11. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Análise de sensibilidade tem o objetivo de determinar os efeitos da variação de um determinado parâmetro ou variável de entrada em variáveis de interesse. Por exemplo, em problemas de otimização, no capítulo anterior, foi mostrado que a sensibilidade da função objetivo em relação às restrições é dada pelo negativo do valor dos multiplicadores de Lagrange, ou seja:

$$\nabla_b S(\mathrm{x}^*) = -\lambda^*.$$

onde b é uma perturbação na restrição ativa. Esta informação é de grande importância para auxiliar na decisão do relaxamento de restrições, como, por exemplo, o aumento de capacidade de uma unidade produtiva. Caso deseja-se analisar a sensibilidade da função objetivo ou de alguma variável do sistema em relação a algum parâmetro, p_j, do problema, que está sujeito a incertezas (de modelagem ou de medida), bastaria calcular:

$$\frac{\partial S(x^*; p)}{\partial p_j} \qquad \text{ou} \qquad \left.\frac{\partial x_i}{\partial p_j}\right|_{x^*}$$

A segunda medida, discutida a seguir, introduz o conceito de matriz de sensibilidade.

Em simulação de processos, o termo "estudo de casos" é freqüentemente usado como sinônimo de análise de sensibilidade das variáveis do processo frente a variações nas condições operacionais (perturbações nas variáveis de entrada), mas com uma abordagem global. O termo "global" refere-se à construção da superfície de soluções no espaço das variáveis independentes e não apenas a tangente em um ponto. Para simulações estacionárias, isto significa resolver o problema:

$$F(x, u; p) = 0$$
$$y = H(x, u; p)$$

onde $x \in \Re^n$ são as variáveis de estado, $u \in \Re^r$, são as entradas do sistema, $y \in \Re^m$ são as saídas medidas e $p \in \Re^s$ são os parâmetros do modelo, para diferentes valores de u. Note que este problema é equivalente à construção de diagramas de bifurcação, onde também resolve-se o problema acima, mas para diferentes valores de p.

Em problemas de ajuste de modelos a dados experimentais, para realizar um bom planejamento de experimentos e uma adequada estimação de parâmetros é importante conhecer a influência que os parâmetros do modelo exercem sobre as variáveis medidas e quais variáveis operacionais são mais adequadas para conduzir os experimentos.

Seja o sistema dinâmico:

$$F(t, x, \dot{x}, u; p) = 0 \quad , \quad x(t_o; p) = x_o(p)$$
$$y = H(x, u; p)$$

onde x, $\dot{x} \in \Re^n$ são as variáveis de estado e suas derivadas em relação a variável independente, t, $u \in \Re^r$, são as entradas do sistema, $y \in \Re^m$ são as saídas medidas e $p \in \Re^s$ são os parâmetros do modelo. Então, uma análise de sensibilidade deste sistema consiste, inicialmente, em encontrar a matriz $W_y(t)$, definida como:

$$W_y(t) = \frac{\partial y}{\partial p}$$

que descreve como as variáveis medidas variam com mudanças nos parâmetros. Esta matriz pode ser obtida através da relação:

$$W_y = \frac{\partial H}{\partial x} W_x(t) + \frac{\partial H}{\partial p}$$

onde $W_x(t) = \frac{\partial x}{\partial p}$ é a matriz de sensibilidade das variáveis de estado em relação aos parâmetros. Esta, por sua vez, pode ser calculada a partir do sistema dinâmico abaixo:

$$\frac{\partial F}{\partial \dot{x}} \dot{W}_x(t) + \frac{\partial F}{\partial x} W_x(t) + \frac{\partial F}{\partial p} = 0 \quad , \quad W_x(t_o) = \frac{\partial x_o}{\partial p}$$

A solução desta equação é favorecida pelos fatos de possuir a mesma matriz de iteração do sistema original e ser um sistema linear em W_x, podendo ser acoplada ao sistema original para ser resolvida simultaneamente.

A solução do problema acima tem a informação de como as matrizes de sensibilidade se comportam durante o transiente do sistema, o que daria uma informação mais completa sobre a importância dos parâmetros na robustez do modelo. Quando uma análise estacionária é suficiente para obter informações sobre quais os parâmetros devem ser considerados para estimação, as equações se reduzem ao seguinte conjunto:

$$F(x, u; p) = 0$$

$$y = H(x, u; p)$$

$$W_y = \frac{\partial H}{\partial x} W_x + \frac{\partial H}{\partial p}$$

$$W_x = -\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial p}$$

onde $\frac{\partial F}{\partial x}$ é a matriz jacobiana do sistema. Observe que esta última equação, escrita na forma:

$$\delta x = -\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial p} \delta p$$

É a mesma expressão usada na construção de diagramas de bifurcação pelo método da continuação, abordado no Capítulo 9.

Deve-se ter em mente, ao realizar os cálculos acima, que as matrizes de sensibilidade podem não ser muito precisas se as derivadas parciais forem obtidas de forma aproximada. No caso da solução do sistema dinâmico ou estacionário, a aproximação da matriz jacobiana é suficiente, na maioria dos casos, pois esta só participa do processo iterativo para obter a solução do problema. Nas matrizes de sensibilidade, estas derivadas fazem parte da solução.

