



# **SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTROS DE PARTÍCULAS ASIR**

**José Geraldo Gonçalves da Silva**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos – Mestrado Profissional, PPGEP/ITEC, da Universidade Federal do Pará, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia de Processos.

Orientadores: Clauderino da Silva Batista

João Nazareno Nonato Quaresma

Belém

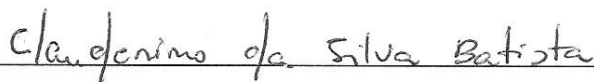
Abril de 2015

**SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A  
TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTRO DE PARTÍCULAS  
ASIR**

José Geraldo Gonçalves da Silva

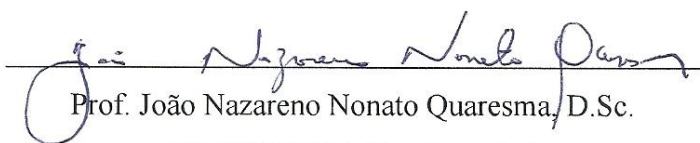
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE PROCESSOS  
(PPGEP/ITEC) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM  
ENGENHARIA DE PROCESSOS.

Examinada por:



Prof. Clauderino da Silva Batista, D.Eng.

(PPGEP/UFPA-Orientador)



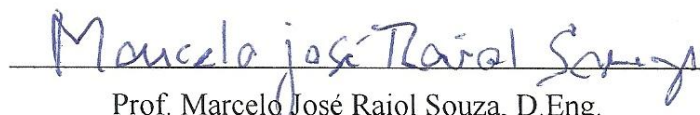
Prof. João Nazareno Nonato Quaresma, D.Sc.

(PPGEP/UFPA-Coorientador)



Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D.Sc.

(PPGEP/UFPA-Membro)



Prof. Marcelo José Raiol Souza, D.Eng.

(CCNT/UEPA-Membro)

BELÉM, PA - BRASIL

ABRIL DE 2015

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**

---

Silva, José Geraldo Gonçalves da  
Solução de equações de balanço populacional usando a  
técnica da transformada de Laplace e filtro de partículas  
asir/José Geraldo Gonçalves da Silva.- 2015.

Orientadores: Clauderino da Silva Batista  
João Nazareno Nonato Quaresma

Dissertação (Mestrado Profissional) - Universidade  
Federal do Pará. Instituto de Tecnologia. Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia de Processos, 2015

1.Transformada de Laplace 2. Matemática na engenharia  
3. Filtros de partículas I. Título

CDD 23.ed.515.723

---

*À minha esposa Shirley e aos meus filhos José Miguel e José Vitor que me dão muita força e carinho, e colaboraram em todos os momentos para a realização deste trabalho.*

## **AGRADECIMENTOS**

A DEUS, pela força que me impulsionou a chegar ao final de mais uma etapa de minha vida.

Ao meu falecido pai que sempre acreditou no meu potencial, e à minha mãe que sempre está ao meu lado quando preciso de apoio fraternal.

À minha esposa Shirley e aos meus filhos José Miguel e José Vitor que me dão muita força e carinho, e colaboraram em todos os momentos para a realização deste trabalho.

Ao professor Clauderino da Silva Batista, pela orientação, incentivo, amizade e paciência dispensada durante a realização deste trabalho.

Aos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos pelo ensino de qualidade.

Aos meus amigos Samuel, Valdelírio, Frayzer, Nildsen e Kátia pelo incentivo e amizade.

A todos os companheiros do laboratório que me ajudaram direta e indiretamente na realização deste trabalho.

Resumo da Dissertação apresentada ao PPGEP/UFPA como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia de Processos (M.Eng.)

**SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL USANDO A  
TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE E FILTRO DE PARTÍCULAS  
ASIR**

**José Geraldo Gonçalves da Silva**

Abril/2015

Orientadores: Cláuderino da Silva Batista

João Nazareno Nonato Quaresma

Área de Concentração: Engenharia de Processos

A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica foi usada para resolver uma equação integro-diferencial parcial que relaciona a modelagem matemática do problema físico para estudar processos convectivos com taxas de nascimento e morte de partículas e aerossóis. Tal modelo é governado PBE, na qual leva em consideração a nucleação, crescimento e processos de coagulação. Um método Bayesiano foi usado para resolver o problema inverso hiperbólico e não-linear, e estimar a função densidade de tamanho de partículas, e assim prever o comportamento dinâmico do sistema físico. Especificamente, o filtro de partículas com Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR) foi utilizado como metodologia de solução do problema. Por meio dessas soluções, resultados numéricos foram obtidos e comparados com os disponíveis na literatura para sistemas particulados, permitindo uma avaliação crítica da presente metodologia de solução.

Abstract of Dissertation presented to PPGE/UFPA as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master in Process Engineering (M.Eng.)

**SOLUTION OF A GENERAL POPULATION BALANCE EQUATION BY THE  
LAPLACE TRANSFORM AND ASIR PARTICLES FILTER TECHNIQUES**

José Geraldo Gonçalves da Silva

April/2015

Advisors: Clauderino da Silva Batista

João Nazareno Nonato Quaresma

Research Area: Process Engineering

The Laplace transform technique with numerical inversion was used to solve an integro-partial-differential equation related to the mathematical modeling of the physical problem to study convective processes with birth and death rates of particles or aerosols. Such model is governed by the population balance equation (PBE), in which is taken into account the nucleation, growth and coagulation processes. A Bayesian method was employed to solve the hyperbolic and non-linear inverse problem and estimate the size distribution density function, thus predicting the dynamic behavior of the physical system. Specifically, particulate filters with Auxiliary Sampling Importance Resampling (ASIR) has been applied as a method of solving the problem. From these solutions, numerical results were obtained and compared with those in the literature for particulate systems permitting a critical evaluation of the present solution methodology.

## SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1 MOTIVAÇÃO.....	1
1.2 OBJETIVOS.....	2
1.3 CONTRIBUIÇÕES DA DISSERTAÇÃO.....	2
1.4 SINTESE DO TRABALHO.....	2
2. ESTADO DA ARTE E REVISÃO DA LITERATURA.....	4
2.1 EQUAÇÕES DO BALANÇO POPULACIONAL.....	4
2.2 APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS.....	7
2.3 METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÃO DO BALANÇO POPULACIONAL (PBE).....	10
2.3.1 Método das características.....	10
2.3.2 Método da transformada de Laplace.....	11
2.3.3 Inversão numérica da transformada de Laplace.....	14
2.4 PROBLEMAS INVERSOS.....	16
2.5 FILTROS BAYESIANOS.....	18
2.5.1 Filtro de Kalman.....	21
3. MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO.....	24
3.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	24
3.2 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO UTILIZANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE.....	25
3.2.1 Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978) para sistemas particulados.....	25
4. FILTRO DE PARTÍCULAS.....	35
4.1 AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA.....	36
4.2 AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIS).....	37
4.3 AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR).....	41
4.4 AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA AUXILIAR (ASIR).....	43



4.5 APLICAÇÃO PARA O PROBLEMA DE GELBARD E SEINFELD (1978).....	46
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES DOS FILTROS DE PARTÍCULAS SIR E ASIR.....	47
5.1 FILTROS COM AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR) E AUXILIAR (ASIR).....	47
5.2 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 1.....	56
5.3 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 2.....	61
5.4 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 3.....	66
5.5 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 4.....	71
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	76
6.1 CONCLUSÕES.....	76
6.2 SUGESTÕES.....	77
REFERÊNCIAS.....	79
APÊNDICE A: CASO-TESTE 1.....	89
APÊNDICE B: CASO-TESTE 2.....	99
APÊNDICE C: CASO-TESTE 3.....	109
APÊNDICE D: CASO-TESTE 4.....	118

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1</b>	Termos do balanço populacional. Fonte: IPT (2007).....	5
<b>Figura 2.2</b>	Termos no balanço populacional. Fonte: IPT (2007).....	5
<b>Figura 2.3</b>	Relação da função densidade de distribuição de tamanho com volume da partícula. Fonte: IPT (2007).....	7
<b>Figura 2.4</b>	Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991).....	8
<b>Figura 2.5</b>	Filtro Bayesiano. Fonte: KAIPIO e SOMERSALO (2004).....	21
<b>Figura 2.6</b>	Ilustração esquemática para o filtro de Kalman atualizado com preditor-corretor. Fonte: CHEN (2003).....	22
<b>Figura 4.1</b>	Reamostragem. Fonte: CHEN (2002).....	42
<b>Figura 4.2</b>	Algoritmo do filtro de partícula ASIR. Fonte: SILVA (2010)....	45
<b>Figura 5.1</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,03 – 0,03) e $\tau = 0,25$ .....	50
<b>Figura 5.2</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,03 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	50
<b>Figura 5.3</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,03) e $\tau = 0,25$ .....	51
<b>Figura 5.4</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e $\tau = 0,25$ .....	51
<b>Figura 5.5</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,03 – 0,03) e $\tau = 1,0$ .....	52
<b>Figura 5.6</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,03 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	52
<b>Figura 5.7</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,05 – 0,03) e $\tau = 1,0$ .....	53
<b>Figura 5.8</b>	Comparação da solução exata com variação do $\sigma$ (0,05 – 0,05) e $\tau = 1,0$ .....	53
<b>Figura 5.9</b>	Comparação da solução exata com o $\sigma$ (0,03 – 0,03) e $\tau = 2,0$ .....	54
<b>Figura 5.10</b>	Comparação da solução exata com o $\sigma$ (0,03 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	54

<b>Figura 5.11</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,03) e $\tau = 2,0$ .....	55
<b>Figura 5.12</b>	Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e $\tau = 2,0$ .....	55
<b>Figura 5.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	57
<b>Figura 5.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	57
<b>Figura 5.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	58
<b>Figura 5.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	58
<b>Figura 5.17</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	59
<b>Figura 5.18</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	59
<b>Figura 5.19</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	60
<b>Figura 5.20</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	60
<b>Figura 5.21</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	62
<b>Figura 5.22</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	62
<b>Figura 5.23</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	63
<b>Figura 5.24</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	63
<b>Figura 5.25</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	64
<b>Figura 5.26</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	64

<b>Figura 5.27</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	65
<b>Figura 5.28</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	65
<b>Figura 5.29</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	67
<b>Figura 5.30</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	67
<b>Figura 5.31</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	68
<b>Figura 5.32</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	68
<b>Figura 5.33</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	69
<b>Figura 5.34</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	69
<b>Figura 5.35</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	70
<b>Figura 5.36</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	70
<b>Figura 5.37</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	72
<b>Figura 5.38</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	72
<b>Figura 5.39</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	73
<b>Figura 5.40</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	73
<b>Figura 5.41</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	74
<b>Figura 5.42</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	74

<b>Figura 5.43</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro SIR).....	75
<b>Figura 5.44</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 2,0$ (filtro ASIR).....	75
<b>Figura A.1</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	90
<b>Figura A.2</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	90
<b>Figura A.3</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	91
<b>Figura A.4</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	91
<b>Figura A.5</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	92
<b>Figura A.6</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	92
<b>Figura A.7</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	93
<b>Figura A.8</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	93
<b>Figura A.9</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	95
<b>Figura A.10</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	95
<b>Figura A.11</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	96
<b>Figura A.12</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	96
<b>Figura A.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	97
<b>Figura A.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	97

<b>Figura A.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	98
<b>Figura A.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 1 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	98
<b>Figura B.1</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	100
<b>Figura B.2</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	100
<b>Figura B.3</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	101
<b>Figura B.4</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	101
<b>Figura B.5</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	102
<b>Figura B.6</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	102
<b>Figura B.7</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	103
<b>Figura B.8</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	103
<b>Figura B.9</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	105
<b>Figura B.10</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	105
<b>Figura B.11</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	106
<b>Figura B.12</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	106
<b>Figura B.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	107
<b>Figura B.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	107

<b>Figura B.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	108
<b>Figura B.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 2 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	108
<b>Figura C.1</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	110
<b>Figura C.2</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	110
<b>Figura C.3</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	111
<b>Figura C.4</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	111
<b>Figura C.5</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	112
<b>Figura C.6</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	112
<b>Figura C.7</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	113
<b>Figura C.8</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	113
<b>Figura C.9</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	114
<b>Figura C.10</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	114
<b>Figura C.11</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	115
<b>Figura C.12</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	115
<b>Figura C.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	116
<b>Figura C.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	116

<b>Figura C.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	117
<b>Figura C.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 3 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	117
<b>Figura D.1</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	119
<b>Figura D.2</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	119
<b>Figura D.3</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	120
<b>Figura D.4</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	120
<b>Figura D.5</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	121
<b>Figura D.6</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	121
<b>Figura D.7</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro SIR).....	122
<b>Figura D.8</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 0,25$ (filtro ASIR).....	122
<b>Figura D.9</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	123
<b>Figura D.10</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	123
<b>Figura D.11</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	124
<b>Figura D.12</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,03 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	124
<b>Figura D.13</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	125
<b>Figura D.14</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,03), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	125



<b>Figura D.15</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro SIR).....	126
<b>Figura D.16</b>	Comparação das medidas com $\sigma$ (0,05 – 0,05), para o caso- teste 4 e $\tau = 1,0$ (filtro ASIR).....	126

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 5.1</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 0,25$ (Filtro SIR).....	48
<b>Tabela 5.2</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 1,0$ (Filtro SIR).....	48
<b>Tabela 5.3</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (Filtro SIR).....	48
<b>Tabela 5.4</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 0,25$ (Filtro ASIR).....	48
<b>Tabela 5.5</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 1,0$ (Filtro ASIR).....	49
<b>Tabela 5.6</b>	Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e $\tau = 2,0$ (Filtro ASIR).....	49

## NOMENCLATURA

$B(v,t)dv$	Taxa de nascimento de partículas
$D$	Diâmetro da partícula, $\mu m$
$D(v,t)dv$	Taxa de morte de partículas
$L_i(x_{i+1} x_i)$	Núcleo anterior
$M_0(t)$	Número total de partículas por unidade de volume do fluido, $cm^{-3}$
$M_1(t)$	Volume total de partículas por unidade de volume do fluido, $\mu m^3 / cm^3$
$N$	Número de partículas
$N_p$	Número de partículas
$N_s$	Número de células
$N_t$	Número de termos
$N_0$	Número total de partículas por unidade de volume no tempo zero, $cm^{-3}$
$n(D,t)$	Função densidade de número, $\mu m^{-1}cm^{-3}$
$n(v,t)$	Função densidade de distribuição de tamanho, $\mu m^{-3}cm^{-3}$
$P(x_0)$	Distribuição inicial da variável de estado
$P(x_i x_{i-1})$	Equação de transição da variável de estado
$P(y_i x_i)$	Distribuição marginal da variável de observação
$S_0$	Taxa de nucleação, $cm^3 / s$
$v$	Volume da partícula, $cm^3$
$v_0$	Volume da partícula no tempo zero, $cm^3$
$\tilde{v}$	Volume da partícula, $cm^3$
$v^*$	Volume da partícula sobre o qual a nucleação ocorre, $cm^3$
$w(x_{0,t})$	Peso de importância
$w(x_t^{*(i)})$	Peso de importância normalizados

## LETRAS GREGAS

$\alpha_0$	Taxa de variação de volume da partícula de tamanho $v$ , $\mu m^3 / s$
$\beta_0$	Coefficiente de coagulação constante, $cm^3 / s$
$\beta(v + \tilde{v})$	Coefficiente de coagulação variável, $cm^3 / s$
$\Delta$	Parâmetro adimensional de velocidade

$\delta(x_{0:k} - x'_{0:k})$	Delta de Dirac das medidas
$\theta$	Relação entre a taxa de remoção de partículas e a taxa de coagulação
$\Lambda$	Relação entre a taxa de condensação de partículas e a taxa de coagulação
$\pi(x_{0:t}   y_{1:t})$	Distribuição por importância
$\sigma$	Desvio Padrão
$\sigma_0$	Condensação constante para crescimento uniforme, $\mu m^3 / s$
$\sigma_1$	Condensação constante para crescimento linear, $s^{-1}$
$\sigma_{medidas}$	Desvio padrão do valor medido
$\sigma_{modelo}$	Desvio padrão do valor simulado
$\sigma_{med}$	Desvio padrão do valor medido
$\sigma_{mod}$	Desvio padrão do valor simulado
$\tau$	Tempo adimensional

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

O presente capítulo estabelece as motivações e os principais objetivos ligados ao estudo de sistemas particulados, pela aplicação da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica e filtro Bayesiano (com amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar) na solução das equações de balanço populacional associadas ao problema físico de sistemas particulados.

### 1.1 - MOTIVAÇÃO

O comportamento dinâmico de uma população de pequenas partículas é um assunto de interesse nos campos da física atmosférica, cristalização e da química coloidal. Em todos esses sistemas, as partículas crescem por colisões e coalescência com outras partículas (coagulação) e com crescimento de material no meio contendo partículas (RAMABHADRAN *et al.*, 1976). A descrição matemática do sistema onde a nucleação, crescimento e agregação ocorrem é referido como balanço populacional (BP). O BP muitas vezes toma a forma de uma equação íntegro-diferencial parcial hiperbólica não-linear e raramente tratável analiticamente (LITSTER *et al.*, 1995).

Particularmente, para aerossóis atmosféricos, os fenômenos mais importantes são a coagulação e a condensação heterogênea. Por causa da forte dependência das propriedades de aerossóis como dispersão da luz sobre tamanho de partícula, é desejável entender com mais detalhes como a distribuição de tamanho evolui sob a influência desses dois processos. A distribuição de tamanho de um aerossol é descrito por sua função densidade de distribuição de tamanho, que é regida por uma equação geral de balanço populacional. Para simulações da dinâmica atmosférica de aerossóis, incluindo o transporte turbulento e dispersão, a solução numérica da equação de BP pode ser necessária.

Como o processo é complicado pela interação dos mecanismos envolvidos, é difícil e, muitas vezes impossível, propor normas de *scale-up* e de projetos a partir de dados experimentais. Assim, uma abordagem de modelagem fornece uma ferramenta útil para a interpretação de dados experimentais. O modelo tem de ser tão preciso e

completo quanto possível no que diz respeito aos dois fenômenos principais envolvidos: a mistura e evolução de sólidos (MARCHISIO *et al.*, 2003).

## 1.2 - OBJETIVOS

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é obter solução através da transformada de Laplace com inversão numérica e do filtro Bayesiano com amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR), para a equação geral que rege a função densidade de distribuição de tamanho de particulados. A solução deve ser útil para estimar o comportamento dinâmico de um sistema de partículas onde estará ocorrendo coagulação e condensação. Além disso, soluções analíticas para as situações anteriormente tratadas na literatura serão obtidas a fim de permitir uma comparação crítica da metodologia de solução atual.

## 1.3 - CONTRIBUIÇÕES DA DISSERTAÇÃO

Partículas precipitadas, normalmente são pequenos e discretos cristais, juntamente com aglomerados, cada um com diferentes tamanhos. A distribuição de tamanho de partícula (PSD, do inglês *Particle Size Distribution*) é frequentemente um importante indicador da qualidade para uma ampla faixa de produtos industriais, incluindo corantes, química fina e fármacos (FALOPE *et al.*, 2001).

A presente dissertação oferece uma alternativa para a solução de equação de balanço populacional (PBE) com taxa de crescimento e remoção fazendo-se uso da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica e do filtro ASIR. O filtro ASIR é usado no presente trabalho para estimar a função densidade de tamanho das partículas inerentes ao processo de sistema particulado.

## 1.4 - SÍNTESE DO TRABALHO

O capítulo introdutório procura situar motivações, objetivos e as contribuições do presente trabalho. É feito também um comentário sobre a importância do comportamento dinâmico de uma população de pequenas partículas, o qual é um assunto de interesse nos campos da física atmosférica, de cristalização e da química coloidal.

O Capítulo 2 apresenta uma revisão das principais contribuições na literatura que abordaram o caso de sistemas particulados, envolvendo a taxa de crescimento, nascimento e morte, remoção e nucleação. É também dada atenção à técnica da transformada de Laplace, ao método das características, bem como à técnica da transformada de Laplace com inversão numérica na solução das equações de balanço populacional associadas ao problema físico abordado.

O Capítulo 3 apresenta a formulação matemática do problema para sistemas particulados, com as respectivas soluções utilizando-se a metodologia da transformada de Laplace com inversão numérica, visando à obtenção computacional dos resultados dos problemas estudados.

O Capítulo 4 apresenta uma revisão de problemas inversos e filtros Bayesianos com ênfase nos filtros de partículas. Os filtros de partículas são técnicas estocásticas usadas para estimar o comportamento de um fenômeno ao longo de uma trajetória utilizando dados de medidas reais e pontuais.

A discussão dos resultados obtidos pela técnica de filtro ASIR é comparada com o filtro por amostragem e Reamostragem por Importância Sequencial (SIR) mostrada no Capítulo 5, ilustrando-se os resultados encontrados, e comparando-os aos resultados disponíveis na literatura.

Finalmente, o Capítulo 6 apresenta as conclusões referentes à presente dissertação, bem como sugestões de sua continuação em etapas futuras.

## CAPÍTULO 2

### ESTADO DA ARTE E REVISÃO DA LITERATURA

#### 2.1 - EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL

Durante o último século, as equações de balanço populacional (PBEs, da sigla em inglês, *Population Balance Equations*) têm se estabelecido como uma forma rigorosa de descrever uma variedade de sistemas particulados, tais como populações de células, grande números de gotas ou bolhas, sólidos granulares, cristais, polímeros e coagulantes de aerossóis, e até mesmo sistemas astrofísicos. Em todas essas situações, o objetivo é prever a evolução da distribuição de uma ou mais propriedades que caracterizam o indivíduo, partículas ou entidades, e a PBE dinâmica é em essência uma equação de balanço de número para descrever essa evolução.

Segundo RIGOPOULUS e JONES (2003) a PBE teve origem no trabalho de SMOLUCHOWSKI (1917), cuja equação discreta para agregação pura desenvolveu-se por seu estudo para o movimento browniano. A equação foi mais tarde lançada de forma contínua e ampliada para incluir o processo de quebra de partículas.

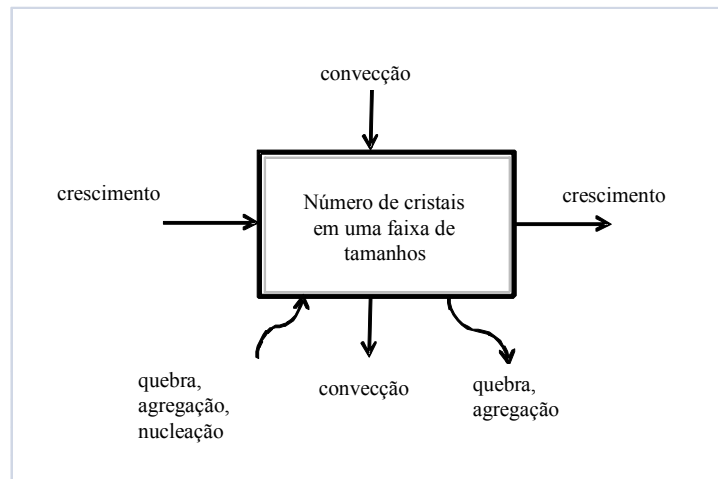
Assim, na década de 1960, HULBURT e KATZ (1964) e RANDOLPH (1969) formularam a PBE para os fenômenos de nucleação e crescimento. As etapas seguintes, como o levantamento exaustivo de DRAKE (1972), a análise de RAMKRISHNA e BORWANKER (1973) e a revisão de RAMKRISHNA (1985) fizeram muito para a racionalização da PBE e estabelecê-la como um método popular para a análise de sistemas particulados.

O número de partículas dentro das classes e tamanho é importante também para os processos industriais secundários, como separação sólido-líquido e secagem. A modelagem da geração de distribuições de tamanho de partículas para a operação da unidade de cristalização tem sido um desafio dentro desta área de tecnologia de partículas por algumas décadas (FALOPE *et al.*, 2001).

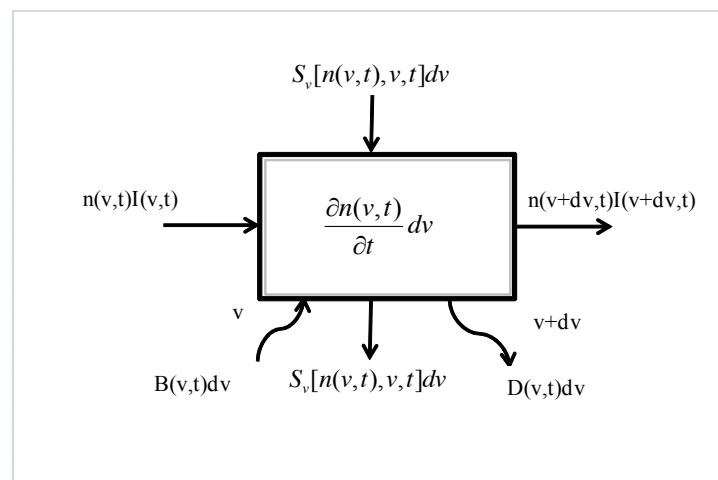
A maioria dos modelos foi desenvolvida utilizando-se um balanço de número de cristais, mais comumente conhecidos como balanço populacional, que considera a forma de uma equação íntegro-diferencial. Inicialmente, o desenvolvimento desses modelos levou somente em conta o nascimento de partículas, nucleação e crescimento



de cristal. Posteriormente, os processos secundários como a agregação e quebra de cristais no sistema foram também incluídos (RANDOLPH, 1969; RANDOLPH e LARSON, 1988). Nas Figuras 2.1 e 2.2, é apresentado o modelo conceitual para a função densidade de distribuição de tamanho.



**Figura 2.1** – Termos do balanço populacional. Fonte: IPT (2007).



**Figura 2.2** – Termos no balanço populacional. Fonte: IPT (2007).

Em sistemas de fases dispersas o domínio material consiste de uma fase contínua e de uma fase dispersa. Esta última pode ser considerada como uma população de partículas, o que talvez se destaque pela propriedade de coordenadas. O conceito geral de equações de balanço populacional para modelos de sistemas de fases dispersas foi introduzido pela primeira vez na engenharia química por HULBURT e KATZ (1964) e uma revisão foi fornecida por RAMKRISHNA (1985).

A modelagem matemática de processos sólidos por meio de balanços populacionais é um campo de grande importância, mas as aplicações desse conceito também foram feitas na modelagem de processos de sistemas biológicos (FREDRICKSON *et al.*, 1967) e em outras áreas. Embora partículas individuais talvez se destaquem por mais de uma propriedade de coordenadas, em engenharia química quase todas as publicações são limitadas a um problema unidimensional (WULKOW *et al.*, 2001).

Um sistema particulado quimicamente homogêneo e seu estado espacial é descrito pela sua função densidade de distribuição de tamanho  $n(v,t)$ , onde  $n(v,t)dv$  é o número de partículas por unidade de volume de fluido numa escala de volume  $v$  para  $v+dv$ . A dinâmica de tal sistema, no qual as partículas individuais podem crescer através de adesão de material da fase fluida (ou encolher pela perda de material) e no qual as partículas podem colidir e coagular é descrita pela equação do balanço geral de partículas (GELBARD e SEINFELD, 1978)

$$\frac{\partial n_v(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I_v(v,t)n_v(v,t)]}{\partial v} = \int_0^{v/2} \beta_v(v-\tilde{v},\tilde{v})n_v(v-\tilde{v},t)n_v(\tilde{v},t)d\tilde{v} - n_v(v,t) \int_0^\infty \beta_v(v,\tilde{v})n_v(\tilde{v},t)d\tilde{v} + S_v[n_v(v,t),v,t] \quad (2.1)$$

em que,  $I_v(v,t)=dv/dt$ , é a taxa de mudança de volume  $v$  pela transferência de material entre partículas e fase fluida,  $\beta_v(v,\tilde{v})$  é o coeficiente de coagulação da partícula para volumes  $v$  e  $\tilde{v}$ , e  $S_v$  é a taxa líquida de adição de partículas novas no sistema. As condições inicial e de contorno requeridas para a Eq. (2.1) são geralmente dadas como:

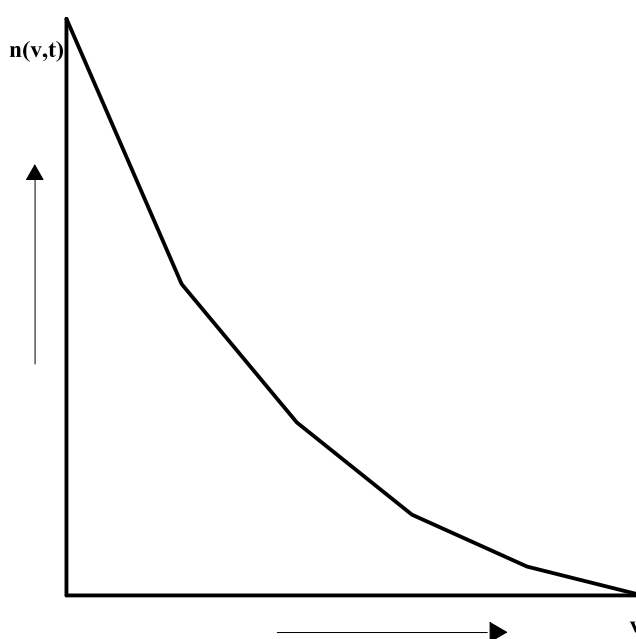
$$n_v(v,0) = n_{v_0}(v) \quad (2.2)$$

$$n_v(0,t) = 0 \quad (2.3)$$

O primeiro termo do lado direito da Eq. (2.1) representa a taxa de crescimento da partícula pela transferência de material para a partícula individual. O segundo termo representa a taxa de acúmulo de partículas numa escala de tamanho  $(v,v+dv)$  pela colisão de duas partículas para volumes  $(v-\tilde{v})$  e  $(\tilde{v})$  para formar partículas de volume  $(v)$  (assumindo conservação de volume durante a coagulação). O terceiro termo representa a taxa de perda de partícula na escala de tamanho  $(v,v+dv)$  pela colisão com

todas as outras partículas. O último termo representa todas as fontes e sumidouros de partículas. A Eq. (2.1) surge em uma grande variedade de contextos físicos, tais como química coloidal, dinâmica atmosférica de aerossóis, cinética de cristalização e dinâmica de populações biológicas (GELBARD e SEINFELD, 1978).

Na Figura 2.3, observa-se a relação entre a função densidade de distribuição de tamanho e o aumento do volume da partícula. Observa-se graficamente, onde o volume de partículas é menor a função densidade de partículas é maior e devido as colisões entre as partículas o volume cresce, logo a função densidade de distribuição de tamanho diminui devido a perda de partículas para o corpo que esta aumentando de volume.



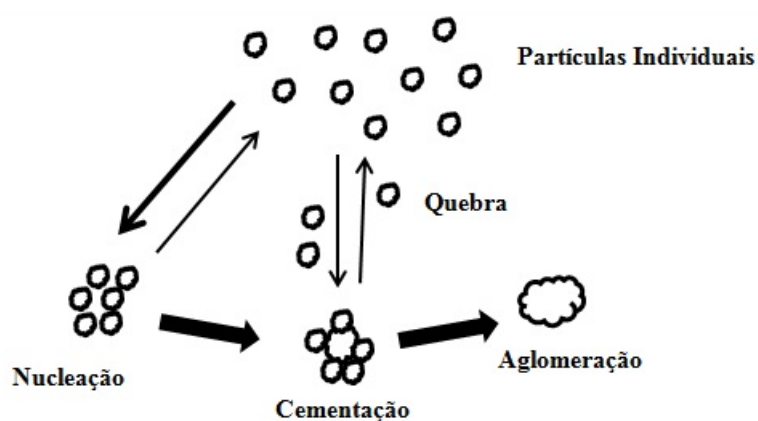
**Figura 2.3** – Relação função densidade de distribuição de tamanho com volume da partícula. Fonte: IPT (2007).

## 2.2 - APLICAÇÕES EM SISTEMAS PARTICULADOS

Uma propriedade importante de muitos processos particulados é a distribuição de tamanho de partículas (PSD) que controla os principais aspectos do processo e afeta as propriedades do produto final (ALEXOUPOULOS *et al.*, 2004). A distribuição do tamanho de cristal final (CSD), bem como a morfologia do cristal (PAGLIOLICO *et al.*, 1999; JUNG *et al.*, 2000) são fortemente influenciadas pelas concentrações locais e, em seguida, pela mistura se o processo é muito rápido. Além disso, a mistura também desempenha um papel importante na determinação das interações das partículas (KRUTZER *et al.*, 1995; ZAUNER e JONES, 2000; SUNG *et al.*, 2000).

Muitos processos químicos, tais como catalisadores, pigmentos, preparação de produtos farmacêuticos, perfuração de poços de petróleo no mar, e tratamento de água, envolvem precipitação em uma ou mais etapas-chaves da operação global. A precipitação é um problema muito complexo, uma vez que é influenciada por vários fenômenos interagindo, e por isso tem atraído muita atenção de pesquisadores nessa linha de pesquisa.

A precipitação ocorre através de várias etapas, ou seja, nucleação, crescimento de cristais e, eventualmente agregação e quebra como mostra a Figura 2.4. Como o processo é rápido, com mistura em várias escalas, desempenha um importante papel na determinação da distribuição de tamanho do cristal final (CSD) e na morfologia dos cristais. Vários testes de reação de precipitação têm sido conduzidos para essa investigação, nos quais se utiliza o carbonato de cálcio, o sulfato de bário, o oxalato de cálcio e o oxalato de ítrio. Uma série de trabalhos foi publicada sobre este assunto tentando explicar os diferentes aspectos do processo (MARCHISIO *et al.*, 2002).



**Figura 2.4** - Precipitação de partículas: nucleação, cementação, quebra e aglomeração. Fonte: ILIEVSKI (1991).

A precipitação com moderação de sais solúveis é um processo importante na produção de diversos materiais, tais como catalisadores, proteínas, produtos farmacêuticos, pigmentos e haleto de prata para a indústria fotográfica. A qualidade do produto final dos materiais obtidos por esta operação unitária é fortemente influenciada pela morfologia e pela distribuição do tamanho de cristais. O processo envolve três etapas distintas: a reação química, nucleação e crescimento. As duas primeiras etapas são muito rápidas, o processo é definido "mistura sensível", no sentido de que a taxa não

é controlada apenas pela cinética de precipitação, mas também pela mistura (MARCHISIO e BARRESI, 2001).

Agregação e quebra de partículas finas e ultrafinas em dispersões agitadas é um processo relevante em engenharia química. Tratamento de água, pós-processamento de polímeros, a dispersão dos minerais e a cristalização são algumas das inúmeras aplicações onde a agregação e a quebra de partículas desempenham um papel importante. Os produtos finais são na forma de uma população de agregados comumente descrita por uma distribuição de tamanho de partícula ou *cluster* (PSD) (MARCHISIO *et al.*, 2006a).

Populações de agregados podem ser caracterizadas por diversas técnicas experimentais, incluindo espalhamento de luz, espectroscopia de som, ou microscopia. Métodos de dispersão de luz são amplamente utilizados para caracterizar as dispersões diluídas e permitem obter propriedades médias da distribuição da massa de *cluster* (DMC), tais como o raio médio de rotação ou a massa ponderada à massa média, bem como informações sobre a estrutura dos agregados através do fator de estrutura (MARCHISIO *et al.*, 2006a).

Processos particulados estão entre os mais comuns em processos químicos. Técnicas para a geração eficiente e precisa de soluções para as equações governantes são necessárias para o projeto e controle destes sistemas. As exigências variam de qualidade da solução e velocidade entre as aplicações, bem como a diversidade de sistemas específicos de uma análise cuidadosa na escolha adequada de técnicas numéricas.

Modelos de balanço populacional são estruturas do sistema onde uma população discreta está distribuída sobre uma ou mais variáveis, incluindo as distribuições de tamanho de partícula em cristalização, precipitação, polimerização e estrutura interna de células biológicas. O resultado é geralmente uma equação íntegro-diferencial parcial, com condição de contorno e raramente admite solução analítica, sendo necessária a utilização de técnicas numéricas (MAHONEY e RAMKRISHNA, 2002).

## 2.3 - METODOLOGIAS DE SOLUÇÕES PARA EQUAÇÕES DE BALANÇO POPULACIONAL

### 2.3.1 - Método das características

O método das características é um método que pode ser usado para resolver um problema de valor inicial (PVI) de uma equação diferencial parcial de primeira ordem. Considere a EDP de primeira ordem linear com duas variáveis independentes, juntamente com a condição inicial (SARRA, 2002):

$$a(x,t)u_x + b(x,t)u_t + c(x,t)u = 0 \quad (2.4.a)$$

$$u(x,0) = f(x) \quad (2.4.b)$$

O objetivo do método das características, quando aplicado a esta equação, é a mudança de coordenadas  $(x,t)$  para um novo sistema de coordenadas  $(x_0,s)$  em que a EDP se torna uma equação diferencial ordinária ao longo de certas curvas no plano  $x-t$ . Esse tipo de curva  $\{[x(s),t(s)]: 0 < s < \infty\}$ , ao longo do qual a solução da EDP se reduz a uma EDO, são chamadas curvas características ou apenas características. A nova variável  $s$  variará, e a nova variável  $x_0$  será constante ao longo das suas características. A variável  $t$  irá mudar ao longo da curva inicial, no plano  $x-t$  (ao longo da linha em  $t=0$ ). Fazendo-se a seguinte consideração:

$$\frac{dx}{ds} = a(x,t) \quad (2.5)$$

$$\frac{dt}{ds} = b(x,t) \quad (2.6)$$

obtém-se,

$$\frac{du}{ds} = \frac{dx}{ds}u_x + \frac{dt}{ds}u_t = a(x,t)u_x + b(x,t)u_t \quad (2.7)$$

e, ao longo das curvas características, a EDP se torna uma EDO

$$\frac{du}{ds} + c(x,t)u = 0 \quad (2.8)$$

As Eqs. (2.5) e (2.6) são referenciadas como equações características (SARRA, 2002).

### 2.3.2 - Método da transformada de Laplace

A teoria da transformada de Laplace, ou transformação de Laplace, também mencionada como cálculo operacional, tornou-se, em anos recentes, parte essencial da troca matemática de engenheiros, físicos, matemáticos e outros cientistas. Isso porque, além de ser de grande interesse teórico, os métodos da transformada de Laplace proporcionam meios fáceis e efetivos para a solução de muitos problemas que surgem em vários campos da ciência e da engenharia. O assunto se originou em tentativas para justificar rigorosamente certas regras operacionais usadas por Heaviside no século XIX para resolver equações na teoria eletromagnética. Essas tentativas finalmente tiveram seu êxito no início do século XX através dos esforços de Bromwich, Carson, Van der Pol e outros matemáticos que empregaram a teoria das variáveis complexas (BALDINO, 1979).

Oliver Heaviside, quando estudava processos simples para obter soluções de equações diferenciais, vislumbrou um método de cálculo operacional que leva ao conceito matemático da transformada de Laplace, que é um método simples para transformar um problema de valor inicial em uma equação algébrica, de modo a obter uma solução deste PVI de uma forma indireta, sem o cálculo de integrais e derivadas. Pela utilidade deste método nas Engenharias, Matemática, Computação, Física e outras Ciências Aplicadas, o método representa algo importante neste contexto. As transformadas de Laplace são muito usadas em diversas situações (SODRÉ, 2003).

A transformada de Laplace é particularmente útil na análise de circuitos, onde os termos descontínuos ou impulsivos são comuns, mas também é importante em outras aplicações (BOYCE e DIPRIMA, 2001).

A técnica da Transformada de Laplace é uma ferramenta poderosa na determinação de soluções de equações diferenciais ordinárias com condições iniciais. O operador  $\mathcal{L}$  é um operador integral (linear) que remove derivadas, transformando EDOs em equações algébricas simples. A transformada de Laplace é definida por uma integral variando de zero a infinito. A seguir algumas particularidades da transformada de Laplace (RAINVILLE, 1964; BALDINO, 1979):

i) Definição da transformada de Laplace: Seja  $F(t)$  uma função de  $t$  definida para  $t > 0$ . Então, a transformada de Laplace de  $F(t)$  é representada por  $\mathcal{L}\{F(t)\}$  é definida por:

$$\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} F(t) dt \quad (2.9)$$

Diz-se que a transformada de Laplace de  $F(t)$  existe se a integral dada pela Eq. (2.9) converge para algum valor de  $s$ ; caso contrário ela não existe.

ii) Notação: Se uma função de  $t$  é indicada em termos de uma letra maiúscula, tal como  $F(t)$ ,  $G(t)$ ,  $Y(t)$ , etc, a transformada de Laplace da função é denominada pela letra minúscula correspondente, isto é,  $f(s)$ ,  $g(s)$ ,  $y(s)$ , etc. Em outros casos, um til ( $\sim$ ) pode ser usado para denotar a transformada de Laplace.

iii) Condições suficientes para existência da transformada de Laplace: Teorema: Se  $F(t)$  é seccionalmente contínua em todo intervalo finito  $0 \leq t \leq N$  e de ordem exponencial  $\gamma$  para  $t > N$ , então sua transformada de Laplace  $f(s)$  existe para todo  $s > \gamma$ .

iv) Algumas propriedades importantes da transformação de Laplace: Na lista abaixo de teoremas, supõe-se que todas as funções satisfaçam as condições do teorema acima, de modo que suas transformadas de Laplace existam:

- Propriedade de linearidade;
- Primeira propriedade de translação ou de deslocamento;
- Segunda propriedade de translação ou de deslocamento;
- Propriedade de mudança de escala;
- Transformada de Laplace de derivadas;
- Transformada de Laplace de integrais;
- Multiplicação por  $t^n$ ;
- Divisão por  $t$ ;
- Funções periódicas
- Comportamento de  $f(s)$  quando  $s \rightarrow \infty$ ;
- Teorema do valor inicial;
- Teorema do valor final;
- Generalização do teorema do valor inicial;
- Generalização do teorema do valor final.



v) Métodos para encontrar transformadas de Laplace: Há vários métodos disponíveis para determinar transformadas de Laplace, como indicado na seguinte lista:

- Método direto;
- Método das séries;
- Método das equações diferenciais;
- Método em relação a um parâmetro;
- Diferenciação em relação a um parâmetro;
- Métodos diversos;
- Uso de tabelas.

vi) A transformada inversa de Laplace: Se a transformada de Laplace de uma  $F(t)$  é  $f(s)$ , isto é, se  $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$ , então  $F(t)$  é chamada transformada inversa de Laplace de  $f(s)$  e escreve-se simbolicamente  $F(t) = \mathcal{L}^{-1}\{f(s)\}$ , onde  $\mathcal{L}^{-1}$  é chamado operador da transformada inversa de Laplace.

vii) Algumas propriedades importantes das transformadas inversas de Laplace:

- Propriedade de linearidade;
- Primeira propriedade de translação ou deslocamento;
- Segunda propriedade de translação ou deslocamento;
- Propriedade de mudança de escala;
- Transformada inversa de Laplace de derivadas;
- Transformada inversa de Laplace de integrais;
- Multiplicação  $s^n$ ;
- Divisão por  $s$ ;
- Propriedade da convolução.

viii) Métodos para encontrar transformadas inversas de Laplace:

- Método das frações parciais;
- Método das séries;

- Método das equações diferenciais;
- Diferenciação em relação a um parâmetro;
- Métodos diversos usando os teoremas acima;
- Uso de tabelas;
- A fórmula complexa de inversão.

