PUC Minas
A B A K Ó S
Instituto de Ciências Exatas e Informática

Licença Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs 3.0 Unported

Filtragem e melhoramento de espectros com filtro de Kalman*

Filtering and improving of spectra with Kalman filter

Gustavo Siqueira Vinhal[1]
Heber Valdo Nogueira[2]
Iara Maia Silva[3]
Arlindo Rodrigues Galvão Filho[4]
Daniel Vitor de Lucena[5]
Anderson da Silva Soares[6]
Telma Woerle de Lima Soares[7]
Clarimar José Coelho[8]

Resumo

Este trabalho apresenta o filtro de Kalman como uma ferramenta para o pré-processamento de sinais espectrofotométricos no contexto da quimiometria. Inicialmente são introduzidos os principais conceitos sobre o filtro de Kalman. O filtro de Kalman é usado com amostras de aço-ligas. O sinal filtrado é usado na calibração multivariada para construir um modelo matemático com boa capacidade preditiva. A eficiência do filtro é demonstrada utilizando um conjunto de dados obtidos por um espectrofotômetro de emissão atômica em plasma com baixa resolução para tratar o problema da determinação simultânea do Manganês (Mn), Molibdênio (Mo), Cromo (Cr), Níquel (Ni) e Ferro (Fe). Os resultados obtidos demonstram que o filtro de Kalman pode ser aplicado com vantagens em relação a outras técnicas tradicionais em quimiometria como filtro de média móvel.

Palavras-chave: Filtro de Kalman. Calibração Multivariada. Processamento de Sinais.

---

*Artigo apresentado à revista Abakós.

[1]Mestrando em Ciência de Computação, Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás, gusvinhal@hotmail.com, Brasil.

[2]Mestrando em Engenharia Eletrônica e Computação, Divisão de Engenharia Eletrônica, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, hebervn@yahoo.com.br, Brasil.

[3]Iniciação Científica, Sistemas de Informação, UniEVANGÉLICA, iaramaiasilva@hotmail.com, Brasil.

[4]Doutorando em Engenharia Eletrônica e Computação, Divisão de Engenharia Eletrônica, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, argfilho@gmail.com, Brasil.

[5]Mestrando em Ciência da Computação, Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás, dvlucena@gmail.com, Brasil.

[6]Professor, Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás, engsoares@gmail.com, Brasil.

[7]Professor, Instituto de Informática, Universidade Federal de Goiás, telma.woerle@gmail.com, Brasil.

[8]Professor, Mestrado Multidisciplinar em Sociedade Tecnologia e Meio Ambiente, UniEVANGÉLICA, clarimar.coelho@docente.unievangelica.edu.br, Brasil.

Abstract

This work presents the Kalman filter as a tool to pre-processing spectrophotometric signals in chemometric context. Initially the main concepts of the Kalman filter are introduced. The Kalman filter is used with steel alloys samples. The filtered signal is used in the multivariate calibration to construct a mathematical model with good predictive ability. The filter efficiency is demonstrated using a data set obtained by an atomic emission plasma with low resolution spectrophotometer to treat the problem of simultaneous determination of Manganese (Mn), Molybdenum (Mo), Chromium (Cr), Nickel (Ni) and Iron (Fe). The results show that the Kalman filter can be applied with advantages over other traditional techniques shown in chemometrics as a moving average filter.

Keywords: Kalman filter. Multivariate Calibration. Signal Processing.

1 INTRODUÇÃO

A quimiometria é uma área da química analítica que procura criar modelos matemáticos e estatísticos com o objetivo de extrair a maior quantidade possível de informação dos dados obtidos a partir dos métodos instrumentais (BERETON, 2003; JOHNSON; WICHERN, 2002; BEEBE; PELL; SEASHOLTZ, 1998). O acoplamento de instrumentos relacionados à análise química a computadores modernos permite obter uma grande quantidade de dados de natureza complexa (FERREIRA et al., 1999; PIMENTEL et al., 1997; WOLD; SJöSTRöM, 1998). Os dados obtidos através desses métodos podem ser, por exemplo, a absorbância de radiação luminosa extraída de uma amostra através de um espectrofotômetro (SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 1998).

Em geral, ruídos são inerentes ao processo de obtenção desses dados (CERQUEIRA et al., 2000). Porém, a presença de ruído dificulta a interpretação dos dados e compromete a construção de um modelo matemático capaz de predizer as propriedades de interesse em uma dada amostra (MARTENS; NAES, 1989). O processo de obtenção de um modelo matemático para a análise dos dados é chamado de calibração multivariada (BERETON, 2000; VILLOSLADA, 1997).

