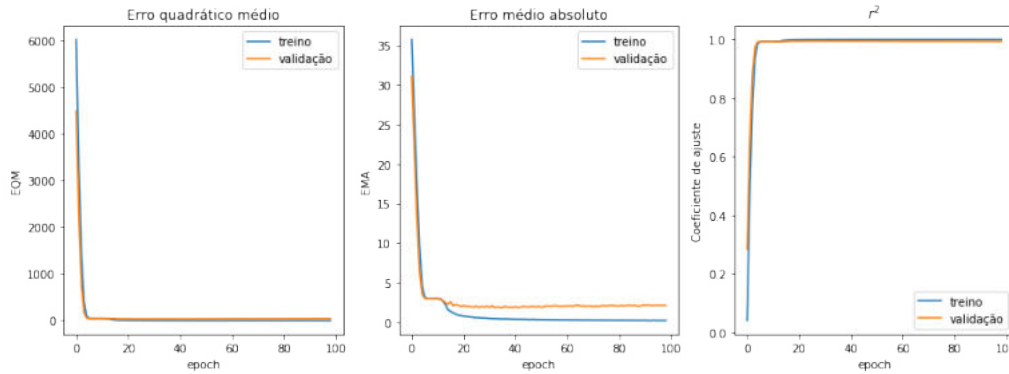


Figura 5.66: Métricas de aprendizado durante o treinamento da rede neural usando métricas invariantes

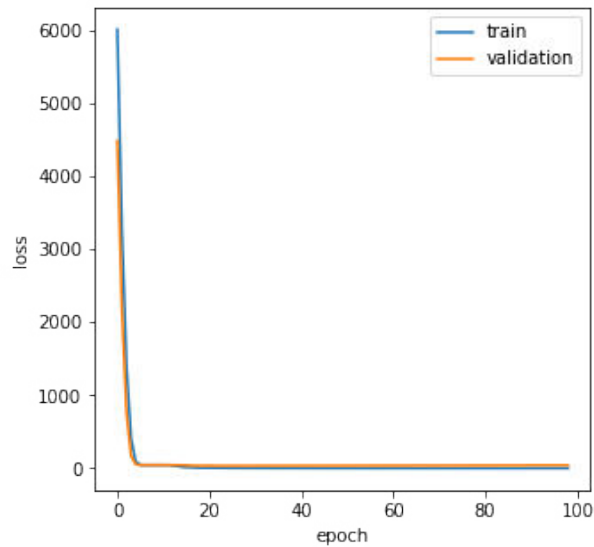


Figura 5.67: Curva de aprendizagem durante o treinamento da rede neural usando métricas invariantes

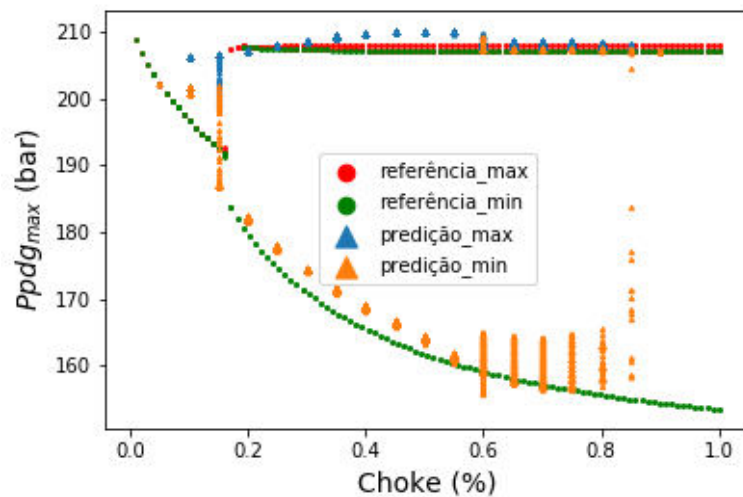


Figura 5.68: Diagrama de bifurcação do modelo FOWM reconstruído pela rede neural LSTM usando as métricas invariantes

Na Figura 5.68 apresenta-se o diagrama de bifurcação reconstruído a partir do modelo obtido pela rede neural. Observa-se que a reconstrução foi satisfatória para o intervalo completo do parâmetro de bifurcação. É importante ressaltar que, embora o conjunto de treinamento estivesse desbalanceado, esta abordagem conseguiu a reconstrução plena do diagrama, uma vez que foram inclusas métricas que oferecem mais informação sobre a dinâmica de transição em torno ao ponto de bifurcação de Hopf.

Tabela 5.7: Períodos de dados usados na reconstrução do diagrama de bifurcação via rede neural artificial.

Período	I	II	III	IV
Datas	[2018-11-19T06:00; 2018-11-21T00:00]	[2017-02-12T06:00; 2017-02-13T00:00]	[2017-09-28T10:00; 2017-09-29T00:00]	[2018-02-18T12:00; 2018-03-06T00:00]

5.4.1.5 Reconstrução do diagrama de bifurcação usando os dados de poço offshore

Considerando o caso de estudo apresentado na Seção 5.1.2 referente aos dados de produção da plataforma *offshore*. A tabela 5.7 apresenta os períodos com dinâmica golfante usados no treinamento da rede neural e a reconstrução do diagrama de bifurcação do poço. Outros períodos de interesse são apresentados na animação do material suplementar⁶.

A Figura 5.69 corresponde ao período I onde é possível observar o surgimento de um comportamento oscilatório auto-sustentado produto de uma bifurcação de Hopf. Os respectivos diagramas de bifurcação obtidos a partir das observações diretas das séries temporais mostram que o ponto de bifurcação coexiste (em termos de abertura de válvula Choke) para as duas pressões medidas no sistema.

A rede neural empregada segue a arquitetura proposta na 5.55 e Seção 5.4.1.3 com $N_s = 100$, $R_\tau = 26$ mantendo a amostragem de dados com frequência de 1 minuto. O treinamento da rede neural considerou as mesmas métricas de ajuste apresentadas na Seção 5.4.1.3.

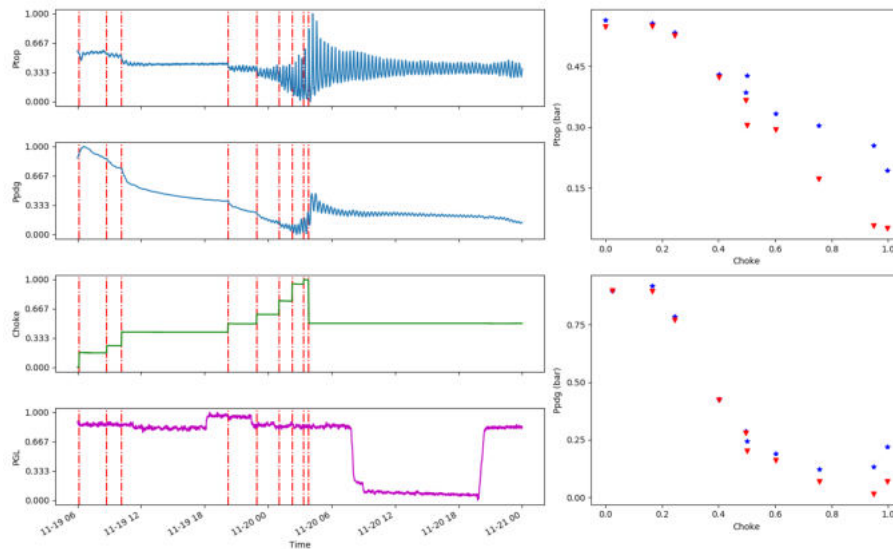


Figura 5.69: Dados do processo do período I e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).

⁶A versão digital apresenta-se em YouTube 

Na Figura 5.70 apresenta-se os resultados de ajuste da rede neural nos períodos de treino e teste. Por outra parte a Figura 5.71 apresenta o diagrama de bifurcação reconstruído a partir do modelo obtido pela rede neural e sua respectiva comparação com os dados de dispersão da planta. A metodologia de reconstrução do diagrama de bifurcação segue os mesmos lineamentos descritos na Seção 5.4.1.1. Nota-se que o modelo obtido, prevê o ponto de bifurcação de Hopf no mesmo ponto onde foi observada a bifurcação nos dados do processo (ponto de maior dispersão verticalmente).

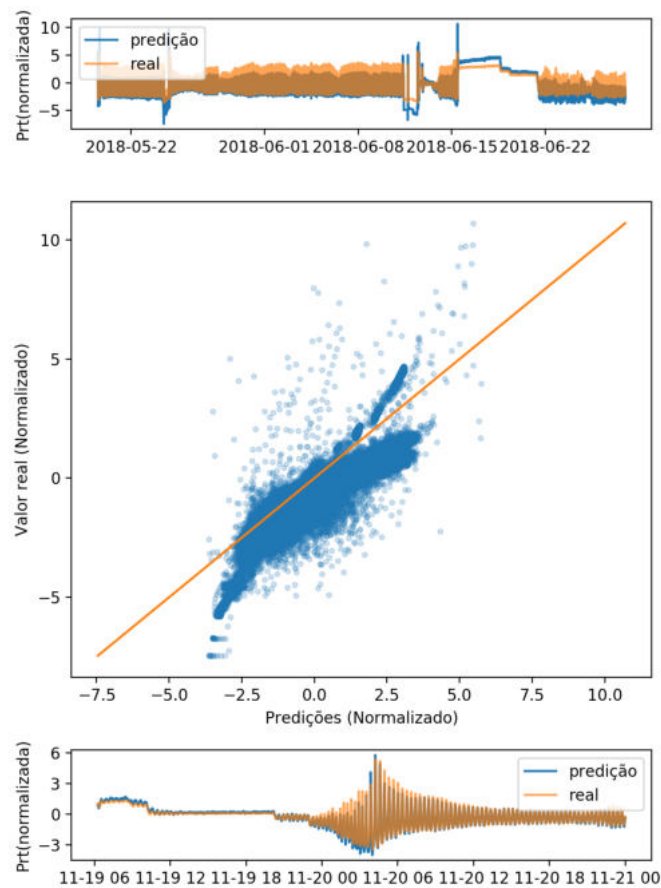


Figura 5.70: Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período I (Normalização robusta [216]).

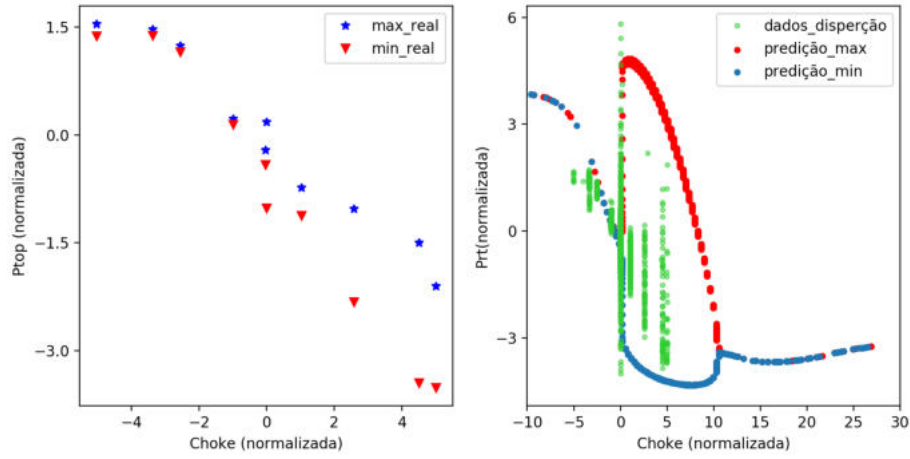


Figura 5.71: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período I (Normalização robusta [216]).

A Figura 5.72 exibe o comportamento golfante no período II e os diagramas de bifurcações obtidos a partir das observações das séries temporais. Além disso, as Figuras 5.73 e 5.74 mostram o ajuste obtido e a respectiva reconstrução do diagrama de bifurcação. É importante notar que para as reconstruções com este subconjunto de dados foi considerado um atraso $R_\tau = 10$.

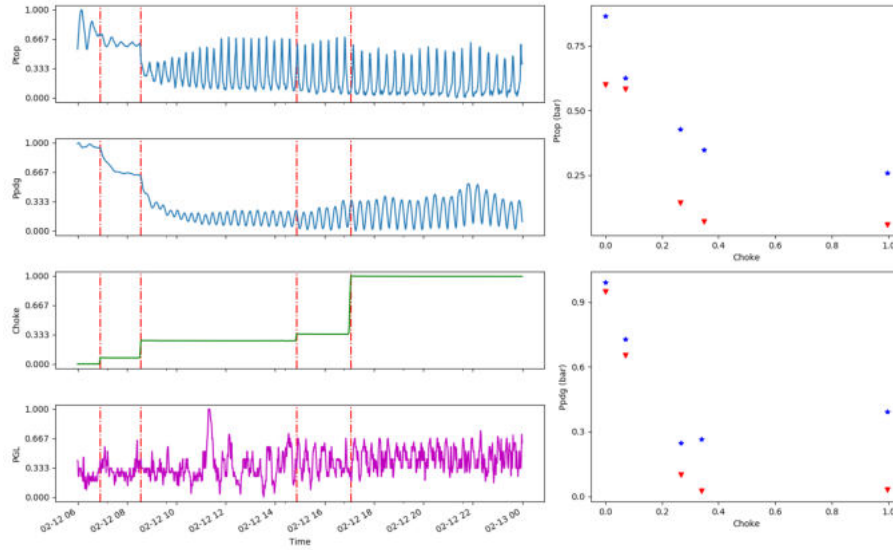


Figura 5.72: Dados do processo do período II e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).

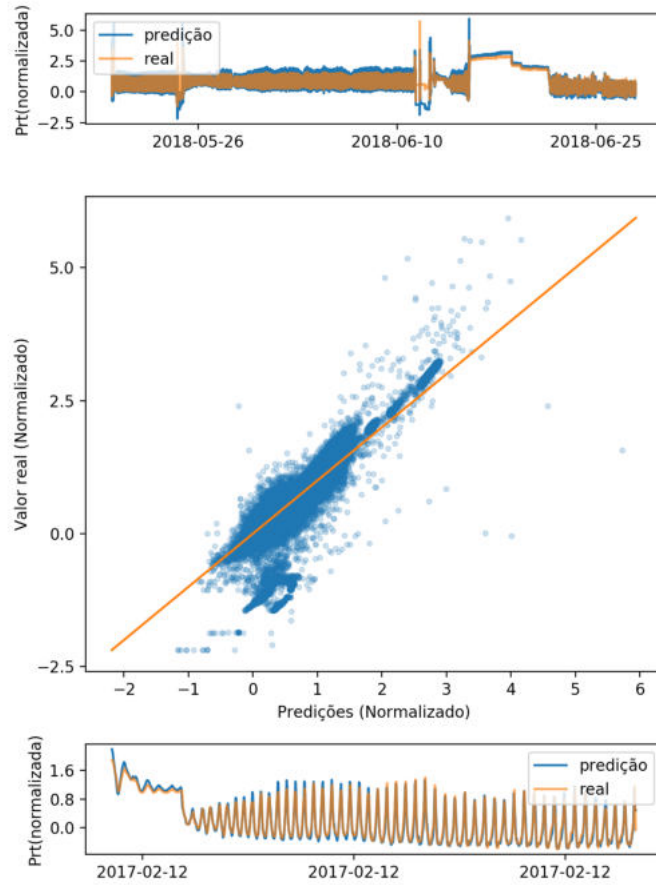


Figura 5.73: Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).

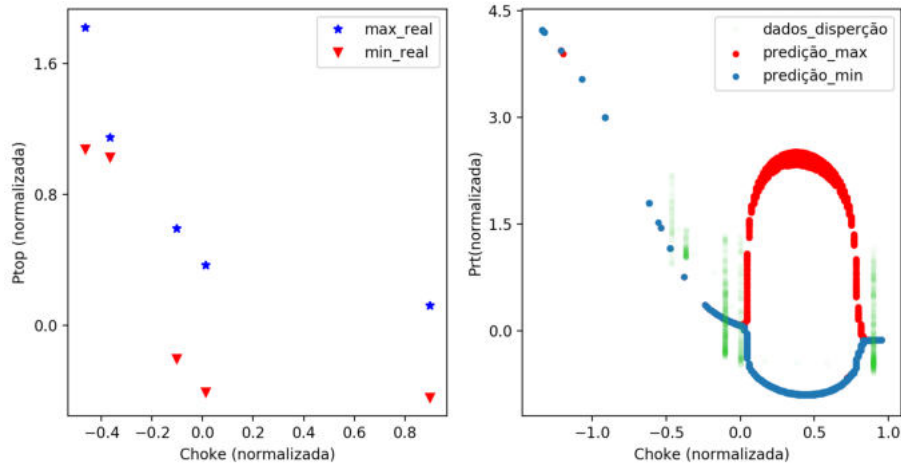


Figura 5.74: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).

Por fim, as Figuras 5.75, 5.76 e 5.77 correspondem aos resultados de ajuste e reconstrução do diagrama de bifurcação do período de dados III quando considerado um atraso $R_\tau = 26$

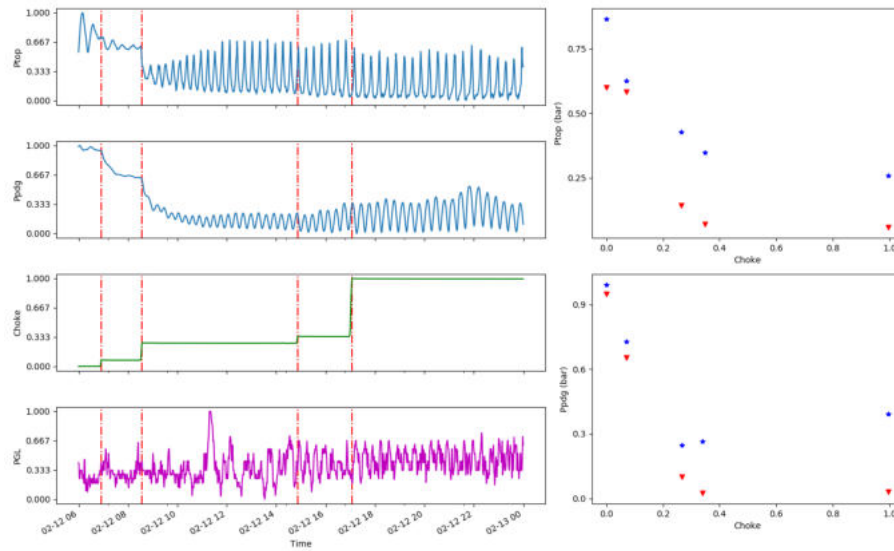


Figura 5.75: Dados do processo do período II e diagramas de bifurcação reais (Normalização min-max).

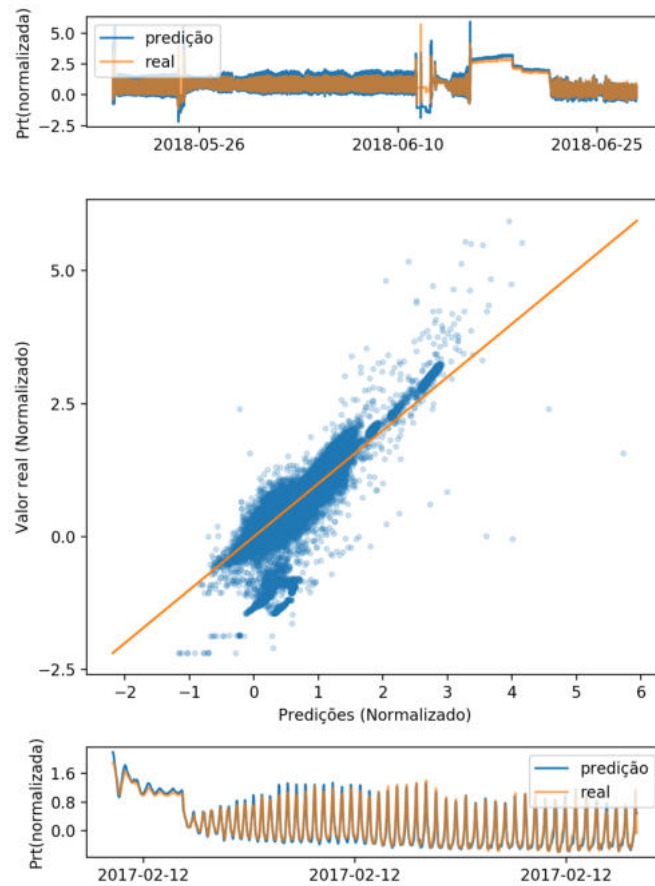


Figura 5.76: Ajuste do modelo obtido via rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).

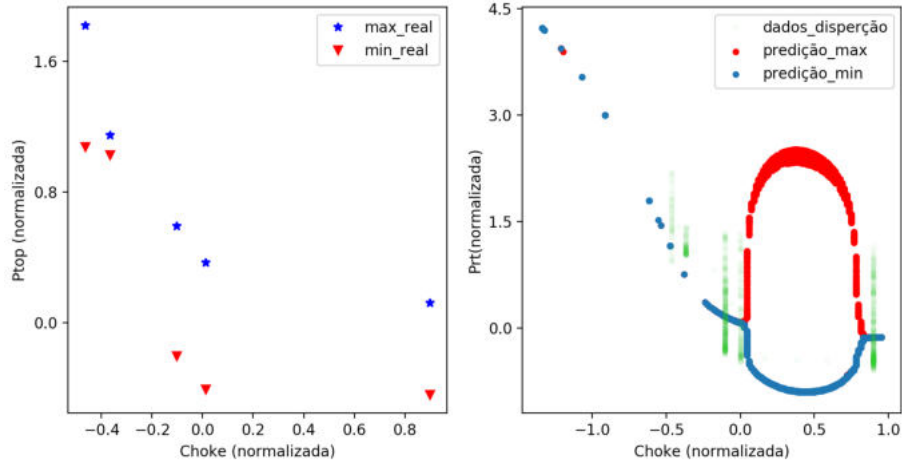


Figura 5.77: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período II (Normalização robusta [216]).

É importante destacar que nos períodos descritos acima a rede neural conseguiu ajustar nos respectivos conjuntos de treinamento e validação. Além disso, foi possível reconstruir, em todos os cenários, o diagrama de bifurcação cuja curva de equilíbrio passa pelos dados de dispersão do processo. No entanto, é importante ressaltar que a metodologia é incapaz de obter o ramo de curva de equilíbrio instável uma vez que as redes neurais foram treinadas com dados de origem observável, i.e. dados dinâmicos de um equilíbrio assintoticamente estável e convergente.

O efeito do parâmetro R_τ (passos de atraso na rede neural) na reconstrução do diagrama de bifurcação pode ser observado nas Figuras 5.78, 5.79 e 5.80. Observá-se que para um mesmo conjunto de treinamento (período IV) os resultados da previsão da série temporal e posteriormente da reconstrução do diagrama de bifurcação são sensíveis a esse parâmetro. Particularmente, o conjunto de dados apresenta um período médio de oscilação $T_{av} = 26min$, daí que a rede LSTM com $R_\tau = 29$ conseguiu a melhor reconstrução uma vez que os atrasos preenchem completamente uma oscilação da série temporal.

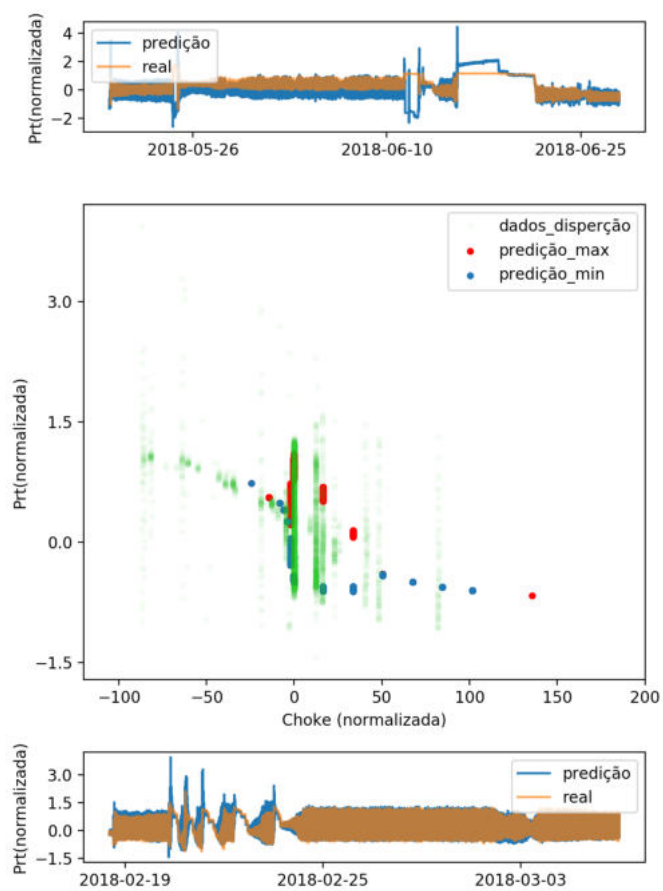


Figura 5.78: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 9$.

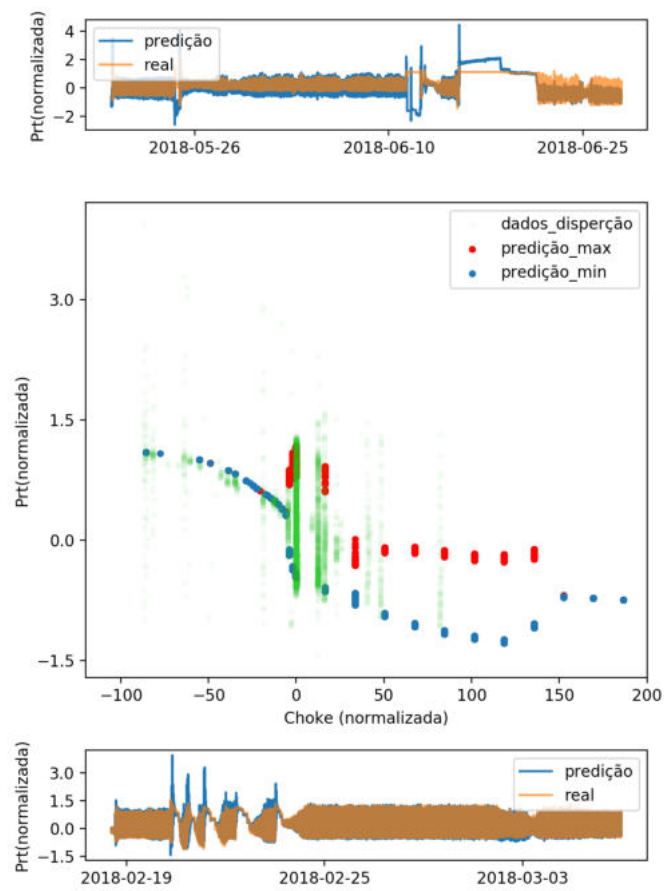


Figura 5.79: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 12$.

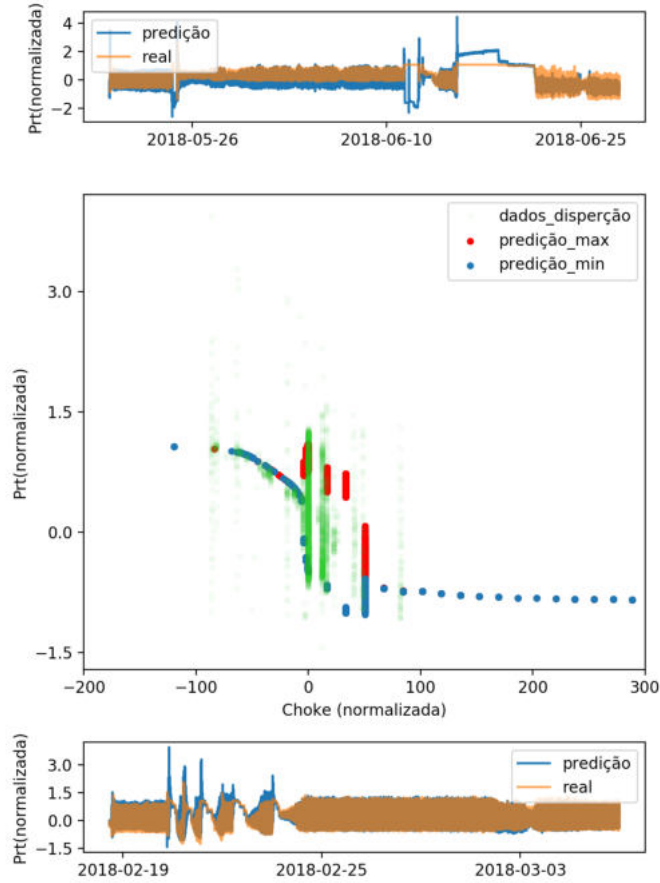


Figura 5.80: Diagrama de bifurcação reconstruído usando a rede LSTM no período IV com $R_\tau = 29$.

5.4.1.6 Comentários complementares

Conforme mostrado nas seções anteriores, foi mostrado de forma completamente original que a adição dos invariantes dinâmicos no conjunto de treinamento das redes neurais permite o treinamento muito mais preciso e melhor ajustado dos comportamentos dinâmicos do modelo original que gerou os dados. Com base na literatura consultada, não identificamos outros trabalhos que tenham mostrado esse benefício de considerar os invariantes como parte do problema de identificação do modelo *machine learning* construído. Dessa forma, mostra-se novamente que a caracterização dinâmica das trajetórias avaliadas com auxílio de tais invariantes, como autocorrelações, medidas de entropia e expoentes de Lyapunov, pode ser muito benéfica para a construção de modelos do tipo *machine learning* para o monitoramento de processos.

Tabela 5.8: Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur

Parâmetro	r	c	ϵ	m	w	a	h	d_1	d_2
Valor	2	10	1	1	0.2	3	0.5	1	1

5.4.2 Reconstrução da matriz Jacobiana via equações estocásticas

A reconstrução da matriz Jacobiana pode estar baseada na resolução da equação de Fokker-Planck, construída a partir conceitos de equações estocásticas apresentados na Seção 3.6. Os resultados apresentados foram obtidos aplicando a metodologia descrita na Seção 4.2.5 e Apêndice F.

A metodologia de reconstrução foi inicialmente testada, validada e aplicada à rede *meta-foodweb*, considerando o sistema dinâmico de Rosenzweig-MacArthur [39] que tem sido empregado para a análise de metodologias de reconstrução da matriz Jacobiana via abordagem estocástica [23, 38]. O modelo consiste em uma rede espacial de nichos de habitat P ligados por avenidas de dispersão de espécies (Figura 5.81). Cada nicho abriga uma complexa cadeia alimentar, consistindo de nós S que representam populações de diferentes espécies, que estão ligadas por interações presa-predador. A dinâmica do sistema é dada por um conjunto de equações diferenciais que governam as mudanças nas variáveis devido à dispersão difusiva entre nichos e processos biológicos que ocorrem dentro de cada nicho (produção primária, interação predador-presa, mortalidade natural).

As funções usadas para modelar os processos biológicos são fortemente não lineares. Elas capturam vários efeitos de saturação e respostas realistas à disponibilidade de diferentes fontes de alimentos, como mostrado a seguir.

$$\dot{X}_{1i} = rX_{1i} \left(1 - \frac{X_{1i}}{c}\right) - \frac{aX_{1i}X_{2i}}{1 + ahX_{1i}} + \sum_j d_1 (X_{1j} - X_{1i}) \quad (5.5)$$

$$\dot{X}_{2i} = \epsilon \frac{aX_{1i}X_{2i}}{1 + ahX_{1i}} - mX_{2i}^2 - (wX_{2i})^2 + \sum_j d_2 (X_{2j} - X_{2i}) \quad (5.6)$$

Deve-se observar que, os termos de nascimento, morte natural e morte por predador na espécie presa X_{1i} , enquanto na espécie predador destacam-se os termos de reprodução e morte natural. O termo final nos balanços descreve a migração de espécies por difusão em função da taxa d_s . As conexões entre nichos via termo de migração são descritos pela matriz de adjacência A .

O modelo compreende 12 equações diferenciais ordinárias geradas pelos balan-

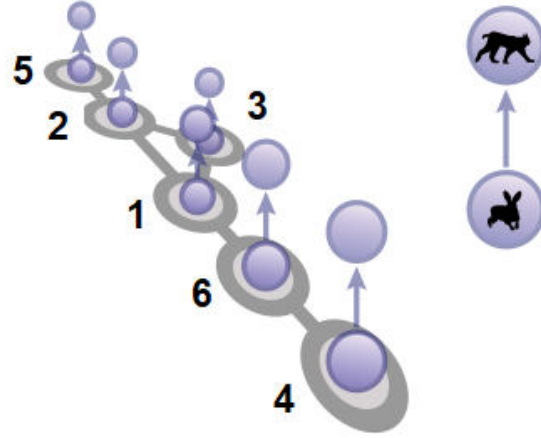


Figura 5.81: Representação esquemática da rede ecossistêmica food-web e seus nichos.

ços de espécies das Equações 5.5 e 5.6 ao longo da arquitetura de 6 nichos da Figura 5.81. As variáveis do modelo X_{si} denotam a densidade populacional das espécies s no nicho i (o modelo considera que todos os nichos de habitat são iguais). Os parâmetros do modelo são descritos na Tabela 5.8.

De acordo à referência [38], a matriz Jacobiana da família de modelos meta-food web interconectados numa rede pode ser escrita como:

$$J = I \otimes P - L \otimes K \quad (5.7)$$

em que I é a matriz identidade de tamanho $N \times N$, P é a matriz Jacobiana de um nicho isolado, L é a matriz Laplaciana da geografia da rede e K corresponde à matriz diagonal de acomplamento:

$$K = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

A matriz L pode ser calculada como: $L = D_e - A$, em que D_e é a matriz de grau e A é a matriz de adjacência. O operador $\otimes$ representa o produto Kronecker. Para a arquitetura da rede food-web analisada, a matriz Laplaciana corresponde:

$$L = D_e - A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

O sistema possui três equilíbrios locais:

$$L = D_e - A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

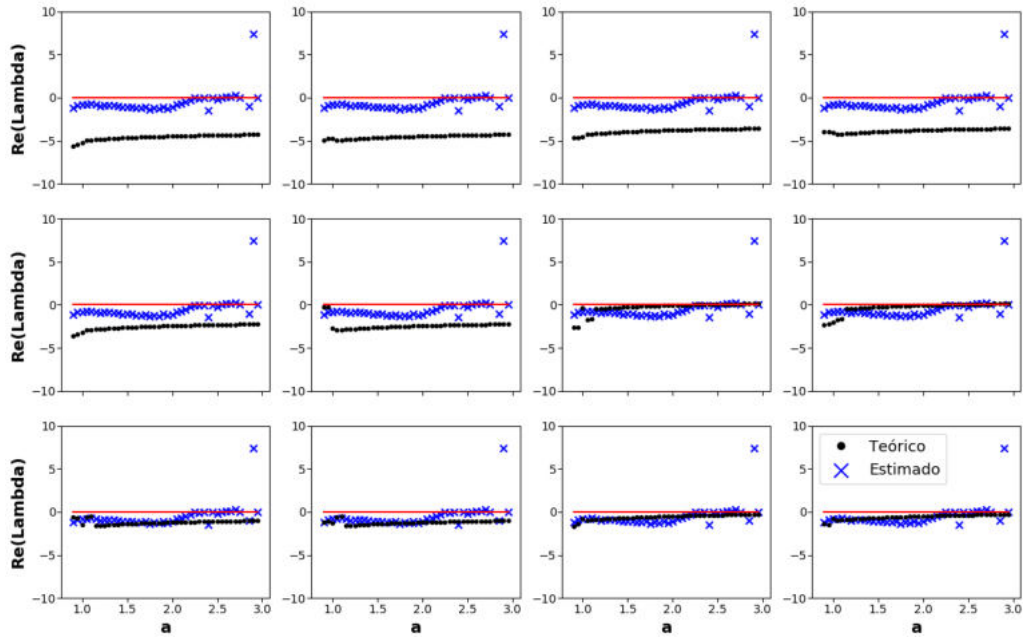


Figura 5.82: Comparação entre os autovalores analíticos do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana.

Na Figura 5.82 apresenta-se o comportamento do maior autovalor obtido pela reconstrução da matriz Jacobiana como função do parâmetro de bifurcação a (ver Equação 5.5). Deve ser observado que para o valor $a = 2.5$ ocorre uma mudança de estabilidade, produto de uma bifurcação no sistema dinâmico. Essa transição aconte-

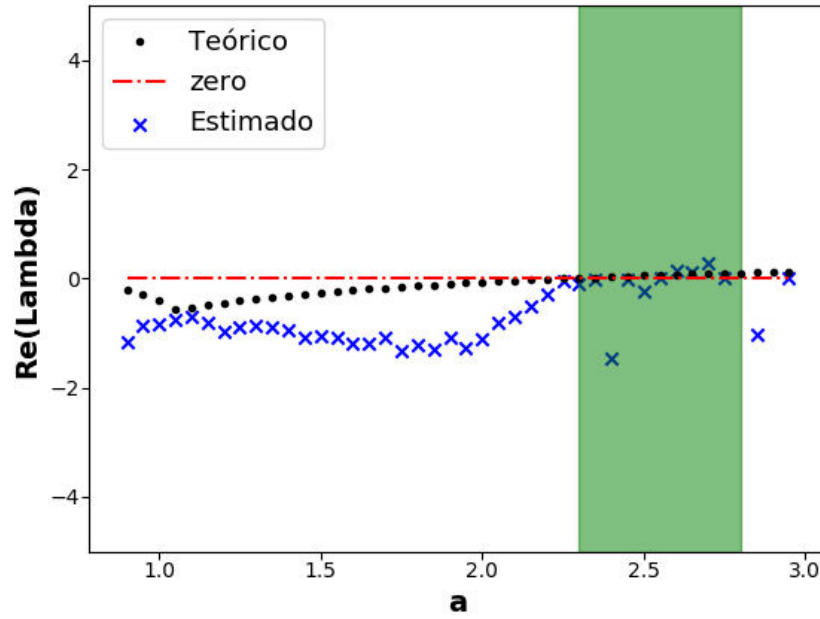


Figura 5.83: Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando a como parâmetro de bifurcação.

tece via par de autovalores complexo conjugados, o que caracteriza uma bifurcação de Hopf [258]. Por outra parte, a Figura 5.83 compara o comportamento do maior autovalor analítico e estimado. Nota-se que o ajuste do autovalor estimado é tanto melhor quanto mais próxima (janela verde) está a singularidade ou bifurcação, o que poderia ser esperado pelas próprias condições da equação de Fokker-Planck.

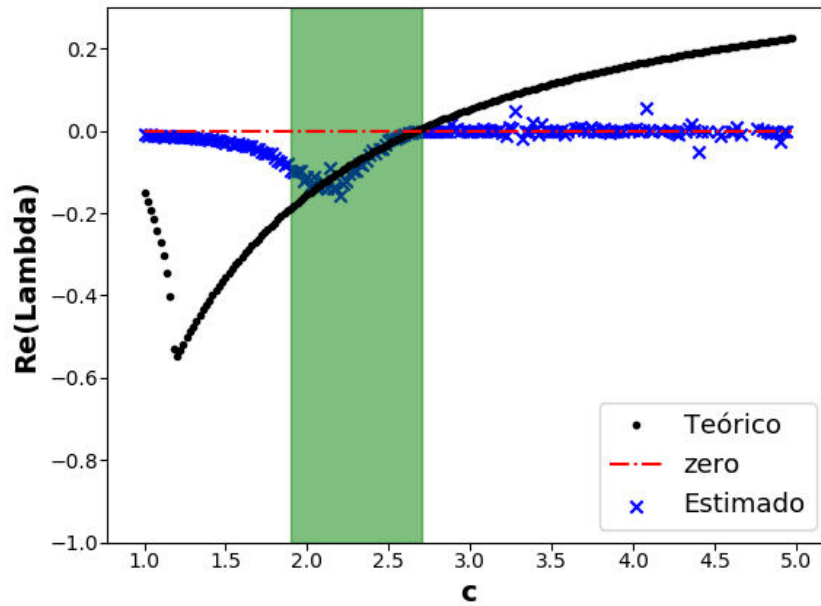


Figura 5.84: Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando c como parâmetro de bifurcação.

A Figura 5.84 corresponde à comparação entre os maiores autovalores, analítico

Tabela 5.9: Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur modificado

Parâmetro	a	b	c	m	n	d_1	d_2
Valor	1	0.5	0.6	0.1	0.2	1	1

Tabela 5.10: Parâmetros do modelo Rosenzweig-MacArthur modificado

Parâmetro	a	b	c	m	n	d_1	d_2
Valor	1	0.5	0.6	0.1	0.2	1	1

e estimado, em função da evolução do parâmetro de bifurcação c (ver Equação 5.5). Deve ser observado que em $c = 2.7$ acontece uma bifurcação, sendo que nas regiões paramétricas próximas a essa singularidade é onde a matriz Jacobiana reconstruída é mais representativa em comparação à solução analítica.

Considere-se a versão modificada (ver referência [124]) do sistema dinâmico Rosenzweig-MacArthur definido pelas Equações 5.11-5.12 e os parâmetros definidos na Tabela 5.9:

$$\dot{X}_{1i} = X_{1i} (1 - X_{1i}) (X_{1i} - m) (X_{1i} + a) - X_{1i} X_{2i} (X_{1i} + n) \quad (5.11)$$

$$\dot{X}_{2i} = b (X_{1i} + n) (X_{1i} - c) X_{2i} \quad (5.12)$$

Esse sistema dinâmico possui 5 equilíbrios coexistentes.

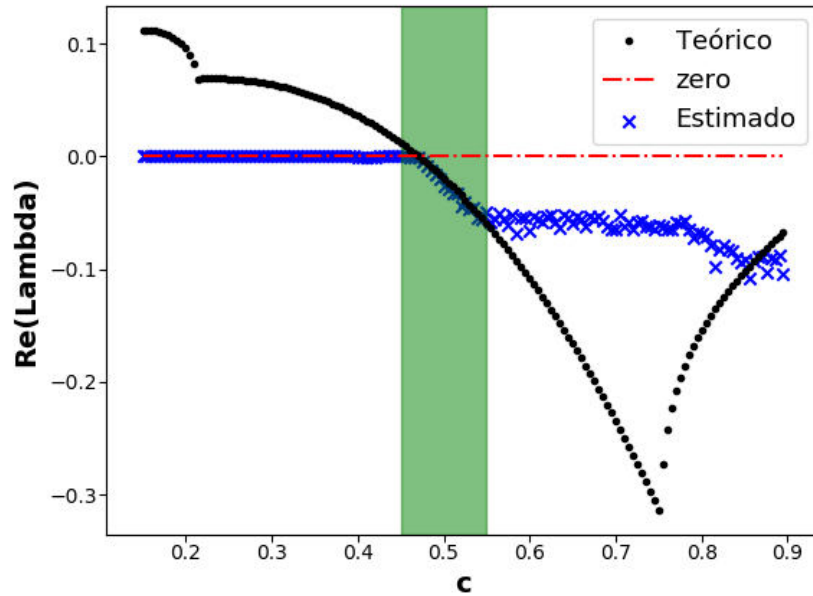


Figura 5.85: Comparação entre o maior autovalor analítico do modelo modificado e o maior autovalor da reconstrução da Jacobiana considerando c como parâmetro de bifurcação.

A Figura 5.85 mostra a comparação entre o maior valor característico analítico e estimado, considerando o parâmetro de bifurcação c . Deve ser observado que, embora a existência de maior linearidades e um maior número de equilíbrios coexistentes inerentes ao modelo modificado, a matriz reconstruído apresenta uma boa representação em regiões próximas a bifurcação de Hopf em $c = 0.5$.

A grande vantagem do procedimento estocástico de Fokker-Planck é que ele pode ser aplicado diretamente aos dados, sem a necessária intermediação de um modelo fenomenológico, facilitando muito a identificação de instabilidades. Nesse caso, o procedimento pode em tese ser usado para prover uma medida da distância da operação à condição operacional instável. Por isso, depois de implementado, aplicado e validado no modelo meta-food web, o procedimento foi aplicado ao problema de produção de petróleo de interesse. No entanto, em relação ao sistema FOWM, é importante notar que esta metodologia não pode ser empregada, uma vez que o modelo matemático e a estrutura da matriz Jacobiana não atingem o número mínimo de restrições ou zeros requeridos na análise.

Essa caracterização está apresentada no Apêndice F, em que se mostra o problema numérico que resulta na impossibilidade de aplicação do procedimento no problema de produção de petróleo abordado. Apesar desse resultado constituir uma conclusão negativa da análise, ele é apresentado nesse texto principal por duas razões fundamentais: (i) porque nunca foi analisado anteriormente no contexto do modelo proposto e revela uma importante limitação do procedimento de Fokker-Planck para um caso real; (ii) porque revela a impossibilidade de aplicação desse procedimento *data-driven*, reforçando a importância do uso de estratégias de monitoramento baseadas nos invariantes dinâmicos discutidos nas seções anteriores deste trabalho.

5.5 Causalidade

Conforme a metodologia apresentada na Seção 4.2.6 apresentam-se a seguir os resultados obtidos da análise de causalidade aplicados em primeiro lugar no caso Benchmark do processo Tennessee-Eastman (apresentado no Apêndice A) e em segundo lugar ao problema de medidores fiscais da Seção 5.1.1).