### 2.3.3 - Inversão numérica da transformada de Laplace

A transformada de Laplace de  $F(t)$  dada pela Eq. (2.9) é uma operação altamente estável, no sentido de que pequenas flutuações em  $F(t)$  são ponderadas na determinação da área sob uma curva. Além disso, o fator peso,  $e^{-st}$ , faz com que o comportamento de  $F(t)$  em grandes valores de  $t$  seja efetivamente desprezível, a menos que  $s$  seja pequeno. Como consequência desses efeitos, uma grande variação de  $F(t)$  para grandes valores de  $t$  indica uma variação muito pequena de  $f(s)$ . Em contrapartida, a transformada inversa de Laplace de uma função é altamente instável. Uma pequena variação em  $f(s)$  pode resultar em uma grande variação em  $F(t)$ . No entanto, não há em geral, um método numérico completamente satisfatório para inverter a transformada de Laplace. Mas, para funções relativamente suaves, vários métodos são apresentados na literatura. Por exemplo, BELLMAN *et al.* (1966) converteu a transformada de Laplace por uma transformação de Mellin ( $x=e^{-t}$ ) e usou uma quadratura numérica baseada em polinômios de Legendre deslocados. KRYLOV e SKOBYLA (1969) se focaram na avaliação da integral de Bromwich, com uma técnica de substituição dos integrandos com polinômios interpolantes de potências negativas e integrou-os analiticamente.

A subrotina INLAP/DINLAP da biblioteca IMSL (1991) calcula a inversa da transformada de Laplace de uma função com valor complexo. Notando que se  $F(t)$  é uma função que tende a zero no eixo real negativo, então se pode definir a transformada de Laplace dessa função de acordo com a Eq. (2.9), supondo-se que para algum valor de  $s$  o integrando é absolutamente integrável.

O cálculo da inversa da transformada de Laplace é baseado na aplicação do algoritmo épsilon para séries de Fourier complexas obtidas como uma aproximação discreta da integral de inversão. O algoritmo inicial foi proposto por CRUMP (1976), mas foi significativamente melhorado por DE HOOG *et al.* (1982). Dada uma

transformada de valor complexo  $\mathcal{L}\{F(t)\} = f(s)$ , a regra trapezoidal dá a seguinte aproximação para a transformada inversa:

$$G(t) = \left(\frac{e^{\alpha t}}{T}\right) \Re \left\{ \frac{1}{2} f(\alpha) + \sum_{k=1}^{\infty} f\left(\alpha + \frac{ik\pi}{T}\right) \exp\left(\frac{ik\pi t}{T}\right) \right\} \quad (2.10)$$

Esta é a parte real da soma de uma série de potências complexa em  $z = \exp(i\pi t/T)$ , e o algoritmo acelera a convergência das somas parciais dessa série de potência usando o algoritmo épsilon para calcular as correspondentes diagonais da aproximação de Pade. O algoritmo tenta escolher a ordem da aproximação de Pade para obter a precisão relativa especificada, não excedendo o número máximo permitido de avaliações da função. O parâmetro  $\alpha$  é uma estimativa do máximo das partes reais das singularidades de  $f$ , e uma escolha errada de  $\alpha$  pode dar uma falsa convergência. Mesmo nos casos em que o valor correto de  $\alpha$  é desconhecido, o algoritmo tentará estimar um valor aceitável. Assumindo uma convergência satisfatória, o erro de discretização  $E = G - F$  satisfaz a seguinte equação:

$$E = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2n\alpha T} F(2nT + t) \quad (2.11)$$

Segue-se que se  $|F(t)| \leq Me^{\alpha t}$ , então se pode estimar a expressão acima para obter ( $0 \leq t \leq 2T$ ):

$$E \leq \frac{Me^{\alpha t}}{e^{2T(\alpha-\beta)} - 1} \quad (2.12)$$

Segundo PACHECO e CREUS (1997), geralmente a aplicação da transformada de Laplace não envolve maiores dificuldades, porém a inversão ou retorno ao domínio da variável  $t$  normalmente é de difícil execução analítica. Assim, a alternativa natural é uma abordagem através de métodos numéricos de inversão. Há uma unanimidade entre os pesquisadores quanto a não haver o melhor método de inversão, mas sim o método mais adequado para a classe de função que se quer inverter, mesmo porque a inversão

numérica da transformada de Laplace é um processo mal condicionado (BELLMAN *et al.*, 1966).

Em vista disso, métodos numéricos têm sido desenvolvidos, já que na maioria dos casos os métodos analíticos são insuficientes. Os melhores métodos numéricos conhecidos, para a inversão da transformada de Laplace, são baseados na integração numérica da integral de Bromwich, ou na expansão da função original numa série de funções ortogonais.

É preciso observar, antes de tudo, certos critérios para avaliação de diferentes técnicas numéricas de inversão, por exemplo: aplicação a uma variedade de tipos comuns de problema de inversão; precisão numérica; tempo relativo de computação; dificuldades de programação e implementação, e outros. Consciente, no entanto, que nenhum método é definitivamente superior em todos os critérios.

Na prática existem muitos problemas para os quais a inversão numérica da transformada de Laplace requer um tipo especial de método ou pode ser grandemente facilitado pelo uso de um determinado método.

Vários métodos têm sido descritos na literatura, nos quais a transformada inversa é obtida da integração complexa de inversão pelo uso da quadratura numérica, ou se obtém a inversa como uma expansão em série dos termos de um conjunto de funções linearmente independentes (BARICHELLO, 1988).

## 2.4 – PROBLEMAS INVERSOS

No passado, problemas inversos foram considerados de não interesse físico por causa de sua característica mal posta, hoje desempenham um importante papel na solução de uma série de problemas práticos. O uso de métodos inversos representa uma linha de pesquisa, onde os resultados obtidos através de experimentos e soluções numéricas não são simplesmente comparados posteriormente, mas existe um sinergismo fechado entre pesquisadores teóricos e experimentais do estudo em curso, a fim de obter o máximo de informações do problema físico estudado (BECK, 1999).

Em um passado recente, problemas inversos tem-se desenvolvido, através de tópicos de pesquisa teóricos e específico, como uma importante ferramenta para análises em engenharia (OZISIK e ORLANDE, 2000).

O objetivo da coleta de dados é obter informações significativas sobre um sistema físico ou fenômeno de interesse. No entanto, em muitas situações as

quantidades que se deseja determinar são diferentes daqueles que são capazes de medir ou medidos. Se os dados medidos dependem, de algum modo das quantidades que queremos então os dados contém informações dessa quantidade. Começando com os dados que temos medidos, o problema de tentar reconstruir as quantidades que realmente queremos é chamado de problema inverso. Genericamente falando, geralmente dizemos que um problema inverso é onde medimos um efeito e queremos saber a causa (TAN *et al.*, 2006).

A coleção de valores que queremos reconstruir é referido como imagem, mesmo que esses valores não representem uma imagem, mas são simples parâmetros que definem um modelo. O conjunto de todas as imagens é chamado de espaço imagem. Normalmente é definida a imagem por  $f$ .

O problema direto é o mapeamento da imagem para as quantidades que somos capazes de medir. Na maioria dos exemplos o problema direto é dado por alguma teoria física. Por exemplo, com a meia vida de uma substância radioativa, os físicos nucleares podem calcular o decaimento radioativo ao menos no sentido estatístico. O mapeamento direto pode ser linear ou não linear e é definido por  $A(f)$ .

Na prática nunca é feito uma medida exata e os dados que medimos são versões corrompidas das quantidades medidas. Dados espaciais é o conjunto de todos os dados possíveis. A corrupção pode ser tão pequena quanto um erro de arredondamento produzido pela representação do cálculo das medições, pode ser intrínseco ao processo de medição como o brilho de uma estrela brilhante produzido por uma atmosfera turbulenta, ou geralmente inerente ao processo de medição. Então, a rigor o processo direto é um mapeamento a partir da imagem com os dados livres de erros  $\bar{d}$  e os dados atualmente medidos  $d$  é a forma corrompida. A diferença  $\bar{d} - d$  é chamada de ruído o qual é representado por  $n$ .

Assim o mapeamento da imagem para dados reais é dado pela relação

$$d = A(f) + n \tag{2.13}$$

O problema inverso é então o problema de encontrar a imagem original com base nos dados e conhecimento do problema direto (TAN *et al.*, 2006).

Engenheiros e cientistas precisam se preocupar com muito mais do que simplesmente encontrar respostas matematicamente aceitáveis para estimativa de

parâmetros e problemas inversos. Uma razão é que pode haver muitos modelos que ajustam adequadamente os dados. É essencial para caracterizar que a solução obtida seja "boa", a aceitabilidade física e ajuste aos dados, talvez consistente com outras restrições. Questões essenciais que devem ser considerados incluem a existência de soluções, a unicidade da solução, e a instabilidade do processo de solução.

(i) Existência: Pode não haver nenhum modelo que se encaixe exatamente aos dados. Isso pode ocorrer na prática porque o modelo matemático do problema físico é aproximado ou porque os dados contêm ruído.

(ii) Unicidade: Se as soluções exatas existem, elas podem não ser única, mesmo para um número infinito dos pontos exatos de dados. Essa situação ocorre comumente em problemas de campo potencial. Um exemplo clássico é o campo gravitacional externo a partir de uma distribuição de massa esfericamente simétrica, que depende apenas da massa total e não sobre a distribuição da densidade radial.

(iii) Instabilidade: O processo de cálculo de uma solução inversa pode ser, e muitas vezes é, extremamente instável em que uma pequena mudança na medição pode levar a uma enorme mudança no modelo estimado. Problemas inversos, onde surge essa situação, são referidos como mal-postos no caso de sistemas contínuos, ou mal-condicionados no caso de sistemas discretos lineares. Um ponto importante é que comumente é possível estabilizar o processo de inversão através da imposição de restrições adicionais à solução inversa, um processo que é geralmente referido como a regularização. Regularização é freqüentemente essencial para produzir uma solução utilizável para uma outra forma intratável do problema inverso mal-posto ou mal-condicionado (ASTER *et al.*, 2005).

## 2.5 – FILTROS BAYESIANOS

Segundo ORLANDE *et al.* (2008) os problemas de estimativa de estado são resolvidos com Filtros Bayesianos. Na abordagem estatística Bayesiana é feito uma tentativa de usar todas as informações disponíveis com a finalidade de reduzir as incertezas presentes em problema de tomada de decisão ou inferencial. Com novas informações obtidas, elas são combinadas com informações anteriores para formar a base para procedimentos estatísticos.

Para se definir o problema de estimativa de estado, deve-se considerar um modelo para a evolução do vetor  $x$  na forma:

$$x_k = f_k(x_{k-1}, v_{k-1}) \quad (2.14)$$

em que  $k = 1, 2, \dots$ , indica um instante de tempo  $t_k$  em um problema dinâmico. O vetor  $x \in R^{n_x}$  é chamado de vetor de estado e contém as variáveis a serem dinamicamente estimadas. Este vetor avança de acordo com o modelo de evolução de estado dado pela Eq. (2.14), onde  $f$  é no caso geral, uma função não linear das variáveis de estado  $x$  e do vetor ruído de estado  $v \in R^{n_v}$ .

Considere também que as medidas  $z \in R^{n_z}$  são avaliadas para  $t_k, k = 1, 2, \dots$ . As medidas estão relacionadas com as variáveis de estado  $x$  através da possivelmente não linear função  $h$  na forma:

$$y_k = h_k(x_k, n_k) \quad (2.15)$$

em que  $n \in R^{n_n}$  são as medidas de ruídos. A Eq. (2.15) é referida como observação (medidas) do modelo.

O problema de estimativa de estado visa a obtenção de informações sobre  $x_k$  baseado no modelo de evolução do estado representado pela Eq. (2.14) e sobre as medidas  $y_{1:k} = \{y_i, i = 1, \dots, k\}$  disponíveis pela observação do modelo da Eq.(2.15) (ORLANDE *et al.*, 2008).

O modelo de evolução-observação dada pelas Eqs. (2.14 e 2.15) são baseados nas seguintes hipóteses (KAPIO e SOMERSALO, 2004; KAPIO, *et al.*, 2005):

(i) A seqüência  $x_k$  para  $k = 1, 2, \dots$  é um processo Markoviano, o qual é

$$\pi(x_k | x_0, x_1, \dots, x_{k-1}) = \pi(x_k | x_{k-1}) \quad (2.16)$$

Esta propriedade equivale a afirmar que a probabilidade condicional de qualquer evento futuro, dado qualquer evento passado e o estado presente  $x_k$ , é independente do evento passado e dependente somente do estado presente do processo.

(ii) A seqüência  $y_k$  para  $k = 1, 2, \dots$  é um processo Markoviano com respeito a história de  $x_k$ , o qual é

$$\pi(y_k | x_0, x_1, \dots, x_k) = \pi(y_k | x_k) \quad (2.17)$$

- (iii) A sequência  $x_k$  depende somente das observações passadas através de sua própria história, isto é,

$$\pi(x_k | x_{k-1}, y_{1:k-1}) = \pi(x_k | x_{k-1}) \quad (2.18)$$

em que  $\pi(a|b)$  denota a probabilidade condicional de  $\mathbf{a}$  quando  $\mathbf{b}$  é dado.

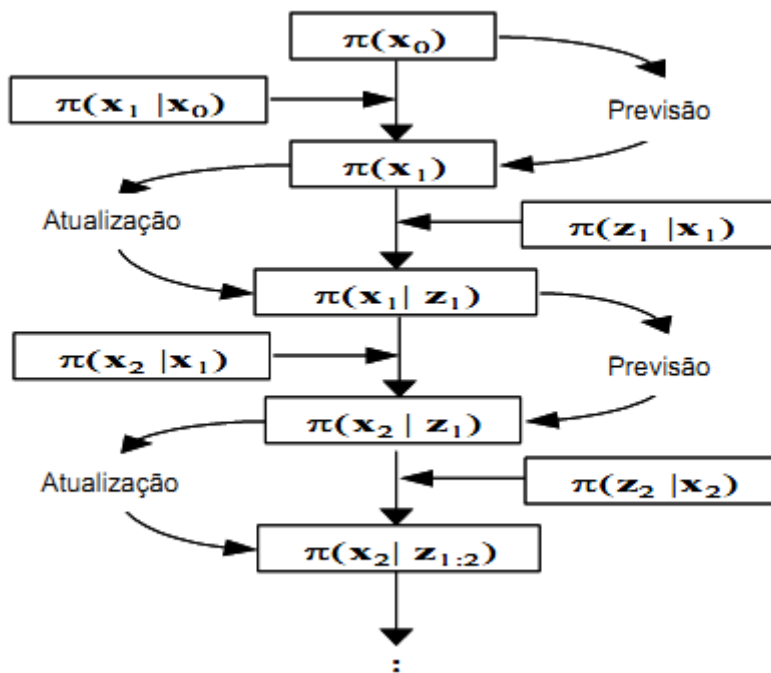
Além disso, para o modelo de evolução-observação dado pelas Eqs. (2.14 e 2.15) assume-se que, para  $i \neq j$  os vetores de ruído  $v_i$  e  $v_j$ , bem como  $n_i$  e  $n_j$ , são independentes entre si e também mutuamente independente do estado inicial  $x_0$ . Os vetores  $v_i$  e  $n_j$  também são independentes entre si, para todos  $i$  e  $j$  (KAPIO and SOMERSALO, 2004).

Problemas diferentes podem ser considerados com o modelo de evolução observação acima, ou seja:

- (i) O problema de previsão, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k-1})$ .
- (ii) O problema de filtragem, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k})$ .
- (iii) O problema fixo-retardo de suavização, diz respeito à determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k+P})$ , onde  $P \geq 1$  isto é retardo fixado.
- (iv) O problema de suavização de todo o domínio, com a determinação de  $\pi(x_k | y_{1:k})$ , onde  $y_{1:k} = \{y_i, i = 1, \dots, k\}$  é a sequência completa de medições (ORLANDE *et al.*, 2008).

Assumindo-se que  $\pi(x_0 | z_0)$  é uma informação disponível (a priori), a densidade de probabilidade a posteriori  $\pi(x_k | z_{1:k})$  (objetivo do problema de filtro) pode ser obtida por filtros “Bayesianos” através de duas etapas: previsão e atualização. A Figura 2.5 ilustra o processo (PIRES, 2008).



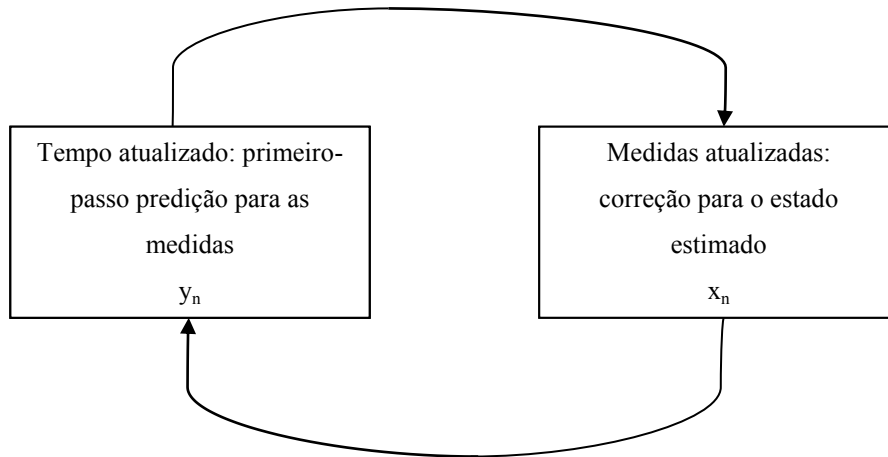


**Figura 2.5** – Filtro Bayesiano. Fonte: KAIPIO e SOMERSALO (2004).

### 2.5.1 - Filtro de Kalman

Quando o problema de estimação de estado envolve modelos de evolução e de observação lineares e quando os ruídos destes modelos são “Gaussianos” com médias e covariâncias conhecidas, o filtro de Kalman é aplicável (PIRES, 2008).

O filtro de Kalman é um algoritmo que calcula recursivamente as variáveis de estado de um sistema representado por equações de estado lineares (JAZWINSKI, 1970). O filtro de Kalman consiste em um processo iterativo previsão - correção (Figura 2.6). No passo previsão, o tempo atualizado é tomado, onde o passo-um previsão a frente da observação é calculado; na etapa correção, a medição atualizada é feita onde a correção para a estimativa do estado atual é calculado (CHEN, 2003).



**Figura 2.6** – Ilustração esquemática para o filtro de Kalman atualizado com preditor-corretor. Fonte: CHEN (2003).

Segundo ORLANDE *et al.* (2008), para a aplicação do filtro de Kalman assume-se que os modelos de evolução e observação dados pelas Eqs. (2.14 e 2.15) são lineares. Assume-se que os ruídos em tais modelos são Gaussianos, com as médias e a covariâncias conhecidas e que são aditivos. Portanto, a densidade posterior  $\pi(x_k | y_{1:k})$  para  $t_k$ ,  $k = 1, 2, \dots$  é Gaussiano e o filtro de Kalman resulta em solução ótima para o problema de estimativa de estado, isto é, a densidade posterior é calculada exatamente. Com as hipóteses acima citadas, os modelos de evolução e observação podem ser escritos, com:

Modelo de Evolução de Estado:

$$x_k = F_k x_{k-1} + v_{k-1} \quad (2.19)$$

Modelo de Observação:

$$y_k = H_k x_k + n_k \quad (2.20)$$

Em que  $F_k$  e  $H_k$  são matrizes conhecidas para as evoluções linear do estado  $x$  e da observação  $y$ , respectivamente. Assumindo que os ruídos  $v$  e  $n$  têm zero média matriz de covariância  $Q$  e  $R$ , respectivamente a previsão e as etapas de atualização do filtro de Kalman são dadas por: (ORLANDE *et al.* 2008).

Previsão:

$$x_k^- = F_k x_{k-1} \quad (2.21)$$

$$P_k^- = F_k P_{k-1} F_k^T + Q_k \quad (2.22)$$

Atualização:

$$K_k = P_k^- H_k^T (H_k P_k^- H_k^T + R_k)^{-1} \quad (2.23)$$

$$x_k = x_k^- + K_k (y_k - H_k x_k^-) \quad (2.24)$$

$$P_k = (I - K_k H_k) P_k^- \quad (2.25)$$

A matriz  $K$  é chamada de matriz ganho de Kalman. Observe acima que, depois de prever o estado da variável  $x$  e sua matriz de covariância  $P$  com as Eqs. (2.21 e 2.22), a estimativa *posteriori* para tais quantidades são obtidas na etapa de atualização com a utilização das medições  $y$ .

Para outros casos em que a hipótese linear de Gauss de modelos evolução-observação não é válida, o uso do filtro de Kalman não resulta em soluções ótimas porque a densidade posterior não é analítica (ORLANDE *et al.*, 2008).

## CAPÍTULO 3

### MODELAGEM MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

Neste capítulo é apresentado o modelo matemático para o balanço populacional (PB) de particulado proposto por GELBARD e SEINFELD (1978) como também a aplicação da metodologia de solução empregada para o problema em questão.

#### 3.1 - FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O estado espacial e químico para um sistema particulado homogêneo é descrito pela função densidade de partícula para a distribuição de tamanho  $n(v,t)$ , sendo  $n(v,t)dv$  o número de partículas por unidade de volume do fluido numa escala de volume  $v$  para  $v+dv$ . A dinâmica para um sistema similar no qual um indivíduo pode crescer pela adição de material da fase fluida, no qual partículas podem colidir e coagular é descrito pela equação geral do balanço populacional:

$$\frac{\partial n(v,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(v,t)n(v,t)]}{\partial v} = \frac{1}{2} \int_0^{v/2} \beta(v-\tilde{v},\tilde{v})n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} - \int_0^\infty \beta(v,\tilde{v})n(v,t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v} + S[n(v,t),v,t] \quad (3.1.a)$$

$$n(v,0) = \frac{N_0}{v_0} e^{-v/v_0} \quad (3.1.b)$$

$$n(0,t) = 0 \quad (3.1.c)$$

Em termos do diâmetro  $D$  da partícula (assumindo partículas esféricas) a Eq. (3.1.a) pode ser escrita na forma:

$$\frac{\partial n(D,t)}{\partial t} + \frac{\partial [I(D,t)n(D,t)]}{\partial D} = \frac{1}{2} \int_0^{(D/2)^{1/3}} \frac{\beta[(D-\tilde{D})^{1/3},\tilde{D}]n[(D-\tilde{D})^{1/3},t]n(\tilde{D},t)}{(D-\tilde{D})^2} d\tilde{D} + \quad (3.2)$$

$$- \int_0^\infty \beta(D,\tilde{D})n(D,t)n(\tilde{D},t)d\tilde{D} + S[n(D,t),D,t]$$

sendo,

$$n(D,t) = (\pi D^2 / 2) n(v,t), \quad D_0 = (6v_0 / \pi)^{1/3}, \quad \tilde{v} = v / v_0, \quad \tilde{D} = D / D_0 \quad (3.3.a-d)$$

## 3.2 - METODOLOGIA DE SOLUÇÃO UTILIZANDO A TÉCNICA DA TRANSFORMADA DE LAPLACE

### 3.2.1 - Modelos propostos por GELBARD e SEINFELD (1978) para sistemas particulados

Para resolver o modelo matemático dado pela equação integro-diferencial parcial (Eq. (3.1)), a técnica de transformada de Laplace com inversão numérica foi empregada. Portanto, para este fim, quatro casos teste foram considerados:

- Caso-teste 1: Coeficiente de coagulação constante (  $\beta(v,\tilde{v}) = \beta_0$  ) e  $I(v,t) = S[n(v,t),v,t] = 0$ .

Aplicando a transformada de Laplace na Eq. (3.1), a fim de remover a variável independente  $v$  no caso-teste 1, obtém-se:

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\partial n(v,t)}{\partial t} \right] = \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} \quad (3.4.a)$$

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v},t) n(\tilde{v},t) d\tilde{v} \right] = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.4.b)$$

$$\mathcal{L} \left[ \beta_0 n(v,t) M_0(t) \right] = \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.4.c)$$

Portanto, a equação diferencial transformada para este caso, a partir dos resultados das Eqs. (3.4), juntamente com a condição inicial, dada pela Eq. (3.1.b), também transformada, são escritas como:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} + \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.5.a)$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s + (1/v_0)} \quad (3.5.b)$$

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.5.a) é obtido a partir da sua definição usual e, para este caso-teste, é dado por (RAMABHADRAN *et al.*, 1976):

$$M_0(t) = \int_0^{\infty} n(v,t) dv = \frac{2N_0}{2 + \beta_0 N_0 t} \quad (3.6)$$

Resolvendo a Eq. (3.5.a) pelo teorema de Bernoulli e usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.5.b), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2N_0}{(2 + N_0 \beta_0 t) \left[ 1 + \frac{v_0 s (2 + N_0 \beta_0 t)}{2} \right]} \quad (3.7.a)$$

logo

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4N_0}{v_0 (2 + N_0 \beta_0 t)^2 \left[ s + \frac{2}{v_0 (2 + N_0 \beta_0 t)} \right]} \quad (3.7.b)$$

aplicando a inversa da transformada de Laplace na Eq. (3.7.b), resulta

$$n(s,t) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{4N_0}{v_0 (2 + N_0 \beta_0 t)^2 \left[ s + \frac{2}{v_0 (2 + N_0 \beta_0 t)} \right]} \right\} \quad (3.8)$$

- Caso-teste 2: Coeficiente de coagulação linear (  $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1 (v + \tilde{v})$  ) e  $I(v,t) = S[n(v,t), v, t] = 0$ .

Neste caso-teste a diferença em relação ao caso-teste 1 é a transformada de Laplace do primeiro e segundo termo do lado direito da Eq. (3.1.a):

$$\mathcal{L} \left[ \frac{\beta_1}{2} \int_0^v v n(v - \tilde{v}, t) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] = -\beta_1 \bar{n}(s,t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} \quad (3.9.a)$$

$$\mathcal{L} \left[ \beta_1 n(v,t) \int_0^{\infty} (v + \tilde{v}) n(\tilde{v}, t) d\tilde{v} \right] = -\beta_1 M_0(t) \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} + \beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.9.b)$$

A equação diferencial transformada para este caso é dada pelas Eqs. (3.9), na forma

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} + \beta_1 [\bar{n}(s,t) - M_0(t)] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 M_1(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.10)$$

Em que o momento de ordem zero  $M_0(t)$  e primeira ordem  $M_1(t)$  que aparecem na Eq. (3.10), são obtidos para este caso-teste como em RAMABHADRAN *et al.*, (1976):

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v,t) dv = N_0 \exp(-\beta_1 N_0 v_0 t) \quad (3.11)$$

$$M_1(t) = \int_0^\infty vn(v,t) dv = N_0 v_0 \quad (3.12)$$

Aplicando as Eqs. (3.11) e (3.12) na Eq. (3.10) e definindo  $\tau = \beta_1 N_0 v_0 t$ , obtém-se

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} + \beta_1 [\bar{n}(s,t) - N_0 \exp(-\tau)] \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = -\beta_1 N_0 v_0 \bar{n}(s,t) \quad (3.13)$$

A Eq. (3.13) é uma equação diferencial do tipo hiperbólica e é resolvida analiticamente através do método das características.

Usando-se o método das características, temos:

$$\bar{n} = \bar{n}(s,t); \quad \bar{n} = \bar{n}[s(\xi), t(\xi)] \quad (3.14.a,b)$$

$$\frac{d\bar{n}}{d\xi} = \frac{ds}{d\xi} \frac{\partial \bar{n}}{\partial s} + \frac{dt}{d\xi} \frac{\partial \bar{n}}{\partial t} \quad (3.14.c)$$

Comparando-se a Eq. (3.14.c) com a Eq. (3.13), tem-se:

$$\frac{dt}{d\xi} = 1; \quad t = \xi; \quad \frac{ds}{d\xi} = \beta_1 [\bar{n}(s,t) - N_0 \exp(-\tau)]; \quad \frac{d\bar{n}(s,t)}{d\xi} = -\beta_1 N_0 v_0 \bar{n}(s,t) \quad (3.15.a-d)$$

Resolvendo a Eq. (3.15.d), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \bar{n}(s,0)\exp(-\tau) \quad (3.16)$$

Aplicando a Eq. (3.16) na Eq. (3.15.c), obtém-se

$$\frac{ds}{dt} = \beta_1[\bar{n}(s,0) - N_0]\exp(-\tau) \quad (3.17)$$

Resolvendo a Eq. (3.17), resulta

$$s = s_0 + \frac{[\bar{n}(s,0) - N_0]}{v_0 N_0} [1 - \exp(-\tau)] \quad (3.18)$$

Da distribuição inicial dada pela Eq.(3.5.b), obtém-se

$$s_0 = \frac{1}{\bar{n}(s,0)} \frac{N_0}{v_0} - \frac{1}{v_0} \quad (3.19.a)$$

Substituindo a Eq. (3.19.a) na Eq. (3.18) temos

$$s = \frac{N_0}{\bar{n}(s,0)v_0} - \frac{1}{v_0} + \frac{[\bar{n}(s,0) - N_0]}{v_0 N_0} [1 - \exp(-\tau)] \quad (3.19.b)$$

logo

$$\bar{n}^2(s,0)(1 - \exp(-\tau)) - N_0 [sv_0 + 1 + (1 - \exp(-\tau))] \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.19.c)$$

Resolvendo a Eq. (3.19.c) resulta

$$\bar{n}(s,0) = \frac{N_0[sv_0 + 1 + 1 - \exp(-\tau)] \pm \sqrt{N_0^2[sv_0 + 1 + 1 - \exp(-\tau)]^2 - 4[1 - \exp(-\tau)]N_0^2}}{2[1 - \exp(-\tau)]} \quad (3.20)$$

Aplicando a Eq. (3.20) na Eq. (3.16), obtém-se:

$$\bar{n}(s,t) = N_0 \exp(-\tau) \left\{ \frac{[sv_0 + 2 - \exp(-\tau)]}{2[1 - \exp(-\tau)]} \pm \frac{\sqrt{[sv_0 + 2 - \exp(-\tau)]^2 - 4[1 - \exp(-\tau)]}}{2[1 - \exp(-\tau)]} \right\} \quad (3.21)$$

onde

$$T = 1 - \exp(-\tau) \quad (3.22.a)$$



A equação resultante para  $\bar{n}(s, T)$  é

$$\bar{n}(s, T) = N_0(1-T) \left\{ \frac{[sv_0 + 1 + T] \pm \sqrt{[sv_0 + 1 + T]^2 - 4T}}{2T} \right\} \quad (3.22.b)$$

logo

$$\bar{n}(s, T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left\{ \left( s + \frac{1+T}{v_0} \right) \pm \sqrt{\left[ s + \frac{1+T}{v_0} \right]^2 - \left[ \frac{2}{v_0} \sqrt{T} \right]^2} \right\} \quad (3.22.c)$$

Fazendo  $S = s + \frac{1+T}{v_0} = s + b$ ,  $b = \frac{1+T}{v_0}$  e  $A = \frac{2\sqrt{T}}{v_0}$ ; logo

$$\bar{n}(S, T) = \frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left[ S \pm \sqrt{S^2 - A^2} \right] \quad (3.22.d)$$

Da definição da transformada de Laplace tem-se que

$$\mathcal{L} \left[ e^{-bt} F(t) \right] = \int_0^\infty e^{-st} e^{-bt} F(t) dt = \int_0^\infty e^{-(s+b)t} F(t) dt = f(s+b) = f(S) \quad (3.23.a)$$

Portanto,

$$\mathcal{L}^{-1} [f(S)] = e^{-bt} F(t) \quad (3.23.b)$$

Das Eqs. (3.23.a), (3.23.b) e (3.22.d), para a raiz negativa tem-se que

$$\bar{n}(S, T) = -\frac{N_0(1-T)v_0}{2T} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.24)$$

Aplicando a inversão de Laplace na Eq. (3.24) e da definição da Eq. (3.23), obtém-se

$$n(v, T) = -\frac{N_0v_0(1-T)}{2T} \exp \left[ -\frac{(1+T)v}{v_0} \right] \mathcal{L}^{-1} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.25)$$

- Caso-teste 3: Coeficiente de coagulação linear ( $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_1(v + \tilde{v})$ ),  $I(v, t) = 0$  e taxa líquida de adição de partículas novas no sistema  $S[n(v, t), v, t] = -R_0 n(v, t)$ .

Neste caso-teste, a diferença em relação ao caso-teste 2, é a transformada de Laplace do último termo do lado direito da Eq. (3.1.a).

$$\mathcal{L}[-R_0 n(v, t)] = -R_0 \bar{n}(s, t) \quad (3.26)$$

A equação diferencial transformada para este caso é dada pela equação abaixo

$$\frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} - \beta_1 [M_0(t) - \bar{n}(s, t)] \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial s} = -[\beta_1 M_1(t) + R_0] \bar{n}(s, t) \quad (3.27)$$

O cálculo do momento de ordem zero  $M_0(t)$  e primeira ordem  $M_1(t)$ , que aparecem na Eq. (3.27) estão demonstrados abaixo:

$$M_0(t) = \int_0^\infty n(v, t) dv = N_0 \exp \left\{ \frac{\beta_1 v_0 N_0 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right\} \quad (3.28.a)$$

$$M_1(t) = \int_0^\infty vn(v, t) dv = v_0 N_0 \exp(-R_0 t) \quad (3.28.b)$$

Substituindo as Eqs. (3.28.a) e (3.28.b) na Eq. (3.27), resulta

$$\frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial t} - \beta_1 \left\{ N_0 \exp \left[ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right] - (\bar{n}(s, t)) \right\} \frac{\partial \bar{n}(s, t)}{\partial s} = - (N_0 v_0 \beta_1 \exp(-R_0 t) + R_0) \bar{n}(s, t) \quad (3.29)$$

Resolvendo a Eq. (3.29) pelo método das características

$$\frac{ds}{dt} = -\beta_1 \left\{ N_0 \exp \left[ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right] - \bar{n}(s, t) \right\} \quad (3.30.a)$$

$$\frac{d\bar{n}(s, t)}{dt} = -[N_0 v_0 \beta_1 \exp(-R_0 t) + R_0] \bar{n}(s, t) \quad (3.30.b)$$

$$\bar{n}(s, t) = \bar{n}(s, 0) \exp \left\{ \frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t \right\} \quad (3.30.c)$$

Substituindo a Eq. (3.30.c) na Eq. (3.30.a) obtem-se

$$\frac{ds}{dt} = -\beta_1[N_0 - \bar{n}(s,0)] \exp\left\{\frac{N_0 v_0 \beta_1 [\exp(-R_0 t) - 1]}{R_0} - R_0 t\right\} \quad (3.31.a)$$

logo

$$s = s_0 - \beta_1[N_0 - \bar{n}(s,0)] \left\{ \frac{1 - \exp\left\{-\frac{N_0 v_0 \beta_1 [1 - \exp(-R_0 t)]}{R_0}\right\}}{N_0 v_0 \beta_1} \right\} \quad (3.31.b)$$

Usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.5.b) e admitindo  $\theta = \frac{R_0}{N_0 v_0 \beta_1}$

obtem-se

$$sv_0 + 1 = \frac{N_0}{\bar{n}(s,0)} + \left(\frac{\bar{n}(s,0)}{N_0} - 1\right) \left(1 - \exp\left[\frac{\exp(-R_0 t) - 1}{\theta}\right]\right) \quad (3.31.c)$$

$$(sv_0 + 1)\bar{n}(s,0) = N_0 + \left[\frac{\bar{n}^2(s,0)}{N_0}\right] \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0 t} - 1}{\theta}\right)\right] - \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0 t} - 1}{\theta}\right)\right] \bar{n}(s,0) \quad (3.31.d)$$

Reescrevendo a Eq. (3.31.d) resulta

$$\bar{n}^2(s,0) \left[1 - \exp\left(\frac{e^{-R_0 t} - 1}{\theta}\right)\right] - N_0 \left\{(sv_0 + 1) + 1 - \exp\left[\frac{e^{-R_0 t} - 1}{\theta}\right]\right\} \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.31.e)$$

Admitindo  $\tau = N_0 \beta_1 v_0 t$  e  $\tilde{T} = \exp(-\theta\tau)$ , tem-se

$$\bar{n}^2(s,0) \left[1 - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right)\right] - N_0 \left\{(sv_0 + 2) - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right)\right\} \bar{n}(s,0) + N_0^2 = 0 \quad (3.31.f)$$

onde

$$\tilde{g} = 1 - \exp\left(\frac{\tilde{T} - 1}{\theta}\right) \quad (3.31.g)$$

logo

$$\bar{n}(s, 0) = \frac{N_0 \left[ (sv_0 + 2) - e^{\frac{\tilde{t}-1}{\theta}} \right] \pm \sqrt{N_0^2 \left[ (sv_0 + 2) - e^{\frac{\tilde{t}-1}{\theta}} \right]^2 - 4\tilde{g}N_0^2}}{2\tilde{g}} \quad (3.32.a)$$

Substituindo a Eq. (3.32.a) na Eq. (3.30.c) resulta

$$\bar{n}(s, \tilde{T}) = \frac{\tilde{T} \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}} \left\{ \frac{N_0}{v_0} \left[ (sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0) \pm \sqrt{[sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0]^2 - (2v_0\sqrt{\tilde{g}})^2} \right] \right\} \quad (3.32.b)$$

Fazendo  $S = sv_0^2 + (1+\tilde{g})v_0 = s+b$ ,  $b = (1+\tilde{g})v_0$  e  $A = 2v_0\sqrt{\tilde{g}}$  tem-se

$$\bar{n}(S, \tilde{T}) = \frac{\tilde{T}N_0 \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}v_0} \left\{ S \pm \sqrt{S^2 - A^2} \right\} \quad (3.32.c)$$

Para raiz negativa

$$\bar{n}(S, \tilde{T}) = -\frac{\tilde{T}N_0 \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right)}{2\tilde{g}v_0} \left\{ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right\} \quad (3.32.d)$$

Lembrando-se da definição de transformada de Laplace das Eqs. (3.23.a) e (3.23.b) e aplicando a inversão de Laplace na Eq. (3.32.d), resulta

$$n(v, \tilde{T}) = -\frac{\tilde{T}N_0}{2\tilde{g}v_0} \exp\left(\frac{\tilde{T}-1}{\theta}\right) \exp[-(1+\tilde{g})v_0v] \mathcal{L}^{-1} \left[ \sqrt{S^2 - A^2} - S \right] \quad (3.32.e)$$

- Caso-teste 4: Coeficiente de coagulação constante ( $\beta(v, \tilde{v}) = \beta_0$ ), taxa de mudança de volume  $v$  pela transferência de material entre as partículas e a fase fluida, linear ( $I(v, t) = \sigma v$ ) e  $S[n(v, t), v, t] = 0$ .

$$\frac{\partial n(v, t)}{\partial t} + \sigma \frac{\partial [vn(v, t)]}{\partial v} = \frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v}, t)n(\tilde{v}, t)d\tilde{v} - \beta_0 n(v, t)M_0(t) \quad (3.33)$$

Aplicando a transformada de Laplace na Eq. (3.33), a fim de remover a variável independente  $v$  no caso-teste 4, obtém-se:

$$\mathcal{L}\left[\frac{\partial n(v,t)}{\partial t}\right] = \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t}; \quad \mathcal{L}\left[\sigma \frac{\partial [vn(v,t)]}{\partial v}\right] = -\sigma s \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} \quad (3.34.a,b)$$

$$\mathcal{L}\left[\frac{\beta_0}{2} \int_0^v n(v-\tilde{v},t)n(\tilde{v},t)d\tilde{v}\right] = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.34.c)$$

$$\mathcal{L}[\beta_0 n(v,t)M_0(t)] = \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.34.d)$$

sendo,  $\bar{n}(s,t) = \mathcal{L}[n(v,t)]$ .

