

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO NORTE FLUMINENSE
LABORATÓRIO DE ENGENHARIA E EXPLORAÇÃO DE PETRÓLEO

PROJETO ENGENHARIA
DESENVOLVIMENTO DO SOFTWARE:
DESENVOLVIMENTO DO SOFTWARE:
AVALIAÇÃO DAS CONDIÇÕES EXPERIMENTAIS PARA
SEPARAÇÃO DE COMPONENTES DO PETRÓLEO POR
CROMATOGRAFIA LÍQUIDA UTILIZANDO PLANEJAMENTO
FATORIAL
TRABALHO DA DISCIPLINA PROGRAMAÇÃO PRÁTICA

Versão 1:
JHONNY COSTA CARVALHO
Versão 2:
ARTHUR VERSIANI GOMES DA SILVA
PEDRO DANIELUCI CARDOZO
Prof. André Duarte Bueno

MACAÉ - RJ
Versão 2018 - Semestre 2019/1
Versão 2023 - Semestre 2023/2

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Escopo do problema	1
1.2	Objetivos	2
2	Especificação	4
2.1	Especificação do software - requisitos	4
2.1.1	Definições da interface	4
2.2	Nome do sistema/produto	5
2.2.1	Requisitos funcionais	5
2.2.2	Requisitos não funcionais	5
2.3	Casos de uso	5
2.4	Diagrama de caso de uso geral	6
2.5	Diagrama de caso de uso Específico	7
3	Elaboração	8
3.1	Experimento de cromatografia líquida:	8
3.1.1	Preparação da Amostra:	8
3.1.2	Escolha da Fase Estacionária e Móvel:	8
3.1.3	Injeção da Amostra:	9
3.1.4	Eluição dos Componentes:	9
3.1.5	Detecção e Análise:	9
3.2	Cálculo da porcentagem dos compostos SARA:	9
3.3	Análise de domínio	10
3.4	Formulação teórica	10
3.4.1	Planejamentos fatoriais com ponto central	11
3.4.2	Modelos empíricos em estudo de triagem	12
3.4.3	Estimativa dos erros para os efeitos através de repetições	14
3.4.4	Estimativa dos erros para os efeitos, sem repetições	15
3.4.5	Estimativa dos erros para os efeitos e coeficientes a partir das repetições no ponto central	16
3.4.6	Identificação dos efeitos e coeficientes significativos	16
3.4.7	Avaliação do modelo	18

4 AOO – Análise Orientada a Objeto	22
4.1 Diagramas de classes	22
4.1.1 Dicionário de classes	24
4.2 Diagrama de seqüência – eventos e mensagens	24
4.2.1 Diagrama de sequência geral	25
4.3 Diagrama de comunicação – colaboração	27
4.4 Diagrama de máquina de estado	27
4.5 Diagrama de atividades	28
5 Projeto	30
5.1 Projeto do sistema	30
5.2 Projeto orientado a objeto – POO	31
5.3 Diagrama de componentes	32
5.4 Diagrama de implantação	33
6 Implementação	35
6.1 Código fonte	35
7 Teste	51
7.1 Teste 1: Descrição	51
7.2 Teste 2: Resultados	51
8 Documentação	53
8.1 Documentação do usuário	53
8.1.1 Como instalar o software	53
8.2 Documentação para desenvolvedor	54
8.2.1 Dependências	54
8.2.2 Como gerar a documentação usando doxygen	54

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de caso de uso – Caso de uso geral	6
2.2	Diagrama de caso de uso específico	7
3.1	Experimento Cromatografia Líquida	9
3.2	Planejamento 2 ² com ponto central.	12
3.3	Replesentação gráfica do valor p para um teste unilateral.	18
4.1	Diagrama de classes	23
4.2	Diagrama de seqüência	26
4.3	Diagrama de comunicação.	27
4.4	Diagrama de máquina de estado para a classe CFPC22_02.	28
4.5	Diagrama de atividades do metodo minimos quadrados da classe CFP22_02.	29
5.1	Diagrama de componentes.	33
5.2	Diagrama de implantação	34
7.1	Tela do programa mostrando xxx	52
7.2	Tela do programa mostrando resultados	52
8.1	Documentacao do doxygen	54
8.2	Documentacao doxygen	55
8.3	Documentacao do doc.gen	55

Lista de Tabelas

2.1 Exemplo de caso de uso	6
3.1 Análise de variância para regressão multipla	21

Capítulo 1

Introdução

Neste trabalho desenvolve-se o software para avaliação das melhores condições experimentais para a obtenção da fração de hidrocarbonetos saturados do petróleo por meio de planejamento fatorial com ponto central com o intuito de minimizar o uso de solventes e obter um maior rendimento na separação desta fração.

1.1 Escopo do problema

O petróleo bruto inalterado contém carbono ($\sim 80 - 87\%$), hidrogênio ($\sim 12 - 15\%$), enxofre ($\sim 0,1-5\%$), oxigênio (0,1-4,5%) e nitrogênio (0,1 - 1,5%). Grande parte do nitrogênio, enxofre e oxigênio estão associados às resinas e asfaltenos e são frequentemente denominados compostos NSO. Outros elementos presentes no petróleo incluem vários metais, em particular níquel e vanádio, que geralmente estão presentes em pequenas quantidades. A composição do petróleo bruto contém em média 57% de hidrocarbonetos saturados (S), 29% de hidrocarbonetos aromáticos (A) e 14% de resinas (R) e asfaltenos (A) [Killops and Killops, 2013]. No entanto, esta composição média pode variar significativamente devido, por exemplo, à origem da matéria orgânica, à história térmica e às alterações secundárias ocorridas em reservatório após acumulação.

O petróleo contém também vários componentes lipídicos preservados, designados biomarcadores, os quais podem ser associados com compostos precursores biológicos, porque seus esqueletos básicos são preservados durante a diagênese e grande parte da catagênese. Esses biomarcadores podem estar presentes nas frações de hidrocarbonetos saturados e aromáticos, tais como os esteranos normais, hopanos e os esteróides aromáticos. Porém, geralmente representam menos de 1% em peso de óleos brutos inalterados [Killops and Killops, 2013].

A análise composicional confiável das frações do petróleo é muito importante porque fornece informações que afetam desde a exploração de petróleo até a produção, transporte e refino [Bissada et al., 2016]. Por exemplo, na análise do sistema petrolífero, em correlações com a rocha geradora, na previsão de reservatórios com potencial para precipitar as-

faltenos, na resolução de problemas ambientais, dentre outros [Ashoori and Vanini, 2016]. Assim, para fornecer adequadamente estas informações efetua-se a separação dos componentes SARA para determinar a concentração relativa de cada grupo químico e obter frações de alta pureza para posteriores análises por cromatografia gasosa acoplada a espectrometria de massas (CG-EM) e análise isotópica, por exemplo [Bissada et al., 2016].

Vários procedimentos podem ser adotados para separação das frações SARA, tais como cromatografia em fase líquida clássica (CLC), cromatografia em camada delgada por detecção por ionização em chama (do inglês *thin layer chromatography - flame ionization detection*, TLC-FID), cromatografia líquida de alta performance (HPLC), dentre outros [Karlsen and Larter, 1991, Fan and Buckley, 2002, Jiang et al., 2008]. A CLC, apesar de ser uma técnica simples, é amplamente utilizada como etapa preliminar para análises instrumentais mais sensíveis como CG-EM especialmente quando não se dispõe de outros métodos de separação. Vale ressaltar, no entanto, que este método requer quantidades significativas de solventes, adsorventes e estes ainda podem interferir na adequada separação das frações presentes na matriz analisada [Collins et al., 2006].

Assim, aliada à necessidade da indústria, faz-se necessário a busca por processos que otimizem a utilização desses materiais (solventes orgânicos e adsorventes) usados na caracterização do petróleo. Uma ferramenta capaz de determinar melhores condições experimentais com consequente diminuição da quantidade de solvente utilizado é o planejamento fatorial [Brasil and Araújo, 2014].

Dada a importância desta etapa para análises posteriores, uma vez que a separação das frações do petróleo pode ser influenciada pelas quantidades de adsorvente e de solvente utilizados, este trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um software com o auxílio de planejamento fatorial, com ponto central, determinar as melhores condições experimentais para a obtenção da fração de saturados, aromáticos e polares (NSO) do petróleo.

1.2 Objetivos

Os objetivos deste projeto de engenharia são:

- Objetivo geral:

- Determinar, a partir do planejamento fatorial com ponto central, as melhores condições experimentais para a obtenção da fração de hidrocarbonetos saturados, aromáticos e polares do petróleo utilizando a técnica de cromatografia em fase líquida clássica em coluna aberta, visando diminuir a quantidade de solvente utilizado e aumentar a porcentagem de recuperação da fração.

- Objetivos específicos:

- Otimizar o tempo calculando o volume do solvente e o seu tipo;

- Calcular a porcentagem das três frações de compostos do petróleo;
- Calcular desvio padrão e variância;
- Utilizar o planejamento fatorial para avaliação preliminar dos parâmetros da análise SARA;
- Determinar as melhores condições para separação em coluna cromatográfica clássica a partir de Planejamento Composto Central e teste F;

Capítulo 2

Especificação

Apresenta-se neste capítulo do projeto de engenharia a concepção, a especificação do sistema a ser modelado e desenvolvido.

2.1 Especificação do software - requisitos

Construir um software para fins acadêmicos, que será livre, licença GNU/GPL v2.0, multiplataforma e orientado a objeto em C++. Este será em modo texto, pois há pouca interação do usuário com o software. Inicialmente, o usuário definirá os parâmetros de entrada obtidos em laboratório, inserindo-os manualmente via teclado ou pela leitura de um arquivo de texto (formato ASCII). Utilizando essas informações, o software calculará a variância, desvio padrão, teste t e outras estatísticas para avaliação dos coeficientes significativos. Além disso, na segunda versão, será possível calcular a porcentagem dos compostos SARA contidos na amostra de petróleo e otimizar o tempo com o cálculo do volume do solvente que deve ser utilizado. Os resultados serão apresentados ao usuário em conformidade com a ANOVA.

2.1.1 Definições da interface

O software tem interface de entrada em modo texto e saídas em modo texto.

2.2 Nome do sistema/produto

Nome	Avaliação das condições experimentais para separação de componentes do petróleo por cromatografia líquida utilizando planejamento fatorial 2.
Componentes principais	Caracterizar as amostras de óleos a partir dos parâmetros de entradas que informam o volume e os compostos SARA.
Missão	Otimizar o uso de solvente, calculando o seu volume e o tipo que será usado.

2.2.1 Requisitos funcionais

Apresenta-se a seguir os requisitos funcionais.

RF-01	O Engenheiro Químico analista deverá ter liberdade para escolher o tipo de entrada de dados (teclado ou disco).
RF-02	Deve permitir o carregamento de arquivos criados pelo software
RF-03	O usuário terá disponível os resultados em arquivos de texto.

2.2.2 Requisitos não funcionais

RNF-01	Os cálculos devem ser feitos utilizando-se Porcentagem dos resultados obtidos.
RNF-02	O programa deverá ser multi-plataforma, podendo ser executado em <i>Windows, GNU/Linux</i> .

2.3 Casos de uso

Um caso de uso descreve um ou mais cenários de uso de software, exemplos de uso, como o sistema interage com usuários externos (atores). Ademais, ele deve representar uma sequência típica de uso do programa (a execução de determinadas tarefas padrão). Também deve representar as exceções, casos em que o usuário comete algum erro, em que o sistema não consegue realizar as tarefas solicitadas.

A Tabela 2.1 que exemplifica um caso de uso do sistema, bem como os diagramas de casos de uso

Tabela 2.1: Exemplo de caso de uso

Nome do caso de uso:	Experinto de cromatografia líquida e suas probabilidades estatísticas.
Resumo/descrição:	Geração de coeficientes correspondentes as suas varia- ves no qual informará se são ou não significativa para o processo de obtenção da fração de saturados.
Etapas:	<ol style="list-style-type: none"> 1. Etapas Experimento. 2. Parâmetros das Amostras. 3. Diluição da Amostra. 4. Separação das Frações de Hidrocarbonetos. 5. Entrada dados cromatografia. 6. Calcular TStudent. 7. Calcular FFisher. 8. Gerar ANOVA. 9. Análise de Rsultados.
Cenários alternativos:	Um cenário alternativo envolve uma entrada errada do usuário.

2.4 Diagrama de caso de uso geral

O diagrama de caso de uso geral da Figura 2.1 mostra o Engenheiro realizando etapas do experimento de cromatografia líquida e posteriormente entrando com os valores de entradas após ter escolhido o tipo de Planejamento, com esses dados o software efetua os calculos da ANOVA, posteriormente analisando os resultados.

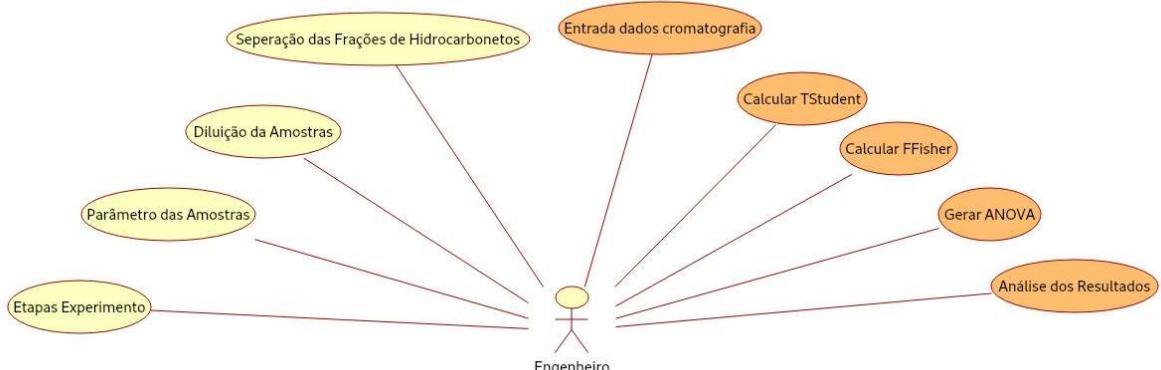


Figura 2.1: Diagrama de caso de uso – Caso de uso geral

2.5 Diagrama de caso de uso Específico

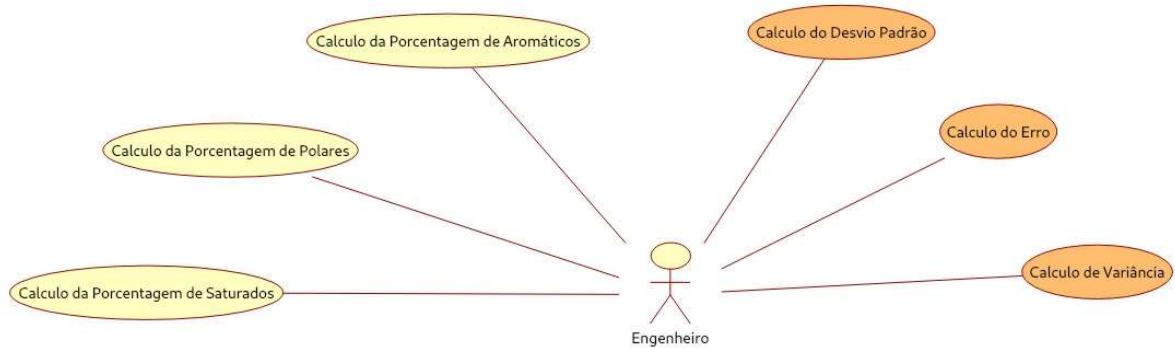


Figura 2.2: Diagrama de caso de uso específico

Capítulo 3

Elaboração

Depois da definição dos objetivos, da especificação do software e da montagem dos primeiros diagramas de caso de uso, a equipe de desenvolvimento do projeto de engenharia passa por um processo de elaboração que envolve o estudo de conceitos relacionados ao sistema a ser desenvolvido, a análise de domínio e a identificação de pacotes.