5.5.1 Causalidade no benchmark Tennessee-Eastman

Os dados descrevem o processo para condições de controle de laço aberto e laço fechado para o processo de Tennessee-Eastman, assim como também os dados de

treino e teste usados para avaliar métodos *data-driven* (PCA, PLS, FDA e CVA) como disponibilizados em [56, 73]. O conjunto de dados simula 21 tipos de falhas diferentes, para as variáveis classificadas como manipuladas (notada como XMV) e medidas (notadas como $XMEAS$). As variáveis manipuladas são listadas na Tabela A.1 e as variáveis medidas são listadas nas Tabelas A.2, A.3, A.4 e A.5 no Apêndice A.

Visando à procura das estruturas causais entre as variáveis do processo, foi calculado o gráfico causal para um período de tempo em operação normal. As configurações estabelecidas para a análise causal consideraram a metodologia de correlação parcial para a seleção de condições ou parentes, e correlação parcial para o cálculo das causalidades (de acordo à Seção 4.2.6).

A Figura 5.86 mostra o mapa de causalidade do processo em que é possível visualizar as diferentes conexões causais das variáveis. A partir dessa análise é possível determinar quais são as dependências do conjunto inteiro de variáveis e a força dessa dependência. O mapa só apresenta as conexões mais importantes do processo, ou seja, as conexões com maior grau de significância, conforme a análise causal (i.e. nível alpha baixos, como é explicado na Seção 4.2.6). Na Figura A.1 apresenta-se o diagrama do processo como ferramenta auxiliar na interpretação das rotas causais.

Numa abordagem inicial foram consideradas variáveis de atraso no conjunto de análise com $\tau = 0$, que permite realizar as vinculações e descobertas causais só entre variáveis contemporâneas. Observou-se que as conexões entre variáveis tinham coerência fisicamente com as fenomenologias descritas no processo Tennessee-Eastman. A seguir são comentadas algumas características causais entre as conexões mais importantes (filtradas com nível alpha = 1^{-10}) da Figura 5.86.

- $XMEAS(1) - XMV(3)$: Corresponde conforme as notações do Apêndice A à conexão causal positiva entre alimentação de A (corrente 1) e a vazão de alimentação A-C (corrente 4). Dado que a vazão de alimentação A-C responde à relação de alimentação de A/C da corrente 4, é evidente que há uma dependência direta e positiva com a corrente 1.
- $XMV(10) - XMEAS(9)$: Corresponde à conexão negativa entre vazão de água de resfriamento no reator e temperatura do reator, reforçando que a maior vazão de água de resfriamento consegue resfriar mais o reator, sendo consequentemente obtida uma menor temperatura no reator.
- $XMV(7) - XMEAS(12)$: Corresponde à conexão causal positiva entre vazão líquida no separador (corrente 10) e o nível do separador. Deve ser observado

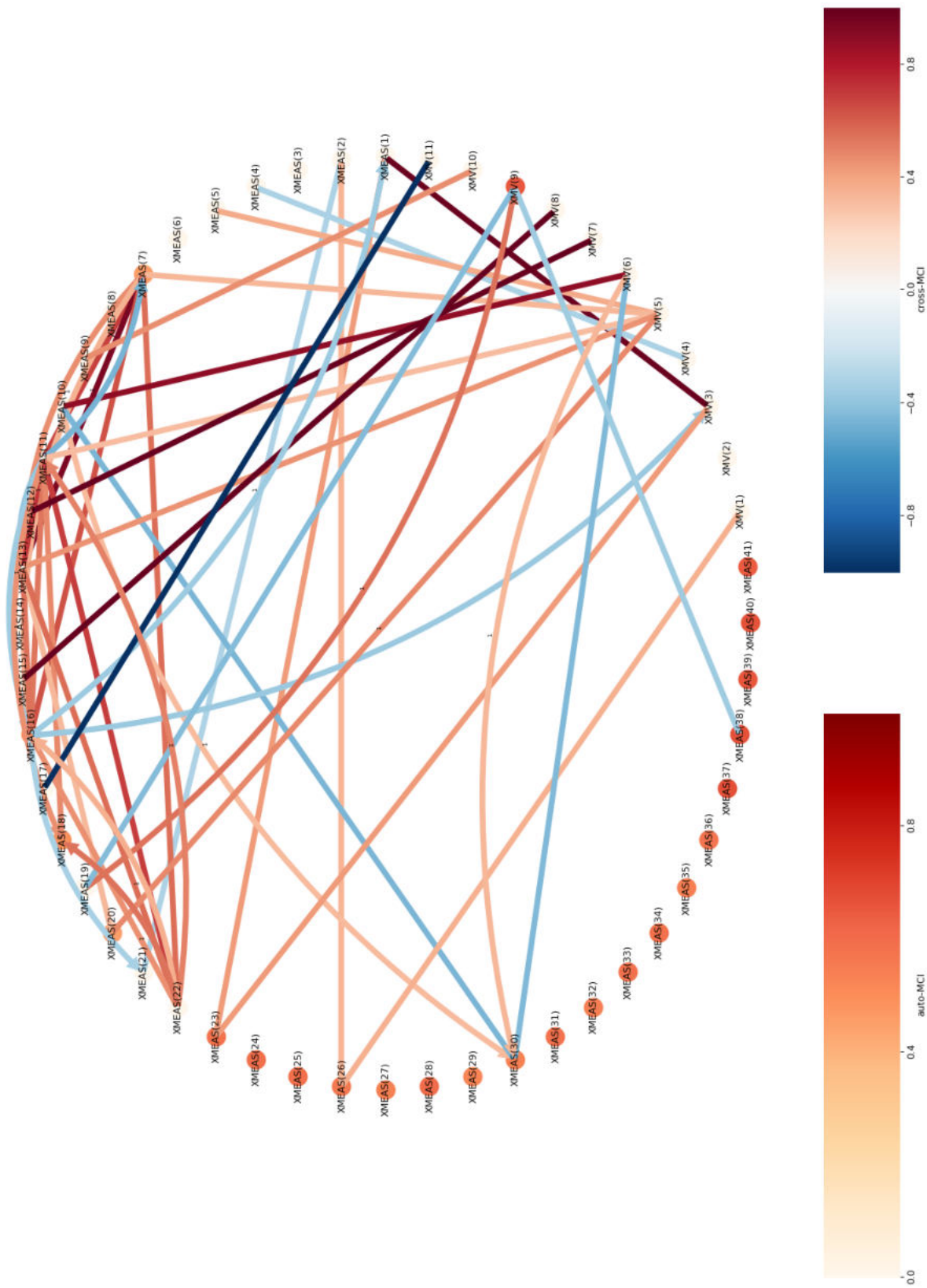


Figura 5.86: Mapa de causalidade do processo Tennessee-Eastman em condição normal de operação. Conexões entre variáveis são representadas por setas e podem ser diretas $\rightarrow$ ou indiretas $\dashrightarrow$. Os nós representam as variáveis e suas próprias autocorrelações. Conexões em vermelho representam uma correlação positiva enquanto as conexões em azul representam correlações negativas. Autocorrelações em branco representam uma autocorrelação nula da variável enquanto autocorrelações em vermelho significam uma alta autocorrelação da variável.

que no processo quanto maior é a corrente 10 de entrada no separador, maior deve ser o nível do separador.

- $XMEAS(22) \rightarrow XMEAS(11)$: Corresponde à conexão entre temperatura de água de resfriamento na saída do compressor e temperatura no separador.
- $XMV(9) \rightarrow XMEAS(19)$: Corresponde à conexão entre a abertura de válvula de vapor e a vazão de vapor no Stripper.

Todas as conexões descritas acima refletem as principais características do processo e a interação entre as suas variáveis principais. Dessa forma, a análise de causalidade aqui apresentada mostra que o diagrama de processos (Figura A.1) é reproduzido em grande parte pelo mapa causal (Figura 5.86). Deve ser observado que também que todas as variáveis manipuladas no mapa (notadas como MV) são independentes consigo mesmas, uma vez que os nós de autocorrelação corresponderam à cor branca. Adicionalmente, a técnica foi testada para diferentes conjuntos de tempo nos dados (1 dia, 30 dias e 90 dias). Observou-se que o padrão de conexões mantinha sua forma.

5.5.2 Causalidade em EFAL

Na Seção 5.1.1 apresentou-se a descrição da estação de monitoramento Fazenda Alegre (EFAL), cujo conjunto de dados é composto por 112 variáveis que correspondem a variáveis dos sensores e outras variáveis do processo. É importante notar que o conjunto de variáveis pode ser reduzido dependendo do intervalo de tempo de análise escolhido, uma vez que algumas variáveis permanecem estáticas durante longos períodos de tempo e são descartadas no pre-tratamento de dados (i.e. a técnica de causalidade não permite a análise de variáveis com variância zero). Uma vez validado o procedimento para o processo Tenesse-Eastman, a caracterização de causalidade foi estendida aos dados de produção que caracterizam o problema de medição fiscal. A descrição das variáveis usadas na análise de causalidade é apresentada na tabela B.1

Analogamente ao caso do processo Tenesse-Eastman, não foram consideradas variáveis desfasadas no tempo ($\tau = 0$), restringindo-se a análise causal às variáveis contemporâneas. As configurações estabelecidas para a análise consideraram a metodologia de correlação parcial para a seleção de condições ou parentes, e informação mútua condicional para o cálculo das causalidades (De acordo à seção 3.5).

Na Figura 5.87 apresenta-se o mapa de causalidade das variáveis da EFAL. De forma análoga à análise causal do processo Tenesse-Eastman, apresentam-se a

seguir alguns comentários sobre as conexões causais e sua relação com a fenomenologia do processo.

- $X22 - X27 - X52 - X53$: Corresponde às conexões 'Pressão nos Tratadores de Óleo (B)' - 'Pressão nos Tratadores de Óleo (A)' - 'Pressão no TO-365501' - 'Pressão no TO-365502'. Conforme indicam os diagramas de processo consultados, essas medidas correspondem às mesmas linhas (365501 e 365502) em diferentes pontos de medição;
- $5 - 33$: Corresponde à vazão instantânea de transferência (A) e a EMED de óleo. Conforme o diagrama do processo mostrado na Figura 5.1 a estação de medição de óleo está localizada na mesma linha da vazão de transferência (A);
- $35 - 67 - 22 - 27$: Corresponde à conexão Descarga bomba B-365502A - Corrente elétrica na bomba de alimentação do TO (B-365502A) - Pressão nos Tratadores de Óleo (B)- Pressão nos Tratadores de Óleo (A), mostrando que existem variáveis dependentes no conjunto de dados, como as correntes elétricas das bombas e as suas respectivas pressões;
- $10 - 1$ Corresponde à conexão Diferencial de Pressão PDIT-3655-05-002A - Vazão Instantânea FIT-3655-05-002A, mostrando as características de medição do sensor, em que a vazão medida é linearmente dependente do diferencial de pressão da linha do processo.

Dessa forma, a análise causal contemporânea consegue identificar as conexões em vários níveis de significância para o processo. Particularmente para o caso dos medidores EFAL, observou-se que as variáveis de medição fiscal de gás tinham pouca correlação com as outras variáveis do processo, mostrando que o conjunto inteiro de dados pode ser reduzido às variáveis de medição fiscal, permitindo o uso de técnicas de monitoramento e detecção de falhas sem que as principais características da dinâmica dos sensores se veja afetada. Particularmente, essa observação permite selecionar em etapas iniciais um conjunto relevante de dados para as posteriores metodologias de monitoramento e detecção, evitando a inclusão de variáveis correlacionadas entre si que podem gerar problemas a posteriori no desempenho computacional e das próprias técnicas de monitoramento.

Por outra parte, é importante notar que o mapa causal representa várias características importantes do processo descrito na Figura 5.1. Considerando um caso hipotético em que não é conhecido um diagrama do processo, os mapas causais surgem como uma importante ferramenta para reconstruir relações de causa-consequência entre variáveis e estabelecer princípios sobre a dinâmica observada. Em resumo, a

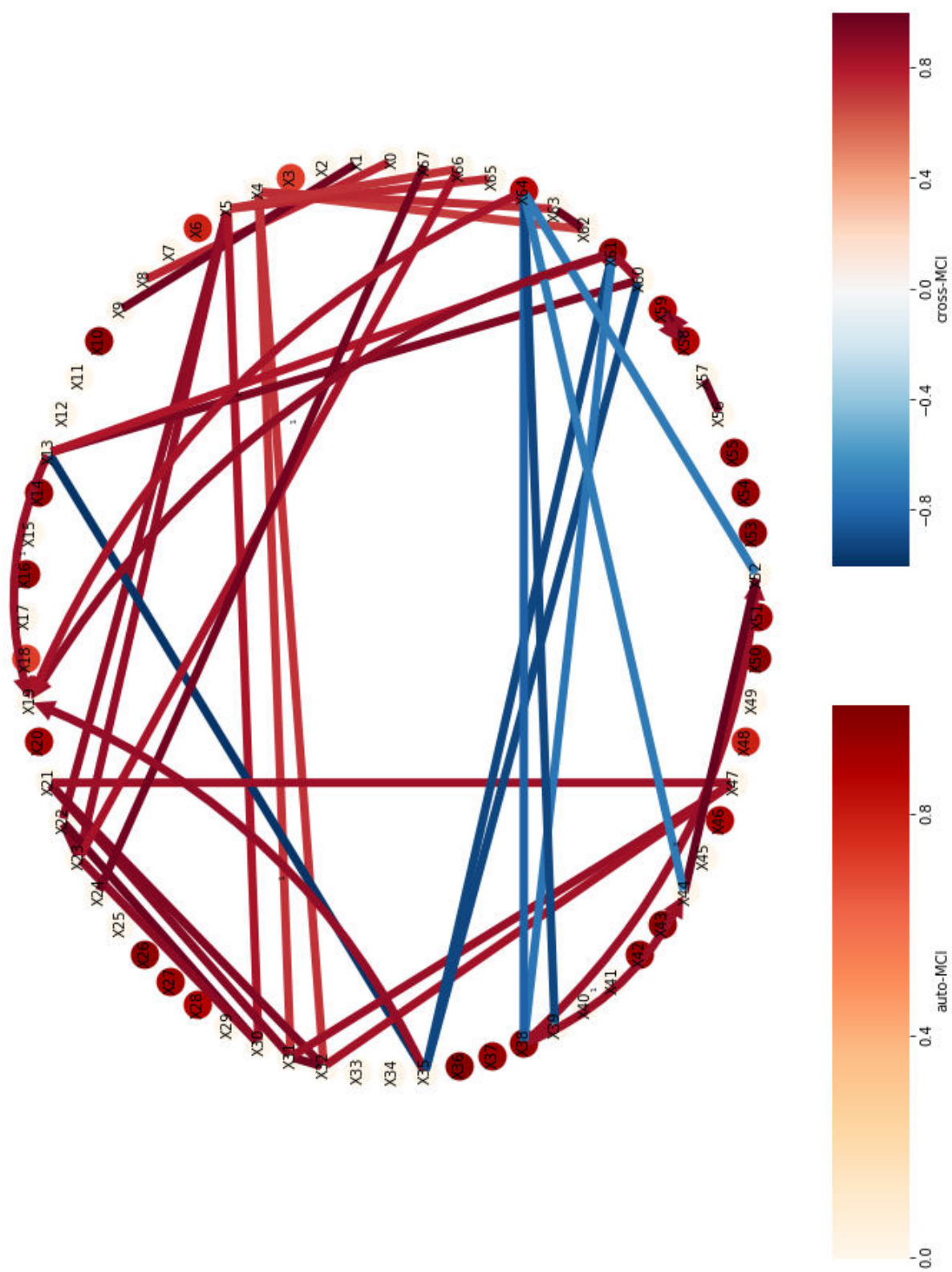


Figura 5.87: Mapa de causalidade das variáveis do processo EFAL. Conexões entre variáveis são representadas por setas e podem ser diretas $\rightarrow$ ou indiretas $-$. Os nós representam as variáveis e suas próprias autocorrelações. Conexões em vermelho representam uma correlação positiva enquanto as conexões em azul representam correlações negativas. Autocorrelações em branco representam uma autocorrelação nula da variável enquanto autocorrelações em vermelho significam uma alta autocorrelação da variável.

Tabela 5.11: Performance de referência quando nenhum procedimento de seleção de variáveis foi empregado-FAL

Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
F-I	RR	0.0	10.71	0.99	-186.93	-690.37
	RF	8.4	10.42	0.99	0.96	-24.26
	MLPR	0.0	10.59	0.95	-23.69	-78.41
	CCA	0.0	10.60	0.99	-170.23	-635.27
F-II	RR	3.98	0.0	0.88	-21.76	-1.78
	RF	59.4	0.0	1.0	-0.34	-0.95
	MLPR	10.96	0.0	0.76	-19.07	-2.31
	CCA	21.53	0.0	0.43	-2.79	-0.40
F-III	RR	51.47	11.0	0.88	-20.28	-0.61
	RF	63.04	7.29	1.0	-0.14	-0.18
	MLPR	8.87	0.0	-1.41	-185.67	-1.09
	CCA	63.44	0.3	0.43	-0.51	-0.22

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

análise de causalidade permite desvendar as leis de relação dinâmica imersas entre os dados e estabelecer sequencias lógicas para as variáveis observadas.

5.5.3 Causalidade no problema de seleção de variáveis

Nesta seção, a eficácia das abordagens de caracterização de descoberta causal propostas são avaliadas como métodos de seleção de variáveis. Outros algoritmos de seleção de variáveis foram considerados para comparar e discutir os efeitos nos casos de detecção de falhas.

No presente trabalho, foi considerado que os subconjuntos de variáveis selecionados tem tamanho fixo. Uma estimativa do número de variáveis a serem selecionadas pelos procedimentos de seleção de variáveis pode ser calculada com auxílio da análise de componentes principais (PCA). Assim, considerando uma variância explicada acumulada de 95,0%, o número de componentes principais necessários correspondeu a um total de 20 variáveis.

O desempenho das abordagens de seleção de variáveis analisadas são caracterizados em termos das seguintes métricas de desempenho: taxa de detecção de falhas (FDR %), taxa de falsos alarmes (FAR %) e pontuação de regressão R^2 . Para estabelecer um ponto de referência para todas as falhas estudadas, os modelos de aprendizado também foram treinados sem levar em conta procedimentos de seleção

de variáveis/características. A Tabela 5.11 mostra os respectivos resultados que serão considerados como valores de desempenho de referência para comparação com o desempenho dos modelos treinados com uso de métodos de seleção de variáveis.

A Tabela 5.12 mostra o desempenho dos regressores quando métodos de seleção de variável baseados em filtro foram usados. Em geral, os regressores foram capazes de detectar a falha F-III, mas não conseguiram detectar a falha F-I. Por outro lado, a Falha F-II levou às maiores taxas de detecção (FDR %) quando o método de seleção de variáveis foi baseado em informações mútuas. Como se pode observar, os modelos de aprendizado que utilizaram procedimentos de seleção de variáveis baseados em correlação linear (Pearson e Spearman) apresentaram maior probabilidade de apresentar overfitting, pois os valores de R^2 para o conjunto de validação foram negativos. No entanto, valores menores de R^2 para o conjunto de validação Fault FI eram esperados, pois esse conjunto era muito maior que o conjunto de teste e, cronologicamente, era o mais distante do evento de falha, incorporando comportamentos dinâmicos que possivelmente não haviam sido capturados no conjunto de treino. Como já era de se esperar, valores baixos de R^2 foram obtidos no teste devido à presença de muitos dados defeituosos.

Considerando o desempenho médio dos 4 regressores, os valores de FDR mais altos e os valores de FAR mais baixos foram alcançados quando o método de seleção de variáveis baseado em informações mútuas foi utilizado. Isso possivelmente pode ser explicado porque a métrica de informação mútua é capaz de capturar associações não lineares entre as variáveis, enquanto as correlações de Pearson ou Spearman são incapazes de detectar essas associações não lineares.

Quando comparados ao desempenho de referência, os métodos baseados em correlações lineares (Pearson e Spearman) levaram a piores resultados nas três falhas, enquanto o método baseado em informações mútuas foi melhor nos três casos.

O desempenho do regressor obtido quando os procedimentos de seleção de variáveis baseados em métodos wrapper foram usados estão resumidos na Tabela 5.13. É possível observar que a Falha F-III foi devidamente detectada com todos os métodos wrapper de seleção de variáveis analisados. Por outro lado, a falha FI não foi detectada, exceto quando o modelo Random Forest foi usado, enquanto as melhores detecções da falha F-II foram alcançadas com o procedimento de seleção de variável backward feature elimination (Lasso) seguido por backward feature elimination (Lasso). Como era de se esperar, valores altos de FDR (%) e R^2 foram obtidos com os conjuntos de treinamento e validação quando o modelo de aprendizado no método wrapper coincidiu com o modelo regressor (Random Forest). Outro aspecto que deve ser destacado diz respeito ao desempenho geral dos métodos wrapper, que

Tabela 5.12: Desempenho quando os métodos de filtro de seleção de variáveis foram empregados - FAL

Método de seleção de variáveis	Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
Correlação de Pearson	F-I	RR	0.0	0.02	0.85	- 153700	- 379953
		RF	9.1	0.03	0.99	0.71	0.709
		MLPR	0.0	0.0	0.64	-377	-928.18
		CCA	0.0	0.03	0.54	-63786	-63786
	F-II	RR	1.9	8.12	0.79	-41.74	-11.26
		RF	74.5	0.0	0.99	0.04	-0.69
		MLPR	0.0	0.0	0.19	-121.6	-1.32
		CCA	1.9	8.24	0.79	-42.74	-11.67
	F-III	RR	63.4	0.0	0.79	-22.59	-0.30
		RF	63.4	23.14	0.99	-0.35	-0.23
		MLPR	63.4	0.0	0.68	0.32	0.32
		CCA	63.4	0.0	0.79	-22.84	-0.30
Correlação de Spearman	F-I	RR	0.0	0.01	0.83	-85700	- 241433
		RF	6.1	0.05	0.98	0.78	0.512
		MLPR	9.8	0.02	0.96	-2.31	-6.061
		CCA	0.0	0.03	0.54	-26281	-63786
	F-II	RR	2.2	6.95	0.72	-40.41	-11.02
		RF	78.5	0.0	0.99	0.08	-0.47
		MLPR	4.9	0.0	0.78	-35.79	-0.64
		CCA	1.97	8.24	0.79	-42.74	-11.72
	F-III	RR	60.6	0	0.68	-18.42	-0.12
		RF	63.4	16.47	0.98	-0.19	-0.21
		MLPR	63.4	0.16	0.57	-214.65	-2.74
		CCA	63.4	0.0	0.79	-22.84	-0.31
Informação mútua	F-I	RR	11.0	10.51	0.99	0.69	-411.87
		RF	28.4	10.43	0.99	0.99	-32.64
		MLPR	12.1	10.42	0.90	-2.66	-38.65
		CCA	9.1	10.61	0.97	0.81	-350.76
	F-II	RR	6.9	0.0	0.56	-244.78	-8.21
		RF	78.4	3.05	0.99	-0.04	-0.83
		MLPR	10.7	0.0	0.43	-11.15	-0.15
		CCA	26.8	0.0	0.20	-14.72	-1.26
	F-III	RR	63.4	0.0	0.56	-64.56	-1.47
		RF	63.4	0.0	0.99	-0.25	-0.21
		MLPR	63.4	0.0	0.75	-26.28	-0.41
		CCA	63.4	0.0	0.20	-2.12	-0.32

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

Tabela 5.13: Desempenho quando os métodos wrapper de seleção de variáveis foram empregados - FAL

Método de seleção de variáveis	Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
Eliminação de features progressiva (Lasso)	F-I	RR	0.4	11.43	0.98	-15.90	-1506.12
		RF	8.6	10.42	0.99	0.99	-28.19
		MLPR	0.0	10.52	0.99	-25.00	-268.13
		CCA	0.3	11.45	0.98	-15.49	-1535
	F-II	RR	5.4	11.93	0.80	-23.24	-7.70
		RF	57.1	0.0	0.99	-0.33	-0.56
		MLPR	5.2	10.28	0.65	-13.90	-2.34
		CCA	5.3	11.53	0.70	-10.22	-2.18
	F-III	RR	63.4	0.0	0.80	-3.71	-0.19
		RF	63.4	6.62	0.99	-0.25	-0.21
		MLPR	63.4	0.0	0.47	-8.21	0.05
		CCA	63.4	0.0	0.70	-1.21	-0.16
Eliminação de features progressiva (Random Forest)	F-I	RR	8.0	10.50	0.98	-29.41	-876.13
		RF	23.7	10.43	0.99	0.97	-38.19
		MLPR	7.4	0.78	0.89	-46.03	-59.49
		CCA	10.9	10.5	0.94	-46.71	-1268
	F-II	RR	19.68	4.58	0.71	-2.17	-1.85
		RF	68.57	0.0	0.99	-1.03	-1.31
		MLPR	11.15	3.31	0.47	-4.31	-0.16
		CCA	31.60	0.31	0.57	-0.12	-1.08
	F-III	RR	63.4	0.0	0.71	-128.02	-2.01
		RF	63.4	0.0	0.99	-1.25	-0.22
		MLPR	63.4	0.0	0.52	-182.21	-0.48
		CCA	63.4	0.0	0.54	-35.93	-0.85
Eliminação de features reversa (Lasso)	F-I	RR	0.0	0.0	0.31	-424	-247.82
		RF	0.3	2.41	0.99	-6.88	-38.04
		MLPR	0.0	0.06	-0.01	-9.57	-23.18
		CCA	0.0	0.0	0.22	-1106	-611.13
	F-II	RR	21.5	24.51	0.75	-20.72	-4.21
		RF	60.5	0.0	0.99	-1.84	-0.73
		MLPR	11.4	0.0	-1.05	-23.98	-0.43
		CCA	21.4	25.51	0.70	-34.81	-7.81
	F-III	RR	63.4	1.60	0.75	-9.94	-0.76
		RF	63.4	0.0	0.99	-1.28	-0.23
		MLPR	63.4	0.0	0.01	-28.34	-0.75
		CCA	63.4	1.60	0.70	-17.06	-1.01
Eliminação de features reversa (Random Forest)	F-I	RR	0.0	0.14	0.91	-27.23	-25.16
		RF	10.4	0.08	0.99	0.78	0.66
		MLPR	0.0	0.03	0.76	-20.81	-66.90
		CCA	0.0	0.15	0.89	-35.51	-30.75
	F-II	RR	4.9	14.47	0.79	-24.14	-8.20
		RF	68.2	0.0	0.99	-0.16	-0.67
		MLPR	1.5	0.0	0.19	-22.97	-0.05
		CCA	5.8	14.38	0.78	-28.84	-10.25
	F-III	RR	63.4	0.0	0.79	-7.31	-0.33
		RF	63.4	18.34	0.99	-0.48	-0.18
		MLPR	63.4	53.36	0.35	-24.15	-1.51
		CCA	63.4	0.0	0.78	-8.67	-0.36

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

obtiveram maiores valores de R^2 que os métodos de filtro. Regressores treinados com uso de métodos wrapper apresentaram melhor capacidade de modelar corretamente novos dados (generalização), conforme observado nos escores de regressão dos conjuntos de validação. Além disso, apenas os métodos wrapper que usaram o modelo de aprendizado Lasso excederam o desempenho de referência em todos os cenários de detecção de falhas.

A Tabela 5.14 apresenta o desempenho do regressor obtido com os métodos embutidos de seleção de variáveis. No geral, embora a falha F-III sempre tenha sido identificada adequadamente, esses regressores mostraram taxas mais baixas de detecção de falhas do que as descritas anteriormente para as abordagens de seleção de variáveis baseadas em métodos wrapper. Além disso, os procedimentos de seleção baseados em esquemas random forest forneceram modelos mais pobres e sujeitos a overfitting. Em geral, os modelos de aprendizado que consideraram uma etapa de seleção de variáveis com base em métodos embutidos não apresentaram melhorias substanciais quando comparados aos desempenhos de referência.

Embora os métodos de seleção de variáveis baseados em relações causais tenham sido classificados como métodos de filtro, a Tabela 5.15 mostra a avaliação independente dos respectivos resultados de detecção de falhas obtidos com esses métodos. Como se pode ver, as abordagens baseadas em causalidade superaram os outros métodos quando testados com a maioria das falhas em termos de seleção do subconjunto que produz a melhor precisão de regressão. Essas abordagens também levaram aos melhores valores de R^2 para o conjunto de validação, gerando modelos de aprendizado mais generalistas e fornecendo em média os maiores valores de FDR e os menores valores de FAR entre todos os métodos aqui aplicados. Essa melhor capacidade de generalização mostrou-se fundamental no contexto analisado, pois o processo está sujeito a mudanças dinâmicas durante o tempo de operação em função das variações nas condições de operação da planta. Em particular, o procedimento PCMCI, com estágio PCStable usando correlação parcial e estágio MCI usando métricas de informação mútua condicional, provou ser o procedimento mais adequado para a detecção de Falhas II e III, enquanto o melhor desempenho de detecção de Falha I foi alcançado usando o procedimento PCMCI considerando métricas de correlação parcial em suas duas etapas.

A Figura 5.88 mostra as previsões de Falha F-I obtidas com PCMCI (correlação parcial). Para todos os regressores analisados, é possível observar bons valores de R^2 para os conjuntos de treinamento e validação e uma clara divergência entre os dados medidos e respectivas previsões no conjunto de teste próximo ao evento de falha. A Figura 5.89 apresenta o respectivo gráfico do índice SPE, onde os resíduos de regressão nos conjuntos de treinamento e validação permaneceram abaixo

Tabela 5.14: Desempenho quando os métodos embutidos de seleção de variáveis foram empregados - FAL

Método de seleção de variáveis	Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
regularização L1 (Lasso)	F-I	RR	0.0	0.02	0.91	-94.52	-189.52
		RF	0.7	0.07	0.99	0.76	0.71
		MLPR	0.0	1.55	0.88	-4.75	-19.70
		CCA	0.0	0.02	0.84	-51.24	-96.02
	F-II	RR	7.6	12.28	0.81	-51.27	-19.62
		RF	58.9	0.0	0.99	-0.26	-0.51
		MLPR	44.35	4.71	0.79	-5.64	-2.46
		CCA	7.8	12.30	0.81	-52.98	-52.98
	F-III	RR	63.7	1.36	0.81	-9.39	-0.37
		RF	63.4	0.0	0.99	-0.71	-0.21
		MLPR	63.4	0.0	0.04	-21.32	-0.41
		CCA	63.7	1.28	0.81	-9.76	-0.38
Importâncias de Random forest	F-I	RR	0.0	0.12	1.0	1.0	1.0
		RF	0.3	0.08	0.99	0.99	0.94
		MLPR	0.0	11.60	0.89	-2.65	-15.78
		CCA	81.1	0.20	1.0	1.0	1.0
	F-II	RR	0.6	0.0	1.0	0.99	0.99
		RF	69.2	0.0	0.99	0.99	0.12
		MLPR	0.0	0.0	-0.97	-1257	-3.59
		CCA	26.1	17.58	1.0	1.0	1.0
	F-III	RR	63.4	0.0	1.0	0.99	0.99
		RF	63.4	2.23	0.99	0.99	0.01
		MLPR	0.0	0.0	0.82	-335.12	-3.09
		CCA	63.4	0.80	1.0	1.0	1.0

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

Tabela 5.15: Desempenho quando os métodos causais de seleção de variáveis foram empregados - FAL

Método de seleção de variáveis	Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
PCMCI (Correlação parcial)	F-I	RR	11.1	10.36	0.98	0.21	-218.91
		RF	15.4	10.76	0.99	0.85	-33.96
		MLPR	38.1	21.02	0.91	-2.31	-237.33
		CCA	66.4	10.41	0.86	0.61	-92.75
	F-II	RR	0.0	0.0	0.74	-439.89	-3.41
		RF	79.7	0.0	0.99	-0.82	-0.97
		MLPR	0.7	18.04	0.05	-105.12	-7.64
		CCA	44.7	0.0	0.01	-0.50	-0.44
	F-III	RR	42.2	0.08	0.75	-312.6	-4.03
		RF	63.4	0.0	0.99	-0.36	-0.21
		MLPR	4.3	2.04	0.40	-1311	-20.17
		CCA	63.4	0.0	0.02	-0.57	-0.11
PCStable (Correlação parcial)	F-I	RR	1.1	10.61	0.98	0.60	-187.87
		RF	3.8	10.85	0.99	0.90	-27.37
		MLPR	0.4	10.45	0.95	-0.02	-81.35
		CCA	10.5	10.51	0.85	0.47	-84.97
	F-II	RR	8.67	0.0	0.55	-15.23	-0.61
		RF	74.9	0.0	0.99	-0.40	-0.75
		MLPR	0.0	0.0	0.40	-501.12	-4.95
		CCA	34.1	0.0	0.01	-0.89	-0.44
	F-III	RR	63.4	0.08	0.55	-45.23	-0.60
		RF	63.3	10.36	0.99	-1.23	-0.25
		MLPR	63.4	0.0	0.37	-9.96	-0.67
		CCA	63.9	1.12	0.01	-0.85	-0.11
PCStable (Correlação parcial) + MCI (Informação mútua condicional)	F-I	RR	10.1	10.56	0.98	0.68	-275.59
		RF	10.38	10.86	0.99	0.90	-26.26
		MLPR	10.4	10.47	0.97	0.80	-498.66
		CCA	13.9	10.51	0.92	0.60	-158.31
	F-II	RR	28.8	0.0	0.57	-0.55	-0.31
		RF	61.3	0.0	0.99	-0.06	-0.07
		MLPR	21.7	0.1	0.62	-0.93	-0.28
		CCA	49.3	0.0	0.42	-0.02	-0.35
	F-III	RR	63.4	0.0	0.57	-2.97	-0.17
		RF	63.7	9.78	0.99	-0.24	-0.18
		MLPR	63.4	0.0	0.37	-5.62	-0.18
		CCA	63.4	0.0	0.45	-1.13	-1.14

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

do limite de controle, exceto para alguns pontos esporádicos que foram responsáveis pelas taxas de FAR observadas. Este limite de controle foi excedido de forma consistente no evento de falha reportado, comprovando a capacidade destes modelos para detecção de falhas. Como se pode ver, a anormalidade foi detectada antes do evento de falha reportado pela operação, o que explica os valores baixos de FDR e os valores de FAR monótonos obtidos por todos os regressores independente do método de seleção empregado.

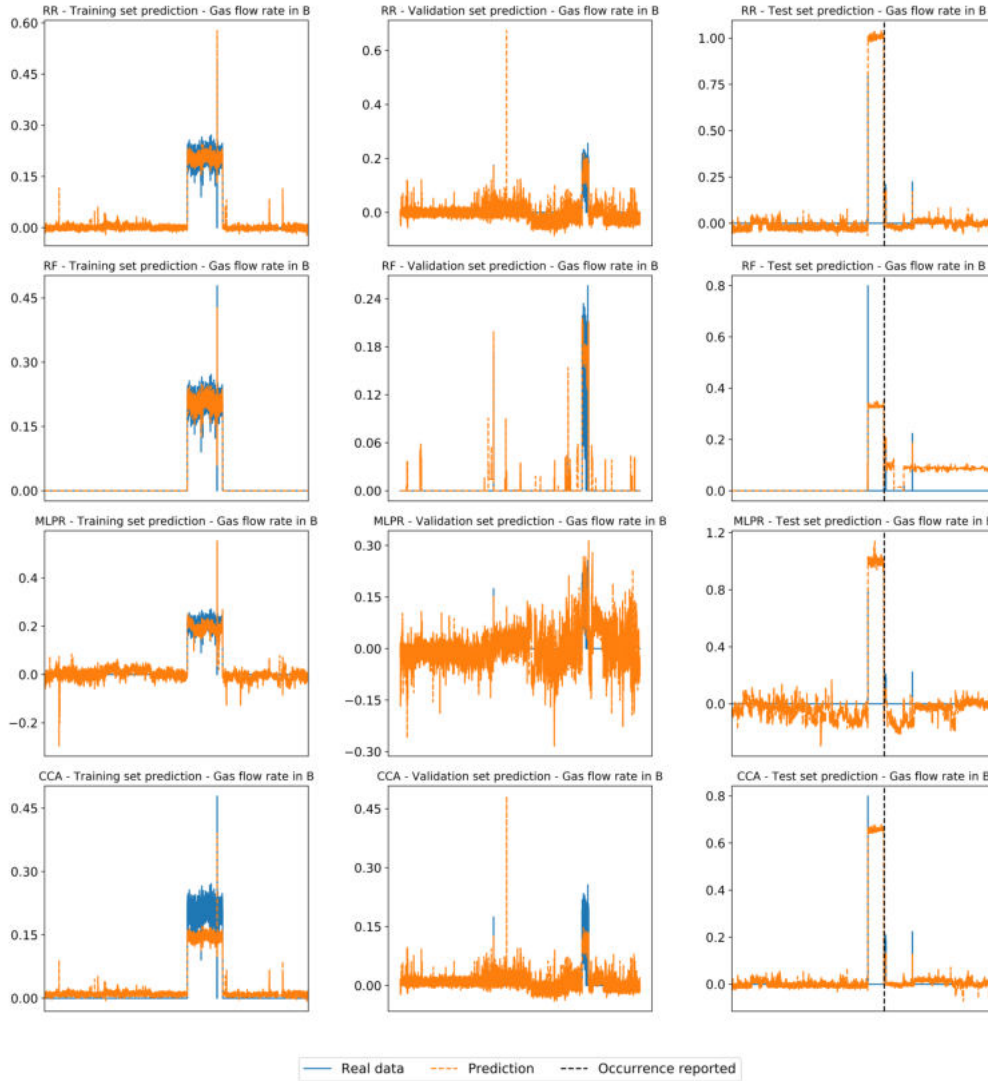


Figura 5.88: Predição dos regressores para a vazão de gás no medidor fiscal 02B (Section A) na falha - FI quando empregado o algoritmo PCMCI (correlação parcial) como método de seleção de variáveis.

As Figuras 5.90 e 5.91 mostram, respectivamente, as previsões de temperatura adimensionais e o índice SPE durante a detecção de Falha II. Neste caso, o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) foi usado como procedimento de seleção de variáveis. A falha foi detectada corretamente de acordo com o evento relatado e o comportamento do SPE. Por outro lado, a natureza

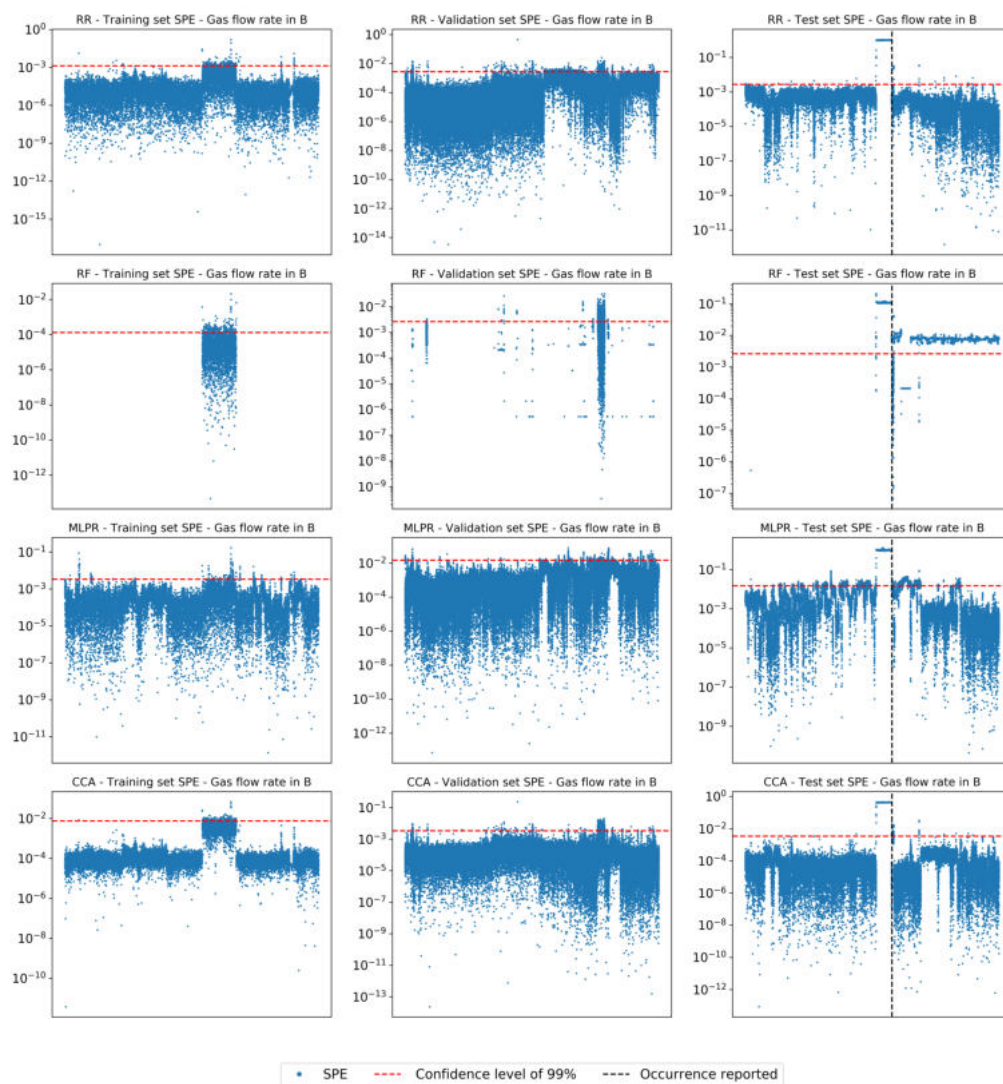


Figura 5.89: Índice de detecção SPE na falha - FI quando empregado o algoritmo PCMCi (correlação parcial) como método de seleção de variáveis.

intermitente desta falha explica os valores pobres de FDR obtidos.

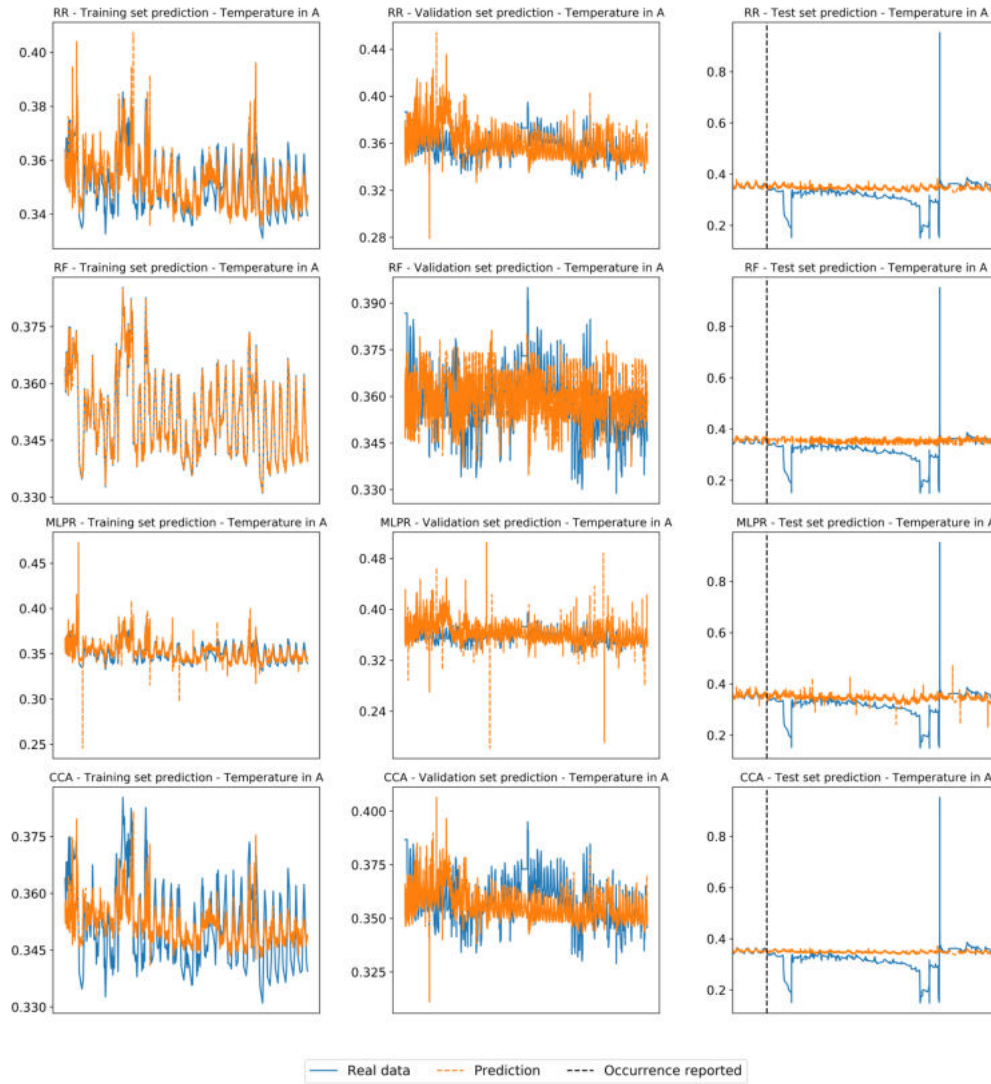


Figura 5.90: Predição dos regressores para a temperatura no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.