A presença de ruídos pode ser minimizada se é feito o pré-processamento dos dados coletados. Existem vários tipos de filtros que podem ser utilizados com essa finalidade, em especial o filtro de Kalman (CHAU et al., 2004; KAY, 1998; WILLIAMS; MADISETTI, 1997; OTTO, 2005; VANDEGINSTE et al., 1998). O filtro de Kalman apareceu em 1960, quando Rudolf Emil Kalman publicou um importante artigo descrevendo a solução recursiva para problemas lineares relacionados à filtragem de dados discretos (KALMAN et al., 1960). Atualmente, devido ao constante uso de computadores, o filtro de Kalman é muito utilizado em várias aplicações como navegação aeroespacial, robótica, filtragem de sinais, entre outros (WELCH; BISHOP, 1995; SILVA; PEREIRA, São José dos Campos; FARIA; SOUZA, 2004; LIBONATI; TRIGO; CAMARA, 2004; MEINHOLD; SINGPURWALLA, 1983; PIZZINGA, 2008).

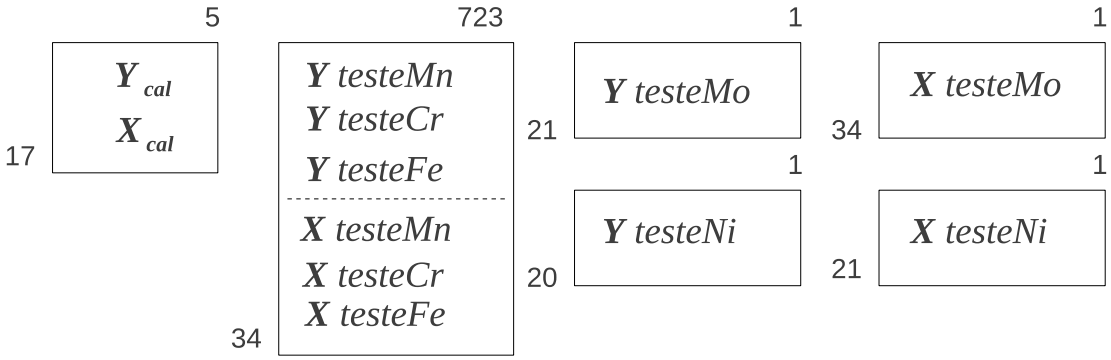
O objetivo deste trabalho é utilizar o filtro de Kalman no pré-processamento de sinais quimiométricos com a finalidade de suavizar ruídos para a construção de modelos de calibração multivariada com a regressão linear múltipla visando obter melhor capacidade preditiva. É feito um modelo de calibração para o sinal não filtrado e outro modelo para o sinal filtrado com filtro de Kalman. Apresenta-se uma dedução intuitiva do custo computacional do filtro de Kalman a partir das Equações que implementam o filtro.

2 MATERIAIS E MÉTODO DE CALIBRAÇÃO MULTIVARIADA

Os dados utilizados neste trabalho são obtidos de uma amostra de aço-ligas através de um espectrofotômetro de emissão atômica em plasma com acoplamento indutivo sequencial convertido para um sistema de múltiplos canais de detecção baseado em um arranjo linear de 1024 fotodiodos. O aparelho instrumental faz uso das propriedades deabsorção e emissão de

plasma, conforme descrito por Pimentel et al. (1997).

Figura 1 – Conjunto de dados de calibração e teste.



A Figura 1 mostra a organização dos dados de aço-ligas na forma de matriz. O número inferior representa a quantidade de linhas e o número superior representa a quantidade de colunas da matriz. O índice ($_{cal}$) na formação do nome da matriz identifica matriz para os dados de calibração. As matrizes cujo nome inclui a palavra *teste* correspondem a dados de teste no processo de calibração do modelo. A linha da matriz corresponde às observações para os analitos presentes na amostra de aço-ligas. A coluna da matriz corresponde à absorbância do elemento químico para um dado comprimento de onda.

Espectros obtidos por fontes de plasma são bastante complexos e constituem em centenas ou até milhares de frequências (comprimentos de onda), o que melhora a análise qualitativa. Porém, dificultam a análise quantitativa uma vez que é gerada uma grande quantidade de variáveis por amostras, o que motiva o emprego de calibração multivariada (MARTENS; NAES, 1989; SKOOG; HOLLER; NIEMAN, 1998).

A forma de avaliar o desempenho da predição com o sinal filtrado com filtro de Kalman é o cálculo da raiz quadrada do erro médio de predição (*Root-Mean-Square Error of Prediction*, RMSEP).

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \tag{1}$$

onde, $\hat{y}_i$ é a i-ésima concentração predita pelo modelo de regressão.