Na elaboração fazemos uma análise dos requisitos, ajustando os requisitos iniciais de forma a desenvolver um sistema útil, que atenda às necessidades do usuário e, na medida do possível, permita seu reuso e futura extensão.

Eliminam-se os requisitos "impossíveis" e ajusta-se a idéia do sistema de forma que este seja flexível, considerando-se aspectos como custos e prazos.

3.1 Experimento de cromatografia líquida:

A Cromatografia Líquida é uma técnica amplamente utilizada na análise e separação de compostos presentes no petróleo, incluindo os compostos SARA (Saturados, Aromáticos, Resinas e Asfaltenos). O método SARA é uma abordagem comum para caracterizar a composição do petróleo em termos dessas quatro frações principais.

3.1.1 Preparação da Amostra:

- A amostra de petróleo é preparada para a análise. Isso pode envolver a diluição da amostra e, em alguns casos, a remoção de impurezas que podem interferir na análise.

3.1.2 Escolha da Fase Estacionária e Móvel:

- A fase estacionária é escolhida com base nas propriedades dos compostos a serem separados. Uma fase estacionária típica pode ser uma coluna empacotada com um material poroso, como sílica gel ou alumina.

- A fase móvel, geralmente um solvente ou uma mistura de solventes, é escolhida com base na polaridade e seletividade desejadas.

3.1.3 Injeção da Amostra:

- A amostra preparada é injetada na coluna cromatográfica.

3.1.4 Eluição dos Componentes:

- A fase móvel (eluente) é bombeada através da coluna, interagindo com a fase estacionária.
- Os diferentes compostos SARA interagem de maneiras distintas com a fase estacionária e móvel. Compostos mais saturados tendem a interagir menos com a fase estacionária, enquanto compostos mais aromáticos podem interagir mais fortemente.

3.1.5 Detecção e Análise:

- A medida que os componentes SARA se movem pela coluna, são detectados e registrados.

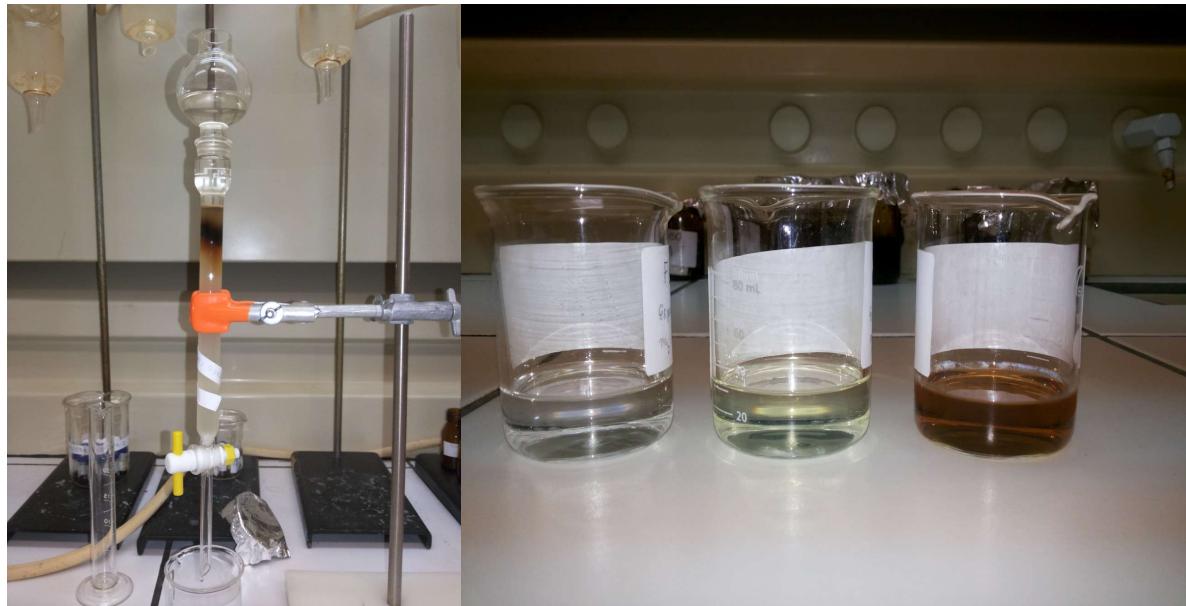


Figura 3.1: Experimento Cromatografia Líquida

3.2 Cálculo da porcentagem dos compostos SARA:

Após a eluição dos compostos através da coluna cromatográfica, as frações são coletadas e frequentemente sujeitas a técnicas adicionais para isolar e identificar os compostos

presentes, a técnica utilizada para este trabalho é a de evaporação, em que as frações coletadas podem ser evaporadas para remover o solvente utilizado na eluição, este processo leva em consideração os pontos de ebulição dos solventes utilizados em comparação aos da fração de Hidrocarbonetos. Com isso, teremos os valores dos volumes dos compostos SARA do petróleo e fazendo uma avaliação do volume inicial da amostra de óleo cru, podemos obter a porcentagem de cada fração.

3.3 Análise de domínio

- Área relacionada:
 - A principal área relacionada a este projeto é a estatística aplicada a Geoquímica do petróleo.
 - Sub-área relacionada:
 - Planejamento Fatorial

3.4 Formulação teórica

De acordo com Breitkreitz et al., (2014), independente da área de pesquisa, é necessário conhecer as variáveis (ou fatores) que afetam o sistema em estudo e a extensão desta influência, a fim de melhorar o processo de uma maneira geral, com o objetivo de reduzir tempo e custos. Assim, no método multivariado realiza-se o menor número de experimentos necessários para extrair o máximo de informação dos dados coletados de modo a avaliar e/ou otimizar um produto ou processo.

Quando se realiza um planejamento fatorial o objetivo é estudar variáveis estatisticamente independentes, ou seja, aquelas que podem ter seus valores alterados e controlados de forma independenteumas das outras ([Breitkreitz et al., 2014]). Assim, com a realização do planejamento fatorial pode-se determinar as quantidades de ensaios a serem realizados de acordo com os números de variáveis envolvidas no processo, é possível identificar as variáveis que apresentarão respostas significativas para o experimento, além de otimizar tempo, capital e reagentes químicos, gerando assim menos resíduos ao meio ambiente.

Adicionalmente, o planejamento fatorial avalia os parâmetros que têm efeitos significativos em seus resultados experimentais, avaliando simultaneamente as variáveis envolvidas no processo. Essas interações são as principais componentes de muitos processos de otimização, levando às condições de relevância dos parâmetros em estudo ([Teófilo et al., 2006]).

O tipo de planejamento fatorial que será utilizado é uma escolha do pesquisador, mas de forma geral, para um estudo inicial com o intuito de se fazer uma triagem de

variáveis e identificar aquelas que possuem maior influência na resposta, sugere-se o uso de planejamentos fracionários ou completos ([Breitkreitz et al., 2014]).

O planejamento fatorial normalmente é adequado para estudar, de forma eficiente e econômica, o efeito conjunto de vários fatores sobre uma variável resposta de interesse.

O planejamento fatorial do tipo 2^2 é considerável o mais comum, por praticar menores números de níveis, no entanto, se mostra vantajoso, pois, indica tendências de resultados para análises de métodos posteriores ([Cunico et al., 2008]). Uma boa ferramenta de escolha após os resultados obtidos do planejamento fatorial é o gráfico de superfície de resposta, onde conseguimos obter o ponto máximo de obtenção das frações do petróleo através da cromatográfica líquida ([Teófilo et al., 2006]).

Quando se pretende otimizar custos e tempo de pesquisa é interessante o implemento do planejamento fatorial com ponto central. Através dele consegue-se estimar o desvio padrão dos resultados sem a necessidade de realizar repetições para cada resultado obtido. O cálculo da variância em experimentos feitos com ponto central se dá através da média das variáveis envolvidas ([Teófilo et al., 2006]).

O objetivo e determinar, a partir do planejamento fatorial com ponto central, as melhores condições experimentais para a obtenção da fração de hidrocarbonetos saturados do petróleo utilizando a técnica de cromatografia em fase líquida clássica em coluna aberta, visando diminuir a quantidade de solvente e adsorvente utilizado, aumentar a porcentagem de recuperação da fração e, como consequência, reduzir a quantidade de resíduos líquidos e sólidos gerados ao meio ambiente

3.4.1 Planejamentos fatoriais com ponto central

Em muitos casos, a realização de repetições autênticas pode ser algo inconveniente por diversas razões. Para contornar este infortúnio e obter uma boa estimativa dos erros, um experimento é normalmente incluído no centro do planejamento, em que o valor médio dos níveis de todas as variáveis é empregado. São os conhecidos experimentos no ponto central (nível zero). Deste modo, é possível avaliar a significância dos efeitos ou coeficientes, tanto em planejamentos de triagem (completos ou fracionários) como em metodologias de superfície de resposta (discutidos mais adiante). Além desta vantagem, recomenda-se este tipo de experimento pelas seguintes razões: o risco de perder a relação não linear entre os intervalos é minimizado e é possível estimar um modelo razoável e verificar se há falta de ajuste.

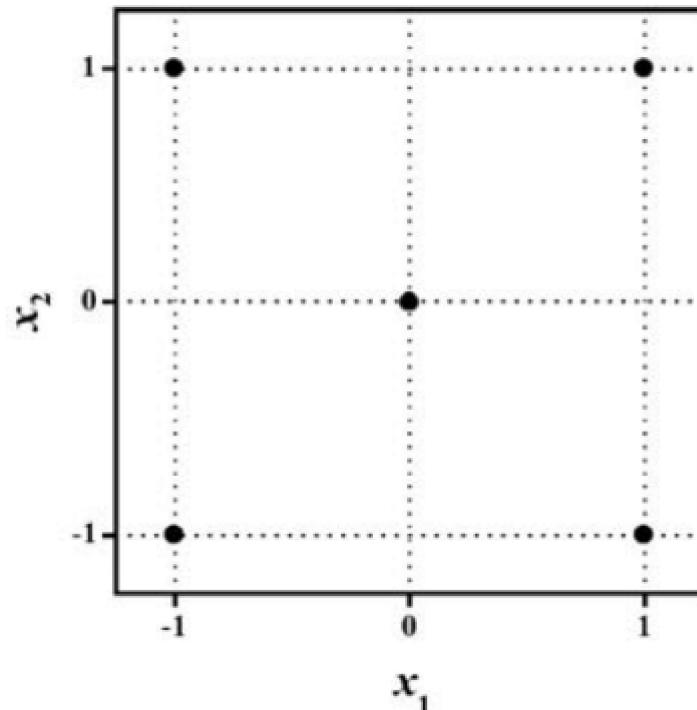


Figura 3.2: Planejamento 2² com ponto central.

Logicamente não há como fugir das repetições, mas o número destas, na maioria dos casos, é significativamente reduzido. No entanto, esta metodologia é possível de ser aplicada somente quando se utilizam variáveis quantitativas, visto que, para variáveis qualitativas, não há como adicionar níveis no ponto central.

Os cálculos para estimativa de efeitos e coeficientes relacionados aos planejamentos com ponto central serão discutidos no item Modelos empíricos em estudo de triagem.

3.4.2 Modelos empíricos em estudo de triagem

Pode-se assumir, desde o início do experimento, que o sistema estudado (domínio experimental) é regido por alguma função que é descrita pelas variáveis experimentais. Normalmente esta função pode ser aproximada por um polinômio, o qual pode fornecer uma boa descrição entre os fatores e a resposta obtida. A ordem deste polinômio é limitada pelo tipo de planejamento usado.

Planejamentos fatoriais de dois níveis, completos ou fracionários, podem estimar apenas efeitos principais e interações.

Planejamentos fatoriais de três níveis (ponto central) podem estimar, além disso, o grau de curvatura na resposta.

Para descrever tais modelos em um estudo de triagem, são utilizados os polinômios mais simples, ou seja, aqueles que contêm apenas termos lineares. Considerando um exemplo para três variáveis, x_1 , x_2 e x_3 , dois polinômios seriam:

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + e \quad (3.1)$$

$$y = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + b_{12}x_1x_2 + b_{13}x_1x_3 + b_{23}x_2x_3 + b_{123}x_1x_2x_3 + e \quad (3.2)$$

Segundo a Equação 1, o coeficiente b_0 é o valor populacional da média de todas as respostas obtidas, b_1 , b_2 e b_3 são os coeficientes relacionados com as variáveis x_1 , x_2 e x_3 , respectivamente, e é o erro aleatório associado ao modelo e, para o caso da Equação 2, b_{12} , b_{13} , b_{23} são os coeficientes para as interações x_1x_2 , x_1x_3 , x_2x_3 e b_{123} é o coeficiente para a interação $x_1x_2x_3$.

A partir do planejamento montado, pode-se construir a matriz de coeficientes de contraste, de acordo com a Tabela 1. A matriz de coeficientes de contraste X , juntamente com o vetor de respostas y , obtido experimentalmente, será utilizada para cálculo dos coeficientes do modelo, conhecidos também como vetor de regressão.