Portanto, a equação diferencial transformada para este caso, a partir dos resultados das Eqs. (3.34), juntamente com a condição inicial, dada pela Eq. (3.1.b), também transformada, são escritas como:

$$\frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial t} - \sigma s \frac{\partial \bar{n}(s,t)}{\partial s} = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) - \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) \quad (3.35.a)$$

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s + (1/v_0)} \quad (3.35.b)$$

O momento de ordem zero  $M_0(t)$  que aparece na Eq. (3.35.a) é representado pela Eq. (3.6).

Resolvendo a Eq. (3.35) através do método das características

$$\frac{ds}{dt} = -\sigma s \quad (3.36.a)$$

$$s_0 = s \exp(\sigma t) \quad (3.36.b)$$

$$\frac{d\bar{n}(s,t)}{dt} + \beta_0 M_0(t) \bar{n}(s,t) = \frac{\beta_0}{2} \bar{n}^2(s,t) \quad (3.36.c)$$

Substituindo a Eq. (3.36.b) na Eq. (3.35.b), obtém-se a condição inicial

$$\bar{n}(s,0) = \frac{(N_0/v_0)}{s \exp(\sigma t) + (1/v_0)} \quad (3.36.d)$$

Resolvendo a Eq. (3.36.c) pelo teorema de Bernoulli e usando a distribuição inicial dada pela Eq. (3.36.d), resulta

$$\bar{n}(s,t) = \frac{2N_0}{(2 + \beta_0 N_0 t)[1 + 2N_0 C(2 + \beta_0 N_0 t)]} \quad (3.36.e)$$

Então em  $t = 0$ , tem-se

$$\bar{n}(s,t) = \bar{n}(s,0) = \frac{N_0}{v_0} \frac{1}{s \exp(\sigma t) + 1/v_0} \quad (3.36.f)$$

$$\frac{N_0}{v_0} \frac{1}{s \exp(\sigma t) + 1/v_0} = \frac{2N_0}{2(1 + 4N_0 C)} \quad (3.36.g)$$

$$2N_0 C = \frac{sv_0 \exp(\sigma t)}{2} \quad (3.36.h)$$

Substituindo a Eq. (3.36.h) na Eq. (3.36.e), obtém-se:

$$\bar{n}(s,t) = \frac{4(N_0/v_0)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2 \exp(\sigma t) \left[ s + \frac{2 \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0} \right]} \quad (3.37)$$

Usando a fórmula da inversão de Laplace na Eq. (3.37), resulta

$$n(v,t) = \frac{4(N_0/v_0) \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)^2} \mathcal{L}^{-1} \left[ \frac{1}{s + \frac{2 \exp(-\sigma t)}{(2 + \beta_0 N_0 t)v_0}} \right] \quad (3.38)$$

## CAPÍTULO 4

### FILTRO DE PARTÍCULAS

O filtro de partículas é um método numérico de integração, ele é adequado para resolver problemas não lineares e não Gaussianos. Desde a década de sessenta, grande atenção tem sido devotada a estes problemas. Entretanto, somente com o aumento do suporte computacional foi possível torna-lo mais usual.

Muitos problemas na ciência exigem estimativa do estado para um sistema em que mudanças ao longo do tempo usando uma sequência de medidas de ruídos são feitas sobre o sistema. Assim, equações diferenciais são usadas para modelar a evolução do sistema com o tempo, e medições são assumidos para avaliar os momentos discretos. Para a estimativa do estado dinâmico, a abordagem de tempo discreto é generalizada e conveniente. (ARULAMPALAM *et al*, 2002)

O método Cadeia de Markov Monte Carlo é uma ferramenta comum para inferência Bayesiana. Infelizmente na dinâmica estabelecida quando uma sequência de distribuições posterior  $\pi_t$  é envolvida, a técnica Cadeia de Markov Monte Carlo pode ser ineficiente, pois terá de gerar uma corrida de diferentes cadeias para cada  $\pi_t$  posterior. Isto não leva em conta as gerações anteriores através de  $\pi_{t-1}$ . Alguns autores têm desenvolvido métodos mais eficientes com base em importância da amostragem e estratégia iterativa (CHOPIN, 2002).

Desde sua introdução em 1993, filtros de partículas tornaram-se uma classe muito popular de métodos numéricos para a solução de problemas de estimativa ótima em cenários não-linear e não-Gaussiano. Em comparação com os métodos de aproximação padrão, como o popular Filtro Kalman Estendido, a principal vantagem dos métodos de partículas é que eles não dependem de qualquer técnica de linearização local ou qualquer aproximação grosseira funcional. O preço que deve ser pago por essa flexibilidade é computacional: estes métodos são computacionalmente caros. No entanto, graças à disponibilidade cada vez maior do suporte computacional, estes métodos já são utilizados em aplicações em tempo real aparecendo em campos tão diversos como a engenharia química, visão computacional, econometria financeira, acompanhamento de alvo e robótica. Além disso, mesmo em situações em que não há restrições de tempo real, estes métodos podem ser uma alternativa poderosa para Cadeia

de Markov Monte Carlo (MCMC), alternativamente eles podem ser usados para projetar sistemas muito eficientes (DOUCET e JOHANSEN, 2008).

#### 4.1 - AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA

O cálculo da integral na Eq. (4.1) é função da densidade posterior. Da mesma forma, toda a descrição da variável não observável  $\{\mathbf{x}_{0:t} \in \mathbf{N}\}$  é obtida da densidade posterior. Dentro do ambiente Bayesiano a distribuição posterior desempenha papel fundamental.

$$I = \int f(x_{0:t}) P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t} \quad (4.1)$$

onde  $P(x_{0:t} | y_{1:t})$  é a distribuição posterior.

À exceção de casos lineares e Gaussianos, o cálculo da distribuição posterior e dos estimadores Bayesianos são proibitivamente complexos. Para transpor esta dificuldade o filtro de partículas adota uma abordagem baseada em simulação cuja técnica básica é denominada amostragem por importância. O objetivo é estimar a densidade de probabilidade posterior e a idéia central do filtro de partículas é representar tais densidades por conjunto de partículas.

Adota-se uma distribuição  $\pi(x_{0:t} | y_{1:t})$  denominada distribuição por importância. A amostragem será feita a partir desta distribuição e geradas amostras independentes e identicamente distribuída (i.i.d). Assim, seja a integral na Eq. (4.1), é válida a identidade:

$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int P(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (4.2)$$

multiplicando e dividindo a Eq. (4.2) por  $\pi(x_{0:t} | y_{1:t})$  numerador e denominador:



$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})} \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})} \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (4.3)$$

definindo  $w_{0:t} = \frac{P(x_{0:t} | y_{1:t})}{\pi(x_{0:t} | y_{1:t})}$  a equação resultante é:

$$I = \frac{\int f(x_{0:t}) w(x_{0:t}) \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}}{\int w(x_{0:t}) \pi(x_{0:t} | y_{1:t}) dx_{0:t}} \quad (4.4)$$

em que  $w(x_{0:t})$  é denominado peso de importância. Um estimador da integral na Eq. (4.4) é dado por:

$$\hat{I}(f_t) = \frac{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_{0:t}^{(i)}) w(x_{0:t}^{(i)})}{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N w(x_{0:t}^{(j)})} = \sum_{i=1}^N f(x_{0:t}^{(i)}) w_t^{*(i)} \quad (4.5)$$

em que  $N$  representa o número de partículas e  $w_t^{*(i)} = \frac{w(x_{0:t}^{(i)})}{\sum_{j=1}^N w(x_{0:t}^{(j)})}$  são os pesos de

importância normalizados. O método, apesar de ser um método genérico de integração de Monte-Carlo (MC), não possui uma forma recursiva (AIUBE, 2005).

#### 4.2 - AMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIS)

Segundo ARULAMPALAM *et al.* (2002), o algoritmo de amostragem por importância sequencial (SIS) é um método de Monte Carlo (MC) que forma a base para a maioria dos filtros sequenciais MC desenvolvido ao longo das últimas décadas. Esta abordagem sequencial MC (SMC) é conhecida também como filtragem *bootstrap*, algoritmo de condensação, filtragem de partículas, aproximações de partículas interagindo e sobrevivência do mais apto. É uma técnica para implementação de um filtro Bayesiano recursivo por simulações MC. A idéia chave é representar a função de

densidade posterior necessária por um conjunto de amostras aleatórias com pesos associados e calcular as estimativas baseadas nessas amostras e pesos. Como o número de amostras torna-se muito grande, esta caracterização MC torna-se uma representação equivalente a descrição funcional habitual da função densidade de probabilidade (fdp) posterior, abordagens do filtro SIS é uma ótima estimativa Bayesiana.

A fim de desenvolver os detalhes do algoritmo, denotou-se uma medida aleatória  $\{x_{0:k}^i, w_k^i\}_{i=1}^{N_s}$  que caracteriza a fdp posterior  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$ , onde  $\{x_{0:k}^i, i = 0, \dots, N_s\}$  é um conjunto de pontos de apoio com pesos associados  $\{w_k^i, i = 1, \dots, N_s\}$ , e  $x_{0:k} = \{x_j, j = 0, \dots, k\}$  é o conjunto de todos os estados até o momento  $k$ . Os pesos são normalizados tal que  $\sum_i w_k^i = 1$ . Então, a densidade posterior pode ser aproximada como

$$P(x_{0:k} | z_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x_{0:k} - x_{0:k}^i) \quad (4.6)$$

Segundo ARULAMPALAM *et al.* (2002) tem-se, portanto, uma aproximação discreta ponderada para a verdade posterior  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$ . Os pesos são escolhidos com o princípio da importância por amostragem. Este princípio baseia-se sobre a seguinte premissa: Suponha que  $P(x) \propto \pi(x)$  é uma densidade de probabilidade a partir do qual é difícil tirar amostras, mas para o qual  $\pi(x)$  pode ser avaliado. Além disso,  $x^i \sim q(x), i = 1, \dots, N_s$ , são amostras que são geradas facilmente a partir de uma proposta chamada importância de densidade. Então, uma aproximação ponderada para a densidade  $P(\bullet)$  é dada por

$$P(x) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x - x^i) \quad (4.7)$$

sendo,

$$w^i \propto \frac{\pi(x^i)}{q(x^i)} \quad (4.8)$$

é o peso normalizado da partícula.

Portanto, se as amostras  $x_{0:k}^i$  foram retiradas de uma importância de densidade  $q(x_{0:k} | z_{1:k})$  logo os pesos na Eq (4.6) são definidos pela Eq.(4.8), então

$$w_k^i \propto \frac{P(x_{0:k}^i | z_{1:k})}{q(x_{0:k}^i | z_{1:k})} \quad (4.9)$$

Voltando ao caso seqüencial, a cada iteração, um poderia ter amostras constituindo uma aproximação para  $P(x_{0:k-1} | z_{1:k})$  e quer aproximar  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$  com um novo conjunto de amostras. Se a importância de densidade é escolhido para fatorar tais que

$$q(x_{0:k} | z_{1:k}) = q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k}) q(x_{0:k-1} | z_{1:k-1}) \quad (4.10)$$

então pode-se obter amostras  $x_{0:k}^i \sim q(x_{0:k} | z_{1:k})$  aumentando cada uma das amostras existentes  $x_{0:k-1}^i \sim q(x_{0:k-1} | z_{1:k-1})$  com o novo estado  $x_k^i \sim q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k})$ . Para obter a equação do peso atualizado,  $P(x_{0:k} | z_{1:k})$  é primeira expressa em termos de  $P(x_{0:k-1} | z_{1:k-1})$ ,  $P(z_k | x_k)$  e  $P(x_k | x_{k-1})$ , logo

$$P(x_{0:k} | z_{1:k}) = P(z_k | x_k) P(x_k | x_{k-1}) P(x_{0:k-1} | z_{1:k-1}) \quad (4.11)$$

Substituindo as Eqs. (4.10) e (4.11) na Eq. (4.9), a equação do peso atualizado será

$$w_k^i = w_{k-1}^i \frac{P(z_k | x_k^i) P(x_k^i | x_{k-1}^i)}{q(x_k^i | x_{0:k-1}^i, z_{1:k})} \quad (4.12)$$

Além disso, se  $q(x_k | x_{0:k-1}, z_{1:k}) = q(x_k | x_{k-1}, z_k)$ , logo a importância de densidade torna-se apenas dependente de  $x_{k-1}$  e  $z_k$ . Isso é particularmente útil no caso comum quando apenas uma estimativa filtrada de  $P(x_k | z_{1:k})$  é exigido em cada passo de tempo. Deste ponto em diante, assume-se tal caso, exceto quando explicitamente indicado o contrário. Em tais cenários, só  $x_k^i$  precisa ser armazenada; portanto, pode-se descartar o caminho  $x_{0:k-1}^i$  e história das observações  $z_{1:k-1}$ . O peso modificado é

$$w_k^i \propto w_{k-1}^i \frac{P(z_k | x_k^i) P(x_k^i | x_{k-1}^i)}{q(x_k^i | x_{k-1}^i, z_k)} \quad (4.13)$$

e a densidade posterior filtrada pode ser aproximada como:

$$P(x_k | z_{1:k}) \approx \sum_{i=1}^{N_s} w_k^i \delta(x_k - x_k^i) \quad (4.14)$$

em que os pesos são definidos na Eq. (4.13). Pode ser demonstrado que com  $N_s \rightarrow \infty$ , a aproximação dada pela Eq. (4.14) se aproxima da verdadeira densidade posterior. O algoritmo SIS, portanto, consiste da propagação recursiva de pesos e pontos de apoio de como cada medição é recebido sequencialmente (ARULAMPALAM *et al*, 2002).

Um problema comum com o filtro de partículas SIS é o fenômeno da degeneração, em que depois de algumas iterações todas as partículas terão um peso insignificante. A variância dos pesos por importância somente aumentam ao longo do tempo, e assim, é impossível evitar a fenômeno degeneração. Esta degeneração implica em grande esforço computacional onde é dedicado à atualização de partículas cuja contribuição para a aproximação  $P(x_k | z_{1:k})$  é quase zero. A medida adequada de degeneração do algoritmo é o tamanho efetivo da amostra  $N_{\text{eff}}$  o qual é definido como

$$N_{\text{eff}} = \frac{N_s}{1 + \text{Var}(w_k^{*i})} \quad (4.15)$$

em que  $w_k^{*i} = P(x_k^i | z_{1:k}) / q(x_k^i | x_{k-1}^i, z_k)$  é referido como o " peso verdadeiro". Isto não pode ser avaliado exatamente, mas uma estimativa  $\hat{N}_{eff}$  do  $N_{eff}$  pode ser obtida por

$$\hat{N}_{eff} = \frac{1}{\sum_{i=1}^{N_s} (w_k^i)^2} \quad (4.16)$$

sendo  $w_k^i$  o peso normalizado obtido na Eq. (4.12). Note que  $N_{eff} \leq N_s$ , pequeno  $N_{eff}$  indica grave degeneração. Claramente, a degeneração do problema é um efeito indesejável de filtros de partículas. A abordagem de força bruta para reduzir o seu efeito é utilizado para  $N_s$  muito grande (ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

#### 4.3 - AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR)

O algoritmo SIR pode ser facilmente derivado do algoritmo SIS por uma escolha adequada da densidade por importância onde  $q(x_k | x_{k-1}^i, z_{1:k})$  é escolhida para ser a densidade anterior  $P(x_k | x_{k-1}^i)$  e a etapa de reamostragem, que deve ser aplicada em cada índice de tempo.

A escolha da importância por densidade implica que precisamos de amostras a partir de  $P(x_k | x_{k-1}^i)$ . Uma amostra  $x_k^i \sim P(x_k | x_{k-1}^i)$  pode ser gerada pela primeira geração de uma amostra do processo de ruído  $v_{k-1}^i \sim P_v(v_{k-1})$  e configuração  $x_k^i = f_k(x_{k-1}^i, v_{k-1}^i)$ , onde  $P_v(\bullet)$  é o pdf do  $v_{k-1}$ . Para esta escolha particular de importância de densidade é evidente que os pesos são dados por

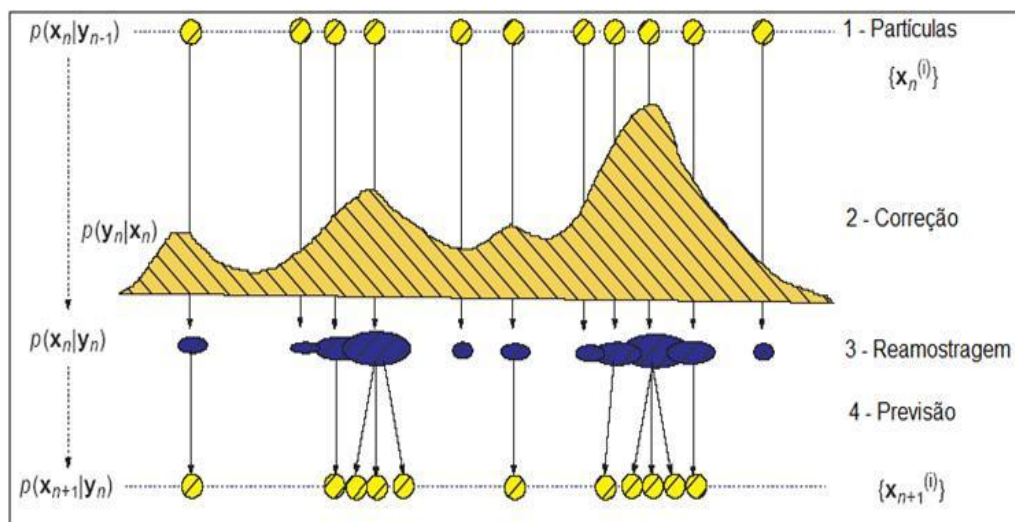
$$w_k^i \propto w_{k-1}^i P(z_k | x_k^i) \quad (4.17)$$

no entanto, observando que a reamostragem é aplicada a cada índice de tempo, tem-se  $w_{k-1}^i = 1/N$ ,  $\forall i$ , portanto

$$w_k^i \propto P(z_k | x_k^i) \quad (4.18)$$

os pesos dados pela proporcionalidade da Eq. (4.18) são normalizados antes da fase de reamostragem.

A Figura 4.1 apresenta o processo de seleção das partículas através da reamostragem, onde: (1) são as partículas com peso uniforme no momento  $t = t_u$ ; (2) são os pesos das partículas atualizados após as medições; (3) reamostragem, embora a quantidade total de partículas seja a mesma, aquelas com menor peso são descartadas e aquelas com maior peso dão origem a mais partículas próximas às regiões de maior probabilidade e (4) são as partículas com pesos uniformes no momento  $t_{u+1}$ .



**Figura 4.1** – Reamostragem. Fonte: CHEN (2002).

Como a densidade de amostragem por importância para o filtro SIR é independente de medição  $z_k$ , o espaço de estado é explorado sem nenhum conhecimento das observações. Portanto, esse filtro pode ser ineficiente e sensível a saídas. Além disso, a reamostragem é aplicada em cada iteração isso pode resultar em rápida perda de diversidade de partículas. No entanto, o método SIR tem a vantagem de que os pesos por importância são facilmente avaliados e que a importância de densidade pode ser facilmente amostrada (ARULAMPALAM *et al.*, 2002).

#### 4.4 - AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA AUXILIAR (ASIR)

O filtro Auxiliary Sampling Importance Resampling (ou Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar) (PITT e SHEPHARD, 1999) é uma variação do filtro SIR. Ele pode ser obtido a partir do filtro genérico SIS através da escolha da função densidade de importância  $q(x_k, \beta | z_k)$ , que amostra  $\{x_k^j, \beta^j\}_{j=1}^N$ , onde  $\beta^j$  é o índice da amostra no instante de tempo  $k-1$ . Aplicando-se a regra de Bayes, obtém-se o seguinte resultado (ARULAMPALAM, 2002):

$$\begin{aligned} p(x_k, \beta / z_k) &\propto p(z_k / x_k) p(x_k, \beta / z_{k-1}) \\ &= p(z_k / x_k) p(x_k, \beta / z_{k-1}) p(\beta / z_{k-1}) \\ &= p(z_k / x_k) p(x_k / x_{k-1}^i) w_{k-1}^i \end{aligned} \quad (4.19)$$

A função densidade de importância utilizada para extrair a amostra  $\{x_k^j, \beta^j\}_{j=1}^N$  é definida de modo a satisfazer a equação (ARULAMPALAM, 2002):

$$q(x_k, \beta / z_k) \propto p(z_k / u_k^i) p(x_k / x_{k-1}^i) w_{k-1}^i \quad (4.20)$$

$u_k^i$  é uma caracterização de  $x_k$  dado  $x_{k-1}^i$  e pode, portanto, ser definida como a seguinte expectância:  $u_k^i = E[x_k / x_{k-1}^i]$ , ou ainda uma amostra  $u_k^i$  extraída de  $p(x_k | x_{k-1}^i)$ .

Fazendo:

$$q(x_k, \beta / z_k) = q(\beta / z_k) q(x_k / \beta, z_k) \quad (4.21)$$

$$q(x_k | \beta, z_k) \triangleq p(x_k | x_{k-1}^i) \quad (4.22)$$

Utilizando as equações (4.20), (4.21) e (4.22), resulta:

$$q(\beta | z_k) \propto p(z_k | u_k^i) w_{k-1}^i \quad (4.23)$$

A amostra  $\{x_k^j, \beta^j\}_{j=1}^N$  recebe então um peso proporcional a uma grandeza definida pela relação entre as equações (4.19) e (4.20) (ARULAMPALAM, 2002):

$$w_k^j \propto w_{k-1}^j \frac{p(z_k / x_k^i) p(x_k / x_{k-1}^i)}{q(x_k / x_k^i, z_k)} = \frac{p(z_k / x_k^i)}{p(z_k / u_k^{\beta^j})} \quad (4.24)$$

Comparando ao filtro SIR, o filtro ASIR tem a vantagem de gerar pontos a partir da amostra no instante  $k-1$  que com maior probabilidade estarão próximos ao estado real do sistema. O filtro ASIR pode ser entendido como o algoritmo do filtro SIR com uma reamostragem no instante de tempo anterior, baseada em algumas estimativas  $u_k^i$  que caracterizam a função  $p(x_k | x_{k-1}^i)$ . Se o nível de ruído do processo é pequeno, e desse modo a função densidade de probabilidade  $p(x_k | x_{k-1}^i)$  for bem definida por  $u_k^i$ , o filtro ASIR funcionará melhor que o filtro SIR. Entretanto, se o nível de ruído do processo for alto,  $u_k^i$  não caracterizará a função  $p(x_k | x_{k-1}^i)$  de modo adequado. Neste caso, o uso do algoritmo ASIR não é recomendável (ARULAMPALAM, 2002).

A Figura 4.2 resume as principais etapas do filtro ASIR.



### Algoritmo do filtro ASIR

#### 1. Inicialização

a. Tome um conjunto de partículas da distribuição inicial  $p(x_0)$  e obtenha

$$\left\{ \left( x_k^{(i)}, w_k^{(i)} \right); i = 1, \dots, N \right\}.$$

b. Faça  $k=1$ .

#### 2. Cálculo da amostra do estado do sistema para a Variável Auxiliar

a. Calcule  $u_k^i = E[x_k | x_{k-1}^i]$  ou  $u_k^i \sim p(x_k | x_{k-1}^i)$ .

#### 3. Avaliação dos Pesos

a. Calcule a função de verossimilhança  $w_k^i = w_{k-1}^i p(z_k | u_k^{(i)})$ .

b. Normalize os pesos:  $\hat{w}_k^i = \frac{w_k^i}{\sum_{j=1}^N w_k^j}$

#### 4. Reamostragem ou Seleção

a. Construindo a soma dos pesos acumulativos (CSW), sendo computada por

$$c_i = c_{i-1} + \hat{w}_k^i \text{ para } i = 1, \dots, N, \text{ com } c_0 = 0.$$

b. Tome  $i = 1$  e gere  $\xi_1$  de uma distribuição uniforme  $U[0, N^{-1}]$ .

c. Para  $j = 1, \dots, N$ , faça:

- Calcule  $\xi_j = \xi_1 + N^{-1}(j-1)$ .
- Enquanto  $\xi_j > c_i$  faça  $i = i + 1$ .
- Designe as partículas  $u_k^{\beta^j} = u_k^i$ .

5. Calculam os pesos das partículas selecionadas:  $p(z_k | u_k^{\beta^j})$ .

#### 6. Evolução do Modelo

a. Calcule as partículas:  $x_k^i = p(x_k | x_{k-1}^i)$  para  $i = 1, \dots, N$ .

#### 7. Avaliação dos Pesos

a. Calcule a função de verossimilhança  $p(z_k | x_k^{(i)})$ .

b. Calcule os novos pesos:  $w_k^i = \frac{p(z_k | x_k^i)}{p(z_k | u_k^{\beta^j})}$ .

c. Normalize os pesos:  $\hat{w}_k^{(i)} = \frac{w_k^{(i)}}{\sum_{j=1}^N w_k^{(j)}}$ .

#### 8. Cálculo da Estimativa do Estado Atual

a.  $x_k = \sum_{i=1}^N x_k^{(i)} \hat{w}_k^{(i)}$ .

b. Faça  $k = k + 1$ , se  $k = t_{final} + 1$ , então pare.

Com as novas partículas, retorne ao segundo passo.

**Figura 4.2** – Algoritmo do filtro de partícula ASIR. Fonte: SILVA (2010).

No algoritmo do filtro ASIR, os índices  $\beta^j$  são obtidos através do algoritmo de reamostragem (ou seja, são reamostradas as partículas com pesos maiores e seus índices são obtidos – estes índices são  $\beta^j, j=1,\dots,N$ ). Um algoritmo de reamostragem eficaz está detalhado em (ARULAMPALAM, 2002).

#### 4.5 - APLICAÇÃO PARA O PROBLEMA DE GELBARD E SEINFELD (1978)

Para a solução do problema proposto por GELBARD e SEINFELD (1978) o filtro de partícula usado foi o filtro com Amostragem por Importância e Reamostragem Sequencial (SIR), o qual foi descrito na seção 4.3 (BATISTA, 2011).

O filtro SIR proposto em GORDON *et al.* (1993) é um método de Monte Carlo que pode ser aplicado a problemas Bayesianos de filtragem recursiva. As hipóteses necessárias para usar o filtro SIR são muito fracas. O estado dinâmico e as funções de medição  $f_k(\cdot, \cdot)$  e  $h_k(\cdot, \cdot)$  nas Eqs. (4.2 e 4.3) precisam ser conhecidas, é necessário para ser capaz de realizar amostra do processo de distribuição de ruído  $v_{k-1}$ , através da amostragem anterior. Finalmente a função de probabilidade  $P(y_k | x_k)$  precisa estar disponível para uma avaliação pontual (ARULAMPALAM, *et al.*, 2002).

As partículas de maior peso (importância) são selecionadas. De acordo com o seu peso é realizada uma nova amostragem (da distribuição anterior). Assim, as partículas de maior peso dão origem a um maior número de partículas. As partículas de menor importância desaparecem e não originam “descendentes” (AIUBE, 2005).

## CAPÍTULO 5

### RESULTADOS E DISCUSSÕES DOS FILTROS DE PARTÍCULAS SIR E ASIR

Neste capítulo serão apresentados os resultados do algoritmo do filtro de partícula com Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR) descrito na seção 4.4, para o problema não-linear de balanço populacional transiente unidimensional, descrito na seção 3.2.1 para sistemas particulados, a fim de estimar a função densidade de tamanho das partículas ( $n(v, t)$ ). O algoritmo do filtro Bayesiano, a solução por inversão numérica da transformada de Laplace e solução analítica para o problema de sistema particulado foram implementados em Fortran 90 e o resultado foi gerado em um computador com processador Intel(R) Celeron(R) CPU G440 com 1.60 GHz e utilizou-se uma malha com 81 números de termos.

#### 5.1 - FILTROS COM AMOSTRAGEM E REAMOSTRAGEM POR IMPORTÂNCIA SEQUENCIAL (SIR) E AUXILIAR (ASIR)

Os filtros SIR e ASIR foram usados para estimar ( $n(v, t)$ ), como mostram as Tabelas 5.1 a 5.6. Com o número de partículas ( $N_p = 100, 500, 1000$  e  $2000$  (filtro SIR) e  $N_p = 10, 40, 60, 80$  e  $100$  (filtro ASIR)) para as variáveis de estado estimadas, o erro RMS (raiz quadrada do erro quadrático médio) dado pela Eq. (5.1) é mostrado nas tabelas anteriormente mencionadas e fixou na ordem de  $10^{-5}$  para os dois filtros. Foi analisado o desvio padrão do modelo e das medidas ( $\sigma$ ) de 3% e 5%, os quais foram testados em quatro combinações possíveis ( $\sigma_{\text{modelo}} = 0,03$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,03$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,03$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,05$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,05$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,03$ ,  $\sigma_{\text{modelo}} = 0,05$  e  $\sigma_{\text{medida}} = 0,05$ ). As combinações são mostradas nas Tabelas 5.1 a 5.6, e nas Figuras 5.1 a 5.12, para os tempos  $\tau = 0,25, 1,0$  e  $2,0$  para o filtro ASIR. O problema físico abordado foi para sistemas particulados e o caso-teste 1 foi escolhido para essa análise e seus resultados foram comparados com as medidas (resultado do problema direto mais um valor randômico multiplicado pelo desvio padrão das medidas).

$$eRMS = \sqrt{\frac{1}{J} \sum_{j=1}^J \left( \frac{\bar{n}_{est}(D_j, \tau)}{N_0} - \frac{\bar{n}_{exa}(D_j, \tau)}{N_0} \right)^2} \quad (5.1)$$

em que est e exa denotam, respectivamente, os valores estimados e exatos da variável de estado, para  $j = 1, 2, \dots, J$ .

**Tabela 5.1:** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ .

$\tau = 0,25$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS (Filtro SIR)			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,03 – 0,03	2,912E-05	2,125E-05	2,031E-05	2,428E-05
0,03 – 0,05	2,499E-05	2,954E-05	2,410E-05	1,934E-05
0,05 – 0,03	5,647E-05	4,549E-05	7,602E-05	5,318E-05
0,05 – 0,05	7,628E-05	3,842E-05	8,665E-05	6,140E-05

**Tabela 5.2.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .

$\tau = 1,0$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS (Filtro SIR)			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,03 – 0,03	2,253E-05	3,220E-05	1,940E-05	2,222E-05
0,03 – 0,05	2,521E-05	1,460E-05	2,373E-05	2,900E-05
0,05 – 0,03	6,923E-05	6,577E-05	5,698E-05	5,386E-05
0,05 – 0,05	5,231E-05	5,295E-05	4,828E-05	6,170E-05

**Tabela 5.3.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ .

$\tau = 2,0$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS (Filtro SIR)			
	$N_p = 100$	$N_p = 500$	$N_p = 1000$	$N_p = 2000$
0,03 – 0,03	1,757E-05	1,697E-05	2,119E-05	2,836E-05
0,03 – 0,05	2,687E-05	2,381E-05	1,996E-05	2,264E-05
0,05 – 0,03	6,269E-05	5,298E-05	4,875E-05	7,189E-05
0,05 – 0,05	6,118E-05	7,796E-05	5,985E-05	7,605E-05

**Tabela 5.4:** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$ .

$\tau = 0,25$ $\sigma_{med}-\sigma_{mod}$	eRMS (Filtro ASIR)				
	$N_p = 10$	$N_p = 40$	$N_p = 60$	$N_p = 80$	$N_p = 100$
0,03 – 0,03	2,682E-05	2,655E-05	2,230E-05	2,782E-05	2,755E-05
0,03 – 0,05	2,460E-05	2,952E-05	3,278E-05	3,380E-05	3,715E-05
0,05 – 0,03	6,712E-05	7,778E-05	8,256E-05	8,591E-05	7,449E-05
0,05 – 0,05	7,890E-05	6,597E-05	5,327E-05	7,877E-05	6,695E-05

**Tabela 5.5.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$ .

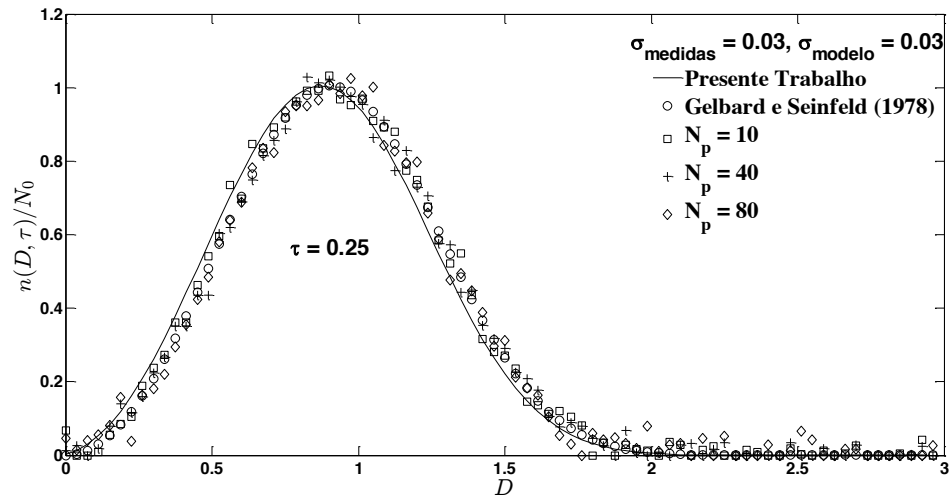
$\tau = 1,0$ $\sigma_{\text{med}} - \sigma_{\text{mod}}$	eRMS (Filtro ASIR)				
	$N_p = 10$	$N_p = 40$	$N_p = 60$	$N_p = 80$	$N_p = 100$
0,03 – 0,03	3,432E-05	2,597E-05	3,682E-05	3,599E-05	2,417E-05
0,03 – 0,05	2,957E-05	3,086E-05	3,423E-05	2,915E-05	2,262E-05
0,05 – 0,03	9,449E-05	7,355E-05	6,285E-05	9,850E-05	8,182E-05
0,05 – 0,05	6,852E-05	8,476E-05	5,778E-05	9,568E-05	6,739E-05

**Tabela 5.6.** Função de GELBARD e SEINFELD (1978) para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$ .

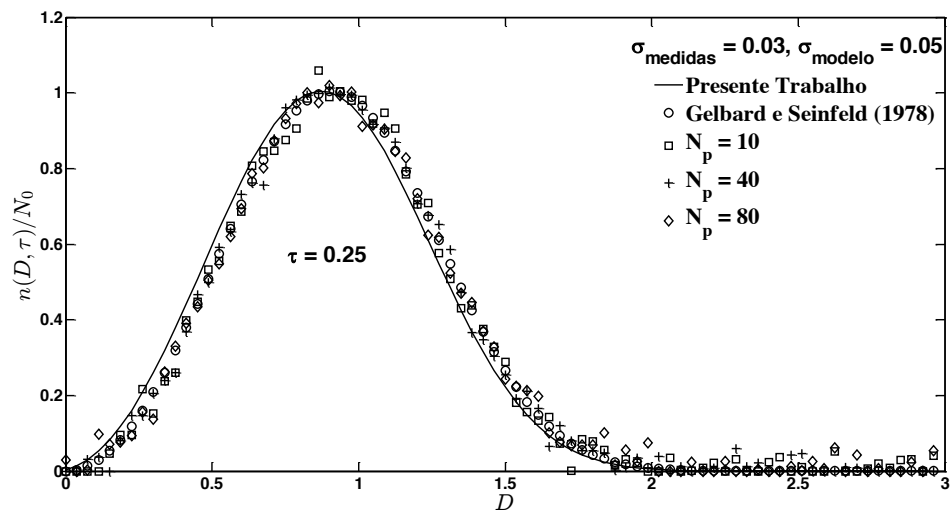
$\tau = 2,0$ $\sigma_{\text{med}} - \sigma_{\text{mod}}$	eRMS (Filtro ASIR)				
	$N_p = 10$	$N_p = 40$	$N_p = 60$	$N_p = 80$	$N_p = 100$
0,03 – 0,03	3,044E-05	3,394E-05	3,294E-05	4,011E-05	2,121E-05
0,03 – 0,05	3,566E-05	3,373E-05	3,052E-05	3,730E-05	3,570E-05
0,05 – 0,03	7,914E-05	6,834E-05	5,764E-05	7,893E-05	6,305E-05
0,05 – 0,05	7,245E-05	7,058E-05	8,701E-05	8,567E-05	9,172E-05

Para a solução do problema de estimativa de estado, as medidas simuladas da variável de estado  $n(v, t)$  foram disponibilizadas e geradas com as soluções exatas apresentadas nos casos-testes de 1 a 4. Um ruído Gaussiano não correlacionado, com média zero e desvio padrão constante, foi adicionado à solução do problema direto.

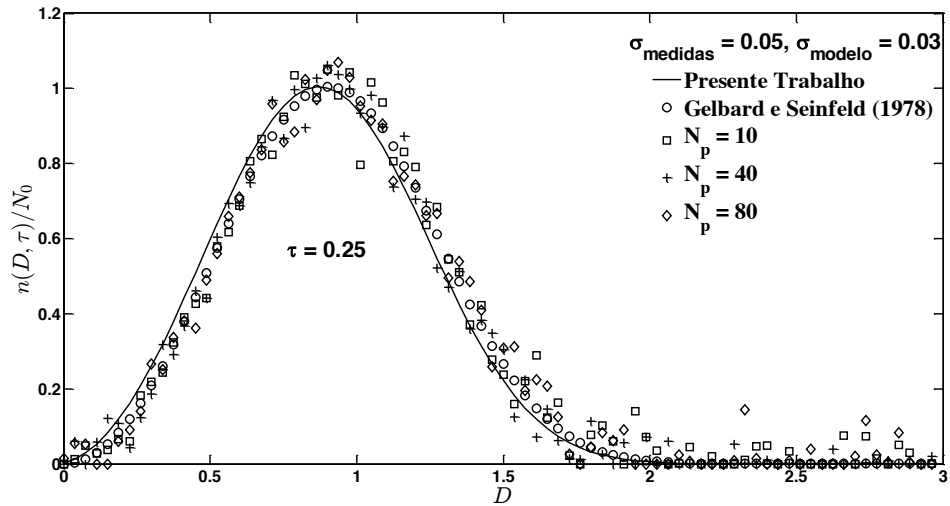
Nas Figuras 5.1 a 5.4 são mostrados o comportamento dos resultados do filtro ASIR para  $N_p = 10, 40$  e  $80$  os quais foram comparados com a solução exata para o tempo  $\tau = 0,25$ . Observa-se nas Figuras 5.1 e 5.2 que aumentando o desvio padrão do modelo as medidas tendem aos valores medidos. Porém, verificam-se nas Figuras 5.3 e 5.4 que aumentando o  $\sigma$  dos valores medidos as medidas tendem aos valores estimados, nota-se também que aumentando o diâmetro da partícula  $D$ , que varia de 0 a 3, a função densidade de distribuição de tamanho sofre forte influência em relação ao desvio padrão. Graficamente os resultados têm boa concordância para as combinações testadas do desvio padrão.



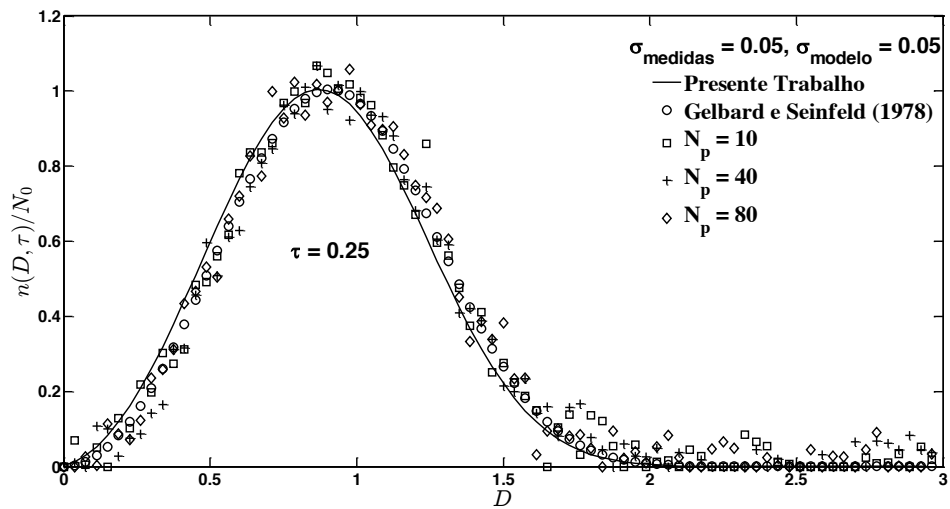
**FIGURA 5.1** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,03 – 0,03) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 5.2** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,03 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 5.3** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,03) e  $\tau = 0,25$ .



**FIGURA 5.4** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e  $\tau = 0,25$ .

Nas Figuras 5.5 a 5.8, observa-se a mesma tendência das figuras anteriores para o tempo  $\tau = 1,0$ . Idem análise das Figuras 5.1 a 5.4.

