

# Identificação de Modelos de Processos Químicos

Prof. Galo Carrillo Le Roux

galoroux@usp.br

São Paulo – 2020

## OBJETIVOS:

Fornecer os fundamentos para a construção de representações matemáticas a partir de dados reais. O aluno ao final do curso deve ser capaz de realizar a análise crítica dos resultados de ajuste de modelos a fim de propor abordagens adaptadas a cada sistema real, seja ele experimental ou industrial, de acordo com a aplicação que pretende-se dar aos modelos, seja ela o projeto, a análise, a otimização ou o controle automático. As hipóteses implícitas na escolha de diferentes metodologias têm que estar claramente estabelecidas com a finalidade de entender a sua utilidade.

## JUSTIFICATIVA:

Modelos que representem os diferentes sistemas de interesse de engenharia química, com capacidade de predição adequada e comprovada frente a dados experimentais ou de operação são cada vez mais importantes para aplicações tais como a otimização, o controle e o projeto de processos químicos.

Existe um fundamento comum a todas as metodologias de identificação de modelos, e o objetivo é fazer com que o aluno os entenda para que seja capaz de selecionar a mais adequada para as suas aplicações.

Uma abordagem alternativa poderia ser a enumeração pura e simples das metodologias existentes e das fórmulas necessárias para a sua aplicação, no entanto, a variedade de metodologias é demasiadamente grande.

## CONTEÚDO:

Noções estatísticas básicas. Distribuições de probabilidade. Definição de modelos estocásticos completos. Definição de algumas estruturas de modelos importantes no estudo de processos químicos. Propriedades estruturais dos modelos: identificabilidade e distinguibilidade. Distribuição de amostragem e propriedades gerais dos estimadores: tendência, variância, eficiência e consistência. Critérios quadráticos. Estimadores de verossimilhança máxima. Estimadores Bayesianos. Robustez de estimadores.

Cálculo de estimações para estruturas de modelos lineares em relação aos parâmetros: método dos mínimos quadrados. Regressão multilinear. Diagnósticos de ajuste: análise de resíduos e inferência estatística (regiões de confiança, etc.). Discriminação de modelos. Análise em Componentes Principais. Estimadores tendenciosos. Pseudo-mínimos quadrados (PLS) e regressão em componentes principais (PCR). Introdução à quimiometria.

Cálculo de estimações para estruturas de modelos não lineares em relação aos parâmetros: métodos de Newton, Gauss-Newton e Levenberg-Marquardt. Otimização com restrições. Cálculo de estimadores Bayesianos. Discriminação rotacional e seleção automática de parâmetros a estimar.

Modelos descritos por equações diferenciais e algébricas: cálculo de sensibilidades. Modelos com erros aleatórios independentes aditivos na saída e na entrada: método dos erros nas variáveis.

Ajuste de modelos em linha. Filtro Estendido de Kalman e Estimadores de Horizonte Móvel.

Planejamento seqüencial de experiências: definição dos diferentes critérios de otimalidade. Ajuste de modelos em linha. Filtro Estendido de Kalman e Estimadores de Horizonte Móvel.

Planejamento sequencial de experiências: definição dos diferentes critérios de otimalidade.

## **BIBLIOGRAFIA:**

BATES D.M. WATTS D.G., Nonlinear Regression Analysis and its Application, Wiley, 2007

BARD Y., Nonlinear Parameter Estimation, Academic Press, New York, 1974

BERETRON, R.G., Applied Chemometrics for Scientists, John Wiley & Sons, 2007

BOX G.E.P. HUNTER W.G. HUNTER J.S., Statistics for experimenters: introduction to design, data analysis and model building., John Wiley & Sons, 2005

BISHOP, C.M., Pattern Recognition and Machine Learning, Springer, 2006

De GROOT, M.H., SCHERVISH, M.J., Probability and Statistics 4<sup>th</sup> Ed., Addison-Wesley, 2011

LEROY F., Ideas of Statistics, John Wiley & Sons, 1981

Ljung, L., Modeling & Identification of Dynamic Systems, Studentlitteratur AB, UK, 2016

LJUNG L., System Identification, Prentice-Hall Inc., N.J., 1999.

MONTGOMERY D.C. RUNGER G.C., Applied Statistics and Probability for Engineers, Wiley, 2013

STEWART, W.E., CARACOTSIOS, M., Computer Aided Modeling of Reactive Systems, John Wiley & Sons, 2008

WALTER E. PRONZATO L., Identification de Modèles Paramétriques à partir de données expérimentales, Masson, Paris, 1994

WALTER E. PRONZATO L., Identification of Parametric Models from Experimental Data, Springer, 1997