O modelo procurado, descrito pelas Equações 1 e 2 pode ser representado matricialmente pela Equação 3

$$\hat{y} = Xb \quad (3.3)$$

em que \hat{y} é o vetor das respostas estimadas pelo modelo e b o vetor de regressão.

Uma maneira de determinar o vetor de regressão b é através do método dos quadrados mínimos, definido pela Equação 4, em que X^t indica a transposta de X

$$b = (X^t X)^{-1} X^t y \quad (3.4)$$

$(X^t X)^{-1}$ é a matriz inversa do produto da transposta da matriz X com ela mesma.

Para um planejamento fatorial completo, a matriz X é quadrada e ortogonal, onde n corresponde ao número de ensaios. Isto ocorre pois as colunas de X não estão normalizadas, portanto $X^{-1} = X^t$. Neste caso, a Equação 8 se resume à Equação 5

$$b = \left(\frac{1}{n}\right) X^t y \quad (3.5)$$

A Equação 4 é geral e pode ser empregada para se fazer a estimativa de efeitos e coeficientes para todos os planejamentos descritos neste artigo, no entanto a Equação 5 é específica para o planejamento fatorial completo, não sendo aplicável aos outros planejamentos descritos.

Como as variáveis são estudadas em dois níveis codificados, cada efeito satisfaz à variação de duas unidades da variável correspondente. Se considerarmos os fatores individualmente, pode-se provar que o valor de cada coeficiente do modelo é a metade do valor do efeito correspondente, exceto para b_0 , cujo valor é o mesmo do calculado para

seu efeito. Desta maneira, o modelo empregado para descrever as respostas é elaborado em função dos efeitos por unidade de variação individual.

3.4.3 Estimativa dos erros para os efeitos através de repetições

Normalmente os resultados obtidos em experimentos de planejamento fatorial completo ou fracionário com repetições consistem de uma pequena amostra de um hipotético conjunto maior, representado por uma população. Destes dados podemos obter a média amostral, a variância amostral e o desvio padrão amostral, como se segue:

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^r y_i \quad (3.6)$$

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^r (y_i - \bar{y})^2}{(r - 1)} \quad (3.7)$$

$$s = \pm \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^r (y_i - \bar{y})^2}{(r - 1)}} \quad (3.8)$$

em que r é o número de replicatas, isto é, o número de ensaios realizados em um mesmo ponto experimental (nível), y_i são os valores de cada observação individual, \bar{y} é o valor médio, s^2 é a variância e s o desvio padrão.

A soma dos desvios da média amostral de r replicatas é necessariamente zero. Isto requer que $\sum(y_i - \bar{y}) = 0$ constitua uma restrição linear nos desvios usados no cálculo de s^2 . Está subentendido que com $r-1$ replicatas é possível determinar a que falta. Os r resíduos $y - \bar{y}$ e, consequentemente, a soma dos seus quadrados juntamente com a variância amostral são ditas ter, por esta razão, $r-1$ graus de liberdade. A perda de um grau de liberdade está associada à necessidade de substituir a média populacional pela média amostral derivada dos dados. Desta maneira, quando repetições genuínas são realizadas em uma série de condições experimentais, a variação entre suas observações pode ser usada para estimar o desvio padrão de uma simples observação e, consequentemente, o desvio dos efeitos. Todos os ensaios, inclusive repetições, devem ser realizados aleatoriamente, refazendo todas as etapas do experimento. As repetições realizadas desta maneira são consideradas genuínas.

Em um experimento em que cada ensaio foi realizado r vezes, se o valor de r for pequeno, por exemplo, $2 \leq r \leq 10$, haverá poucos graus de liberdade para o cálculo da variância. Uma maneira para se obter um maior número de graus de liberdade é realizando uma estimativa conjunta das variâncias, conforme a Equação 9

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (ri - 1) si^2}{\sum_{i=1}^n (ri - 1)} \quad (3.9)$$

$$\nu = \sum_{i=1}^n (ri - 1) \quad (3.10)$$

O resultado da Equação 9 reflete a variância conjunta (s^2_c) de cada observação individual y_i sendo o erro padrão igual à raiz quadrada do mesmo. A Equação 10, que é exatamente o denominador da Equação 9 é, portanto, o número de graus de liberdade da estimativa conjunta, designada como ν .

Considerando a realização de repetições autênticas, que cada efeito é uma combinação linear dos valores dey_i dos n ensaios, com coeficientes c iguais a $+2/n$ e $-2/n$. Levando em consideração a aleatoriedade dos ensaios, tais valores são estatisticamente independentes e apresentam a mesma variância populacional σ^2 . Neste caso, por definição, as correlações entre todas as variáveis são nulas, e a variância da combinação linear das variáveis aleatórias pode ser dada por.

$$\sigma^2 = \sum_i c^2 i \sigma^2 i \quad (3.11)$$

Transportando a Equação 11 para o nosso mundo amostral, pode-se provar que a variância de cada efeito é dada por

$$V_{(ef)} = \frac{4s^2}{\sum_{i=1}^n r_i} \quad (3.12)$$

em que s^2_c é dada pela Equação 9 e r_i é o número de replicatas em cada ensaio n .

E, finalmente, para calcular o valor do erro de cada efeito, basta extrair a raiz quadrada de $V_{(ef)}$.

3.4.4 Estimativa dos erros para os efeitos, sem repetições

Uma maneira de estimar erros de efeitos sem a realização de repetições é supor que interações de altas ordens para $k \geq 3$ não são significativos e, portanto, são erros experimentais nos valores dos efeitos.

Aplicando a Equação 9 sobre estes efeitos de interação e fazendo algumas considerações, obtém-se a variância dos efeitos conforme a 3.13

$$V_{(ef)} = \frac{\sum (ef_{ii})^2}{l} \quad (3.13)$$

em que ef_{ii} são os efeitos de interação considerados como erros experimentais e l é o número total de efeitos considerados.

É preciso estar atento ao utilizar este tipo de estimativa do erro. Nem sempre os efeitos de altas ordens são irrelevantes e, se tais efeitos forem incluídos no cálculo, os erros tornam-se altos e, desta maneira, não é possível distinguir com confiabilidade aqueles que são realmente importantes.

O número de graus de liberdade utilizado para avaliação dos efeitos agregados a estes erros é o mesmo número total de efeitos considerados como erros, isto é, o valor 1 da Equação 13.

3.4.5 Estimativa dos erros para os efeitos e coeficientes a partir das repetições no ponto central

Conforme mencionado anteriormente, uma das grandes vantagens da inclusão de experimentos no centro do planejamento é devida à estimativa do erro com poucas repetições, normalmente entre 3 e 5.

A partir das repetições realizadas é possível obter a média e a variância das replicatas de acordo com as Equações 10 e 11, respectivamente.

Por outro lado, sendo os coeficientes obtidos através da Equação 8, nota-se que a matriz $(X^t X)^{-1}$ apresenta grande influência na variância dos parâmetros de regressão. O produto desta matriz com o valor da variância obtida através das repetições no ponto central (Equação 11) fornece a matriz $V(b)$ conhecida como matriz de variância-covariância (Equação 14). A matriz $V(b)$ é simétrica e os elementos de sua diagonal são as variâncias dos parâmetros de regressão, na mesma ordem em que elas aparecem na equação de regressão. Os elementos fora da diagonal são as covariâncias entre os parâmetros de regressão. A raiz quadrada dos elementos da diagonal principal da matriz $V(b)$ determina os valores correspondentes dos erros padrão (s_{bi}) dos coeficientes calculados (Equação 15).

$$V(b) = (X^t X)^{-1} s^2 \quad (3.14)$$

$$s_{bi} = \pm \sqrt{v(b)_{ij,i}} = 1, 2, \dots, n \quad (3.15)$$

3.4.6 Identificação dos efeitos e coeficientes significativos

Na literatura há diferentes métodos para se avaliar efeitos e coeficientes significativos; entre os mais usados destaca-se a análise de variância (ANOVA), o gráfico de probabilidade normal (distribuição normal) e a comparação de efeitos com uma medida independente da variabilidade. Neste trabalho, as avaliações de significância para a decisão estatística, tanto para efeitos como para coeficientes de modelos, foram realizadas empregando o teste t (distribuição de Student), através do valor p .

Para realizar a interpretação correta utilizando o valor p é necessário compreender os testes de hipótese e significância, conforme descrito abaixo.

Em muitos casos, formula-se uma hipótese estatística com o propósito de rejeitá-la ou invalidá-la. Por ex., se o desejo é decidir se um sistema é diferente de outro, formula-se a hipótese de que não há diferença entre os sistemas. Essa hipótese é denominada nula e representada por H_0 . Qualquer hipótese diferente da pré-fixada é denominada hipótese alternativa e é normalmente representada por H_1 .

Se uma hipótese for rejeitada quando deveria ser aceita, diz-se que foi cometido um erro tipo I. Se, por outro lado, uma hipótese for aceita quando deveria ter sido rejeitada, diz-se que foi cometido um erro do tipo II. Em ambos os casos foi tomada uma decisão errada ou foi cometido um erro de julgamento.

Para que qualquer teste de hipótese ou regra de decisão seja adequada, eles devem ser planejados de modo que os erros de decisão sejam reduzidos ao mínimo.

Ao testar uma hipótese estabelecida, a probabilidade máxima, representada freqüentemente por α , com a qual se sujeitaria a correr o risco de um erro do tipo I é denominada nível de significância do teste.

Se, por ex., é escolhido um nível de significância 0,05 ou 5%, há então cerca de 5 chances em 100 da hipótese nula ser rejeitada, quando deveria ser aceita, isto é, há uma confiança de 95% de que se tomou uma decisão correta. Nesses casos, diz-se que a hipótese é rejeitada ao nível de significância 0,05, o que significa que a probabilidade de erro seria de 0,05.

Considerando a hipótese nula de que o valor do efeito se confunde com seu erro, pode-se formular a seguinte regra de decisão:

- a) rejeição da hipótese nula com 5% de significância, quando o valor de t_{calc} situar-se fora do intervalo entre $\pm t\alpha (|t_{calc}| \geq t\alpha)$. Isso equivale a dizer que o valor estatístico amostral observado é significativo no nível definido e,
- b) aceitação da hipótese, caso contrário.

Uma maneira alternativa de concluir o teste de hipótese é comparar o valor p do teste estatístico amostral com o nível de significância α . O valor p do teste estatístico amostral é o menor nível de significância para que se rejeite H_0 . Neste sentido, compara-se o valor p com α e, se o valor $p \leq \alpha$ rejeita-se H_0 , caso contrário H_0 é aceito. A vantagem de se conhecer o valor p está na possibilidade de se avaliar todos os níveis de significância para que o resultado observado possa ser estatisticamente rejeitado. A representação gráfica do valor p é descrita na Figura 3.

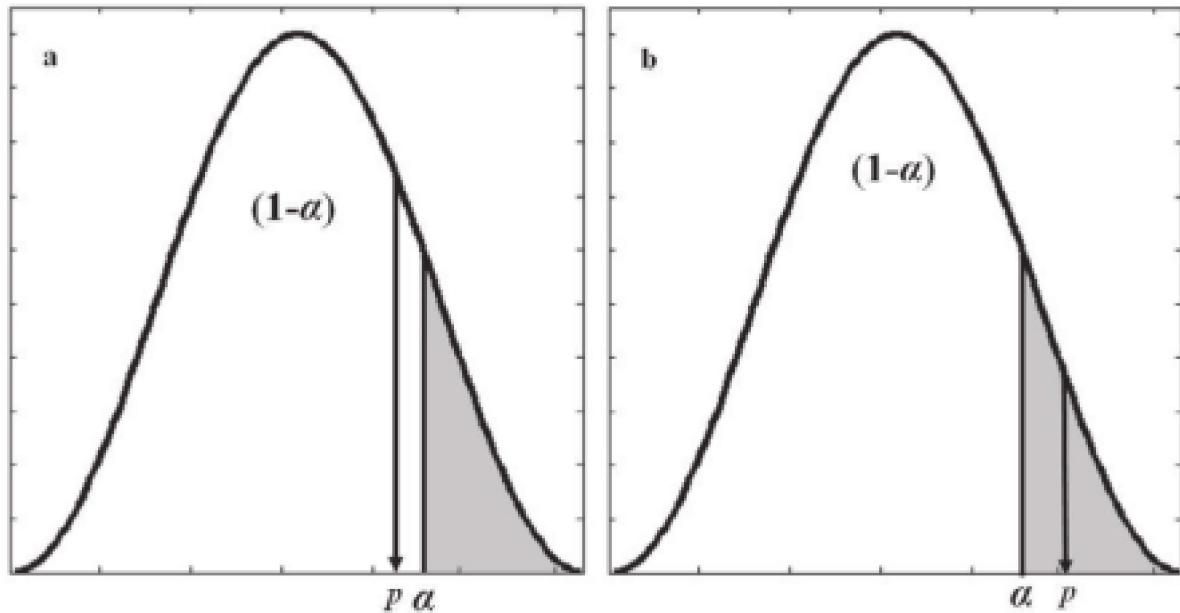


Figura 3.3: Represenração gráfica do valor p para um teste unilateral.

Conforme as Figuras 3.2(a e b), o nível de significância α é a área hachurada no gráfico de distribuição. Na Figura 3.2a a área correspondente ao valor p é maior que o nível de significância, portanto, o valor calculado do teste estatístico está fora da região crítica, o que implica em aceitar H_0 . Para a Figura 3b a área do valor p é menor que o nível de significância e assim, o valor calculado do teste estatístico está dentro da região crítica, o que implica em rejeitar H_0 . É importante ressaltar que esta discussão é válida tanto para testes unilaterais quanto para bilaterais.

Especificamente, o valor p representa a probabilidade de validade do erro envolvido no resultado observado, isto é, como representativo da população. Por ex., levando em consideração o valor de um efeito, se o valor do teste estatístico calculado (razão entre o efeito e seu erro) apresentar um grande desvio da distribuição de Student, ele provavelmente descreve algo mais que o resíduo experimental. Desta maneira, será significativo dentro de um intervalo de confiança e assim, $|t_{calc}| \geq t_\alpha$ ou $p \leq \alpha$, para o número de graus de liberdade em questão.

3.4.7 Avaliação do modelo

O modelo obtido pode não ser exatamente aquele que descreve a região estudada do sistema e, neste caso, não pode ser usado para fazer estimativas para deslocamento e muito menos para extrair conclusões sobre a região ótima. A maneira mais confiável de se avaliar a qualidade do ajuste do modelo é empregando a análise de variância (ANOVA).