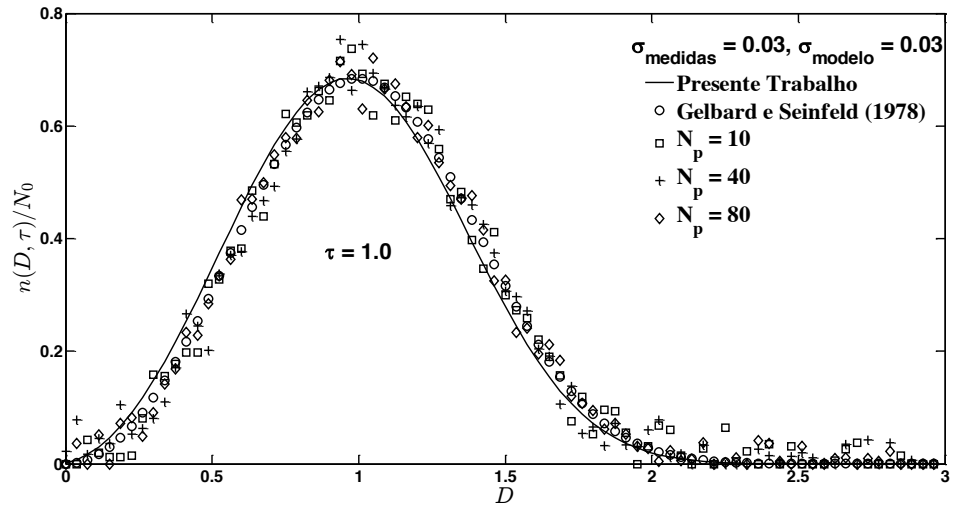


FIGURA 5.5 - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,03 – 0,03) e  $\tau = 1,0$ .

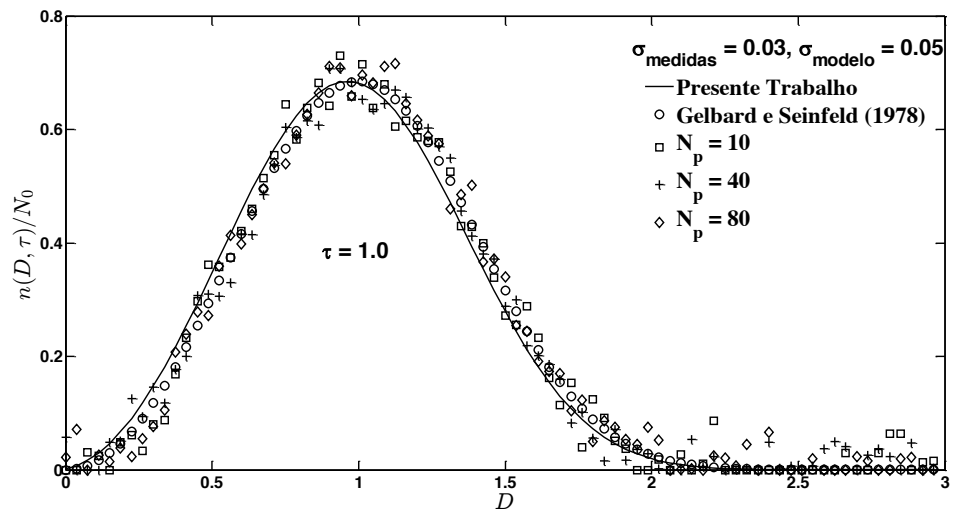
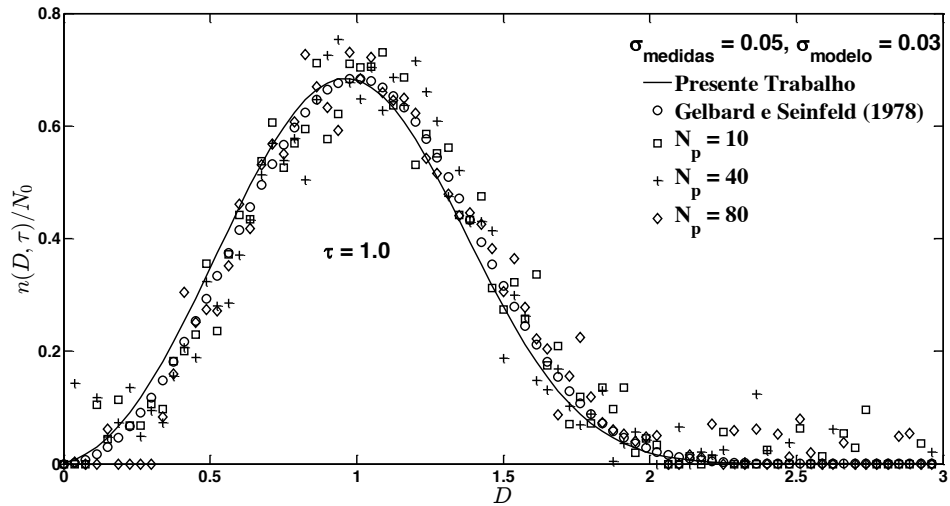
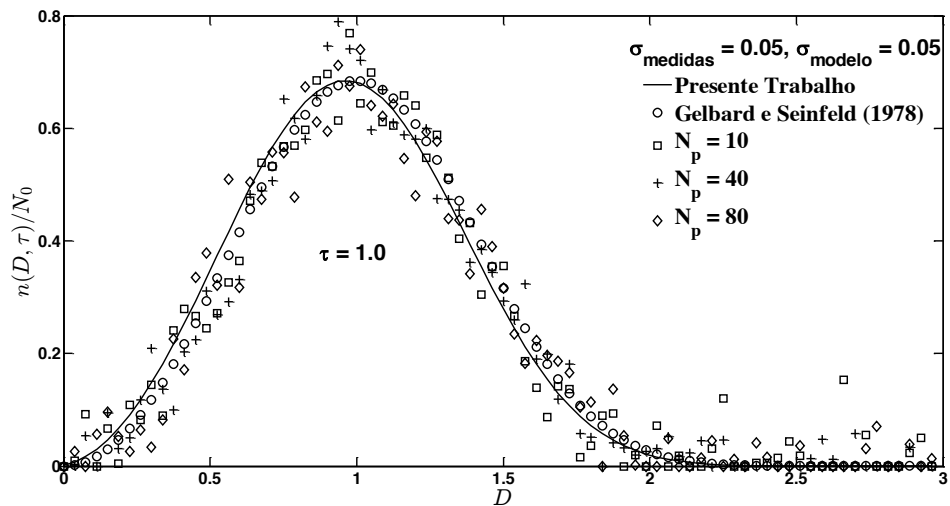


FIGURA 5.6 - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,03 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .





**FIGURA 5.7** - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,05 – 0,03) e  $\tau = 1,0$ .



**FIGURA 5.8** - Comparação da solução exata com variação do  $\sigma$  (0,05 – 0,05) e  $\tau = 1,0$ .

Nas Figuras 5.9 e 5.10, nota-se a mesma tendência das Figuras 5.7 e 5.8 para o tempo  $\tau = 2,0$  mesmo com a redução da função densidade de distribuição de tamanho. Porém, nas Figuras 5.11 e 5.12 observa-se que aumentando o desvio padrão dos valores medidos, as medidas são fortemente influenciadas ao longo de todo o tamanho ( $D$ ).

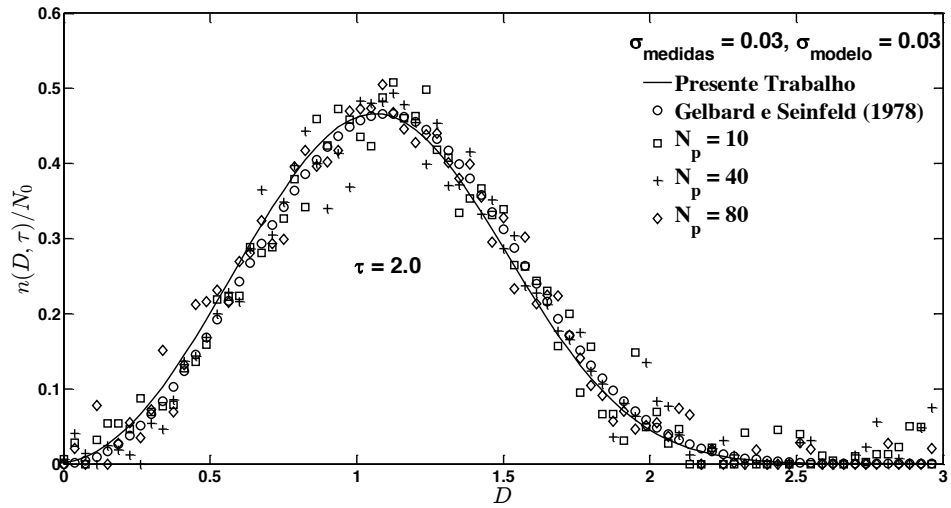


FIGURA 5.9 - Comparação da solução exata com o  $\sigma$  (0,03 – 0,03) e  $\tau = 2,0$ .

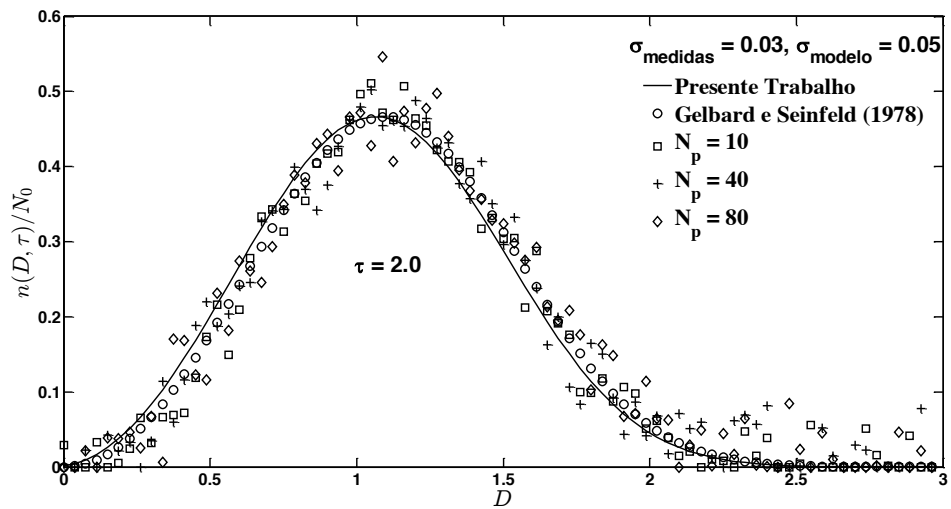
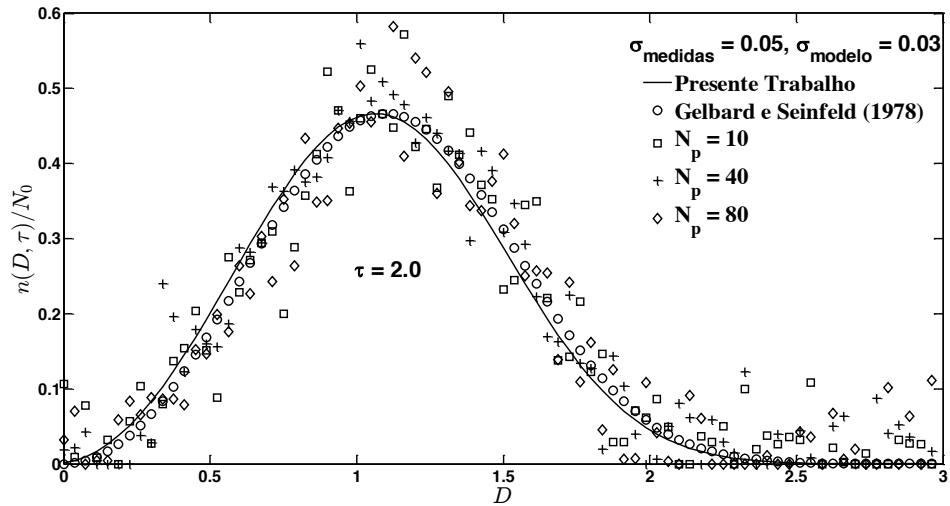
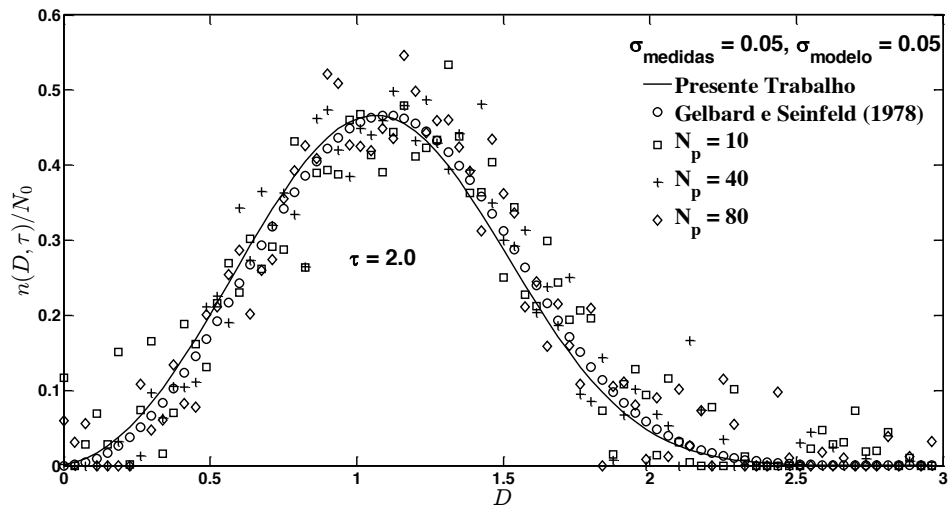


FIGURA 5.10 - Comparação da solução exata com o  $\sigma$  (0,03 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .



**FIGURA 5.11** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,03) e  $\tau = 2,0$ .



**FIGURA 5.12** - Comparação da solução exata com desvio padrão (0,05 – 0,05) e  $\tau = 2,0$ .

Observando as Tabelas 5.4 a 5.6 e as Figuras 5.1 a 5.12 optou-se usar  $N_p = 80$  para estimar a função densidade do tamanho de partículas para os casos-testes estudados na seção 3.2.1. O motivo foi o erro ser pequeno em todas as variações do número de partículas para o filtro ASIR; o tempo de CPU para  $N_p = 10$  foi 11,36s,  $N_p = 40$  foi 11,61s e  $N_p = 80$  foi 11,22s. Em todas as análises, o desvio padrão foi dividido pela concentração máxima da densidade do tamanho das partículas. Em BATISTA (2011) optou-se usar  $N_p = 1000$  para estimar a referida função, com tempo de CPU de 46,19s.

## 5.2 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 1

Para o caso-teste 1, foram analisados os tempos adimensionais  $\tau = 0,25, 1,0$  e  $2,0$  admitindo o desvio padrão do modelo e dos valores medidos 3% e 5% para os filtros SIR (BATISTA, 2011) e ASIR, com quatro combinações as quais foram utilizadas para melhor análise dos resultados.

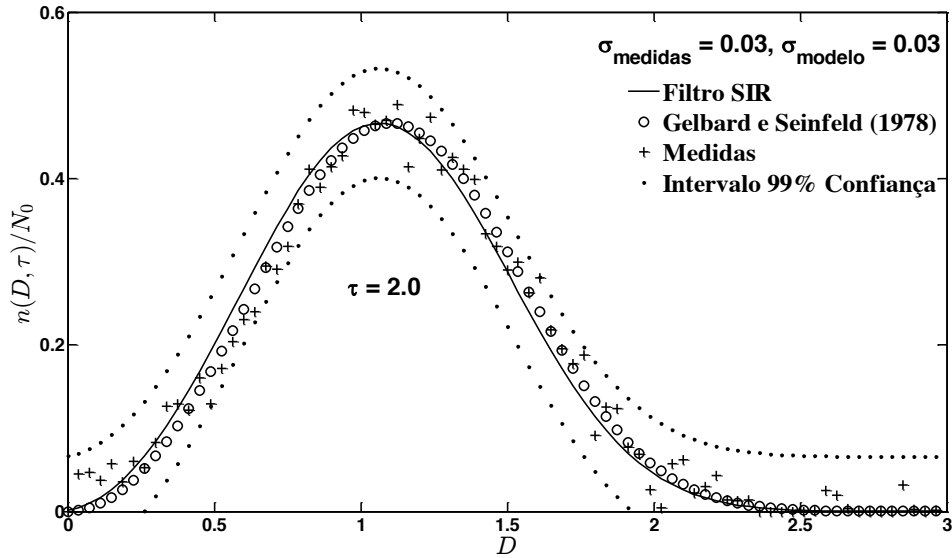
As Figuras A.1 a A.8 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$  (ver Apêndice A).

As Figuras A.9 a A.16 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$  (ver Apêndice A).

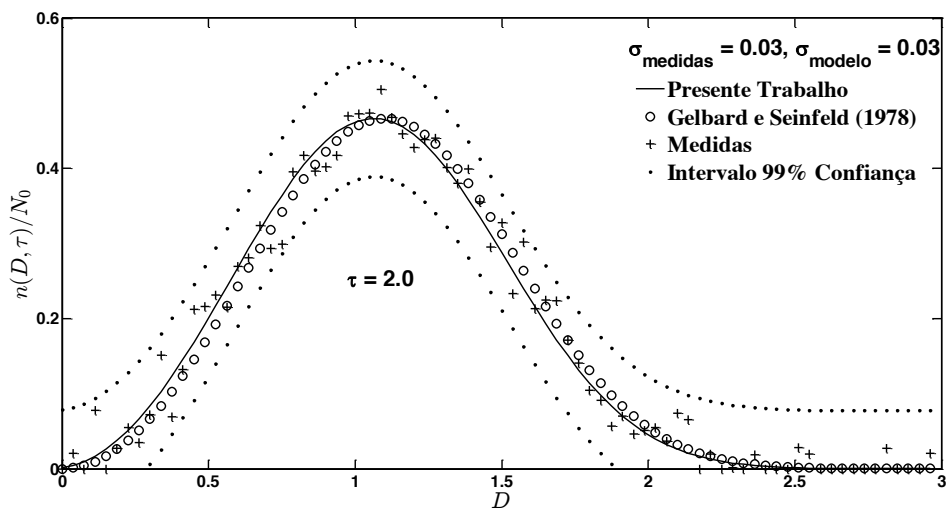
As Figuras 5.13 a 5.20 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 2,0$ .

Analisando a Figura 5.14, nota-se que as medidas têm excelente concordância com os valores medidos para pequenos desvios padrão os quais estão dentro do intervalo de 99% de confiança do modelo.

Comparando as Figuras 5.13 e 5.14, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



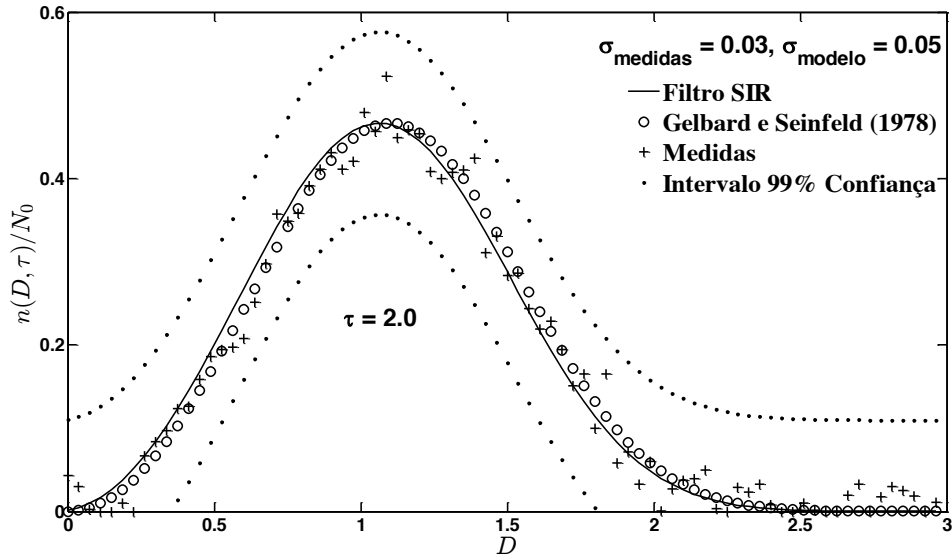
**FIGURA 5.13** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



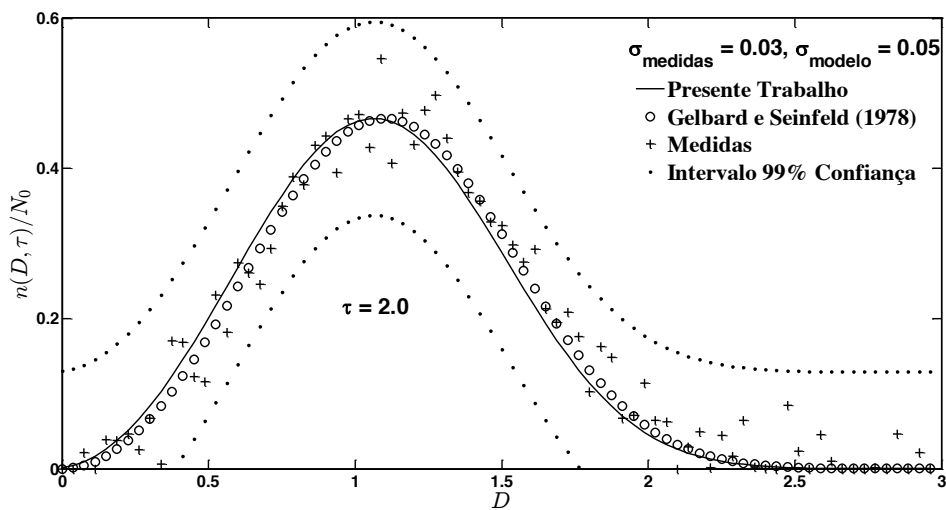
**FIGURA 5.14** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Nota-se que a Figura 5.16, tem o mesmo comportamento que a Figura 5.14 para pequeno desvio padrão dos valores medidos e grande desvio padrão do modelo, os quais estão dentro do intervalo de 99% de confiança do modelo.

Comparando as Figuras 5.15 e 5.16, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.



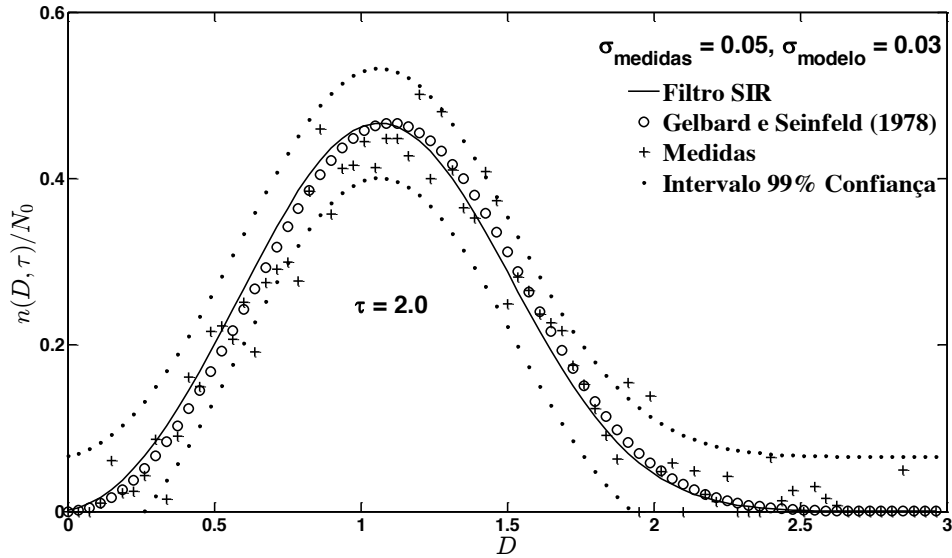
**FIGURA 5.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



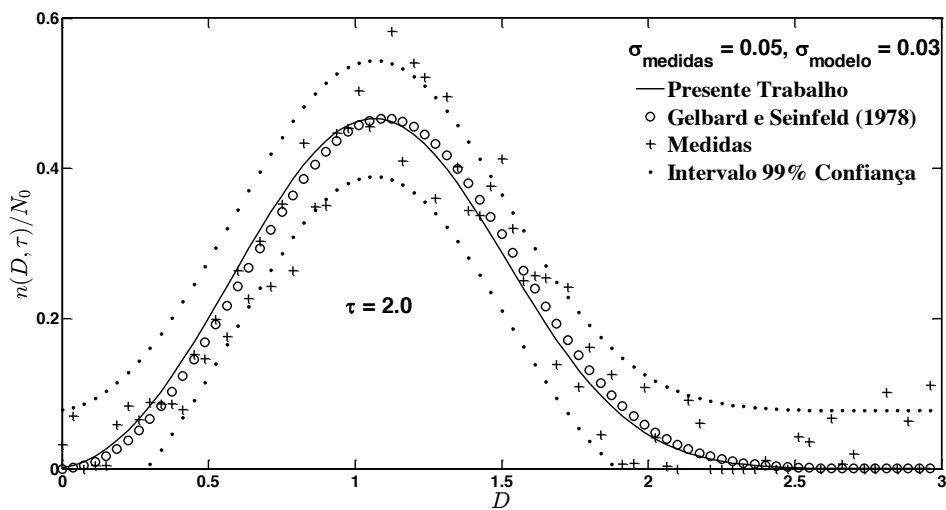
**FIGURA 5.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Observa-se na Figura 5.18, para grande desvio padrão dos valores medidos e pequeno desvio padrão do modelo, as medidas se desviam do resultado simulado.

Comparando as Figuras 5.17 e 5.18, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



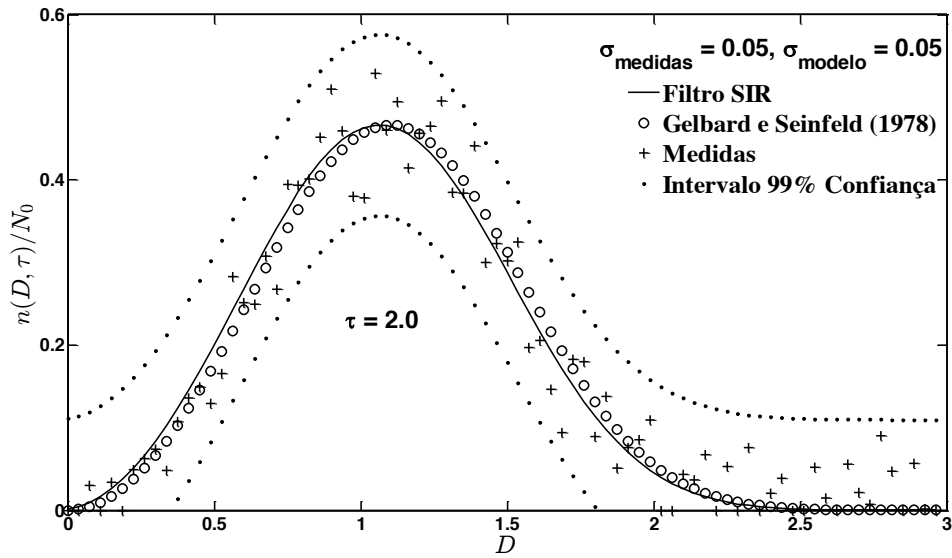
**FIGURA 5.17** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



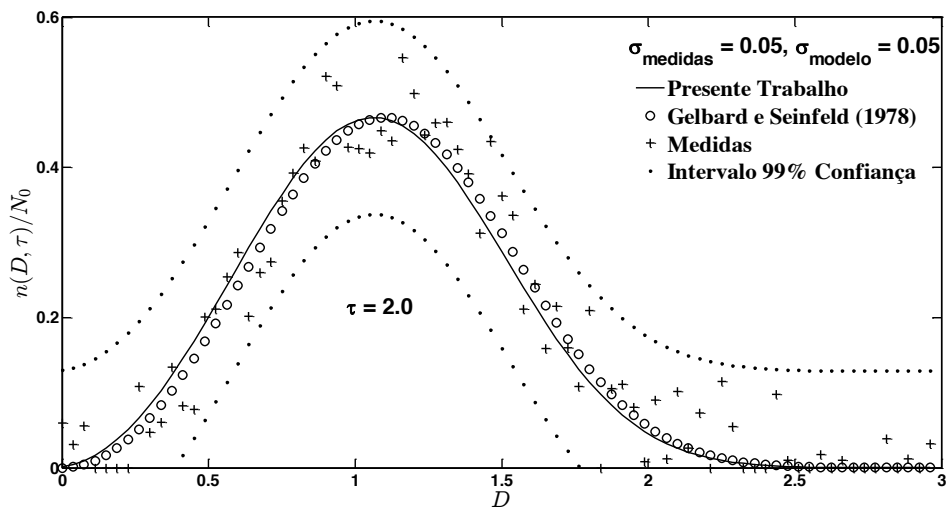
**FIGURA 5.18** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Verifica-se na Figura 5.20, para grande desvio padrão dos valores medidos e do modelo, as medidas possuem boa concordância com aos valores simulados. Observa-se que os resultados estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

Comparando as Figuras 5.19 e 5.20, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA 5.19** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.20** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).



### 5.3 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 2

Para o caso-teste 2, foram analisados os tempos adimensionais  $\tau = 0,25, 1,0, e 2,0$  admitindo o  $\sigma$  (0,03 – 0,03; 0,03 – 0,05; 0,05 – 0,03; 0,05 – 0,05) para os filtros de partículas SIR (BATISTA, 2011) e ASIR os quais foram utilizados para melhor análise dos resultados.

Nas Figuras B.1 a B.8 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$  (ver Apêndice B).

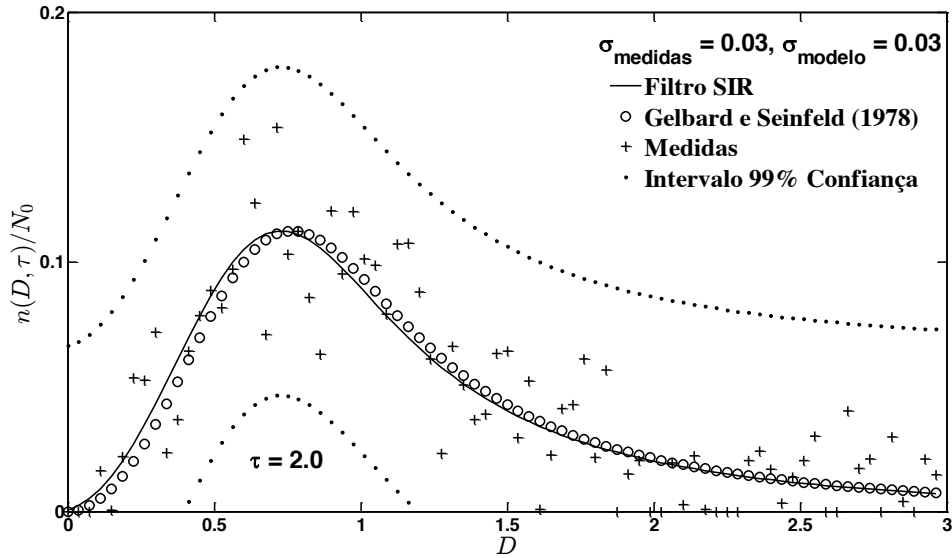
Nas Figuras B.9 a B.10 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$  (ver Apêndice B).

As Figuras 5.21 a 5.28 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 2,0$ .

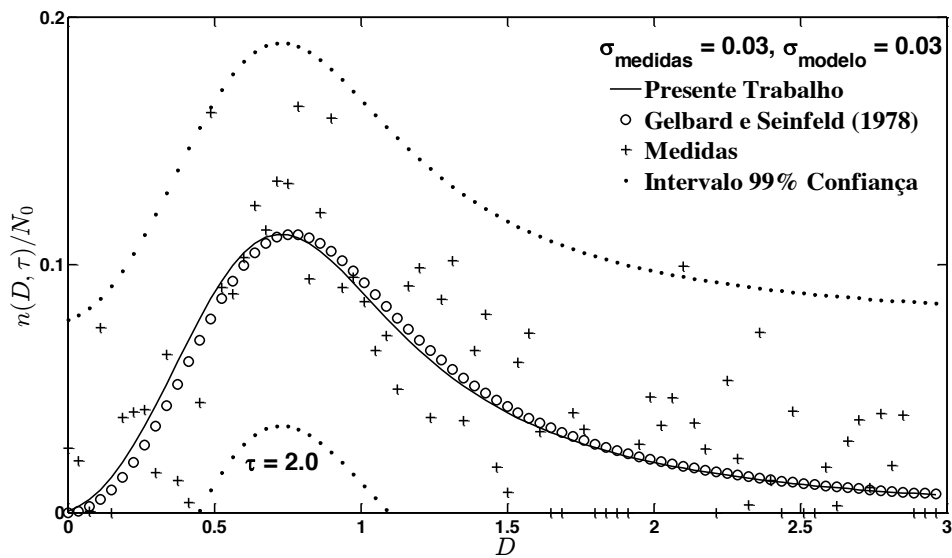
Observa-se nas Figuras 5.22 e 5.24 que as medidas se afastam dos valores medidos para pequeno desvio padrão os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%.

Nota-se nas Figuras 5.26 e 5.28 que as medidas apresentam oscilações fortes e abandonam os valores medidos para grande desvio padrão das medidas e tentam convergir para o modelo. Observa-se na Figura 5.26 que as medidas estão parcialmente fora do intervalo de confiança de 99%, pelo aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas as quais sofrem forte influência para pequenos  $n(v,t)$  ao longo da distribuição de tamanho de partículas. Na Figura 5.28 as medidas estão dentro do intervalo de confiança de 99%, porém devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido e pequena função densidade de tamanho de partículas as medidas sofrem forte influência ao longo da distribuição de tamanho de partículas.

Comparando as Figuras 5.21 e 5.22, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

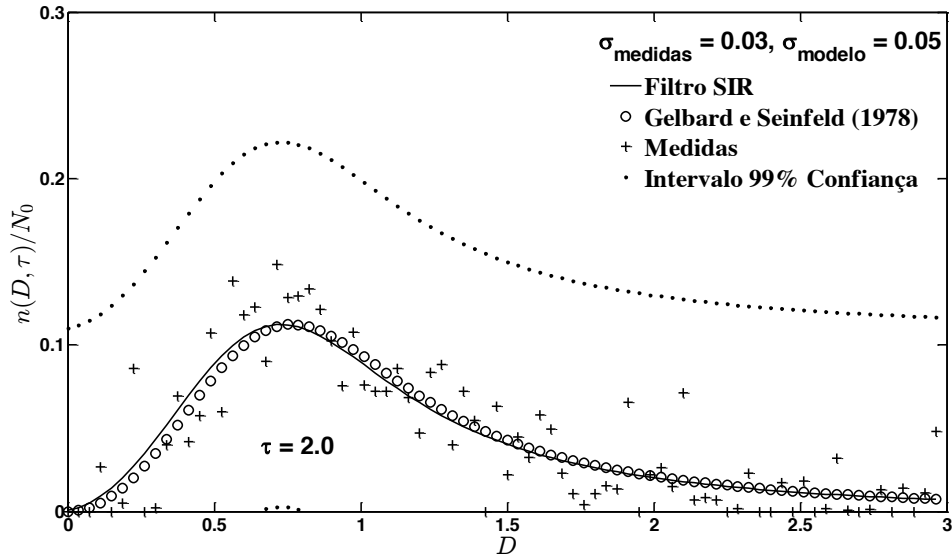


**FIGURA 5.21** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).

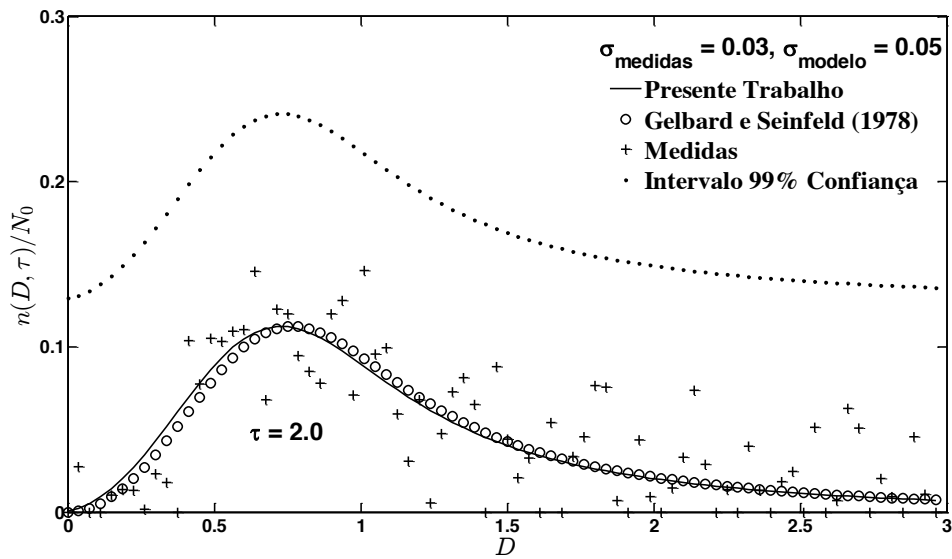


**FIGURA 5.22** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras 5.23 e 5.24, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

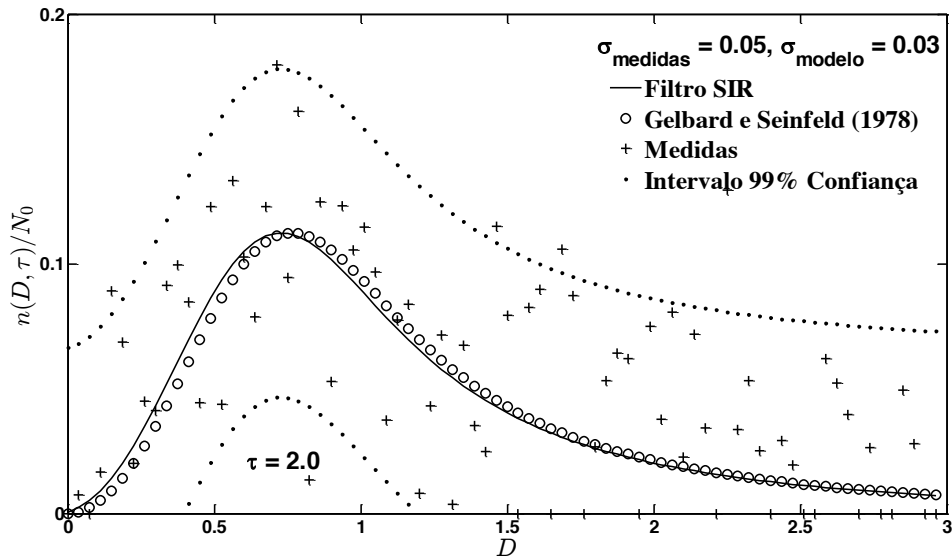


**FIGURA 5.23** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).

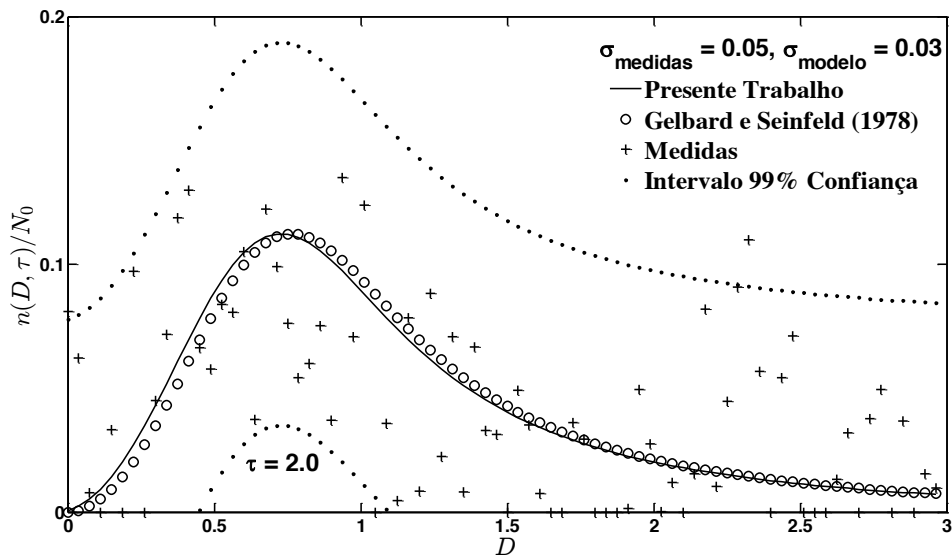


**FIGURA 5.24** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras 5.25 e 5.26, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

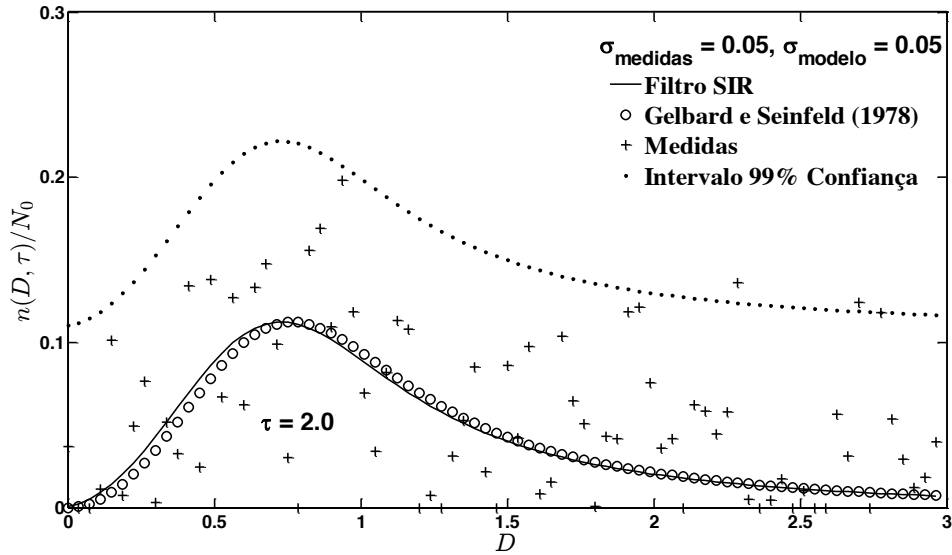


**FIGURA 5.25** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).

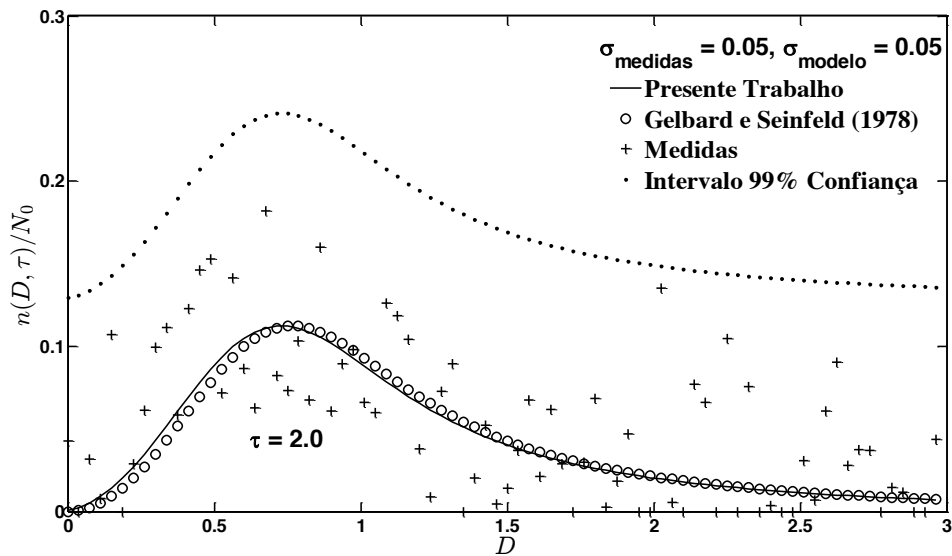


**FIGURA 5.26** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras 5.27 e 5.28, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA 5.27** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.28** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

#### 5.4 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 3

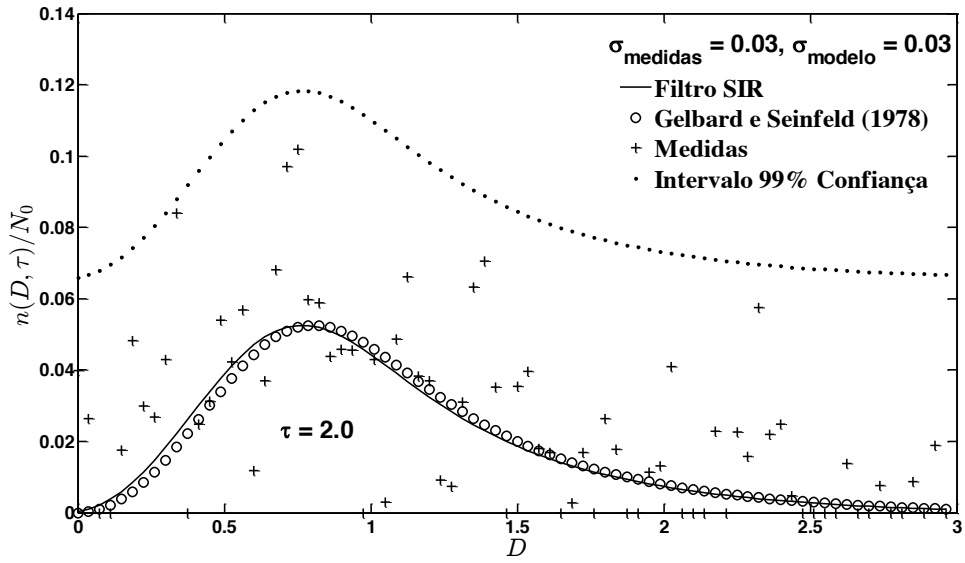
Para o caso-teste 3, foram usados os mesmos parâmetros do caso-teste 2, para análise dos resultados.