Finalmente, os resultados da previsão e o comportamento do índice SPE no cenário de detecção de Falha-III são apresentados nas Figuras 5.92 e 5.93, respectivamente. Conforme apontado anteriormente, essa falha foi detectada adequadamente, apesar do caráter oscilatório da variável predita. Além disso, o evento relatado pela operação parecia ter ocorrido antes da manifestação real da falha; consequentemente, a taxa máxima de FDR alcançável corresponde (aproximadamente) ao valor de 63% relatado nas Tabelas 5.12–5.15.

Um aspecto importante na discussão sobre métodos de seleção de variáveis baseados em causalidade é a inserção de variáveis desfasadas na análise, que deriva, naturalmente, da descoberta e reconstrução de ligações causais. A inclusão dessas variáveis deslocadas no tempo pode permitir uma modelagem aprimorada do com-

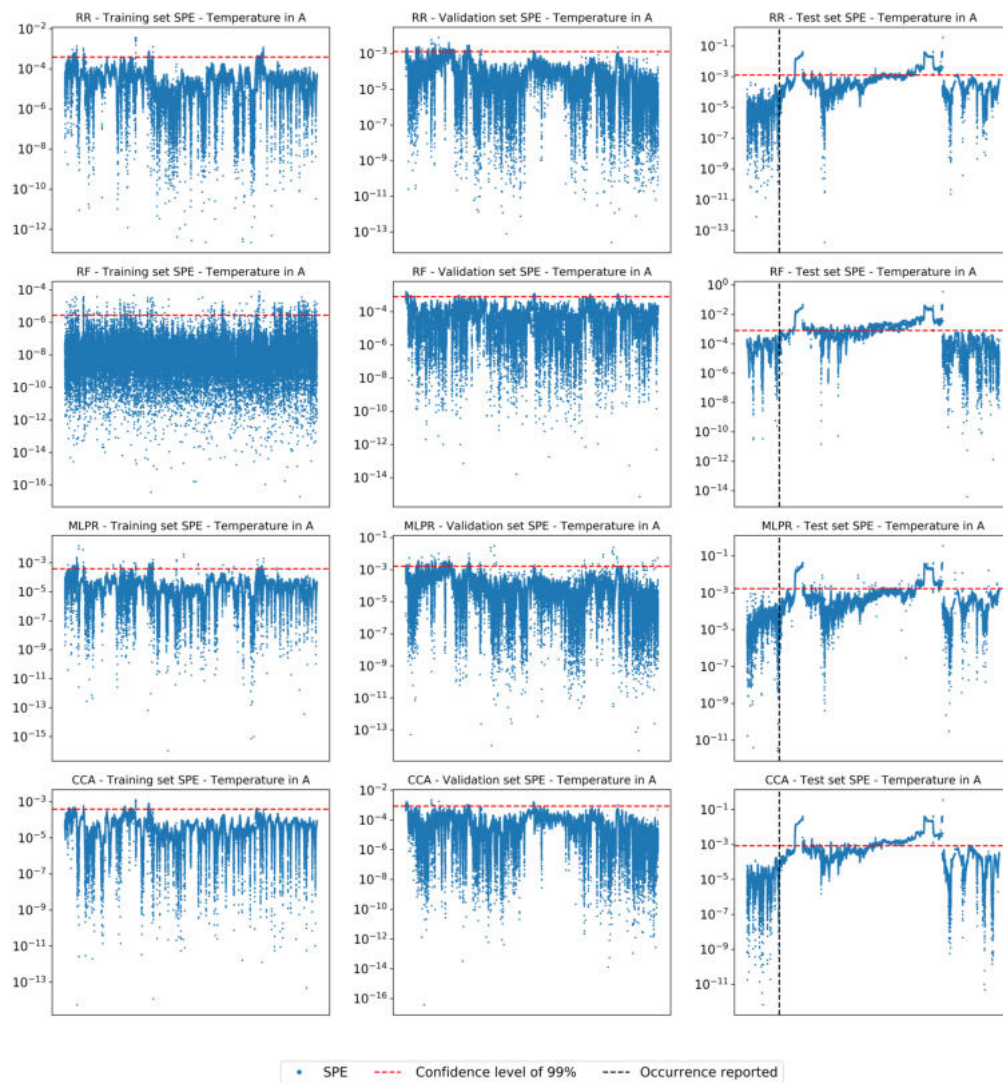


Figura 5.91: Índice de detecção SPE na falha - FII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.

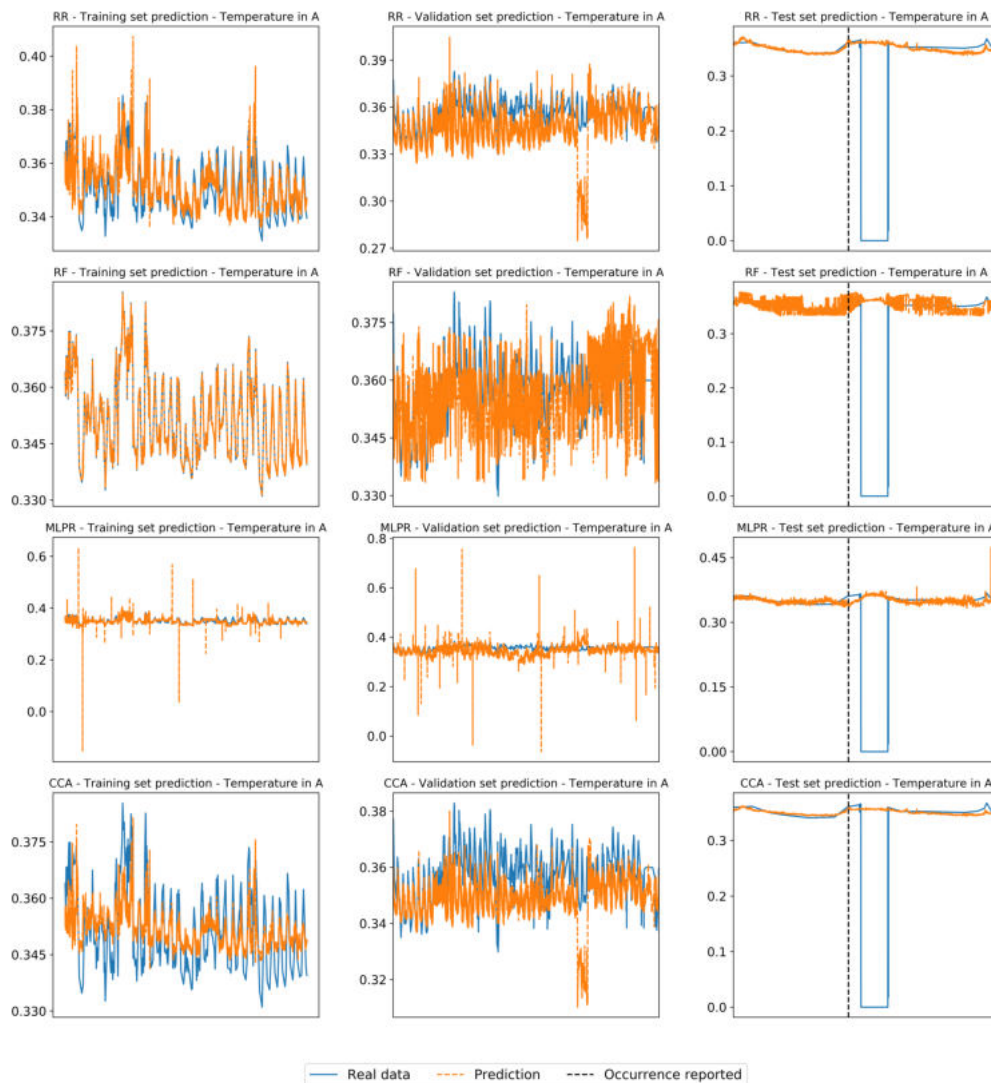


Figura 5.92: Predição dos regressores para a temperatura no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FIII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.

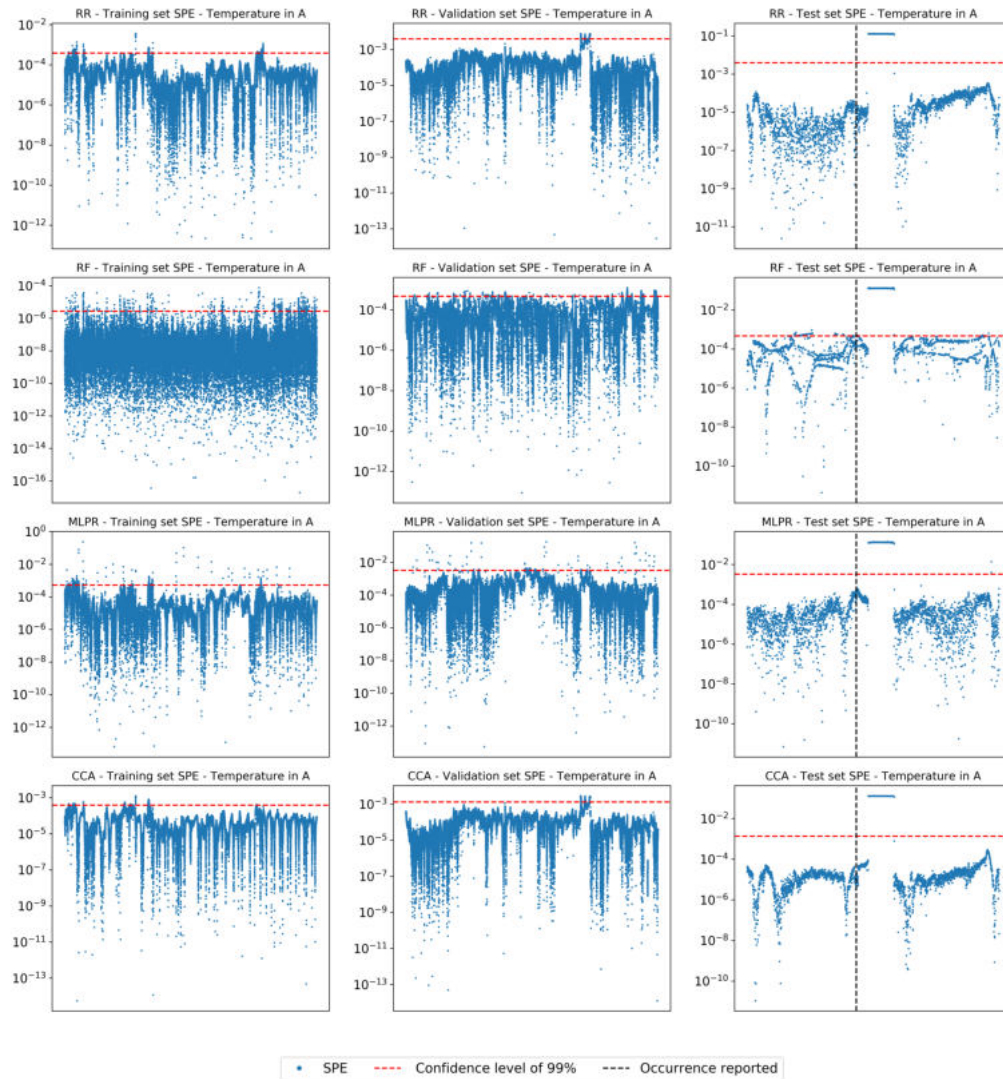


Figura 5.93: Índice de detecção SPE na falha - FIII quando empregado o algoritmo PCStable (correlação parcial) com MCI (informação mútua condicional) como método de seleção de variáveis.

portamento dinâmico das trajetórias do processo, enquanto usa o mesmo modelo de detecção [50, 163, 170].

A informação mútua, que foi aplicada em métodos de filtro, é uma métrica semelhante às utilizadas em métodos causais. No entanto, esta metodologia determina as relações entre variáveis pareadas, desprezando o efeito das demais variáveis sobre o par. Portanto, abordagens condicionais são mais apropriadas, pois tentam isolar os efeitos das variáveis durante a descoberta de conexões causais. Basicamente, enquanto uma abordagem procura variáveis correlacionadas (não linearmente), as outras abordagens procuram variáveis causais.

Conforme destacado anteriormente, os procedimentos de descoberta de independência condicionalmente desfasada buscam as conexões causais da variável predita Y . Assim, o uso do conjunto causal parece ser a forma mais natural para definir o subconjunto de variáveis selecionadas.

A Tabela 5.16 mostra o desempenho dos regressores nas falhas do sistema TEP ao aplicar os procedimentos de seleção de variáveis mais proeminentes por classe. De acordo com as métricas FDR e FAR, a detecção de falha IDV(1) foi melhor quando a abordagem PCMCI foi empregada, enquanto a falha IDV(5) foi detectada corretamente com desempenho semelhante pelos métodos PCMCI e 11-regularization (Lasso). Os valores R^2 obtidos nos conjuntos de teste refletem que eles são compostos principalmente de dados sem falhas.

O melhor desempenho dos métodos causais para seleção de variáveis neste estudo de caso poder ser explicado pela inclusão de variáveis desfasadas no treinamento do modelo, que segundo a literatura [168], podem exercer um papel determinante na detecção de falhas no processo TEP.

Vale ressaltar que o uso de métodos de seleção de variáveis (exceto os métodos causais) não trouxe melhorias notáveis em relação ao desempenho de referência. Portanto, a utilização de esquemas de seleção de variáveis no estudo de caso TEP não constitui uma etapa limitante para a detecção das falhas analisadas, pois as variáveis de processo são mais causalmente interligadas e as variáveis redundantes não interferem drasticamente no desempenho dos modelos. No entanto, a seleção de variáveis permite trabalhar com modelos menos complexos e computacionalmente mais rápidos. Além disso, é importante notar que o uso de métodos causais para seleção de variáveis relevantes permitiu a melhoria do desempenho analisado, sendo recomendado para implementações mais envolventes.

Tabela 5.16: Desempenho dos métodos de seleção de variáveis empregados na detecção de falhas do processo TEP

Método de seleção de variáveis	Falha	Regressor	FDR (%)	FAR (%)	R^2 treinamento	R^2 validação	R^2 teste
Sem seleção de variáveis	IDV(1)	RR	48.63	1.25	0.35	0.28	0.77
		RF	75.23	0.0	0.94	0.61	0.37
		MLPR	37.43	0.62	-996.67	-	-332.96
		CCA	73.94	1.56	0.01	1162.42	-0.04
	IDV(5)	RR	99.0	0.62	0.68	0.66	-152.75
		RF	41.99	0.0	0.91	0.65	0.55
		MLPR	26.93	0.62	-845.53	-873.52	-
		CCA	45.31	0.62	0.01	0.01	1085.37
Informação mútua	IDV(I)	RR	44.07	0.62	0.23	0.19	0.77
		RF	61.49	0.0	0.98	0.58	0.31
		MLPR	88.46	1.25	-0.78	-0.82	-0.54
		CCA	61.08	1.25	-0.34	-0.52	0.14
	IDV(5)	RR	99.0	1.25	0.60	0.6	-389.82
		RF	24.0	0.0	0.91	0.62	0.49
		MLPR	23.62	0.94	-769.7	-760.7	-886.25
		CCA	30.75	0.94	0.06	0.06	-1.06
Eliminação de feature progressiva (Lasso)	IDV(I)	RR	24.52	1.56	0.32	0.28	0.84
		RF	61.91	0.0	0.91	0.59	0.41
		MLPR	72.28	0.62	-183.4	-212.14	-171.64
		CCA	41.99	0.94	0.24	0.18	0.72
	IDV(5)	RR	44.89	1.25	0.53	0.52	0.71
		RF	44.75	0.0	0.91	0.62	0.61
		MLPR	29.22	0.62	-201.32	-205.56	-110.87
		CCA	56.17	0.94	0.37	0.37	0.44
Regularização L1 (Lasso)	IDV(I)	RR	32.06	1.25	0.33	0.28	0.87
		RF	84.54	0.0	0.93	0.64	0.32
		MLPR	97.30	1.56	-27.59	-30.59	-103.89
		CCA	83.12	0.94	0.06	-0.04	0.44
	IDV(5)	RR	46.95	0.94	0.54	0.54	0.64
		RF	61.84	0.0	0.92	0.65	0.53
		MLPR	80.99	2.19	-99.74	-100.12	-360.55
		CCA	61.13	0.31	0.39	0.38	0.39
PCStable (Partial correlation) + MCI (Informação mútua condicional)	IDV(I)	RR	32.06	1.25	0.33	0.28	0.87
		RF	84.54	0.0	0.93	0.60	0.32
		MLPR	97.30	1.56	-27.59	-30.59	-103.89
		CCA	83.12	0.94	0.06	-0.04	0.44
	IDV(5)	RR	46.95	0.94	0.54	0.54	0.64
		RF	61.84	0.0	0.92	0.65	0.53
		MLPR	80.99	2.19	-99.74	-100.12	-360.55
		CCA	61.13	0.31	0.39	0.38	0.39

As métricas de desempenho na detecção de falhas correspondem a taxa de detecção de falha (FDR%), taxa de falsos alarmes (FAR%) e índice de ajuste R^2 .

5.6 Pertinência das técnicas de caracterização dinâmica na detecção de falhas

Ao longo da Seção 5.3.1 foram apresentados diversos resultados que mostraram como as métricas do conjunto invariante podem representar de forma mais evidente as transições dinâmicas em torno a uma falha de processo. A abordagem consiste na obtenção, via análise não linear de séries temporais, do cálculo sequencial de métricas invariantes aplicando um método de janela móvel ao longo da série temporal constituída pelas medidas das variáveis do processo. Essas métricas foram avaliadas no caso da estação de monitoramento fiscal no conjunto relativo à falha F-II, que também foi estudada na Seção 5.5.2 em que foi avaliada por diversos modelos de aprendizado de máquina. Os resultados obtidos na detecção da falha pelos métodos via machine learning são resumidos na Tabela 5.11 e nas Figuras 5.94 e 5.95.

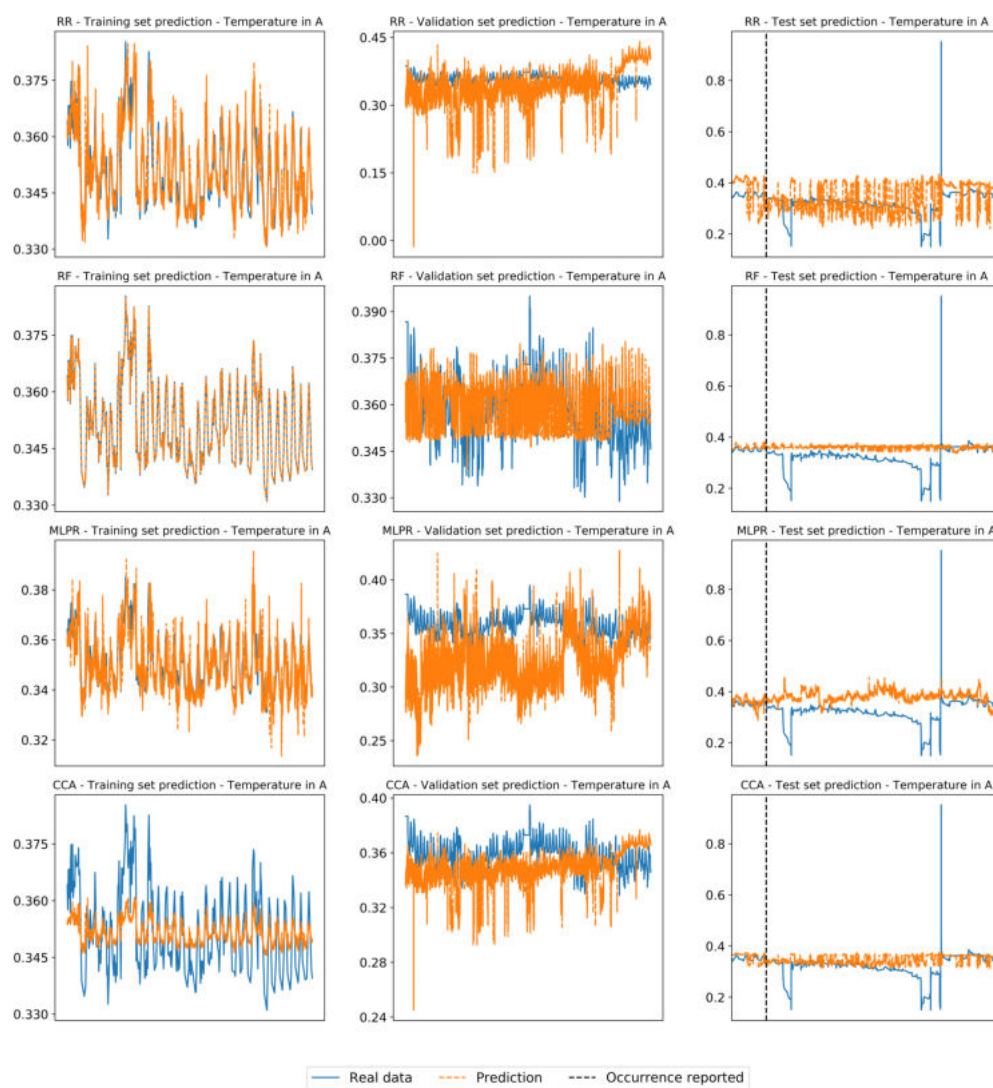


Figura 5.94: Predição dos regressores para a Temperatura de gás no medidor fiscal 02A (Section A) na falha - FII sem seleção de variáveis.

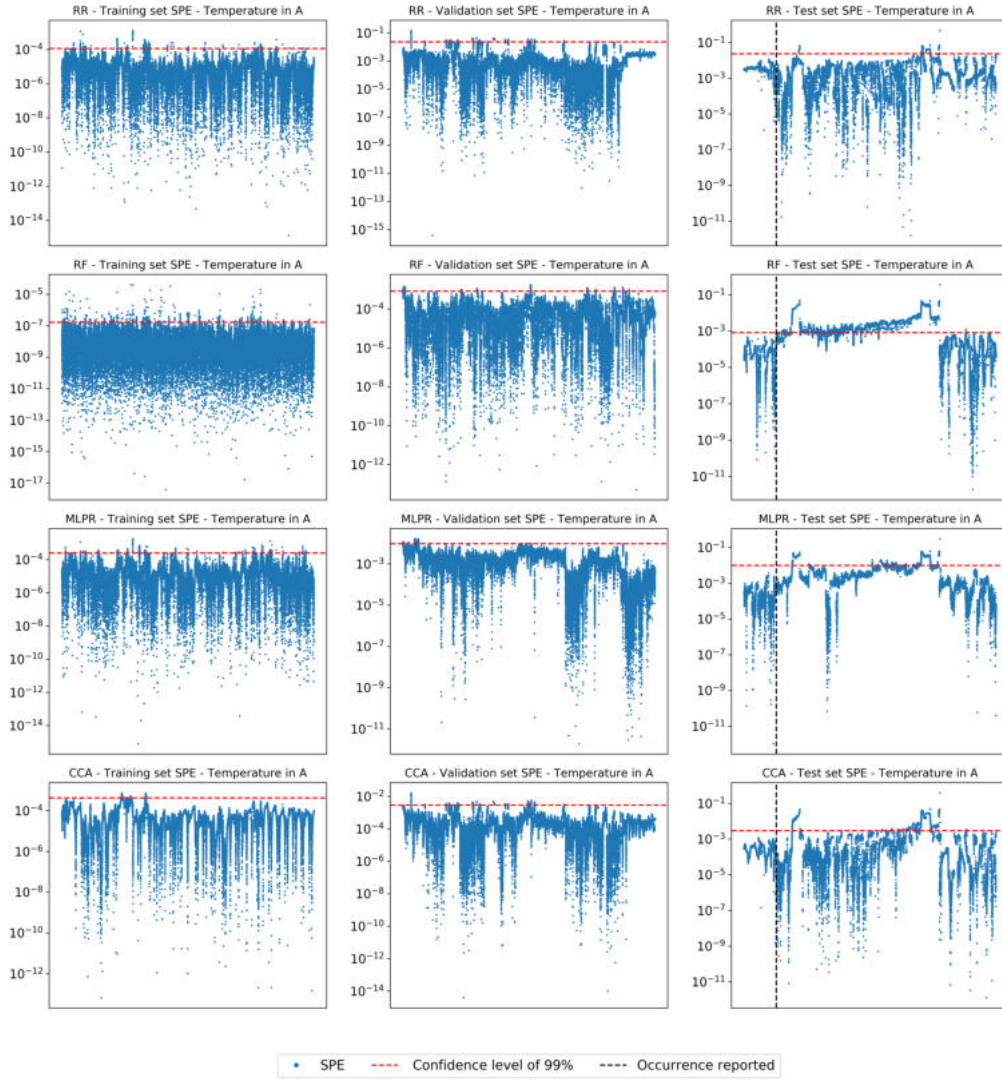


Figura 5.95: Índice de detecção SPE na falha - FII sem seleção de variáveis.

Deve-se destacar que embora as duas abordagens avaliaram a mesma falha os resultados não são comparáveis em termos das medidas de desempenho apresentadas na secção 5.5.2. Os modelos obtidos via aprendizado de máquinas permitem fazer predições sobre o estado futuro do processo, sendo possível comparar o estado predito com o estado do processo real. Dessa forma, pode-se estabelecer uma medida de divergência que é usada como sinal de monitoramento. Por outra parte, a abordagem baseada em métricas invariantes possui uma natureza totalmente livre de modelo e não oferece nenhum tipo de predição mas sinais de tendência do comportamento dinâmico.

Tabela 5.17: Comparação de desempenho na falha F-II entre modelos ML e métricas invariantes

Técnica	Tempo detecção após falha (min)	Tempo computacional monitoramento (s)
τ autocorrelação	840	17
τ informação mútua	∞	173
Entropia Shanon	4128	181
Max Expoente de Lyapunov	∞	623
Entropia Kolmogorov	3956	421
Dimensão de correlação	4310	408
Ridge Regression	4795	11
Random Forest	4240	9
MLPR	4280	12
CCA	4525	10

Visando a comparação entre as metodologias mencionadas, foi estabelecido um limite de detecção para métodos baseados em métricas invariantes igual a $\bar{x} \pm 5\sigma$.

A Tabela 5.17 apresenta uma comparação da detecção da falha F-II em termos de tempo de detecção e custo computacional. Deve ser observado que para todas técnicas empregadas a detecção da falha sempre aconteceu após a observação da mesma, ou seja, nenhuma das técnicas empregadas permitiu a antecipação da falha. Por outra parte, a técnica baseada em entropia de Shanon e autocorrelação exibiram menores tempos de detecção em comparação aos modelos de aprendizado de máquinas.

Em geral, as detecções baseadas em métricas invariantes demandaram maior tempo computacional, uma vez que os sinais de tendência precisam ser calculados para cada novo ponto dentro da janela móvel. Considerando um cenário de monitoramento online, as detecções via modelos de aprendizado de máquinas apresentariam vantagem, uma vez que o treinamento do modelo é offline enquanto as previsões online demandariam pouco tempo computacional. Por outro lado, as técnicas baseadas em invariantes não demandam retreinamento ou reconstrução do modelo, o que constitui grande vantagem em ambientes sujeito a mudanças frequentes. Dessa forma, so as técnicas baseadas em autocorrelação, informação mútua e entropia de Shannon podem ser vantajosas em aplicações de monitoramento em tempo real em que é comum a obtenção de medidas do processo em frequências menores a 5 minutos e que estão sujeitas a retreinamento frequente. Obviamente, as técnicas baseadas em modelos e invariantes dinâmicos podem ser também combinadas para prover um ambiente mais robusto e abrangente de monitoramento.

5.7 Considerações finais

Neste capítulo foram apresentados os resultados referentes à adaptação e relevância das técnicas de caracterização de dinâmica caótica em problemas de monitoramento de processos. Na Seção 5.1.1 foram apresentados os casos de estudo baseados em dados de planta real que foram analisados neste trabalho.

Posteriormente, na Seção 5.2 foi realizada a caracterização da dinâmica periódica e caótica apresentada pelo modelo FOWM. A metodologia de caracterização tinha como propósito a obtenção das métricas invariantes dos respectivos fluxos usando as seguintes metodologias: análise de estabilidade local, análise da dinâmica discreta, análise de estabilidade pela matriz J , análise de sensibilidade às condições iniciais pelo espectro de Lyapunov e análise não linear de séries temporais via reconstrução de espaço de fases. Além disso, foram identificadas as métricas mais representativas para a caracterização de dinâmicas de transição quando apresentadas bifurcações de Hopf. Nessa seção foi mostrado pela primeira vez que a implantação de alguns sistemas de controle de golfada podem resultar em dinâmica caótica complexa, em grande parte oriunda das respostas dinâmicas que contêm resposta inversa.

Na Seção 5.3 foi apresentada a relevância do conjunto de métricas invariantes, calculado via análise não linear de séries temporais, para detecção de falhas/bifurcações nos casos de estudo envolvendo dados de planta. Foi mostrado em particular que invariantes oriundos de medidas de autocorrelação e entropia podem ser muito úteis para a identificação precisa de mudanças dinâmicas, como aquelas causadas por falhas de processo, em tempo hábil e com bom desempenho computacional.

Depois, na Seção 5.4 foi tratado o problema de reconstrução de diagramas de bifurcação de um sistema dinâmico empregando a observação de séries temporais. Apresentou-se uma metodologia baseada em aprendizado de máquinas e outra baseada na equação de Fokker-Planck. Observou-se que a reconstrução de diagramas de bifurcação pode ser muito beneficiada pela inserção de invariantes dinâmicos nos procedimentos de treinamento de modelos de *machine learning* e que o procedimento de Fokker-Planck apresenta limitações que impediram o uso no problema de produção descrito pelo modelo FOWM.

Posteriormente, na Seção 5.5 apresentou-se uma análise do uso de técnicas de descoberta causal baseadas em séries temporais desfasadas para a determinação de causa-raiz em falhas de processos. A metodologia apresentou resultados satisfatórios, recomendando-se esses procedimentos para seleção de variáveis usadas para o monitoramento, identificação e diagnóstico de falhas. Por outra parte, apresentou-

se também o uso das técnicas causais no problema de seleção de variáveis, obtendo modelos mais simplificados e de maior precisão.

Por fim, na Seção 5.6 é discutida a pertinência das técnicas de monitoramento baseadas em análise não linear de séries temporais, apresentando-se uma comparação em termos de desempenho em relação às detecções de falha baseadas em modelos de aprendizado de máquina. Em particular, foi observada a pertinência do uso de técnicas baseadas em invariantes para o monitoramento de processos sujeitos à necessidade frequente de retreinamento, tendo em vista que esses procedimentos se baseiam exclusivamente em dados.

Capítulo 6

Conclusões

Ao longo do trabalho foi estudada a pertinência e potencial de uso de diversas métricas do conjunto invariante no contexto de monitoramento e detecção de falhas de dois casos de estudo reais de escala industrial, a partir dos dados coletados em planta. Além disso, outras técnicas de caracterização dinâmica foram analisadas em casos de estudo simulados. Dessa forma, o conjunto dos métodos e técnicas estudadas e desenvolvidas neste trabalho podem ser classificadas como analíticas (aquelas dirigidas para caracterizar dinâmicas representadas por modelos matemáticos determinísticos) e as baseadas em dados (aquelas dirigidas à extração de informação sobre a dinâmica do sistema a partir de observações ou séries temporais).

Neste trabalho foram observados e estudados diversos fenômenos não lineares e complexidades que são inerentes ao comportamento dinâmico caótico. Foi observado que a caracterização das dinâmicas tem como objetivo principal a obtenção das medidas invariantes que contêm toda a informação da evolução temporal do fluxo. Em uma etapa inicial, essas caracterizações foram determinadas com auxílio das próprias equações de fluxo (caracterização analítica), para que esses resultados posteriormente fossem úteis na validação da caracterização via análise não linear se séries temporais.

Inicialmente foi realizada a caracterização analítica dos casos de estudo Benchmark (fluxos caóticos de Rossler e Lorenz conforme a definição de [258]) visando a validação das rotinas e métodos computacionais empregados. Basicamente, a caracterização desses sistemas dinâmicos avaliou os seguintes aspectos:

- Análise da estabilidade local dos equilíbrios pela matriz A . Foi mostrado que os respectivos equilíbrios que se encontram dentro das bases de atração dos correspondentes fluxos são instáveis, especificamente focos selas. Estes pontos de equilíbrio possuem natureza hiperbólica e não cumprem o Teorema de

Shilnikov, pelo que é possível afirmar que não existem órbitas homoclínicas no entorno desses pontos de equilíbrio.

- Análise da dinâmica discreta por secções de Poincaré. Foi possível representar a dinâmicas dos respectivos fluxos aperiódicos em termos de um mapa, que mostrou qualitativamente as propriedades características de expansão e contração (dobradura) de sistemas caóticos nos atratores estudados.
- Sensibilidade às condições iniciais via cálculo do espectro de Lyapunov. Foram calculados os respectivos espectros de Lyapunov para cada sistema, sendo encontrados dentro deles pelo menos um expoente de Lyapunov positivo. Além disso, foi mostrado que os expoentes de Lyapunov formam uma medida invariante do fluxo para tempos de integração $\tau > 100$.
- Análise de estabilidade local de trajetórias pela matriz J. Foi mostrado que as respectivas dinâmicas deformam e expandem em pelo menos uma direção na vizinhança infinitesimal associada à correspondente condição inicial da trajetória.
- Análise de quantificação de recorrências. Foram determinadas as métricas de quantificação de mapas de recorrências num espaço m -dimensional, encontrando-se que essas métricas refletem as mudanças dinâmicas observadas nas séries temporais e no espaço de fases.

A análise de estabilidade local dos pontos de equilíbrio da Seções D.1.1.1 e D.1.2.1 permitiu determinar os pontos de equilíbrio nos atratores, encontrando-se que ambos os fluxos (Lorenz e Rossler) correspondiam a equilíbrios instáveis, mais especificamente nós selas. Durante a análise da dinâmica discreta das seções D.1.1.2 e D.1.2.2 foi possível caracterizar a dinâmica discreta dos fluxos, sendo que no caso do atrator de Rossler só um plano de Poincaré foi requerido, enquanto para o atrator de Lorenz foram requeridos dois, isso ocorreu porque o atrator de Lorenz envolve três pontos de equilíbrio e dois lóbulos de órbitas, dificultando a escolha do mapa de Poincaré que satisfaz as condições necessárias (Seção 3.1.4.1). A análise e cálculos dos espectros de Lyapunov da Seção D.1.1.3 para o sistema de Rossler e da Seção D.1.2.3 do sistema de Lorenz permitiu observar que os comportamentos complexos e caos surgem dentro de uma estrutura espacial discreta. Dessa forma, foram mapeadas as regiões paramétricas e os comportamentos complexos que surgem dentro de elas.

Por outra parte, os resultados de estabilidade por transporte temporal de vizinhança (matriz Jacobiana) da Seção D.1.1.4 mostraram que o fluxo de Lorenz é instável pelo critério do círculo unitário, enquanto o fluxo de Lorenz na condição periódica apresenta um multiplicador de Floque marginal.

As técnicas analíticas de caracterização dinâmica foram empregadas para a análise do comportamento oscilatório periódico do modelo FOWM que descreve a dinâmica de golfadas num sistema de produção *flowline/riser* real. A caracterização dinâmica mostrou que:

- Estabilidade local: O sistema possui um único equilíbrio hiperbólico (tipo sela) que descreve a instabilidade própria do sistema dados os valores característicos da matriz de estabilidade.
- Análise de dinâmica discreta: Mostrou, qualitativamente, a existência de uma órbita periódica no espaço de fases.
- Análise de transporte de fluxo: Mostrou que a órbita periódica é estável.
- Análise de bifurcações: Foram encontrados e identificados pontos de bifurcação onde surgem oscilações de 1 e 2 períodos. Embora o intervalo do parâmetro z em que surge oscilações duplas estivesse fora da viabilidade física (abertura de válvula $> 100\%$), é possível que sob certas combinações paramétricas apareçam oscilações duplas em regiões paramétricas viáveis. O monitoramento dos autovalores do sistema dinâmico permitiu identificar um possível ponto de bifurcação de Hopf, dadas as trajetórias dos autovalores no plano Re-Img. Os procedimentos de continuação paramétrica permitiram provar rigorosamente a existência das bifurcações de Hopf. Além disso, foi identificada uma bifurcação generalizada de Hopf nas mesmas coordenadas. Durante a continuação paramétrica não foram observadas bifurcações de duplicação de período, pelo que é possível especular que as oscilações duplas observadas nas simulações dinâmicas possam ter origem em instabilidades do método de integração numérica.
- Métricas do conjunto invariante: Observou-se que os expoentes de Lyapunov conformam uma métrica interessante para também acompanhar/monitorar as bifurcações e outros fenômenos do sistema dinâmico, inclusive mostram uma tendência sobre a estabilidade que pode ser importante na antecipação da bifurcação em si. Particularmente no caso do atrator de FOWM, os expoentes de Lyapunov descrevem as mudanças dinâmicas observadas ao longo do diagrama de bifurcação. Adicionalmente, as métricas de entropia de Shannon e dimensão de correlação apresentaram uma representação indireta das bifurcações, destacando um caráter mais antecipativo e robusto que os expoentes de Lyapunov.
- Mapa de recorrências e RQA: O padrão de recorrência confirmou o caráter

periódico da dinâmica e mostrou que a trajetória tem maior densidade de recorrências na região próxima ao ponto de equilíbrio.

Por outra parte, foi estudada uma abordagem anti-slug baseado em um controle PI de feedback. Foram simulados três cenários de controle diferentes considerando uma variável controlada diferente, em que o desempenho do controle estava diretamente relacionado à capacidade de deslocamento do ponto de bifurcação de Hopf que constitui uma barreira de operabilidade da planta, uma vez que a dinâmica se torna instável. Foi demonstrado pela primeira vez que o controle PI, quando P_{rt} foi a variável controlada, permitiu o surgimento de dinâmicas caóticas. Além disso, o aparecimento desses comportamentos complexos foi detectado em condições de menor produção (ou seja, em valores de z mais baixos) do que na dinâmica de malha aberta.

O comportamento caótico foi devidamente corroborado por métricas quantitativas, como expoentes de Lyapunov e entropia de Shannon, e observações qualitativas de análise de recorrência. Além disso, os parâmetros do controlador PI que produzem comportamento oscilatório autossustentado foram determinados por meio da análise de estabilidade local. A identificação de condições de ajuste de PI que induzem dinâmicas oscilatórias (ou seja, *slugging* severo) constitui uma tarefa importante no projeto do esquema de controle.

Nos esquemas de controle, quando P_{rb} e P_{pdg} foram considerados como variáveis controladas, mostrou-se que as condições de ajuste de controle que levaram a condições de menor pressão no sistema, ou seja, condições de alta produção de óleo corresponderam a valores altos de K_p e baixos de τ .

Na Seção 5.3 também foi mostrado que é possível realizar a caracterização dos sistemas dinâmicos usando uma série temporal, o que desperta grande interesse para caracterização de sistemas dinâmicos experimentais em que não são conhecidos os modelos matemáticos e as regras determinísticas associadas aos dados. Todas as métricas descritas foram calculadas usando uma única série temporal, reconstruindo o espaço de fases e suas propriedades, e permitindo obter resultados que refletiam as caracterizações estabelecidas por via analítica. Estes resultados mostram, conforme o Teorema de Takens, que embora a reconstrução espacial não conserve a geometria, as propriedades topológicas das dinâmicas são preservadas.

Paralelamente, a análise não linear de séries temporais mostrou, no caso do problema de monitoramento EFAL, que podem ser derivadas métricas representativas da evolução temporal (Seção 5.3.1). Dessa forma, observou-se que as métricas de: autocorrelação, entropia de Shanon, expoentes de Lyapunov (via estimação

do espectro), entropia de Kolmogorov e dimensão de correlação podem ser usadas como métricas de monitoramento, uma vez que apresentam mudanças qualitativas notáveis em eventos de falha, embora desempenhos muito melhores e computacionalmente mais eficientes tenham sido obtidos a partir de métricas de autocorrelação e medidas de entropia. Por outra parte, a análise de mapas de recorrência da Seção 5.3.1.5 mostrou um alto potencial de aplicabilidade para sistemas de monitoramento de alta dimensionalidade.

As técnicas descritas, mostraram a capacidade de responder sensivelmente às falhas estudadas nos casos aqui apresentados da estação de medição fiscal EFAL.

Os procedimentos de análise não linear de séries temporais foram também utilizados no estudo da dinâmica oscilatória emergente a partir do conjunto de dados do sistema de produção offshore no contexto de detecção de *slugging*. Após a construção dos diagramas de bifurcação a partir dos dados de planta, foi possível identificar os valores de parâmetro (abertura de válvula Choke) que conduziam ao surgimento da bifurcação de Hopf. Foi provado que as métricas obtidas via análise não linear de séries (autocorrelação, entropias e taxas de informação) permitem distinguir notoriamente o comportamento prévio e posterior à bifurcação de Hopf, constituindo dessa forma um conjunto de variáveis a serem consideradas nos esquemas de monitoramento do processo e reforçando a importância de incorporar esses invariantes na rotina de monitoramento dos processos.

Por outra parte, foi aplicada uma metodologia de reconstrução de matriz Jacobiana a partir de séries temporais empregando uma abordagem de equações estocásticas e formulação de Fokker-Planck. A metodologia permitiu a reconstrução da matriz Jacobiana do sistema a partir da relação estabelecida entre a matriz jacobiana e a matriz de covariância. No entanto, a formulação se mostrou inadequada para descrever o modelo FOWM não possui viabilidade dado o número de restrições requeridas para a aplicação da metodologia analisada.

Os estudos de causalidade da Seção 5.5 mostraram para os casos de estudo da estação de medição fiscal EFAL e o processo Tennessee-Eastamn que é possível reconstruir as leis de interação do processo, por meio da determinação das conexões causais existentes imersas dentro dos dados. Também foi possível acoplar as técnicas de descobrimento causal com técnicas não paramétricas para o cálculo de distribuições de probabilidade, permitindo um cálculo mais exato das forças causais entre os enlaces das variáveis. Por outra parte, a análise de causalidade mostrou que todas as características inferidas pelo conhecimento do diagrama de processo estão refletidas nos mapas causais obtidos com base nos dados. Particularmente no caso de estudo de monitoramento da estação EFAL, observou-se que foi possível

distinguir e dividir os conjuntos de dados de acordo com suas respectivas relevâncias em seções diferentes da planta, constituindo então uma ferramenta especialmente útil na seleção das variáveis para a conclusão de análises posteriores de detecção e identificação de falhas.

Por fim, métodos de seleção de variáveis baseados em causalidade foram implementados, analisados e, em seguida, os desempenhos obtidos foram comparados com os desempenhos obtidos com vários outros métodos de seleção de variáveis baseados em filtro, wrapper e embutido. Dois estudos de caso foram apresentados, correspondendo a um benchmark simulado (o processo Tennessee-Eastman) e um caso industrial real (uma estação fiscal de medição de gás). Como mostrado através de muitos exemplos, todos os algoritmos de aprendizado considerados no presente trabalho forneceram melhores desempenhos de regressão e detecção de falhas ao usar procedimentos de seleção de variáveis baseados em causalidade. Em particular, as abordagens de seleção de variáveis baseadas em causalidade estabelecem as conexões causais da variável predita, permitindo também a determinação da respectiva dependência condicionalmente defasada. Assim, o subconjunto das variáveis selecionadas reflete características fenomenológicas do processo, como ficou evidente no estudo de caso industrial. Embora os métodos de seleção de variáveis baseados em causalidade sejam mais exigentes computacionalmente, o uso desses métodos em cenários de monitoramento que envolvem um grande número de variáveis é altamente recomendado, especialmente porque pode ser realizado como etapa de pré-processamento de análise de dados e, portanto, não irá comprometer o tempo de computação característico da aplicação final.

6.1 Sugestões para trabalhos futuros

As metodologias até aqui desenvolvidas apresentaram um grande potencial de aplicação em tempo real para os casos de plantas de produção de óleo consideradas neste trabalho. Particularmente, as métricas invariantes apresentaram diversas vantagens como discutido nas Seções 5.6 5.3. No entanto, os mesmos resultados tem sugerido a necessidade da formulação de novos índices de detecção de falha independentes a qualquer medida de discrepância, uma vez que os procedimentos baseados nas medidas invariantes não visam à predição do estado futuro da planta mas a transformação dos sinais e observação de tendências.

Ao longo da Seção 5.2.1 foram caracterizados os comportamentos caóticos originados a partir da inclusão de um sistema de controle automático PI. Os resultados sugerem que a adição de efeitos de retroalimentação carregam grande responsabi-

lidade por esse tipo de dinâmicas pelo que seria justificado avaliar a existência ou supressão de dinâmicas complexas em outros sistemas de controle ou inclusive no mesmo controlador mas considerando a ação derivativa.

Outra frente de trabalhos futuros é orientada pela análise de técnica causais abordada na Seção 5.5. Conforme discutido neste trabalho e no geral na literatura, as estimações das funções de densidade de probabilidade torná-se uma tarefa muito importante uma vez que as atuais metodologias de estimação tendem a apresentar erros em espaços altamente multidimensionais.

Para concluir, a metodologia de reconstrução da matriz Jacobiana via Equação de Fokker-Planck tem potencial para contribuir em novas frentes de pesquisas no problema de identificação de golfadas. Novas formas de especificar restrições dentro da estrutura da matriz Jacobiana constituiriam um tema de pesquisa interessante, uma vez que o método é totalmente baseado em dados.