Na ANOVA a variação total da resposta é definida como a soma quadrática de dois componentes: a soma quadrática da regressão (SQ_{regr}) e a soma quadrática dos resíduos (SQ_{res}). A soma quadrática da variação total, corrigida para a média (SQ_{total}) pode, assim, ser escrita como a Equação 16

$$SQ_{total} = SQ_{regr} + SQ_{res} \quad (3.16)$$

em que SQ_{regr} e SQ_{res} são apresentadas com mais detalhes nas Equações 17 e 18, respectivamente.

$$SQ_{regr} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (3.17)$$

$$SQ_{res} = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \bar{y})^2 \quad (3.18)$$

Da Equação 24, m é o número total de níveis do planejamento, isto é, pontos experimentais do planejamento \hat{y}_i é o valor estimado pelo modelo para o nível i e \bar{y}_i é o valor médio das replicatas (r). No entanto, como há somente replicatas no ponto central, a média das replicatas nos níveis (+) mais e (-) menos é o próprio valor observado do ensaio naquele nível. Note que o segundo somatório indica que se deve fazer o quadrado das diferenças inclusive com cada repetição.

As replicatas realizadas no ponto central deixarão um resíduo para cada observação y_i . A soma quadrática destes resíduos fornece a soma quadrática residual somente no nível zero.

A Equação 25 indica que o quadrado da diferença entre o valor de cada observação (y_i) e o valor estimado (\hat{y}_i) e, inclusive das replicatas (y_j) em cada nível (m), fornece a soma quadrática residual de todos os níveis.

Quando algum modelo é ajustado aos dados, a soma quadrática do erro puro é sempre uma parte da soma quadrática dos resíduos. Então, cada resíduo pode ser desmembrado em duas partes, isto é

$$(y_{ij} - \hat{y}_i) = (y_{ij} - \bar{y}) - (\hat{y}_i - \bar{y}_i) \quad (3.19)$$

Pela Equação 19, o primeiro termo da direita diz respeito à diferença entre o valor de cada observação individual no nível e a média de todas as observações naquele nível. Já o segundo termo corresponde à diferença entre o valor estimado no nível e a média de todas as observações naquele nível. A subtração entre estes dois termos fornece como resposta o resíduo de cada observação individual. Para evitar os termos negativos na Equação 19, tomam-se as suas diferenças quadráticas e obtém-se Equação 20

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{r_i} (y_{ij} - \bar{y})^2 + \sum_{i=1}^m (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2 \quad (3.20)$$

O primeiro termo da direita é chamado de soma quadrática do erro puro e está relacionado exclusivamente com os erros aleatórios das replicatas. Já o segundo termo da direita é chamado de soma quadrática da falta de ajuste, pois ele é uma medida da discrepância

entre a resposta do modelo de previsão (\hat{y}_i) e a média das replicatas (\bar{y}_i) realizadas no conjunto de condições experimentais.

A Equação 20 pode ser resumida da seguinte maneira

$$SQ_{res} = SQ_{ep} + SQ_{faj} \quad (3.21)$$

Para cada fonte de variação (regressão, resíduos, falta de ajuste, erro puro e total), é necessário obter o número de graus de liberdade. Não introduzindo detalhes, pode-se provar que o número de graus de liberdade para as Equações 17, 18 e 20 são $p-1$, $n-p$ e $(n-m) + (m-p)$, respectivamente, em que p é o número de parâmetros (coeficientes) do modelo, n é o número total de observações (ensaios) e m é o número de níveis do planejamento. O número de graus de liberdade para as outras fontes de variação pode ser obtido por cálculos algébricos simples.

A divisão da soma quadrática de cada fonte de variação pelo seu respectivo número de grau de liberdade fornece a média quadrática (MQ). A razão entre a média quadrática da regressão (MQ_{reg}) pela média quadrática dos resíduos (MQ_{res}), que nada mais é do que a razão entre duas variâncias, pode ser usada para comparar tais fontes de variação através do teste F (distribuição de Fisher), levando em consideração seus respectivos números de graus de liberdade. O mesmo pode ser feito para a razão entre a média quadrática da falta de ajuste (MQ_{faj}) pela média quadrática do erro puro (MQ_{ep}).

Assim, como foi realizada a avaliação dos efeitos e coeficientes empregando o teste t, através do valor p , o mesmo será feito para comparar as duas fontes de variação entre si, empregando-se neste caso o teste F (Equação 22)

$$\frac{MQ_1}{MQ_2} = F\nu_1\nu_2 \quad (3.22)$$

em que MQ_1 e MQ_2 são as médias quadráticas das fontes de variação 1 e 2, respectivamente, e ν_1, ν_2 são seus respectivos números de graus de liberdade.

Exemplificando, a razão entre as médias quadráticas da falta de ajuste e do erro puro é o valor calculado do teste estatístico (F_{calc}), que é usado para comparar qual é mais significativo. Pode-se formular uma hipótese nula (H_0) considerando que não há diferença entre as fontes de variação comparadas. Esta hipótese se reflete na seguinte regra de decisão:

a) rejeição da hipótese nula com 5% de significância, quando o valor de F_{calc} se situar fora do intervalo definido por $F\alpha$ ($|F_{calc}| \geq F\alpha$), ou seja, $p \leq \alpha$. Isso equivale a dizer que o valor estatístico amostral observado é significativo no nível definido e as fontes de variação comparadas são diferentes.

b) Aceitação da hipótese nula, caso contrário. Se H_0 for rejeitada para MQ_{faj}/MQ_{ep} , isto é, $p \leq \alpha$, então há uma falta de ajuste significativa ao nível de probabilidade e número de graus de liberdade definidos (normalmente, $\alpha = 0,05$) e o modelo não é adequado.

Em termos práticos, um bom modelo necessita ter uma regressão significativa e uma

falta de ajuste não significativa. Isto equivale a dizer que a maior parte da variação total das observações em torno da média deve ser descrita pela equação de regressão e o restante certamente, ficará com os resíduos. Da variação que fica com os resíduos é esperado que a maior parte fique com o erro puro, que é o erro experimental, e não com a falta de ajuste, que está diretamente relacionada com o modelo.

Outros parâmetros para observar se toda variação em torno da média foi explicada pela regressão são o valor do coeficiente de variação R^2 (Equação 23) e o gráfico dos resíduos. O valor de R^2 representa a fração da variação que é explicada pela falta de ajuste do modelo (Equação 23). Quanto mais próximo de 1 o valor do coeficiente estiver, melhor estará o ajuste do modelo às respostas observadas.

$$R^2 = \frac{SQ_{res}}{SQ_{total}} \quad (3.23)$$

Note que o erro puro não explica nada do modelo, então o valor máximo possível de R^2 é

$$R^2 = \frac{SQ_{total} - SQ_{ep}}{SQ_{total}} \quad (3.24)$$

A análise de variância (ANOVA), de acordo com as Equações descritas para avaliação do modelo, está resumida na tabela abaixo.

Fonte de variação	SQ	Nº de graus de liberdade	MQ	F
Regressão	SQ_{regr}	$p - 1$	MQ_{regr}	MQ_{regr}/MQ_{res}
Resíduos	SQ_{res}	$n - p$	MQ_{res}	
Falta de ajuste	SQ_{faj}	$m - p$	MQ_{faj}	MQ_{faj}/MQ_{ep}
Erro puro	SQ_{ep}	$n - m$	MQ_{ep}	
Total	SQ_{total}	$n - 1$		

Tabela 3.1: Análise de variância para regressão multipla

Uma boa prática é examinar a distribuição dos resíduos, pois ajuda a verificar se não há nada de errado com o modelo. Neste caso, pode-se fazer um gráfico dos valores estimados pelo modelo (\hat{y}_i) com os valores da diferença entre os valores observados experimentalmente (y_i) e seus respectivos valores estimados, isto é, $(y_i - \hat{y}_i)$. Se os resíduos não estiverem aleatoriamente distribuídos, pode-se desconfiar do modelo e investir em outros recursos para sua melhoria.

Capítulo 4

AOO – Análise Orientada a Objeto

A terceira etapa do desenvolvimento de um projeto de engenharia, no nosso caso um software aplicado a engenharia de petróleo, é a AOO – Análise Orientada a Objeto. A AOO utiliza algumas regras para identificar os objetos de interesse, as relações entre os pacotes, as classes, os atributos, os métodos, as heranças, as associações, as agregações, as composições e as dependências.

O modelo de análise deve ser conciso, simplificado e deve mostrar o que deve ser feito, não se preocupando como isso será realizado.

O resultado da análise é um conjunto de diagramas que identificam os objetos e seus relacionamentos.

4.1 Diagramas de classes

O diagrama de classes é apresentado na Figura 4.1.

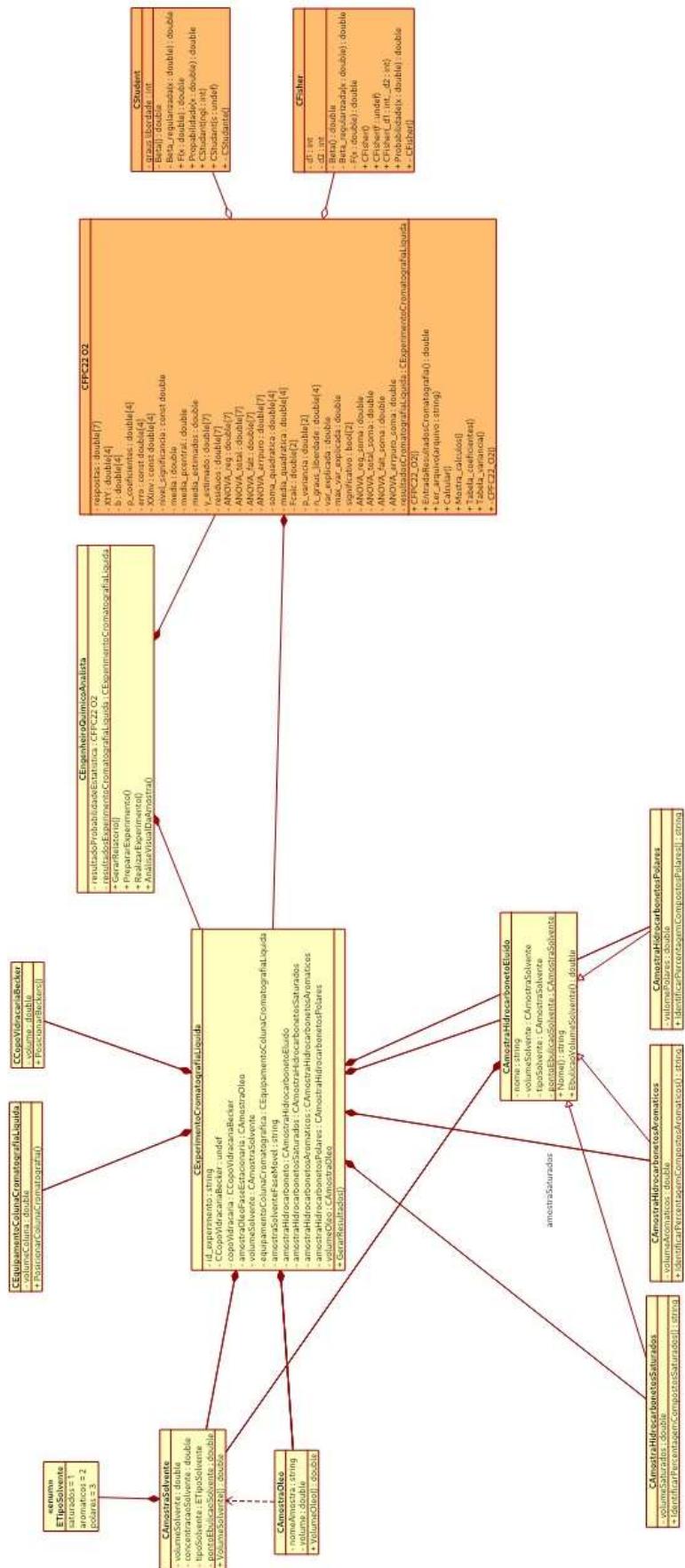


Figura 4.1: Diagrama de classes

4.1.1 Dicionário de classes

- Classe CExperimentoCromatografiaLiquida: representa o método de separação das frações dos componentes dos Hidrocarbonetos.
- Classe CEquipamentoColumaCromatografaliquida: representa a coluna responsável por armazenar as fases estacionárias e móveis da cromatografia.
- Classe CCopaVidraçariaBecker: representa o recipiente responsável por armazenar as frações de Hidrocarbonetos.
- Classe CAmostraSolvete: representa o volume de solvente utilizado com fase móvel.
- Classe CAmostraOleo: representa o volume de óleo utilizado como fase estacionária.
- Classe CAmostraHidrocarbonetiEluido: representa o volume da fração de Hidrocarbonetos eluido pelo volume de solvente.
- Classe CAmostraHidrocarboneteSaturado: representa o volume da fração de Hidrocarbonetos Saturados.
- Classe CAmostraHidrocarbonetosAromatico: representa o volume da fração de Hidrocarbonetos Aromáticos.
- Classe CAmostraHidrocarbonetosPolares: representa o volume da fração de Hidrocarbonetos Polares.
- Classe CFisher: representa o cálculo do teste F fisher para a avaliação do modelo de entre 2 amostras.
- Classe CStudent: representa o cálculo do teste t student para avaliação para múltiplas amostras..
- Classe CFPC22_02: representa os cálculos dos efeitos das variáveis em análises gerando a ANOVA.
- Classe CEngenheiroQuímicoAnalítico: representa pessoa responsável por preparar e realizar experimento, obter os resultados e gerar um relatório.

4.2 Diagrama de seqüência – eventos e mensagens

O diagrama de seqüência enfatiza a troca de eventos e mensagens e sua ordem temporal. Contém informações sobre o fluxo de controle do software. Costuma ser montado a partir de um diagrama de caso de uso e estabelece o relacionamento dos atores (usuários e sistemas externos) com alguns objetos do sistema.

4.2.1 Diagrama de sequência geral

Veja o diagrama de seqüência na Figura 4.2.

- O diagrama de sequência aqui representado, demonstra o caminho utilizado para realizar o experimento de cromatografia líquida, obtendo assim os dados pedidos pelo simulador que por sua vez chama a classe CFPC22_02 para calcular as variâncias. Em seguida o software calcula todos os parâmetros necessários para criar ANOVA.