O modelo de calibração multivariada usado para testar a qualidade da filtragem com o filtro de Kalman é elaborado com a Regressão Linear Múltipla (*Multiple Linear Regression, MLR*) (CHATTERJEE; HADI; PRICE, 2000; DRAPER; SMITH; POWNELL, 1999; JOHNSON; WICHERN, 2002; KLEINBAUM; KUPPER; MULLER, 1998; NUNES, 2008).

Inicialmente é calculado o RMSEP usando um sinal não filtrado com o filtro de Kalman e depois é calculado um novo RMSEP após a filtragem com o filtro de Kalman. Vale ressaltar que os dados de aço-ligas são pré-processados com outras técnicas, conforme descrito por Pimentel

et al. (1997). Mesmo assim, o filtro de Kalman é capaz de melhorar a capacidade preditiva da MLR.

A eficiência do filtro de Kalman é demonstrada utilizando um conjunto de sinais e/ou espectros obtidos por um espectrofotômetro de emissão em plasma de baixa resolução para tratar um problema de calibração multivariada na determinação simultânea do Manganês (Mn), Molibdênio (Mo), Cromo (Cr), Níquel (Ni) e Ferro (Fe) em amostras de aço-ligas. O filtro de Kalman é implementado utilizando o Matlab r2010a.

3 FILTRO DE KALMAN

O filtro de Kalman é um conjunto de equações matemáticas que oferece uma eficiente solução computacional para estimar os estados de um sistema linear dinâmico perturbado por ruído gaussiano branco. O filtro age de forma a minimizar o erro médio quadrado, que é a diferença entre o estado predito e o atual. Dado um valor inicial, o filtro prediz o próximo estado e, baseado na leitura do estado, atualiza a predição e minimiza o erro em cada atualização (WELCH; BISHOP, 1995; CHAU et al., 2004; MEINHOLD; SINGPURWALLA, 1983; VILLOSLADA, 1997).

A característica recursiva do filtro proporciona uma solução computacionalmente aceitável, uma vez que a computação ocorre à medida que os dados vão sendo processados. O filtro apóia-se no fato de que o ruído é normalmente distribuído. Mesmo que essa hipótese não se confirme, o filtro continua sendo um estimador ótimo (CHAU et al., 2004; WENTZELL; VANSLYKE, 1992).

O filtro de Kalman é baseado em um modelo dinâmico de sistema que representa como seus parâmetros, representados por um vetor de estados, variam à medida que o filtro é processado (VILLOSLADA, 1997). O modelo é representado por

$$\mathbf{x}(k) = \mathbf{F}(k,\, k\text{-}1)\mathbf{x}(k-1) + \mathbf{w}(k) \tag{2}$$

onde $\mathbf{x}(k)$ representa o vetor de estados, $\mathbf{F}(k,\, k\text{-}1)$ é uma matriz de transição de estados que mostra como o processo transita do estado $k-1$ para o estado k, $\mathbf{w}(k)$ é um ruído do sistema e k representa a iteração do processo ao longo do tempo (KALMAN et al., 1960).

No caso da análise multicomponente que é feita aqui, a matriz de transição de estados é definida como uma matriz identidade. Isso é devido ao fato da concentração dos analitos não variar no tempo (CHAU et al., 2004). Além do modelo dinâmico do sistema, o filtro tem como base a observação (medida) do sistema que relaciona os sinais analíticos com o vetor de estado e é descrita por

$$\mathbf{y}(k) = \mathbf{h}'(k)\mathbf{x}(k\text{-}1) + \mathbf{e}(k) \tag{3}$$

onde $\mathbf{y}(k)$ representa o vetor de medição dos sinais analíticos (absorbância), $\mathbf{h}(k)$ é a função de medição que relaciona o vetor de estados com o sinal analítico e $\mathbf{e}(k)$ é o ruído de medição.

Tanto $\mathbf{w}(k)$ quanto $\mathbf{e}(k)$ são normalmente distribuídos com média zero e covariância $\mathbf{Q}$ e $\mathbf{R}$, respectivamente.

$$p(w) \approx N(0, \mathbf{Q}) \tag{4}$$

$$p(e) \approx N(0, \mathbf{R}). \tag{5}$$

Devido ao fato da concentração dos analitos não variar no tempo a covariância do ruído do sistema é considerado como nulo, ou seja, $\mathbf{Q} = 0$.