Referências Bibliográficas

- [1] AAMO, O. M., EIKREM, G. O., SIAHAAN, H. B., et al., 2005, “Observer Design for Multiphase Flow in Vertical Pipes with Gas Lift - Theory and Experiments”, v. 26, n. 2 (jan.), pp. 65–80. doi: 10.4173/mic.2005.2.1. Disponível em: <<https://www.mic-journal.no/ABS/MIC-2005-2005-2.asp>>.
- [2] ABADI, M., AGARWAL, A., BARHAM, P., et al., 2015. “TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems”. Disponível em: <<https://www.tensorflow.org/>>. Software available from tensorflow.org.
- [3] ABARBANEL, H., 2012, *Analysis of observed chaotic data*. Springer Science & Business Media.
- [4] ABARBANEL, H. D., GOLLUB, J. P., 1996, “Analysis of observed chaotic data”, *Physics Today*, v. 49, pp. 86.
- [5] ABARBANEL, H. D., BROWN, R., SIDOROWICH, J. J., et al., 1993, “The analysis of observed chaotic data in physical systems”, *Reviews of modern physics*, v. 65, n. 4, pp. 1331.
- [6] AFSAR, O., EROGLU, D., MARWAN, N., et al., 2015, “Scaling behaviour for recurrence-based measures at the edge of chaos”, *EPL (Europhysics Letters)*, v. 112, n. 1 (oct), pp. 10005. doi: 10.1209/0295-5075/112/10005. Disponível em: <<https://doi.org/10.1209/0295-5075/112/10005>>.
- [7] AHMAD, R., KAMARUDDIN, S., 2012, “An overview of time-based and condition-based maintenance in industrial application”, *Computers & Industrial Engineering*, v. 63, n. 1, pp. 135–149.
- [8] AHMED, M. S., SHAHJAMAN, M., KABIR, E., et al., 2018, “Prediction of Protein Acetylation Sites using Kernel Naive Bayes Classifier Based on Protein Sequences Profiling”, *Bioinformation*, v. 14, n. 5, pp. 213.

- [9] AKHOONDZADEH, M., 2016, “Decision Tree, Bagging and Random Forest methods detect TEC seismo-ionospheric anomalies around the time of the Chile,(Mw= 8.8) earthquake of 27 February 2010”, *Advances in Space Research*, v. 57, n. 12, pp. 2464–2469.
- [10] ALCALA, C. F., QIN, S. J., 2010, “Reconstruction-based contribution for process monitoring with kernel principal component analysis”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 49, n. 17, pp. 7849–7857.
- [11] ALEXANDRIDIS, A., PATRINOS, P., SARIMVEIS, H., et al., 2005, “A two-stage evolutionary algorithm for variable selection in the development of RBF neural network models”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 75, n. 2 (fev.), pp. 149–162. ISSN: 0169-7439. doi: 10.1016/j.chemolab.2004.06.004. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169743904001716>>.
- [12] ALIZADEH, E., EL KOUJOK, M., RAGAB, A., et al., 2018, “A Data-Driven Causality Analysis Tool for Fault Diagnosis in Industrial Processes”, *IFAC-PapersOnLine*, v. 51, n. 24, pp. 147–152.
- [13] ALLEN, D. J., 1984, “Digraphs and fault trees”, *Industrial & engineering chemistry fundamentals*, v. 23, n. 2, pp. 175–180.
- [14] AMBLARD, P.-O., MICHEL, O., 2013, “The relation between Granger causality and directed information theory: A review”, *Entropy*, v. 15, n. 1, pp. 113–143.
- [15] APLEY, D. W., SHI, J., 1999, “The GLRT for statistical process control of autocorrelated processes”, *IIE transactions*, v. 31, n. 12, pp. 1123–1134.
- [16] ASKARIAN, M., BENÁTEZ, R., GRAELLS, M., et al., 2016, “Data-based fault detection in chemical processes: Managing records with operator intervention and uncertain labels”, *Expert Systems with Applications*, v. 63, pp. 35 – 48. ISSN: 0957-4174. doi: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2016.06.040>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417416303219>>.
- [17] AYHAN, B., CHOW, M.-Y., TRUSSELL, H. J., et al., 2003, “A case study on the comparison of non-parametric spectrum methods for broken rotor bar fault detection”. In: *IECON'03. 29th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society (IEEE Cat. No. 03CH37468)*, v. 3, pp. 2835–2840. IEEE.

- [18] BABINEC, P., LESZCZYNSKI, J., 2003, “Recurrence plot analysis of nonlinear vibrational dynamics in H₃+ molecule”, *Chaos, Solitons & Fractals*, v. 17, n. 5, pp. 981–984.
- [19] BANG, M., ENGELSGAARD, S. S., ALEXANDERSEN, E. K., et al., 2019, “Novel real-time model-based fault detection method for automatic identification of abnormal energy performance in building ventilation units”, *Energy and Buildings*, v. 183, pp. 238 – 251. ISSN: 0378-7788. doi: <https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2018.11.006>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378778818328858>>.
- [20] BAO, W., YUE, J., RAO, Y., 2017, “A deep learning framework for financial time series using stacked autoencoders and long-short term memory”, *PloS one*, v. 12, n. 7, pp. e0180944.
- [21] BARANSKI, P., PIETRZAK, P., 2016, “Computational Effective Fault Detection by Means of Signature Functions”, *PloS one*, v. 11, n. 3, pp. e0150787.
- [22] BARNETT, L., BARRETT, A. B., SETH, A. K., 2009, “Granger causality and transfer entropy are equivalent for Gaussian variables”, *Physical review letters*, v. 103, n. 23, pp. 238701.
- [23] BARTER, E., BRECHTEL, A., DROSSEL, B., et al., 2021, “A closed form for Jacobian reconstruction from time series and its application as an early warning signal in network dynamics”, *Proceedings of the Royal Society A*, v. 477, n. 2247, pp. 20200742.
- [24] BASS, T. A., 1985, *The eudaemonic pie*. Houghton Mifflin Harcourt.
- [25] BAUER, M., THORNHILL, N. F., 2008, “A practical method for identifying the propagation path of plant-wide disturbances”, *Journal of Process Control*, v. 18, n. 7-8, pp. 707–719.
- [26] BAUER, M., THORNHILL, N. F., COX, J. W., 2005, “Measuring cause and effect between process variables”. In: *Proceedings of the the IEEE Advanced Process Control Applications for Industry Workshop*.
- [27] BAUER, M., COX, J. W., CAVENESS, M. H., et al., 2007, “Finding the direction of disturbance propagation in a chemical process using transfer entropy”, *IEEE transactions on control systems technology*, v. 15, n. 1, pp. 12–21.

- [28] BAUER, M., COX, J. W., CAVENESS, M. H., et al., 2007, “Nearest neighbors methods for root cause analysis of plantwide disturbances”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 46, n. 18, pp. 5977–5984.
- [29] BELAIR, J., GLASS, L., AN DER HEIDEN, U., et al., 1995, “Dynamical disease: identification, temporal aspects and treatment strategies of human illness”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 5, n. 1, pp. 1–7.
- [30] BERGÉ, P., POMEAU, Y., VIDAL, C. “Order within chaos: towards a deterministic approach to turbulence. 1986”. .
- [31] BETTOCCHI, R., SPINA, P., AZZONI, P., 1996, “Fault Detection for Gas Turbine Sensors Using I/O Dynamic Linear Models: Methodology of Fault Code Generation”. In: *ASME 1996 Turbo Asia Conference*, pp. V001T03A002–V001T03A002. Citeseer.
- [32] BIRCANOĞLU, C., ARICA, N., 2018, “A comparison of activation functions in artificial neural networks”. In: *2018 26th Signal Processing and Communications Applications Conference (SIU)*, pp. 1–4. IEEE.
- [33] BLUM, A. L., LANGLEY, P., 1997, “Selection of relevant features and examples in machine learning”, *Artificial Intelligence*, v. 97, n. 1 (dez.), pp. 245–271. ISSN: 0004-3702. doi: 10.1016/S0004-3702(97)00063-5. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0004370297000635>>.
- [34] BOGER, Z., GUTERMAN, H., 1997, “Knowledge extraction from artificial neural network models”. In: *1997 IEEE International Conference on Systems, Man, and Cybernetics. Computational Cybernetics and Simulation*, v. 4, pp. 3030–3035. IEEE.
- [35] BOWMAN, A. W., 1984, “An alternative method of cross-validation for the smoothing of density estimates”, *Biometrika*, v. 71, n. 2, pp. 353–360.
- [36] BRAATZ, R. P., YOUNG, P. M., DOYLE, J. C., et al., 1994, “Computational complexity of μ calculation”, *IEEE Transactions on Automatic Control*, v. 39, n. 5 (May), pp. 1000–1002. ISSN: 0018-9286. doi: 10.1109/9.284879.
- [37] BRADLEY, E., KANTZ, H., 2015, “Nonlinear time-series analysis revisited”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 25, n. 9, pp. 097610.

- [38] BRECHTEL, A., GRAMLICH, P., RITTERSKAMP, D., et al., 2018, “Master stability functions reveal diffusion-driven pattern formation in networks”, *Phys. Rev. E*, v. 97 (Mar), pp. 032307. doi: 10.1103/PhysRevE.97.032307. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.97.032307>>.
- [39] BRECHTEL, A., GROSS, T., DROSSEL, B., 2019, “Far-ranging generalist top predators enhance the stability of meta-foodwebs”, *Scientific reports*, v. 9, n. 1, pp. 1–15.
- [40] BROWN, R. L., ADAMS, D. E., 2003, “Equilibrium point damage prognosis models for structural health monitoring”, *Journal of Sound and Vibration*, v. 262, n. 3, pp. 591–611.
- [41] BRUNTON, S. L., BRUNTON, B. W., PROCTOR, J. L., et al., 2017, “Chaos as an intermittently forced linear system”, *Nature Communications*, v. 8.
- [42] BULLMORE, E., SPORNS, O., 2009, “Complex brain networks: graph theoretical analysis of structural and functional systems”, *Nature reviews neuroscience*, v. 10, n. 3, pp. 186.
- [43] CASDAGLI, M., 1989, “Nonlinear prediction of chaotic time series”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 35, n. 3, pp. 335–356.
- [44] CASDAGLI, M., 1992, “A dynamical systems approach to modeling input-output systems”. In: *SANTA FE INSTITUTE STUDIES IN THE SCIENCES OF COMPLEXITY-PROCEEDINGS VOLUME-*, v. 12, pp. 265–265. ADDISON-WESLEY PUBLISHING CO.
- [45] CASTELLI, R., LESSARD, J.-P., 2013, “Rigorous Numerics in Floquet Theory: Computing Stable and Unstable Bundles of Periodic Orbits”, *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, v. 12, n. 1, pp. 204–245. ISSN: 1536-0040. doi: 10.1137/120873960. Disponível em: <<http://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/120873960>>.
- [46] CENCINI, M., FALCIONI, M., OLBRICH, E., et al., 2000, “Chaos or noise: Difficulties of a distinction”, *Physical Review E*, v. 62, n. 1, pp. 427.
- [47] CESTNIK, R., ABEL, M., 2019, “Inferring the dynamics of oscillatory systems using recurrent neural networks”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 29, n. 6, pp. 063128. doi: 10.1063/1.5096918. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/1.5096918>>.

- [48] CHANDRASHEKAR, G., SAHIN, F., 2014, “A survey on feature selection methods”, *Computers & Electrical Engineering*, v. 40, n. 1 (jan.), pp. 16–28. ISSN: 0045-7906. doi: 10.1016/j.compeleceng.2013.11.024. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045790613003066>>.
- [49] CHEN, H.-S., ZHAO, C., YAN, Z., et al., 2017, “Root Cause Diagnosis of Oscillation-Type Plant Faults Using Nonlinear Causality Analysis”, *IFAC-PapersOnLine*, v. 50, n. 1, pp. 13898 – 13903. ISSN: 2405-8963. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2017.08.2208>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2405896317328793>>. 20th IFAC World Congress.
- [50] CHEN, J., LIU, K.-C., 2002, “On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models”, *Chemical Engineering Science*, v. 57, n. 1 (jan.), pp. 63–75. ISSN: 0009-2509. doi: 10.1016/S0009-2509(01)00366-9. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250901003669>>.
- [51] CHEN, K. K., TU, J. H., ROWLEY, C. W., 2012, “Variants of Dynamic Mode Decomposition: Boundary Condition, Koopman, and Fourier Analyses”, *Journal of Nonlinear Science*, v. 22, pp. 887–915.
- [52] CHEN, Y., RANGARAJAN, G., FENG, J., et al., 2004, “Analyzing multiple nonlinear time series with extended Granger causality”, *Physics Letters A*, v. 324, n. 1, pp. 26 – 35. ISSN: 0375-9601. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2004.02.032>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960104002403>>.
- [53] CHEN, Z.-S., YANG, Y.-M., HU, Z., et al., 2005, “Early detection of gear crack based on cyclic time series”, *Hangkong Dongli Xuebao/Journal of Aerospace Power*, v. 20, n. 1, pp. 154–158.
- [54] CHENG, C., SA-NGASOONGSONG, A., BEYCA, O., et al., 2015, “Time Series Forecasting for Nonlinear and Nonstationary Processes: A Review and Comparative Study”, *IIE Transactions*, (01). doi: 10.1080/0740817X.2014.999180.
- [55] CHIANG, L. H., RUSSELL, E. L., BRAATZ, R. D., 2000, *Fault detection and diagnosis in industrial systems*. Springer Science & Business Media.
- [56] CHIANG, L. H., RUSSELL, E. L., BRAATZ, R. D., 2000, “Fault diagnosis in chemical processes using Fisher discriminant analysis, discriminant par-

tial least squares, and principal component analysis”, *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, v. 50, n. 2, pp. 243–252.

- [57] CHOLLET, F., OTHERS, 2015. “Keras”. Disponível em: <<https://github.com/fchollet/keras>>.
- [58] CLAVIJO, N., MELO, A., SOARES, R. M., et al., 2021, “Variable Selection for Fault Detection Based on Causal Discovery Methods: Analysis of an Actual Industrial Case”, *Processes*, v. 9, n. 3. ISSN: 2227-9717. doi: 10.3390/pr9030544. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/2227-9717/9/3/544>>.
- [59] COVER, T., THOMAS, J., 2006, “Elements of Information Theory 2nd edn (Hoboken, NJ, John Wiley & Sons)”, .
- [60] CURRERI, F., PATANÈ, L., XIBILIA, M. G., 2021, “RNN- and LSTM-Based Soft Sensors Transferability for an Industrial Process”, *Sensors*, v. 21, n. 3. ISSN: 1424-8220. doi: 10.3390/s21030823. Disponível em: <<https://www.mdpi.com/1424-8220/21/3/823>>.
- [61] CVITANOVIĆ, P., ARTUSO, R., MAINIERI, R., et al., 2016, *Chaos: Classical and Quantum*. Copenhagen, Niels Bohr Inst. Disponível em: <<http://ChaosBook.org/>>.
- [62] DASH, M., LIU, H., 1997, “Feature selection for classification”, *Intelligent Data Analysis*, v. 1, n. 1 (jan.), pp. 131–156. ISSN: 1088-467X. doi: 10.1016/S1088-467X(97)00008-5. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1088467X97000085>>.
- [63] DESROCHES, M., GUCKENHEIMER, J., KRAUSKOPF, B., et al., 2012, “Mixed-Mode Oscillations with Multiple Time Scales”, *SIAM Review*, v. 54, n. 2, pp. 211–288. doi: 10.1137/100791233. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/100791233>>. _eprint: <https://doi.org/10.1137/100791233>.
- [64] DEVANEY, R., 1992, *A First Course In Chaotic Dynamical Systems: Theory and Experiment. 1992*.
- [65] DIACONESCU, E., 2008, “The use of NARX neural networks to predict chaotic time series”, *Wseas Transactions on computer research*, v. 3, n. 3, pp. 182–191.

- [66] DIEHL, F. C., ANZAI, T. K., ALMEIDA, C. S., et al., 2017, “Fast Offshore Wells Model (FOWM): A practical dynamic model for multiphase oil production systems in deepwater and ultra-deepwater scenarios”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 99 (abr.), pp. 304–313. ISSN: 0098-1354. doi: 10.1016/j.compchemeng.2017.01.036. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135417300443>>.
- [67] DIEHL, F. C., ALMEIDA, C. S., ANZAI, T. K., et al., 2018, “Oil production increase in unstable gas lift systems through nonlinear model predictive control”, *Journal of Process Control*, v. 69, pp. 58–69. ISSN: 0959-1524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2018.07.009>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152418301380>>.
- [68] DIEHL, F. C., MACHADO, T. O., ANZAI, T. K., et al., 2019, “10% increase in oil production through a field applied APC in a Petrobras ultra-deepwater well”, *Control Engineering Practice*, v. 91 (out.), pp. 104108. ISSN: 0967-0661. doi: 10.1016/j.conengprac.2019.104108. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0967066119301273>>.
- [69] DING, X., GUO, L., 1996, “Observer-based fault detection optimized in the frequency domain”, *IFAC Proceedings Volumes*, v. 29, n. 1, pp. 6476–6481.
- [70] DIRETORA GERAL DA AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO, GÁS NATURAL E BIOCOMBUSTÍVEIS, 2014. “Resolução ANP Nº 18 DE 27/03/2014”.
<http://legislacao.anp.gov.br/?path=legislacao-anp/resol-anp/2014/marco&item=ranp-18--2014>.
- [71] DONGES, J. F., ZOU, Y., MARWAN, N., et al., 2009, “Complex networks in climate dynamics”, *The European Physical Journal Special Topics*, v. 174, n. 1, pp. 157–179.
- [72] DOOLEY, K., KAPOOR, S., DESSOUKY, M., et al., 1986, “An integrated quality systems approach to quality and productivity improvement in continuous manufacturing processes”, *Journal of engineering for industry*, v. 108, n. 4, pp. 322–327.
- [73] DOWNS, J., VOGEL, E., 1993, “A plant-wide industrial process control problem”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 17, n. 3, pp. 245 – 255. ISSN: 0098-1354. doi: [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(93\)80018-I](https://doi.org/10.1016/0098-1354(93)80018-I).

Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135493800181>>. Industrial challenge problems in process control.

- [74] DOYLE, R., , C., , L., et al., 1993, “Causal modeling and event-driven simulation for monitoring of continuous systems”, v. 9 (02). doi: 10.2514/6.1993-4525.
- [75] DRON, J., RASOLOFONDRAIBE, L., COUET, C., et al., 1998, “Fault detection and monitoring of a ball bearing benchtest and a production machine via autoregressive spectrum analysis”, *Journal of Sound and Vibration*, v. 218, n. 3, pp. 501–525.
- [76] DUAN, P., 2014, “Information theory-based approaches for causality analysis with industrial applications”, .
- [77] DUAN, P., CHEN, T., SHAH, S. L., et al., 2014, “Methods for root cause diagnosis of plant-wide oscillations”, *AIChE Journal*, v. 60, n. 6, pp. 2019–2034.
- [78] DUDA, R. O., HART, P. E., STORK, D. G., 1973, *Pattern classification and scene analysis*, v. 3. Wiley New York.
- [79] DUNIA, R., QIN, S. J., EDGAR, T. F., 1995, “Multivariable process monitoring using nonlinear approaches”. In: *Proceedings of 1995 American Control Conference-ACC'95*, v. 1, pp. 756–760. IEEE.
- [80] DUONG, T., OTHERS, 2007, “ks: Kernel density estimation and kernel discriminant analysis for multivariate data in R”, *Journal of Statistical Software*, v. 21, n. 7, pp. 1–16.
- [81] ECKMANN, J.-P., KAMPHORST, S. O., RUELLE, D., 1987, “Recurrence plots of dynamical systems”, *EPL (Europhysics Letters)*, v. 4, n. 9, pp. 973.
- [82] FAES, L., NOLLO, G., PORTA, A., 2011, “Information-based detection of nonlinear Granger causality in multivariate processes via a nonuniform embedding technique”, *Physical Review E*, v. 83, n. 5, pp. 051112.
- [83] FAES, L., KUGIUMTZIS, D., NOLLO, G., et al., 2015, “Estimating the decomposition of predictive information in multivariate systems”, *Physical Review E*, v. 91, n. 3, pp. 032904.
- [84] FAITAKIS, Y. E., KANTOR, J. C., 1996, “Residual generation and fault detection for discrete-time systems using an l technique”, *International Journal*

- of Control*, v. 64, n. 1, pp. 155–174. doi: 10.1080/00207179608921622. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00207179608921622>>.
- [85] FAN, J., YAO, Q., 2003, “Nonlinear time series: Nonparametric and parametric methods springer-verlag”, *New York*.
 - [86] FARMER, J. D., SIDOROWICH, J. J., 1987, “Predicting chaotic time series”, *Physical review letters*, v. 59, n. 8, pp. 845.
 - [87] FARMER, J. D., SIDOROWICH, J. J., 1988, “Exploiting chaos to predict the future and reduce noise”. In: *Evolution, learning and cognition*, World Scientific, pp. 277–330.
 - [88] FEATHERSTONE, A. P., BRAATZ, R. D., 1998, “Integrated robust identification and control of large-scale processes”, *Industrial & engineering chemistry research*, v. 37, n. 1, pp. 97–106.
 - [89] FLORENS, J.-P., MOUCHART, M., 1982, “A note on noncausality”, *Econometrica: Journal of the Econometric Society*, pp. 583–591.
 - [90] FRANK, P. M., 1990, “Fault diagnosis in dynamic systems using analytical and knowledge-based redundancy: A survey and some new results”, *Automatica*, v. 26, n. 3, pp. 459 – 474. ISSN: 0005-1098. doi: [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(90\)90018-D](https://doi.org/10.1016/0005-1098(90)90018-D). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000510989090018D>>.
 - [91] FRASER, A. M., 1989, “Information and entropy in strange attractors”, *IEEE transactions on Information Theory*, v. 35, n. 2, pp. 245–262.
 - [92] FRASER, A. M., SWINNEY, H. L., 1986, “Independent coordinates for strange attractors from mutual information”, *Physical review A*, v. 33, n. 2, pp. 1134.
 - [93] FRENZEL, S., POMPE, B., 2007, “Partial mutual information for coupling analysis of multivariate time series”, *Physical review letters*, v. 99, n. 20, pp. 204101.
 - [94] GAO, Z., CECATI, C., DING, S. X., 2015, “A Survey of Fault Diagnosis and Fault-Tolerant Techniques—Part I: Fault Diagnosis With Model-Based and Signal-Based Approaches”, *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, v. 62, n. 6 (June), pp. 3757–3767. ISSN: 0278-0046. doi: 10.1109/TIE.2015.2417501.
 - [95] GARCIA, G. M., MUNARO, C. J., 2016, “Isolation of plant-wide faults using causality detection methods”, *IFAC-PapersOnLine*, v. 49, n. 7, pp. 13–18.

- [96] GARLAND, J., BRADLEY, E., 2015, “Prediction in projection”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 25, n. 12, pp. 123108.
- [97] GE, Z., SONG, Z., GAO, F., 2013, “Review of Recent Research on Data-Based Process Monitoring”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 52, n. 10, pp. 3543–3562. doi: 10.1021/ie302069q. Disponível em: <<https://doi.org/10.1021/ie302069q>>.
- [98] GERTLER, J., 1991, “Analytical Redundancy Methods in Fault Detection and Isolation - Survey and Synthesis”, *IFAC Proceedings Volumes*, v. 24, n. 6, pp. 9 – 21. ISSN: 1474-6670. doi: [https://doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)51119-2](https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)51119-2). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667017511192>>. IFAC/IMACS Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS’91), Baden-Baden, Germany, 10-13 September 1991.
- [99] GERTLER, J. J., 1988, “Survey of model-based failure detection and isolation in complex plants”, *IEEE Control Systems Magazine*, v. 8, n. 6 (Dec), pp. 3–11. ISSN: 0272-1708. doi: 10.1109/37.9163.
- [100] GHARAHBAGHERI, H., IMTIAZ, S. A., KHAN, F. I., 2017, “Application of Bayesian network for root cause diagnosis of chemical process fault”. In: *2017 Indian Control Conference (ICC)*, pp. 188–193, Jan. doi: 10.1109/INDIANCC.2017.7846473.
- [101] GHOSH, K., RAMTEKE, M., SRINIVASAN, R., 2014, “Optimal variable selection for effective statistical process monitoring”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 60 (jan.), pp. 260–276. ISSN: 0098-1354. doi: 10.1016/j.compchemeng.2013.09.014. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135413002950>>.
- [102] GILES, C. L., LAWRENCE, S., TSOI, A. C., 2001, “Noisy time series prediction using recurrent neural networks and grammatical inference”, *Machine learning*, v. 44, n. 1, pp. 161–183.
- [103] GILMORE, R., 1998, “Topological analysis of chaotic dynamical systems”, *Rev. Mod. Phys.*, v. 70 (Oct), pp. 1455–1529. doi: 10.1103/RevModPhys.70.1455. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.70.1455>>.
- [104] GODHAVN, J.-M., FARD, M. P., FUCHS, P. H., 2005, “New slug control strategies, tuning rules and experimental results”, *Journal of Process Control*, v. 15, n. 5 (ago.), pp. 547–557. ISSN: 0959-1524. doi: 10.1016/

- j.jprocont.2004.10.003. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152404001131>>.
- [105] GOODMAN, R. M., SMYTH, P., 1990, “Decision tree design using information theory”, *Knowledge Acquisition*, v. 2, n. 1, pp. 1–19.
 - [106] GOWERS, T., BARROW-GREEN, J., LEADER, I., 2008, *The Princeton companion to mathematics*. Princeton University Press.
 - [107] GRAMACKI, A., 2018, *Nonparametric kernel density estimation and its computational aspects*. Springer.
 - [108] GRASSBERGER, P., KANTZ, H., 1985, “Generating partitions for the dissipative Hénon map”, *Physics Letters A*, v. 113, n. 5, pp. 235–238.
 - [109] GRASSBERGER, P., SCHREIBER, T., SCHAFFRATH, C., 1991, “Nonlinear time sequence analysis”, *International Journal of Bifurcation and Chaos*, v. 1, n. 03, pp. 521–547.
 - [110] GRASSBERGER, P., HEGGER, R., KANTZ, H., et al., 1993, “On noise reduction methods for chaotic data”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 3, n. 2, pp. 127–141.
 - [111] GUCKENHEIMER, J., MEERKAMP, P., 2012, “Unfoldings of Singular Hopf Bifurcation”, *SIAM Journal on Applied Dynamical Systems*, v. 11, n. 4, pp. 1325–1359. doi: 10.1137/11083678X. Disponível em: <<https://doi.org/10.1137/11083678X>>. _eprint: <https://doi.org/10.1137/11083678X>.
 - [112] GYÖRFI, L., KOHLER, M., KRZYZAK, A., et al., 2006, *A distribution-free theory of nonparametric regression*. Springer Science & Business Media.
 - [113] HAJARIAN, N., MOVAHEDI SOBHANI, F., SADJADI, S. J., 2020, “An improved approach for fault detection by simultaneous overcoming of high-dimensionality, autocorrelation, and time-variability”, *PloS one*, v. 15, n. 12 (dez.), pp. e0243146–e0243146. ISSN: 1932-6203. doi: 10.1371/journal.pone.0243146. Disponível em: <<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/33332390>>. Publisher: Public Library of Science.
 - [114] HAN, M., XI, J., XU, S., et al., 2004, “Prediction of chaotic time series based on the recurrent predictor neural network”, *IEEE transactions on signal processing*, v. 52, n. 12, pp. 3409–3416.

- [115] HARRIS, J., LIU, S.-C., MATHUR, B., 1991, “Discarding outliers using a non-linear resistive network”. In: *IJCNN-91-Seattle International Joint Conference on Neural Networks*, v. 1, pp. 501–506. IEEE.
- [116] HASSONA, S., MARSZALEK, W., SADECKI, J., 2021, “Time series classification and creation of 2D bifurcation diagrams in nonlinear dynamical systems using supervised machine learning methods”, *Applied Soft Computing*, v. 113, pp. 107874. ISSN: 1568-4946. doi: <https://doi.org/10.1016/j.asoc.2021.107874>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1568494621007961>.
- [117] HE, Q. P., QIN, S. J., WANG, J., 2005, “A new fault diagnosis method using fault directions in Fisher discriminant analysis”, *AIChE journal*, v. 51, n. 2, pp. 555–571.
- [118] HEATON, J., 2008, *Introduction to neural networks with Java*. Heaton Research, Inc.
- [119] HEGGER, R., KANTZ, H., SCHREIBER, T., 1999, “Practical implementation of nonlinear time series methods: The TISEAN package”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 9, n. 2, pp. 413–435. doi: 10.1063/1.166424. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/1.166424>.
- [120] HEIDENREICH, N.-B., SCHINDLER, A., SPERLICH, S., 2013, “Bandwidth selection for kernel density estimation: a review of fully automatic selectors”, *AStA Advances in Statistical Analysis*, v. 97, n. 4, pp. 403–433.
- [121] HIRSH, S. M., ICHINAGA, S. M., BRUNTON, S. L., et al., 2021, “Structured time-delay models for dynamical systems with connections to Frenet–Serret frame”, *Proceedings. Mathematical, Physical, and Engineering Sciences*, v. 477.
- [122] HLAVÁČKOVÁ-SCHINDLER, K., PALUŠ, M., VEJMEĽKA, M., et al., 2007, “Causality detection based on information-theoretic approaches in time series analysis”, *Physics Reports*, v. 441, n. 1, pp. 1–46.
- [123] HONERKAMP, J., 1990, *Stochastische dynamische systeme*, v. 94. Vch, Weinheim.
- [124] HUINCAHUE, J., GONZÁLEZ-OLIVARES, E., 2013, “The Rosenzweig–MacArthur predation model with double Allee effects on prey”. 09.

- [125] ISERMANN, R., 1994, "Integration of Fault Detection and Diagnosis Methods", *IFAC Proceedings Volumes*, v. 27, n. 5, pp. 575 – 590. ISSN: 1474-6670. doi: [https://doi.org/10.1016/S1474-6670\(17\)48088-8](https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)48088-8). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667017480888>>. IFAC Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS'94), Espoo, Finland, 13-16 June.
- [126] ISERMANN, R., 1997, "Supervision, fault-detection and fault-diagnosis methods — An introduction", *Control Engineering Practice*, v. 5, n. 5, pp. 639 – 652. ISSN: 0967-0661. doi: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(97\)00046-4](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(97)00046-4). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0967066197000464>>.
- [127] ISERMANN, R., 1995, "Model base fault detection and diagnosis methods". In: *Proceedings of 1995 American Control Conference - ACC'95*, v. 3, pp. 1605–1609 vol.3, June. doi: 10.1109/ACC.1995.529778.
- [128] ISERMANN, R., BALLÉ, P., 1997, "Trends in the application of model-based fault detection and diagnosis of technical processes", *Control Engineering Practice*, v. 5, n. 5, pp. 709 – 719. ISSN: 0967-0661. doi: [https://doi.org/10.1016/S0967-0661\(97\)00053-1](https://doi.org/10.1016/S0967-0661(97)00053-1). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0967066197000531>>.
- [129] ISERMANN, R., FREYERMUTH, B., 1991, "Process Fault Diagnosis Based on Process Model Knowledge: Part I—Principles for Fault Diagnosis With Parameter Estimation", *Journal of Dynamic Systems Measurement and Control-transactions of The Asme - J DYN SYST MEAS CONTR*, v. 113 (12). doi: 10.1115/1.2896466.
- [130] ISERMANN, R., 1984, "Process fault detection based on modeling and estimation methods—A survey", *Automatica*, v. 20, n. 4, pp. 387 – 404. ISSN: 0005-1098. doi: [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(84\)90098-0](https://doi.org/10.1016/0005-1098(84)90098-0). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0005109884900980>>.
- [131] ISERMANN, R., 1993, "Fault diagnosis of machines via parameter estimation and knowledge processing—Tutorial paper", *Automatica*, v. 29, n. 4, pp. 815 – 835. ISSN: 0005-1098. doi: [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(93\)90088-B](https://doi.org/10.1016/0005-1098(93)90088-B). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/000510989390088B>>.

- [132] ISERMANN, R., 2005, “Model-based fault-detection and diagnosis â€“ status and applications”, *Annual Reviews in Control*, v. 29, n. 1, pp. 71 – 85. ISSN: 1367-5788. doi: <https://doi.org/10.1016/j.arcontrol.2004.12.002>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1367578805000052>>.
- [133] ITOH, Y., TADA, Y., ADACHI, M., 2015, “Reconstruction of bifurcation diagrams with lyapunov exponents for chaotic systems from only time-series data”. In: *2015 International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications*, pp. 692–695.
- [134] JACKSON, J. E., 1959, “Quality Control Methods for Several Related Variables”, *Technometrics*, v. 1, n. 4, pp. 359–377. ISSN: 00401706. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1266717>>.
- [135] JACOBI, C. G. J., 1841, “De functionibus alternantibus earumque divisione per productum e differentiis elementorum conflatum.” *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, v. 22, pp. 360–371.
- [136] JAFFE, A. B., NEWELL, R. G., STAVINS, R. N., 2002, “Environmental policy and technological change”, *Environmental and resource economics*, v. 22, n. 1, pp. 41–70.
- [137] JAMES, R. G., BARNETT, N., CRUTCHFIELD, J. P., 2016, “Information flows? A critique of transfer entropies”, *Physical review letters*, v. 116, n. 23, pp. 238701.
- [138] JANSEN, F. E., SHOHAM, O., TAITEL, Y., 1996, “The elimination of severe slugging—experiments and modeling”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 22, n. 6 (nov.), pp. 1055–1072. ISSN: 0301-9322. doi: 10.1016/0301-9322(96)00027-4. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932296000274>>.
- [139] JEPSEN, K., HANSEN, L., MAI, C., et al., 2013, “Emulation and control of slugging flows in a gas-lifted offshore oil production well through a lab-sized facility”. In: *2013 IEEE International Conference on Control Applications (CCA)*, pp. 906–911, ago. doi: 10.1109/CCA.2013.6662866. ISSN: 1085-1992.
- [140] JI, H., HUANG, S., LV, X., et al., 2019, “Empirical Studies of a Kernel Density Estimation Based Naive Bayes Method for Software Defect Prediction”, *IEICE TRANSACTIONS on Information and Systems*, v. 102, n. 1, pp. 75–84.

- [141] JIANG, B., BRAATZ, R. D., 2017, “Fault detection of process correlation structure using canonical variate analysis-based correlation features”, *Journal of Process Control*, v. 58, pp. 131–138.
- [142] JIANG, H., CHOUDHURY, M. S., SHAH, S. L., 2007, “Detection and diagnosis of plant-wide oscillations from industrial data using the spectral envelope method”, *Journal of Process Control*, v. 17, n. 2, pp. 143–155.
- [143] JIANG, H., PATWARDHAN, R., SHAH, S. L., 2009, “Root cause diagnosis of plant-wide oscillations using the concept of adjacency matrix”, *Journal of Process Control*, v. 19, n. 8, pp. 1347–1354.
- [144] JIZBA, P., KLEINERT, H., SHEFAAT, M., 2012, “Rényi’s information transfer between financial time series”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 391, n. 10, pp. 2971–2989.
- [145] JONES, W. M., 1995. “Kernel Smoothing, Chapman & Hall”. .
- [146] JOSHI, A., DEIGNAN, P., MECKL, P., et al., 2005, “Information theoretic fault detection”. In: *Proceedings of the 2005, American Control Conference, 2005.*, pp. 1642–1647. IEEE.
- [147] KAASA, G.-O., ALSTAD, V., ZHOU, J., et al., 2008, “Attenuation of Slugging in Unstable Oil Wells by Nonlinear Control”, *IFAC Proceedings Volumes*, v. 41, n. 2 (jan.), pp. 6251–6256. ISSN: 1474-6670. doi: 10.3182/20080706-5-KR-1001.01055. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667016399475>>.
- [148] KANTZ, H., 1994, “A robust method to estimate the maximal Lyapunov exponent of a time series”, *Physics letters A*, v. 185, n. 1, pp. 77–87.
- [149] KANTZ, H., SCHREIBER, T., 2004, *Nonlinear time series analysis*, v. 7. Cambridge university press.
- [150] KAPLAN, D., GLASS, L., 1995, “Understanding nonlinear dynamics Springer”, *New York*.
- [151] KARATZAS, I., SHREVE, S., 2012, *Brownian motion and stochastic calculus*, v. 113. Springer Science & Business Media.
- [152] KATOK, A., HASSELBLATT, B., 1997, *Introduction to the modern theory of dynamical systems*, v. 54. Cambridge university press.

- [153] KENNEL, M. B., BROWN, R., ABARBANEL, H. D., 1992, “Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction”, *Physical review A*, v. 45, n. 6, pp. 3403.
- [154] KESAVAN, P., LEE, J. H., 1997, “Diagnostic tools for multivariable model-based control systems”, *Industrial & engineering chemistry research*, v. 36, n. 7, pp. 2725–2738.
- [155] KHAN, F. I., ABBASI, S., 1999, “Major accidents in process industries and an analysis of causes and consequences”, *Journal of Loss Prevention in the process Industries*, v. 12, n. 5, pp. 361–378.
- [156] KHAN, F. I., ABBASI, S., 1999, “Major accidents in process industries and an analysis of causes and consequences”, *Journal of Loss Prevention in the process Industries*, v. 12, n. 5, pp. 361–378.
- [157] KING, A. P., ECKERSLEY, R. J., 2019, “Chapter 1 - Descriptive Statistics I: Univariate Statistics”. In: King, A. P., Eckersley, R. J. (Eds.), *Statistics for Biomedical Engineers and Scientists*, Academic Press, pp. 1–21. ISBN: 978-0-08-102939-8. doi: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102939-8.00010-4>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780081029398000104>>.
- [158] KITAMURA, M., 1980, “Detection of sensor failures in nuclear plant using analytic redundancy”. v. 34, 01.
- [159] KOHAVI, R., JOHN, G. H., 1997, “Wrappers for feature subset selection”, *Artificial Intelligence*, v. 97, n. 1 (dez.), pp. 273–324. ISSN: 0004-3702. doi: 10.1016/S0004-3702(97)00043-X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000437029700043X>>.
- [160] KOLLER, D., SAHAMI, M., 1996, “Toward optimal feature selection”. In: *Proc. 13th International Conference on Machine Learning*, pp. 284–292. Morgan Kaufmann.
- [161] KRESTA, J. V., MACGREGOR, J. F., MARLIN, T. E., “Multivariate statistical monitoring of process operating performance”, *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 69, n. 1, pp. 35–47. doi: 10.1002/cjce.5450690105. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cjce.5450690105>>.
- [162] KRISHNAIAH, J., KUMAR, C., FARUQI, M., 2006, “Modelling and control of chaotic processes through their Bifurcation Diagrams generated with the

- help of Recurrent Neural Network models: Part 1—simulation studies”, *Journal of process control*, v. 16, n. 1, pp. 53–66.
- [163] KU, W., STORER, R. H., GEORGAKIS, C., 1995, “Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 30, n. 1 (nov.), pp. 179–196. ISSN: 0169-7439. doi: 10.1016/0169-7439(95)00076-3. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0169743995000763>>.
- [164] KUGIUMTZIS, D., LILLEKJENDLIE, B., CHRISTOPHERSEN, N. D., 1994, “Chaotic time series: Part 1: estimation of some invariant properties in state space”, *Modeling, Identification and Control*, v. 15, n. 4, pp. 205–224.
- [165] KUMAR, C., PATEL, N., JARUDI, I., 2003, “21st century physics: Grand challenges”, *Journal of the Federation of American Scientists*, v. 56, n. 2, pp. 9–11.
- [166] KUZNETSOV, Y., 2004, *Elements of Applied Bifurcation Theory*. Applied Mathematical Sciences. 3 ed. New York, Springer-Verlag. ISBN: 978-0-387-21906-6. doi: 10.1007/978-1-4757-3978-7. Disponível em: <<https://www.springer.com/gp/book/9780387219066>>.
- [167] KUZNETSOV, Y. A., 2013, *Elements of applied bifurcation theory*, v. 112. Springer Science & Business Media.
- [168] L. RUSSELL, E., CHIANG, L., BRAATZ, R., 2000, *Data-Driven Methods for Fault Detection and Diagnosis in Chemical Processes*. doi: 10.1007/978-1-4471-0409-4.
- [169] LANG, T., PLAGEMANN, C., BURGARD, W., 2007, “Adaptive Non-Stationary Kernel Regression for Terrain Modeling.” In: *Robotics: Science and Systems*, v. 6.
- [170] LEE, C., CHOI, S. W., LEE, I.-B., 2004, “Sensor fault identification based on time-lagged PCA in dynamic processes”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 70, n. 2 (fev.), pp. 165–178. ISSN: 0169-7439. doi: 10.1016/j.chemolab.2003.10.011. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S016974390300203X>>.
- [171] LI, G., QIN, S. J., YUAN, T., 2016, “Data-driven root cause diagnosis of faults in process industries”, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, v. 159, pp. 1 – 11. ISSN: 0169-7439. doi: <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2016.09.006>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169743916303203>>.

- [172] LILLEKJENDLIE, B., KUGIUMTZIS, D., CHRISTOPHERSEN, N., 1994, “Chaotic time series part II: System identification and prediction”, *arXiv preprint chao-dyn/9401003*.
- [173] LIU, J., LUO, W., YANG, X., et al., 2016, “Robust Model-Based Fault Diagnosis for PEM Fuel Cell Air-Feed System”, *IEEE TRANSACTIONS ON INDUSTRIAL ELECTRONICS*, v. 63 (5), pp. 3261–3270. ISSN: 0278-0046. doi: 10.1109/TIE.2016.2535118.
- [174] LORENZ, E. N., 1969, “Atmospheric predictability as revealed by naturally occurring analogues”, *Journal of the Atmospheric sciences*, v. 26, n. 4, pp. 636–646.
- [175] LORENZ, E. N., 1963, “Deterministic Nonperiodic Flow”, *Journal of the Atmospheric Sciences*, v. 20, n. 2 (mar.), pp. 130–141. ISSN: 0022-4928, 1520-0469. doi: 10.1175/1520-0469(1963)020<0130:DNF>2.0.CO;2. Disponível em: <https://journals.ametsoc.org/view/journals/atsc/20/2/1520-0469_1963_020_0130_dnf_2_0_co_2.xml>. Publisher: American Meteorological Society Section: Journal of the Atmospheric Sciences.
- [176] LOU, X.-C., WILLSKY, A. S., VERGHESE, G. C., 1986, “Optimally robust redundancy relations for failure detection in uncertain systems”, *Automatica*, v. 22, n. 3, pp. 333 – 344. ISSN: 0005-1098. doi: [https://doi.org/10.1016/0005-1098\(86\)90031-2](https://doi.org/10.1016/0005-1098(86)90031-2). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0005109886900312>>.
- [177] LUSCH, B., KUTZ, J. N., BRUNTON, S. L., 2018, “Deep learning for universal linear embeddings of nonlinear dynamics”, *Nature communications*, v. 9, n. 1, pp. 1–10.
- [178] LV, F., WEN, C., BAO, Z., et al., 2016, “Fault diagnosis based on deep learning”. In: *2016 American Control Conference (ACC)*, pp. 6851–6856, July. doi: 10.1109/ACC.2016.7526751.
- [179] MA, D. L., CHUNG, S. H., BRAATZ, R. D., “Worst-case performance analysis of optimal batch control trajectories”, *AIChE Journal*, v. 45, n. 7, pp. 1469–1476. doi: 10.1002/aic.690450710. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690450710>>.
- [180] MA, Y., SHI, W., PENG, C.-K., et al., 2018, “Nonlinear dynamical analysis of sleep electroencephalography using fractal and entropy approaches”, *Sleep Medicine Reviews*, v. 37, pp. 85 – 93. ISSN: 1087-0792. doi: <https://doi.org/10.1016/j.smrv.2018.05.003>.

//doi.org/10.1016/j.smr.2017.01.003. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1087079217300187>>.