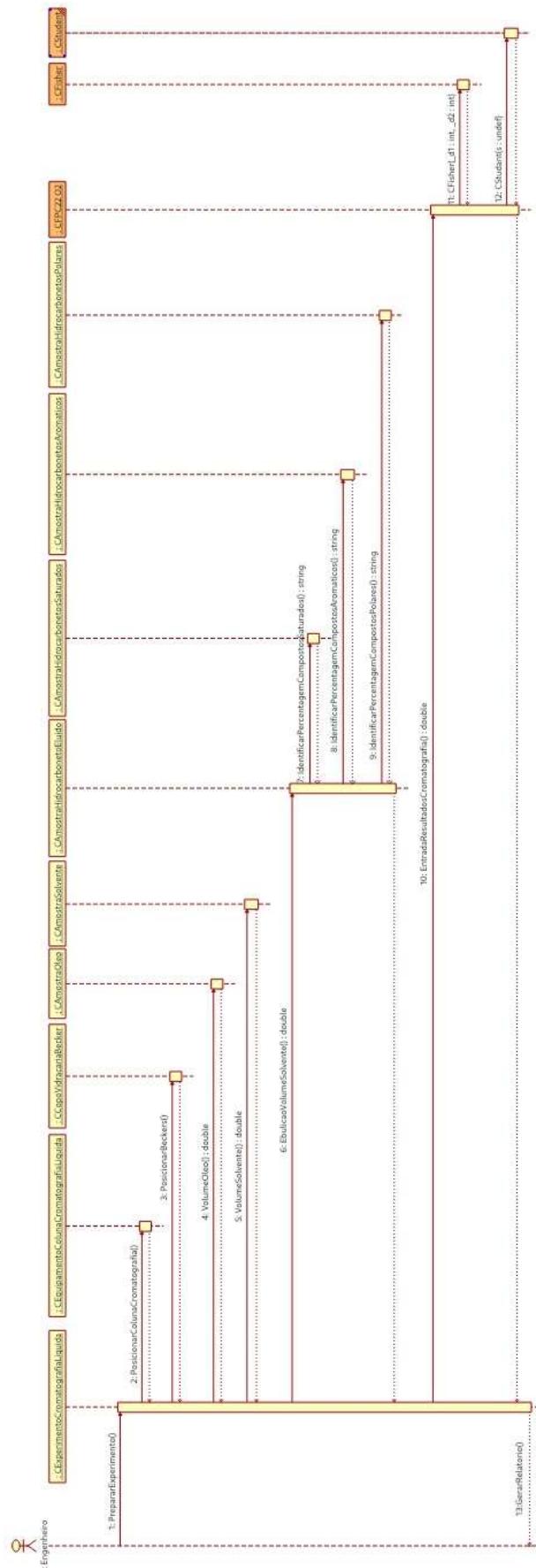


Figura 4.2: Diagrama de seqüência

4.3 Diagrama de comunicação – colaboração

No diagrama de comunicação o foco é a interação e a troca de mensagens e dados entre os objetos. Veja na Figura 4.3 o diagrama de comunicação mostrando a sequência de operações que cada um dos objetos realiza durante a cromatografia e análise estatísticas dos resultados.

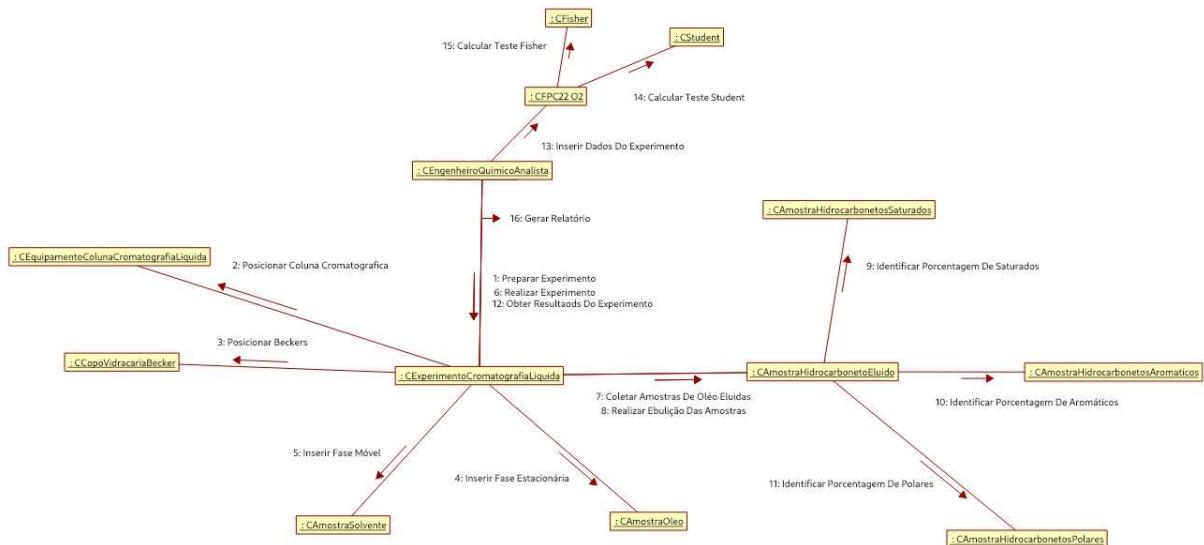


Figura 4.3: Diagrama de comunicação.

4.4 Diagrama de máquina de estado

Um diagrama de máquina de estado representa os diversos estados que o objeto assume e os eventos que ocorrem ao longo de sua vida ou mesmo ao longo de um processo (histórico do objeto). É usado para modelar aspectos dinâmicos do objeto.

A Figura 4.5 demonstra os estados e as transições entre eles realizadas durante o experimento de cromatografia líquida e inserção de dados na Classe CFPC22_02 que apresenta durante a execução do software.

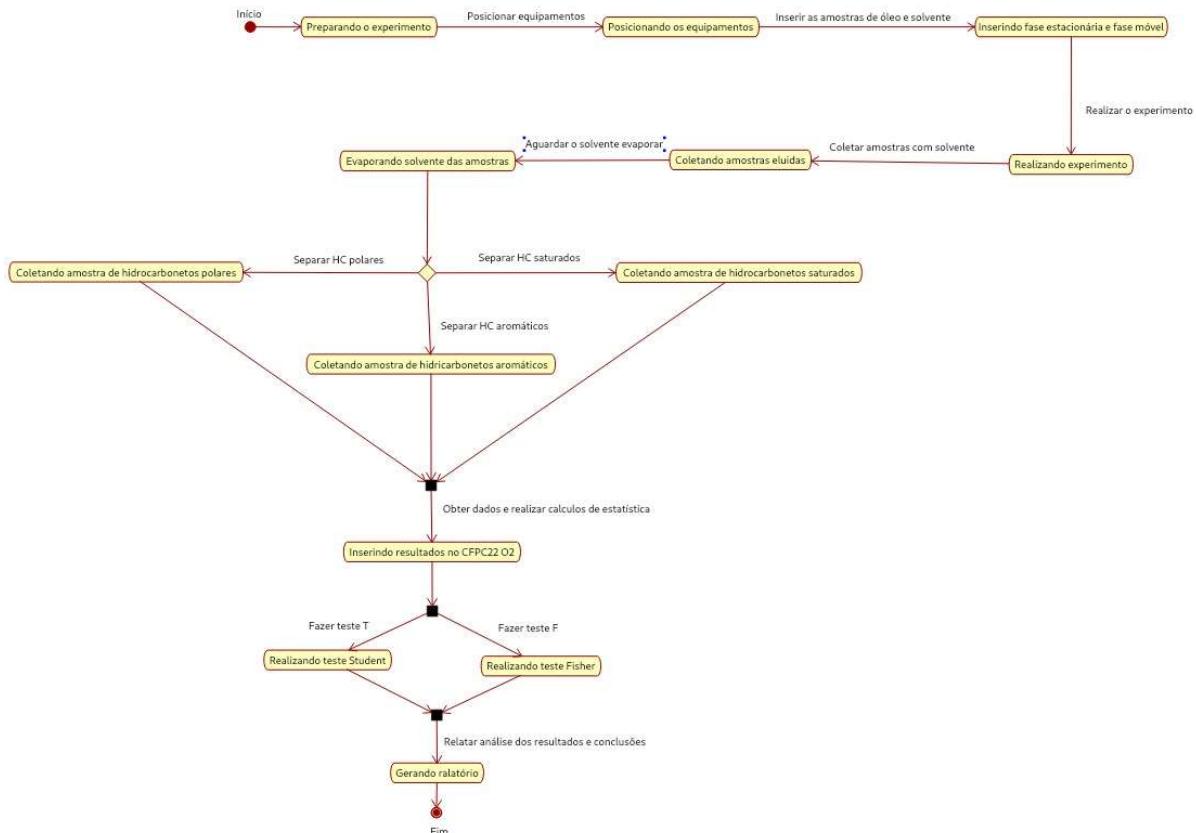


Figura 4.4: Diagrama de máquina de estado para a classe CFPC22_02.

4.5 Diagrama de atividades

Veja na Figura 4.6 o diagrama de atividades corresponde a uma atividade específica das Classes CAmostraHidrocarbonetosSaturados, CAmostraHidrocarbonetosAmorfolíticos, CAmostraHidrocarbonetosPolares e CFPC22_02, onde calculam-se os volumes das frações de Hidrocarbonetos, assim como o erro a partir dos coeficientes.

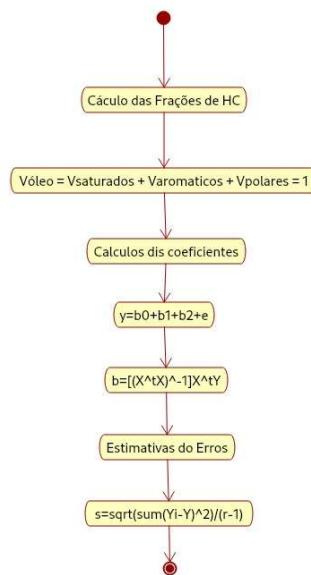


Figura 4.5: Diagrama de atividades do metodo minimos quadrados da classe CFP22_02.

Capítulo 5

Projeto

Neste capítulo do projeto de engenharia veremos questões associadas ao projeto do sistema, incluindo protocolos, recursos, plataformas suportadas, implicações nos diagramas feitos anteriormente, diagramas de componentes e implantação. Na segunda parte revisamos os diagramas levando em conta as decisões do projeto do sistema.

5.1 Projeto do sistema

Depois da análise orientada a objeto desenvolve-se o projeto do sistema, qual envolve etapas como a definição dos protocolos, da interface API, o uso de recursos, a subdivisão do sistema em subsistemas, a alocação dos subsistemas ao hardware e a seleção das estruturas de controle, a seleção das plataformas do sistema, das bibliotecas externas, dos padrões de projeto, além da tomada de decisões conceituais e políticas que formam a infraestrutura do projeto.

Deve-se definir padrões de documentação, padrões para o nome das classes, padrões de retorno e de parâmetros em métodos, características da interface do usuário e características de desempenho.

1. Protocolos

- O software receberá dados via teclado;
- A interface utilizada será em modo texto;
- O softwate terá como saída arquivos de extensão .dat.

2. Recursos

- O presente programa precisara utilizar o HD, o processador, o teclado, a tela, o mouse, a memória e demais componentes internos do computador.

3. Controle

- Não haverá necessidade de grande espaço na memória visto que o programa e seus componentes trabalham com dados relativamente pequenos.
- Neste projeto todos os cálculos necessitam de estruturas de repetição.
- Neste projeto não há necessidade de uso de processos de processamento paralelo, pois os cálculos realizados requerem pouco esforço de processamento

4. Plataformas

- O software irá operar nos sistemas operacionais Windows e GNU/Linux, sendo desenvolvido e testado em ambos os sistemas.
- Não haverá necessidade de grandes mudanças para tornar o programa multiplataforma pois a linguagem escolhida, C++, tem suporte em todos estes sistemas operacionais, [Bueno, 2003].
- Os ambientes de desenvolvimento serão o CodeBlocks (Windows) e Kate (Linux).

5.2 Projeto orientado a objeto – POO

O projeto orientado a objeto é a etapa posterior ao projeto do sistema. Baseia-se na análise, mas considera as decisões do projeto do sistema. Acrescenta a análise desenvolvida e as características da plataforma escolhida (hardware, sistema operacional e linguagem de software). Passa pelo maior detalhamento do funcionamento do software, acrescentando atributos e métodos que envolvem a solução de problemas específicos não identificados durante a análise.

Envolve a otimização da estrutura de dados e dos algoritmos, a minimização do tempo de execução, de memória e de custos. Existe um desvio de ênfase para os conceitos da plataforma selecionada.

Efeitos do projeto no modelo estrutural

- Adicionar nos diagramas de pacotes as bibliotecas e subsistemas selecionados no projeto do sistema (exemplo: a biblioteca gráfica selecionada).
- Novas classes e associações oriundas das bibliotecas selecionadas e da linguagem escolhida devem ser acrescentadas ao modelo.
- Estabelecer as dependências e restrições associadas à plataforma escolhida.
 - Neste projeto não se aplica.

Efeitos do projeto no modelo dinâmico

- Revisar os diagramas de seqüência e de comunicação considerando a plataforma escolhida.
- Verificar a necessidade de se revisar, ampliar e adicionar novos diagramas de máquinas de estado e de atividades.

Efeitos do projeto nos atributos

- Atributos novos podem ser adicionados a uma classe, como, por exemplo, atributos específicos de uma determinada linguagem de softwareção (acesso a disco, ponteiros, constantes e informações correlacionadas).

Efeitos do projeto nos métodos

- Em função da plataforma escolhida, verifique as possíveis alterações nos métodos. O projeto do sistema costuma afetar os métodos de acesso aos diversos dispositivos (exemplo: hd, rede).
- De maneira geral os métodos devem ser divididos em dois tipos: i) tomada de decisões, métodos políticos ou de controle; devem ser claros, legíveis, flexíveis e usam polimorfismo. ii) realização de processamentos, podem ser otimizados e em alguns casos o polimorfismo deve ser evitado.

Efeitos do projeto nas heranças

- Reorganização das classes e dos métodos (criar métodos genéricos com parâmetros que nem sempre são necessários e englobam métodos existentes).
- Abstração do comportamento comum (duas classes podem ter uma superclasse em comum).
- Utilização de delegação para compartilhar a implementação (quando você cria uma herança irreal para reaproveitar código). Usar com cuidado.
- Revise as heranças no diagrama de classes.