O filtro de Kalman funciona em duas etapas: predição e atualização. Na fase de predição o estado atual é estimado com base na leitura realizada do estado anterior. Na fase de atualização o estado predito é atualizado com base na leitura do estado em tempo real. Para ajustar a diferença entre o vetor de estado predito e do atualizado é utilizado o ganho de Kalman descrito por

$$\mathbf{g}(k) = \mathbf{P}(k\text{-}1)\mathbf{h}(k)[\mathbf{h}'(k)\mathbf{P}(k\text{-}1)\mathbf{h}(k) + \mathbf{r}(k)]^{-1} \tag{6}$$

onde $\mathbf{P}(k)$ é a matriz de covariância do sistema e $\mathbf{r}(k)$ é a variância do ruído de medição ($\mathbf{e}(k)$).

A situação ideal é quando o ganho de Kalman converge a zero à medida que o vetor de estados vai se estabilizando. Entretanto, na prática, o ganho de Kalman converge a um intervalo próximo de zero e é determinado pelo ruído do sistema (VILLOSLADA, 1997). A matriz de covariância do sistema pode ser obtida como

$$\mathbf{P}(k) = [\mathbf{I} - \mathbf{g}(k\text{-}1)\mathbf{h}'(k)]\mathbf{P}(k\text{-}1)[\mathbf{I} - \mathbf{g}(k\text{-}1)\mathbf{h}'(k)] + \mathbf{g}(k\text{-}1)\mathbf{r}(k)\mathbf{g}'(k\text{-}1) \tag{7}$$

onde $\mathbf{I}$ representa a matriz identidade.

Depois de encontrado o ganho de Kalman e atualizada a matriz de covariância através das Equações (6) e (7), respectivamente, é feita a atualização do vetor de estados por

$$\mathbf{x}(k) = \mathbf{x}(k\text{-}1) + \mathbf{g}(k)[\mathbf{y}(k) - \mathbf{h}'(k)\mathbf{x}(k\text{-}1)]. \tag{8}$$

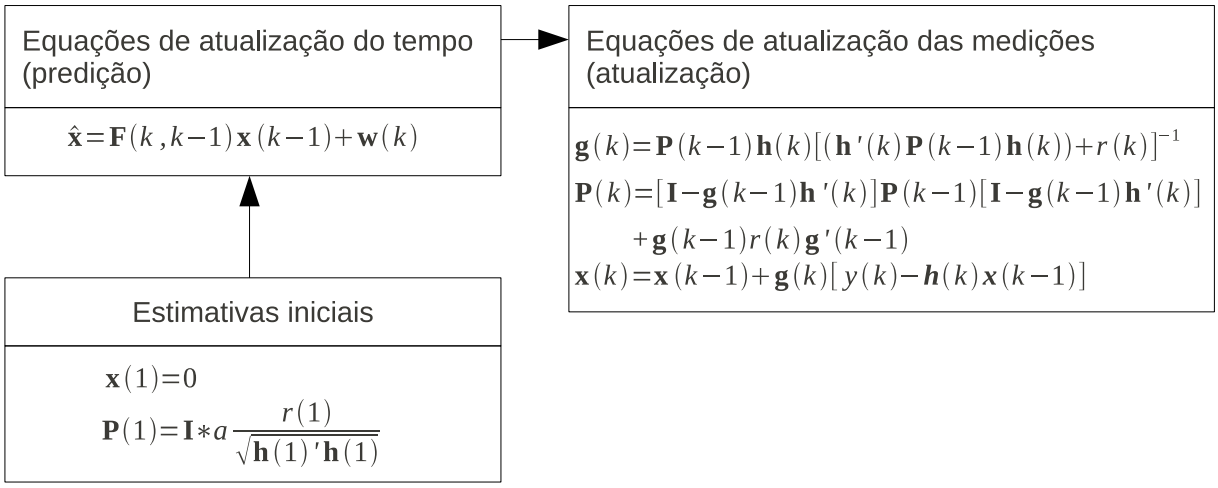
Um ponto crucial no filtro de Kalman é a estimativa dos valores iniciais do vetor de estados e da matriz de covariância do sistema (CHAU et al., 2004), uma vez que no começo do processo não existem valores anteriores ao inicial no sinal. Para o vetor deestados é atribuído o valor inicial igual a zero, $\mathbf{x}(0) = 0$ e para a matriz de covariância o valor inicial pode ser calculado por

$$\mathbf{P}(0) = \mathbf{I} * a\frac{\mathbf{r}(1)}{\sqrt{\mathbf{h}'(1)\mathbf{h}(1)}} \tag{9}$$

onde o fator a varia entre 0,01 até 1. Neste trabalho, o valor do fator a é verificado experimentalmente.