- [181] MACGREGOR, J. F., KOURTI, T., 1995, “Statistical process control of multivariate processes”, *Control Engineering Practice*, v. 3, n. 3, pp. 403–414.
- [182] MALHOTRA, P., VIG, L., SHROFF, G., et al., 2015, “Long Short Term Memory Networks for Anomaly Detection in Time Series”. 04.
- [183] MARWAN, N., KURTHS, J., 2002, “Nonlinear analysis of bivariate data with cross recurrence plots”, *Physics Letters A*, v. 302, n. 5-6, pp. 299–307.
- [184] MARWAN, N., WESSEL, N., MEYERFELDT, U., et al., 2002, “Recurrence-plot-based measures of complexity and their application to heart-rate-variability data”, *Physical review E*, v. 66, n. 2, pp. 026702.
- [185] MARWAN, N., ROMANO, M. C., THIEL, M., et al., 2007, “Recurrence Plots for the Analysis of Complex Systems”, *Physics Reports*, v. 438, n. 5-6 (jan.), pp. 237–329. ISSN: 0370-1573. doi: 10.1016/J.PHYSREP.2006.11.001. Disponível em: <<https://abdn.pure.elsevier.com/en/publications/recurrence-plots-for-the-analysis-of-complex-systems>>. Publisher: Elsevier.
- [186] MASUGI, M., 2006, “Recurrence plot-based approach to the analysis of IP-network traffic in terms of assessing nonstationary transitions over time”, *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers*, v. 53, n. 10, pp. 2318–2326.
- [187] MAURYA, M. R., PARITOSH, P. K., RENGASWAMY, R., et al., 2010, “A framework for on-line trend extraction and fault diagnosis”, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, v. 23, n. 6, pp. 950 – 960. ISSN: 0952-1976. doi: <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2010.01.027>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0952197610000680>>.
- [188] MAYER-KRESS, G., 2012, *Dimensions and Entropies in Chaotic Systems: Quantification of Complex Behavior Proceeding of an International Workshop at the Pecos River Ranch, New Mexico, September 11–16, 1985*, v. 32. Springer Science & Business Media.
- [189] MEGLIO, F. D., KAASA, G., PETIT, N., 2009, “A first principle model for multiphase slugging flow in vertical risers”. In: *Proceedings of the 48h*

IEEE Conference on Decision and Control (CDC) held jointly with 2009 28th Chinese Control Conference, pp. 8244–8251, dez. doi: 10.1109/CDC.2009.5400680. ISSN: 0191-2216.

- [190] MEZIĆ, I., 2013, “Analysis of Fluid Flows via Spectral Properties of the Koopman Operator”, *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 45, pp. 357–378.
- [191] MICHAEL, S., 2005, *Applied nonlinear time series analysis: applications in physics, physiology and finance*, v. 52. World Scientific.
- [192] MOEUF, A., PELLERIN, R., LAMOURI, S., et al., 2018, “The industrial management of SMEs in the era of Industry 4.0”, *International Journal of Production Research*, v. 56, n. 3, pp. 1118–1136.
- [193] MOHAMAD, T. H., CHEN, Y., CHAUDHRY, Z., et al., 2018, “Gear Fault Detection Using Recurrence Quantification Analysis and Support Vector Machine”, *Journal of Software Engineering and Applications*, v. 11, n. 05, pp. 181.
- [194] MONIZ, L., NICHOLS, J., NICHOLS, C., et al., 2005, “A multivariate, attractor-based approach to structural health monitoring”, *Journal of Sound and Vibration*, v. 283, n. 1-2, pp. 295–310.
- [195] MUBAYI, A., KRIBS, C., ARUNACHALAM, V., et al., 2019, “Chapter 5 - Studying Complexity and Risk Through Stochastic Population Dynamics: Persistence, Resonance, and Extinction in Ecosystems”. In: Srinivasa Rao, A. S., Rao, C. (Eds.), *Integrated Population Biology and Modeling, Part B*, v. 40, *Handbook of Statistics*, Elsevier, pp. 157–193. doi: <https://doi.org/10.1016/bs.host.2018.11.001>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169716118300944>>.
- [196] NAIR, G. N., 2013, “A nonstochastic information theory for communication and state estimation”, *IEEE Transactions on automatic control*, v. 58, n. 6, pp. 1497–1510.
- [197] NATARAJU, M., JOHNSON, T. J., ADAMS, D. E., 2003, “Dynamic similarity approach for more robust structural health monitoring in nonlinear, nonstationary and stochastic systems”. In: *Smart Structures and Materials 2003: Modeling, Signal Processing, and Control*, v. 5049, pp. 156–168. International Society for Optics and Photonics.
- [198] NGUYEN-TUONG, D., PETERS, J. R., SEEGER, M., 2009, “Local gaussian process regression for real time online model learning”. In: *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 1193–1200.

- [199] NICHOLS, J., TRICKEY, S., TODD, M., et al., 2003, “Structural health monitoring through chaotic interrogation”, *Meccanica*, v. 38, n. 2, pp. 239–250.
- [200] NOR, N. M., HASSAN, C. R. C., HUSSAIN, M. A., “A review of data-driven fault detection and diagnosis methods: applications in chemical process systems”, *Reviews in Chemical Engineering*.
- [201] OLBRICH, E., KANTZ, H., 1997, “Inferring chaotic dynamics from time-series: On which length scale determinism becomes visible”, *Physics Letters A*, v. 232, n. 1-2, pp. 63–69.
- [202] OTT, E., 2002, *Chaos in dynamical systems*. Cambridge university press.
- [203] OTT, E., SAUER, T., YORKE, J. A., 1994, “Coping with Chaos: Analysis of Chaotic Data and the Exploitation of Chaotic Systems, 418 pp”, .
- [204] PACKARD, N. H., CRUTCHFIELD, J. P., FARMER, J. D., et al., 1980, “Geometry from a Time Series”, *Phys. Rev. Lett.*, v. 45 (Sep), pp. 712–716. doi: 10.1103/PhysRevLett.45.712. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.712>>.
- [205] PARK, B. U., MARRON, J. S., 1990, “Comparison of data-driven bandwidth selectors”, *Journal of the American Statistical Association*, v. 85, n. 409, pp. 66–72.
- [206] PIKOVSKY, A., 1986, “Noise filtering in the discrete time dynamical systems”, *Sov. J. Commun. Technol. Electron*, v. 31, n. 5, pp. 911–914.
- [207] PLOVOSO, M. J., KOSANOVICH, K. A., 1994, “Applications of multivariate statistical methods to process monitoring and controller design”, *International Journal of Control*, v. 59, n. 3, pp. 743–765. doi: 10.1080/00207179408923103. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00207179408923103>>.
- [208] PLUCENIO, A., PAGANO, D. J., CAMPONOGARA, E., et al., 2009, “Gas-lift Optimization and Control with Nonlinear MPC”, *IFAC Proceedings Volumes*, v. 42, n. 11 (jan.), pp. 904–909. ISSN: 1474-6670. doi: 10.3182/20090712-4-TR-2008.00148. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1474667015303918>>.
- [209] POMERAT, J., SEGEV, A., DATTA, R., 2019, “On neural network activation functions and optimizers in relation to polynomial regression”. In: *2019*

IEEE International Conference on Big Data (Big Data), pp. 6183–6185. IEEE.

- [210] POMPE, B., RUNGE, J., 2011, “Momentary information transfer as a coupling measure of time series”, *Physical Review E*, v. 83, n. 5, pp. 051122.
- [211] QIAN, Y., LI, X., JIANG, Y., et al., 2003, “An expert system for real-time fault diagnosis of complex chemical processes”, *Expert Systems with Applications*, v. 24, n. 4, pp. 425 – 432. ISSN: 0957-4174. doi: [https://doi.org/10.1016/S0957-4174\(02\)00190-2](https://doi.org/10.1016/S0957-4174(02)00190-2). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417402001902>>.
- [212] QIN, S. J., 2012, “Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis”, *Annual Reviews in Control*, v. 36, n. 2, pp. 220 – 234. ISSN: 1367-5788. doi: <https://doi.org/10.1016/j.arcontrol.2012.09.004>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1367578812000399>>.
- [213] RAGAB, A., EL-KOUJOK, M., AMAZOUZ, M., et al., 2017, “Fault detection and diagnosis in the Tennessee Eastman Process using interpretable knowledge discovery”. In: *2017 Annual Reliability and Maintainability Symposium (RAMS)*, pp. 1–7. IEEE.
- [214] RAGAB, A., EL-KOUJOK, M., POULIN, B., et al., 2018, “Fault diagnosis in industrial chemical processes using interpretable patterns based on Logical Analysis of Data”, *Expert Systems with Applications*, v. 95, pp. 368 – 383. ISSN: 0957-4174. doi: <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2017.11.045>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417417307984>>.
- [215] RAICH, A., ÇINAR, A., 1996, “Statistical process monitoring and disturbance diagnosis in multivariable continuous processes”, *AIChE Journal*, v. 42, n. 4, pp. 995–1009. doi: 10.1002/aic.690420412. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690420412>>.
- [216] RASCHKA, S., MIRJALILI, V., 2019, *Python machine learning: Machine learning and deep learning with Python, scikit-learn, and TensorFlow 2*. Packt Publishing Ltd.
- [217] RASHID, K., BAILEY, W., COUËT, B., 2012, “A Survey of Methods for Gas-Lift Optimization”, *Modelling and Simulation in Engineering*, v. 2012

- (set.), pp. e516807. ISSN: 1687-5591. doi: 10.1155/2012/516807. Disponível em: <<https://www.hindawi.com/journals/mse/2012/516807/>>. Publisher: Hindawi.
- [218] RAUBER, T. W., BOLDT, F. A., MUNARO, C. J., 2020, “Feature selection for multivariate contribution analysis in fault detection and isolation”, *Journal of the Franklin Institute*, v. 357, n. 10 (jul.), pp. 6294–6320. ISSN: 0016-0032. doi: 10.1016/j.jfranklin.2020.03.005. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016003220301617>>.
- [219] REUNANEN, J., 2003, “Overfitting in Making Comparisons Between Variable Selection Methods”, *Journal of Machine Learning Research*, v. 3, n. Mar, pp. 1371–1382. ISSN: ISSN 1533-7928. Disponível em: <<https://www.jmlr.org/papers/v3/reunanen03a.html>>.
- [220] RIEMER, P. L., MITCHELL, J. W., BECKMAN, W. A., 2002, “The use of time series analysis in fault detection and diagnosis methodologies”, *ASHRAE Transactions*, v. 108, pp. 384.
- [221] RISKEN, H., 1996, “Fokker-planck equation”. In: *The Fokker-Planck Equation*, Springer, pp. 63–95.
- [222] ROBINS, V., ROONEY, N., BRADLEY, E., 2004, “Topology-based signal separation”, *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, v. 14, n. 2, pp. 305–316.
- [223] ROJKO, A., 2017, “Industry 4.0 concept: background and overview”, *International Journal of Interactive Mobile Technologies (iJIM)*, v. 11, n. 5, pp. 77–90.
- [224] ROSENSTEIN, M. T., COLLINS, J. J., DE LUCA, C. J., 1993, “A practical method for calculating largest Lyapunov exponents from small data sets”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 65, n. 1-2, pp. 117–134.
- [225] ROWLEY, C. W., MEZIĆ, I., BAGHERI, S., et al., 2009, “Spectral analysis of nonlinear flows”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 641, pp. 115–127. doi: 10.1017/S0022112009992059.
- [226] RUNGE, J., 2015, “Quantifying information transfer and mediation along causal pathways in complex systems”, *Phys. Rev. E*, v. 92 (Dec), pp. 062829. doi: 10.1103/PhysRevE.92.062829. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.92.062829>>.

- [227] RUNGE, J., 2015, “Quantifying information transfer and mediation along causal pathways in complex systems”, *Physical Review E*, v. 92, n. 6, pp. 062829.
- [228] RUNGE, J., 2017, “Conditional independence testing based on a nearest-neighbor estimator of conditional mutual information”, *arXiv preprint arXiv:1709.01447*.
- [229] RUNGE, J., HEITZIG, J., MARWAN, N., et al., 2012, “Quantifying causal coupling strength: A lag-specific measure for multivariate time series related to transfer entropy”, *Physical Review E*, v. 86, n. 6, pp. 061121.
- [230] RUNGE, J., HEITZIG, J., PETOUKHOV, V., et al., 2012, “Escaping the curse of dimensionality in estimating multivariate transfer entropy”, *Physical review letters*, v. 108, n. 25, pp. 258701.
- [231] RUNGE, J., PETOUKHOV, V., DONGES, J. F., et al., 2015, “Identifying causal gateways and mediators in complex spatio-temporal systems”, *Nature communications*, v. 6, pp. 8502.
- [232] RUNGE, J., SEJDINOVIC, D., FLAXMAN, S., 2017, “Detecting causal associations in large nonlinear time series datasets”, *arXiv preprint arXiv:1702.07007*.
- [233] RUSSELL, E. L., POWER, C. P., BRAATZ, R. D., 1997, “Multidimensional realization of large scale uncertain systems for multivariable stability margin computation”, *International Journal of Robust and Nonlinear Control: IFAC-Affiliated Journal*, v. 7, n. 2, pp. 113–125.
- [234] SAMADANI, M., KWUIMY, C. A., NATARAJ, C., 2014, *Fault detection and severity analysis of servo valves using recurrence quantification analysis*. Relatório técnico, Villanova University Villanova United States.
- [235] SANO, M., SAWADA, Y., 1985, “Measurement of the Lyapunov spectrum from a chaotic time series”, *Physical review letters*, v. 55, n. 10, pp. 1082.
- [236] SATO, S., SANO, M., SAWADA, Y., 1987, “Practical methods of measuring the generalized dimension and the largest Lyapunov exponent in high dimensional chaotic systems”, *Progress of Theoretical Physics*, v. 77, n. 1, pp. 1–5.
- [237] SAUER, T., YORKE, J. A., CASDAGLI, M., 1991, “Embedology”, *Journal of statistical Physics*, v. 65, n. 3-4, pp. 579–616.

- [238] SAVI, M. A., 2006, *Dinâmica não-linear e caos*. Editora E-papers.
- [239] SCHMID, P. J., 2010, “Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 656, pp. 5 – 28.
- [240] SCHMIDT, Z., DOTY, D. R., DUTTA-ROY, K., 1985, “Severe Slugging in Offshore Pipeline Riser-Pipe Systems”, *Society of Petroleum Engineers Journal*, v. 25, n. 01 (fev.), pp. 27–38. ISSN: 0197-7520. doi: 10.2118/12334-PA. Disponível em: <<https://doi.org/10.2118/12334-PA>>.
- [241] SCHREIBER, T., 1999, “Interdisciplinary application of nonlinear time series methods”, *Physics reports*, v. 308, n. 1, pp. 1–64.
- [242] SCHREIBER, T., 2000, “Measuring information transfer”, *Physical review letters*, v. 85, n. 2, pp. 461.
- [243] SCHUSTER, H. G., JUST, W., 2006, *Deterministic chaos: an introduction*. John Wiley & Sons.
- [244] SCOTT, D. W., 2015, *Multivariate density estimation: theory, practice, and visualization*. John Wiley & Sons.
- [245] SEIFRIED, P., 1979, “Fault Detection and Diagnosis in Chemical and Petrochemical Processes, Bd. 8 der Serie Chemical Engineering Monographs.” *Chemie Ingenieur Technik*, v. 51, n. 7, pp. 766–766. doi: 10.1002/cite.330510726. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cite.330510726>>.
- [246] SEVERSON, K., CHAIWATANODOM, P., BRAATZ, R. D., 2016, “Perspectives on process monitoring of industrial systems”, *Annual Reviews in Control*, v. 42, pp. 190–200.
- [247] SHAHBAZ, M., LOGANATHAN, N., SBIA, R., et al., 2015, “The effect of urbanization, affluence and trade openness on energy consumption: A time series analysis in Malaysia”, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 47, pp. 683 – 693. ISSN: 1364-0321. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.03.044>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1364032115001975>>.
- [248] SHANNON, C. E., 1948, “A Mathematical Theory of Communication”, *Bell System Technical Journal*, v. 27, n. 3, pp. 379–423. doi: 10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/j.1538-7305.1948.tb01338.x>>.

- [249] SHEELA, K. G., DEEPA, S. N., 2013, “Review on methods to fix number of hidden neurons in neural networks”, *Mathematical problems in engineering*, v. 2013.
- [250] SHIL'NIKOV, L., 1965, “A case of the existence of a denumerable set of periodic motion”. In: *Sov. Math. Dokl*, v. 6, pp. 163–166.
- [251] SILVERMAN, B. W., 2018, *Density estimation for statistics and data analysis*. Routledge.
- [252] SINGH, A., GUPTA, P., ASJAD, M., 2019, “Reconfigurable Manufacturing System (RMS): Accelerate Towards Industries 4.0”, *Available at SSRN 3354485*.
- [253] SIVERTSEN, H., STORKAAS, E., SKOGESTAD, S., 2010, “Small-scale experiments on stabilizing riser slug flow”, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 88, n. 2 (fev.), pp. 213–228. ISSN: 0263-8762. doi: 10.1016/j.cherd.2009.08.007. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0263876209002019>>.
- [254] SKOGESTAD, S., POSTLETHWAITE, I., 2005, “Multivariable Feedback Control: Analysis and Design”. In: *Multivariable Feedback Control: Analysis and Design*, v. 1, 2 ed., Wiley, p. 590, New York. ISBN: 978-0-470-01167-6.
- [255] SMALL, M., TSE, C. K., 2012, “Predicting the outcome of roulette”, *Chaos: an interdisciplinary journal of nonlinear science*, v. 22, n. 3, pp. 033150.
- [256] STACK, J. R., HABETLER, T. G., HARLEY, R. G., 2004, “Bearing fault detection via autoregressive stator current modeling”, *IEEE Transactions on Industry Applications*, v. 40, n. 3, pp. 740–747.
- [257] STRAMAGLIA, S., WU, G.-R., PELLICORO, M., et al., 2012, “Expanding the transfer entropy to identify information circuits in complex systems”, *Physical Review E*, v. 86, n. 6, pp. 066211.
- [258] STROGATZ, S. H., 2014, *Nonlinear dynamics and chaos: with applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. Westview press.
- [259] SUGIHARA, G., MAY, R. M., 1990, “Nonlinear forecasting as a way of distinguishing chaos from measurement error in time series”, *Nature*, v. 344, n. 6268, pp. 734.

- [260] SUGIHARA, G., MAY, R., YE, H., et al., 2012, “Detecting Causality in Complex Ecosystems”, *Science*, v. 338, n. 6106, pp. 496–500. ISSN: 0036-8075. doi: 10.1126/science.1227079. Disponível em: <<https://science.sciencemag.org/content/338/6106/496>>.
- [261] SUGUMARAN, V., MURALIDHARAN, V., RAMACHANDRAN, K. I., 2007, “Feature selection using Decision Tree and classification through Proximal Support Vector Machine for fault diagnostics of roller bearing”, *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 21, n. 2 (fev.), pp. 930–942. ISSN: 0888-3270. doi: 10.1016/j.ymssp.2006.05.004. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0888327006001142>>.
- [262] SUN, Y., 2011, *Fault detection in dynamic systems using the largest lyapunov exponent*. Tese de Doutorado, Thesis, Texas A&M.
- [263] TAITEL, Y., 1986, “Stability of severe slugging”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 12, n. 2 (mar.), pp. 203–217. ISSN: 0301-9322. doi: 10.1016/0301-9322(86)90026-1. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0301932286900261>>.
- [264] TAKENS, F., 1981, “Detecting strange attractors in turbulence”. In: Rand, D., Young, L.-S. (Eds.), *Dynamical Systems and Turbulence, Warwick 1980*, pp. 366–381, Berlin, Heidelberg. Springer Berlin Heidelberg. ISBN: 978-3-540-38945-3.
- [265] THOMAS, P., 2002, “Fault detection and diagnosis in engineering systems”, *Control Engineering Practice*, v. 10 (09), pp. 1037–1038. doi: 10.1016/S0967-0661(02)00064-3.
- [266] TIAN, Q., PRICE, N. D., HOOD, L., 2012, “Systems cancer medicine: towards realization of predictive, preventive, personalized and participatory (P4) medicine”, *Journal of internal medicine*, v. 271, n. 2, pp. 111–121.
- [267] TIBSHIRANI, R., 1996, “Regression Shrinkage and Selection via the Lasso”, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, v. 58, n. 1, pp. 267–288. ISSN: 0035-9246. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/2346178>>. Publisher: [Royal Statistical Society, Wiley].
- [268] TRAN, K. P., NGUYEN, H. D., THOMASSEY, S., 2019, “Anomaly detection using Long Short Term Memory Networks and its applications in

- Supply Chain Management”, *IFAC-PapersOnLine*, v. 52, n. 13, pp. 2408–2412. ISSN: 2405-8963. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2019.11.567>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S240589631931554X>>. 9th IFAC Conference on Manufacturing Modelling, Management and Control MIM 2019.
- [269] TRENDAFILOVA, I., VAN BRUSSEL, H., 2001, “Non-linear dynamics tools for the motion analysis and condition monitoring of robot joints”, *Mechanical Systems and Signal Processing*, v. 15, n. 6, pp. 1141–1164.
- [270] TRULLA, L., GIULIANI, A., ZBILUT, J., et al., 1996, “Recurrence quantification analysis of the logistic equation with transients”, *Physics Letters A*, v. 223, n. 4, pp. 255 – 260. ISSN: 0375-9601. doi: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)00741-4](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00741-4). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960196007414>>.
- [271] TRUNZER, E., WU, C., GUO, K., et al., 2018, “Data-Driven Approach to Support Experts in the Identification of Operational States in Industrial Process Plants”. In: *IECON 2018 - 44th Annual Conference of the IEEE Industrial Electronics Society*, pp. 3096–3101, Oct. doi: 10.1109/IECON.2018.8591445.
- [272] TU, J. H., ROWLEY, C. W., LUCHTENBURG, D. M., et al., 2014, “On dynamic mode decomposition: Theory and applications”, *Journal of Computational Dynamics*, v. 1, n. 2, pp. 391–421.
- [273] UPADHYAYA, B., SKORSKA, M., 1983, “Fault analysis of in-core detectors in a PWR using time-series models”. In: *The 22nd IEEE Conference on Decision and Control*, pp. 758–763. IEEE.
- [274] UPADHYAYA, B., KITAMURA, M., KERLIN, T., 1980, “Signature monitoring of nuclear power plant dynamics-stochastic modeling and case studies”. In: *1980 19th IEEE Conference on Decision and Control including the Symposium on Adaptive Processes*, pp. 121–126. IEEE.
- [275] VAKORIN, V. A., KRAKOVSKA, O. A., MCINTOSH, A. R., 2009, “Confounding effects of indirect connections on causality estimation”, *Journal of neuroscience methods*, v. 184, n. 1, pp. 152–160.
- [276] VAN KAMPEN, N. G., 1992, *Stochastic processes in physics and chemistry*, v. 1. Elsevier.
- [277] VARGA, A., 2008, “On computing nullspace bases—A fault detection perspective”, *IFAC Proceedings Volumes*, v. 41, n. 2, pp. 6295–6300.

- [278] VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY, R., KAVURI, S. N., et al., 2003, “A review of process fault detection and diagnosis: Part III: Process history based methods”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 27, n. 3, pp. 327 – 346. ISSN: 0098-1354. doi: [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00162-X](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00162-X). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S009813540200162X>>.
- [279] VENKATASUBRAMANIAN, V., RENGASWAMY, R., YIN, K., et al., 2003, “A review of process fault detection and diagnosis: Part I: Quantitative model-based methods”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 27, n. 3, pp. 293 – 311. ISSN: 0098-1354. doi: [https://doi.org/10.1016/S0098-1354\(02\)00160-6](https://doi.org/10.1016/S0098-1354(02)00160-6). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135402001606>>.
- [280] VICENTE, R., WIBRAL, M., LINDNER, M., et al., 2011, “Transfer entropy—a model-free measure of effective connectivity for the neurosciences”, *Journal of computational neuroscience*, v. 30, n. 1, pp. 45–67.
- [281] VOGEL, J., 1968, “Inflow Performance Relationships for Solution-Gas Drive Wells”, *Journal of Petroleum Technology*, v. 20, n. 01 (jan.), pp. 83–92. ISSN: 0149-2136. doi: 10.2118/1476-PA. Disponível em: <<https://doi.org/10.2118/1476-PA>>.
- [282] WANG, J. M., FLEET, D. J., HERTZMANN, A., 2008, “Gaussian process dynamical models for human motion”, *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence*, v. 30, n. 2, pp. 283–298.
- [283] WANG, X., SYRMOS, V. L., 2007, “Nonlinear system identification and fault detection using hierarchical clustering analysis and local linear models”. In: *2007 Mediterranean Conference on Control & Automation*, pp. 1–6. IEEE.
- [284] WEISBERG, H. F., 1998, “Nonlinear models of electoral change: the implications of political time and chaos theory for the study of mass political behavior”, *Electoral Studies*, v. 17, n. 3, pp. 369 – 382. ISSN: 0261-3794. doi: [https://doi.org/10.1016/S0261-3794\(98\)00033-X](https://doi.org/10.1016/S0261-3794(98)00033-X). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S026137949800033X>>.
- [285] WISE, B. M., GALLAGHER, N. B., 1996, “The process chemometrics approach to process monitoring and fault detection”, *Journal of Process Control*, v. 6, n. 6, pp. 329 – 348. ISSN: 0959-1524. doi: [https://doi.org/10.1016/0959-1524\(96\)00033-X](https://doi.org/10.1016/0959-1524(96)00033-X).

[//doi.org/10.1016/0959-1524\(96\)00009-1](https://doi.org/10.1016/0959-1524(96)00009-1). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152496000091>>.

- [286] WOLF, A., SWIFT, J. B., SWINNEY, H. L., et al., 1985, “Determining Lyapunov exponents from a time series”, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, v. 16, n. 3, pp. 285–317.
- [287] XU, S., BALDEA, M., EDGAR, T. F., et al., 2016, “Root cause diagnosis of plant-wide oscillations based on information transfer in the frequency domain”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 55, n. 6, pp. 1623–1629.
- [288] YANG, F., XIAO, D., 2012, “Progress in root cause and fault propagation analysis of large-scale industrial processes”, *Journal of Control Science and Engineering*, v. 2012.
- [289] YANG, F., SHAH, S., XIAO, D., 2012, “Signed directed graph based modeling and its validation from process knowledge and process data”, *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, v. 22, n. 1, pp. 41–53.
- [290] YANG, W., LIU, C., JIANG, D., 2018, “An unsupervised spatiotemporal graphical modeling approach for wind turbine condition monitoring”, *Renewable energy*, v. 127, pp. 230–241.
- [291] YESILYURT, I., 2003, “Fault detection and location in gears by the smoothed instantaneous power spectrum distribution”, *NDT & E International*, v. 36, n. 7, pp. 535–542.
- [292] YIN, S., DING, S. X., HAGHANI, A., et al., 2012, “A comparison study of basic data-driven fault diagnosis and process monitoring methods on the benchmark Tennessee Eastman process”, *Journal of Process Control*, v. 22, n. 9, pp. 1567 – 1581. ISSN: 0959-1524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2012.06.009>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152412001503>>.
- [293] YOON, N., KIM, J., LIM, J.-L., et al., 2021, “Dual-stage attention-based LSTM for simulating performance of brackish water treatment plant”, *Desalination*, v. 512, pp. 115107. ISSN: 0011-9164. doi: <https://doi.org/10.1016/j.desal.2021.115107>. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0011916421001788>>.

- [294] YU, J., RASHID, M. M., 2013, “A novel dynamic bayesian network-based networked process monitoring approach for fault detection, propagation identification, and root cause diagnosis”, *AIChE Journal*, v. 59, n. 7, pp. 2348–2365.
- [295] YUAN, T., QIN, S. J., 2014, “Root cause diagnosis of plant-wide oscillations using Granger causality”, *Journal of Process Control*, v. 24, n. 2, pp. 450 – 459. ISSN: 0959-1524. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jprocont.2013.11.009>. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959152413002448>>. ADCHEM 2012 Special Issue.
- [296] YUAN, T., QIN, S. J., 2014, “Root cause diagnosis of plant-wide oscillations using Granger causality”, *Journal of Process Control*, v. 24, n. 2, pp. 450–459.
- [297] ZBILUT, J. P., WEBBER, C. L., 1992, “Embeddings and delays as derived from quantification of recurrence plots”, *Physics Letters A*, v. 171, n. 3, pp. 199 – 203. ISSN: 0375-9601. doi: [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(92\)90426-M](https://doi.org/10.1016/0375-9601(92)90426-M). Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/037596019290426M>>.
- [298] ZBILUT, J. P., WEBBER JR, C. L., 1992, “Embeddings and delays as derived from quantification of recurrence plots”, *Physics letters A*, v. 171, n. 3-4, pp. 199–203.
- [299] ZHANG, J., MARTIN, E., MORRIS, A. J., 1995, “Fault detection and classification through multivariate statistical techniques”. In: *Proceedings of 1995 American Control Conference - ACC'95*, v. 1, pp. 751–755 vol.1, June. doi: 10.1109/ACC.1995.529351.
- [300] ZHANG, W., ZHANG, Z., CHAO, H.-C., et al., 2018, “Kernel mixture model for probability density estimation in Bayesian classifiers”, *Data Mining and Knowledge Discovery*, v. 32, n. 3, pp. 675–707.
- [301] ZHOU, C., ZHANG, W., 2015, “Recurrence plot based damage detection method by integrating control chart”, *Entropy*, v. 17, n. 5, pp. 2624–2641.
- [302] ZONG, Y.-B., JIN, N.-D., WANG, Z.-Y., et al., 2010, “Nonlinear dynamic analysis of large diameter inclined oil–water two phase flow pattern”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 36, n. 3, pp. 166–183. Publisher: Elsevier.

Apêndice A

Processo Tennessee-Eastman

O modelo do Tennessee Eastman Process (modelo TE) é baseado em um processo químico real que foi descrito pela primeira vez em [73]. Contém um arranjo separador / reator / recirculação envolvendo duas reações exotérmicas gás-líquidas simultâneas. É um modelo não linear de um complexo sistema que tem sido amplamente utilizado em muitos estudos de controle de processos, métodos estatísticos de monitoramento, detecção de falhas do sensor e identificação de modelos de rede orientados por dados. Em [55] foi usado para validar algoritmos de diagnóstico de falhas.

Na Figura apresenta-se o diagrama PFD do processo Tennessee-Eastman. As listas de variáveis também são apresentada nas Tabelas A.1, A.2 ,A.3, A.4 e A.5

Variável manipulada	Descrição
XMV(1)	Vazão de alimentação D (corrente 2)
XMV(2)	Vazão de alimentação E (corrente 3)
XMV(3)	Vazão de alimentação A (corrente 1)
XMV(4)	Alimentação A-C (corrente 4)
XMV(5)	Válvula de recirculação do compressor
XMV(6)	Válvula de purga (corrente 9)
XMV(7)	Vazão líquida no separador (corrente 10)
XMV(8)	Vazão líquida no stripper (corrente 11)
XMV(9)	Válvula de vapor do stripper
XMV(10)	Vazão de água de resfriamento do reator
XMV(11)	Vazão de água de resfriamento no condensador
XMV(12)	Velocidade de agitação

Tabela A.1: Descrição de variáveis manipuladas no processo Tennessee-Eastman

Variável medida	Descrição	Unidades
XMEAS(1)	Alimentação A (corrente 1)	kscmh
XMEAS(2)	Alimentação D (corrente 2)	kg/hr
XMEAS(3)	Alimentação E (corrente 3)	kg/hr
XMEAS(4)	Alimentação A-C (corrente 4)	kscmh
XMEAS(5)	Vazão de refluxo (corrente 8)	kscmh
XMEAS(6)	Vazão de alimentação no reator (corrente 6)	kscmh
XMEAS(7)	Pressão no reator	kPa gauge
XMEAS(8)	Nível no reator	%
XMEAS(9)	Temperatura do reator	Deg C
XMEAS(10)	Taxa de purga (corrente 9)	kscmh
XMEAS(11)	Temperatura no separador	Deg C
XMEAS(12)	Nível no separador	%
XMEAS(13)	Pressão no separador	kPa gauge
XMEAS(14)	Vazão de fundo no separador (corrente 10)	m3/hr
XMEAS(15)	Nível do Stripper	%
XMEAS(16)	Pressão do Stripper	kPa gauge
XMEAS(17)	Vazão de fundo do Stripper (corrente 11)	m3/hr
XMEAS(18)	Temperatura no Stripper	Deg C
XMEAS(19)	Vazão de vapor no Stripper	kg/hr
XMEAS(20)	Trabalho no compressor	kW
XMEAS(21)	Temperatura de água de resfriamento na saída do reator	Deg C
XMEAS(22)	Temperatura de água de resfriamento na saída do compressor	Deg C

Tabela A.2: Descrição de variáveis medidas no processo Tennessee-Eastman

Variável	Descrição
XMEAS(23)	Componente A
XMEAS(24)	Componente B
XMEAS(25)	Componente C
XMEAS(26)	Componente D
XMEAS(27)	Componente E
XMEAS(28)	Componente F

Tabela A.3: Medidas amostradas na corrente de alimentação do reator (corrente 6) no processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)

Variável	Descrição
XMEAS(29)	Componente A
XMEAS(30)	Componente B
XMEAS(31)	Componente C
XMEAS(32)	Componente D
XMEAS(33)	Componente E
XMEAS(34)	Componente F
XMEAS(35)	Componente G
XMEAS(36)	Componente H

Tabela A.4: Medidas amostradas na corrente de purga (corrente 9) no processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)

Variável	Descrição
XMEAS(37)	Componente D
XMEAS(38)	Componente E
XMEAS(39)	Componente F
XMEAS(40)	Componente G
XMEAS(41)	Componente H

Tabela A.5: Medidas amostradas na corrente 11 do processo Tennessee-Eastman. Frequência de amostragem (0.1 h)

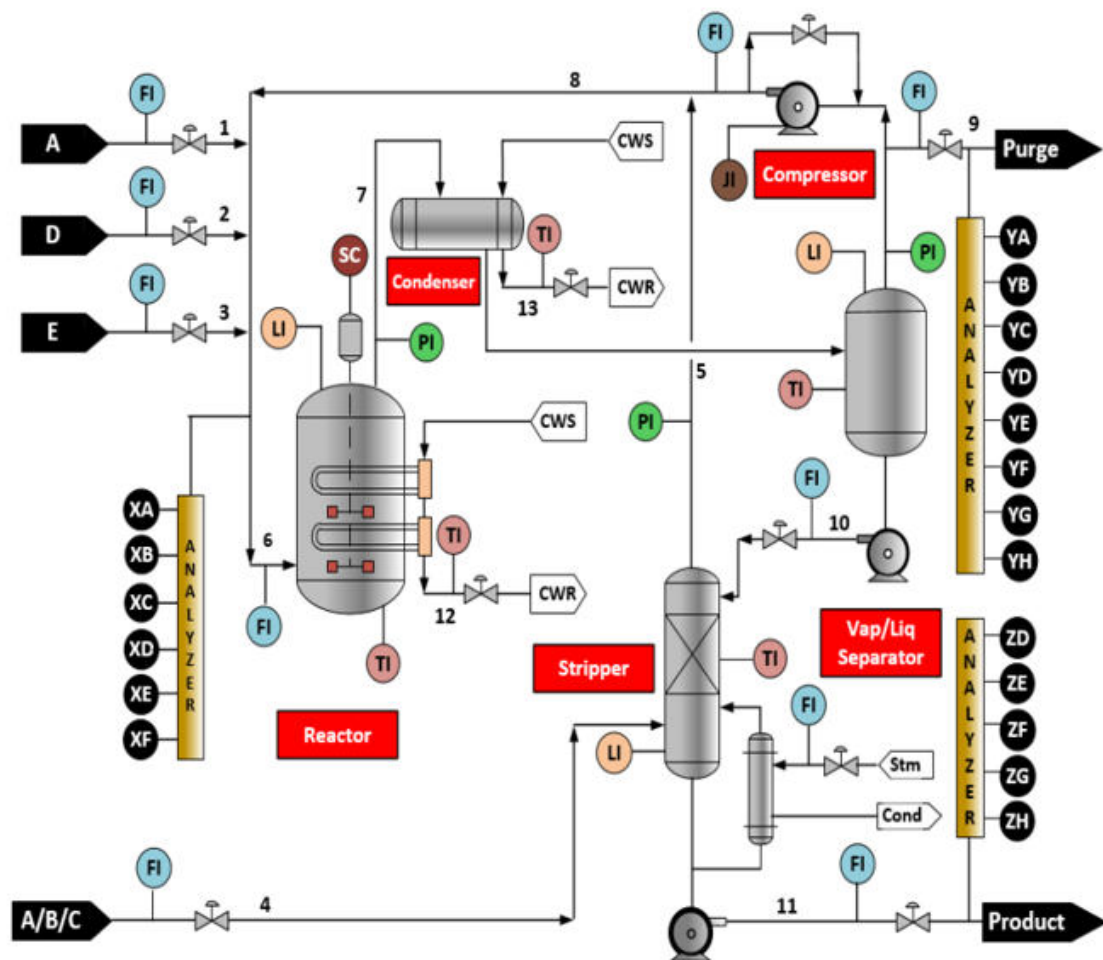


Figura A.1: Diagram PFD do processo Tennessee-Eastman [55]

Apêndice B

Lista de variáveis EFAL

A seguir são listadas as variáveis usadas na análise de causalidade da Seção 5.5.2.

Variável	Descrição
X0	Vazão Instantânea FIT-3655014A - Gás Operacional (importação)
X1	Vazão Instantânea FIT-3655-05-002A - Gás Fiscal
X2	Saída do controlador de vazão de água removida do tanque de lavagem, [%]
X3	FAL: Saída do controlador de vazão de transferência, [%]
X4	FAL: Vazão instantânea de processamento
X5	Vazão Instantânea de Transferência (A)
X6	Saída Água Resf P365501A
X7	Vazão Instantânea de Água Tratada
X8	Diferencial de Pressão PDIT-3655014A- Gás Operacional (importação)
X9	FAL: Diferencial de Pressão PDIT-3655-05-002A - Gás Fiscal'
X10	FAL: Diferencial de Pressão PDIT-3655-05-002B - Gás Fiscal
X11	Permutadores Refrigeradores - Pressão diferencial - Tratador - Tanque (A)
X12	Permutadores Refrigeradores - Pressão diferencial - UTA - UGV (A)

X13	Permutadores Refrigeradores - Pressão diferencial - UTA - UGV (B)
X14	FAL: Pressão Estática PIT-3655014A - Gás Operacional (importação)
X15	FAL: Pressão Estática PIT-3655-05-002A - Gás Fiscal
X16	FAL: Pressão Estática PIT-3655-05-002B - Gás Fiscal
X17	Pressão do óleo na sucção da bomba de transferência de óleo B-365503A
X18	Pressão do óleo na sucção da bomba de transferência de óleo B-365503B
X19	Pressão do óleo na sucção da bomba de transferência de óleo B-365503C
X20	Pressão do óleo na sucção da bomba de transferência de óleo B-365503D
X21	Pressão nos Tratadores de Óleo (A)
X22	Pressão de Descarga das Bombas de Transferência de Óleo (A)
X23	Pressão de Descarga das Bombas de Transferência de Óleo (B)
X24	Pressão de Descarga das Bombas de Transferência de Óleo (D)
X25	Pressão de Descarga das Bombas de Água do SAO (A)
X26	Pressão de Descarga das Bombas de Água do SAO (B)
X27	Pressão de Descarga das Bombas de Água do SAO (A)
X28	Pressão de Descarga das Bombas de Água do SAO (B)
X29	Pressão de descarga para o conjunto de Bombas de Injeção
X30	EMED de Óleo
X31	Descarga bomba B-365502A
X32	Descarga bomba B-365502B
X33	Descarga bomba B-365502C

X34	Ent. Água Resf. P-365501A
X35	Ent. Água Resf. P365501B
X36	Saída Água Resf. P-365501B
X37	Entrada água resfr. P-365501B
X38	Saída Óleo Resf P365501B
X39	FAL:Entrada óleo resfr P365501B
X40	Saída Água Resf P365501A
X41	Saída Óleo Resf P365501A
X42	Ent. Óleo Resf P-365501A
X43	Entrada Óleo Aq. P365502B
X44	Entr. Óleo Aq. P365502A
X45	EMED de Óleo.3
X46	Temperatura nos Tratadores de Óleo (A)
X47	Pressão no TO-365501
X48	Nível de interface TO-365501
X49	Temperatura de saída nos permutadores aquecedores (B)
X50	Temperatura de saída nos permutadores aquecedores (A)
X51	Temperatura de entrada nos permutadores aquecedores (B)
X52	Temperatura de entrada nos permutadores aquecedores (A)
X53	FAL: Temperatura TIT-3655-05-002B - Gás Fiscal
X54	FAL: Temperatura TIT-3655-05-002A - Gás Fiscal
X55	FAL: Temperatura TIT-3655014A - Gás Operacional (importação)
X56	FAL: Massa Específica a 20°C - EMED Fiscal de Óleo - Tramo A e B
X57	FAL: BSW da emed fiscal de óleo - Tramo B
X58	BSW da EMED de ÓLEO - TRATADOR 1 SAÍDA
X59	BSW da EMED de ÓLEO - TRATADOR 2 SAÍDA
X60	EMED de Óleo.4

X61	EMED de Gás.2
X62	Corrente elétrica na bomba de alimentação do TO (B-365502A)
X63	Corrente elétrica na bomba de alimentação do TO (B-365502B)
X64	Corrente elétrica na bomba de alimentação do TO (B-365502C)
X65	Corrente elétrica na bomba de transferência de óleo (B-365503A)
X66	Corrente elétrica na bomba de transferência de óleo (B-365503B)

Tabela B.1: Variáveis do EFAL na análise de causalidade.

Apêndice C

Bifurcações e órbitas periódicas

C.0.1 Bifurcações

Uma bifurcação é definida como uma mudança qualitativa no comportamento dinâmico de um sistema por uma perturbação ou mudança em um parâmetro do sistema. Considere-se um sistema dinâmico autônomo da forma:

$$\dot{x} = f(x, \lambda), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad \lambda \in \mathbb{R}^p \quad (\text{C.1})$$

em que f é uma lei dinâmica suave. Uma bifurcação aparece em um determinado parâmetro $\lambda = \lambda_0$ quando o estado para um parâmetro λ_1 (próximo a λ_0) é topologicamente não-equivalente em relação ao estado com valor de parâmetros λ_0 . A Teoria de Bifurcações pode ser dividida em dois grupos distintos de resultados. A Teoria Local de Bifurcações, também chamada de Bifurcações Locais, trata das mudanças nas trajetórias do espaço que ocorrem nas vizinhanças das soluções do sistema dinâmico. A Teoria Global de Bifurcações ou Bifurcações Globais trata de mudanças ocorridas com as trajetórias numa faixa extensa do espaço.

A Teoria de Bifurcações classifica as singularidades ou bifurcações de acordo com sua codimensão (número de condições de igualdade necessárias para caracterizar a bifurcação):

C.0.1.1 Bifurcações de codimensão 1

As bifurcações de codimensão 1 podem ser classificadas assim [61]:

1. Equilíbrio:

- Bifurcação tipo Ponto Limite: Em um sistema da forma da Eq. C.1; este

tipo de bifurcação ocorre quando o equilíbrio tem um valor característico ($\lambda = 0$) zero na sua matriz de estabilidade A .

- Bifurcação de Hopf: É o nascimento de um ciclo limite a partir de um equilíbrio do sistema Eq. (C.1). Essa bifurcação aparece quando o equilíbrio muda sua estabilidade via par de valores característicos complexos conjugados. A bifurcação de Hopf pode ser supercrítica ou subcrítica.

2. Órbitas periódicas:

- Bifurcação tipo Ponto Limite Periódico: indica o aparecimento da multiplicidade de soluções periódicas e de ciclos limites, em que as amplitudes dos ciclos aumentam ou diminuem bruscamente, à medida que o parâmetro é variado. Ocorre quando um multiplicador de Floquet cruza o círculo unitário no eixo real em $+1$.
- Bifurcação de Duplicação de Período: Numa duplicação de período, o número de máximos e mínimos da órbita periódica dobra. É importante notar que uma rota do caos característica surge do aparecimento de uma cascata de bifurcações de duplicação de período. Ocorre quando um multiplicador de Floquet cruza o círculo unitário no eixo real em -1 .
- Bifurcação tipo toro ou Neimark-Sacker: É o nascimento de uma curva fechada invariante desde um ponto fixo em um sistema discreto. Acontece via mudança de estabilidade de valores característicos complexos conjugados com módulo unitário. Quando acontece em um mapa de Poincaré de um ciclo limite, a bifurcação gera um toro bidimensional invariante.

3. Bifurcações Globais:

- Bifurcação Homoclínica de equilíbrio
- Tangências homoclínicas de variedades estáveis e instáveis de órbitas periódicas
- Bifurcação Heteroclínica de equilíbrio.

C.0.1.2 Bifurcações de codimensão 2

Existem cinco tipos diferentes de bifurcações de codimensão 2 [167]:

1. Bifurcação de Bautin ou Bifurcação generalizada de Hopf: É uma bifurcação de um equilíbrio que tem um par de valores característicos imaginários puros e o primeiro coeficiente de Lyapunov da Bifurcação de Hopf é zero. Esse tipo de

bifurcação separa os ramos subcríticos e supercríticos da bifurcação de Hopf. Para valores de parâmetros próximos, o sistema tem dois ciclos limite que colidem e desaparecem através de uma bifurcação de órbitas periódicas.

No caso multidimensional com $n > 2$, a matriz de estabilidade A_0 tem:

- (a) um par de valores característicos imaginários puros, $\lambda_{1,2} = \pm iw_0$;
- (b) n_s valores característicos com parte real negativa;
- (c) n_u valores característicos com parte real positiva.

Em que $n_s + n_u + 2 = n$. De acordo com o Teorema da Variedade Central, existe uma família de variedades invariantes W^s e W^u próxima ao origem.

2. Bifurcação Bogdanov-Takens: É uma bifurcação de um equilíbrio que tem um valor característico zero de multiplicidade 2. Para valores de parâmetro próximos, o sistema tem dois equilíbrios (uma sela e um equilíbrio não sela) que colidem e desaparecem. O equilíbrio não sela sofre uma bifurcação de Hopf gerando um ciclo limite. Este ciclo degenera em uma órbita homoclínica à sela e desaparece por meio de uma bifurcação homoclínica.