As Figuras C.1 a C.8 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$  (ver Apêndice C).

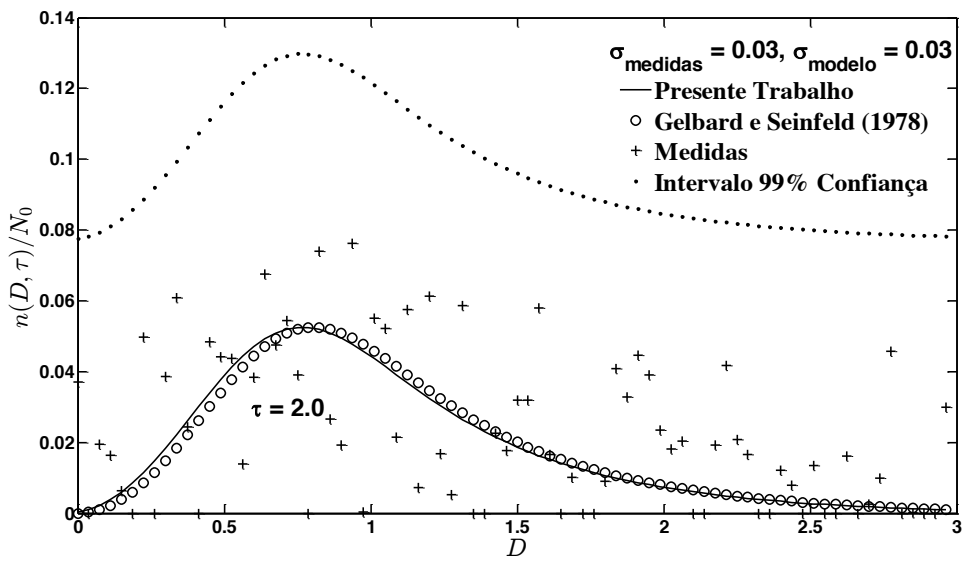
Nas Figuras C.9 a C.16 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$  (ver Apêndice C).

Nas Figuras 5.29 a 5.36 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 2,0$ .

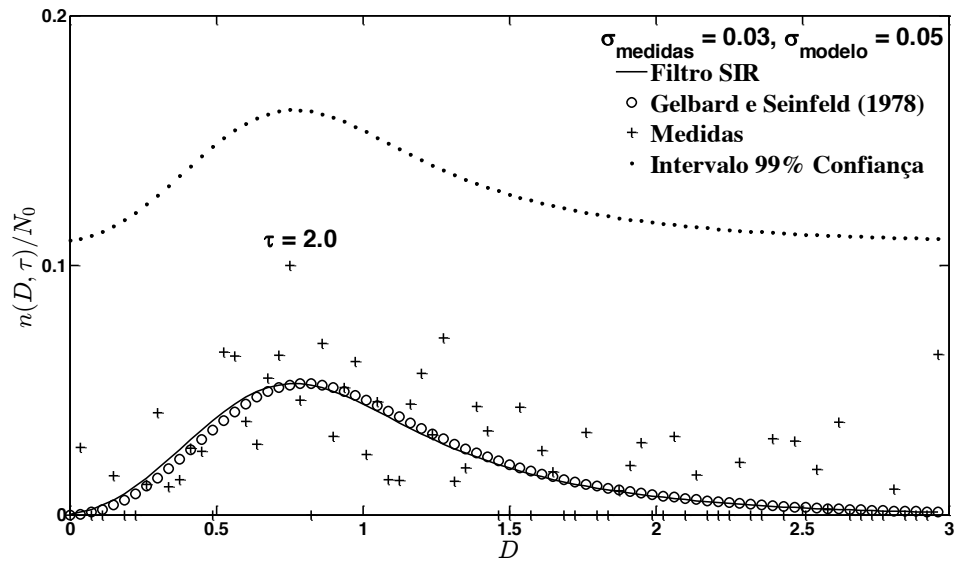
Observa-se que as figuras acima citadas apresentam a mesma concordância gráfica das Figuras 5.21 a 5.28 com suas respectivas análises.



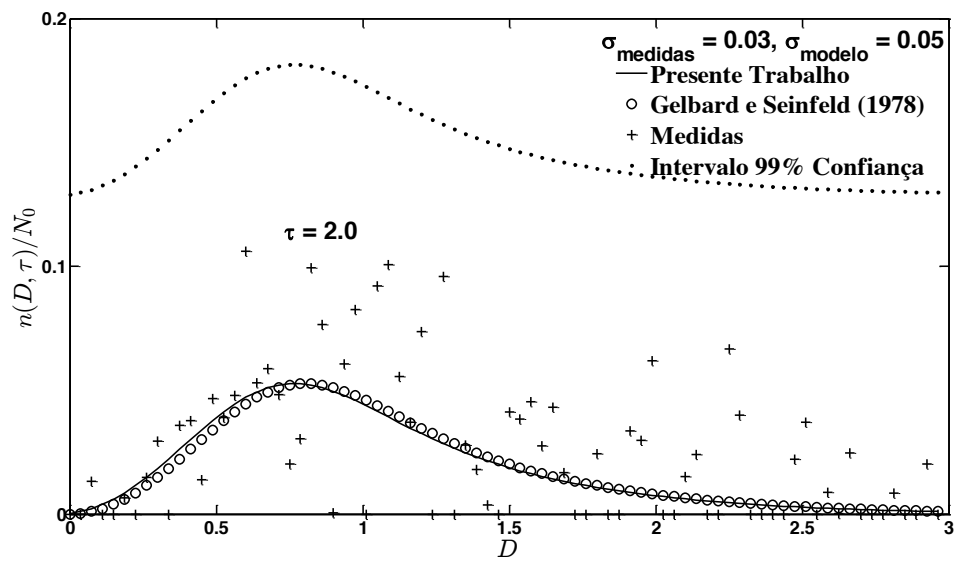
**FIGURA 5.29** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 - 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.30** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 - 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

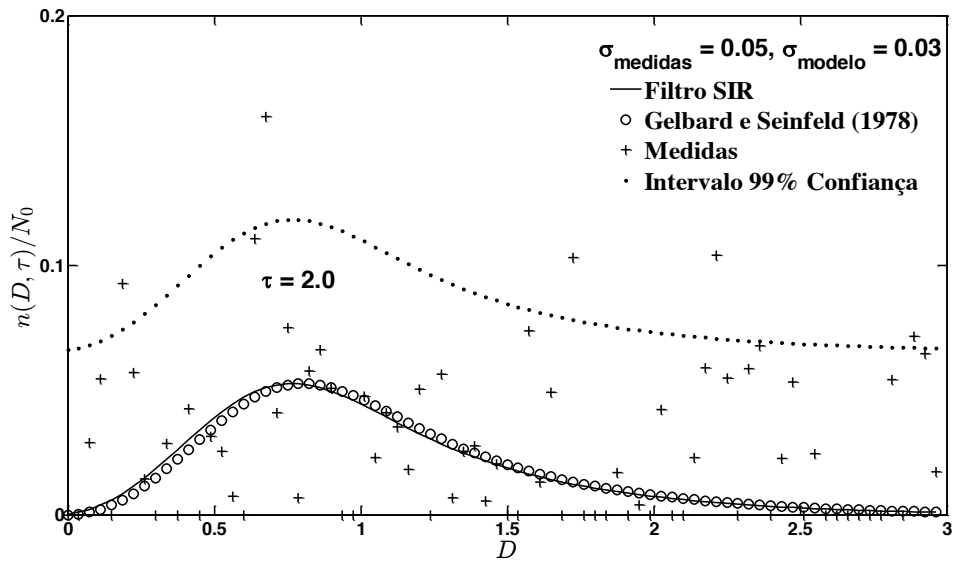


**FIGURA 5.31** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).

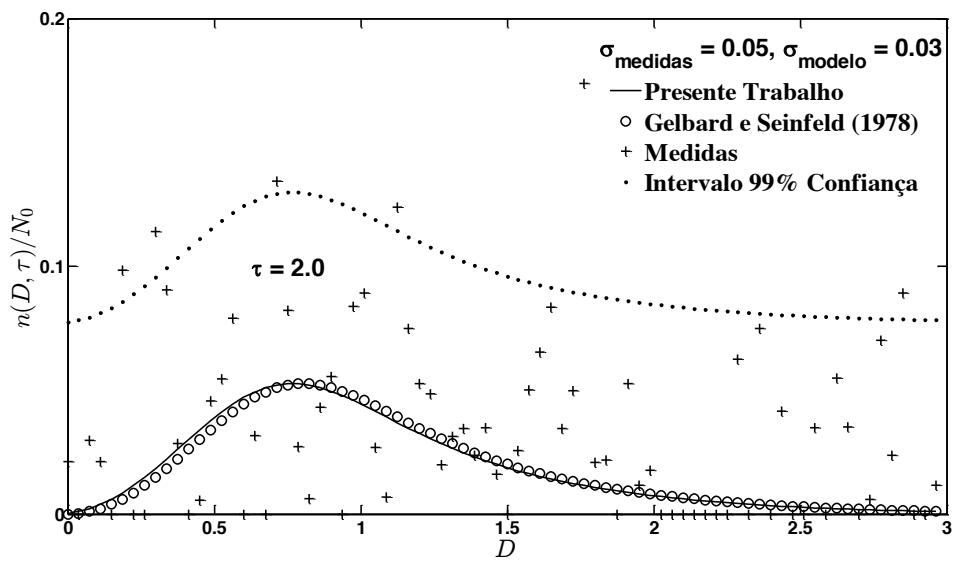


**FIGURA 5.32** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

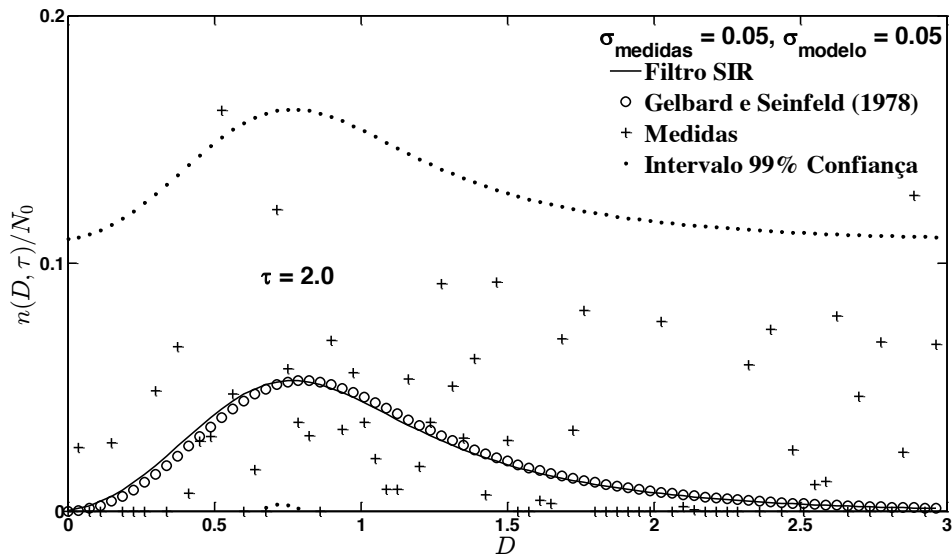




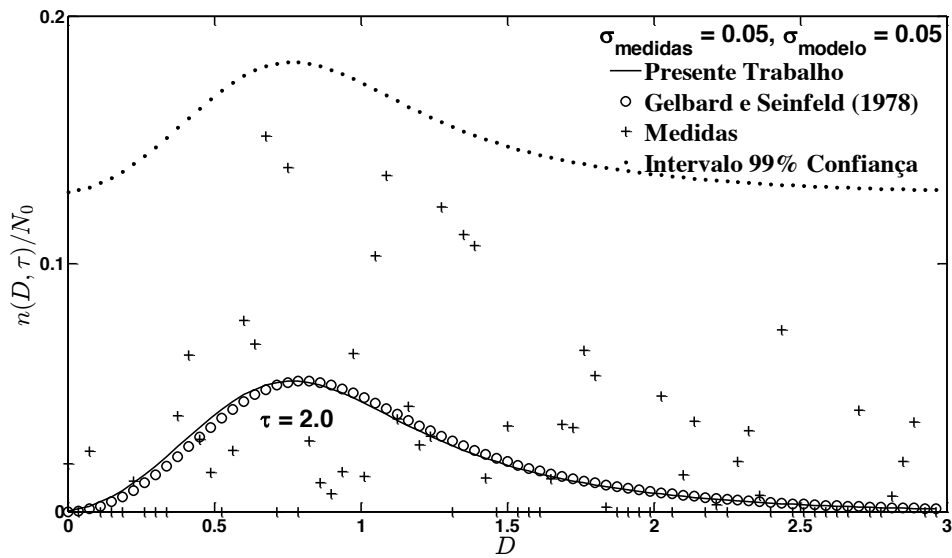
**FIGURA 5.33** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.34** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).



**FIGURA 5.35** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.36** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

## 5.5 – COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS DOS FILTROS SIR E ASIR PARA O CASO-TESTE 4

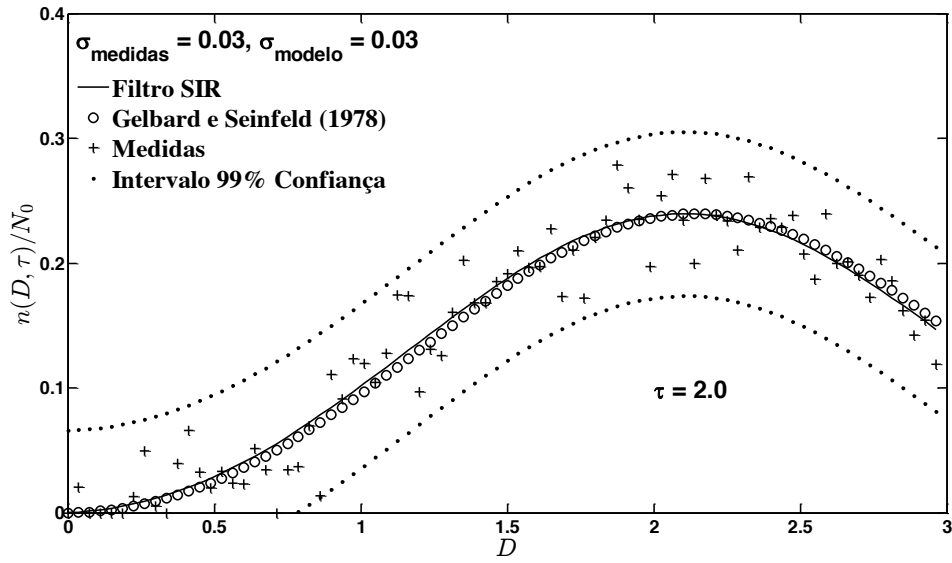
Para o caso-teste 4, foram usados os mesmos parâmetros do caso-teste 2, para análise dos resultados.

Nas Figuras D.1 a D.8 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$  (ver Apêndice D).

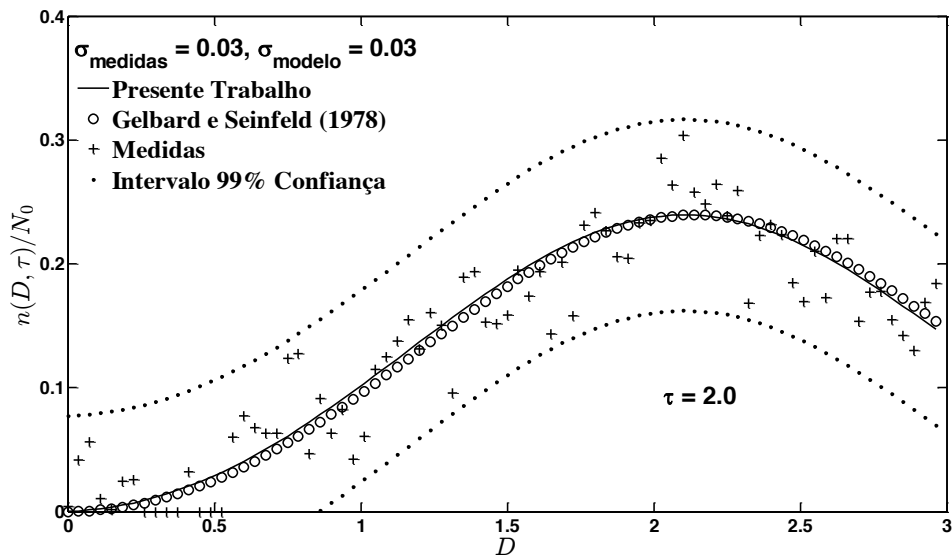
Nas Figuras D.9 a D.16 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$  (ver Apêndice D).

Nas Figuras 5.37 a 5.44 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 2,0$ .

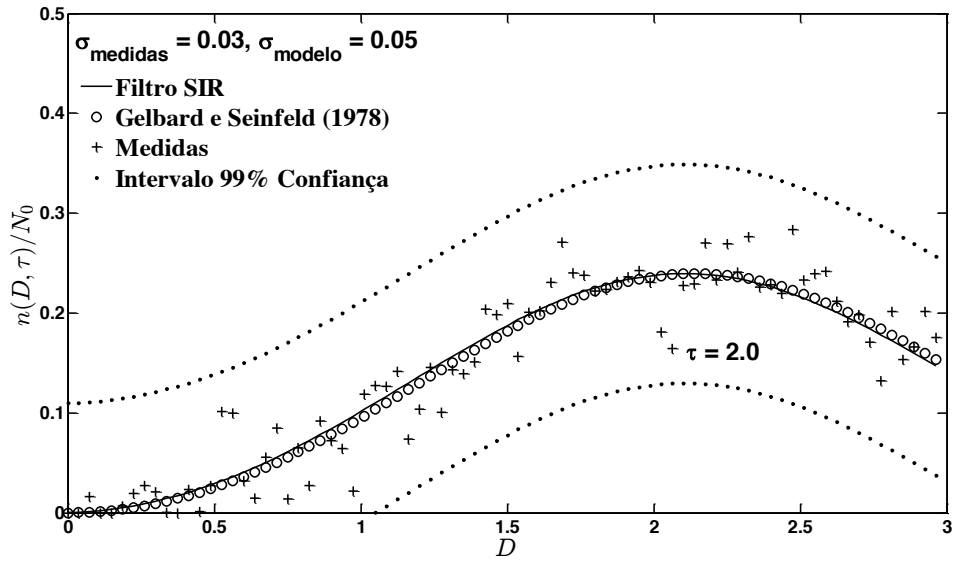
Nota-se que as figuras acima citadas, apresentam a mesma concordância das Figuras 5.21 a 5.28 com suas respectivas análises.



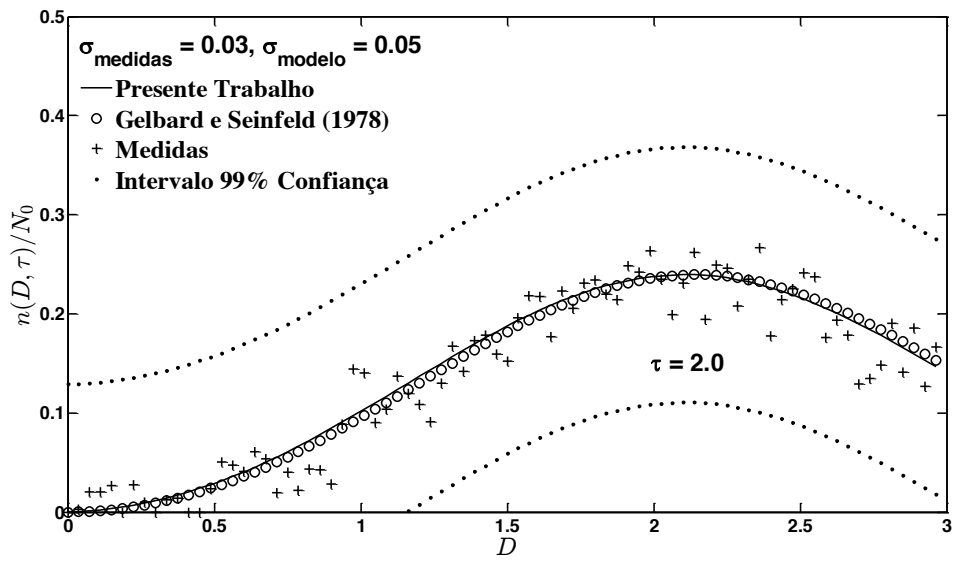
**FIGURA 5.37** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



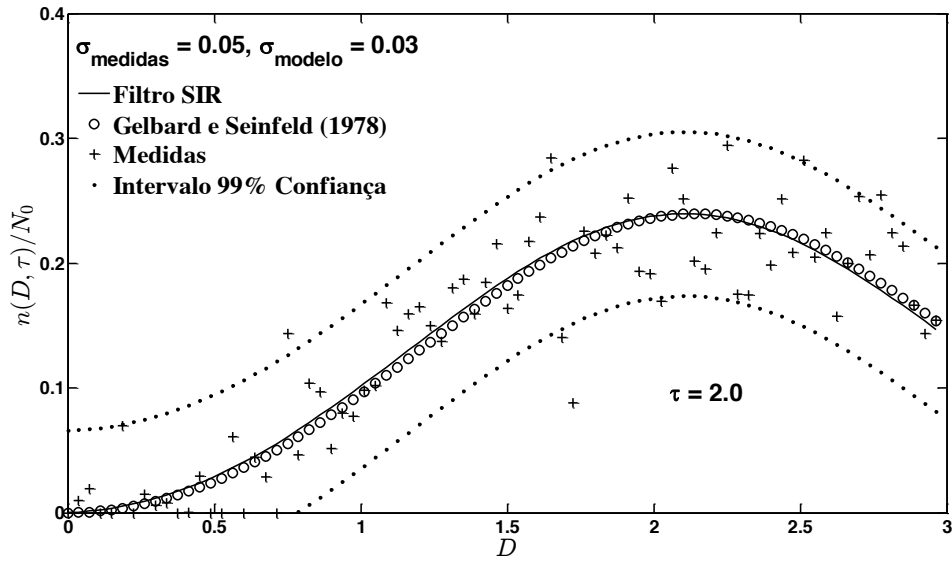
**FIGURA 5.38** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).



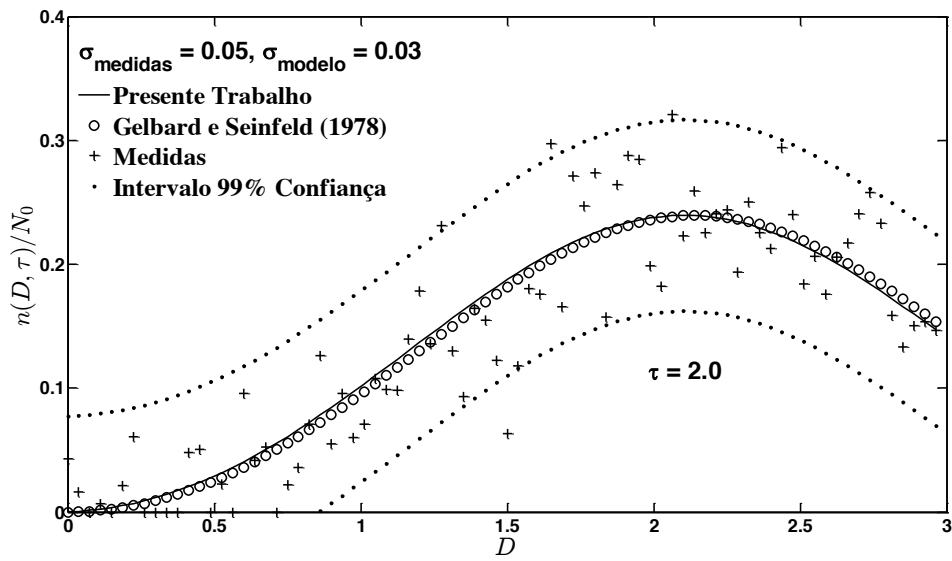
**FIGURA 5.39** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



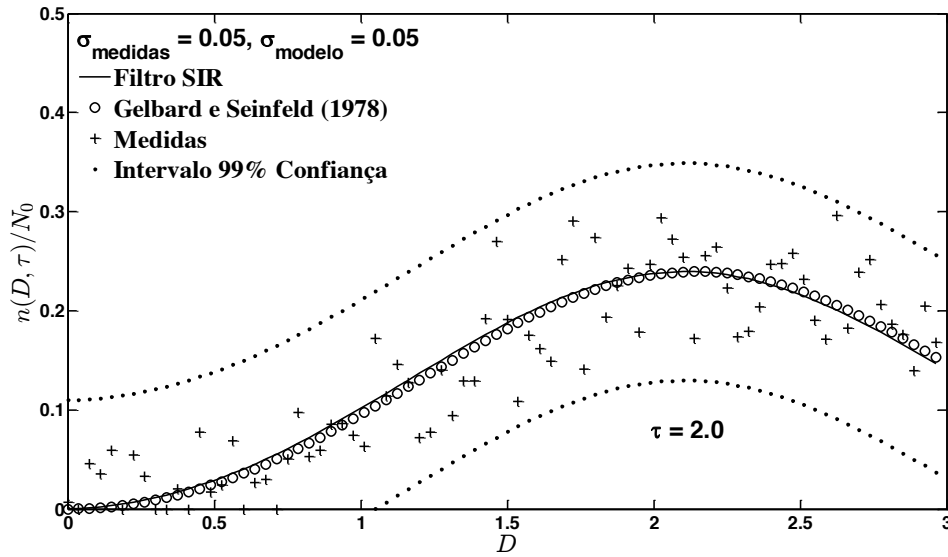
**FIGURA 5.40** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).



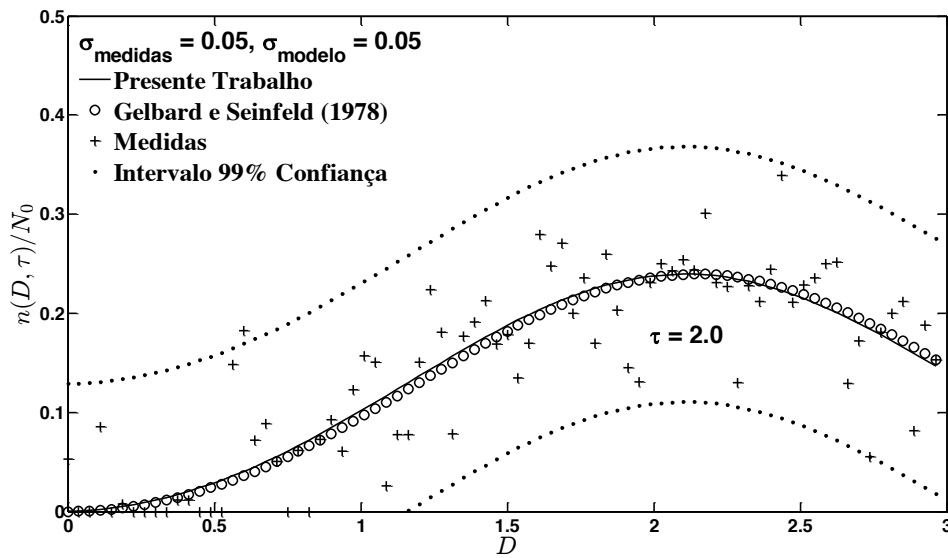
**FIGURA 5.41** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.42** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).



**FIGURA 5.43** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro SIR).



**FIGURA 5.44** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 2,0$  (filtro ASIR).

## CAPÍTULO 6

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES

#### 6.1 – CONCLUSÕES

Neste trabalho os resultados mostram a aplicabilidade da técnica da transformada de Laplace com inversão numérica na solução de equação do balanço populacional em sistemas particulados.

Utilizou-se a subrotina DINLAP da biblioteca IMSL (1991) a qual executa a transformada de Laplace com inversão numérica e os resultados gerados foram comparados com os dados produzidos pela solução analítica, os quais têm excelente concordância.

Validou-se, dessa forma a inversão numérica da transformada de Laplace para resolver problemas em sistemas particulados.

A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica mostrou-se capaz de fornecer excelentes resultados para problemas sem taxa de remoção e nucleação e bons resultados para problemas com taxa de nucleação e remoção.

Analisando o comportamento dos gráficos gerados no presente trabalho, conclui-se que a técnica da transformada de Laplace com inversão numérica é uma ferramenta alternativa na resolução dos problemas estudados.

A técnica da transformada de Laplace com inversão numérica pode ser usada como solução de equação do balanço populacional em processos de cristalização, pois esses processos utilizam o mesmo mecanismo para solucionar a física do problema.

O filtro Bayesiano usado neste trabalho foi o filtro com Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR), o qual é aplicado em problema



hiperbólico e não linear (que é representado pela PBE) com o intuito de estimar a função densidade de tamanho da partícula.

O filtro com Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR) é de razoável implementação computacional.

O filtro ASIR conseguiu estimar a função densidade de tamanho da partícula para sistemas particulados com: coagulação pura e coeficiente de coagulação constante, coagulação pura com o coeficiente de coagulação variável, coagulação pura com coeficiente de coagulação variável e taxa remoção de partículas, condensação e coagulação com coeficiente de coagulação constante e coagulação com coeficiente de coagulação constante e taxa de remoção e nucleação. Para todos os casos testados os resultados são bons.

O filtro Bayesiano com Amostragem e Reamostragem por Importância Auxiliar (ASIR) mostrou-se uma excelente ferramenta para estimar a função densidade de tamanho da partícula em sistemas particulados.

## 6.2 – SUGESTÕES

- A sequência do presente trabalho é aplicar o filtro Auxiliar de Partícula (APF) para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro de Monte Carlo com Amostragem Sequencial (SMC) para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro para Estimativa Combinada de Parâmetros e Variáveis de Estado para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- Utilizar o filtro de Monte Carlo Sequencial sem o Cálculo da Função de Verossimilhança para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de sistemas particulados.

- A sequência natural do presente trabalho é aplicar filtros Bayesianos para estimar a função densidade de tamanho da partícula em processos de cristalização os quais são de grande interesse industrial.

## REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M., STEGUN, I. A., 1965, *Handbook of Mathematical Functions*, U.S. National Bureau of Standards, Washington, D. C.
- AIUBE, F. A. L., 2005, *Modelagem dos preços futuros de commodities: abordagem pelo filtro de partículas*, Tese de Doutorado da PUC-RIO, Departamento de Engenharia Industrial.
- ALEXOPOULOS, A. H., ROUSSOS, A.I., KIPARISSIDES, C., 2004, “Part I: Dynamic evolution of the particle size distribution in particulate processes undergoing combined particle growth and aggregation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 59, PP. 5751 – 5769.
- ANDRADE, D., 2010, *Transformada de Laplace*, <<http://www.dma.uem.br/kit>> acesso em 20 jul.
- ARULAMPALAM, M. S., MASKELL, S., GORDON, N., *et al.*, 2002, “A Tutorial on Particle Filters for Online Nonlinear/Non-Gaussian Bayesian Tracking”, *IEEE Transactions on Signal Processing*, Vol. 50, no. 2, pp. 174-188.
- ASTER, R. C, BORCHERS, B., THURBER, C.H., 2005, *Parameter Estimation and Inverse Problems*, Elsevier Academic Press,.
- BALDINO, R. R., 1979, *Transformada de Laplace*, Ed. McGraw-Hill do Brasil, LTDA.
- BALDYGA, J., PODROSKA, W., POHORECKI, R., 1995, “Mixing-Precipitation Model with Application to Double Feed Semi-Batch Precipitation”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 50, pp. 1281.
- BARRESI, A. A., MARCHISIO, D., G. Baldi, 1999, “On the Role of Micro and Meso-Mixing in a Continuous Couette-Type Precipitator”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 54, pp. 2339.

BARICHELLO, L. B., 1988, *Inversão Numérica da Transformada de Laplace por Polinômios Trigonometricos e de Leguerre*, Dissertação – UFRGS, Brasil.

BATISTA, C. S., 2011, Solução de Equações de Balanço Populacional usando a Técnica da Transformada de Laplace e Filtro de Partículas, Tese – UFPA, Brasil.

BECK, J. V., 1999, “Sequential Methods in Parameter Estimation”, *3rd International Conference on Inverse Problems in Engineering*, Tutorial Session, Port Ludlow, WA.

BELLMAN, R., KALABA, R. E., LOCKETT, J. A., 1966 Numerical inversion of the Laplace transform. *American Elsevier*, New York.

BOYCE, W. E., DIPRIMA, R., C., 2001, *Elementary Differential Equation and Boundary Value Problems*, Seventh Edition, John Wiley & Sons. Inc.

BROCK, J. R., 1972, “Condensational Growth of Atmospheric Aerosols,” 1. *Coil. Interfac. Sci.*, vol. 39, no. 1, 32.

CHEN, Z., 2003, “Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond”,

CHOPIN, N., 2002, “A Sequential Particle Filter Method for Static Models”, *Biometrika Trust*, Vol. 89, No. 3, pp. 539-551.

CRUMP, K. S., 1976, “Numerical inversion of Laplace transforms using a Fourier series approximation”, *Journal of the Association for Computing Machinery*, v. 23, pp. 89-96.

DE HOOG, F.R., KNIGHT, J. H., STOKES, A. N., 1982, “An improved method for numerical inversion of Laplace transforms”, *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, v. 3, pp. 357-366.

DEL MORAL, P., DOUCET, A., JASRA, A., 2006, “Sequential Monte Carlo Samplers”, *J. R. Statist. Soc. B* **68**, pp. 411 – 436.

DIRKSEN, J. A. RING, T. A., 1991, “Fundamentals of Crystallization: Kinetics Effect of Particle Size Distribution and Morphology”, *Chem Eng Sci.*; vol. 46, pp. 2389-2427.

DOUCET, A., JOHANSEN, A. M., 2008, “A Tutorial on Particle Filtering and Smoothing: Fifteen years later”.

DRAKE, R. L., 1972, “A general mathematical survey of the coagulation equation”, in Topics in *Current Aerosol Research*, Part 2 (3) (Edited by G. M. Hidy and J. R. Brock), p. 201. Pergamon, New York.

ELGARAYHI, A., 2003, “Exact Solutions of the Aerosol Dynamic Equation in Spherical Geometry”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 77, pp. 211–217.

FALOPE, G. O., JONES, A.G., ZAUNER, R., 2001, “On Modelling Continuous Agglomerative Crystal Precipitation via Monte Carlo Simulation”, *Chemical Engineering Science*, vol.56, pp. 2567-2574.

FREDRICKSON, A. G., RAMKRISHNA, D., TSUCHIVA, H. M. 1967, “Statistics and Dynamics of Prokaryotic Cell Populations”, *Mathematical Biosciences*, vol. 1, pp. 327-374.

GELBARD, F., SEINFELD, J. H., 1978, “Numerical Solution of the Dynamic Equation for Particulate Systems”, *Journal of computational physics* , vol. 28, 357-375

GORDON, N., SALMOND, D. and SMITH, A. F. M., 1993, “Novel approach to nonlinear and non-Gaussian Bayesian state estimation,” *Proc. Inst. Elect. Eng., F*, vol. 140, pp. 107–113.

HARRISON, P. J., STEVENS, C. F., 1976, “Bayesian Forecasting (with discussion), *Journal of the Royal Statistical Society*, series B 38:205 – 247.

HORN D, RIEGER J., 2001, “Organic Nanoparticles in the Aqueous phase—theory Experiment, and Use”. *Angewandte Chemie - International*, Vol. 40, pp. 4330-4361.

HULBURT, H. M., KATZ, S., 1964, "Some Problems in Particle Technology: A Statistical Mechanical Formulation", *Chemical Engineering Science*, vol.19, pp. 555-574.

ILIEVSKI, D., 2001, "Development and Application of a Constant Supersaturation, Semi-Batch Crystalliser for Investigating Gibbsite Agglomeration", *Journal of Crystal Growth*, vol. 233, pp 846–862.

ILIEVSKI, D., 1991, *Modelling Al(OH)<sub>3</sub> Agglomeration during Batch and Continuous Precipitation in Supersaturated Caustic Aluminate Solutions*, Thesis Doctor, University of Queensland, July.

IMSL LIBRARY, 1991, Math/Lib, Houston, TX.

INSTITUTO DE PESQUISA TECNOLÓGICA (IPT), 2007, "Tecnologia da Cristalização", Apostila.

JAZWINSKI, A. H., 1970, "Stochastic Processes and Filtering Theory". New York: Academic.

JOHNSON B.K., PRUD'HOMME R.K., 2003, "Flash Nanoprecipitation of Organic Actives and Block Copolymers Using a Confined Impinging Jets Mixer", *Australian J Chem.*, vol.56, pp. 1021-1024.

JONAS, A. G., 2002, *Crystallization Process System*, Butterworth-Heinemann.

JUNG, W. M., KANG, S. H., KING, W., et al., 2000, "Particle Morphology of Calcium Carbonate Precipitated by Gas-Liquid Reaction in a Couette-Taylor Reactor", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 733.

KAPIO, J., SOMERSALO, E., 2004, "Statistical and Computational Inverse Problems", *Applied Mathematical Sciences* 160, Springer-Verlag.

KAIPIO, J., DUCAN, S., SEPPANEN, A., *et al.*, 2005, “State Estimation for Process Imaging”, Chapter in *Handbook of Process Imaging for Automatic Control*, editors: David Scott and Hugh McCann, CRC Press.

KALOS, M.H., WHITLOCK, P.A., 1986, *Monte Carlo Methods*, John Wiley and Son.

KIM, W. S., J. M. TARBELL, 1996, “Micromixing Effects on Barium Sulfate Precipitation in an MSMR Reactor”, *Chem. Eng. Commun.*, vol. 146, pag. 33.

KITAGAWA, G., 1996, “Monte Carlo Filter and Smoother for Non-Gaussian State Space Models”, *Journal of Computational and Graphical Statistics*, vol. 5, pp 1-25.