No caso de sistemas dinâmicos lineares, as equações acima simplificam-se para:

$$E(p)\frac{dx}{dt} = A(p)\,x + B(p)\,u \quad , \quad x(t_o;p) = x_o(p)$$

$$y = C(p)\,x + D(p)\,u$$

$$E(p)\dot{W}_x(t) + \frac{\partial E}{\partial p}\dot{x} = A(p)W_x(t) + \frac{\partial A}{\partial p}x + \frac{\partial B}{\partial p}u \quad , \quad W_x(t_o) = \frac{\partial x_o}{\partial p}$$

$$W_y = C(p)W_x + \frac{\partial C}{\partial p}x + \frac{\partial D}{\partial p}u$$

e no estacionário tem-se:

$$W_y = C\,W_x + \left(\frac{\partial D}{\partial p} - \frac{\partial C}{\partial p}A^{-1}B\right)u$$

$$W_x = -A^{-1}\left(\frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p}A^{-1}B\right)u$$

Para fazer uso das matrizes de sensibilidade na estimação de parâmetros deve-se ter em mente que:

$$\delta y = W_y\,\delta p$$

isto é, quanto uma perturbação em um determinado parâmetro vai afetar uma determinada variável medida. A j-ésima coluna da matriz W_y representa a sensibilidade das variáveis de saída em relação ao parâmetro p_j. O maior elemento, em valor absoluto, da i-ésima linha da matriz W_y corresponde ao parâmetro que mais tem influência sobre a variável y_i, desde que o sistema esteja **corretamente escalonado**, inclusive em relação aos parâmetros. Uma forma alternativa de analisar a sensibilidade é através da matriz normalizada:

$$\overline{W}_y = \left[\frac{\overline{p}_j}{\overline{y}_i}\frac{\partial y_i}{\partial p_j}\bigg|_{\overline{x},\overline{y},\overline{p}}\right]_{i,j}$$

onde $\overline{x}, \overline{y}$ e $\overline{p}$ correspondem aos valores do ponto ou trajetória de referência. Na forma matricial temos:

$$\overline{W}_y = (\Diamond y)^{-1}\, W_y\, \Diamond p$$

onde $\Diamond y$ representa a matriz diagonal com os elementos do vetor y.

Uma análise dos valores e vetores singulares da matriz W_y indicará qual o conjunto de parâmetros que terá um maior efeito sobre as saídas medidas do sistema. Assim como uma análise dos valores e vetores singulares da função de transferência do sistema, G, indicará qual o conjunto de variáveis de operação devem ser utilizados para planejar os experimentos:

$$\delta y = G\, \delta u$$

$$G = \frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial H}{\partial u}$$

Pode-se obter aproximações das matrizes discutidas acima por perturbações, onde a seleção do tamanho da perturbação deve ser feita levando-se em conta a magnitude do parâmetro e o erro de truncamento da máquina utilizada, tal como:

$$\delta p_i = [\, p_i + \sqrt{\varepsilon} \cdot \max(|\, p_i \,|,\ \varepsilon_{abs})] - p_i$$

onde ε é a precisão numérica da máquina usada para os cálculos e ε_{abs} é a tolerância absoluta requerida para o *i*-ésimo parâmetro.

Para determinar se o sistema está bem escalonado deve-se verificar o condicionamento das matrizes acima. Por exemplo, para saber se as entradas e saídas estão bem escalonadas, basta calcular o condicionamento da matriz G:

$$\gamma(G) = \overline{\sigma}(G) / \underline{\sigma}(G)$$

onde $\overline{\sigma}(G)$ é o maior valor singular de G e $\underline{\sigma}(G)$ é o menor valor singular não nulo de G. Valores de $\gamma > 100$ devem receber maior atenção no escalonamento. Uma maneira numérica de determinar quais as variáveis devem ser re-escalonadas é através do cálculo do condicionamento mínimo, isto é, determinar as matrizes que pré- e pós-multiplicadas pela matriz G (no exemplo acima) resultam em um γ mínimo (γ^*), isto é:

$$\gamma^*(G) = \min_{L,G} \gamma(L\ G\, R)$$

Considerando L e R matrizes diagonais, então tem-se como resultado do problema de otimização acima quais as saídas e entradas devem ser re-escalonadas, respectivamente, pois:

$$y_e = L\, y \qquad \text{e} \qquad u_e = R\, u$$

No MATLAB, o condicionamento de uma matriz A pode ser obtido através da função *cond*(A), e as matrizes de escalonamento podem ser calculadas pela função:

[*ub*, *D*] = *mu* (*H*, *ones* (2**n*, 2), ‘C’) que calcula os valores singulares estruturados de H com com condicionamento mínimo, onde n é a ordem da matriz A, $H = \begin{bmatrix} 0 & A^{-1} \\ A & 0 \end{bmatrix}$, $\gamma^*(A) = \left(\frac{ub(1)}{ub(2)}\right)^2$,

$L = diag(\mathrm{D}(n+1:2*n))$ e $R = inv(diag(D(1:n)))$. Para verificar se os cálculos estão corretos, basta calcular o $cond(L*A*R)$, que deve ser igual a $\gamma^*(A)$.