No caso multidimensional com $n > 2$, a matriz de estabilidade A_0 tem:

- (a) um par de valores característicos zero, $\lambda_{1,2} = 0$;
- (b) n_s valores característicos com parte real negativa;
- (c) n_u valores característicos com parte real positiva.

3. Bifurcação Cúspide: É uma bifurcação de um equilíbrio que tem um valor característico zero e um coeficiente quadrático de bifurcação sela-nó zero. Na bifurcação cúspide, dois ramos da bifurcação sela-nó encontram-se tangencialmente formando uma parábola semicúbica. A existência de uma bifurcação cúspide implica a presença do fenômeno de histerese. No caso multidimensional com $n > 2$, a matriz de estabilidade A_0 tem:

- (a) um valor característico zero, $\lambda_1 = 0$;
- (b) n_s valores característicos com parte real negativa;
- (c) n_u valores característicos com parte real positiva.

4. Bifurcação zero de Hopf ou Bifurcação de Gavrilov-Guckenheimer: É uma bifurcação de um equilíbrio que tem um valor característico zero e um par de valores característicos imaginários puros. O ponto de bifurcação encontra-se na intersecção tangencial das curvas de bifurcações de nó-sela e bifurcações de Hopf. Dependendo do sistema, um ramo de bifurcações de toros pode emanar

do ponto de bifurcação zero de Hopf. Essa bifurcação também pode implicar o nascimento local do comportamento caótico. No caso multidimensional com $n > 3$, a matriz de estabilidade A_0 tem:

- (a) um valor característico zero, $\lambda_1 = 0$ e um par de valores característicos imaginários puros $\lambda_{2,3} = \pm iw_0$;
 - (b) n_s valores característicos com parte real negativa;
 - (c) n_u valores característicos com parte real positiva.
5. Bifurcação dupla de Hopf: É uma bifurcação de um equilíbrio tem dois pares de valores característicos imaginários puros. O ponto de bifurcação encontra-se na intersecção tangencial das curvas de bifurcações de Hopf. Genericamente dois ramos de bifurcações tipo toro aparecem a partir da bifurcação dupla de Hopf. Essa bifurcação também pode implicar o nascimento local do comportamento caótico e está associada ao movimento quase-periódico.

No caso multidimensional com $n > 4$, a matriz de estabilidade A_0 tem:

- (a) dois pares de valores característicos imaginários puros $\lambda_{1,2} = \pm iw_1(0)$ e $\lambda_{3,4} = \pm iw_2(0)$;
- (b) n_s valores característicos com parte real negativa;
- (c) n_u valores característicos com parte real positiva.

C.0.2 Procura de órbitas periódicas curtas

A procura de soluções periódicas é tão importante como a procura de soluções oscilatórias aperiódicas. Particularmente, existe uma grande fundamentação para o cálculo de órbitas periódicas (Teoria da Órbita Periódica e Teoria de Floquet) [45].

Basicamente o procedimento consiste na busca de soluções (x, T) , $x \in \mathbb{R}^d$, $T \in \mathbb{R}$ que satisfazem a condição de órbita periódica:

$$f^{t+T}(x) = f^t(x), \quad T > 0 \quad (\text{C.2})$$

Supondo que a condição de órbita periódica é satisfeita também para $x + \Delta x$ e $T + \Delta t$, com x e T como chutes iniciais bem próximos da solução, ou seja, Δx e Δt pequenos. Aplicando a solução dada pelo método de Newton:

$$0 = x + \Delta x - f^{T+\Delta t}(x + \Delta x) \quad (\text{C.3})$$

Expandindo em termos de Δx e Δt :

$$x + \Delta x \approx f^T(x) + J^T(x)\Delta x + v(x(T))\Delta t \quad (\text{C.4})$$

O segundo termo da Equação (C.4) vem das variações com respeito a Δx e corresponde à definição dos elementos ij da matriz Jacobiana.

$$\sum_j \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \Delta x_j \implies J^T(x)\Delta x, \quad \frac{\partial f_i}{\partial x_j} = J_{ij} \quad (\text{C.5})$$

O terceiro termo vem das variações respeito ao Δt e corresponde à definição do fluxo ou velocidade:

$$\frac{\partial f^T(x)}{\partial T} = v(x(T)) \quad (\text{C.6})$$

Escrevendo na forma matricial e considerando as variáveis de correção Δx e Δt :

$$(J^T(x) - \mathbb{I})\Delta x + v(x(T))\Delta t = x - f^T(x) \quad (\text{C.7})$$

Observa-se que existem dois problemas na resolução da Equação (C.7). O primeiro consiste em que se tem que resolver não só para Δx , mas também para Δt . O segundo problema está relacionado com o expoente de Floquet marginal do ciclo o qual resulta no condicionamento do termo $(J^T(x) - \mathbb{I})$ como não invertível, já que existe um valor característico zero. Daí que o termo $(J^T(x) - \mathbb{I})$ é mais difícil de inverter, a medida que a solução é mais próxima.

A formulação do problema é dada com a formulação de uma restrição da variação de Δx às direções transversais ao fluxo. Essa restrição pode ser naturalmente definida pela secção de Poincaré:

$$\hat{n} \cdot \Delta x = 0 \quad (\text{C.8})$$

A formulação final do problema pode ser dado matricialmente:

$$\begin{pmatrix} J^T(x) - \mathbb{I} & v(x(T)) \\ \hat{n} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x - f^T(x) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{C.9})$$

Em que $J^T(x) - \mathbb{I}$ é uma matriz $d \times d$, $v(x(T))$ uma matriz $d \times 1$, $\hat{n}$ um vetor $1 \times d$, Δx e $x - f^t(x)$ são d -dimensionais e Δt é unidimensional.

Renomeando as matrizes:
$$\begin{bmatrix} J^T(x) - \mathbb{I} & v(x(T)) \\ \hat{n} & 0 \end{bmatrix} = N$$

$$\begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta t \end{pmatrix} = D$$

$$\begin{bmatrix} x - f^T(x) \\ 0 \end{bmatrix} = E$$

O método consiste em resolver para D : $D = N^{-1}E$ atualizando os chutes iniciais para cada iteração: $x \rightarrow x + \Delta x$ e $T \rightarrow T + \Delta t$ até que o vetor de erro $x - f^T(x)$ seja menor que a tolerância definida ($x - f^T(x) \approx 0$).

Finalmente o chute inicial para o algoritmo de cálculo é dado pelo ponto periódico encontrado no mapa de retorno da seção de Poincaré, tal como foi explicado na Seção 3.1.4.5.

Apêndice D

Caracterização dinâmica de benchmarks

D.1 Cálculo de métricas do conjunto invariante

A seguir são apresentados os casos de estudos sobre os quais foram desenvolvidas e avaliadas as diferentes técnicas. Os sistemas dinâmicos Benchmarks foram caracterizados por análise de estabilidade local, mapas de Poincaré, Expoentes de Lyapunov, Matriz J e análise de recorrências.

D.1.1 Benchmark: Atrator de Rossler

O atrator de Rossler é um sistema dinâmico clássico no estudo de comportamentos complexos e caóticos. Este sistema satisfaz os mínimos requisitos para o caos contínuo; seu espaço de fases $\mathcal{M}$ é 3-dimensional, possui não linearidade mínima porque há só um termo quadrático e gera um atrator caótico num solo lóbulo, em contraste ao atrator de Lorenz Atrator que possui dois lóbulos. O conjunto de equações 3.2 correspondem ao fluxo do atrator de Rossler.

Os termos lineares das duas primeiras equações criam oscilações nas variáveis x e y . Essas oscilações podem ser amplificadas se $a > 0$, o que resulta em um movimento espiral. O movimento em x e y é então acoplado à variável z governada pela terceira equação, que contém o termo não-linear e que induz a reinjeção de volta ao início do movimento em espiral. O sistema possui dois estados estacionários: um na origem $x = y = z = 0$, em torno do qual o movimento espirala para fora, e outro mais distante da origem devido à não-linearidade quadrática. Este sistema apresenta atratores estacionários, periódicos, quase-periódicos e caóticos, dependendo do valor

dos parâmetros (a, b, c) . Estes atratores são interconectados por bifurcações, em particular, uma bifurcação de Hopf dos atratores estacionários-periódicos e uma cascata de duplicação de período de atratores periódicos para atratores caóticos.

A transição para um caos é do tipo parafuso, no qual as oscilações são irregulares, não apenas em suas amplitudes, mas também nos tempos de reinjeção. O caos do tipo parafuso está intimamente relacionado com a presença de uma órbita homoclínica de Shilnikov ligada à origem $x = y = z = 0$, que é um equilíbrio foco sela com uma variedade estável unidimensional para a reinjeção e uma variedade instável bidimensional onde o movimento está em espiral. O critério de Shilnikov para o caos é que a reinjeção é mais rápida do que o movimento em espiral e está satisfeita no atrator de Rossler [250].

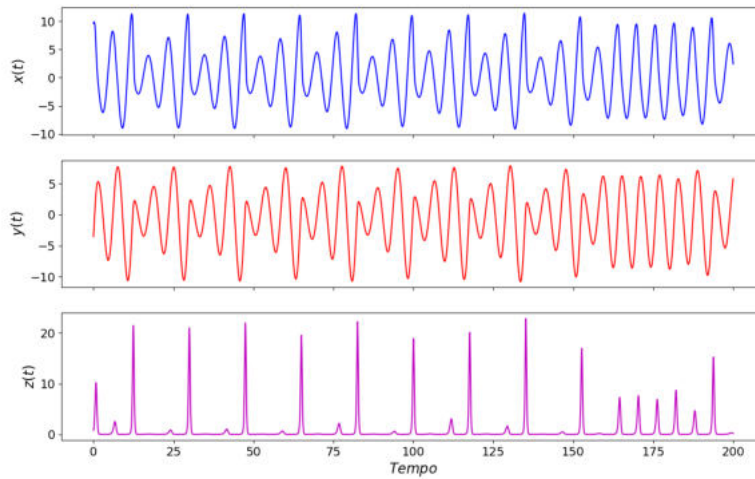


Figura D.1: Séries temporais do atrator de Rossler obtidas pela integração do conjunto de Equações 3.2 com condições iniciais $x_0 = 9.64832079329$ $y_0 = -3.51977184351$ e $z_0 = 0.811107128559$, parâmetros $a = b = 0.2$, $c = 5.7$ e um vetor temporal $t = [0, 200, 10000]$

Na Figura D.1 apresentam-se as séries temporais do sistema para uma condição caótica, observando o surgimento de oscilações de diferentes períodos ao longo do tempo. A trajetória caótica no espaço de fases $\mathcal{M}$ é apresentada na Figura D.2, onde uma órbita dentro do atrator segue uma espiral externa próxima ao plano x, y em torno (assintoticamente) de um ponto fixo instável. Uma vez que a trajetória gira o suficiente, um segundo ponto fixo influencia, causando um aumento e uma torção na dimensão z .

Sistema dinâmico	λ_1	λ_2	λ_3
Rossler	0.097+0.095j	0.097-0.095j	-5.687
Lorenz	-22.8277	11.8277	-2.6667

Tabela D.1: Autovalores obtidos via análise da matriz A para os fluxos Benchmarks

D.1.1.1 Estabilidade local

Conforme as Seções 3.1.2, 3.1.3 e 4.1.1.1 foi determinada a estabilidade local do ponto de equilíbrio x_q mais próximo à base de atração analisando os valores e vetores característicos da matriz de estabilidade A .

A Figura D.2 mostra a trajetória do atrator de Rossler e o ponto de equilíbrio trivial $x_q = (0, 0, 0)$. Observa-se que o fluxo é assintótico ao ponto de equilíbrio. Além disso, foram plotadas as componentes reais e imaginárias do vetor característico mais representativo. Para este caso em particular pode-se observar que estas componentes são ortogonais entre si.

Na Tabela D.1 observa-se que existem um valor característico negativo e um par complexo conjugado de valores característicos com parte real positiva, indicando que nas correspondentes direções existe um comportamento oscilatório e instável. A magnitude do valor característico negativo indica o nível de atração ao longo da direção do vetor característico correspondente. A magnitude dos valores característicos positivos representa o nível de repulsão ao longo das direções características respectivas. O valor característico do equilíbrio é real e possui sinal oposto ao sinal da parte real do par de valores característicos complexos conjugados; portanto, pode-se classificar o equilíbrio como um foco sela.

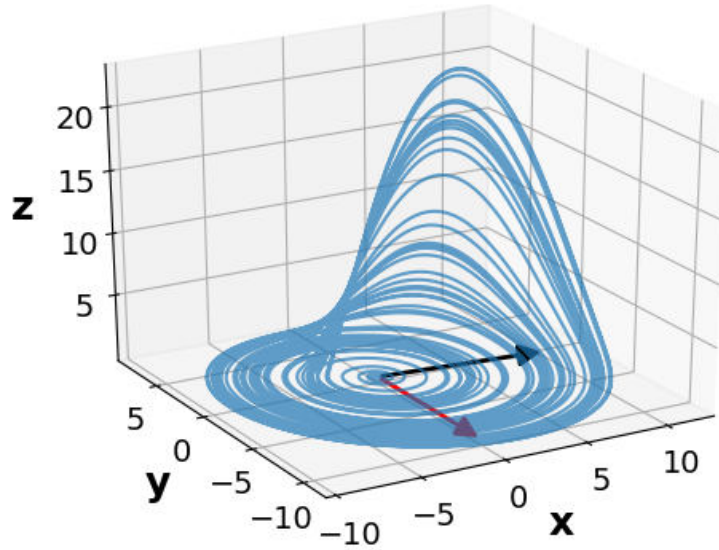


Figura D.2: Análise de estabilidade avaliada no ponto de equilíbrio da base de atração do fluxo do atrator de Rossler. A seta preta corresponde à componente real do primeiro valor característico ($Re(\lambda_x)$) e a seta vermelha ortogonal corresponde à componente imaginaria do mesmo valor característico ($Im(\lambda_x)$). O atrator foi obtido usando as mesmas condições da figura D.1

D.1.1.2 Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré

Como foi apresentado na Seção 4.1.1.2 e fundamentado na Seção 3.1.4 as secções de Poincaré surgem como uma ferramenta para estudar uma dinâmica naturalmente contínua como uma dinâmica discreta. O procedimento descrito, usado para determinar as secções de Poincaré foi explicado anteriormente na Seção 4.1.1.2. Particularmente neste trabalho, as secções de Poincaré estudadas foram todas definidas como secções lineares, portanto chamadas de planos de Poincaré.

A análise a seguir, foi desenvolvida sob a mesma metodologia por CVITANO-VIĆ *et al.*, considerando a mesmo sistema dinâmico.

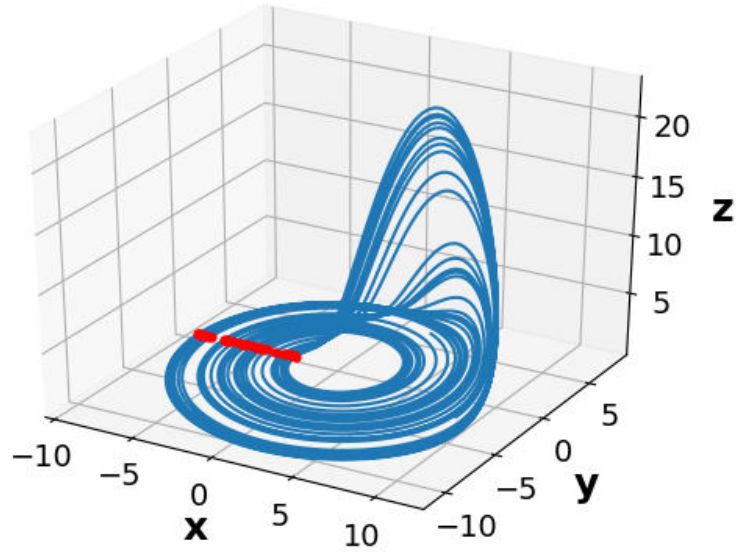


Figura D.3: Atrator de Rossler (azul) com os pontos de Poincaré(vermelho) que intersectam o plano sobre o eixo z

A Figura D.3 apresenta o atrator caótico de Rossler que foi obtido por integração das Equações 3.2. A secção de Poincaré foi definida conforme foi explicado na Seção 4.1.1.2, consistindo em um plano em z com orientação θ em relação a $x - y$. O plano foi rodado em torno ao eixo z , usando a matriz de rotação, daí o ângulo entre o plano de Poincaré e o eixo x correspondeu a $\theta = -\pi$. Os pontos de Poincaré $\hat{x}$ (vermelhos) foram obtidos como os pontos do espaço de fases $x \in \mathcal{M}$ que satisfaziam $U(\hat{x}) = 0$. No caso em particular, é possível observar facilmente que o fluxo é normal ao plano de Poincaré, já que o atrator está construído sobre bases canônicas. Além disso, observa-se que os pontos de Poincaré atingem as condições de transversalidade e orientação única (ver Seção 3.1.4.1).

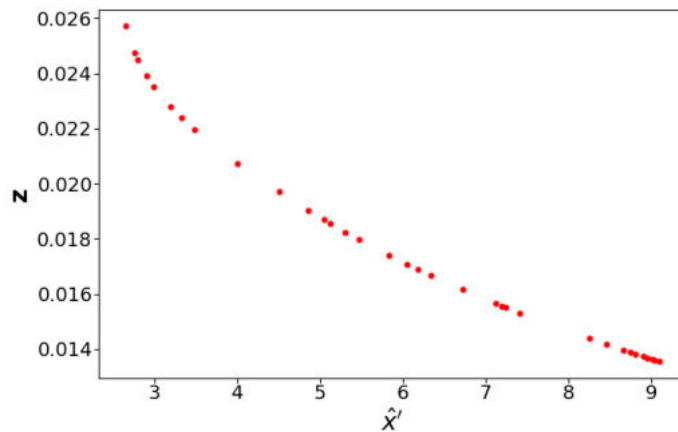


Figura D.4: Mapeamento de Poincaré do atrator de Rossler, que indica a posição coordenada dos pontos de Poincaré

O mapeamento de Poincaré (Figura D.4) está definido pela coordenada z e a coordenada $\hat{x}$, já que o plano fixa a terceira coordenada. De forma análoga à análise realizada por [61], ilustrada na Figura 3.5, observa-se que em essa parte o fluxo tem uma tendência expansiva.

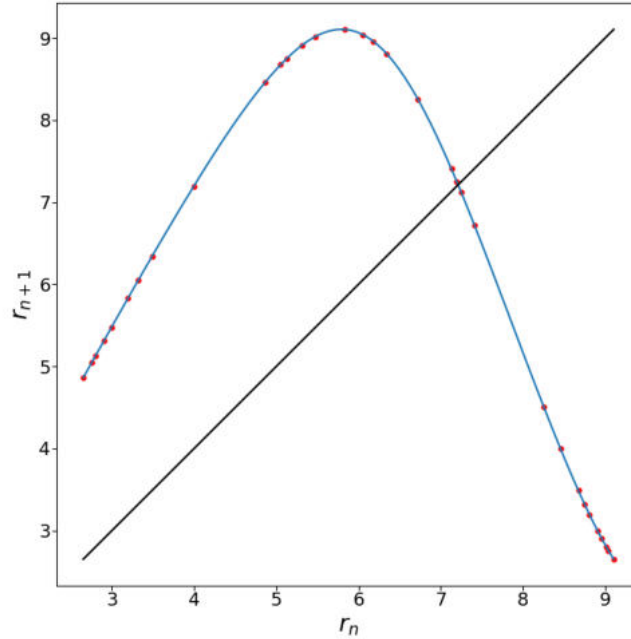


Figura D.5: Mapa de retorno do atrator de Rossler, a linha diagonal auxilia a visualização do ponto periódico do primeiro iterado

Os pontos do mapa de retorno r_n são obtidos pela projeção dos pontos de Poincaré $\hat{x}$ dentro da base do plano de Poincaré. Para este caso em particular, a projeção é igual à distancia radial das interseções no plano de Poincaré (pontos de Poincaré) à origem. O vetor r_n contém todas as distâncias radiais de todos os pontos de Poincaré, excepto a distância do último ponto. O vetor r_{n+1} contém todas as distâncias radiais dos pontos de Poincaré, excepto a distância do primeiro ponto.

A Figura D.5 mostra um mapa de retorno, cuja forma é característica nos atratores caóticos. Usando os pontos foi obtida uma regressão polinomial, que descreve o comportamento como uma função de segunda ordem. Além disso, é evidente que a função de retorno encontrada é uma função 1-1 pelo que é possível construir um mapa de retorno que represente a dinâmica 1-dimensional do fluxo.

O comportamento indica inicialmente uma tendência crescente com inclinações positiva, o que indica que os pontos tendem a se afastar entre si, já que a distância radial à origem é cada vez maior, ou seja os pontos tendem a se afastar do equilíbrio

(lembrando que o ponto de equilíbrio x_q é para este caso igual ao origem $(0, 0, 0)$). Daí, que o comportamento inicial do atrator segue uma dinâmica em que o fluxo se expande. Posteriormente, o ponto com coordenadas $r_n = 6.0545$ e $r_{n+1} = 9.0397$ localiza o máximo ponto da figura. Esse ponto é chamado como *ponto crítico* é representa a máxima expansão possível do fluxo. Finalmente, no último intervalo, posterior ao ponto crítico, observa-se um comportamento com inclinação negativa, que sugere que as distâncias entre os pontos são cada vez menores; ou seja, os pontos estão mais próximos entre si, existindo uma contração do fluxo que é uma condição necessária para a existência do processo de dobradura do fluxo. Daí que o ponto crítico também representa uma transição entre uma dinâmica expansiva e uma dinâmica de contração.

Nota-se que a dinâmica anterior descreve diretamente uma propriedade característica dos sistemas dinâmicos conhecida como transformação do padeiro (Figura 3.8) representando a dinâmica de expansão e dobradura do fluxo.

A equação do mapa de retorno pode ser obtida por uma regressão polinomial simples, usando um polinômio de segunda ordem.

$$r_{n+1} = -0.5155r_n^2 + 5.7009r_n - 6.9312 \quad (\text{D.1})$$

A Equação (D.1) possui a forma de um sistema discreto $x_{n+1} = f(x_n)$, que é característica de outros sistemas dinâmicos discretos tais como a *Equação logística* e o *mapa de Henon* [258].

Tomando em consideração a Equação (3.37), a intersecção da diagonal (traçada na Figura D.5) com a equação do mapa (Eq.D.1), representa um ponto periódico em que $r_{n+1} = r_n$, já que seriam dois pontos que em diferentes instâncias do tempo discreto estão à mesma distância radial do equilíbrio. Daí que o ponto com $r_{n+1} = 7.211$ e $r_n = 7.211$ representa um ponto periódico que pertence a uma órbita periódica do fluxo.

D.1.1.3 Sensibilidade às condições iniciais: Expoentes de Lyapunov

A sensibilidade a pequenas mudanças nas condições iniciais é uma propriedade inerente dos sistemas dinâmicos caóticos. Daí que a avaliação dos expoentes de Lyapunov é uma análise necessária para caracterizar e determinar a existência do caos nos atratores estudados.

Nesta seção foram avaliados os espectros de Lyapunov, os quais contêm os d expoentes de Lyapunov dos sistemas estudados. A metodologia empregada para

Sistema	Parâmetros	Condições iniciais	Espectro de Lyapunov em [286]	Espectro de Lyapunov obtido
Rossler	$a = 0.15$	$x_0 = 10.0$	$\lambda_1 = 0.13$	$\lambda_1 = 0.1287$
	$b = 0.20$	$y_0 = 1.0$	$\lambda_2 = 0.00$	$\lambda_2 = 3.2266 \times 10^{-5}$
	$c = 10.0$	$z_0 = 0.0$	$\lambda_3 = -14.1$	$\lambda_3 = -14.1399$
Lorenz	$\sigma = 10.0$	$x_0 = 10.0$	$\lambda_1 = 2.16$	$\lambda_1 = 2.1638$
	$\rho = 45.92$	$y_0 = 1.0$	$\lambda_2 = 0.00$	$\lambda_2 = 2.1663 \times 10^{-4}$
	$\beta = 4.0$	$z_0 = 0.0$	$\lambda_3 = -32.4$	$\lambda_3 = -32.4607$

Tabela D.2: Espectros de Lyapunov obtidos vs espectros de Lyapunov em [286]

calcular os espectros de Lyapunov foi explicada na Seções 4.1.1.4 e 3.1.6.1.

Os resultados da validação do algoritmo de cálculo do espectro de Lyapunov são apresentados na tabela:

Na Tabela D.2 observa-se que os dois sistemas possuem um expoente de Lyapunov positivo ($\lambda > 0$), pelo que é possível afirmar que esses sistemas são sensíveis às condições iniciais ou seja são caóticos conforme STROGATZ. Além disso, aparece um expoente de Lyapunov muito perto de zero ($\lambda \approx 0$) para ambos os sistemas, indicando que esses atratores sejam estranhos. A natureza estranha desses atratores pode ser confirmada via análise e cálculo da dimensão de correlação ou dimensão fractal do atrator (Seção 3.2.1.8).

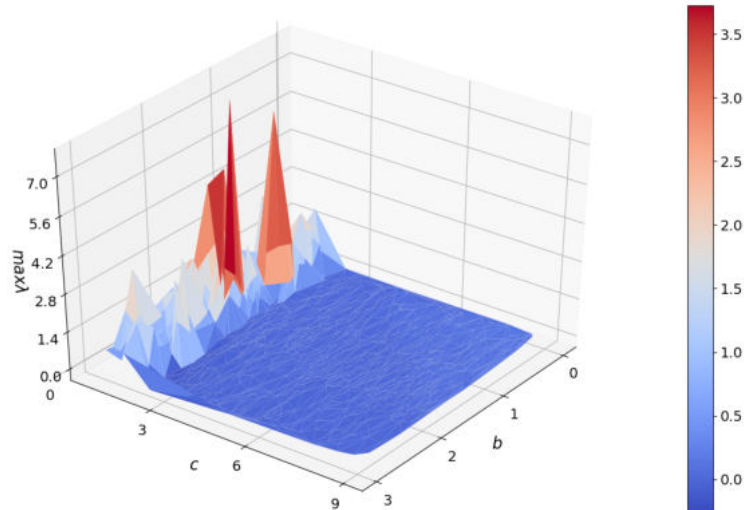


Figura D.6: Máximo expoente de Lyapunov numa malha paramétrica B-C multidimensional

Na figura D.6 apresenta-se o máximo expoente de Lyapunov do fluxo de Rossler numa malha bidimensional de parâmetros $b - c$. Destacando no mapa de cores que os comportamentos caóticos ($\lambda > 0$) encontram-se dentro de uma faixa discreta do

espaço paramétrico (aprox. $C = [0; 3]$ e $B = [0; 3]$). No resto do espaço paramétrico o sistema apresenta comportamentos periódicos ($\lambda = 0$) ou estáveis ($\lambda < 0$).

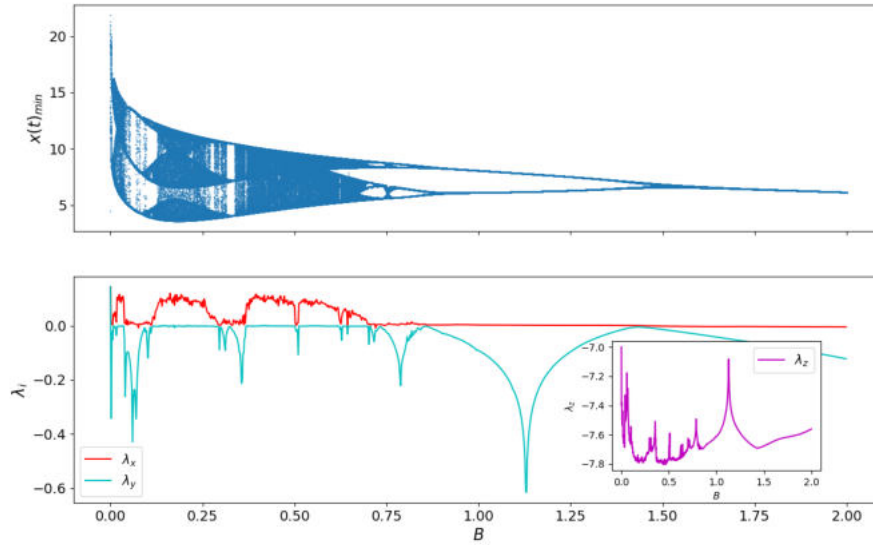


Figura D.7: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Rossler com ($a = 0.1$ e $b = 0.1$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando b . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação

As figura D.7 e D.8 mostram os diagramas de bifurcação e o comportamento dos expoentes de Lyapunov do fluxo de Rossler. Observa-se que o maior expoente de Lyapunov sempre foi positivo nas correspondentes janelas caóticas no diagrama de bifurcação, e foi aproximadamente zero nas janelas de estabilidade e intervalos de periodicidade. Dado que o sistema é tridimensional é descartada a priori a possibilidade de existir um segundo expoente positivo de Lyapunov (i.e. hipercaos existem em espaço 4-dimensional ou superior)

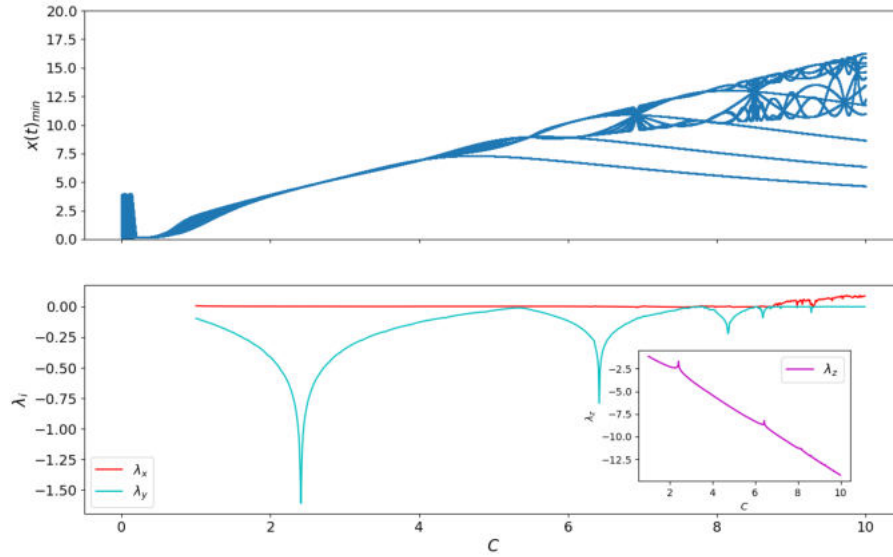


Figura D.8: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Rossler com ($a = 0.2$ e $c = 5.7$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando c . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação

D.1.1.4 Análise da estabilidade local de trajetórias: Matriz J

A análise de estabilidade de uma trajetória no sistema dinâmico foi realizado pela avaliação dos valores característicos ou multiplicadores da matriz de Jacobiana J para uma trajetória que passa pelo ponto de equilíbrio x_q mais próximo à região de atração.

Os cálculos da matriz Jacobiana foram realizados conforme explicado na Seções 3.1.2.2 e 4.1.1.3.

Considere-se a órbita periódica simples (de único período) do fluxo de Rossler para um ponto periódico $x_p = (9.2690828474963798, 0.0, 2.5815927750254137)$ e um período $T = 5.8810885346818402$. (No apêndice C é apresentado o procedimento usado para determinar essa órbita periódica)

Tabela D.3: Multiplicadores de estabilidade da matriz J dos fluxos de estudo

Sistema dinâmico	$\Lambda_1(bits)$	$\Lambda_2(bits)$	$\Lambda_3(bits)$
Rossler	0.9999	$8.9321e - 13$	-2.4039
Lorenz	$2.3874e + 92$	$1.2132e + 75$	$2.8574e + 78$

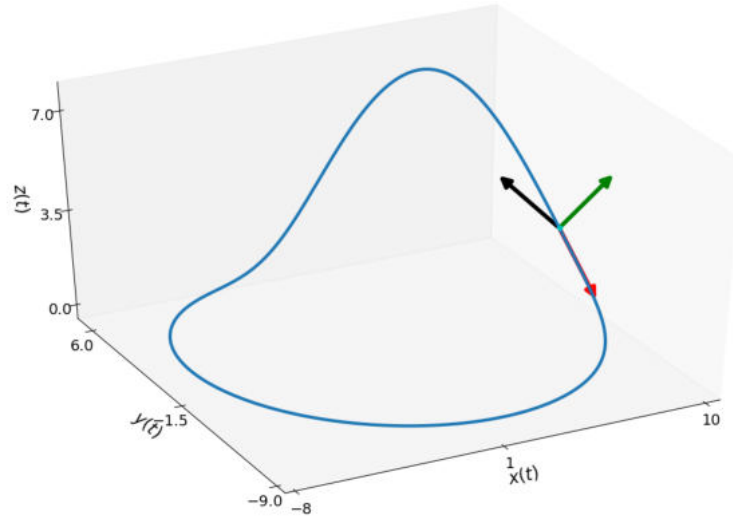


Figura D.9: Vetores característicos da matriz Jacobiana numa órbita periódica do sistema Rossler, o vetor característico sobreposto à trajetória corresponde ao multiplicado de Floquet marginal ($\Lambda = 0$).

As equações do fluxo do atrator Rossler (Equações 3.2) formam integradas, tomando o ponto periódico x_p como condição inicial e o período T como tempo de integração. As condições paramétricas do fluxo correspondem às mesmas condições paramétricas do atrator caótico ($a = 0.2$; $b = 0.2$; $c = 5.7$).

Na Figura D.9 apresenta-se o ciclo ou órbita fechada de período simples. Observa-se que o período T corresponde exatamente ao tempo para o qual a trajetória que sai do ponto periódico x_p retorna ao mesmo ponto. As setas representam os três vetores característicos da matriz Jacobiana. Observa-se que existe um vetor característico marginal, que tem a mesma direção do fluxo (seta vermelha), lembrando que a existência de um vetor característico marginal é uma propriedade natural dos ciclos limites já que constituem uma medida invariante.

Na Tabela D.3 apresentam-se os correspondentes multiplicadores de estabilidade (valores característicos da matriz J) dos diferentes sistemas estudados. Para o sistema de Rossler, cuja trajetória correspondia a um ciclo ou órbita fechada, observa-se que o segundo multiplicador de Floquet (quando a trajetória corresponde a um ciclo o multiplicador de estabilidade passa a chamar-se multiplicador de Floquet) corresponde ao multiplicador marginal $\lambda_2 = 0$. Além disso, o primeiro

multiplicador $\lambda_1 > 0$, pelo que se pode dizer que o fluxo se expande na direção correspondente e o terceiro multiplicador $\lambda_3 < 0$ o qual indica uma contração do fluxo na direção respectiva. No caso do sistema de Lorenz, não foi possível localizar uma órbita periódica simples, mas os multiplicadores de matriz J indicam uma forte divergência no futuro em todas as dimensões do espaço de fases $\mathcal{M}$.

Considerando o critério de estabilidade de ciclos da Seção 3.1.3.2, pode-se classificar o ciclo de Rossler como Hiperbólico, se ou instável a perturbações fora da variedade estável, uma vez que $|\Lambda_1| > 1$ e $|\Lambda_3| < 1$. Ou seja, existem direções que saem do círculo unitário $|\Lambda_j| > 1$ (instáveis) e outras direções que não saem do círculo unitário $|\Lambda_j| < 1$ (estáveis).

D.1.1.5 Análise da recorrências

Os mapas de recorrência são uma ferramenta útil para a determinação de padrões, estacionariedade, intermitência e transitoriedade dos atratores. Um mapa de recorrência pode revelar a estrutura fractal dos atratores, mostrando o padrão geométrico que consegue construir toda a complexidade do sistema. Basicamente o método contabiliza e marca as trajetórias que passam por uma vizinhança (de tamanho determinado) de um ponto. Além disso, a partir dos mapas é possível obter todos os invariantes do sistema dinâmico.

O mapa de recorrência foi determinado para a mesma trajetória caótica das análises previas ($a = 0.2, b = 0.2, c = 5.7$).

Na figura D.10a não é possível observar um mapa altamente coberto por recorrências, daí que é evidente concluir que o sistema não é estacionário, a presença de bandas brancas no mapa confirma esse fato. Por outra parte, há uma baixa longitude nas linhas verticais mostrando que os estados na trajetória mudam rapidamente (i.e. não existem estados laminares). As linhas diagonais paralelas mostram que a evolução dos estados é semelhante em tempos diferentes; daí que o sistema é determinista. Além disso, as linhas diagonais ocorrerem ao lado de pontos isolados, indicando caos no sistema.

A alta presença de recorrências indica que o sistema tem uma região de alta densidade de órbitas concentradas, que no caso correspondem à base de atração do sistema. Os resultados são compatíveis com as observações realizadas nos mapas de retorno (Seção 5.2.1.2), uma vez que estes mostravam que os pontos periódicos tendiam a estar mais próximos entre si quando a dinâmica de dobra do fluxo acontecia.

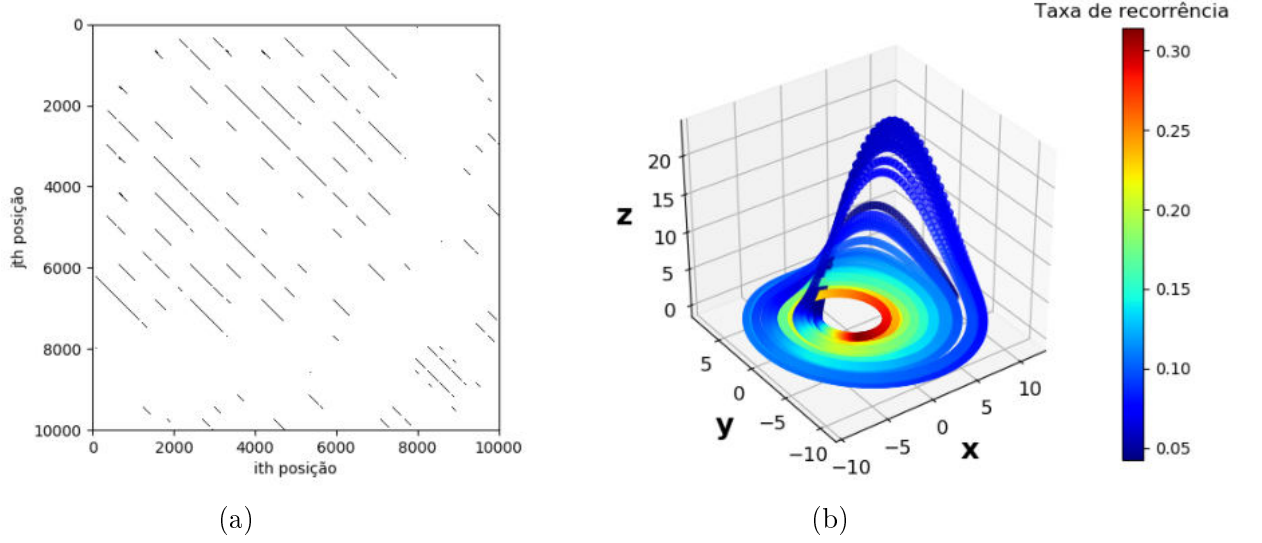


Figura D.10: Recorrências no atrator de Rossler: (D.10a) mostra o mapa de recorrência correspondente à trajetória caótica do fluxo de Rossler, onde os pontos pretos representam as recorrências. (D.10b) corresponde à quantificação de recorrências (Usando a taxa de recorrência RR) locais para cada região do espaço de fases. O radio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 1$

Na figura D.10b apresenta-se o mapeamento de recorrências na própria trajetória, os pontos vermelhos ressaltam os estados mais recorrentes do atrator, sendo estes os mais próximos à base de atração da trajetórias. Os estados menos recorrentes (em azul) correspondem aqueles localizados nas órbitas mais afastadas da região de atração. É importante notar que as taxas de recorrências aqui calculadas são locais e foram obtidas via análise de recorrência de janela móvel com tamanho 100. A baixa densidade de recorrências nas órbitas afastadas é um indicador de que a velocidade da trajetória na reinjeção é mais rápida do que o movimento espiral na base de atração, satisfazendo o critério de Shilnikov para a ruta do caos por órbitas homoclínicas.

Outras métricas de quantificação de recorrência foram obtidas para a mesma trajetória caótica sob $\epsilon = 10$, $v_{min} = 30$ e $l_{min} = 30$. Os resultados são apresentados nas Figuras D.11, D.12 e D.13.

Na figura D.11 o radio ϵ do hiper-cubo considerado para descrever a análise de recorrências foi elevado, daí que foi obtido um comportamento com alta taxa de recorrência (RR) uma vez que a vizinhança é maior e a densidade de órbitas dentro também. O determinismo é elevado já que como foi observado acima (figura D.10a) o sistema se caracteriza por possuir uma alta presença de linhas diagonais paralelas no mapa. A laminaridade apresentou mínimos (≈ 0) nos instantes do tempo em que surgem os picos ou máximos da série temporal $x(t)$, indicando que esses máximos

são de transição muito rápida. Por outra parte, na figura D.13 correspondem as métricas relacionadas as distribuições probabilísticas das linhas verticais e diagonais do mapa.

Finalmente na figura D.13 apresenta-se as métricas diretamente relacionadas com as contribuições das linhas verticais do mapa que representam as velocidades de transições entre os estados. Como é possível observar os estados relacionados às oscilações de mais baixa frequência na série temporal $x(t)$ são mais duradouros na trajetória dinâmica, enquanto os estados relacionados aos máximos das oscilações de mais alta frequência são de transitoriedade rápida.

É importante notar que embora as métricas aqui determinadas sejam comparadas com a série temporal $x(t)$, os mapas e quantificação de recorrências foram determinados considerando o espaço de fases completo $\mathcal{M}$ (3-dimensional), usando a abordagem de análise de janela móvel (tamanho de janela 100)

Uma característica muito importante para se destacar é que todas as métricas de quantificação de recorrência (que representam invariantes do sistema dinâmico) apresentaram sensibilidade à dinâmica do sistema, conseguindo descrever e representar todas as mudanças que ocorreram ao longo do tempo, ou seja, qualquer dessas métricas poderia funcionar como variável de monitoramento de um sistema caótico multidimensional.