KRYLOV, V. I., SKOBLYA, N. S., 1969, *Handbook of numerical inversion of Laplace transforms*. Translated by D. Louvish, Jerusalem: Israel Program for Scientific Translation.

KRUTZER, L. L. M., VAN DIEMEN A. J. G., STEIN H. N., 1995, “The Influence of the Type of Flow on the Orthokinetic Coagulation Rate”, *J. Colloid Interface Sci.*, vol. 171, pp. 429.

KUMAR, S., RAMKRISHNA, D., 1997, “On the Solution of Population Balance Equations by Discretization-III. Nucleation, Growth and Aggregation of Particles”, *Chemical Engineering Science*, Vol. 52, no. 24, pp. 4659-4679.

LI, T. S., ROHL, A. L., ILIEVSKI, D., 2000, “Modelling non-stationary Precipitation Systems: sources of error and their propagation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 55 pp. 6037-6047.

LITSTER, J. D., SMIT, D. J., HOUNSLOW, M. J., 1995, “Adjustable Discretized Population Balance for Growth and Aggregation”, *AIChE J.*, 41, 591 – 603.

LIU, Y., CAMERON, I. T., 2001, “A New Wavelet-Based Method for the Solution of the Population Balance Equation”, *Chemical Engineering Science*, vol. 56, pp.5283–5294.

LIU, J. S., CHEN, R., 1998, “Sequential Monte Carlo Methods for Dynamic Systems”, *Journal of the American Statistical Association*, Vol. 93, No. 443 pp. 1032- 1044.

LIU, J. S., WEST, M., 2001, “Combined Parameter and State Estimation in Simulation-based Filtering”, in *Sequential Monte Carlo Methods in Practice*, A. Doucet, N. de Freitas, and N. Gordon, Eds. New York: Springer - Verlag, 197 – 217.

MAHONEY, A. W., RAMKRISHNA, D., 2002, “Efficient Solution of Population Balance Equations with Discontinuities by Finite Elements”, *Chemical Engineering Science*, vol. 57, pp. 1107 – 1119.

MARCHISIO, D. L., PIKTURNA, J. T., FOX, R. O., *et al.*, 2003, “Quadrature Method of Moments for Population-Balance Equations”, *AIChE Journal*, Vol. 49, No. 5, pp.1266 – 1276.

MARCHISIO, D. L., BARRESI, A. A., GARBERO, M., 2002, “Nucleation, Growth, and Agglomeration in Barium Sulfate Turbulent Precipitation”, *AIChE Journal*, Vol. 48, No. 9, pp. 2039 – 2050.

MARCHISIO, D. L., BARRESI, A. A., 2001, “Simulation of Turbulent Precipitation in a Semi-batch Taylor-Couette Reactor Using CFD”, *AIChE Journal*, Vol. 47, No. 3, pp. 664 – 676.

MARCHISIO, D. L., RIVAUTELLA, L., BARRESI, A. A., 2006a, “Design and Scale-Up of Chemical Reactors for Nanoparticle Precipitation”, *AIChE Journal*, Vol. 52, No. 5, pp. 1877 – 1887.

MARCHISIO, D. L., SOOS, M., SEFCIK, J., *et al.*, 2006b, “Role of Turbulent Shear Rate Distribution in Aggregation and Breakage Processes”, *AIChE Journal*, Vol. 52, No. 1, pp. 158 – 173.

MARSHALL, A., 1956, “The use of Multi-Stage Sampling Schemes in Monte Carlo Computations”, in *Symposium on Monte Carlo Methods*, M. Meyer Ed. New York: Wiley, pp. 123 – 140.



ORLANDE, H. R. B., DULIKRAVICH, G. S., COLAÇO, M. J., 2008, “Application of Bayesian Filters to Heat Conduction Problems”, *International Conference on Engineering Optimization*, Rio de Janeiro, Brazil, 01 - 05 June.

OZISIC, M. N., ORLANDE, H.R.B., 2000, *Inverse Heat Transfer*, Taylor & Francis, New York.

PACHECO, A. R., CREUS, G. J., 1997, “Análise viscoelástica de Estruturas Laminadas Mediante Empleo da Inversão Numérica da Transformada de Laplace”, *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo e Desenhos em Engenharia*, vol. 13,4, pp 455 – 465.

PAGLIOLICO, S., D. MARCHISIO, BARRESI A. A., 1999. “Influence of Operating Conditions on BaSO<sub>4</sub> Crystal Size Distribution and Morphology in a Continuous Couette Type Precipitator”, *J. Ther. Anal. Cal.*, vol. 56, pp. 1423.

PETERSON, T. W., GELBARD, F., SEINFELD, J. H., 1978, “Dynamics of Source-Reinforced Coagulation and Condensing Aerosols”, *Journal of Colloid and Interface Science*, vol. 63, nº 3, March.

PIRES, T. S., 2008, “Estimativa de Função em Problema Inverso de Condução de Calor em uma Parede de Pequena Espessura (filtro de kalman)”, UFRJ – COPPE, Programa de Engenharia Mecânica, COM – 803:Topicos Especiais em Engenharia Mecânica.

PITT, M. e SHEPHARD, N., 1999, “Filtering via Simulation: Auxiliary Particle Filters”, *J. Amer. Statist. Assoc.*, vol. 94, nº 446, pp. 590 – 599.

RAINVILLE, E. D. 1964, *Elementary Differential Equations*, Macmillan Company, Third Edition, New York.

RAMABHADRAN, T. E., PETERSON, T. W., SEINFELD, J. H., 1976, “Dynamics of Aerosol Coagulation and Condensation”, *AIChE*, vol. 22, nº 5.

RAMKRISHNA, D., 1985, “The Status of Population Balances”, *Chemical Engineering Communications*, vol.3, pp.49-95.

RAMKRISHNA, D., BORWANKER, J. D., 1973, “A Puristic Analysis of Population Balance\_I,” *Chem. Eng., Sci.*, 28, 1423.

RANDOLPH, A. D. 1969, “Effect of Crystal Breakage on Crystal Size Distribution from a mixed suspension Crystallizer”, *Industrial and Engineering Chemistry, Fundamentals*, vol. 8, pp. 58-69.

RANDOLPH, A. D., LARSON, M. A., 1988, *Theory of Particulate Processes*, Second Ed., New York: Academic Pres.

RIGOPOULOS, S., JONES, A. G., 2003, “Finite-Element Scheme for Solution of the Dynamic Population Balance Equation”, *AIChE Journal*, Vol. 49, No. 5, pp. 1127 – 1139.

RIVALLIN, M., BENMAMI, M., KANAEV, A., *et al.*, 2005, “Sol-gel Reactor with Rapid Micromixing Modelling and Measurements of Titanium Oxide Nano-particle” Growth. *Chem Eng Research Design.*; 83–1A, pp.67 – 74.

SARRA, S. A., 2002, “The Method of Characteristics with applications to Conservation Laws”.

SCOTT, W. T., 1968, “Analytic Studies of Cloud Droplet Coalescence I”, *J. Atmos. Sci.*, vol. 25, pp. 54 – 65.

SILVA, W. B., 2010, *Aplicação de Filtros de Partículas em Problemas de Transferência de Calor*, Qualificação de Doutorado da COPPE-UFRJ, Programa de Engenharia Mecânica.

SILVA, W. B., ORLAND, H. R. B., COLAÇO, M. J., 2010, “Evaluation of Bayesian Filters Applied to Heat Conduction Problems”, *2nd International Conference on Engineering Optimization*, September 6 – 9, Lisbon – Portugal.

SISSON, S. A., FAN, Y., TANAKA, M. M., 2009, “Sequential Monte Carlo without Likelihoods”, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 104, 1760 – 1765. Errata.

SMITH, A. F. M., WEST, M., 1983, “Monitoring Renal Transplant: In Application of the Multi-process Kalman Filter”, *Biometrics* 39:867 – 878.

SÓDRE, U., 2003, “Transformadas de Laplace”, Notas de aulas, material compilado no dia 6 de Maio.

SPIEGEL, M. R., 2009, *Schaum’s Outline of Theory and Problems of Mathematical Handbook of Formulas and Tables*, McGraw-Hill.

SUNG, M. H., *et al.*, 2000, “Agglomeration of Yttrium Oxalate Particles Produced by Reaction Precipitation in Semi-Batch Reactor”, *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 2173.

TAN, S., FOX, C. & NICHOLLS, G., 2006, “Inverse Problems”, Course Notes for Physics 707, University of Auckland, Auckland, NZ.

WEST, M., 1993a, “Approximation Posterior Distribution by Mixture”, *J. R. Statist. Soc. B*, vol.55, pp. 409 – 422.

WEST, M., 1993b, “Mixture Models, “Monte Carlo, Bayesian updating and Dynamics Models”, J. H. Newton (ed), Computing Science and Statistics: *Proceedings of the 24<sup>th</sup> Symposium on the Interface*, Interface Foundation of North America, Fairfax Station, Virginia, pp. 325 – 333.

WEST, M., HARRISON, P. J., 1997, *Bayesian Forecasting and Dynamics Models*, 2<sup>nd</sup> Edn. Springer – Verlag, New York.

WULKOW, M., GERSTLAUER, A., NIEKEN, U., 2001, “Modeling and simulation of crystallization processes using parsival”, *Chemical Engineering Science*, vol.56, pp. 2575-2588.

ZAUNER, R., JONES A. G., 2000, "Determination of Nucleation, Growth, Agglomeration and Disruption Kinetics from Experimental Precipitation Data: the Calcium Oxalated System", *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 4219.

ZHE CHEN, 2003, "Bayesian Filtering: From Kalman Filters to Particle Filters, and Beyond".

## APÊNDICE A

### CASO-TESTE 1

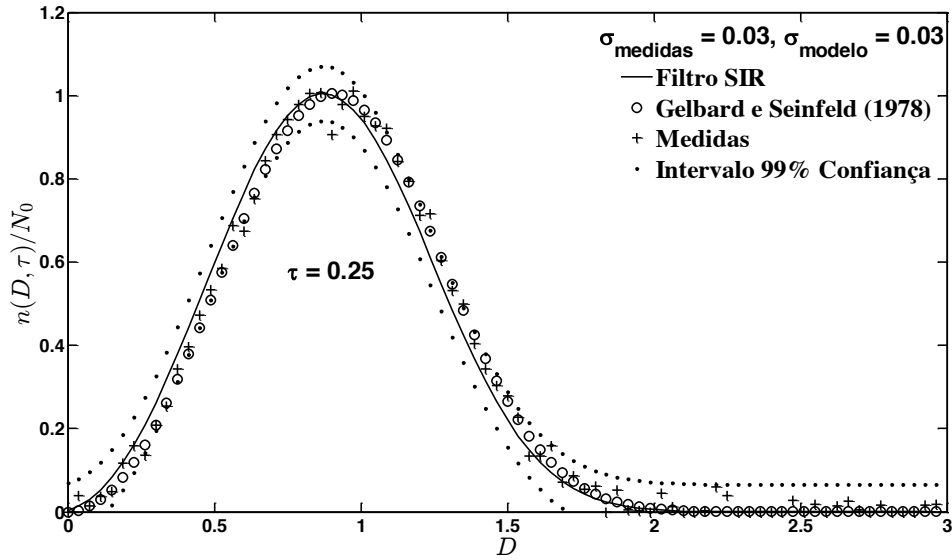
COMPARAÇÕES GRÁFICAS ENTRE OS RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA COM OS OBTIDOS VIA FILTRO DE PARTÍCULAS (SIR E ASIR) PARA  $\tau = 0,25$  e  $\tau = 1,0$

As Figuras A.1 a A.8 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$ .

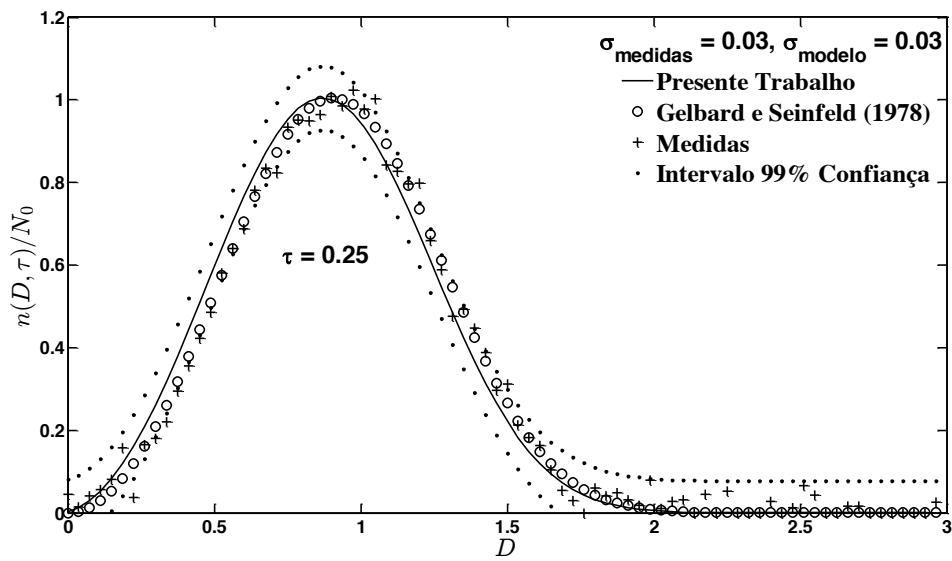
Nas Figuras A.2 e A.4, nota-se que as medidas convergem para os valores medidos quando os desvios padrão do modelo e das medidas são pequenos. Observa-se graficamente que as medidas e os valores medidos tem a mesma tendência, mas estão dentro do intervalo de 99% de confiança.

Observa-se nas Figuras A.6 e A.8 que as medidas convergem para os valores medidos quando o desvio padrão do modelo é pequeno e o desvio padrão das medidas é grande. Nota-se, também, que as medidas e os valores estimados estão parcialmente fora do intervalo de confiança de 99% do modelo.

Comparando as Figuras A.1 e A.2, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

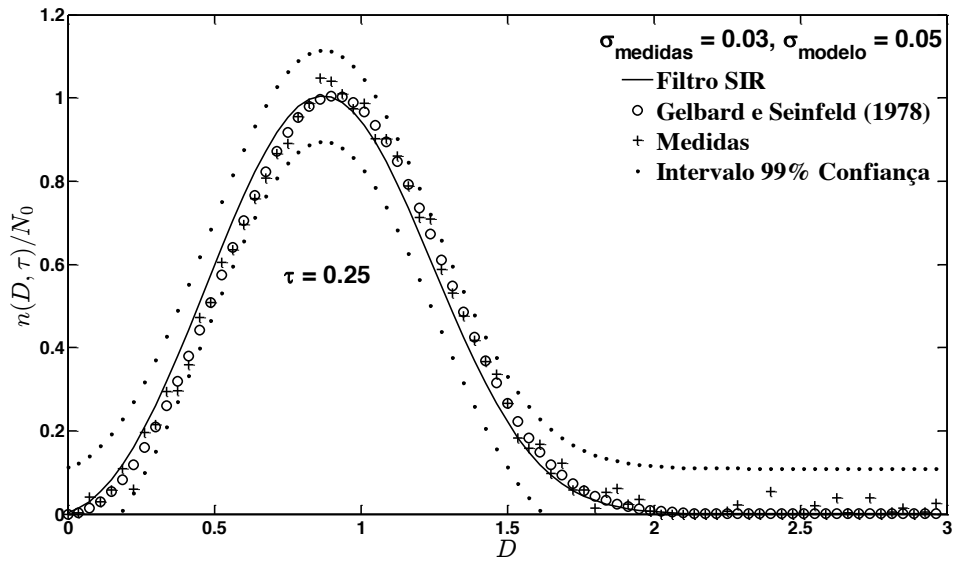


**FIGURA A.1** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

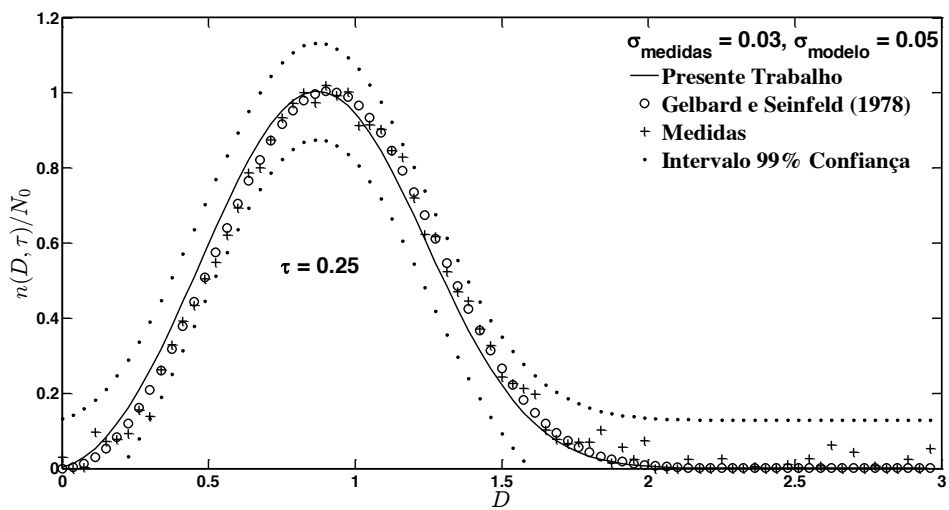


**FIGURA A.2** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras A.3 e A.4, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.

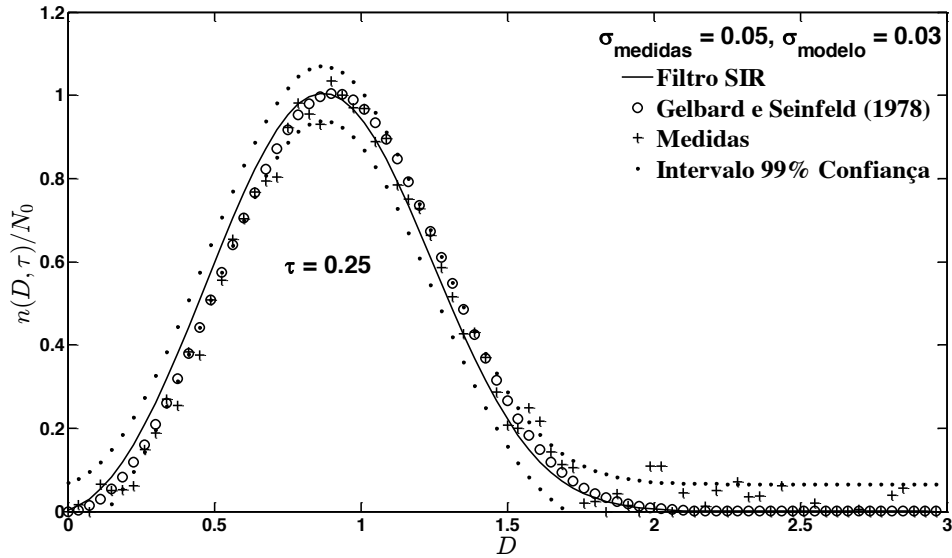


**FIGURA A.3** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

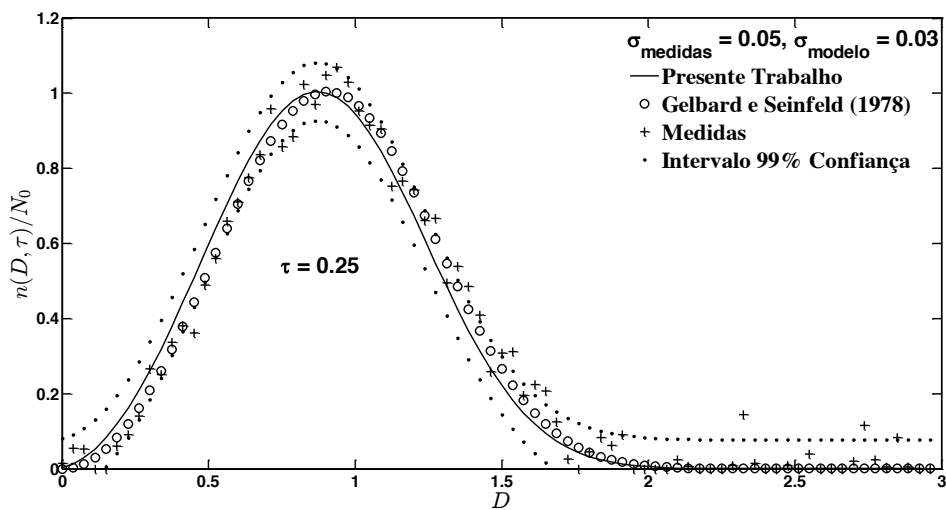


**FIGURA A.4** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras A.5 e A.6, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



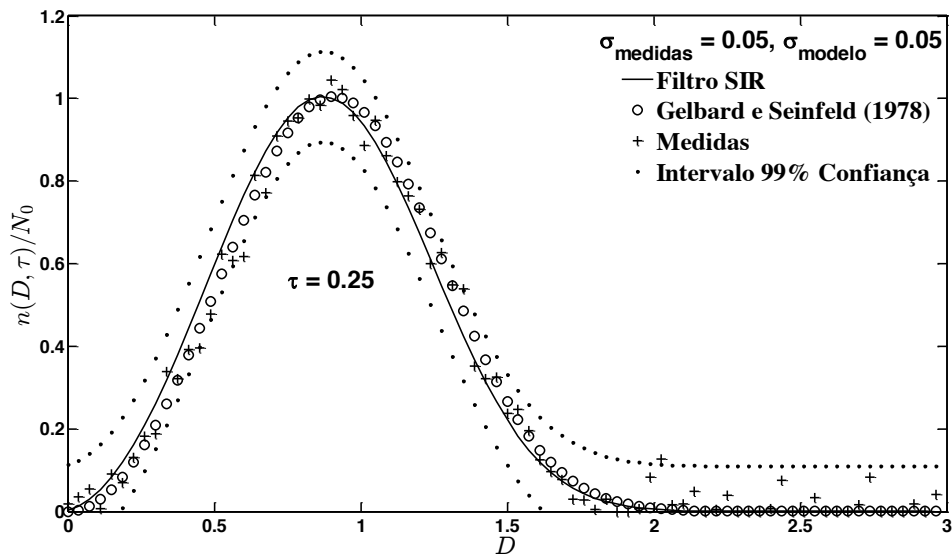
**FIGURA A.5** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



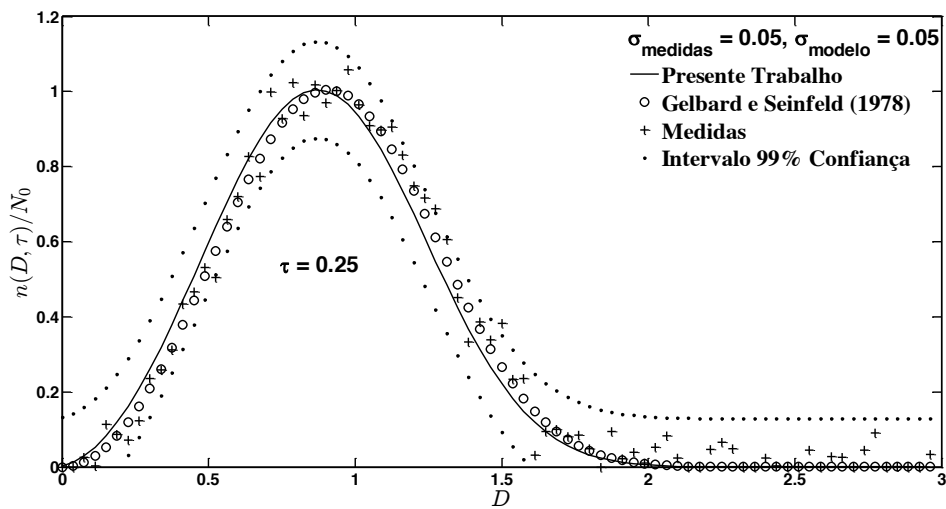
**FIGURA A.6** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).



Comparando as Figuras A.7 e A.8, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA A.7** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



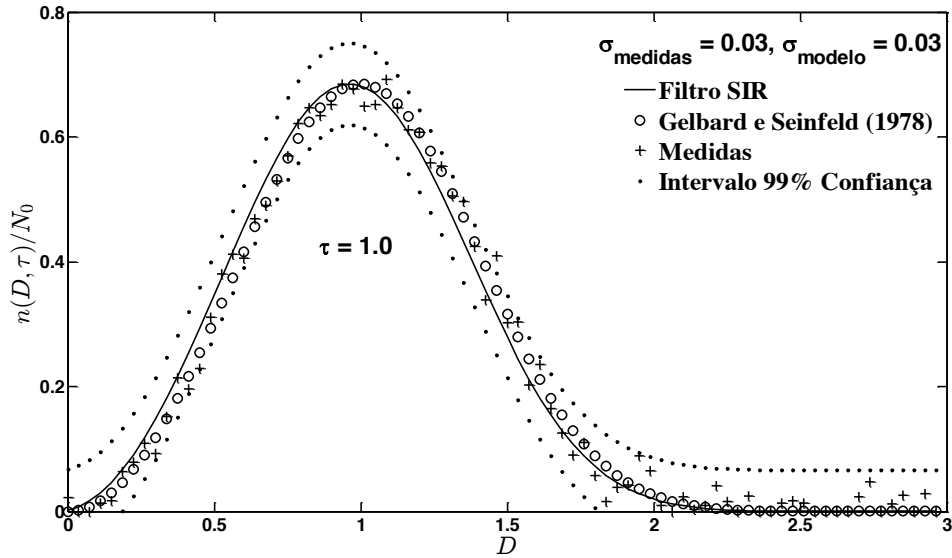
**FIGURA A.8** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso teste 1 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

As Figuras A.9 a A.16 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$ .

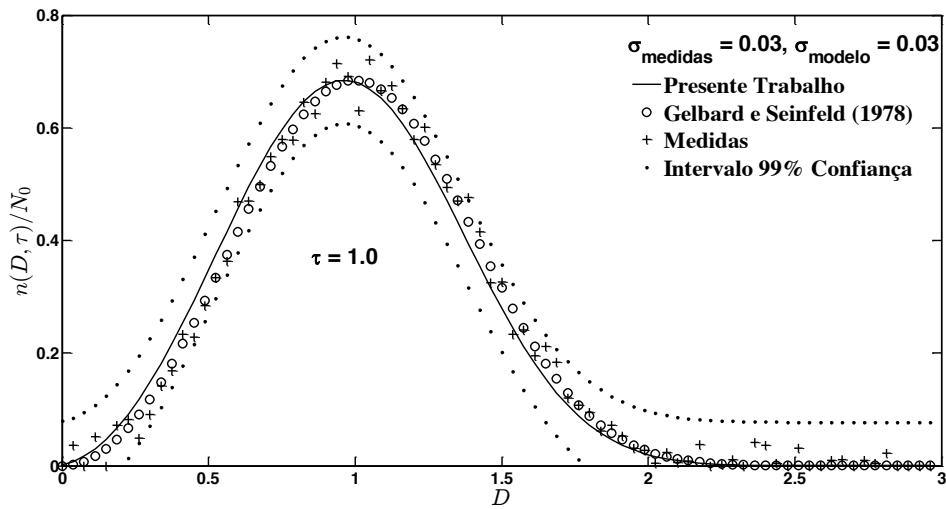
Nas Figuras A.10 e A.12 verifica-se o mesmo comportamento das Figuras A.2 e A.4. Porém, os resultados estão parcialmente dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

Observa-se que as Figuras A.14 e A.16 apresentam o mesmo comportamento da Figura A.6 e A.8 com suas respectivas análises.

Comparando as Figuras A.9 e A.10, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

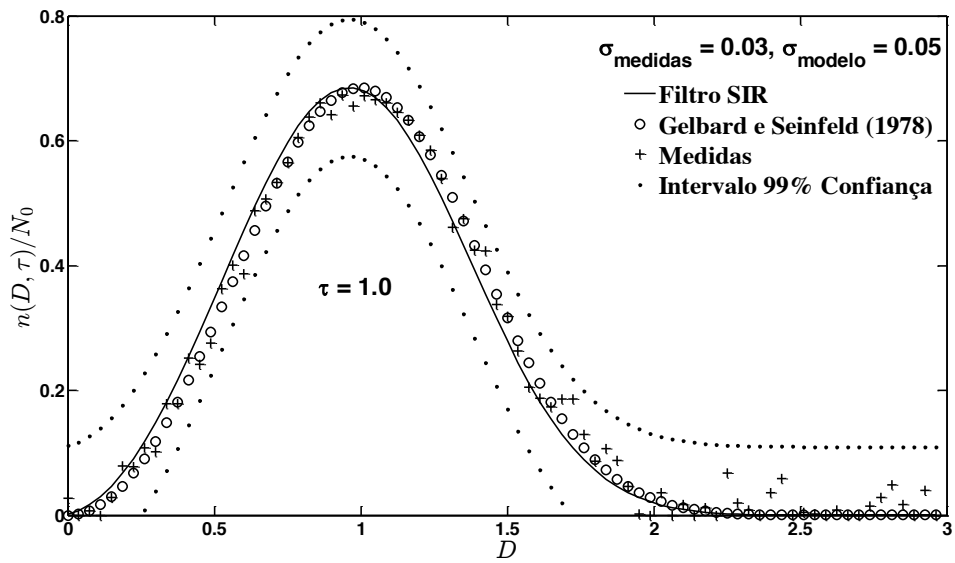


**FIGURA A.9** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

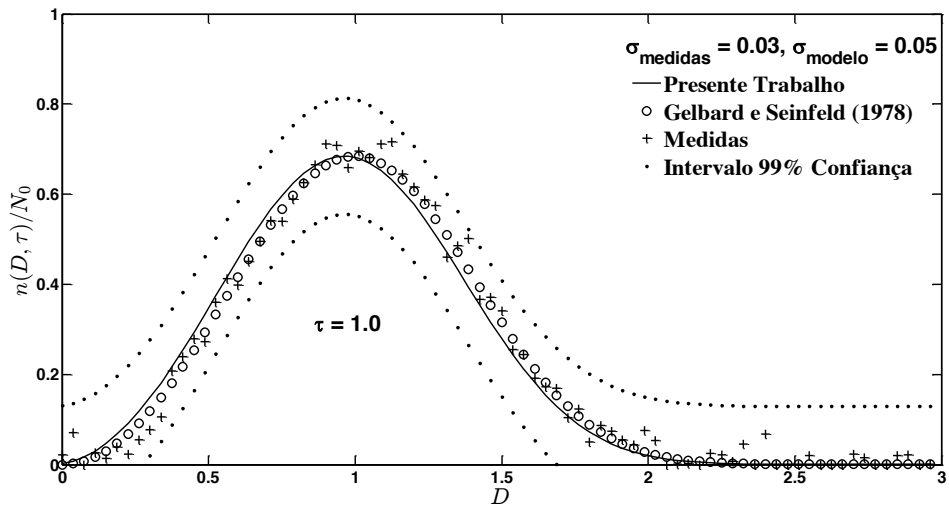


**FIGURA A.10** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras A.11 e A.12, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.

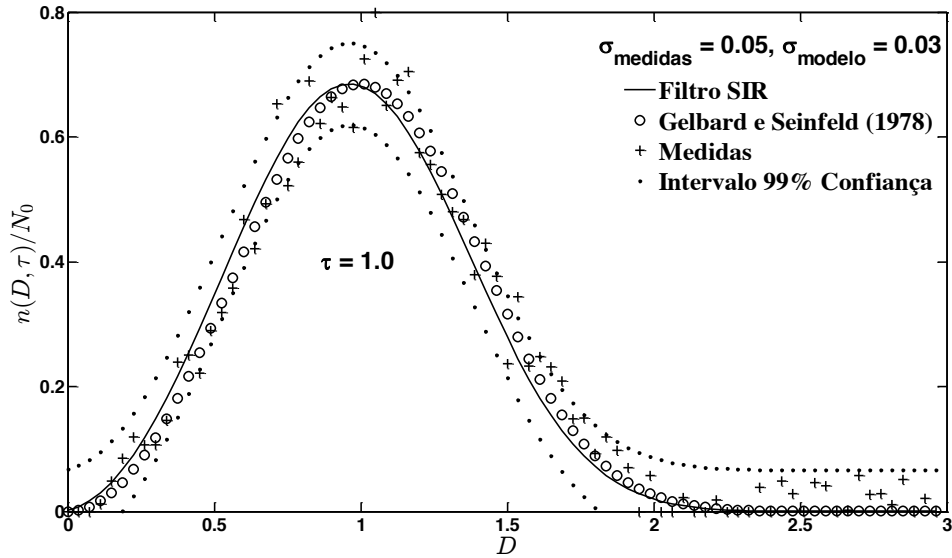


**FIGURA A.11** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

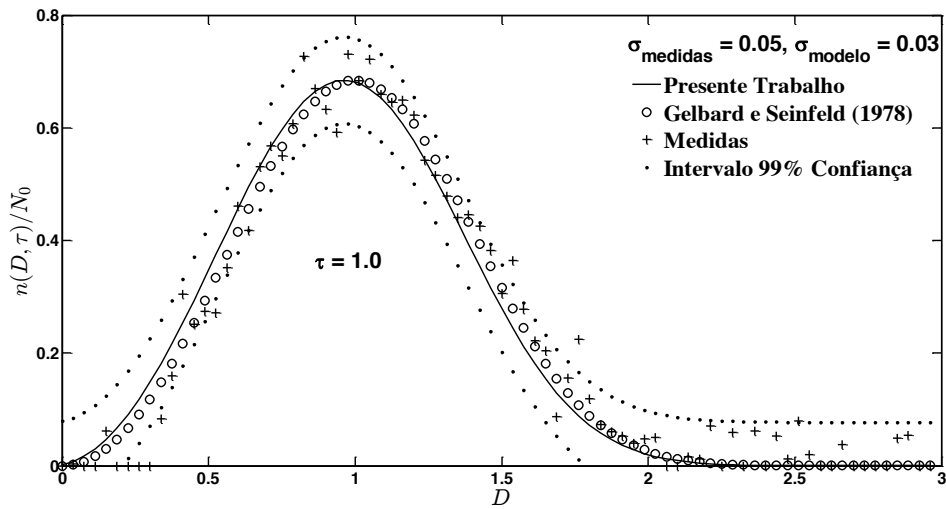


**FIGURA A.12** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras A.13 e A.14, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

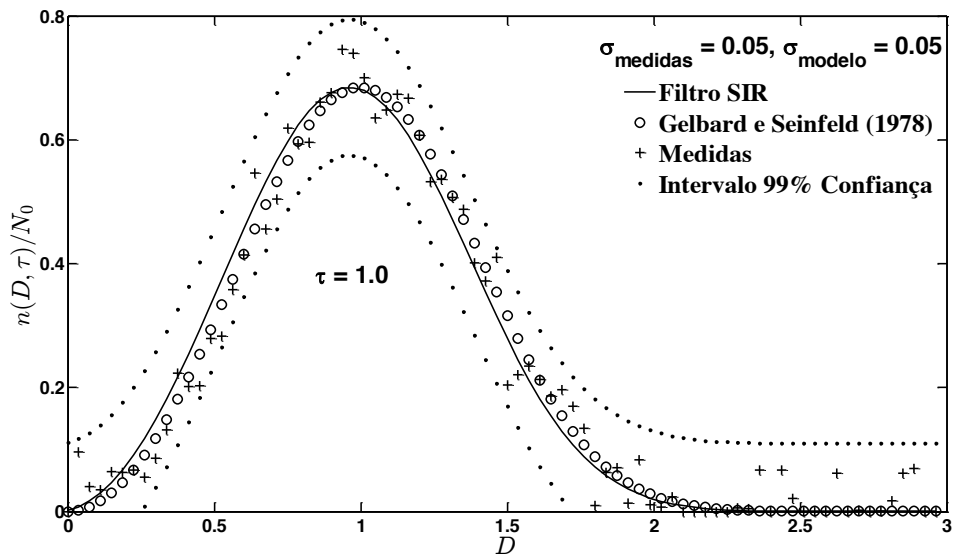


**FIGURA A.13** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

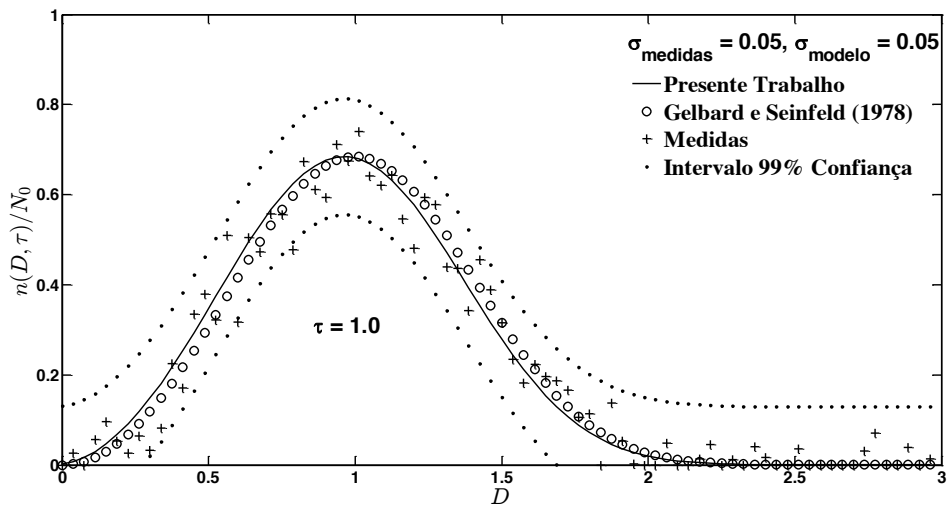


**FIGURA A.14** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras A.15 e A.16, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA A.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA A.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 1 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

## APÊNDICE B

### CASO-TESTE 2

COMPARAÇÕES GRÁFICAS ENTRE OS RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA COM OS OBTIDOS VIA FILTRO DE PARTÍCULAS (SIR E ASIR) PARA  $\tau = 0,25$  e  $\tau = 1,0$

Nas Figuras B.1 a B.8 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$ .

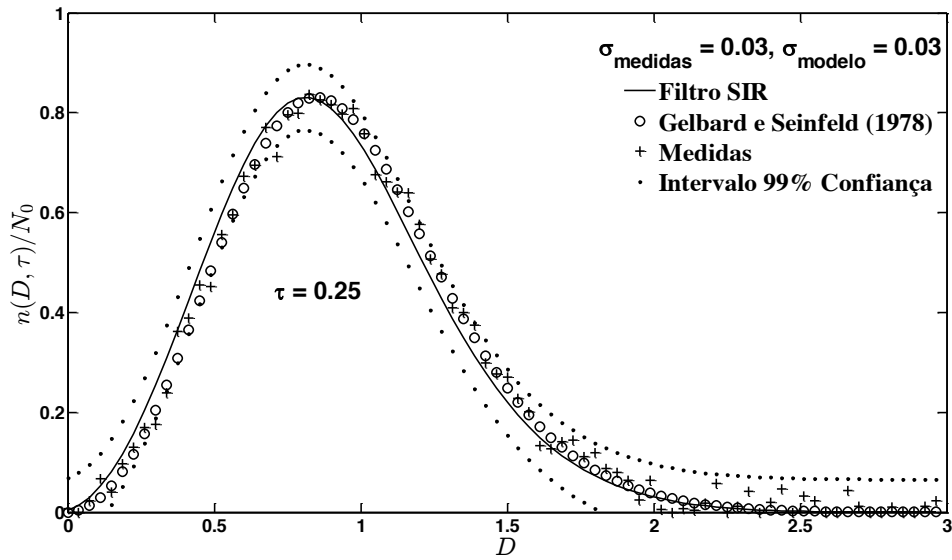
Na Figura B.2 nota-se que as medidas convergem para os valores medidos quando o desvio padrão do modelo e das medidas são pequenos. Observa-se graficamente que as medidas e os valores medidos têm a mesma tendência, porém estão parcialmente dentro do intervalo de 99% de confiança.

Observa-se na Figura B.4 que as medidas convergem para os valores medidos para  $\sigma = 0,03 - 0,05$ . Nota-se, também, que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

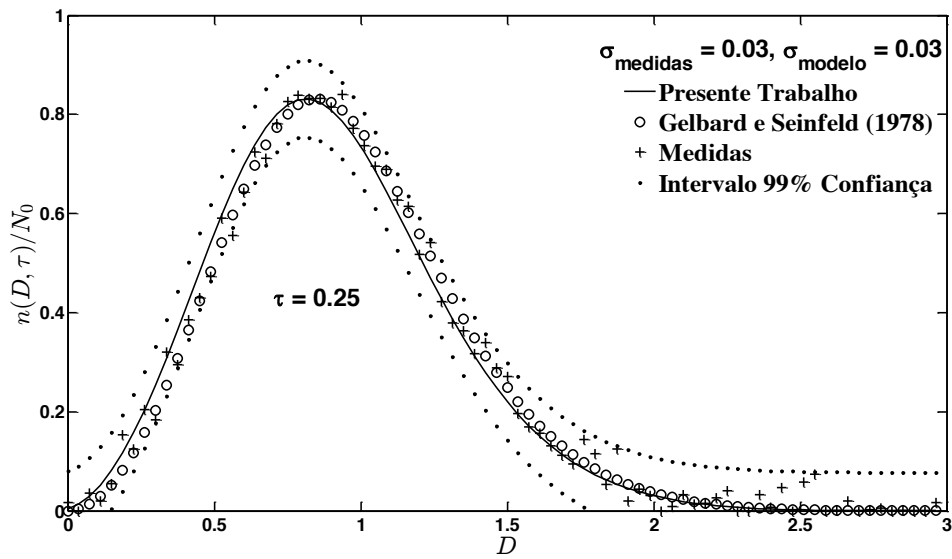
Analisando a Figura B.6, observa-se que as medidas se afastam dos valores medidos e tendem aos resultados estimados quando o desvio padrão dos valores medidos é grande. Nota-se que as medidas para a função densidade de partículas estão parcialmente fora do intervalo de confiança de 99% do modelo. Observa-se também que as medidas da função densidade de tamanho de partículas sofrem forte influência quando se aumenta o desvio padrão dos valores medidos para partículas de tamanho maior.

