

MODELO DE CALIBRAÇÃO LINEAR PARA ELETRODOS DE CARBONO

Marcello Neiva de Mello, neivamarcello@gmail.com
Rodrigo Valente Torres, rodrigo174@gmail.com
Edson Marcos Leal Soares Ramos, edson@ufpa.br
Silvia dos Santos de Almeida, salmeida@ufpa.br
Adrilayne dos Reis Araújo, adrilayne@ufpa.br

Resumo

Este trabalho tem como objetivo estimar a resistência a flexão do eletrodo de carbono para obter estimativas precisas desta característica. Para tanto, aplica-se a técnica estatística de Calibração Linear, onde, na primeira etapa do processo (experimento de calibração), cria-se um modelo de regressão para a variável resistividade elétrica (Y) e valida-se este modelo a partir da análise de resíduos. Na segunda etapa (calibração) utiliza-se uma ferramenta computacional para o cálculo dos estimadores clássico e inverso do modelo de calibração linear para estimar a resistência a flexão (X). A partir das estimativas e propriedades estatísticas dos estimadores propostos pôde-se definir o estimador inverso como o melhor estimador para estimar a resistência a flexão.

Palavras-Chaves: Calibração Linear; Estimação; Parâmetro.

1. INTRODUÇÃO

A melhoria de produtos, redução de desperdícios e utilização da capacidade total dos recursos são fatores fundamentais para garantir a estabilidade e sucesso de uma indústria no mercado global, o que justifica a constante busca para melhorias contínuas e aperfeiçoamentos dos processos ligados a esta produção, isto é geralmente feito por meio do monitoramento da(s) característica(s) da qualidade (variáveis(is)) deste(s) processo(s). Com a indústria do alumínio essa preocupação não é diferente uma vez que os processos de medição nesta indústria necessitam de atenção especial por exigirem condições como calibração do instrumento e/ou atenção do profissional.

Dentre os métodos que viabilizem a maximização do conhecimento do processo está a calibração estatística ou regressão inversa que é caracterizado estatisticamente por duas variáveis Y e X , relacionadas através de uma função f conhecida, tais que a variável dependente Y está sujeita a um erro ε e a variável X é uma quantidade fixada, sem erro de medida.

Para Almeida (1999), o processo pelo qual a escala de um instrumento de medição é definida ou ajustada a partir de um experimento de calibração é denominado de calibração estatística. A calibração estatística é bastante importante em aplicações práticas em diversas áreas, como por exemplo, biologia, química, física, engenharia, medicina, entre outros.

Neste sentido, este artigo apresenta um exemplo prático de calibração linear no processo de estimação das características do Eletrodo de Carbono, este sendo ferramenta fundamental para obtenção do alumínio puro.

2. METODOLOGIA

2.1. MODELO DE REGRESSÃO LINEAR CLÁSSICO

Considere X uma variável independente e Y uma variável dependente, pode-se determinar uma relação funcional entre as mesmas, a partir de uma amostra de valores de X e Y . Por exemplo, o gasto de uma família (Y) em função da renda (X), isto é,

$$Y_i = f(X_i) + \varepsilon_i, \quad (2.1)$$

em que, Y_i é a magnitude dos gastos gerais da família, X_i é a renda e ε_i é uma variável aleatória, que representa os desvios (erros aleatórios) em torno da verdadeira reta de regressão, devido às causas não controláveis. Neter *et al.* (2005) destaca que o modelo de regressão linear simples é a forma mais fácil de equacionar essas relações, como mostrado em (1), sendo seu principal objetivo modelar o relacionamento entre variáveis preditoras (X_i) e uma variável resposta (Y_i). Este relacionamento é usualmente expresso por uma equação linear como,

$$Y_i = \alpha + \beta X_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.2)$$

em que ε_i 's são os erros aleatórios independentes e identicamente distribuídos com média zero e variância constante. Os parâmetros α e β podem ser estimados a partir do método dos mínimos quadrados, por

$$\hat{\beta} = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} \quad (2.3)$$

e

$$\hat{\alpha} = \bar{Y} - \hat{\beta} \bar{X}, \quad (2.4)$$

onde, $\bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i$; $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$; $S_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})$ e $S_{xx} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$.