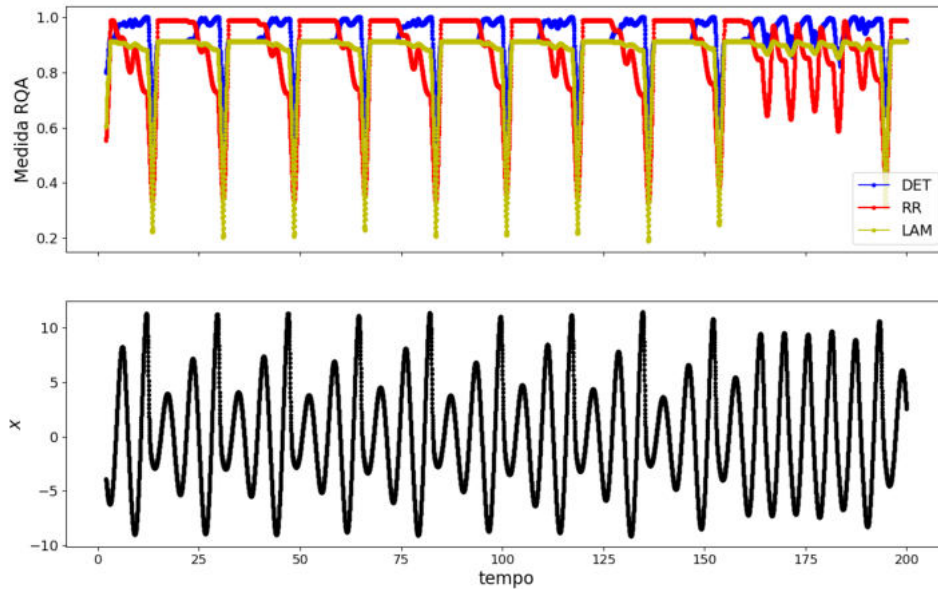


Figura D.11: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Determinismo (DET); Taxa de recorrência (RR) e Laminaridade (LAM)

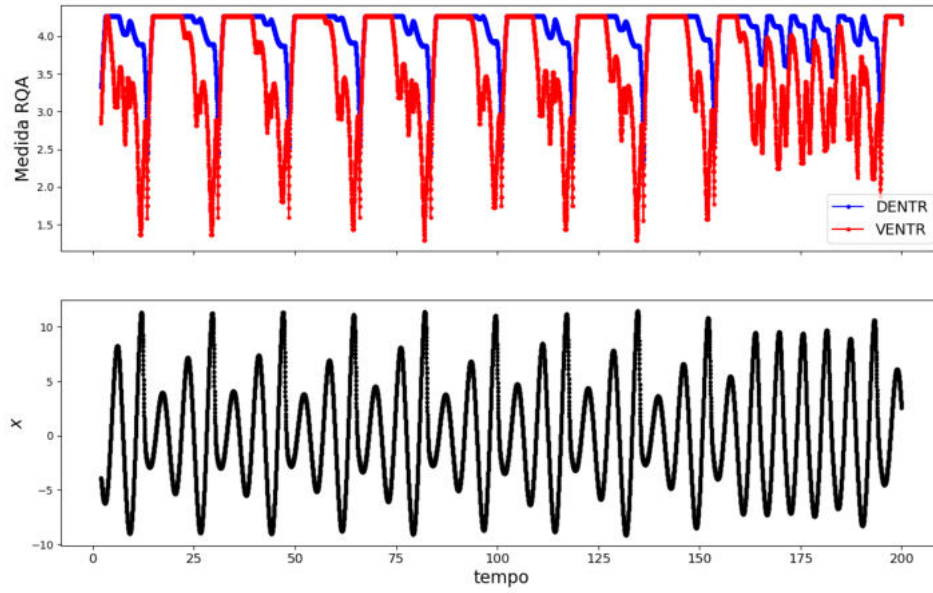


Figura D.12: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Entropia de linhas diagonais (DENTR) e Entropia de linhas verticais (VENTR)

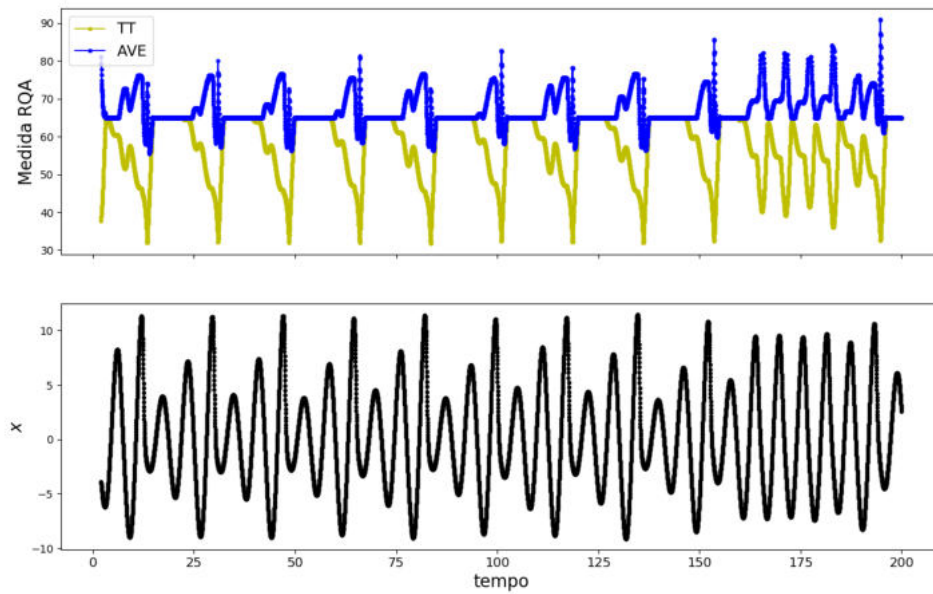


Figura D.13: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Rossler. Métricas: Tempo de retenção (TT) e média de linhas verticais (AVE)

D.1.2 Benchmark: Atrator de Lorenz

O atrator de Lorenz é um sistema dinâmico 3-dimensional paradigmático no estudo de comportamentos não lineares e caos e é descrito pelas equações 3.1.1 que são derivadas de um problema de fluidodinâmica de convecção térmica [174]. O sistema é autônomo (i.e. não ha uma dependência temporal nas equações do fluxo), possui dois termos não lineares na primeira (xz) e terceira equação (xy), é um sistema dissipativo (i.e. seu volume no espaço de fases se contrai ao longo do fluxo) e é simétrico respeito ao eixo z , ou seja é invariante sob a transformação $(x, y, z) \rightarrow (-x, -y, z)$ [61].

Possui três pontos de equilíbrio, $x_{q1} = (0, 0, 0)$ e $x_{q2,3} = \pm\sqrt{b(r-1)}, \pm\sqrt{b(\rho-1)}, \rho-1, \forall \rho > 1$ que se conectam à origem via bifurcação Pitchfork. Assim, $x_{q1} = (0, 0, 0)$ para $\rho > 1$ corresponde a um ponto sela, enquanto para $\rho < 1$ existe um unico ponto de equilibrio atrator de todas as órbitas.

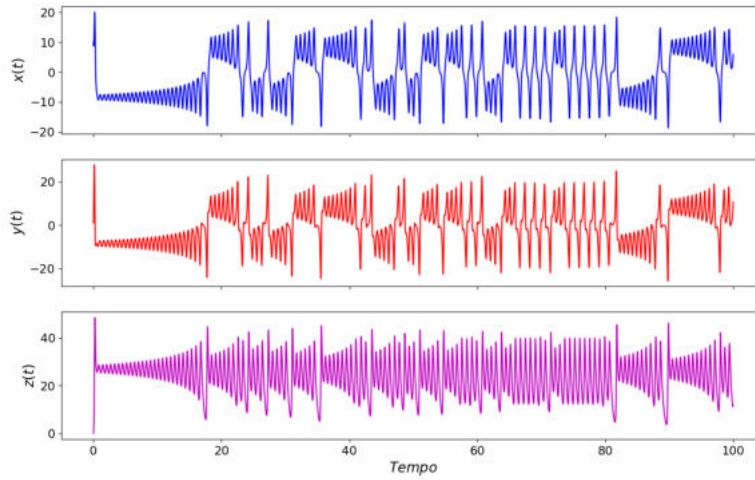


Figura D.14: Séries temporais do atrator de Lorenz obtidas pela integração do conjunto de Equações 3.1.1 com condições iniciais $x_0 = 10.0$, $y_0 = -1.0$ e $z_0 = 0.0$, parâmetros $\sigma = 10$, $\beta = 28$, $\rho = 8/3$ num vetor temporal $t = [0, 200, 10000]$

A figura D.14 corresponde às séries temporais do atrator caótico de Lorenz, observando-se uma alta aperiodicidade com transições entre dois grandes grupos de frequências. O espaço de fases $\mathcal{M}$ é apresentado na figura D.15, onde é possível observar uma órbita de partida, próxima ao ponto de equilíbrio $x_q = (0, 0, 0)$ que posteriormente começa a orbitar em torno a dois lóbulos de estabilidade (os dois pontos de equilíbrio restantes).

D.1.2.1 Estabilidade local

Os autovalores da matriz A avaliada no ponto de equilíbrio $x_q = (0, 0, 0)$ foram reportados na Tabela D.1. Tendo dois autovalores com parte real negativa e um com parte real positiva, pelo que é possível classificar o equilíbrio como hiperbólico (i.e. ponto sela). Na figura D.15 são apresentados os vetores característicos desse ponto de equilíbrio e a trajetória caótica das equações de fluxo de Lorenz.

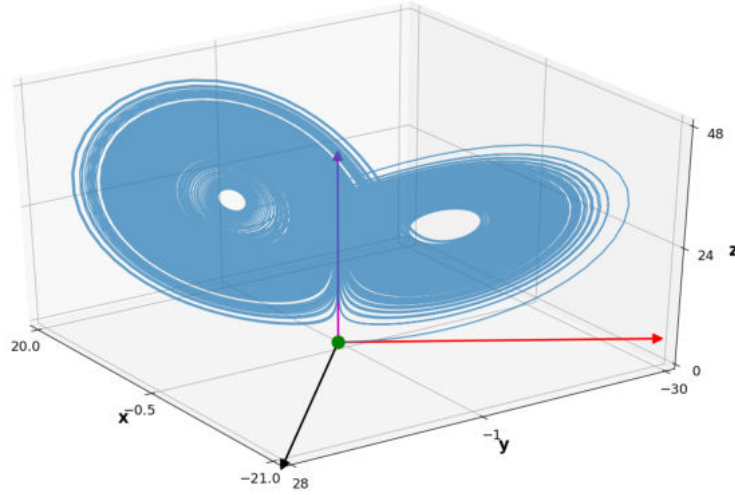


Figura D.15: Análise de estabilidade avaliada no ponto de equilíbrio $x_q = (0, 0, 0)$ do atrator de Lorenz. As setas correspondem aos três vetores característicos do sistema. O atrator foi obtido usando as mesmas condições da figura D.14.

D.1.2.2 Análise da dinâmica discreta: Mapas de Poincaré

A Figura D.3 apresenta o atrator caótico de Lorenz que foi obtido por sob as mesmas condições da figura D.14. Em contraste ao atrator de Rossler, a definição de uma secção de Poincaré capaz de capturar as características mais importantes do fluxo é mais complicada. No caso do atrator de Lorenz, há três pontos de equilíbrio envolvidos no mesmo atrator, daí que é necessário o uso de 2 secções de Poincaré: uma para capturar as dinâmicas do ponto de equilíbrio de origem $x_q = EQ_0 = (0, 0, 0)$ e outra secção para os dois pontos de equilíbrio restantes EQ_1 e EQ_2 . Assim, os planos são definidos em z com orientação θ em relação a $x - y$. O plano foi rotado em torno ao eixo z , usando a matriz de rotação, daí os ângulos entre o plano de Poincaré e o eixo x correspondeu a $\theta = -\pi/4$ e $\theta = \pi/4$.

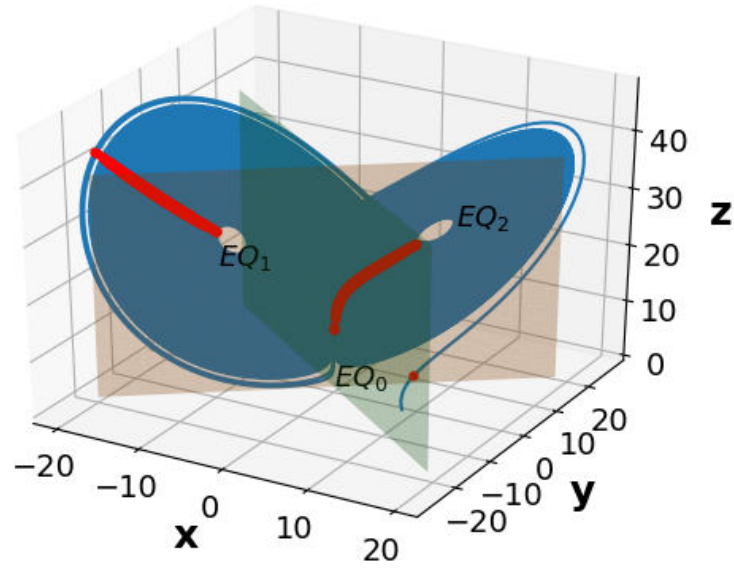


Figura D.16: Atrator de Lorenz (azul) com os pontos que são intersectados pelos planos $x = y$ e $x = -y$. Os pontos de equilíbrio são notados como EQ_0 , EQ_1 e EQ_2

Os pontos de Poincaré $\hat{x}$ (vermelhos) na figura D.16 foram obtidos como os pontos do espaço de fases $x \in \mathcal{M}$ que satisfaziam $U(\hat{x}) = 0$. Além disso, observa-se que os pontos de Poincaré atingem as condições de transversalidade e orientação única (ver Seção 3.1.4.1).

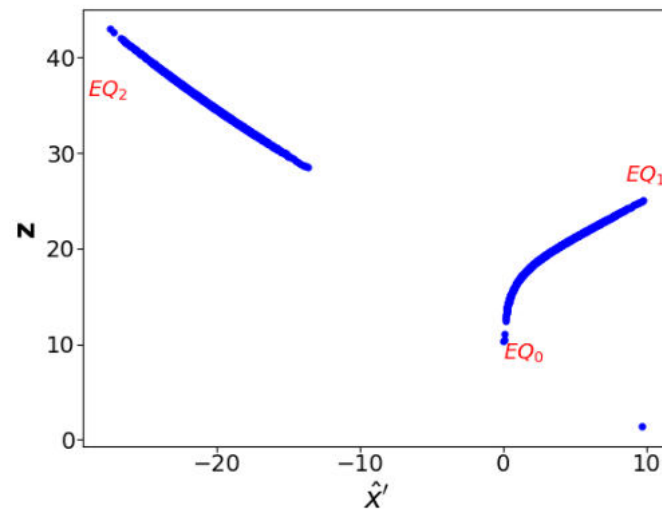


Figura D.17: Mapeamento de Poincaré do atrator de Lorenz, que indica a posição coordenada dos pontos de Poincaré

O mapeamento de Poincaré (Figura D.17) está definido pelo coordenada z e a

coordenada $\hat{x}$, já que o plano fixa a terceira coordenada. Observa-se que nas regiões próximas aos pontos de equilíbrio EQ_1 e EQ_2 há comportamentos de expansão enquanto EQ_0 é uma singularidade onde a trajetória do espaço de fases se contrai.

D.1.2.3 Sensibilidade às condições iniciais: Expoentes de Lyapunov

Analogamente ao caso do atrator de Rossler os expoentes de Lyapunov foram calculados para as condições do fluxo de Lorenz dados na Tabela D.2, os valores obtidos e a respectiva comparação com os valores reportados por WOLF *et al.* encontram-se na mesma Tabela.

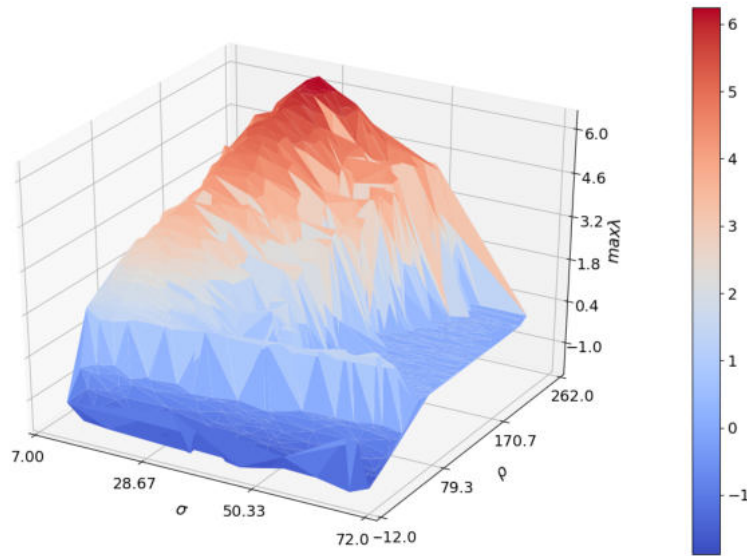


Figura D.18: Máximo expoente de Lyapunov numa malha paramétrica $\rho - \sigma$ multidimensional

Na figura D.18 apresenta-se o máximo expoente de Lyapunov do fluxo de Lorenz numa malha bidimensional de parâmetros $\rho - \sigma$. Destacando no mapa de cores que os comportamentos caóticos ($\lambda > 0$) encontram-se numa ampla região do espaço de fases.

Por sua vez a figura D.19 apresenta o diagrama de bifurcação, onde é possível observar uma ampla região de intervalos caóticos em função do parâmetro ρ , corroborando o resultado obtido na figura D.18. Observe-se que o maior expoente de Lyapunov é positivo só em regiões de caos do diagrama de bifurcação, é zero nas janelas de estabilidade e periodicidade e é negativo nas regiões estacionárias estáveis (aprox. ρ entre 0 e 25). A alta capacidade e confiabilidade dos expoentes de Lyapunov fazem deles idôneos para a detecção de bifurcações, comportamentos estáveis, periódicos e caóticos em sistemas dinâmicos.

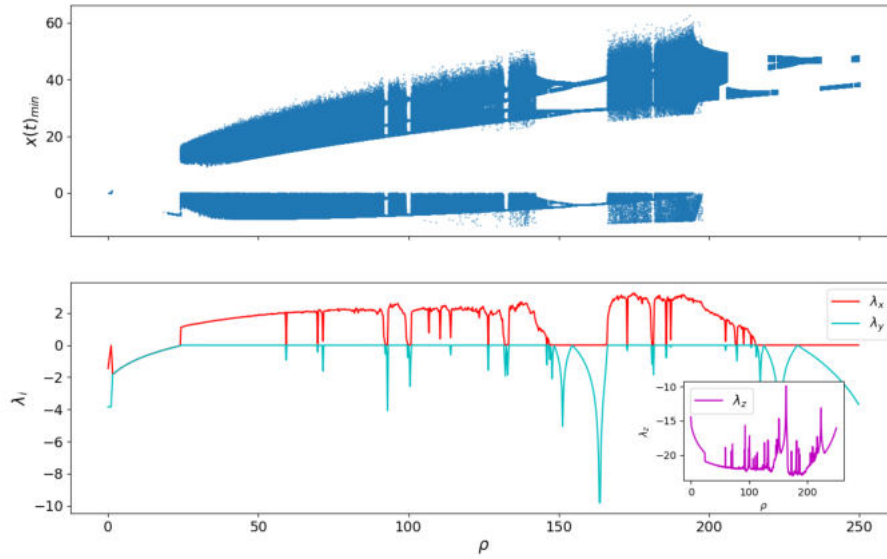


Figura D.19: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) construído para o fluxo de Lorenz com ($\sigma = 10$ e $\beta = 8/3$) e $t = [0, 1000, 10000]$ e variando ρ . Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Lorenz nas mesmas condições do que o diagrama de bifurcação

D.1.2.4 Análise da recorrências

O mapa de recorrência neste caso foi determinado para a mesma trajetória caótica das análises previas ($\sigma = 10, \beta = 8/3, \rho = 28$).

Na figura D.20a apresenta presença de bandas brancas indicando que o sistema é não estacionário. Os padrões na parte superior esquerda mostram que o processo mostram a existência de uma transição entre dois estados, essa transição pode-se relacionar às dinâmicas evolutivas entres os dois lóbulos do atrator. As linhas diagonais paralelas mostram que a evolução dos estados é semelhante em tempos diferentes; daí que o sistema é determinista. Além disso, as linhas diagonais ocorrerem ao lado de pontos isolados, indicando caos no sistema.

As regiões com mais alta concentração de recorrências correspondem às regiões espaciais próximas às espirais dos pontos de equilíbrio EQ_1 e EQ_2 .

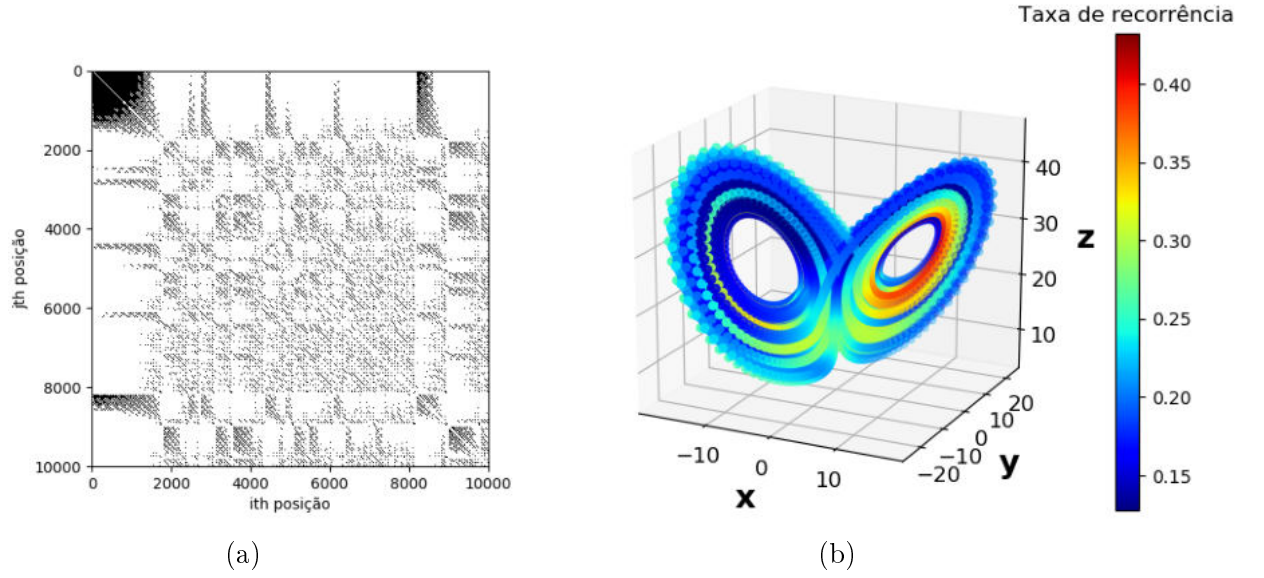


Figura D.20: Recorrências no atrator de Lorenz: (D.20a) mostra o mapa de recorrência correspondente à trajetória caótica do fluxo de Lorenz, onde os pontos pretos representam as recorrências. (D.20b) corresponde à quantificação de recorrências (Usando a taxa de recorrência RR) locais para cada região do espaço de fases. O radio de vizinhança foi estabelecido em $\epsilon = 7$

Na figura D.20b apresenta-se o mapeamento de recorrências na própria trajetória, os pontos vermelhos ressaltam os estados mais recorrentes do atrator, sendo estes os mais próximos à base de atração da trajetórias. Os estados menos recorrentes (em azul) correspondem aqueles localizados nas órbitas mais afastadas da região de atração. Dessa forma, o ponto de equilíbrio EQ_1 possui mais recorrência entorno à sua vizinhança.

Outras métricas de quantificação de recorrência foram obtidas para a mesma trajetória caótica sob $\epsilon = 7$, $v_{min} = 30$ e $l_{min} = 30$. Os resultados são apresentados nas Figuras D.22, D.23 e D.21.

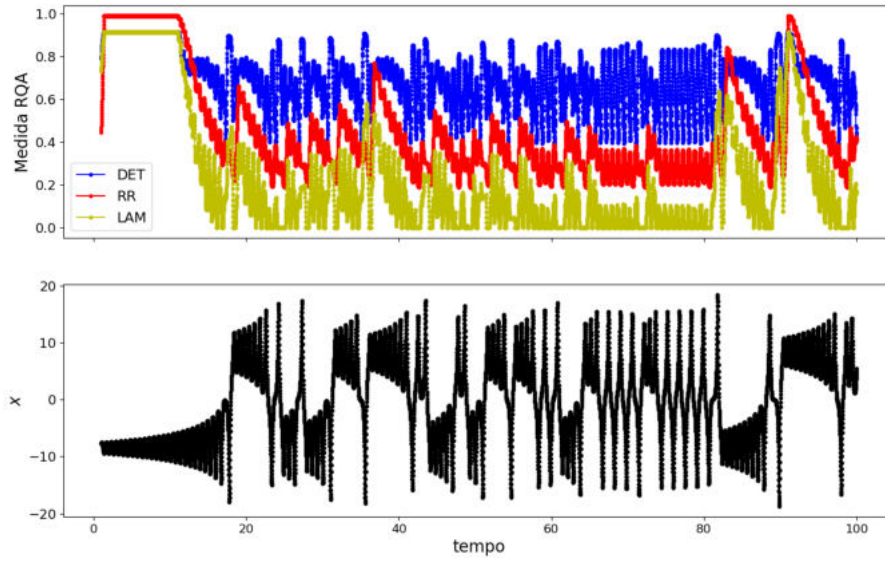


Figura D.22: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Determinismo (DET); Taxa de recorrência (RR) e Laminaridade (LAM)

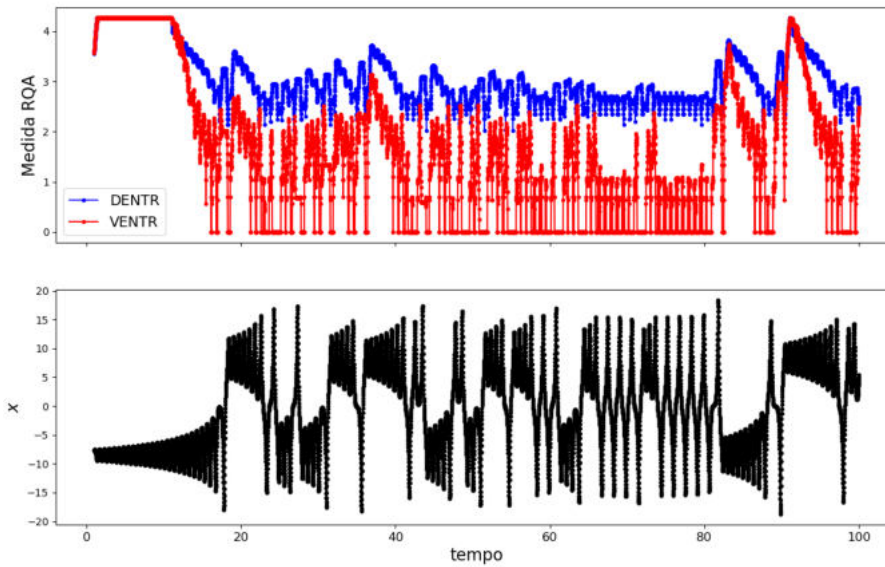


Figura D.23: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Entropia de linhas diagonais (DENTR) e Entropia de linhas verticais (VENTR)

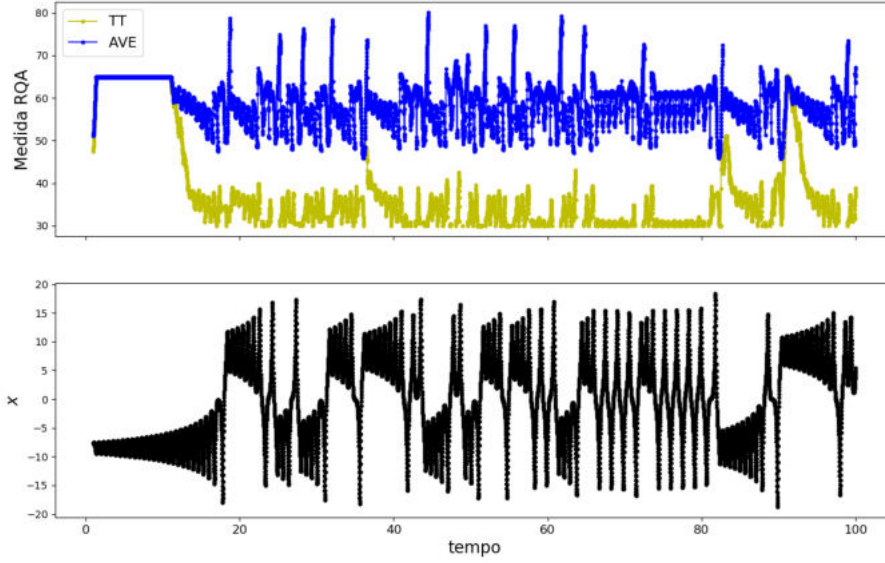


Figura D.21: Análise de quantificação de recorrências (RQA) para a trajetória caótica de Lorenz. Métricas: Tempo de retenção (TT) e média de linhas verticais (AVE)

D.2 Análise não linear de séries temporais

D.2.1 Análise de séries temporais no atrator de Rossler

Para esta análise foi considerada a série temporal da variável $x(t)$ do atrator de Rossler obtida sob as condições estabelecidas na figura D.1. A série temporal $x(t)$ é composta por 1000 pontos de amostragem uniforme e para efeitos deste estudo foi desconsiderado o ruído (a influencia do ruído na análise não linear de séries temporais é tratada em [86, 110, 206]). A reconstrução do espaço de fases do sistema dinâmico requerida para a análise não linear de séries temporais é levada a cabo usando essa mesma série $x(t)$.

D.2.1.1 Reconstrução do espaço de fases

Como foi já comentado na Seção 3.2.1, a reconstrução do espaço de fases requer da obtenção dos parâmetros m (dimensão do espaço imerso) e τ (tempo de atraso).

A figura D.24 mostra os resultados obtidos pela análise de autocorrelação, observando-se um comportamento decrescente uma vez que os estados iniciais do atrator de Rossler são pouco correlacionados com os estados finais do atrator. O comportamento oscilatório da autocorrelação obedece as próprias oscilações da série temporal, obtendo variações simétricas para autocorrelações positivas e negativas. Conforme o critério apresentado na Seção 3.2.1 o tempo de atraso para a recons-

trução é $\tau = 8$, significando que com esse tempo de atraso as séries temporais reconstruídas não possuiriam nenhum tipo de correlação linear entre si.

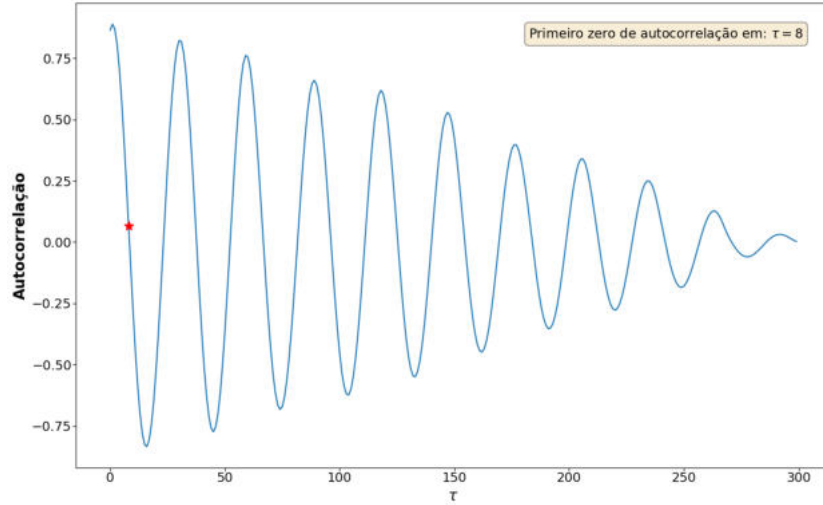


Figura D.24: Função de autocorrelação vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal, onde autocorrelação é zero corresponde a $\tau = 8$

Por outro lado, o critério de informação mútua mostrou que o tempo de atraso para a reconstrução é $\tau = 7$. É possível notar na figura que a informação mútua tem também um comportamento decrescente, notando que o valor de informação mútua em $\tau = 0$ corresponde à própria entropia de Shanon da série temporal $x(t)$. A diferença do critério de autocorrelação a informação mútua considera os efeito não lineares na correlação de variáveis.

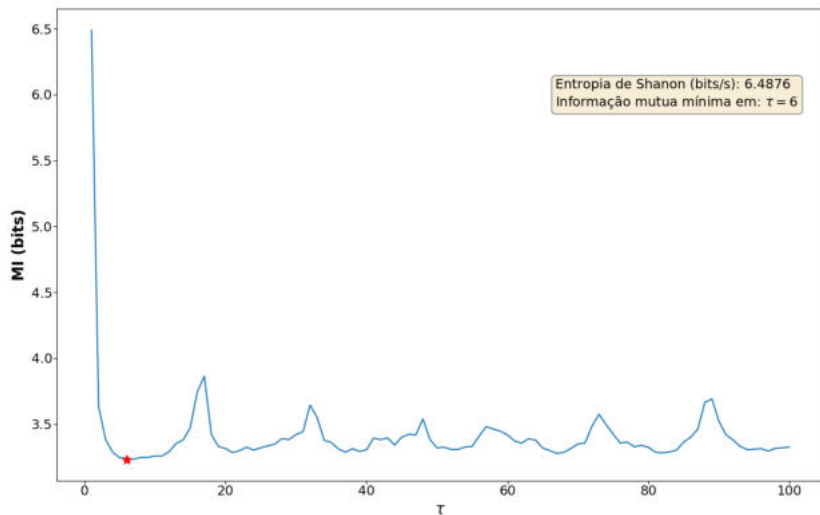


Figura D.25: Função de informação mútua vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal corresponde ao primeiro mínimo da função de informação mútua a $\tau = 7$ (inteiro mais próximo)

O último parâmetro, corresponde à dimensão de imersão, que é a mínima dimensão requerida para representar o sistema. No caso dos atratores de Rossler

e Lorenz essa dimensão é previamente conhecida. A figura apresenta a fração de falsos vizinhos em função da dimensão de imersão, observa-se que a fração mínima de falsos vizinhos é obtida em $m = 3$, corroborando a informação já conhecida (pelas equações de fluxo) e validando o próprio método de falsos vizinhos.

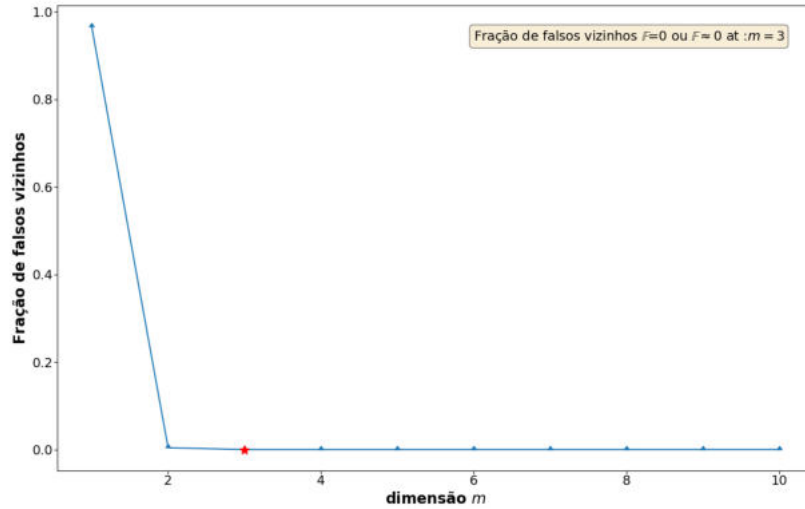


Figura D.26: Fração de falsos vizinhos vs dimensão de imersão. A dimensão ideal, indicada pelo mínimo da fração de falsos vizinhos é $m = 3$, (mesma dimensão do espaço de fases origina $\mathcal{M}$)

As reconstruções dos espaços de fases são apresentadas na figura D.27 junto com os espaços de fases originais, lembrando que o teorema de reconstrução garante que as propriedades topológicas são preservadas mas não necessariamente a geometria. Os valores de m e τ obtidos acima foram empregados em essa reconstrução, em cujos casos observou-se sempre trajetórias contínuas e suaves (sinônimos de uma boa reconstrução).

D.2.1.2 Estimação de expoentes de Lyapunov

De forma análoga à figura D.7 apresenta-se a análise de espectro de expoentes de Lyapunov do fluxo de Rossler calculados a partir da reconstrução do espaço de fases e o método de ECKMANN *et al.*-KANTZ que usa uma estimação da matriz Jacobiana como parte principal da metodologia.

Na figura D.28 apresenta-se o espectro de Lyapunov obtido via análise não linear de séries temporais. Embora o comportamento dos expoentes sejam mais ruidosos em comparação aos obtidos na figura D.7, há tendências claras em indicar positividade em casos caóticos e nulidade em casos de periodicidade. Além disso, o maior expoente do espectro de Lyapunov consegue acompanhar as dinâmicas de surgimento de janelas de estabilidade, já dinâmicas internas de ramificação dentro

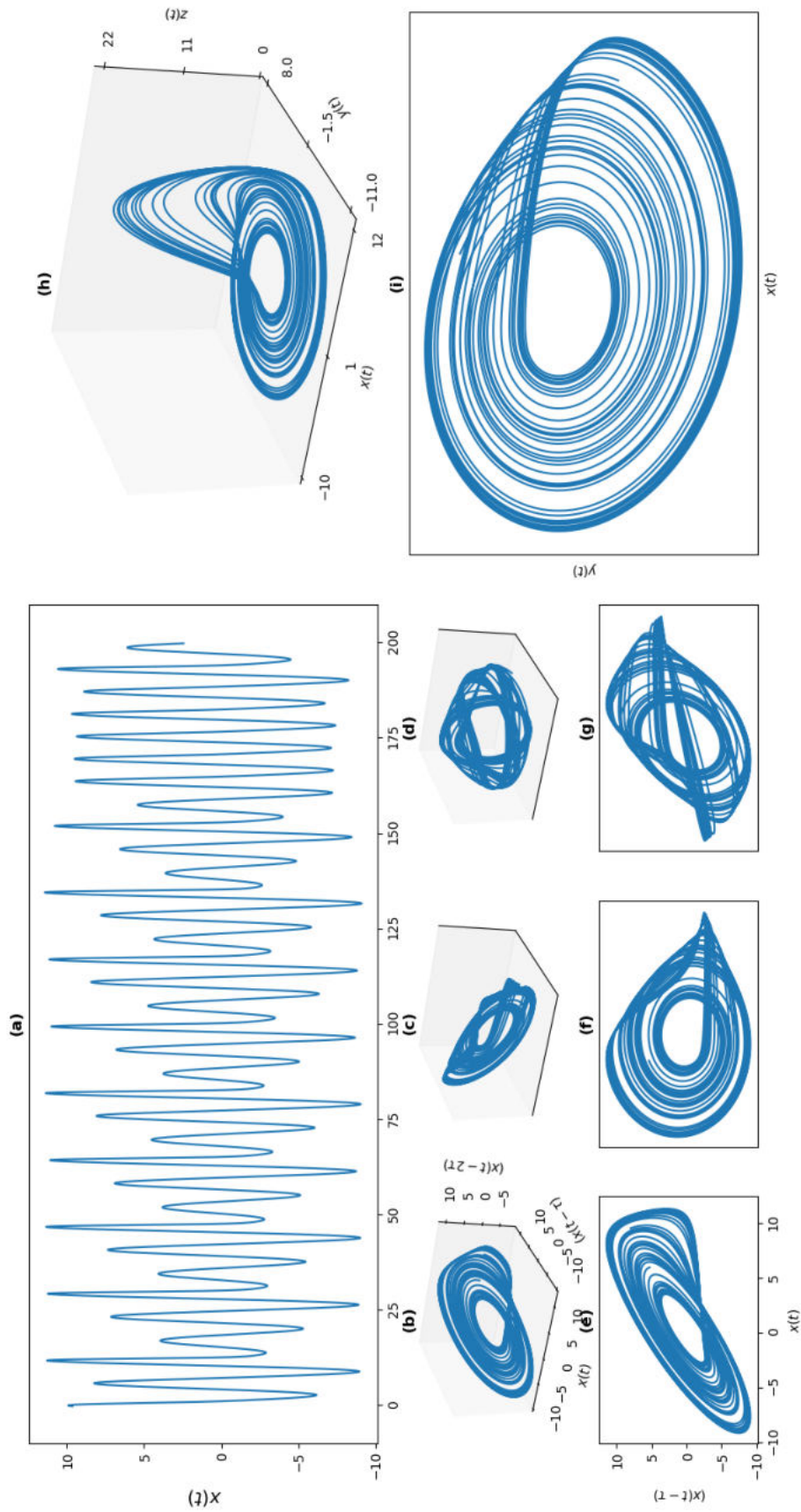


Figura D.27: Reconstrução do espaço de fases do atrator de Rossler pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $x(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (e) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 3$; (c) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 7$ e (d) e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 25$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do Rossler

de janelas caóticas não puderam ser observadas por esse espectro.

O espectro de Lyapunov mostra-se, então, como uma ferramenta capaz de detectar bifurcações e comportamentos oscilatórios periódicos, estáveis e oscilatórios aperiódicos (caos). Embora os resultados obtidos do espectro de Lyapunov não tenham a mesma clareza na separabilidade dos diferentes comportamentos dos métodos analíticos (figura D.7), o método constitui uma boa ferramenta *data-driven* para a detecção de comportamentos complexos, bifurcações e anomalias.

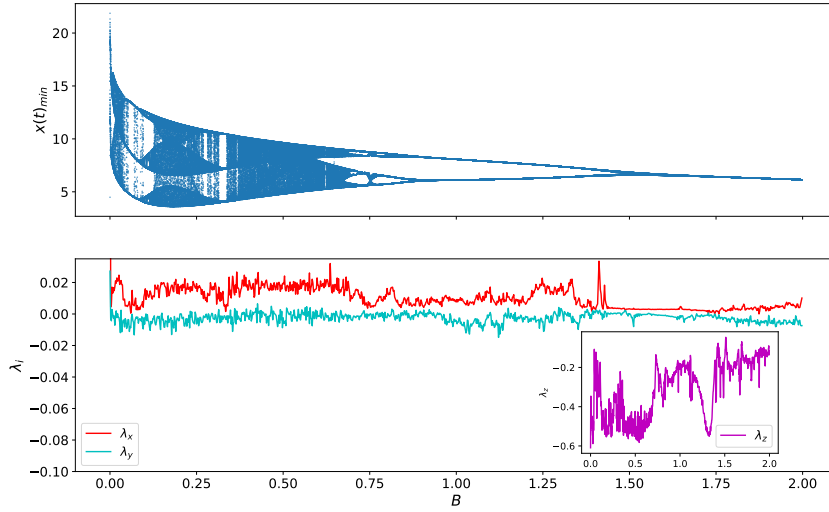


Figura D.28: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Rossler estimado a partir da série temporal $x(t)$

O expoente máximo de Lyapunov estimado a partir da série temporal foi calculado empregando a metodologia de ROSENSTEIN *et al.* -WOLF *et al.* que emprega uma metodologia direta (i.e.sem estimação de Jacobiana, Equação 3.56).

A figura D.29 mostra o comportamento comparativo entre o diagrama de bifurcação e o maior expoente de Lyapunov. Notando que esta metodologia estima um único expoente de Lyapunov e não os m expoentes do espectro uma vez que a distancia de separabilidade é calculada sem distinguir as componentes do espaço. Neste caso o maior expoente de Lyapunov apresentou um comportamento altamente ruidoso e não foi possível identificar os diferentes comportamentos do diagrama de bifurcação na sua estrutura.

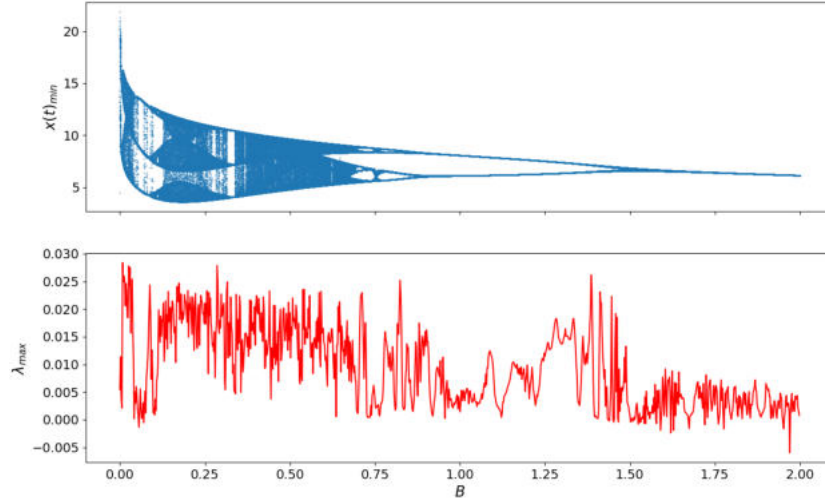


Figura D.29: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura inferior: Maior expoente de Lyapunov do fluxo de Rossler estimado a partir da série temporal $x(t)$

D.2.1.3 Estimação da entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação

Outros invariantes importantes na caracterização dos sistemas dinâmicos são a entropia de Kolmogorov H e a dimensão de correlação D_2 uma vez que medem a perda de informação e por consequência a predizibilidade da evolução temporal de uma trajetória.

A figura D.30 mostra a evolução da entropia de Kolmogorov e dimensão de correlação em comparação ao diagrama de bifurcação do fluxo de Rossler. Observe-se que os duas medidas invariantes H e D_2 são máximas nas regiões caóticas, indicando que o sistema precisa de mais informação nesses estados para ser descrito (i.e. é mais imprevisível) nessa faixa paramétrica. Em contraste ao maior expoente de Lyapunov (figura D.29) o comportamento destas medidas é mais suave e acompanha as diferentes transições de comportamentos dinâmicos observados. Note-se que tanto H como D_2 são mínimas na condição de periodicidade e estabilidade do sistema, constituindo dessa forma outro importante conjunto de índices para o monitoramento *data-driven* de sistemas dinâmicos não lineares.

D.2.1.4 Estimação dos invariantes por recorrências

Na Seção D.1.1.5 foi discutida a importância da análise de recorrências em sistemas dinâmicos, mostrou-se que todas as propriedades evolutivas do sistema estão presentes nestes diagramas. Além disso, foram determinadas as medidas quantitativas de recorrência e observou-se que destacava as características mais relevantes da

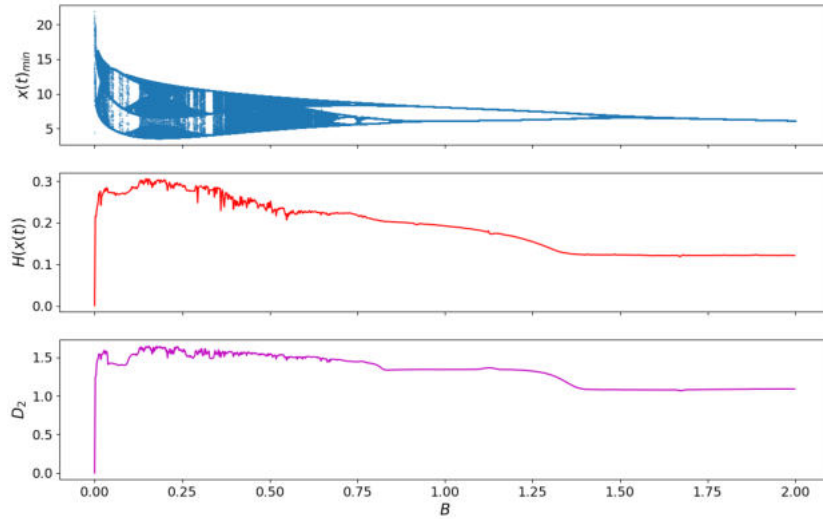


Figura D.30: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Rossler. Figura intermédia: Entropia de Kolmogorov estimada a partir da série temporal $x(t)$. Figura inferior: Dimensão de correlação estimada a partir da série temporal $x(t)$.

dinâmica em observação.