Análise dos valores singulares: para a matriz de sensibilidade paramétrica,

$$\delta y = W_y\, \delta p$$

a solução do problema de valores singulares corresponde a resolver o seguinte problema de otimização:

$$\max_{\delta p} \|\, \delta y \,\|^2$$

$$\text{sujeito a } \|\delta p\|^2 = 1$$

onde $\|\delta y\|^2 = \delta y^T\, \delta y$ ou, usando o conceito de multiplicadores de Lagrange:

$$\max_{\delta p} \delta p^T W_y^T W_y\, \delta p - \lambda\, (\delta p^T\, \delta p - 1)$$

cujos δp ótimos correspondem aos vetores característicos de $W_y^T W_y$ ou os vetores singulares de W_y (também chamados de **componentes principais** de variação, pois indicam as direções de máxima variação das saídas y em função dos parâmetros p) e os respectivos multiplicadores de Lagrange são os valores característicos de $W_y^T W_y$ ou o quadrado dos valores singulares de W_y.

Retomando a análise de sensibilidade em problemas de otimização, seja o problema de otimização sujeito a restrições de igualdade:

$$\min S(x; p)$$

$$\text{sujeito a:} \quad h_j(x; p) = 0\,,\ j = 1, 2, ..., m$$

$$x \in \Re^n$$

onde $S(x)$ e $h(x) \in C^2$. A função de Lagrange para este problema é dada por:

$$L(x, \lambda; p) = S(x; p) + \lambda^T h(x; p)$$

Da condição KKT de primeira ordem resulta em:

$$\nabla_x L = \nabla_x S(x) + \nabla_x^T h(x; p)\, \lambda = 0 = F_1(x, \lambda; p)$$

$$\nabla_\lambda L = h(x; p) = 0 = F_2(x, \lambda; p)$$

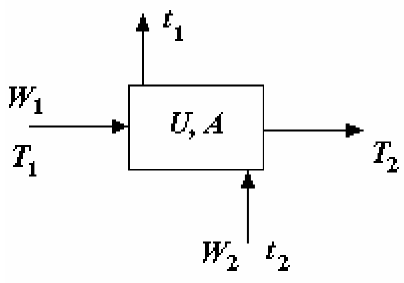
Fazendo o mesmo desenvolvimento para obtenção da matriz de sensibilidade da solução ótima x^* em função do vetor de parâmetros p que foi aplicado ao problema de simulação estacionária, com $F(\tilde{x}\,;\,p) = [F_1\;\; F_2]^T$ e $\tilde{x} = [x\;\lambda]^T$, ou seja:

$$W_{\tilde{x}} = -\left(\frac{\partial F}{\partial \tilde{x}}\right)^{-1} \frac{\partial F}{\partial p}$$

Observa-se que $\frac{\partial F}{\partial \tilde{x}} = \begin{bmatrix} \nabla_x^2 L & M \\ M^T & 0 \end{bmatrix}$ e $\frac{\partial F}{\partial p} = \begin{bmatrix} \nabla_{p,x}^2 L \\ \nabla_{p,\lambda}^2 L \end{bmatrix}$, onde $M = \nabla_x h$. Caso a restrição não tenha dependência com o vetor de parâmetros p, então $\frac{\partial F}{\partial p} = \begin{bmatrix} \nabla_{p,x}^2 S \\ 0 \end{bmatrix}$.

Exemplo: A figura abaixo representa um trocador de calor em contra-corrente, com área de troca térmica ótima A (m^2), onde uma corrente de processo com vazão W_1 = 1000 kg / h e temperatura T_1 = 200 °C é resfriada a T_2 (°C) por uma corrente fria a t_2 = 60 °C e vazão W_2 (kg / h). Considerando cp = 1 kcal / kg °C para as duas correntes e U = 500 kcal / h m^2 °C.

a) Para W_2 = 750 kg / h e A = 10 m^2, analisar a sensibilidade das temperaturas de saída frente a incertezas no coeficiente global de transferência de calor.



b) Para T_2 = 100 °C e t_1 = 195 °C, analisar a sensibilidade da área de troca térmica e da vazão de refrigerante frente a incertezas no coeficiente global de transferência de calor.

c) Para o problema de otimização resolvido no capítulo anterior, ou seja, após calcular a vazão ótima W_2 do refrigerante (kg / h) bem como a área de troca térmica ótima A (m^2) para T_2 = 100 °C, analisar a sensibilidade da solução (W_2, A e custo anual) frente a variações no custo do refrigerante.

dados: investimento do trocador de calor: 3200 (A / 50)^{0,48} \$

custo do refrigerante: 5 x 10^{-6} \$ / kg

custo de manutenção: 2 % do investimento / ano

tempo de operação: 8640 h / ano

critério de desempenho: custo anual = 50 % custo operacional + 10 % ao ano sobre o investimento.