2.2. PROBLEMA DE CALIBRAÇÃO LINEAR

Almeida (1999) comenta que o problema de calibração linear (ou regressão inversa) é caracterizado estatisticamente por duas variáveis X e Y relacionadas por meio de uma função f conhecida. Porém, tratando-se de uma forma de predição inversa, o objetivo agora é estimar o valor de X por meio de um valor de Y conhecido.

A calibração tem duas etapas. Na primeira etapa, chamada experimento de calibração será estimada a função f que relaciona as variáveis por meio do modelo $Y = f(x) + \varepsilon$.

Na segunda etapa, a calibração propriamente dita, seleciona-se uma amostra aleatória de tamanho k ($k \geq 1$) da variável Y , chamada Y_0 , correspondente a um único valor de X desconhecido, chamado X_0 . Objetivando-se obter um estimador para o valor desconhecido de X_0 .

2.2.1. O Modelo de Calibração Linear Clássico

O modelo pode ser definido como

$$Y_i = \alpha + \beta X_i + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

e

$$Y_{0i} = \alpha + \beta X_i + \varepsilon_{0i}, \quad i = n+1, \dots, n+k,$$

com os $\varepsilon_i, \dots, \varepsilon_n$ e $\varepsilon_{0n+1}, \dots, \varepsilon_{0n+k}$ mutuamente independentes e identicamente distribuídos, com média zero e variâncias constantes. Os valores X_1, \dots, X_n são pré-fixados e pertencem a um intervalo I , chamado intervalo de calibração e α, β, X_0 e σ^2 são os parâmetros do modelo.

A função de verossimilhança do modelo, com a suposição de normalidade é dada por

$$L(\alpha, \beta, \sigma^2, X_0 / X_1, \dots, X_n, Y_1, \dots, Y_n, Y_{0n+1}, \dots, Y_{0n+k})$$

$$= \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2} \right)^{\frac{n+k}{2}} \exp - \frac{1}{2\sigma^2} \left\{ \sum_{i=1}^n (Y_i - \alpha - \beta X_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (Y_{0i} - \alpha - \beta X_0)^2 \right\}.$$

Igualando a zero a função de verossimilhança, sendo β e α estimados por (2.3) e (2.4), têm-se os estimadores de máxima verossimilhança de X_0 e σ^2 , dados por

$$\bar{X}_{0c} = \frac{Y_0 - \hat{\alpha}}{\hat{\beta}}, \quad \hat{\beta} \neq 0, \quad (2.4)$$

e

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n+k} \left[\sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{\alpha} - \hat{\beta}X_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{n+k} (Y_{0i} - \bar{Y}_0)^2 \right],$$

$$\text{onde } \bar{Y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \quad \bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad \text{e } \bar{Y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{k=n+1}^{n+k} Y_{0i}.$$

No caso, o estimador de \hat{X}_0 é chamado de estimador clássico ou \hat{X}_{0c} . O estimador $\hat{\sigma}^2$, para σ^2 , depende tanto dos n valores iniciais como dos k últimos valores de Y_i . Porém, na prática é muito comum $k = 1$.

Os estimadores $\hat{\alpha}$ e $\hat{\beta}$ dependem apenas da primeira etapa do modelo de calibração. Para Graybill (1976) estes estimadores são lineares, não viciados e possuem variância mínima. Um outro estimador de X_0 pode ser obtido reescrevendo o modelo (2.4) e considerando a suposição falsa de que os ε_i são independentes de Y_i , para $i = 1, \dots, n$, e utilizando o método dos mínimos quadrados.

$$\hat{X}_i = \hat{\gamma} + \hat{\phi}Y_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

$$\text{onde } \hat{\gamma} = \bar{X} - \hat{\phi}\bar{Y} \text{ e } \hat{\phi} = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}.$$