5.3 Diagrama de componentes

O diagrama de componentes mostra a forma como os componentes do software se relacionam, suas dependências. Inclui itens como: componentes, subsistemas, executáveis, nós, associações, dependências, generalizações, restrições e notas.

Veja na Figura 5.1 um exemplo de diagrama de componentes. Observe que este inclui dependências, ilustrando as relações entre os componentes. O experimento de cromatografia depende das amostras e do equipamento para gerar os resultados que serão inseridos no software executável a ser gerado, o qual depende da biblioteca gerada e do módulo de arquivos.

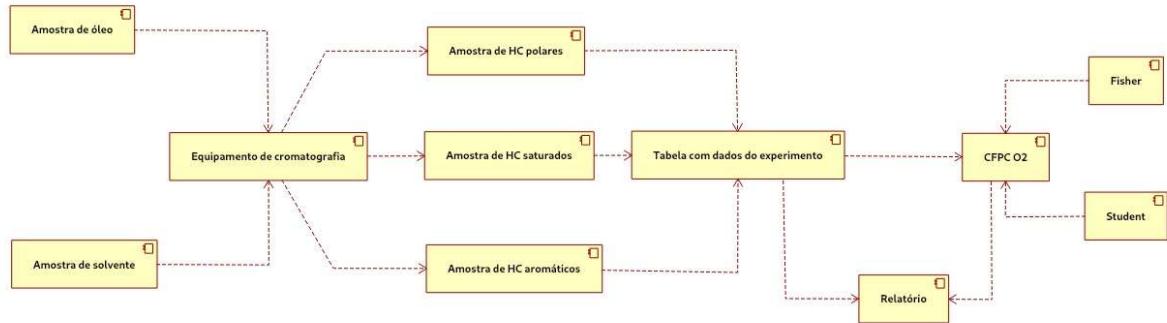


Figura 5.1: Diagrama de componentes.

5.4 Diagrama de implantação

O diagrama de implantação é um diagrama de alto nível que inclui relações entre o sistema e o hardware e que se preocupa com os aspectos da arquitetura computacional escolhida. Seu enfoque é o hardware, a configuração dos nós em tempo de execução.

O diagrama de implantação deve incluir os elementos necessários para que o sistema seja colocado em funcionamento: computador, periféricos, processadores, dispositivos, nós, relacionamentos de dependência, associação, componentes, subsistemas, restrições e notas.

Veja na Figura 5.2 um exemplo de diagrama de implantação de uma coluna cromatográfica. Observe a filtragem dos componentes SARA. Os resultados são armazenados em um servidor de arquivos.

O procedimento foi realizado no laboratório de Geoquímica no campus LNEP em Macaé.

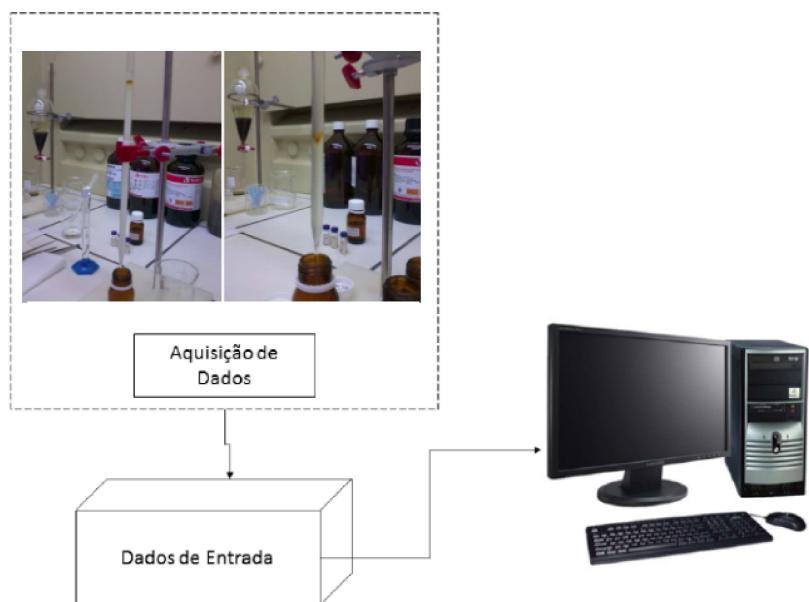


Figura 5.2: Diagrama de implantação

Capítulo 6

Implementação

Neste capítulo do projeto de engenharia apresentamos os códigos fonte que foram desenvolvidos.

Nota: os códigos devem ser documentados usando padrão **javadoc**. Posteriormente usar o programa **doxygen** para gerar a documentação no formato html.

- Veja informações gerais aqui <http://www.doxygen.org/>.
- Veja exemplo aqui <http://www.stack.nl/~dimitri/doxygen/manual/docblocks.html>.

Nota: ao longo deste capítulo usamos inclusão direta de arquivos externos usando o pacote *listings* do L^AT_EX. Maiores detalhes de como a saída pode ser gerada estão disponíveis nos links abaixo.

- http://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Source_Code_Listings.
- <http://mirrors.ctan.org/macros/latex/contrib/listings/listings.pdf>.

6.1 Código fonte

Apresenta-se a seguir um conjunto de classes (arquivos .h e .cpp) além do programa **main**.

Apresenta-se na listagem o arquivo com código da classe **CStudent**.

Listing 6.1: Arquivo de cabeçalho da classe CStudent.

```
1
2#ifndef CStudent_hpp
3#define CStudent_hpp
4
5    /// classe CStudent
6class CStudent
7{
8
```

```

9  private:
10     /// tamanho da amostra(n) menos 1, n > 1
11     int graus_liberdade;
12     /// Beta
13     double Beta();
14     /// Beta_Beta_regularizerada
15     double Beta_regularizerada(double x);
16     /// Função gaussiana
17     double F(double x);
18
19 public:
20     /// Calculo da Probabilidade
21     double Probabilidade(double x);
22     ///costrutor default inicializando com ngl.
23     CStudent(int ngl);
24     /// Construtor de cópia .
25     CStudent (const CStudent & s): graus_liberdade (s.graus_liberdade
26         ) { }
27     /// Destrutor default.
28     ~CStudent();
29};

29# endif

```

Apresenta-se na listagem o arquivo de implementação da classe CStudent.

Listing 6.2: Arquivo de implementação da classe CStudent.

```

30#include "CStudent.hpp"
31#include <cmath>
32#include <iostream>
33
34const double PI = 3.1416;
35using namespace std;
36     /// Costrutur default.
37CStudent::CStudent(int ngl)
38{
39    graus_liberdade = ngl;
40}
41     /// Metodo calcular Probabilidade
42double CStudent::Probabilidade(double x)
43{
44    double argumento = (graus_liberdade / (pow(x, 2) + graus_liberdade))
45        ;
46    return Beta_regularizerada(argumento);
47}
48     /// Metodo calcular Beta
49double CStudent::Beta()
50{
51    int n = 1000;
52    double largura = 1.0 / n;

```

```

52     double integral = 0.0;
53     double centro = largura / 2.0;
54     for (int i = 1; i < n; i++)
55     {
56         integral += largura * F(centro);
57         centro += largura;
58     }
59     return integral;
60 }
61     /// Metodo calcular Beta_regularizada.
62 double CStudent::Beta_regularizada(double x)
63 {
64     int n = 1000;
65     double largura = x / n;
66     double integral = 0.0;
67     double centro = largura / 2.0;
68     for (int i = 1; i < n; i++)
69     {
70         integral += largura * F(centro);
71         centro += largura;
72     }
73     return integral / Beta();
74 }
75     /// Metodo calcular F
76 double CStudent::F(double x)
77 {
78     double a = graus_liberdade / 2.0;
79     double b = 0.5;
80     return (pow(x, a - 1.0) * pow(1 - x, b - 1.0));
81 }
82     /// Destruitor
83 CStudent::~CStudent()
84 {
85 }
```

Apresenta-se na listagem o arquivo com código da classe CFisher.

Listing 6.3: Arquivo de cabeçalho da classe CFisher.

```

86
87 #ifndef CFisher_hpp
88 #define CFisher_hpp
89
90 class CFisher
91 {
92     private:
93
94     int d1; /// variavel 1
95     int d2; /// variavel 2
96     /// Calculo de beta
```

```

97     double Beta();
98     /// calculo de beta regularizado
99     double Beta_regularizada(double x);
100    /// Calculo da gaussiana
101    double F(double x);
102
103   public:
104     /// Construtor default .
105     CFisher() { }
106     /// Construtor de cópia .
107     CFisher( const CFisher & f ): d1 (f. d1 ), d2 (f. d2 ) { }
108     /// Construtor sobre carregado.
109     CFisher(int _d1, int _d2);
110     /// Calculo da probabilidade
111     double Probabilidade(double x);
112     /// Destruitor default.
113     ~CFisher();
114 };
115 # endif

```

Apresenta-se na listagem o arquivo de implementação da classe CFisher.

Listing 6.4: Arquivo de implementação da classe CFisher.

```

116#include "CFisher.hpp"
117#include <math.h>
118#include <iostream>
119
120const double PI = 3.1416;
121using namespace std;
122
123     /// Construtor sobre carregado.
124CFisher::CFisher(int _d1, int _d2)
125{
126     d1 = _d1;
127     d2 = _d2;
128}
129     /// Metodo get.
130double CFisher::Probabilidade(double x)
131{
132     double argumento = (d1 * x / (d1 * x + d2));
133     return 1 - Beta_regularizada(argumento);
134}
135     /// Metodo calcular Beta
136double CFisher::Beta()
137{
138     int n = 1000;
139     double largura = 1.0 / n;
140     double integral = 0.0;
141     double centro = largura / 2.0;

```

```

142     for (int i = 1; i < n; i++)
143     {
144         integral += largura * F(centro);
145         centro += largura;
146     }
147     return integral;
148 }
149     /// Metodo calcular Beta_regulizada.
150 double CFisher::Beta_regularizada(double x)
151 {
152     int n = 1000;
153     double largura = x / n;
154     double integral = 0.0;
155     double centro = largura / 2.0;
156     for (int i = 1; i < n; i++)
157     {
158         integral += largura * F(centro);
159         centro += largura;
160     }
161     return integral / Beta();
162 }
163     /// Metodo calcular F
164 double CFisher::F(double x)
165 {
166     double a = d1 / 2.0;
167     double b = d2 / 2.0;
168     return (pow(x, a - 1.0) * pow(1 - x, b - 1.0));
169 }
170     ///Destrutor
171 CFisher::~CFisher()
172 {
173 }
```

Apresenta-se na listagem o arquivo com código da classe CFPC22_02.

Listing 6.5: Arquivo de cabeçalho da classe CFPC22_O2.

```

174
175 #ifndef CFPC22_02_hpp
176 #define CFPC22_02_hpp
177
178 #include <string>
179
180 using namespace std;
181     /// Classe CFPC22_02 para calcular planejamento Fatorial de 2^2
182 class CFPC22_02
183 {
184 private:
185     double respostas[7]; //< Vetor de respostas obida laboratório
```

```

186 double XtY[4]; //< Matriz do planejamento transposta vezes o vetor
187   resposta
188 double b[4]; //< vetor de regressão
189 double tcalc[4]; //< distribuição de Student
190 double p_coeficientes[4]; //< valor estatístico amostral de student
191 const double erro[4] = {0.378, 0.5, 0.5, 0.5}; //< Matriz erro
192   aleatório associado ao modelo
193 const double XXinv[4] = {0.143, 0.25, 0.25, 0.25}; //< Matriz do
194   planejamento vezes sua inversa
195 const double nivel_significancia = 0.05; //< significa que a
196   probabilidade de erro é de 0,05
197 double media = 0; //< mediada das respostas encontrada no laboratório
198 double media_pcentral = 0; //< Media do ponto central para cálculos
199   dos erros
200 double media_estimados = 0; //< media estimada do Y estimado pelo
201   modelo
202 double y_estimado[7];//< Vetor de respostas estimado
203 double residuos[7]; //< resíduos gerados pelo modelo ex; ( $Y_i$  lab) - (  $Y_i$ 
204   estimado)
205 double ANOVA_reg[7]; //< quadrática da regressão
206 double ANOVA_total[7];//< quadrática da variação total
207 double ANOVA_falt[7]; //< quadrática da falta de ajuste (discrepância)
208 double ANOVA_errpuro[7]; //< erro puro no laboratório
209 double soma_quadratica[4]; //< soma quadrática
210 double media_quadratica[4]; //< soma quadrática da média
211 double Fcalc[2]; //< calcular F distribuição de Fisher.
212 double p_variancia[2]; //< valor estatístico amostral
213 double n_graus_liberdade[4] = {3, 3, 1, 2}; //< graus de liberdade
214 double var_explícada; //< Análise de variância
215 double max_var_explícada; //< Análise de variância máxima
216 bool significativo[2]; //< mostra se foi ou não significativo
217 double ANOVA_reg_soma = 0; //< soma quadrática da regressão
218 double ANOVA_total_soma = 0; //< soma quadrática da variação total
219 double ANOVA_falt_soma = 0; //< soma quadrática da falta de ajuste (
220   discrepância)
221 double ANOVA_errpuro_soma = 0; //< somatório do erro puro no
222   laboratório

223 public:
224   /// construtor default
225   CFPC22_02();
226   /// o usuário entraria com os valores manualmente obtidos em
227   /// laboratório .
228   void Entrada_manual();
229   /// o usuário informaria o arquivo com os dados obtidos em
230   /// laboratório.
231   void Ler_arquivo(string arquivo);
232   /// ler dados para plot

```

```

223 void get_resposta(double _resp[7]);
224     /// ler dados para plot
225 void get_yestimado(double _yresp[7]);
226     /// o programa ira realizar uma sequencia de calculos estatiticos
227     /// para ANOVA.
227 void Calcular();
228     /// Mostrar na tela os valores caulkulados da ANOVA.
229 void Mostrar_calculos();
230     /// mostrar os coeficientes referente a sua equaçao.
231 void Tabela_coeficientes();
232     /// Salvar os aquivos em .txt
233 void Arquivo_saida();
234     /// mostrar a tabela da ANOVA
235 void Tabela_variancia();
236     /// Destrutor default.
237 ~CFPC22_02();
238};
239# endif

```

Apresenta-se na listagem o arquivo de implementação da classe CFPC22_02.