Na Figura B.8, as medidas tendem aos resultados estimados para grandes  $\sigma$  das medidas e do modelo. Observa-se que as medidas e os valores estimados estão dentro do intervalo de confiança de 99% do modelo.

Comparando as Figuras B.1 e B.2, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



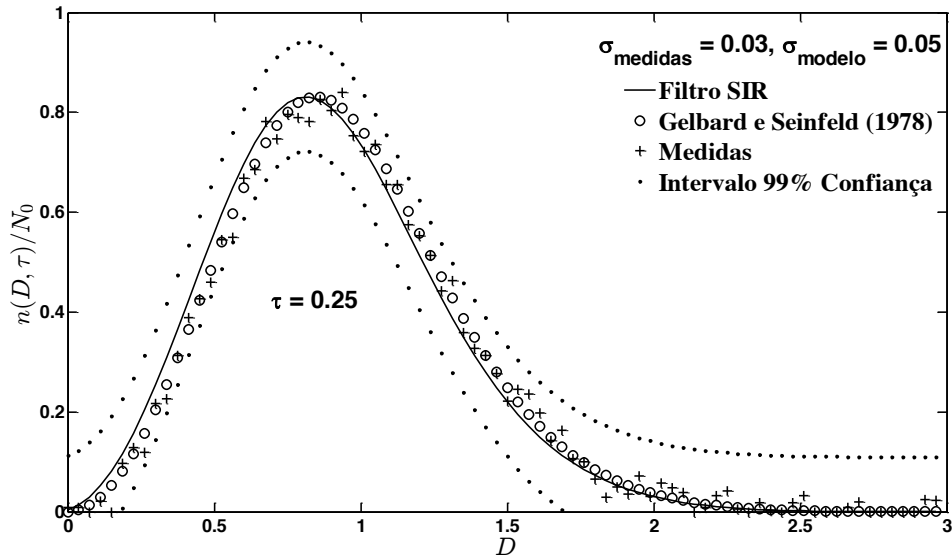
**FIGURA B.1** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



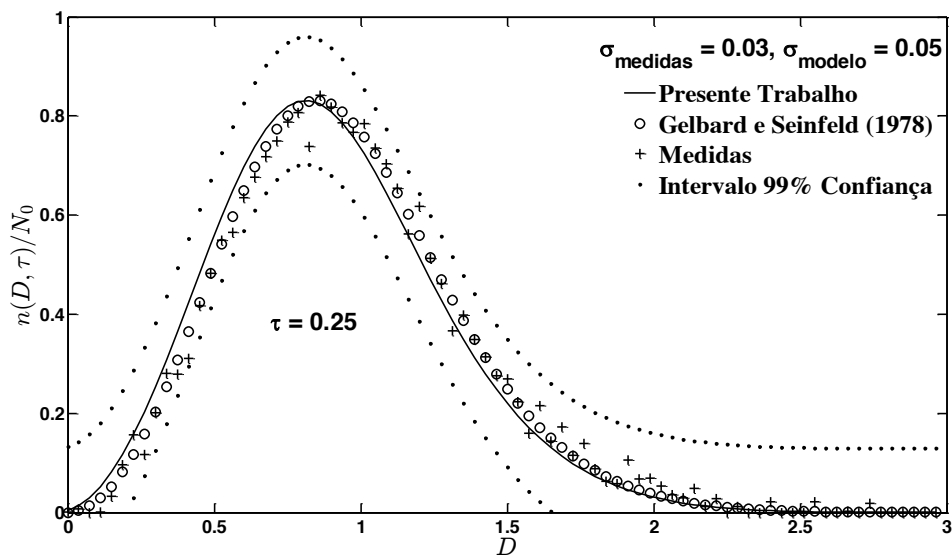
**FIGURA B.2** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).



Comparando as Figuras B.3 e B.4, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.

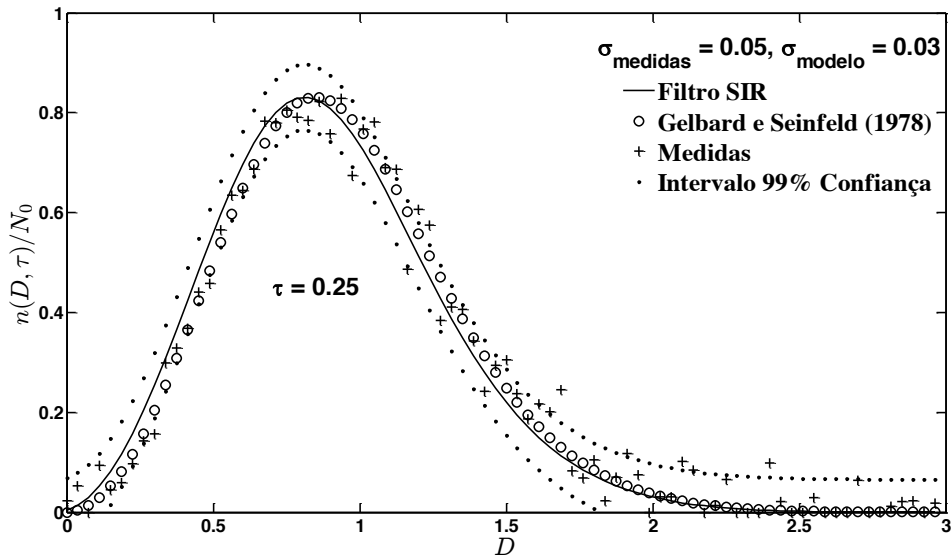


**FIGURA B.3** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

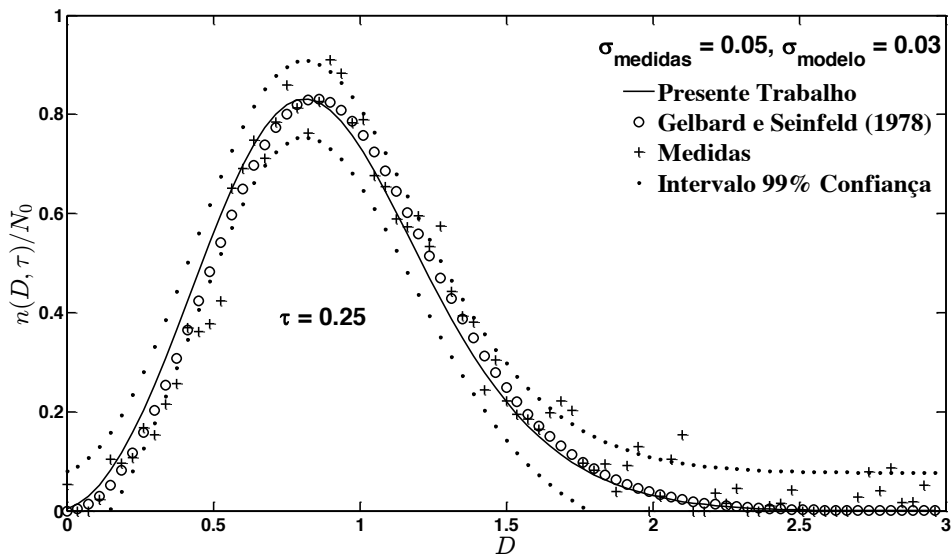


**FIGURA B.4** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras B.5 e B.6, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

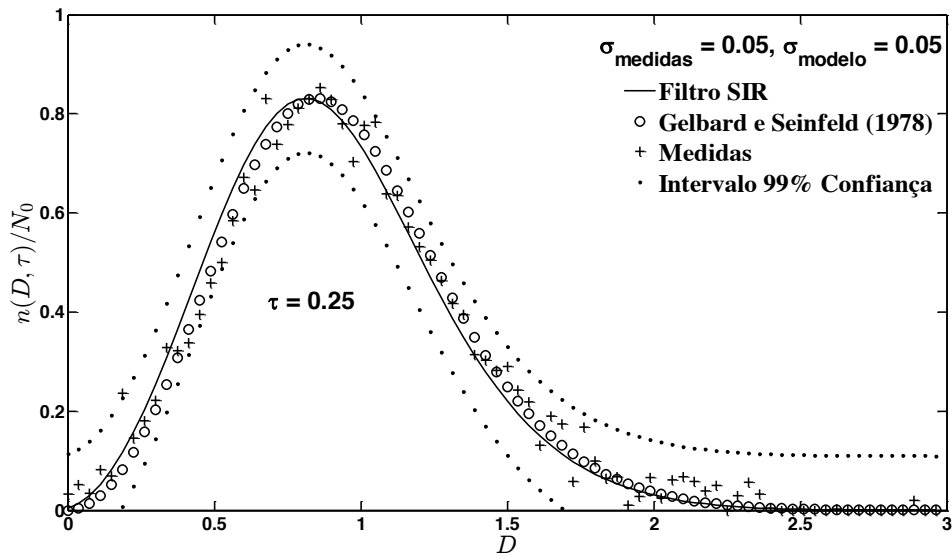


**FIGURA B.5** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

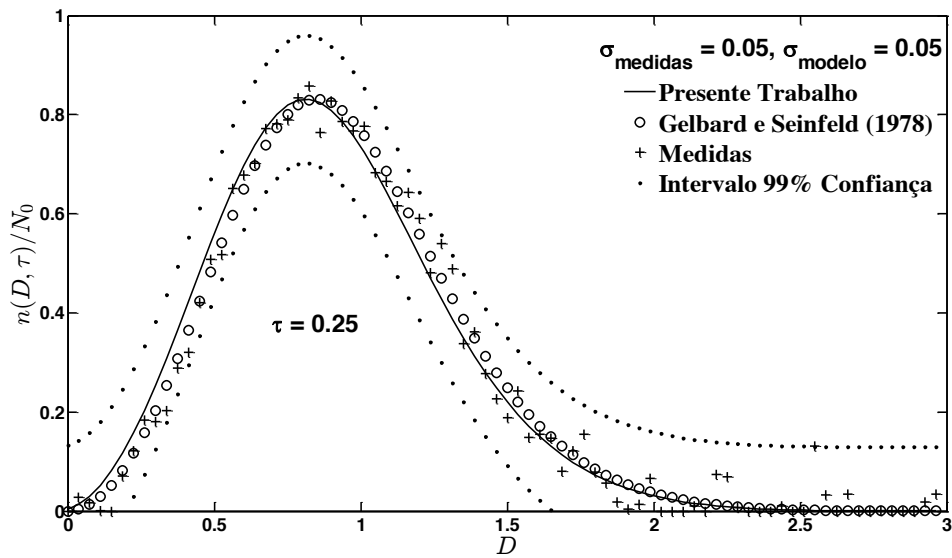


**FIGURA B.6** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras B.7 e B.8, nota-se que as curvas têm comportamentos similares para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA B.7** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



**FIGURA B.8** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

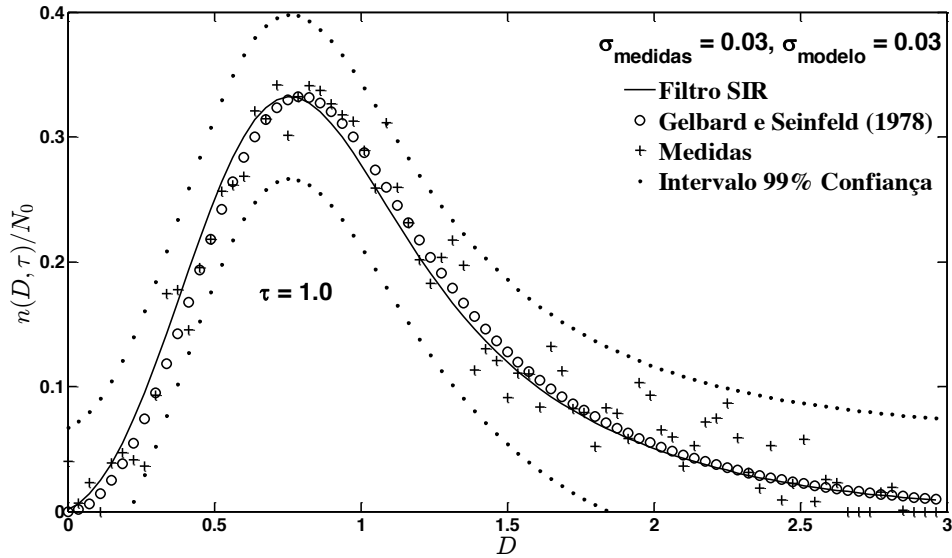
Nas Figuras B.9 a B.16 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$ .

Observa-se na Figura B.10 que as medidas se afastam dos valores medidos para  $\sigma$  pequeno os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%.

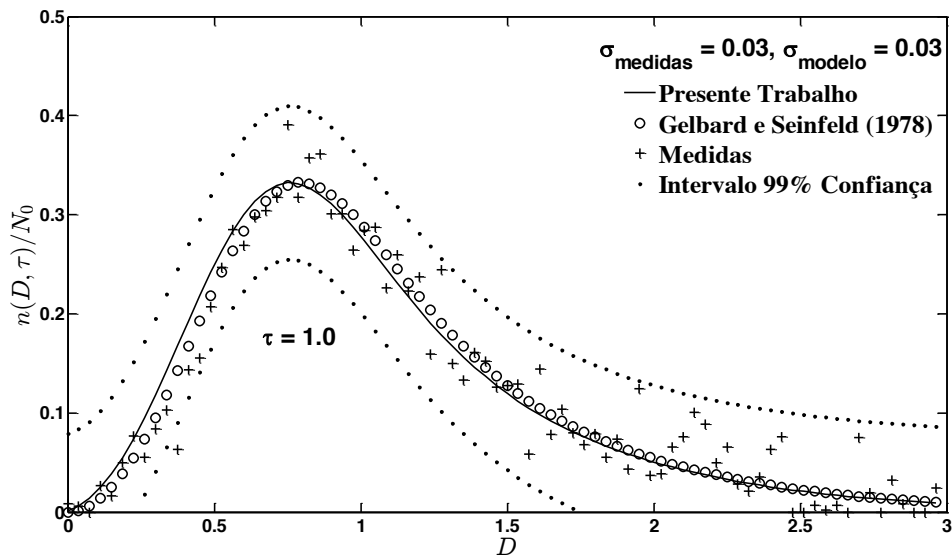
Observa-se na Figura B.12 que as medidas se afastam dos valores medidos para  $\sigma$  do modelo grande os quais estão dentro do intervalo de confiança de 99%.

Nas Figuras B.14 e B.16, observa-se que as medidas abandonam os valores medidos e tentam buscar o modelo. Porém, para pequenos valores da função densidade do tamanho de partículas o aumento do desvio padrão provoca fortes oscilações nas medidas. Observa-se na Figura B.14 que as medidas estão fora do intervalo de confiança de 99% devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas as quais sofrem forte influência para tamanho de partículas maiores. Na Figura B.16 as medidas estão dentro do intervalo de confiança de 99%, porém devido o aumento do desvio padrão para 5% do valor medido da função densidade de tamanho de partículas elas sofrem forte influência para tamanho de partículas maiores.

Comparando as Figuras B.9 e B.10, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

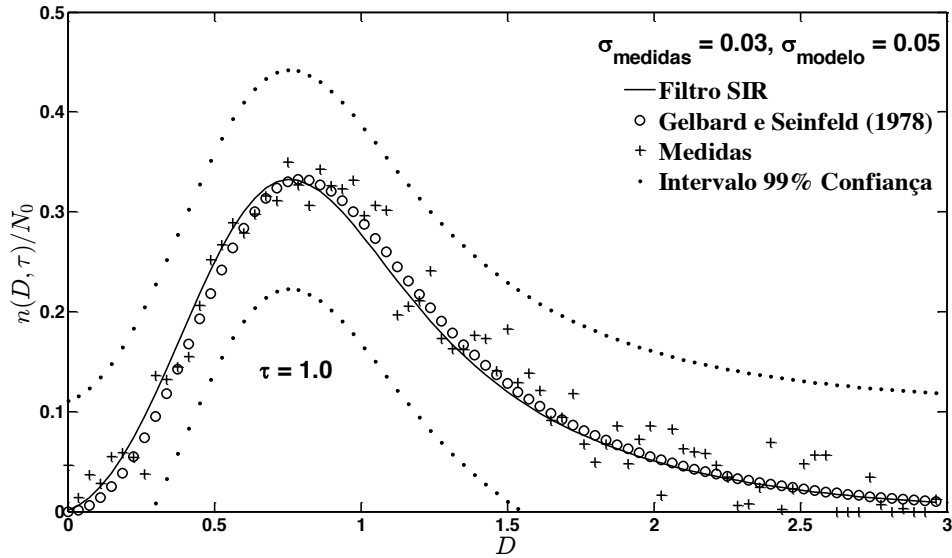


**FIGURA B.9** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 - 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

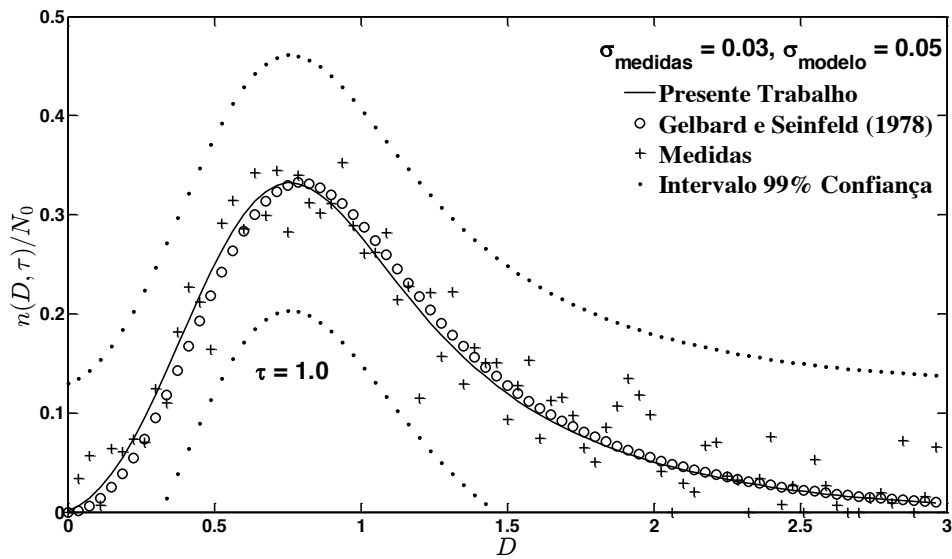


**FIGURA B.10** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 - 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras B.11 e B.12, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

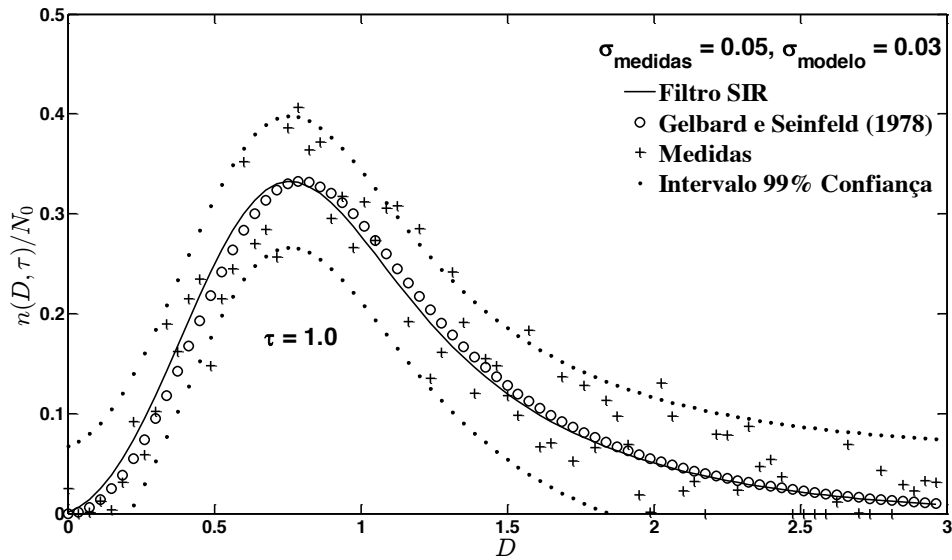


**FIGURA B.11** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

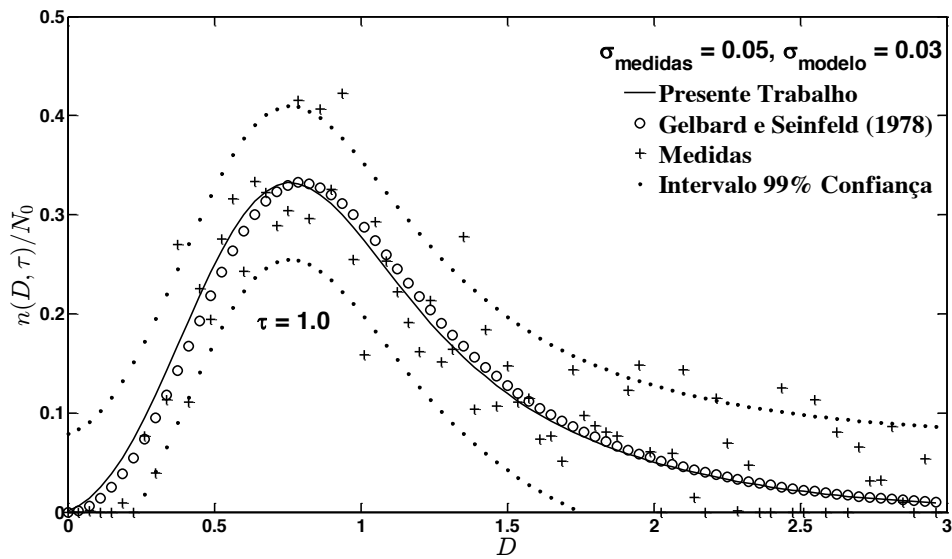


**FIGURA B.12** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras B.13 e B.14, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

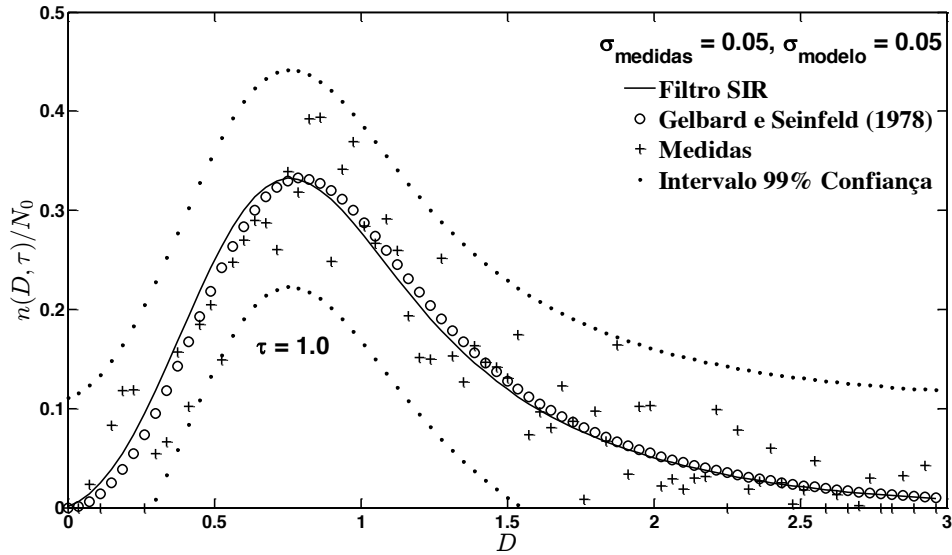


**FIGURA B.13** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

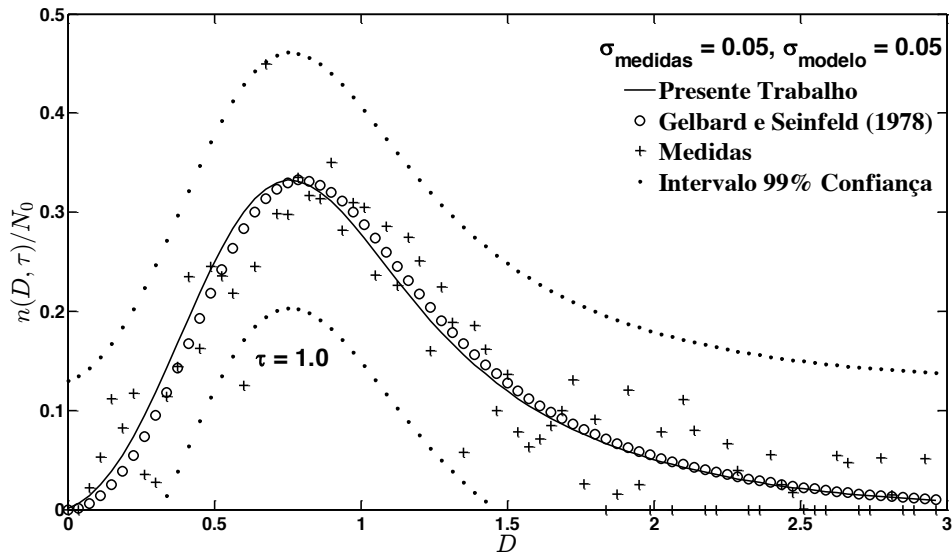


**FIGURA B.14** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras B.15 e B.16, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



**FIGURA B.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA B.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 2 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).



## APÊNDICE C

### CASO-TESTE 3

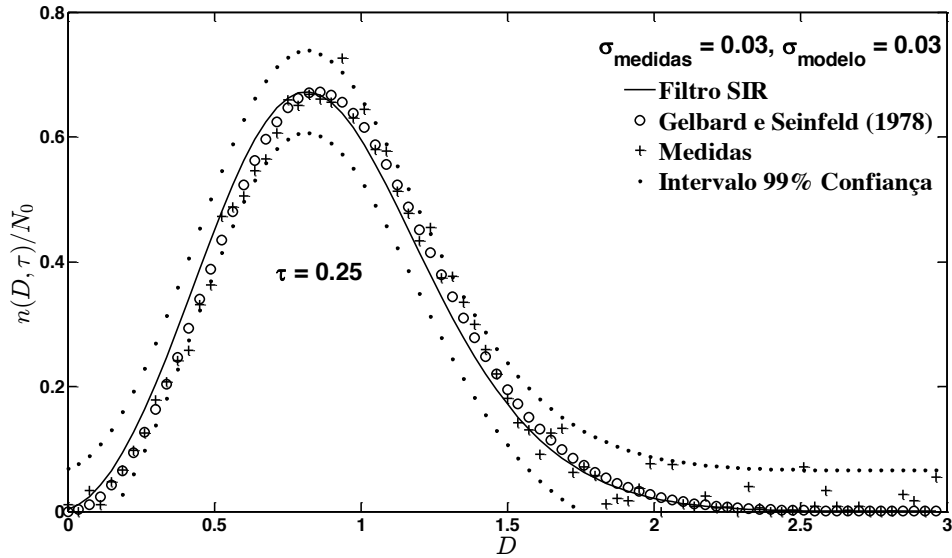
COMPARAÇÕES GRÁFICAS ENTRE OS RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA COM OS OBTIDOS VIA FILTRO DE PARTÍCULAS (SIR E ASIR) PARA  $\tau = 0,25$  e  $\tau = 1,0$

As Figuras C.1 a C.8 mostram as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$ .

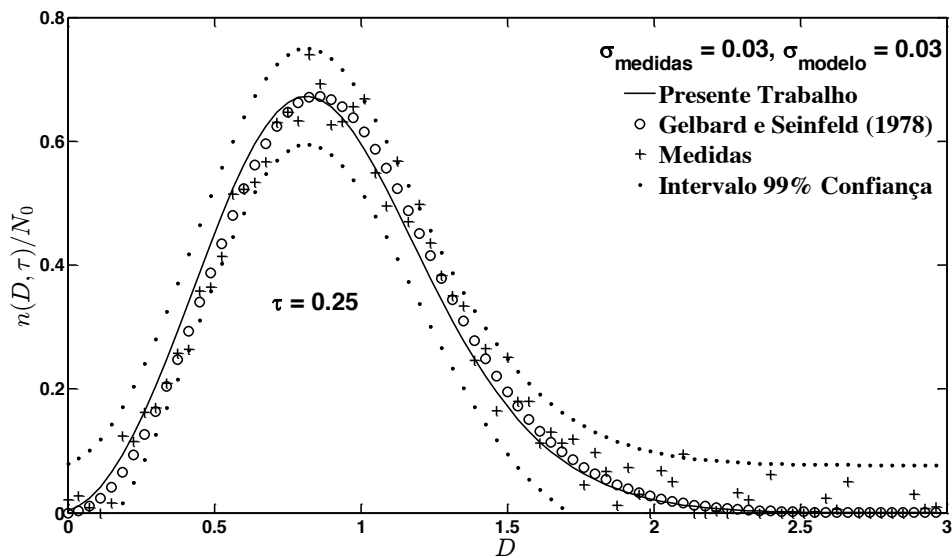
Nas Figuras C.2 e C.4, notam-se as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras B.2 e B.4 com suas respectivas análises.

Nota-se nas Figuras C.6 e C.8 as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras B.6 e B.8 com suas respectivas análises.

Comparando as Figuras C.1 e C.2, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

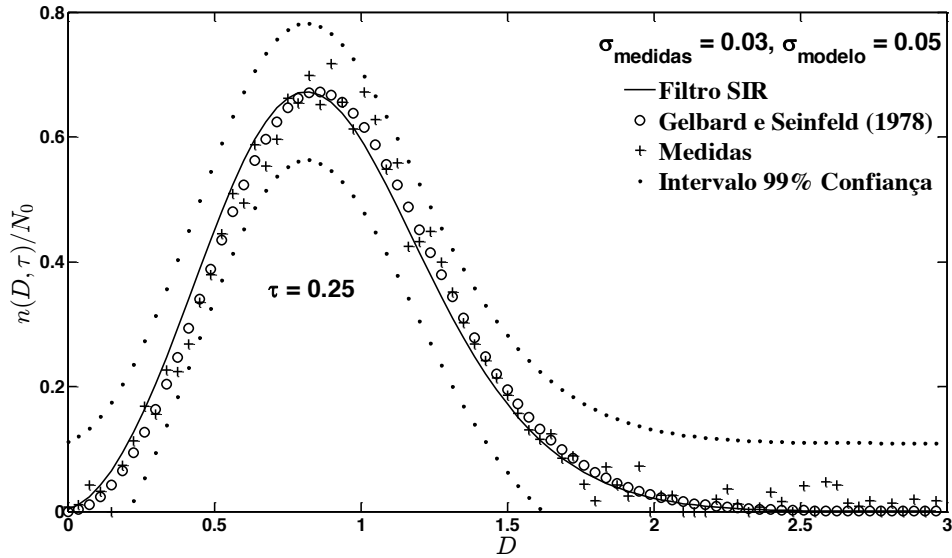


**FIGURA C.1** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

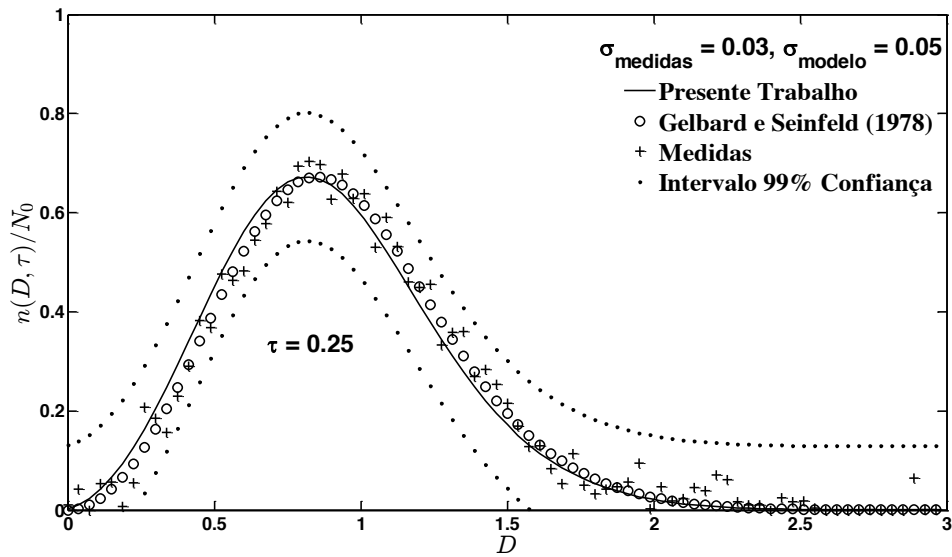


**FIGURA C.2** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras C.3 e C.4, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

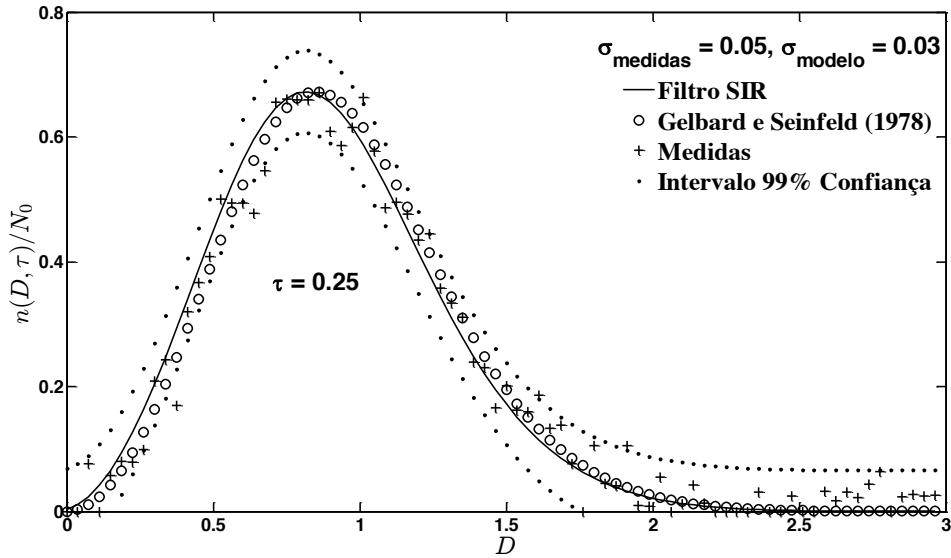


**FIGURA C.3** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

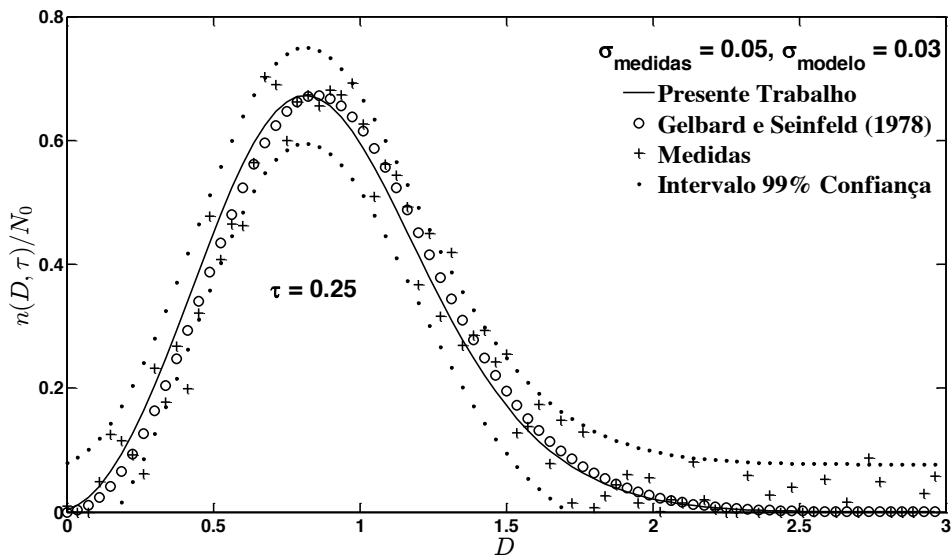


**FIGURA C.4** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras C.5 e C.6, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.

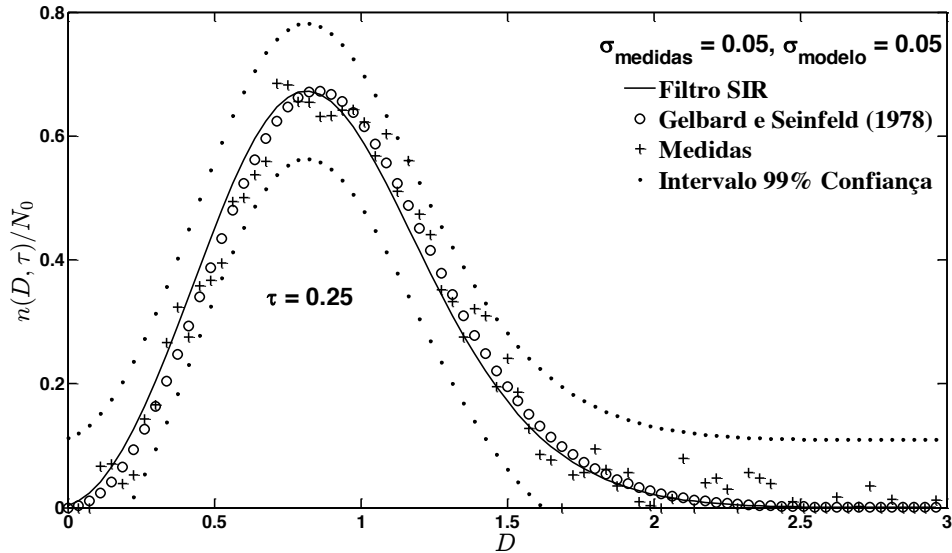


**FIGURA C.5** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).

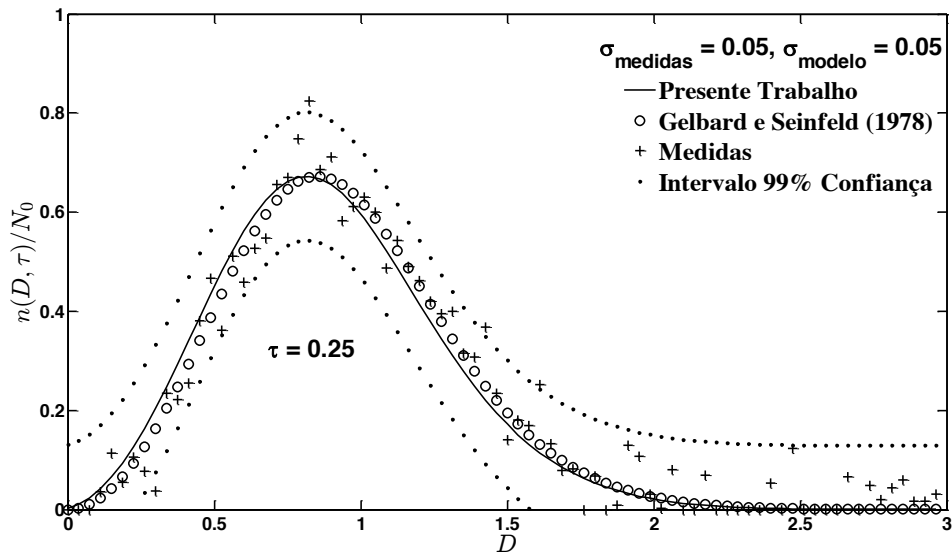


**FIGURA C.6** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Comparando as Figuras C.7 e C.8, observa-se que as curvas têm comportamentos similares com pequenas discrepâncias para os filtros de partículas SIR e ASIR.



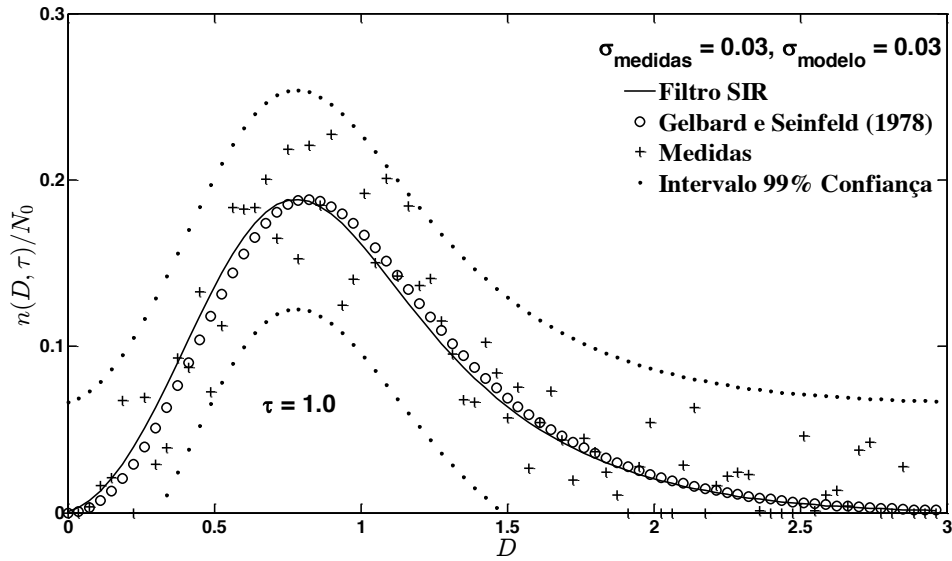
**FIGURA C.7** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



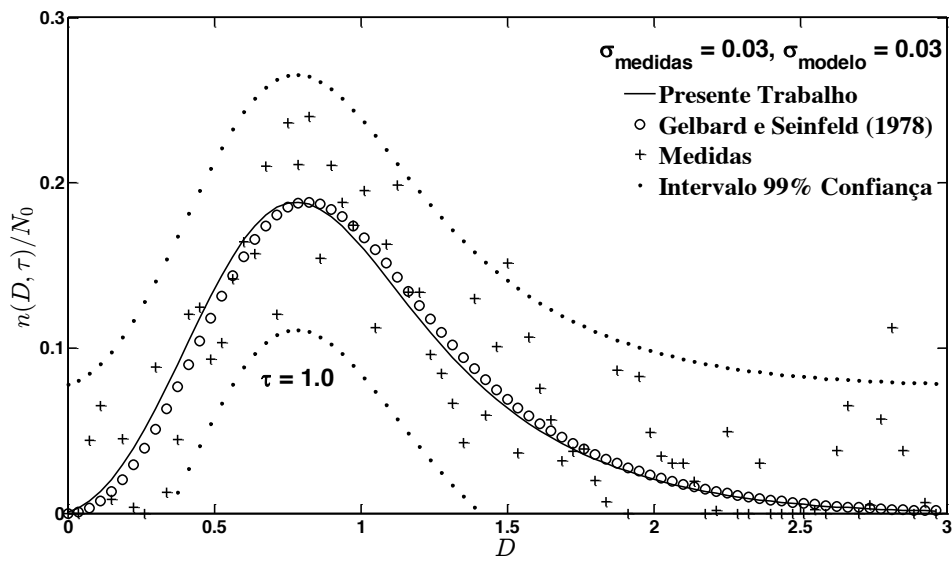
**FIGURA C.8** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Nas Figuras C.9 a C.16 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$ .

