

Título de la Tesis: "Estimación de parámetros y discriminación de modelos en cinética química diseño de experiencias"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Gatica, Jorge Edgardo

Director: Dr. José Romagnoli

Resumen

Se presenta una metodología global de diseño de experiencias considerando en su formulación tanto la optimización de los aspectos numéricos involucrados en su implementación como las distintas alternativas prácticas que pueden surgir en el estudio y modelamiento de procesos físico-químicos.

En el área de estimación de parámetros se desarrolla una nueva técnica que combina alguna de las propiedades de dos de los criterios citados con mayor frecuencia en la literatura a la vez que resuelve gran parte de sus inconvenientes.

En cuanto a la discriminación de modelos se formula una nueva metodología en cuyo desarrollo se considera a la incertidumbre asociada a las determinaciones experimentales como un límite para la obtención de información para la discriminación. Esta metodología además cuenta con la posibilidad de tratar sistemas con respuestas múltiples a la vez que no involucra el uso de aspectos sobre los que existen opiniones en conflicto en la literatura.

En lo que respecta a cuantificar la adecuación de un dado modelo, se introduce una nueva metodología que contempla la existencia de incertidumbre asociada a las determinaciones experimentales en el total de la información, y no solo en parte de ella como han considerado la mayoría de los trabajos en este área.

Finalmente, se analiza el caso de un grupo de problemas aparentemente desvinculados entre sí y que de hecho han recibido un tratamiento

Título de la Tesis: "Estimación de parámetros y discriminación de modelos en cinética química diseño de experiencias"

Magister en Ingeniería Química

Autor: Gatica, Jorge Edgardo

Director: Dr. José Romagnoli

individual en la bibliografía. Se los reformula matemáticamente y se observa que pueden ser atacados con las metodologías aquí desarrolladas. Es el caso de detección de errores de modelamiento, diseño de experiencias y ubicación óptima de sensores en sistemas de parámetros distribuidos, etc.

En la presente Tesis se compendia la mayoría de las contribuciones existentes en la literatura. Esto ha posibilitado el desarrollo de eficientes códigos computacionales que incluyen no solo los algoritmos de factura propia sino también aquellas técnicas que han mostrado ser eficientes en ciertas situaciones y/o de aplicación extensa en la bibliografía. Se conformó de esta manera un conjunto de herramientas generales, que pueden resultar de utilidad en el desarrollo de cualquier programa experimental de investigación.