Listing 6.6: Arquivo de implementação da classe CFPC22_O2.

```

240#include <string>
241#include <fstream>
242#include <iostream>
243#include <cmath>
244
245#include "CFPC22_02.hpp"
246#include "CStudent.hpp"
247#include "CFisher.hpp"
248
249using namespace std;
250
251CFPC22_02::CFPC22_02()
252{
253}
254    /// o usuario informara o arquivo com os dados obtidos em
254    /// laboratorio.
255void CFPC22_02::Ler_arquivo(string arquivo)
256{
257    ifstream entrada("./" + arquivo + ".txt"); /// ler aquivo em formato
257        .txt
258
259    for (int i = 0; i < 7; i++) // percorre os valores de i=0 ate i=6
260    {
261        entrada >> respostas[i];
262    }
263    this->Calcular(); // ponteiro para ter acesso a Calcular
264}

```

```
265     /// o usuario estrara com os valores manualmente obtidos em
266     /// laboratorio .
267 void CFPC22_02::Entrada_manual()
268 {
269     cout << "\nDigite o valor de y para x1=-1, x2=-1: ";
270     // o usuario
271     // entarar com o primeiro valor do lab.
272     cin >> respostas[0]; // amarzenar respostas 0
273     cout << "Digite o valor de y para x1=1, x2=-1: ";
274     // o usuario
275     // entarar com o segundo valor do lab.
276     cin >> respostas[1]; // amarzenar respostas 0
277     cout << "Digite o valor de y para x1=-1, x2=1: ";
278     // o usuario
279     // entarar com o terceiro valor do lab.
280     cin >> respostas[2]; // amarzenar respostas 0
281     cout << "Digite o valor de y para x1=1, x2=1: ";
282     // o usuario
283     // entarar com o quarto valor do lab.
284     cin >> respostas[3]; // amarzenar respostas 0
285     for (int i = 4; i < 7; i++)
286     {
287         cout << "Digite o valor de y do ponto central (" << i - 3 << "
288             "/3): ";
289         // valores do ponto central
290         cin >> respostas[i]; // armazena os valores do ponto central
291     }
292     this->Calcular();
293 }
294
295 // o programa ira realizar uma sequencia de calculos estatiticos
296 // para ANOVA.
297 void CFPC22_02::Calcular()
298 {
299     double soma = 0;
300     for (int i = 0; i < 7; i++)
301     {
302         soma += respostas[i];
303     }
304
305     media = (soma / 7); //soma das respostas dividido pela quantidade
306     // de amostras
307     media_pcentral = ((respostas[4] + respostas[5] + respostas[6]) / 3);
308     // media do ponto central
309
310     XtY[0] = soma;
311     XtY[1] = (respostas[1] + respostas[3] - respostas[0] - respostas[2])
312         ;
313     XtY[2] = (respostas[2] + respostas[3] - respostas[0] - respostas[1])
314         ;
315     XtY[3] = (respostas[0] + respostas[3] - respostas[1] - respostas[2])
316         ;
317
318     CStudent student(2);
```

```
301     for (int i = 0; i < 4; i++)
302     {
303         b[i] = XXinv[i] * Xty[i];
304         tcalc[i] = b[i] / erro[i];
305         p_coeficientes[i] = student.Probabilidade(tcalc[i]);
306     }
307
308     y_estimado[0] = b[0] - b[1] - b[2] + b[3];
309     y_estimado[1] = b[0] + b[1] - b[2] - b[3];
310     y_estimado[2] = b[0] - b[1] + b[2] - b[3];
311     y_estimado[3] = b[0] + b[1] + b[2] + b[3];
312     y_estimado[4] = b[0];
313     y_estimado[5] = b[0];
314     y_estimado[6] = b[0];
315     for (int i = 0; i < 7; i++)
316     {
317         media_estimados += y_estimado[i];
318     }
319     media_estimados /= 7;
320
321     for (int i = 0; i < 7; i++)
322     {
323         residuos[i] = respostas[i] - y_estimado[i];
324     }
325
326     for (int i = 0; i < 7; i++)
327     {
328         ANOVA_reg[i] = pow(y_estimado[i] - media, 2);
329         ANOVA_reg_soma += ANOVA_reg[i];
330     }
331
332     for (int i = 0; i < 7; i++)
333     {
334         ANOVA_total[i] = pow(respostas[i] - media, 2);
335         ANOVA_total_soma += ANOVA_total[i];
336     }
337
338     for (int i = 0; i < 4; i++)
339     {
340         ANOVA_falt[i] = pow(y_estimado[i] - respostas[i], 2);
341         ANOVA_falt_soma += ANOVA_falt[i];
342     }
343     for (int i = 4; i < 7; i++)
344     {
345         ANOVA_falt[i] = pow(y_estimado[i] - media_pcentral, 2);
346         ANOVA_falt_soma += ANOVA_falt[i];
347     }
348     for (int i = 0; i < 4; i++)
```

```

349 {
350     ANOVA_errpuro[i] = pow(respostas[i] - respostas[i], 2);
351     ANOVA_errpuro_soma += ANOVA_errpuro[i];
352 }
353 for (int i = 4; i < 7; i++)
354 {
355     ANOVA_errpuro[i] = pow(respostas[i] - media_pcentral, 2);
356     ANOVA_errpuro_soma += ANOVA_errpuro[i];
357 }
358
359 soma_quadratica[0] = ANOVA_reg_soma;
360 soma_quadratica[1] = ANOVA_falt_soma + ANOVA_errpuro_soma;
361 soma_quadratica[2] = ANOVA_falt_soma;
362 soma_quadratica[3] = ANOVA_errpuro_soma;
363
364 for (int i = 0; i < 4; i++)
365 {
366     media_quadratica[i] = soma_quadratica[i] / n_graus_liberdade[i];
367 }
368 Fcalc[0] = media_quadratica[0] / media_quadratica[1];
369 Fcalc[1] = media_quadratica[2] / media_quadratica[3];
370
371 CFisher fisher1(n_graus_liberdade[0], n_graus_liberdade[1]);
372 p_variancia[0] = fisher1.Probabilidade(Fcalc[0]);
373
374 CFisher fisher2(n_graus_liberdade[2], n_graus_liberdade[3]);
375 p_variancia[1] = fisher2.Probabilidade(Fcalc[1]);
376 for (int i = 0; i < 2; i++)
377 {
378     if (p_variancia[i] < nivel_significancia) {
379         significativo[i] = true;
380     }
381     else {
382         significativo[i] = false;
383     }
384 }
385
386 var_explicada = 100 * (soma_quadratica[0] / ANOVA_total_soma);
387 max_var_explicada = 100 * ((ANOVA_total_soma - soma_quadratica[3]) /
388 ANOVA_total_soma);
389
390     /// Mostrar na tela os valores calculados da ANOVA.
391 void CFPC22_02::Mostrar_calculos()
392 {
393     cout << "media:" << media << endl;
394     cout << "media_pc:" << media_pcentral << endl;
395     cout << "XtY-0" << XtY[0] << "1" << XtY[1] << "2" << XtY[2] << "
396 "3" << XtY[3] << "\n";

```

```
395     for (int i = 0; i < 4; i++)
396     {
397         cout << "b\u201c-\u201d" << b[i] << "\nt\u201c-\u201d" << tcalc[i] << endl;
398     }
399     for (int i = 0; i < 7; i++)
400     {
401         cout << endl
402             << "y\u201cestimado\u201d" << y_estimado[i];
403     }
404     for (int i = 0; i < 7; i++)
405     {
406         cout << endl
407             << "residuo\u201c-\u201d" << residuos[i];
408     }
409     cout << "Media\u201cestimados\u201c-\u201d" << media_estimados << endl;
410     for (int i = 0; i < 7; i++)
411     {
412         cout << endl
413             << "ANOVA\u201creg.\u201c-\u201d" << ANOVA_reg[i];
414     }
415     for (int i = 0; i < 7; i++)
416     {
417         cout << endl
418             << "ANOVA\u201ctotal\u201c-\u201d" << ANOVA_total[i];
419     }
420     for (int i = 0; i < 7; i++)
421     {
422         cout << endl
423             << "ANOVA\u201cfalt\u201c-\u201d" << ANOVA_falt[i];
424     }
425     for (int i = 0; i < 7; i++)
426     {
427         cout << endl
428             << "ANOVA\u201cerrpuro\u201c-\u201d" << ANOVA_errpuro[i];
429     }
430     cout << endl
431         << "ANOVA\u201cregsoma\u201c-\u201d" << ANOVA_reg_soma;
432     cout << endl
433         << "ANOVA\u201ctotal\u201csoma\u201c-\u201d" << ANOVA_total_soma;
434     cout << endl
435         << "ANOVA\u201cfalt\u201csoma\u201c-\u201d" << ANOVA_falt_soma;
436     cout << endl
437         << "ANOVA\u201cerrpuro\u201csoma\u201c-\u201d" << ANOVA_errpuro_soma;
438     for (int i = 0; i < 4; i++)
439     {
440         cout << "\nmedia\u201c" << i << ":">< media_quadratica[i];
441     }
442     cout << "\nFcalc1\u201c-\u201d" << Fcalc[0] << "\nnp\u201c-\u201d" << p_variancia[0];
```

```

443     cout << "\nFcalc2\u201c" << Fcalc[1] << "\nnp\u201c" << p_variancia[1];
444     cout << "\nVariacao\u201c explicada\u201c" << var_explícada;
445     cout << "\nmax\u201c variacao\u201c explicada\u201c" << max_var_explícada;
446 }
447     /// mostrar os coeficientes referente a sua equa\u00e7\u00e3o.
448 void CFPC22_02::Tabela_coeficientes()
449 {
450     cout << endl
451         << "Tabela\u201c de\u201c coeficientes";
452     cout << endl
453         << "-----";
454     cout << endl
455         << '\t' << "Efeitos\tErro\tp" << endl;
456     cout << "Media\t" << b[0] << '\t' << erro[0] << '\t' << tcalc[0] <<
457         '\t' << p_coeficientes[0] << endl;
458     cout << "X1\t" << 2 * b[1] << '\t' << 2 * erro[1] << '\t' << tcalc
459         [1] << '\t' << p_coeficientes[1] << endl;
460     cout << "X2\t" << 2 * b[2] << '\t' << 2 * erro[2] << '\t' << tcalc
461         [2] << '\t' << p_coeficientes[2] << endl;
462     cout << "X12\t" << 2 * b[3] << '\t' << 2 * erro[3] << '\t' << tcalc
463         [3] << '\t' << p_coeficientes[3] << endl;
464     cout << "-----" << endl;
465 }
466     /// mostrar a tabela da ANOVA
467 void CFPC22_02::Tabela_variancia()
468 {
469     cout << endl
470         << "Analise\u201c de\u201c variancia";
471     cout << endl
472         << "
473             -----
474             ";
475     cout << endl
476         << "FV\t\t" << "SQ\t" << "nGL\t" << "MQ\t" << "Fcalc.\t" << "p"
477             << endl;
478     cout << "Regress\u00e3o\t" << soma_quadratica[0] << '\t' <<
479         n_graus_liberdade[0] << '\t' << media_quadratica[0] << '\t' <<
480         Fcalc[0] << '\t' << p_variancia[0] << endl;
481     cout << "Resíduos\t" << soma_quadratica[1] << '\t' <<
482         n_graus_liberdade[1] << '\t' << media_quadratica[1] << endl;
483     cout << "F.\u201c Ajuste\t" << soma_quadratica[2] << '\t' <<
484         n_graus_liberdade[2] << '\t' << media_quadratica[2] << '\t' <<
485         Fcalc[1] << '\t' << p_variancia[1] << endl;
486     cout << "Erro\u201c Puro\t" << soma_quadratica[3] << "\t" <<
487         n_graus_liberdade[3] << '\t' << media_quadratica[3] << endl;
488     cout << "Total\t\t" << ANOVA_total_soma << '\t' << 6 << endl;
489     cout << "
490             -----"

```

```

        " << endl;
477     cout << "-_Regressão";
478     if (!significativo[0]) {
479         cout << "não";
480     }
481     cout << "_Significativa" << endl;
482     cout << "-_F._Ajuste";
483     if (!significativo[1]) {
484         cout << "não";
485     }
486     cout << "_Significativa" << endl;
487     cout << "variação explicada\t\t" << var_explícada << '%' << endl;
488     cout << "máx.variação explicável\t" << max_var_explícada <<
489         '%' << endl;
490
491     /// salvar arquivo em .txt
492 void CFPC22_02::Arquivo_saida(){
493     FILE *saida;
494     saida=fopen("dadosaida.txt", "wb");
495     fstream fout;
496     fout.open("dadosaida.txt");
497
498     fout << endl;
499     fout << "Tabela_de_coeficientes";
500     fout << endl;
501     fout << "-----";
502     fout << '\t' << "Efeitos\tErro\tn(2)\tp" << endl;
503     fout << "Media\t" << b[0] << '\t' << erro[0] << '\t' << tcalc[0] <<
504         '\t' << p_coeficientes[0] << endl;
505     fout << "X1\t" << 2 * b[1] << '\t' << 2 * erro[1] << '\t' << tcalc
506         [1] << '\t' << p_coeficientes[1] << endl;
507     fout << "X2\t" << 2 * b[2] << '\t' << 2 * erro[2] << '\t' << tcalc
508         [2] << '\t' << p_coeficientes[2] << endl;
509     fout << "X12\t" << 2 * b[3] << '\t' << 2 * erro[3] << '\t' << tcalc
510         [3] << '\t' << p_coeficientes[3] << endl;
511     fout << "-----" << endl;
512
513     fout << "\Analises da variância e os coeficientes significativos" <<
514         endl;
515     fout << "FV\t\t" << "SQ\t" << "nGL\t" << "MQ\t" << "Fcalc.\t" << "p"
516         << endl;
517     fout << "Regressão\t" << soma_quadrática[0] << '\t' <<
518         n_graus_liberdade[0] << '\t' << media_quadrática[0] << '\t' <<
519         Fcalc[0] << '\t' << p_variancia[0] << endl;
520     fout << "Resíduos\t" << soma_quadrática[1] << '\t' <<
521         n_graus_liberdade[1] << '\t' << media_quadrática[1] << endl;
522     fout << "F.Ajuste\t" << soma_quadrática[2] << '\t' <<
```

```

    n_graus_liberdade[2] << '\t' << media_quadratica[2] << '\t' <<
    Fcalc[1] << '\t' << p_variancia[1] << endl;
514  fout << "Erro_Puro\t" << soma_quadratica[3] << "\t" <<
    n_graus_liberdade[3] << '\t' << media_quadratica[3] << endl;
515  fout << "Total\t\t" << ANOVA_total_soma << '\t' << 6 << endl;
516  fout << "
-----
" << endl;
517  fout << "-_Regressão";
518  if (!significativo[0]) {
519      cout << "não";
520  }
521  fout << "Significativa" << endl;
522  fout << "-_F._Ajuste";
523  if (!significativo[1]) {
524      cout << "não";
525  }
526  fout << "Significativa" << endl;
527  fout << "variação explicada\t\t" << var_explícada << '%' << endl;
528  fout << "máx.variável explicável\t" << max_var_explícada <<
    '%' << endl;
529
530  fout.close();
531 }
532 /// redefinindo vetor respostas
533 void CFPC22_02::get_resposta(double _resp[7])
534 {
535     for (int i=0;i<7;i++)
536     {
537         _resp[i]=respostas[i];
538     }
539 };
540 /// redefinindo y_estimado
541 void CFPC22_02::get_yestimado(double _yresp[7])
542 {
543     for (int i=0;i<7;i++)
544     {
545         _yresp[i]=y_estimado[i];
546     }
547 };
548 // Destrutor default.
549 CFPC22_02::~CFPC22_02()
550 {
551 }
```

Apresenta-se na listagem a seguir a implementação do Main.