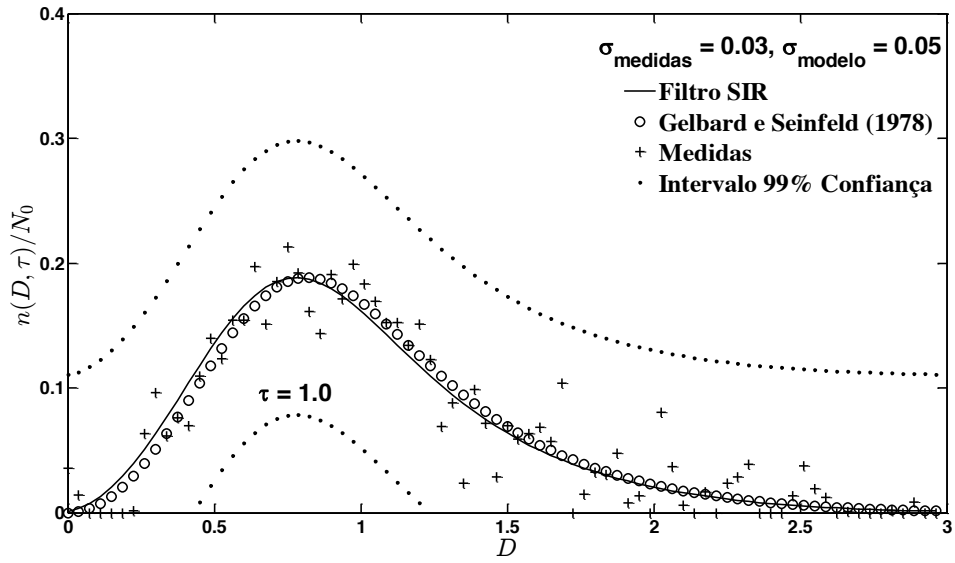
Observa-se que as figuras acima citadas apresentam a mesma concordância das Figuras B.9 a B.16 com suas respectivas análises.



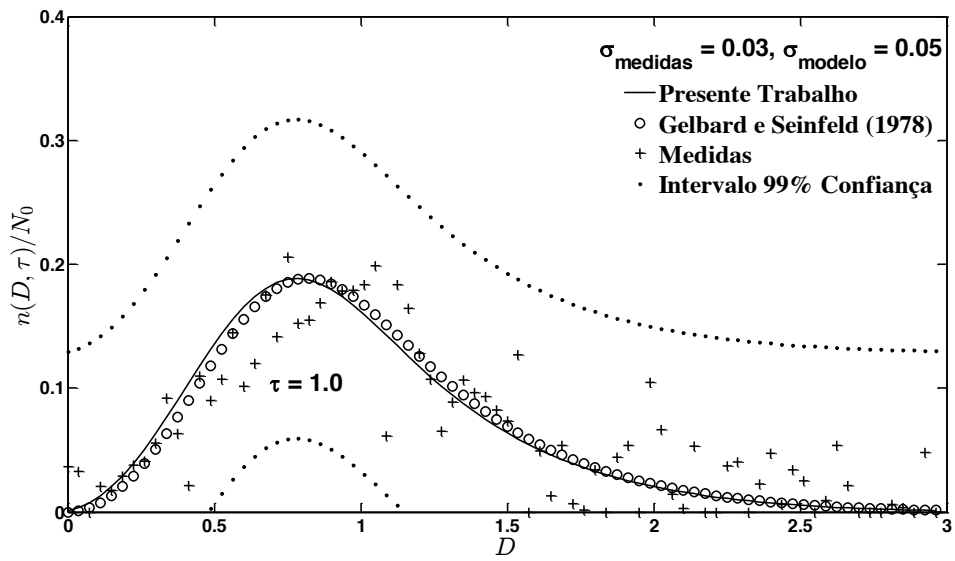
**FIGURA C.9** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



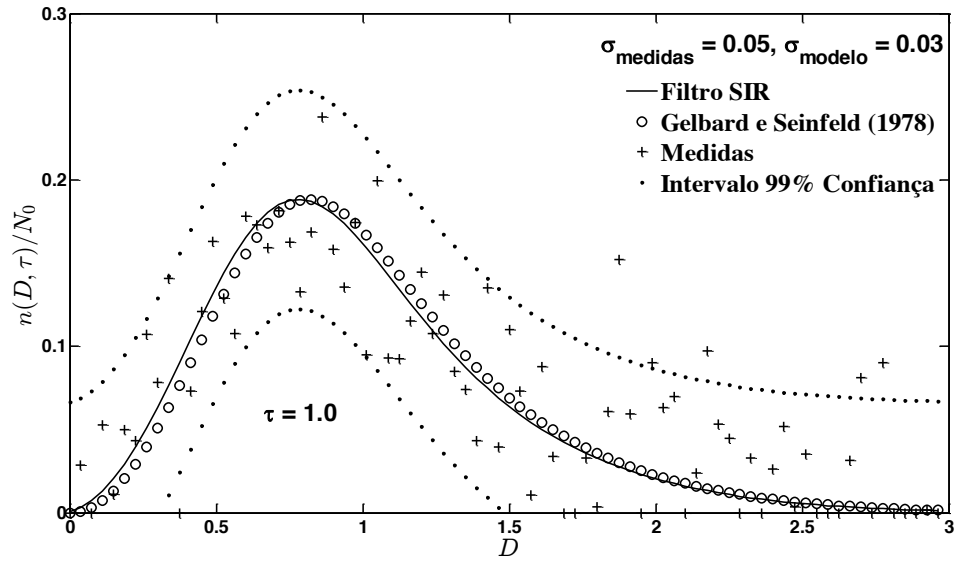
**FIGURA C.10** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).



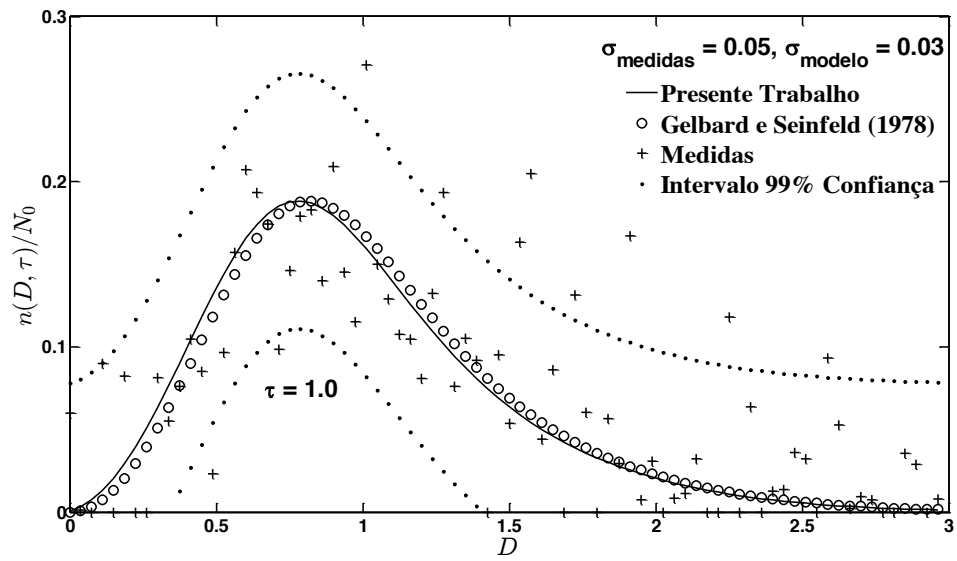
**FIGURA C.11** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA C.12** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

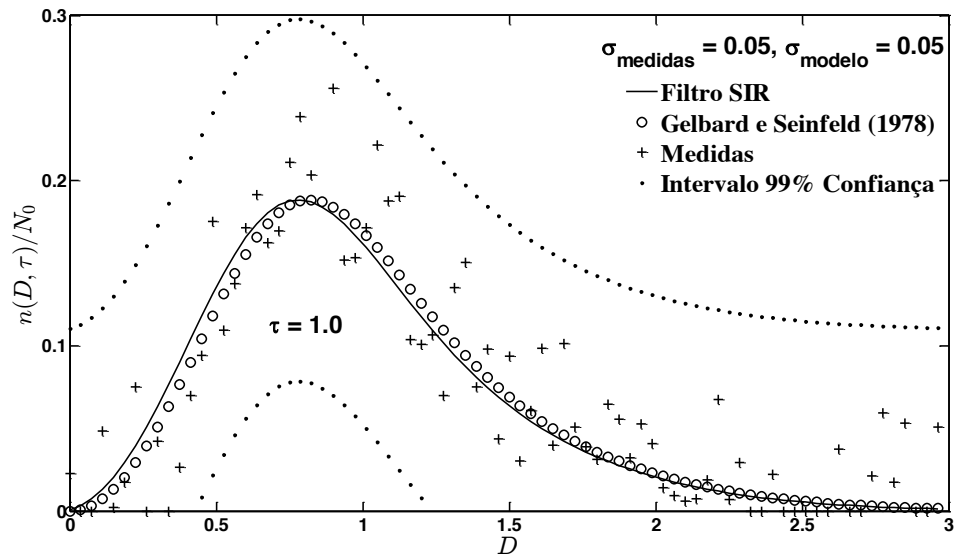


**FIGURA C.13** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

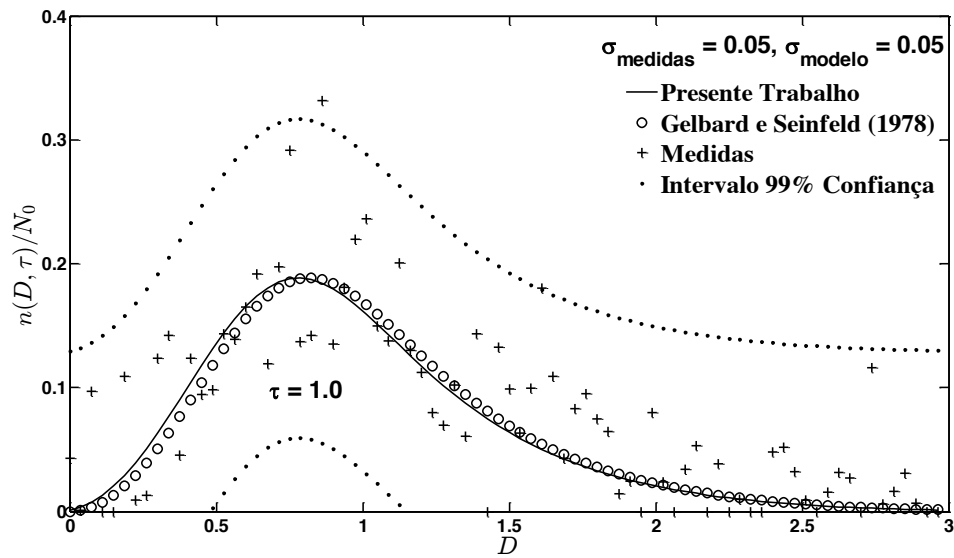


**FIGURA C.14** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).





**FIGURA C.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA C.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,05), para o caso-teste 3 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

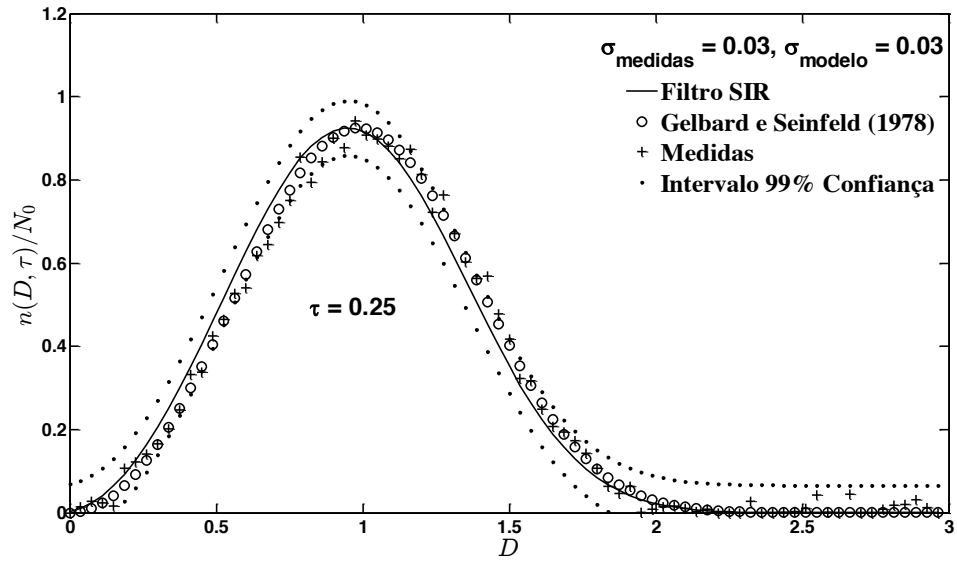
## **APÊNDICE D**

### **CASO-TESTE 4**

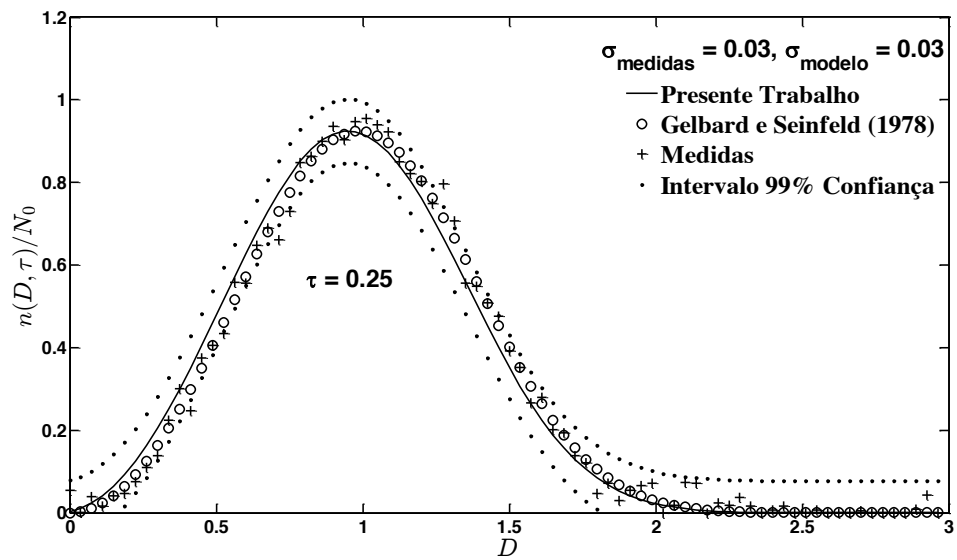
COMPARAÇÕES GRÁFICAS ENTRE OS RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA COM OS OBTIDOS VIA FILTRO DE PARTÍCULAS (SIR E ASIR) PARA  $\tau = 0,25$  e  $\tau = 1,0$

Nas Figuras D.1 a D.8 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 0,25$ .

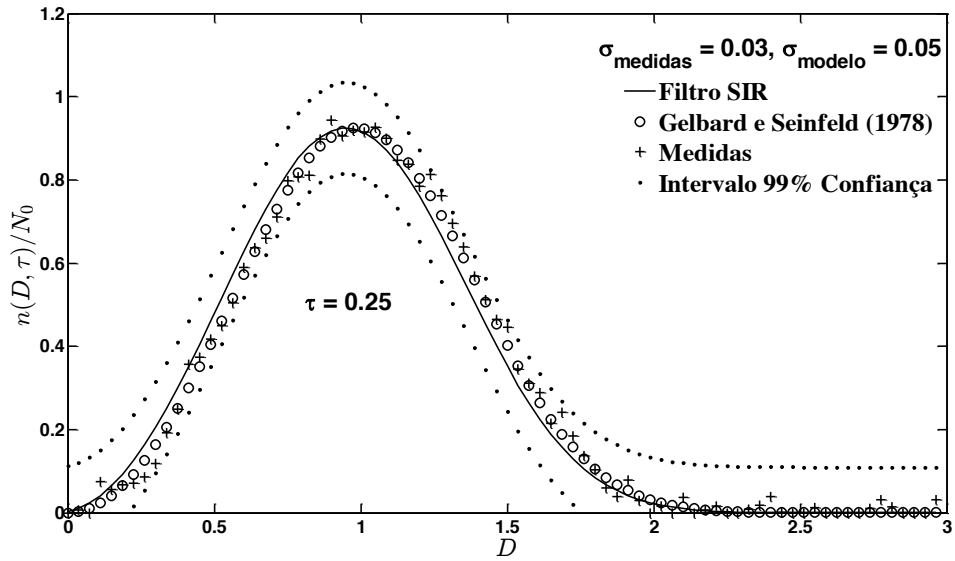
Nas figuras acima citadas, notam-se as mesmas tendências dos resultados apresentados pelas Figuras C.1 a C.8 com suas respectivas análises.



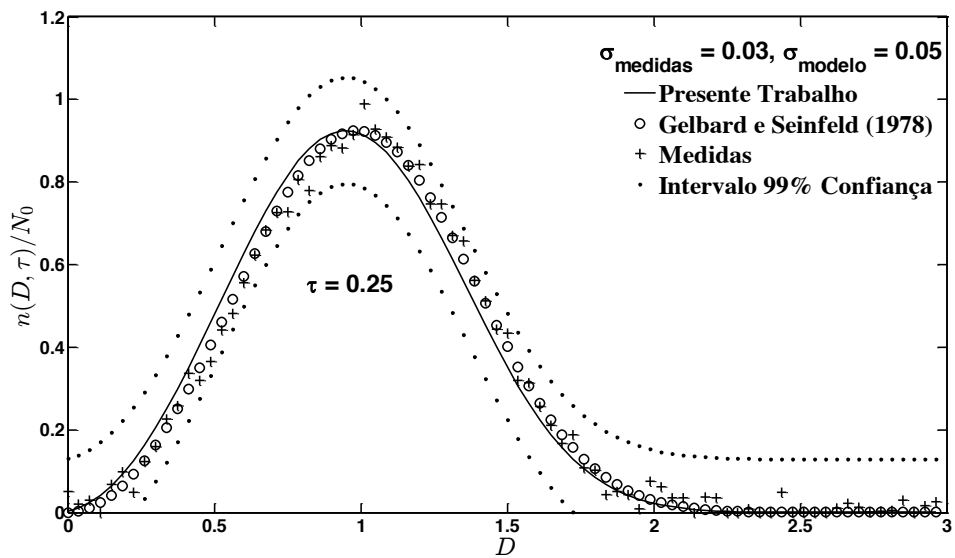
**FIGURA D.1** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



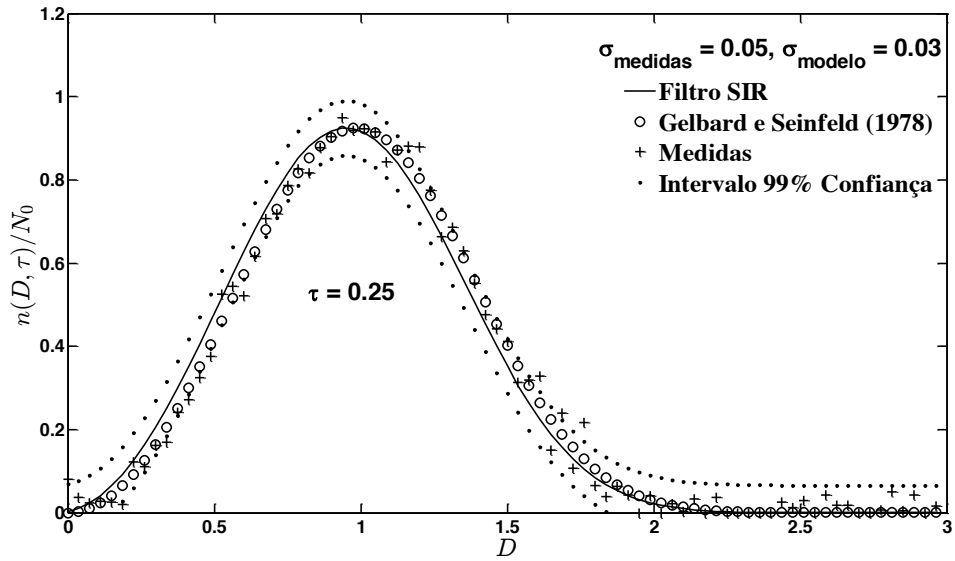
**FIGURA D.2** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).



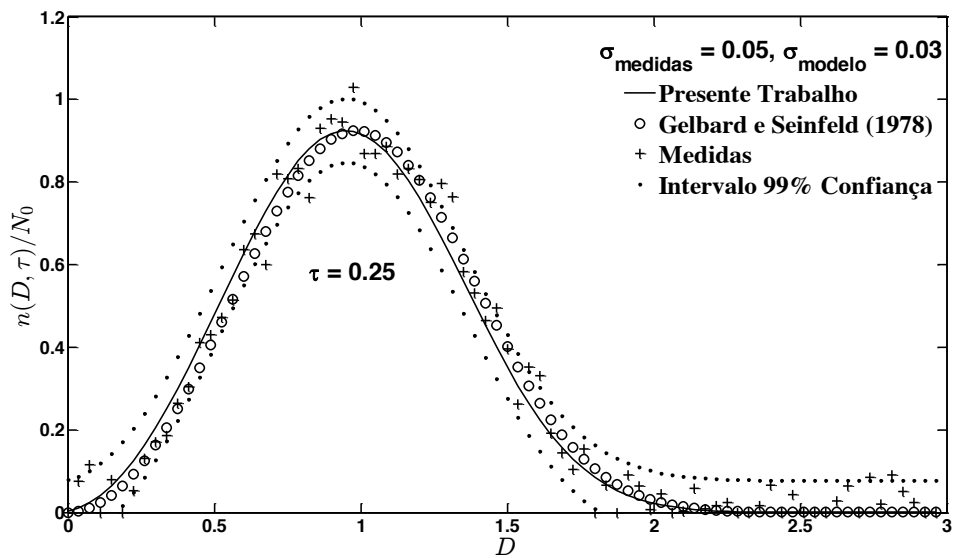
**FIGURA D.3** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



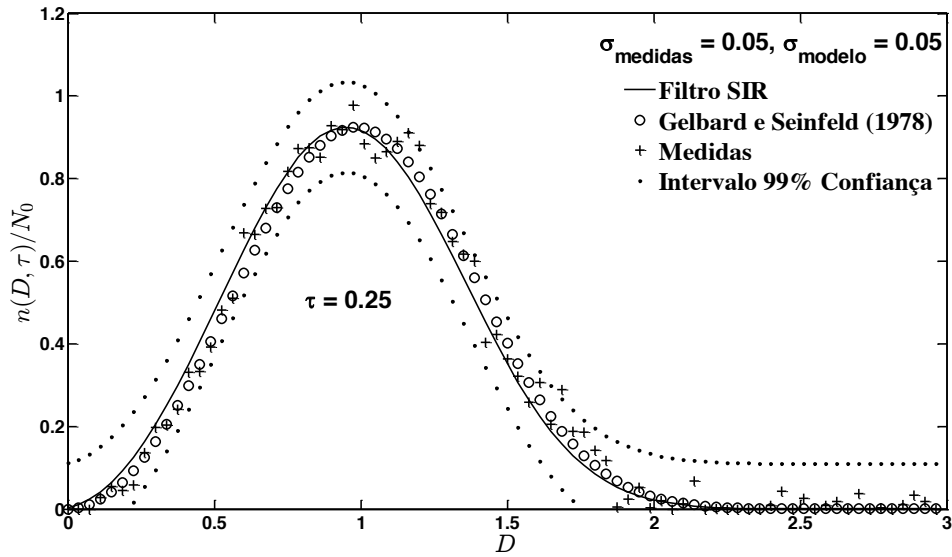
**FIGURA D.4** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).



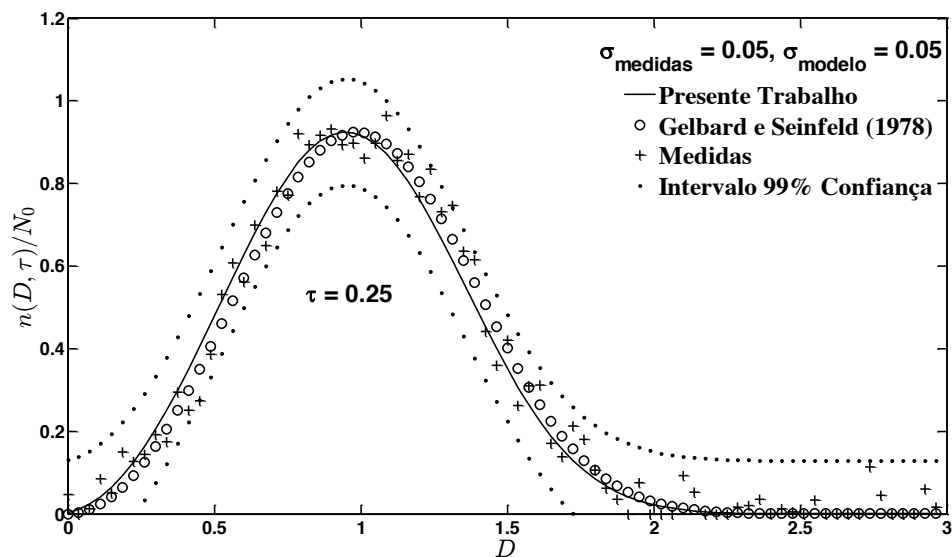
**FIGURA D.5** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



**FIGURA D.6** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).



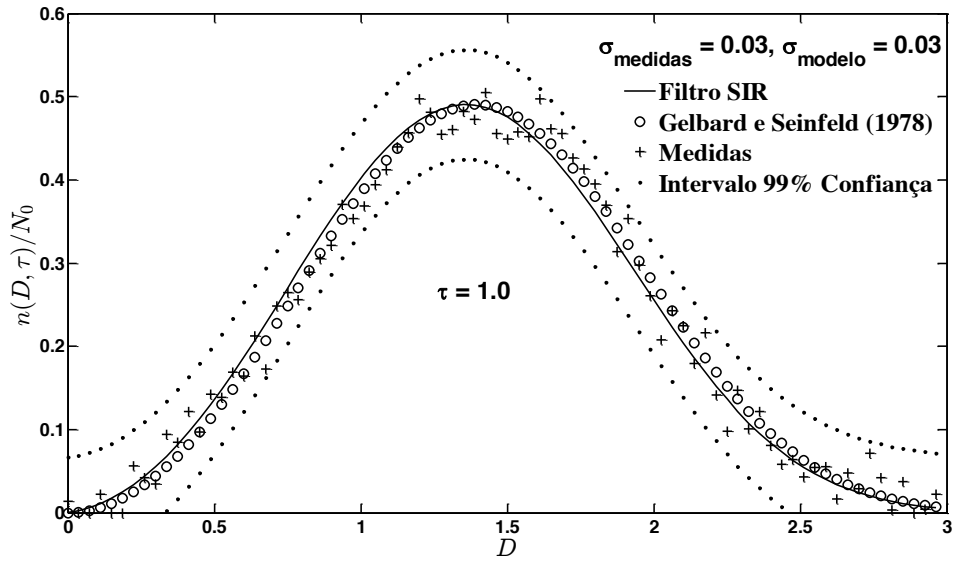
**FIGURA D.7** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro SIR).



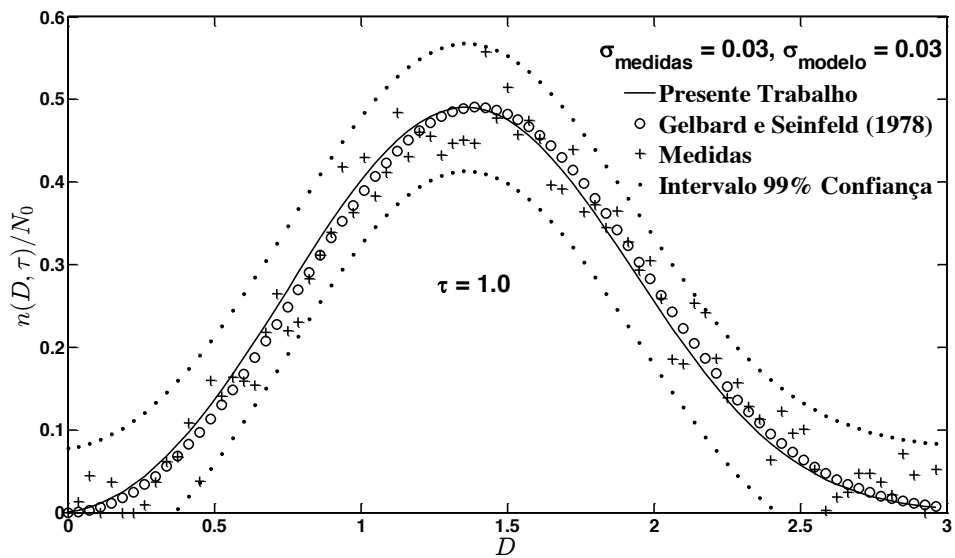
**FIGURA D.8** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 0,25$  (filtro ASIR).

Nas Figuras D.9 a D.16 são mostradas as comparações gráficas entre os resultados da solução analítica com os obtidos via filtro de partículas (SIR e ASIR) para  $\tau = 1,0$ .

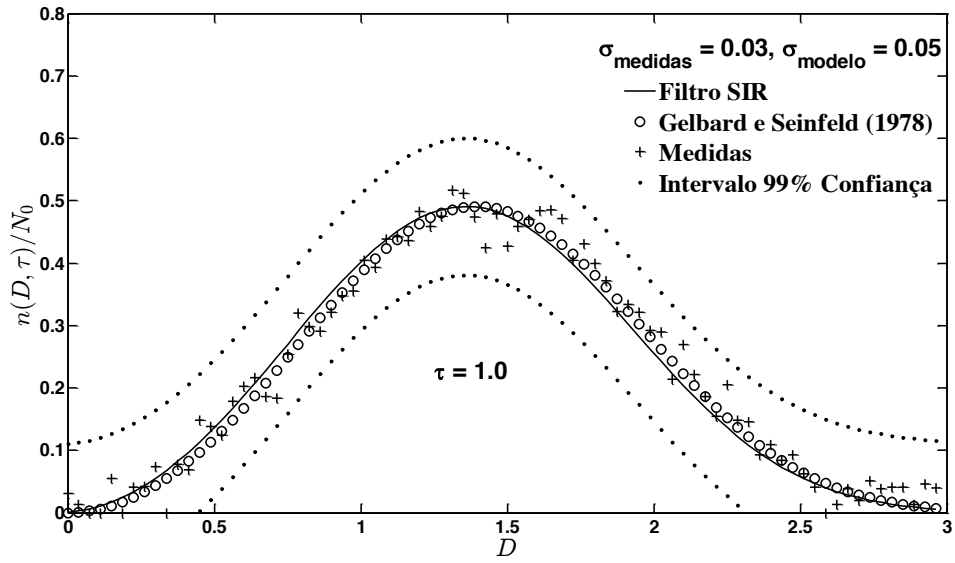
Verifica-se nas figuras acima citadas, a mesma concordância das Figuras B.9 a B.16 com suas respectivas análises.



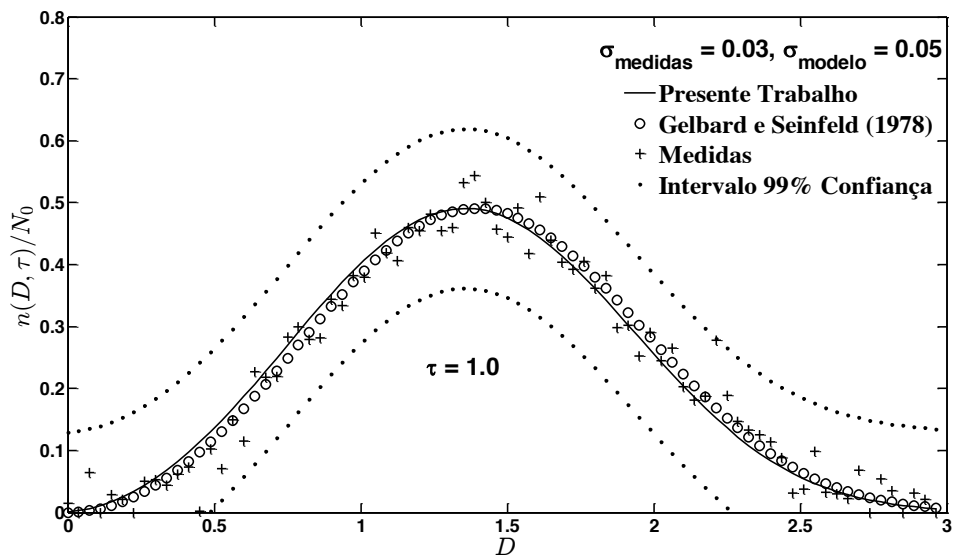
**FIGURA D.9** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA D.10** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

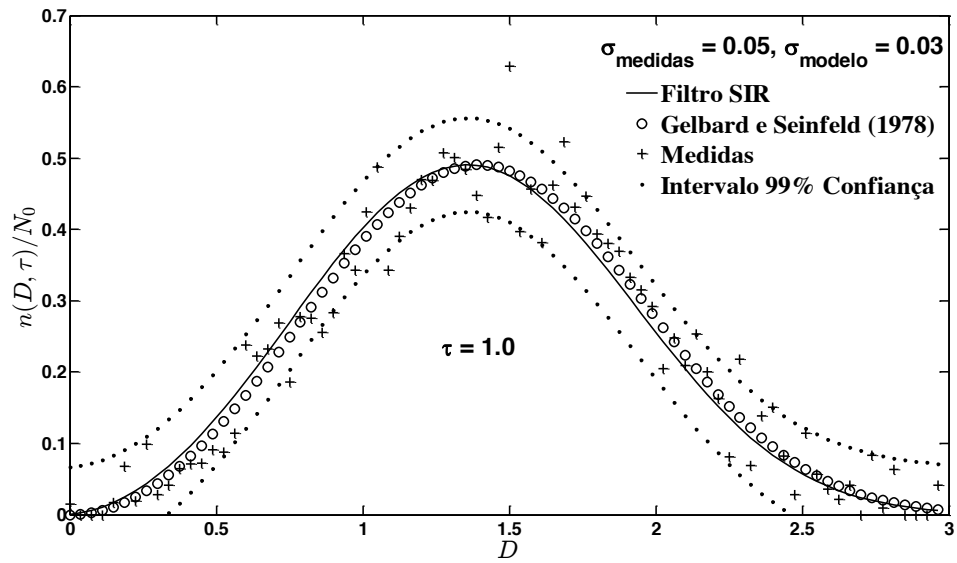


**FIGURA D.11** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).

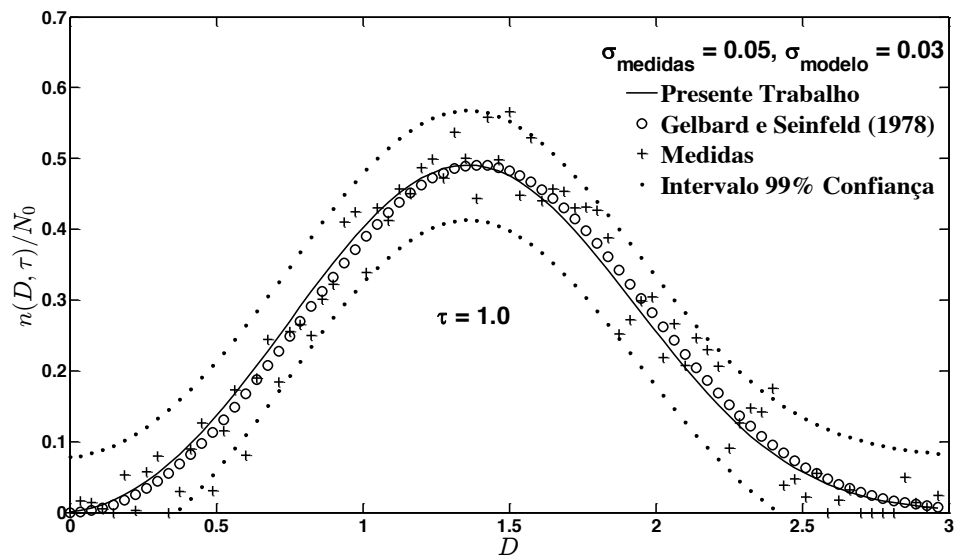


**FIGURA D.12** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,03 – 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).

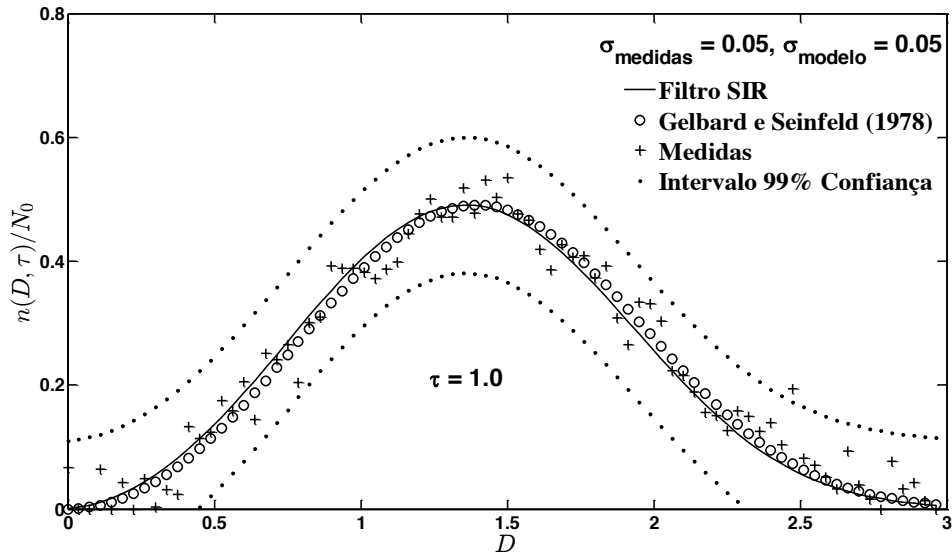




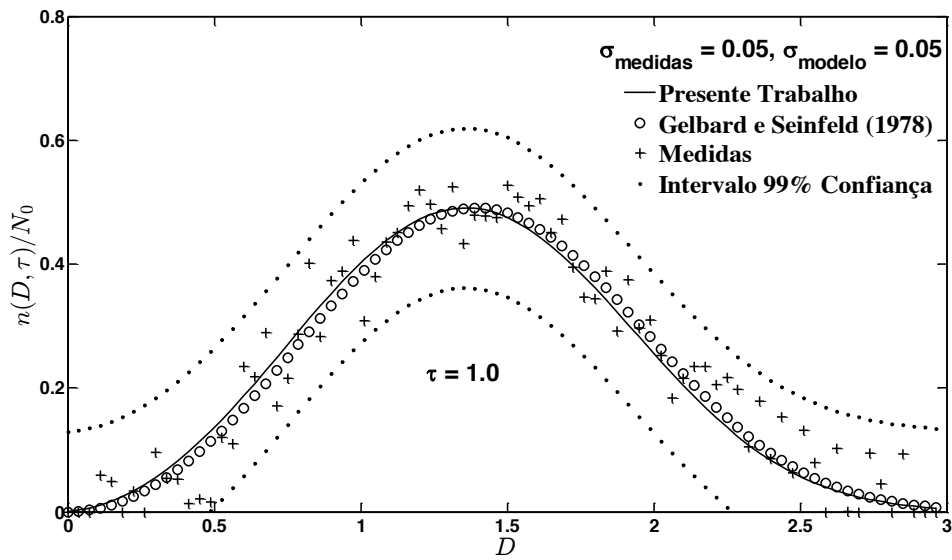
**FIGURA D.13** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA D.14** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 – 0,03), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).



**FIGURA D.15** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro SIR).



**FIGURA D.16** - Comparação das medidas com  $\sigma$  (0,05 - 0,05), para o caso-teste 4 e  $\tau = 1,0$  (filtro ASIR).