Logo, a partir de uma amostra aleatória de tamanho k da variável aleatória Y_0 , com função de densidade determinada por X_0 , o estimador pontual do parâmetro X_{0l} , chamado estimador inverso, é dado por

$$\hat{X}_{0l} = \hat{\gamma} + \hat{\phi}\bar{Y}_0,$$

$$\text{onde } \bar{Y}_0 = \frac{1}{k} \sum_{i=n+1}^{n+k} Y_{0i}.$$

2.3. ELETRODOS DE CARBONO

Para obtenção do alumínio, os eletrodos de carbono, que são compostos de coque e piche e são a matéria-prima do carbono, são chumbados em hastes de ferro e dispostos em

cubas eletrolíticas, ficando em contato com um banho eletrolítico que contém criolita (Na_3AlF_6) e sais fundidos de fluoreto, no qual encontra-se dissolvida a alumina (Al_2O_3).

A partir do uso de corrente elétrica, gera-se calor e dissocia-se a molécula da alumina, que libera o alumínio do oxigênio, o alumínio liberado vai para o fundo da cuba eletrolítica e o oxigênio reage com o carbono do eletrodo formando gases CO e CO_2 , consumindo desta forma os eletrodos de carbono, este processo denomina-se Eletrólise. Assim, se houver uma passagem deficiente de corrente, o eletrodo não será consumido.

Porém, para se chegar a esta conclusão, torna-se necessário mensurar e avaliar as características de qualidade do eletrodo, neste caso, a resistividade elétrica e a resistência a flexão. Sendo assim, supondo a dificuldade de obtenção da variável X (resistência a flexão), utiliza-se o modelo de calibração linear para estimação desta, a partir da variável correspondente Y (resistividade elétrica). Em outros termos aplicar uma regressão inversa.

3. RESULTADOS E APLICAÇÕES

Sejam as variáveis resistividade elétrica (Y) e resistência à flexão (X), do Eletrodo de Carbono, resultantes de 77 amostras, obtidas a partir de medições. Utiliza-se coeficiente de correlação de Pearson para verificar e quantificar a correlação existente entre as variáveis, o qual apresentou um valor de $-0,725$ (moderada correlação negativa).

Para o experimento de calibração selecionou-se 75 observações das variáveis X e Y . Em seguida, para a calibração, selecionou-se 2 observações da variável Y (Y_0) e por meio destas obteve-se o valor de X desconhecido, chamado X_0 .

Utilizou-se o teste de aderência proposto por Ryan e Joiner (1976), na variável resistividade elétrica (Y) e verificou-se que a mesma segue distribuição Normal. O modelo de regressão obtido (primeira etapa) é expresso por

$$\text{RESISTIVIDADE ELÉTRICA} = 64,2 - 0,759 \times \text{RESISTÊNCIA A A FLEXÃO} \quad (3.1)$$

A validação do modelo (3.1) é realizada a partir da análise residual. Assim, inicialmente realizou-se o teste de aderência de Kolmogorov-Smirnov (LILLIEFORE, 1967) nos resíduos e verificou-se que os mesmos seguem distribuição Normal. Souza (1998) comenta que em geral a presença de tendência ou de variabilidade crescente ou decrescente dos resíduos é indicativo de distorção, situação não observada nos resíduos produzidos pelo modelo (3.1), logo admite-se homocedasticidade, além disso, o princípio de independência não foi violado. Sendo assim, pôde-se desenvolver o modelo de calibração linear às variáveis do Eletrodo de Carbono.

Devido a falta de softwares específicos para aplicação da técnica, fez-se necessário o desenvolvimento de um algoritmo específico na planilha eletrônica Excel da Microsoft, para automatizar o procedimento de modelagem.

As Tabelas 1 e 2 apresentam as estimativas para a resistência a flexão (X_0) obtidas pelo modelo de Calibração utilizando o estimador clássico (X_{0c}) e o estimador inverso (X_{0I}), respectivamente. Nelas, pode-se verificar que nas duas observações o estimador inverso apresenta o menor erro quadrático médio, ou seja, suas estimativas são mais precisas, mais próximas do valor real.