Listing 6.7: Arquivo de implementação da função main().

```
553 #include <iostream>
```

```
554 #include "CFPC22_02.hpp"
555 #include <string>
556 #include "CFisher.hpp"
557 #include "CStudent.hpp"
558 #include "CGnuplot.h"
559 #include "vector"
560 #include <fstream>
561
562 using namespace std;
563
564
565 int main()
566 {
567     double tmp1[7],tmp2[7]; //vetor no estilo de C
568     vector <double> tmp11, tmp21; //vetor no estilo de C++
569
570     int entrada = 0;
571     CFPC22_02 planejamento; // objeto planejamento
572
573     cout << "\n\n#####\u2014PLANEJAMENTO\u2014FATORIAL\u2014v1.0\u2014#####\nAutor:\u2014
574             Jhonny\u2014Carvalho;\u2014LENEP\u2014UENF\u2014(2019)\n
575             -----\n"; // T\u00e1tulo em
576             tela
577
578     while (entrada != 1 && entrada != 2)
579     {
580         cout << "Selecione\u2014o\u2014modo\u2014de\u2014entrada\u2014de\u2014dados:\u2014n1\u2014\u2014
581             Utilizar\u2014um\u2014arquivo\u2014de\u2014entrada\u2014n2\u2014\u2014Entrada\u2014manual\u2014n"
582             ;
583         cin >> entrada; cin.get();
584     }
585     if (entrada == 1)
586     {
587         string arquivo;
588         cout << "Lista\u2014de\u2014arquivos.txt):\u2014";
589         system("ls\u2014*.txt"); // lista dos arquivos txt
590         cout << "Digite\u2014o\u2014nome\u2014do\u2014arquivo\u2014(sem\u2014.txt):\u2014";
591         cin >> arquivo; cin.get();
592         planejamento.Ler_arquivo(arquivo); // le dados do
593             arquivo
594     }
595     else
596     {
597         planejamento.Estrada_manual(); // entrada manual
598     }
599
600     planejamento.Tabela_coeficientes(); //calcula coef
601     planejamento.Tabela_variancia(); //calcula variancia
```

```
596     planejamento.Arquivo_saida(); // salvar arquivos
597     planejamento.get_resposta(tmp1);
598     planejamento.get_yestimado(tmp2);
599
600    for (int i=0;i<7;i++)
601    {
602        tmp11.push_back(tmp1[i]);
603        tmp21.push_back(tmp2[i]);
604        //cout << tmp1[i] << "," << tmp2[i] << endl; //vetor c
605        cout << tmp11[i] << "," << tmp21[i] << endl; //vetor c++
606    }
607
608 cout << "size=" << tmp11.size() << ", size=" << tmp21.size() << endl; // 
609          //vetor c++
610
611 // Plot do grafico utilizando CGnuplot:
612
613     //Gnuplot::set_GNUPlotPath("C:/program files/gnuplot/bin"); // 
614             setando Gnuplot no Windows
615     //Gnuplot::Terminal("win"); //Utilizando terminal do Windows
616
617     CGnuplot gp("points"); //Define o estilo do gráf;fico
618     gp.Grid(); // Habilitar grid do gráf;fico ploatada
619     gp.set_pointsize (2.0); //Setando tamanho do ponto
620     gp.set_title ("Plot: Observados VS Estimados"); // Definindo tâtulo
621             para o gráf;fico
622     gp.set_ylabel("Estimados"); //Definindo nome do Eixo Y
623     gp.set_xlabel("Observados"); //Definindo nome do Eixo X
624     gp.set_yautoscale (); // Seta automaticamente os limites para o eixo
625             Y
626     gp.set_xautoscale (); // Seta automaticamente os limites para o eixo
627             X
628     gp.PlotVector(tmp11,tmp21,"Dados"); // Plotando vetor de dados (
629             observados vs estimados)
630
631     cout << "Digite 'enter' para encerrar.\n";
632
633     /// ofstream data ("resultados.txt", ofstream::out | ios::app ); // 
634             Costruindo a saída de dados p/ arquivo
635     /// data << tmp1;
636     /// data.close();
637     gp.SaveTo("grafico_Obs-VS-Estm","png"); // Salvando sessão do
638             gnuplot para um arquivo
639     cin.get();
640     cin.get();
641
642     return 0;
643 }
```

Capítulo 7

Teste

Todo projeto de engenharia passa por uma etapa de testes. Neste capítulo apresentamos alguns testes do software desenvolvido. Estes testes devem dar resposta aos diagramas de caso de uso inicialmente apresentados (diagramas de caso de uso geral e específicos).

7.1 Teste 1: Descrição

O presente trabalho apresenta interface em modo texto. Veja na Figura 7.1 a tela inicial do software, o usuário tem a opção de entrar com os dados de maneira manual ou com arquivo .txt, a interface é da seguinte maneira,

7.2 Teste 2: Resultados

Neste teste foi introduzido os dados de entrada por arquivo .txt para o planejamento. O software realiza os cálculos e exibe os seguintes resultados na figura abaixo. Além dos resultados exibidos no console, o software salva em disco arquivos .txt contendo os resultados dos calculados, que são apresentados na Figura 7.3.

```
##### PLANEJAMENTO FATORIAL v1.0 #####
Autor: Jhonny Carvalho; LENEP-UENF (2019)
-----
Selezione o modo de entrada de dados:
1 - Utilizar um arquivo de entrada
2 - Entrada manual
```

Figura 7.1: Tela do programa mostrando xxx

```
1 - Utilizar um arquivo de entrada
2 - Entrada manual
1
dados-lab.txt resultados.txt
Lista de arquivos.txt): Digite o nome do arquivo (sem .txt): dados-lab

Tabela de coeficientes
-----
      Efeitos Erro    t(2)     p
Media   54.912  0.378   145.27  4.88961e-05
X1      9.5       1        9.5    0.0112476
X2     10.5       1       10.5   0.00923455
X12     0.5       1        0.5    0.687277

Analise de variancia
-----
      FV      SQ      nGL      MQ      Fcalc.     p
Regressão 200.771 3      66.9237 94.3381 0.00202821
Resíduos   2.12821 3      0.709403
F. Ajuste  0.128208      1        0.128208      0.128208      0.754557
Erro Puro  2          2        1
Total    202.857 6

- Regressão Significativa
- F. Ajuste não Significativa
variação explicada           98.9717%
máx. de variação explicável 99.0141%
45,45,162
54,54,162
55,55,162
65,65,162
56,54,912
54,54,912
55,54,912
size=7, size=7
Digite 'enter' para encerrar.
```

Figura 7.2: Tela do programa mostrando resultados

Capítulo 8

Documentação

Todo projeto de engenharia precisa ser bem documentado. Neste sentido, apresenta-se neste capítulo a documentação de uso do "software Planejamento Fatorial 2²". Esta documentação tem o formato de uma apostila que explica passo a passo como usar o software.

8.1 Documentação do usuário

Descreve-se aqui o manual do usuário, um guia que explica, passo a passo a forma de instalação e uso do software desenvolvido.

8.1.1 Como instalar o software

Abra o terminal, vá para o diretório onde está o projeto, compile o programa e, depois o execute. Logo após, siga os seguintes passos:

Entre com os valores dos 7 resultados obtidos em laboratórios de acordo com o Planejamento Fatorial, sendo os 3 últimos o ponto central usados para cálculo dos erros.

- Primeiro valor de entrada (-) X₁ e (+) X₂;
- Segundo valor de entrada (-) X₁ e (-) X₂;
- Terceiro valor de entrada (+) X₁ e (+) X₂;
- Quarto valor de entrada (+) X₁ e (-) X₂;
- E os três últimos valores de entrada (0) X₁ e (0) X₂.

Após isso serão mostrados no console os resultados, e serão salvos “.txt” com os resultados e os gráficos em “.png”.

8.2 Documentação para desenvolvedor

Apresenta-se nesta seção a documentação para o desenvolvedor, isto é, informações para usuários que queiram modificar, aperfeiçoar ou ampliar este software.

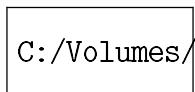
8.2.1 Dependências

Para compilar o software é necessário atender as seguintes dependências:

- Instalar o compilador g++ da GNU disponível em <http://gcc.gnu.org>. Para instalar no GNU/Linux use o comando `yum install gcc`.
- Biblioteca CGnuplot; os arquivos para acesso a biblioteca CGnuplot devem estar no diretório com os códigos do software;
- O software `gnuplot`, disponível no endereço <http://www.gnuplot.info/>, deve estar instalado. É possível que haja necessidade de setar o caminho para execução do `gnuplot`.
- No sistema operacional Windows: Instalar o compilador apropriado; Recomenda-se o CodeBlocks 16.01.

8.2.2 Como gerar a documentação usando doxygen

A documentação do código do software deve ser feita usando o padrão JAVADOC, conforme apresentada no Capítulo - Documentação, do livro texto da disciplina. Depois de documentar o código, use o software `doxygen` para gerar a documentação do desenvolvedor no formato html. O software `doxygen` lê os arquivos com os códigos (*.h e *.cpp) e gera uma documentação muito útil e de fácil navegação no formato html.



C:/Volumes/JHONNY/imprimir/imagens/doxygen3.png

Figura 8.1: Documentacao do doxygen

Jhonny

Class	Description
CFisher	Classe CFPC22_02 para calcular planejamento Fatorial de 2^2
CFPC22_O2	Classe CFPC22_02 para calcular planejamento Fatorial de 2^2
CStudent	
Gnuplot	Classe de interface para acesso ao programa gnuplot
runtime_error	
GnuplotException	Erros em tempo de execucao

This inheritance list is sorted roughly, but not completely, alphabetically:

[detail level 1 2]

Generated by [doxygen](#) 1.8.15

Figura 8.2: Documentacao doxygen

Jhonny

Class	Description
CFisher	Classe CFPC22_02 para calcular planejamento Fatorial de 2^2
CFPC22_O2	Classe CFPC22_02 para calcular planejamento Fatorial de 2^2
CStudent	
Gnuplot	Classe de interface para acesso ao programa gnuplot
GnuplotException	Erros em tempo de execucao

Here are the classes, structs, unions and interfaces with brief descriptions:

Generated by [doxygen](#) 1.8.15

Figura 8.3: Documentacao do doc.gen

Referências Bibliográficas

- [Ashoori and Vanini, 2016] Ashoori, A. and Vanini, S. S. (2016). Thermal buckling of annular microstructure-dependent functionally graded material plates resting on an elastic medium. *Composites Part B: Engineering*, 87:245–255. 2
- [Bissada et al., 2016] Bissada, K. A., Tan, J., Szymczyk, E., Darnell, M., and Mei, M. (2016). Group-type characterization of crude oil and bitumen. part i: Enhanced separation and quantification of saturates, aromatics, resins and asphaltenes (sara). *Organic Geochemistry*, 95:21–28. 1, 2
- [Brasil and Araújo, 2014] Brasil, N. I. and Araújo, M. A. S. (2014). Processamento de petróleo e gás: petróleo e seus derivados, processamento primário, processos de refino, petroquímica, meio ambiente. 2
- [Breitkreitz et al., 2014] Breitkreitz, M. C., Souza, A. M. d., Poppi, R. J., et al. (2014). Experimento didático de quimiometria para planejamento de experimentos: avaliação das condições experimentais na determinação espectrofotométrica de ferro ii com o-fenantrolina. um tutorial, parte iii. *Quim. Nova*, 37(3):564–573. 10, 11
- [Collins et al., 2006] Collins, C. H., Braga, G. L., and Bonato, P. S. (2006). Fundamentos de cromatografia. In *Fundamentos de cromatografia*. Unicamp. 2
- [Cunico et al., 2008] Cunico, M., Cunico, M., Miguel, O., Zawadzki, S., Peralta-Zamora, P., and Volpato, N. (2008). Planejamento fatorial: Uma ferramenta estatística valiosa para a definição de parâmetros experimentais empregados na pesquisa científica. *Visão Acadêmica Acadêmica*, 9(1). 11
- [Fan and Buckley, 2002] Fan, T. and Buckley, J. S. (2002). Rapid and accurate sara analysis of medium gravity crude oils. *Energy & Fuels*, 16(6):1571–1575. 2
- [Jiang et al., 2008] Jiang, C., Larter, S. R., Noke, K. J., and Snowdon, L. R. (2008). Tlc-fid (iatroscan) analysis of heavy oil and tar sand samples. *Organic Geochemistry*, 39(8):1210–1214. 2
- [Karlsen and Larter, 1991] Karlsen, D. A. and Larter, S. R. (1991). Analysis of petroleum fractions by tlc-fid: applications to petroleum reservoir description. *Organic Geochemistry*, 17(5):603–617. 2

Referências

[Killops and Killops, 2013] Killops, S. D. and Killops, V. J. (2013). *Introduction to organic geochemistry*. John Wiley & Sons. 1

[Teófilo et al., 2006] Teófilo, R. F., Ferreira, M. M., et al. (2006). Quimiometria ii: planilhas eletrônicas para cálculos de planejamentos experimentais, um tutorial. *Química Nova*, 29(2):338. 10, 11