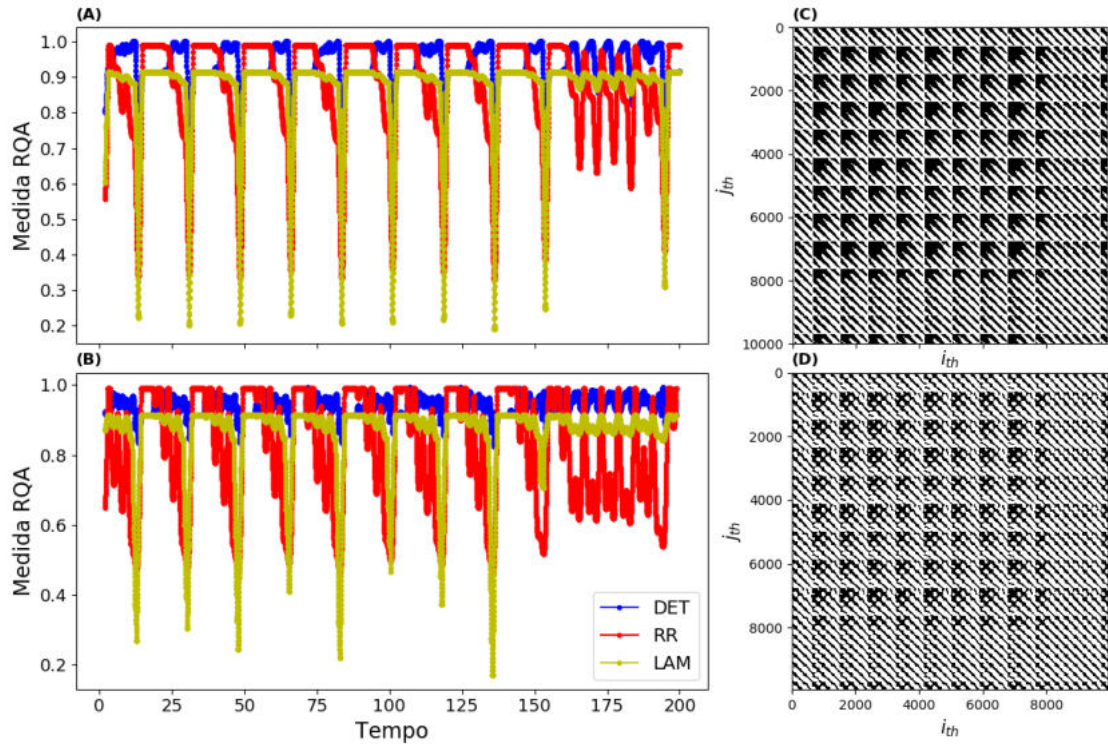


Figura D.31: Comparação na quantificação de recorrências. (A) Invariantes de quantificação RQA obtidos usando a totalidade de séries do espaço de fases $\mathcal{M}$ (a partir das equações). (B) Mapa de recorrências do atrator (a partir das equações). (C) Invariantes de quantificação RQA obtidos usando as técnicas de reconstrução (a partir da série temporal $x(t)$). (D) Mapa de recorrências do atrator (a partir da série temporal $x(t)$). Foram considerados $\epsilon = 10$, $l_{min} = 30$ e $v_{min} = 30$

Na figura D.31 apresenta-se as métricas do análise RQA. Observa-se que os dois diagramas de recorrência são muito semelhantes, mostrando mais uma vez que a reconstrução do espaço de fases foi satisfatória. Além disso, os comportamentos dos invariantes do RQA construídos por reconstrução do espaço mostraram uma alta reproduzibilidade das tendências padrões ou reais observadas na figura D.31 (A). À vista disso, os resultados da anterior análise são consequência do Teorema de Takens uma vez que as propriedades topológicas da dinâmica foram preservadas, embora a geometria reconstruída era sempre diferente à original. De novo, os invariantes da RQA conformam um conjunto promissor para o monitoramento multivariável de processos complexos.

D.2.2 Análise de séries temporais no atrator de Lorenz

Para esta análise foi considerada a série temporal da variável $x(t)$ do atrator de Lorenz obtida sob as condições estabelecidas na figura D.14. A série temporal $x(t)$ é composta por 10000 pontos de amostragem uniforme.

D.2.2.1 Reconstrução do espaço de fases

As análise de autocorrelação e informação mútua são apresentadas nas Figuras D.32 e D.33 respectivamente, obtendo tempos de reconstrução $\tau = 16$ e $\tau = 143$.

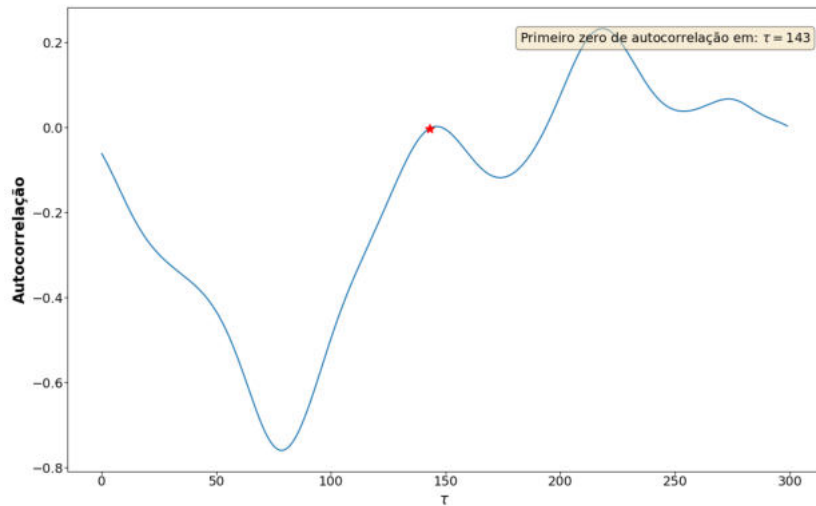


Figura D.32: Função de autocorrelação vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal, onde autocorrelação é zero corresponde a $\tau = 143$

A figura D.34 apresenta a fração de falsos vizinhos em função da dimensão de imersão, observa-se que a fração mínima de falsos vizinhos é obtida em $m = 3$,

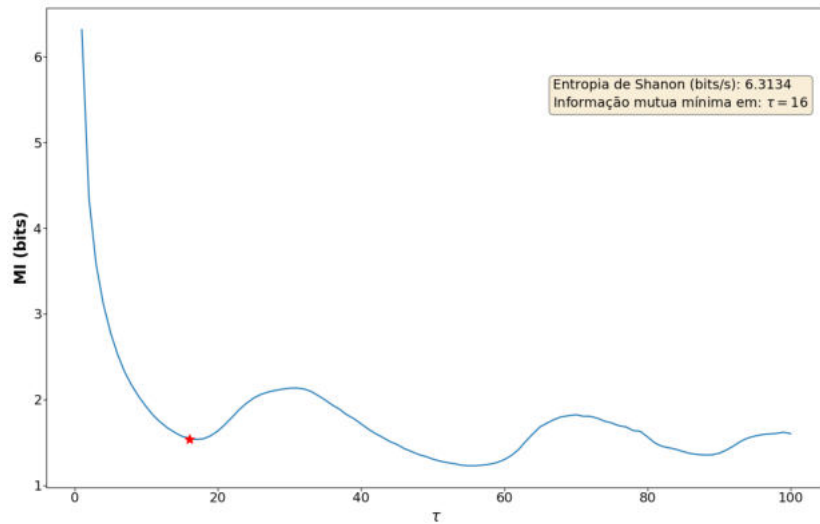


Figura D.33: Função de informação mútua vs tempo de atraso. O tempo de atraso ideal corresponde ao primeiro mínimo da função de informação mútua a $\tau = 16$ (inteiro mais próximo)

corroborando a informação já conhecida (pelas equações de fluxo) e validando o próprio método de falsos vizinhos.

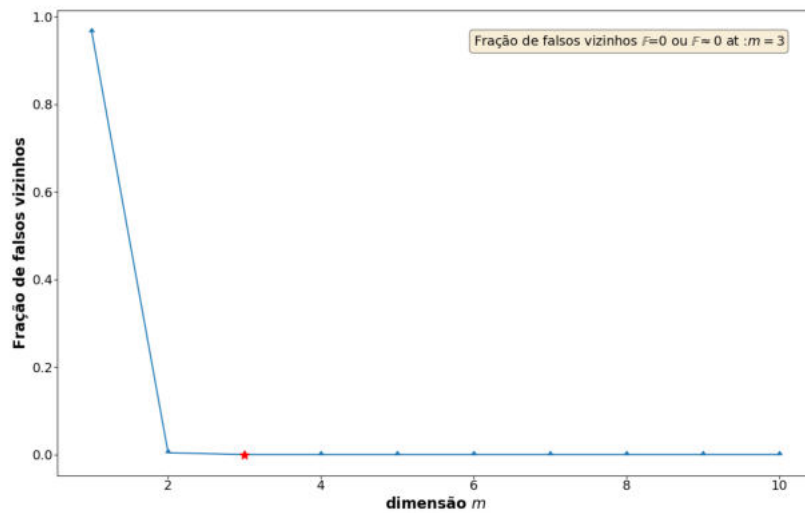


Figura D.34: Fração de falsos vizinhos vs dimensão de imersão. A dimensão ideal, indicada pelo mínimo da fração de falsos vizinhos é $m = 3$, (mesma dimensão do espaço de fases origina $\mathcal{M}$)

As reconstruções dos espaços de fases a partir da série temporal $x(t)$ do atrator de Lorenz são apresentadas na figura D.36. Notando que as Figuras D.36 (b) e D.36(e) foram as reconstruções que mais destacaram a geometria de dois lóbulos característica do atrator.

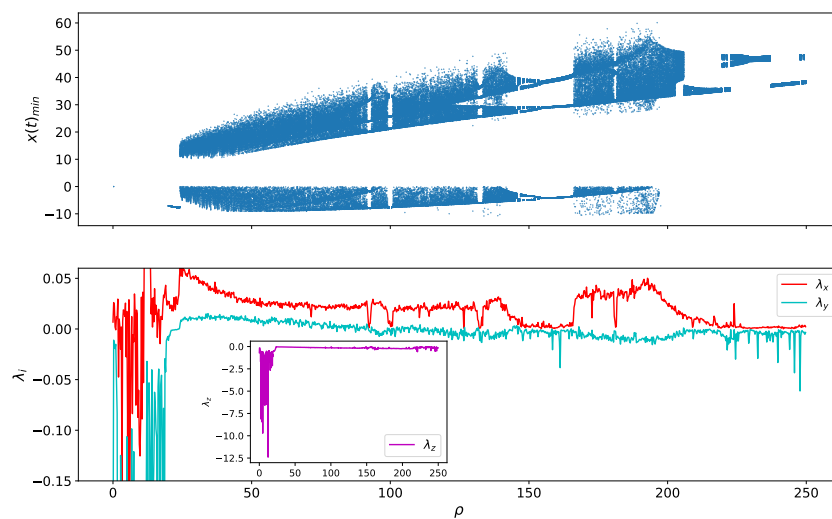


Figura D.35: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura inferior: Espectro de Lyapunov do fluxo de Lorenz estimado a partir da série temporal $x(t)$

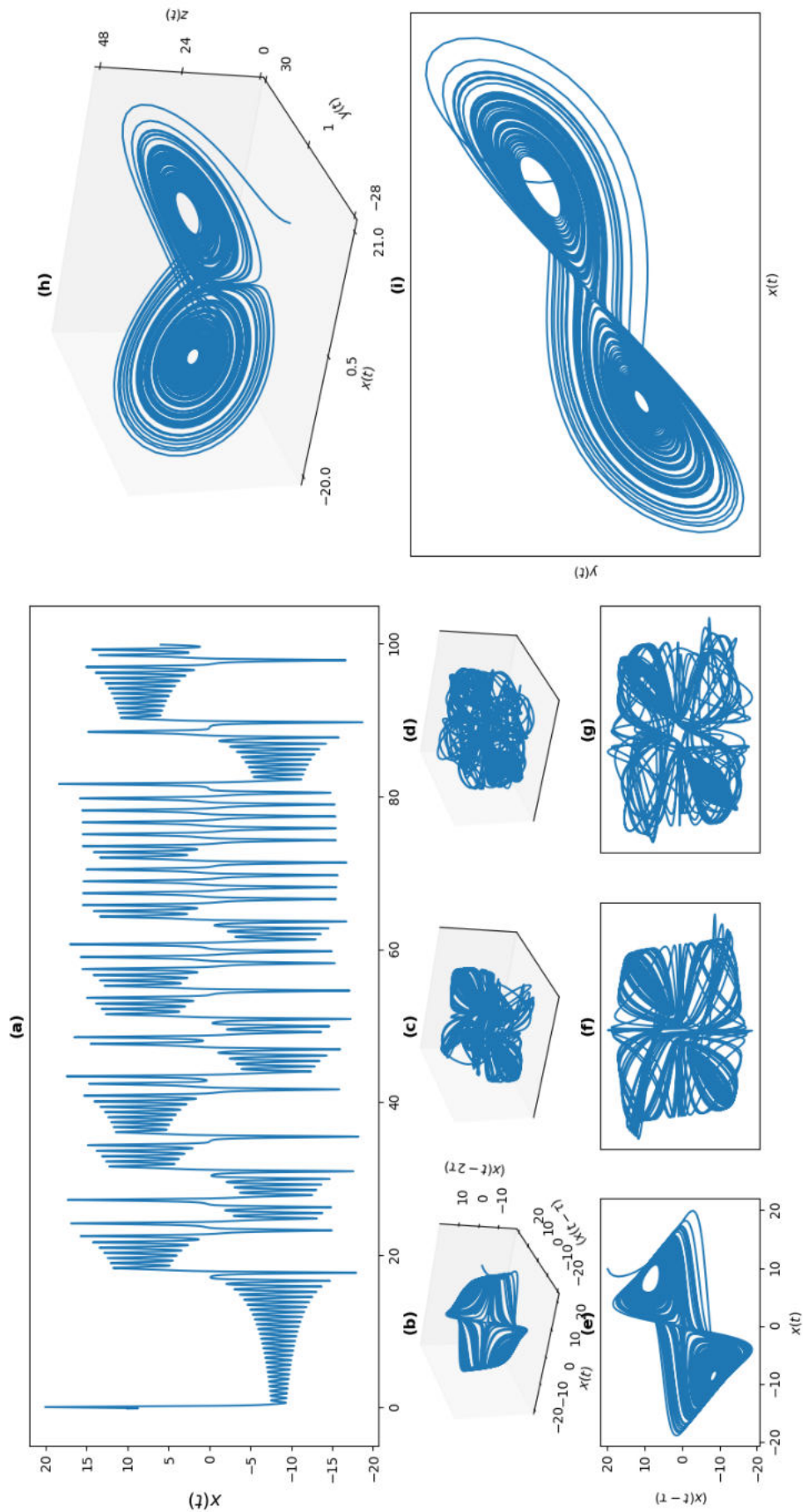


Figura D.36: Reconstrução do espaço de fases do atrator de Lorenz pelo teorema de TAKENS. (a) Corresponde à série temporal $x(t)$ usada para as reconstruções; (b) e (e) atratores tri e bi-dimensionais (respectivamente) reconstruídos com $\tau = 16$; (c) e (f) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 64$ e (d) e (g) atratores tri e bi-dimensionais reconstruídos com $\tau = 143$. (h) e (i) atratores tri e bi-dimensionais originais (obtidos via integração do fluxo) do Lorenz

D.2.2.2 Estimação de expoentes de Lyapunov

Na figura D.35 apresenta-se o comportamento dos expoentes de Lyapunov, destacando que consegue acompanhar as características do comportamento dinâmico dentro das janelas de estabilidade e regiões caóticas do diagrama de bifurcação. Note-se que inicialmente o comportamento do espectro de Lyapunov é ruidoso, isso relacionado também à não convergência de soluções numéricas das equações de fluxo no diagrama de bifurcação (i.e. ausência de pontos no diagrama de bifurcação nessa região inicial).

O expoente máximo de Lyapunov estimado a partir da série temporal foi calculado empregando a metodologia de ROSENSTEIN *et al.* -WOLF *et al.* que emprega uma metodologia direta (i.e. sem estimação de Jacobiana, Equação 3.56).

A figura D.37 mostra o comportamento comparativo entre o diagrama de bifurcação e o maior expoente de Lyapunov. A diferença do caso do atrator de Rossler (figura D.29), o maior expoente de Lyapunov é uma medida representativa das mudanças dinâmicas descritas no diagrama de bifurcação, o comportamento do expoente é menos ruidoso e é mais evidente a associação entre as janelas de estabilidade e os expoentes $\lambda = 0$.

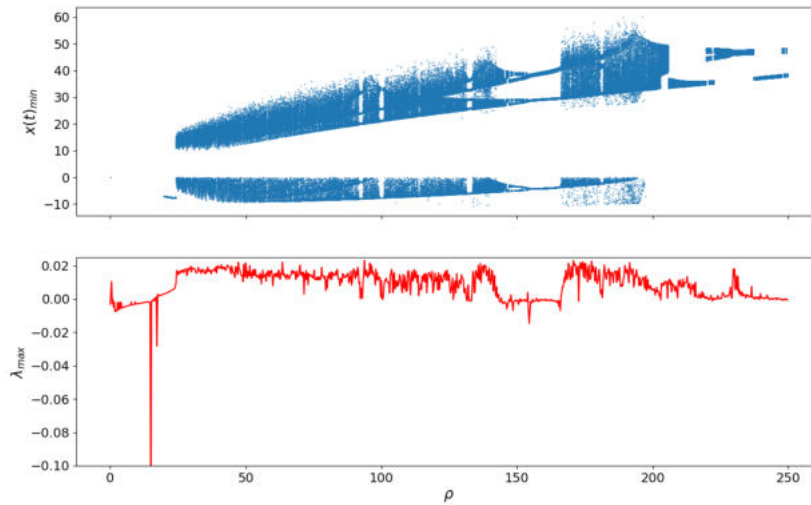


Figura D.37: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura inferior: Maior expoente de Lyapunov do fluxo de Lorenz estimado a partir da série temporal $x(t)$

D.2.2.3 Estimação da entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação

Os comportamentos da entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação descritos na figura D.38 mostraram que essas métricas invariantes são representativas das

diferentes mudanças no diagrama de bifurcação. Além disso, a entropia de Kolmogorov e a dimensão de correlação apresentaram menos ruído do que os correspondentes expoentes de Lyapunov, sendo menos susceptíveis a limitações numéricas associadas aos próprios fluxos.

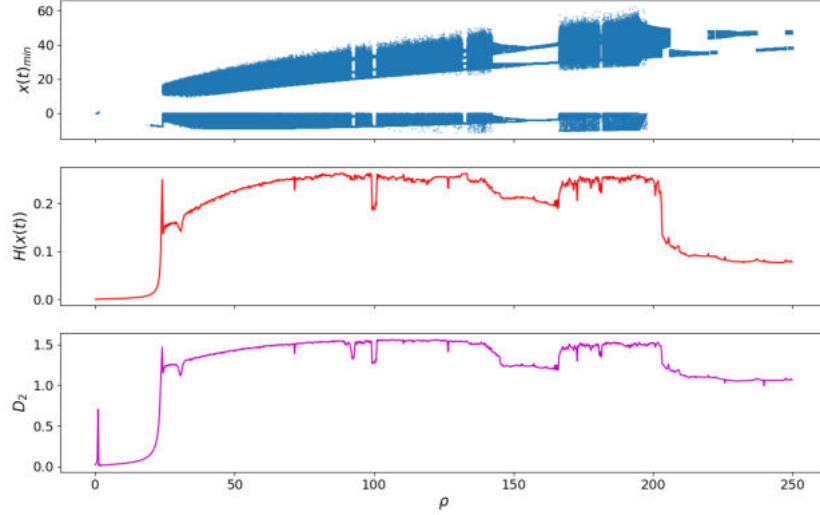


Figura D.38: Figura superior: Diagrama de bifurcação (de árvore) do fluxo de Lorenz. Figura intermédia: Entropia de Kolmogorov estimada a partir da série temporal $x(t)$. Figura inferior: Dimensão de correlação estimada a partir da série temporal $x(t)$.

D.3 Reconstrução do espaço de fases por DMD

D.3.0.1 Reconstrução do espaço de fases via DMD

Análoga à reconstrução de espaços de fases via teorema de Takens foi apresentada na Seção 3.2.2 a metodologia de reconstrução via decomposição dinâmica de modos. Na análise dos casos *benchmark* foram consideradas as três séries temporais de cada sistema dinâmico. Além disso, o fator de truncamento r foi obtido como o índice do vetor característico que consegue acumulativamente representar o 90% da dinâmica do sistema.

Nas Figuras D.39 e D.40 apresentam-se os 3 primeiros modos de decomposição relacionados aos 3 vetores característicos mais importantes encontrados na decomposição para os fluxos de Rossler e Lorenz respectivamente.

Por fim, as Figuras D.41 e D.42 comparam os respectivos espaços naturais com os espaços de fases reconstruídos.

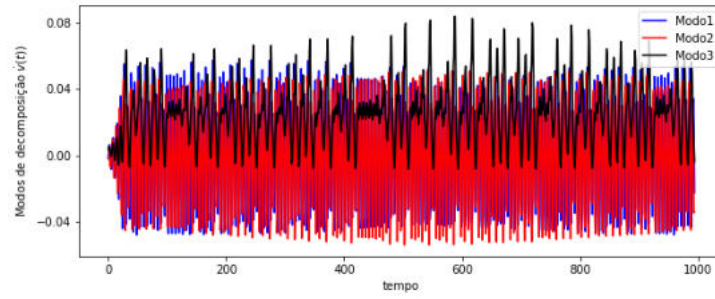


Figura D.39: Modos de decomposição $\dot{v}(t)$ do fluxo de Rossler

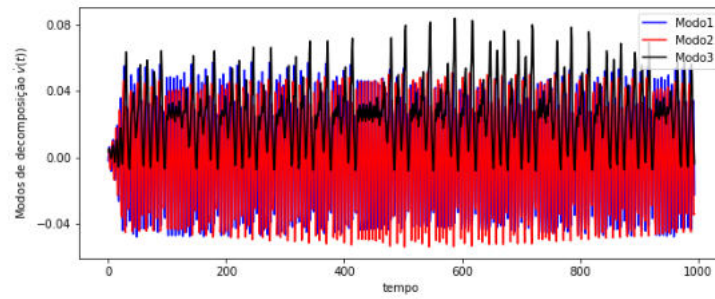


Figura D.40: Modos de decomposição $\dot{v}(t)$ do fluxo de Lorenz

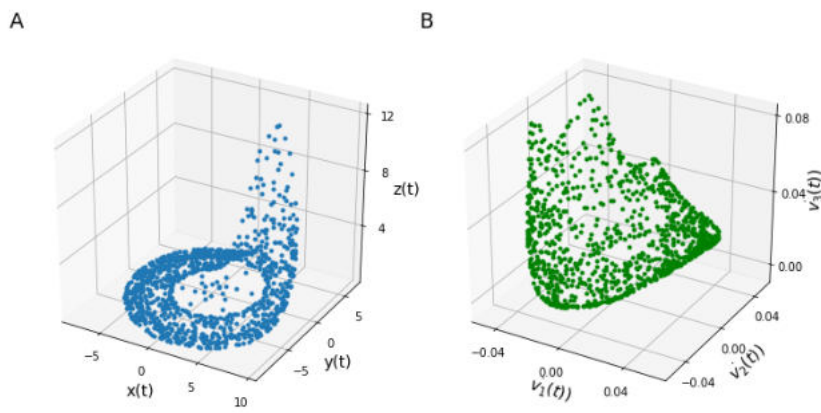


Figura D.41: Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B) para o fluxo de Rossler

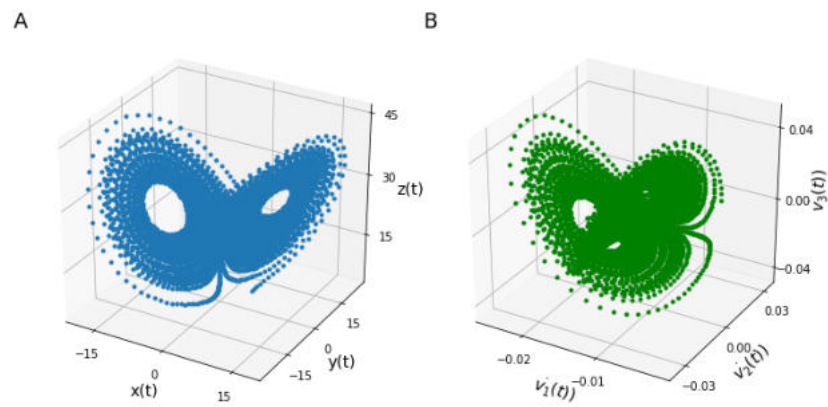


Figura D.42: Comparação entre o espaço de fases original (A) e o espaço de fases reconstruído via DMD (B) para o fluxo de Lorenz

Apêndice E

Descrição do FOWM

E.1 Modelagem matemática

O FOWM foi desenvolvido com base na arquitetura completa do sistema de produção mostrado na Figura 5.4, que é composto por quatro subsistemas: Reservatório, Anular, *Tubbing* e *Flowline-Riser*. As equações de conservação de massa do sistema são dadas por:

$$\frac{dm_{ga}}{dt} = W_{gc} - W_{iv} \quad (\text{E.1})$$

$$\frac{dm_{gt}}{dt} = W_r \alpha_{gr} + W_{iv} - W_{whg} \quad (\text{E.2})$$

$$\frac{dm_{lt}}{dt} = W_r (1 - \alpha_{gr}) - W_{whl} \quad (\text{E.3})$$

$$\frac{dm_{gb}}{dt} = (1 - E) W_{whg} - W_g \quad (\text{E.4})$$

$$\frac{dm_{gr}}{dt} = E W_{whg} + W_g - W_{gout} \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{dm_{lr}}{dt} = W_{whl} - W_{lout} \quad (\text{E.6})$$

em que as variáveis de estado correspondem a: m_{ga} massa de gás na seção anular, m_{gt} massa de gás na seção de *tubbing*, m_{lt} massa líquida na seção de *tubbing*, m_{gb}

massa de gás da bolha na linha de produção submarina, m_{gr} e m_{lr} , correspondem a massa de gás e líquido na secção *flowline/riser*. E corresponde à fração de massa de gás que contorna a bolha no gasoduto submarino e α_{gr} é a fração de massa do gás nas condições de pressão e temperatura do reservatório. Os fluxos de fluido no modelo são descritos pelas seguintes equações:

$$W_{iv} = K_a \sqrt{\rho_{ai} (P_{ai} - P_{tb})} \quad (E.7)$$

$$W_r = K_r \left[1 - \left(0.2 \frac{P_{bh}}{P_r} \right) - \left(0.8 \frac{P_{bh}}{P_r} \right)^2 \right] \quad (E.8)$$

$$W_{whg} = K_w \sqrt{\rho_l (P_{tt} - P_{rb})} \alpha_{gt} \quad (E.9)$$

$$W_{whl} = K_w \sqrt{\rho_l (P_{tt} - P_{rb})} (1 - \alpha_{gt}) \quad (E.10)$$

$$W_g = C_g (P_{eb} - P_{rb}) \quad (E.11)$$

$$W_{gout} = \alpha_g C_{out} z \sqrt{\rho_l (P_{rt} - P_s)} \quad (E.12)$$

$$W_{lout} = \alpha_l C_{out} z \sqrt{\rho_l (P_{rt} - P_s)} \quad (E.13)$$

em que W_{gc} é o fluxo de massa de gas-lift entrando no anular, W_{iv} é o fluxo de massa de gás do anular para o *tubbing*, W_r corresponde ao fluxo de massa multifásico do reservatório estimado pela equação de Vogel [281]. Os fluxos de massa de gás e líquido através da árvore de Natal são, W_{whg} e W_{whl} , respectivamente. A geração do slugging é modelada pela inclusão do mecanismo de válvula virtual [189]: W_g é o fluxo neste dispositivo proposto, W_{gout} e W_{lout} são fluxos de gás e líquido que fluem através da válvula de estrangulamento superior. Uma vez que esses fluxos de massa são modelados via equação de válvula, os parâmetros K_a , K_r e K_w correspondem aos coeficientes de fluxo entre o anular e o *tubbing*, o parâmetro de Vogel [147] e o coeficiente de fluxo na válvula de árvore de Natal, respectivamente.

As constantes da válvula virtual e da válvula de estrangulamento são representadas como C_g e C_{out} , enquanto a fração de abertura da válvula Choke corresponde a z . As pressões no fundo da coluna de produção e no separador gravitacional na

planta de processo são P_r e P_s .

A densidade do líquido ρ_l em todo o sistema é assumida como uma constante. Por outro lado, a densidade do gás no anular ρ_{ai} é dada pela Equação E.14.

$$\rho_{ai} = \frac{MP_{ai}}{RT} \quad (\text{E.14})$$

$$\alpha_{gt} = \frac{m_{gt}}{m_{gt} + m_{lt}} \quad (\text{E.15})$$

$$\alpha_{gr} = \frac{m_{gr}}{m_{gr} + m_{lr}} \quad (\text{E.16})$$

$$\alpha_{lr} = 1 - \alpha_{gr} \quad (\text{E.17})$$

Conforme descrito nas Equações E.15- E.17, α_{gt} é a fração de massa de gás na seção de tubulação, enquanto α_{gr} e α_{lr} são as frações de massa de gás e líquido na seção de tubulação submarina.

As outras pressões presentes nas Equações E.1-E.6 são descritas pelas equações E.18-E.25.

$$P_{ai} = \left(\frac{RT}{V_a M} - \frac{gL_a}{V_a} \right) m_{ga} \quad (\text{E.18})$$

$$P_{tb} = P_{tt} + \rho_{mt} g H_{vgl} \quad (\text{E.19})$$

$$P_{bh} = P_{pdg} + \rho_{rems} g (H_t - H_{pdg}) \quad (\text{E.20})$$

$$P_{pdg} = P_{tb} + \rho_{rems} g (H_{pdg} - H_{vgl}) \quad (\text{E.21})$$

$$P_{tt} = \frac{\rho_{gt} RT}{M} \quad (\text{E.22})$$

$$P_{rb} = P_{rt} + \frac{(m_{lr} + m_{l,still}) g \sin(\theta)}{A_{ss}} \quad (\text{E.23})$$

$$P_{eb} = \frac{m_{gb}RT}{MV_{eb}} \quad (\text{E.24})$$

$$P_{rt} = \frac{m_{gr}RT}{M \left(V_r - \frac{m_{lr} + m_{l,still}}{\rho_l} \right)} \quad (\text{E.25})$$

em que, P_r é a pressão do reservatório, P_{bh} corresponde à pressão no fundo do poço, P_{pdg} é a pressão na posição PDG, P_{ai} representa a pressão no ponto de injeção de gás na seção anular, P_{tb} é a pressão no ponto de injeção de gás em relação ao *tubbing*, P_{tt} é a pressão no topo da seção de *tubbing*, P_{rb} corresponde à pressão na seção do *flowline*, P_{eb} representa a pressão da bolha e P_{rt} é a pressão no topo do *riser*. As propriedades do gás são estimadas assumindo a hipótese de gás ideal; T é a temperatura média em todo o sistema, R é a constante universal do gás e g é a aceleração da gravidade. A densidade da mistura multifásica no reservatório é considerada constante e representada por ρ_{mres} , a densidade da mistura ρ_{mt} e a densidade do gás ρ_{gt} na seção de *tubbing* são calculados pelas Equações E.26 e E.27, respectivamente. Além disso, os parâmetros geométricos são definidos: θ representando a inclinação do *riser*, V_a é o volume anular, V_{eb} é o volume da bolha, $m_{l,still}$ corresponde ao mínimo massa de líquido no duto submarino, e V_r é um volume aparente usado para corrigir o tempo médio de residência no sistema [66, 189]. O comprimento vertical entre a árvore de Natal e a válvula gas-lift, o transmissor PDG e o fundo do poço são representados por H_{vgl} , H_{pdg} e H_t , respectivamente. O volume de gás na seção de *tubbing* V_{gt} e a área de seção transversal da tubulação submarina A_{ss} são dados pelas Equações E.28 e E.29.

$$\rho_{mt} = \frac{m_{gt} + m_{lt}}{V_t} \quad (\text{E.26})$$

$$\rho_{gt} = \frac{m_{gt}}{V_{gt}} \quad (\text{E.27})$$

$$V_{gt} = V_t - \frac{m_{lr}}{\rho_l} \quad (\text{E.28})$$

$$A_{ss} = \frac{\pi D_{ss}^2}{4} \quad (\text{E.29})$$

No FOWM, existem nove parâmetros de modelo de ajuste: $m_{l,still}$, C_g , C_{out} , V_{eb} , E , K_w , K_a , K_r e V_r . O procedimento usado para estimativa de parâmetros usando dados de uma plataforma de produção offshore foi apresentado anteriormente

Tabela E.1: Parâmetros do modelo para um caso real

Parâmetro	Valor (Unidades)
ρ_l (kg/m^3)	962.9
P_r (Pa)	$3.030e^7$
P_s (Pa)	$10.026e^5$
α_{gw}	0.0188
ρ_{mres} (kg/m^3)	905.4
M ($kg/kmol$)	18.0
T (K)	298
R ($m^3Pa/KmolK$)	8314
g (m/s^2)	9.81
W_{gc} (kg/s)	1.603
L_t (m)	1659
L_a (m)	940
H_t (m)	1433
H_{pdg} (m)	1387
H_{vgl} (m)	940
D_{ss} (m)	0.1524
D_t (m)	0.150
D_a (m)	0.140
θ ($rads$)	$\pi/4$

em [66]. As Tabelas E.1 e E.2 apresentam o conjunto completo de parâmetros de modelagem do sistema, que foram obtidos a partir de dados de referência de um poço real offshore da PETROBRAS.

As Equações E.1, E.2, E.3, E.4, E.5 e E.6 constituem o modelo do sistema de produção sem controle. Além disso, presume-se que um controlador PI está controlando as instabilidades do processo, manipulando a fração de abertura da válvula de estrangulamento z . No presente trabalho, considerá-se um mecanismo de controle *feedback* em três cenários diferentes, considerando a pressão na posição PDG P_{pdg} , a pressão na seção da linha de fluxo P_{rb} e a pressão no topo do *riser* P_{rt}

Tabela E.2: Parâmetros de ajuste do FOWM

Parâmetro	Valor
$m_{l,still}$	$1.9656e^4$
C_g	$2.0551e^{-5}$
C_{out}	$6.8920e^{-3}$
V_{eb}	53.3003
E	0.9166
K_w	0.0347
K_a	$6.6005e^{-4}$
K_r	691.2173
V_r	93.9425

como variável controlada, constituindo, em cada cenário, um sistema SISO.

A dinâmica do controlador PI é descrita pela Equação E.30:

$$z(t) = z_{bias} + K_p \left[\left(\hat{P}(t) - \hat{P}_{sp} \right) + \frac{1}{\tau} \int_0^t \left(\hat{P}(t) - \hat{P}_{sp} \right) dt \right] \quad (E.30)$$

sendo:

$$I = \frac{1}{\tau} \int_0^t \left(\hat{P}(t) - \hat{P}_{sp} \right) dt \quad (E.31)$$

dessa forma, a respectiva derivada é dada por:

$$\frac{dI}{dt} = \frac{1}{\tau} \left(\hat{P}(t) - \hat{P}_{sp} \right) \quad (E.32)$$

As Equações E.1, E.2, E.3, E.4, E.5, E.6, E.30 e E.32 formam o sistema de ODEs que modela o sistema de produção com o controlador PI, onde z_{bias} é o viés da fração de abertura da válvula de estrangulamento, K_p é a constante proporcional do controlador, τ é a constante de tempo integral e $\hat{P}(t)$ e $\hat{P}_{sp}$ correspondem à pressão controlada e seu *set-point*. O cenário de controle determina a variável de pressão controlada da seguinte forma:

$$\hat{P}(t) = \begin{cases} Cenrio1, & P_{pdg} \\ Cenrio2, & P_{rb} \\ Cenrio3, & P_{rt} \end{cases} \quad (E.33)$$

Apêndice F

Metodologia de estimação de J

Considere-se que uma matriz Jacobiana de dimensão linear N contém N^2 entradas independentes. Por outra parte, a equação 3.110 iguala duas matrizes simétricas e, portanto, impõe $N(N + 1)/2$ restrições aos elementos de J . Portanto, em qualquer aplicação com múltiplas variáveis ($N > 1$), o sistema é subdeterminado de tal forma que não é possível recuperar a matriz Jacobiana completa a partir das séries temporais a não ser que se tenha informações estruturais do sistema. Em particular, em grandes sistemas espacialmente complexos ou redes razoavelmente esparsas, sabe-se que certas variáveis não podem interagir e, portanto, os elementos correspondentes da Jacobiana devem ser zero. Isso resulta em um conjunto de restrições estruturais da forma $J_{ij} = 0$ para certos pares $(i; j)$. Dessa forma, se forem identificadas pelo menos $N(N - 1)/2$ entradas zero, então a série temporal contém informações suficientes para reconstruir todas as entradas restantes da matriz Jacobiana.

Considere-se um caso bidimensional, a Equação 3.110 pode ser expressada como:

$$\begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} \\ J_{21} & J_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Gamma_{11} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{21} & \Gamma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{11} & J_{21} \\ J_{12} & J_{22} \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{F.1})$$

a qual requer as seguintes condições de independência:

$$2J_{11}\Gamma_{11} + 2J_{12}\Gamma_{12} = -2D_{11} \quad (\text{F.2})$$

$$J_{11}\Gamma_{12} + J_{12}\Gamma_{22} + J_{21}\Gamma_{11} + J_{22}\Gamma_{12} = -2D_{12} \quad (\text{F.3})$$

$$2J_{21}\Gamma_{12} + 2J_{22}\Gamma_{22} = -2D_{22} \quad (\text{F.4})$$

com a segunda condição se aplicando a ambos os termos fora da diagonal. O lado esquerdo dessas equações é um sistema linear.

$$Bj = -2d \quad (\text{F.5})$$

onde B é uma matriz, j é um vetor coluna que contém as entradas da matriz Jacobiana, i.e. $j = (J_{11}, J_{21}, J_{12}, J_{22})^T$ e d é o vetor correspondente de D . A Equação F.5 pode ser expandida como:

$$\begin{pmatrix} 2\Gamma_{11} & 0 & 2\Gamma_{12} & 0 \\ \Gamma_{12} & \Gamma_{11} & \Gamma_{22} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{12} & \Gamma_{11} & \Gamma_{22} & \Gamma_{12} \\ 0 & 2\Gamma_{12} & 0 & 2\Gamma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{21} \\ J_{12} \\ J_{22} \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{12} \\ D_{21} \\ D_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{F.6})$$

A forma da Equação F.6 sugere que pode-se resolver j multiplicando B^{-1} na esquerda. No entanto, deve-se observar que B não é invertível porque as duas linhas centrais são idênticas, o que é uma consequência da falta de informação ou restrições estruturais. Suponha-se que a variável 1 não pode depender da variável 2 e, portanto, $J_{12} = 0$. A Equação F.6 pode ser rescrita adicionando a restrição como uma linha adicional,

$$\begin{pmatrix} 2\Gamma_{11} & 0 & 2\Gamma_{12} & 0 \\ \Gamma_{12} & \Gamma_{11} & \Gamma_{22} & \Gamma_{12} \\ \Gamma_{12} & \Gamma_{11} & \Gamma_{22} & \Gamma_{12} \\ 0 & 2\Gamma_{12} & 0 & 2\Gamma_{22} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{21} \\ J_{12} \\ J_{22} \end{pmatrix} = -2 \begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{12} \\ D_{21} \\ D_{22} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F.7})$$

Na prática, normalmente existem restrições adicionais e, portanto, o sistema será sobredeterminado. Nesse caso, é usada a otimização de mínimos quadrados para encontrar uma solução aproximada. A forma da Equação F.7 é muito conveniente para encontrar a solução de mínimos quadrados.

Para o caso multidimensional de N variáveis, é necessário definir o operador de vetorização

$$\text{vec}(X) = (X_{11}, X_{21}, \dots, X_{N1}, X_{12}, \dots)^T \quad (\text{F.8})$$

Dessa forma a equação de Fokker-Planck pode ser reescrita como:

$$B\text{vec}(J) = -2\text{vec}(D) \quad (\text{F.9})$$

ou seja, a vetorização de uma matriz são as colunas da matriz empilhadas umas sobre as outras. Para encontrar a forma geral de B , são vetorizados ambos lados da Equação 3.110, o que produz

$$vec(J\Gamma + \Gamma J^T) = vec(-2D) \quad (F.10)$$

Como a vetorização é um operador linear, podemos extrair -2 da vetorização no lado direito e aplicar a vetorização separadamente aos dois termos no lado esquerdo, portanto

$$vec(J\Gamma) + vec(\Gamma J^T) = -2vec(D) \quad (F.11)$$

Considere-se a identidade:

$$vec(XYZ) = (Z^T \otimes X) vec(Y) \quad (F.12)$$

onde $\otimes$ é o produto matricial Kronecker definido por

$$X \otimes Y = \begin{pmatrix} X_{11}Y & X_{12}Y & \cdots \\ X_{21}Y & X_{22}Y & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (F.13)$$

Substituindo $Y = J$, $Z = \Gamma$ e $X = I$, onde I é a matriz identidade de. Isso produz

$$vec(J\Gamma) = vec(IJ\Gamma) = (\Gamma \otimes I) vec(J) \quad (F.14)$$

que traz o primeiro termo da Equação F.11. Aplicando o mesmo procedimento para o segundo termo,

$$vec(\Gamma J^T) = vec(\Gamma J^T I) = (I \otimes \Gamma) vec(J^T) \quad (F.15)$$

que não é exatamente a forma desejada porque a vetorização da transposta de J aparece em vez da vetorização de J em si. A vetorização de uma matriz e a vetorização de sua transposta não são idênticas. Considere que para o caso bidimensional as duas vetorizações estão relacionadas por

$$vec(J^T) = \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{12} \\ J_{21} \\ J_{22} \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} J_{11} \\ J_{21} \\ J_{12} \\ J_{22} \end{pmatrix} = Cvec(J) \quad (F.16)$$

em que

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (F.17)$$

é uma matriz de permutação. No caso geral, pode-se escrever:

$$vec(J^T) = Cvec(J) \quad (F.18)$$

em que C é agora uma matriz de permutação de tamanho $N^2 N^2$, pode-se construir esta matriz a partir de blocos de tamanho NN como

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots \\ C_{21} & C_{22} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (F.19)$$

em que, C_{nm} é uma matriz NN definida por

$$(C_{nm})_{ij} = \delta_{im} \delta_{nj} \quad (F.20)$$

em que δ é o delta Kronecker.

Usando a matriz de comutação a equação F.15 pode ser reescrita como:

$$vec(\Gamma J^T) = (I \otimes \Gamma) vec(J^T) = (I \otimes \Gamma) Cvec(J) \quad (F.21)$$

Substituindo esta relação nas Equações F.14 e F.11, obtêm-se:

$$\underbrace{\left\{ \begin{pmatrix} (\Gamma \otimes I) + (I \otimes \Gamma) C \\ B \end{pmatrix} \right\}}_B \underbrace{vec(J)}_j = -2 \underbrace{vec(D)}_d \quad (F.22)$$

este sistema ($Bj = -2d$) ainda está subdeterminado. As restrições estruturais devem ser representadas na matriz U . Para este propósito, são reunidos os respectivos elementos de j em uma lista ordenada $\mathcal{U}$ e, em seguida, definir U como uma matriz

$|\mathcal{U}|xN$ com

$$U_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{Se } j_{nm} \text{ não é entrada de } \mathcal{U} \\ 0 & \text{em outro caso} \end{cases} \quad (\text{F.23})$$

Cada linha dessa matriz representa uma das restrições a impor. Assim, a expressão resultante é:

$$\begin{pmatrix} B \\ U \end{pmatrix} j = -2 \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F.24})$$

em que 0 é um vetor coluna contendo zeros $|\mathcal{U}|$. O $()$ que aparece nesta equação deve ser lido como uma notação em bloco para matrizes / vetores, onde as linhas são empilhadas umas sobre as outras. Seja

$$\hat{B} = \begin{pmatrix} B \\ U \end{pmatrix}; \hat{d} = -2 \begin{pmatrix} d \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{F.25})$$

A equação pode ser reescrita como:

$$\hat{B}j = \hat{d} \quad (\text{F.26})$$

Na prática, este será agora um sistema sobredeterminado, de forma que nenhuma solução exata existe. No entanto, encontrar uma aproximação que minimize os quadrados dos desvios em cada linha é um problema bem conhecido. A solução conhecida para este problema é:

$$j = \left(\hat{B}^T \hat{B} \right)^{-1} \hat{B}^T \hat{d} \quad (\text{F.27})$$

em que a expressão $\left(\hat{B}^T \hat{B} \right)^{-1} \hat{B}^T$ é a pseudo-inversa de $\hat{B}$.