Tabela 1: Estimativas para X_0 Obtidas pelo Modelo de Calibração Utilizando o Estimador Clássico.

k	\hat{X}_{0c}	Y_0	$\hat{\alpha}$	$\hat{\beta}$	$\hat{\sigma}^2$	Var	EQM
1	10,3002	56,3800	64,1997	-0,7592	1,5841	1,5538	1,5538

2 15,2925 52,5900 64,1997 -0,7592 1,5841 1,5273 1,5273

Tabela 2: Estimativas para X_0 Obtidas pelo Modelo de Calibração Utilizando o Estimador Inverso.

k	\hat{X}_{0I}	Y_0	$\hat{\gamma}$	$\hat{\phi}$	$\hat{\sigma}^2$	Var	EQM
1	11,5856	56,3800	50,6068	-0,6921	1,5841	0,3926	0,8521
2	14,2087	52,5900	50,6068	-0,6921	1,5841	0,3916	0,7183

Sendo assim, o modelo de calibração obtido para se estimar a resistência a flexão dos eletrodos de carbono é dado por

$$\hat{X}_{0I} = 50,6068 - 0,6921 \times Y_0. \quad (3.2)$$

4. CONCLUSÃO

Este trabalho teve como objetivo estimar a partir da calibração linear, a resistência a flexão (X) do eletrodo de carbono para obter estimativas precisas da característica resistência à flexão do eletrodo. Para tal, se fez necessário, na primeira etapa do trabalho, separar-se uma amostra contendo $n = 75$ observações sendo X (resistência à flexão) e Y (resistividade elétrica) conhecidas e outra contendo $k = 2$ observações em que somente Y é conhecido. Na primeira etapa da calibração linear, construiu-se um modelo de regressão linear a partir das n observações. Posteriormente, validou-se tal modelo a partir da análise de resíduos que consiste em suposição da normalidade, independência e homocedasticidade dos resíduos. Tendo um modelo válido, partiu-se para a segunda etapa da calibração que consiste na obtenção de estimativas para o valor de X , calculadas a partir dos estimadores clássico e inverso.

Após a obtenção das estimativas fez-se necessário a comparação dos estimadores para verificação de qual deles possui maior eficiência estatística, essa comparação é feita por meio do erro quadrático médio, ou seja, o estimador a ser usado é o que apresenta o menor valor para esta propriedade. A partir das tabelas 1 e 2 pôde-se observar as estimativas e as propriedades referentes a cada estimador e verificou-se que o estimador inverso apresentou os melhores resultados.

Portanto, o modelo de calibração linear com estimador inverso fornece valores que mais se aproximam do real, podendo ser adotado na estimação da característica resistência à flexão, diminuindo os custos e o tempo gasto em medições, mantendo a precisão.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ALMEIDA, S. S. Calibração Absoluta Funcional Sem a Suposição de Normalidade. 1999. 77f. Dissertação (Mestrado em Estatística), Programa de Pós-Graduação em Estatística, UFPE, Recife, PE.
- [2] GRAYBILL, F. A. Theory and Application of Linear Model. North Situate: Duxbury Press, 1976.
- [3] LILLIEFORE, H. W. On the Kolmogorov-Smirnov Test for Normality with Mean and Variance Unknown, *Journal of the American Statistical Association*, n. 62, p. 399-402, 1967.
- [4] NETER, J.; KUTNER, M. H.; NACHTSHEIN, C. J.; WASSERMAN, W. Applied Linear Statistical Models. 5.ed., Columbus: McGraw-Hill/Irwin, 2005.

- [5] RYAN, T. A. Jr.; JOINER, B. L. Normal Probability Plots and Tests for Normality, *Technical Report*, The Pennsylvania State University: Statistics Department, 1976.
- [6] SOUZA, G. S. Introdução aos Modelos de Regressão Linear e Não Linear. Brasília: Embrapa-SPI/ Embrapa-SEA, 1998. 505p.