A Figura 2 mostra o processo que inicia no quadro *Estimativas iniciais* onde são esti-

Figura 2 – Esquema de funcionamento do filtro de Kalman.



mados os valores iniciais para o vetor de estados, $\mathbf{x}$, e para a matriz de covariância, $\mathbf{P}$. Uma vez definidos os valores iniciais é feita predição do vetor de estados representado pelo quadro *Equações de atualização do tempo (predição)*. Depois da predição do vetor de estados o ganho de Kalman é calculado e ele é usado para atualizar a matriz de covariância e o vetor de estados (quadro *Equações de atualização das medições*). O processo se repete para uma nova predição do vetor de estados.

4 RESULTADOS

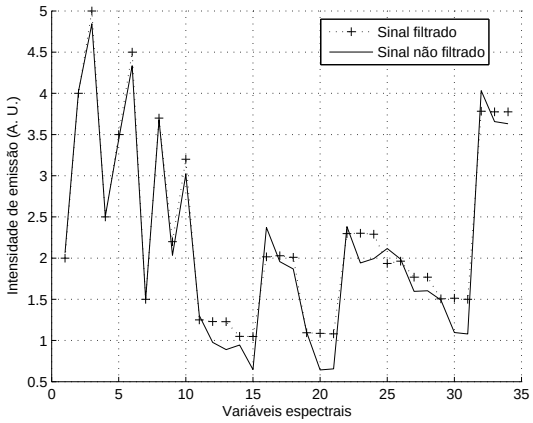
O filtro de Kalman é aplicado a todas as linhas da matriz $\mathbf{X}_{cal}$ uma por vez para a geração de uma nova matriz com os sinais/espectros filtrados denominada $\mathbf{X}_{cal_filt}$. O valor da função de medição $\mathbf{h}(k)$ é definido como um vetor Jacobiano que assume o valor 1 no instante k da iteração. O fator a (Equação (9)) recebe o valor 10. O vetor de medição $\mathbf{y}(k)$ representa cada linha da matriz $\mathbf{X}_{cal}$, enquanto o vetor de estados $\mathbf{x}(k)$ representa cada linha da matriz $\mathbf{X}_{cal_filt}$. À variância do erro (r) é atribuído o valor 1. O valor de (r) tem influência direta no cálculo inicial da matriz de covariância $\mathbf{P}(k)$ e perde importância à medida que o valor atribuído ao fator a é alterado.

O algoritmo implementado para o filtro de Kalman é executado 300 vezes com o objetivo de encontrar o valor do fator a que melhora a capacidade preditiva para a MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$ em menor tempo de execução. O teste experimental para o fator a é feito com os valores $a = [1; 1,01; 1,02; \ldots; 100]$, $a = [1; 1; 1,2; \ldots; 10]$ e $a = [1; 2; 3; \ldots; 100]$.

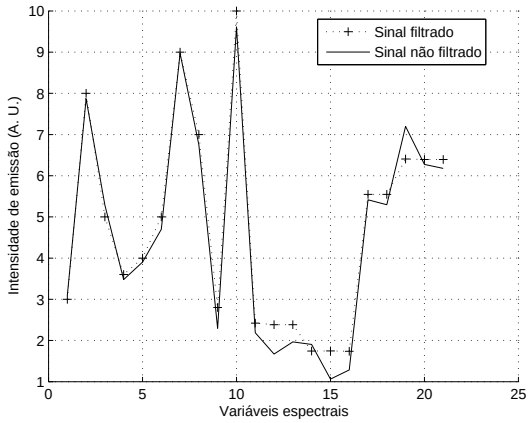
É feita a calibração com a MLR-$\mathbf{X}_{cal}$, para a matriz $\mathbf{X}_{cal}$ e a calibração com MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$ para a matriz $\mathbf{X}_{cal_filt}$.

Figura 3 – Espectros não filtrados e filtrados para os analitos dos dados de plasma.

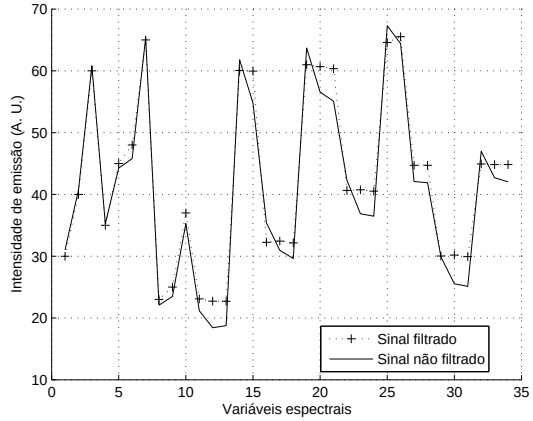
(a) Espectro não filtrado e filtrado com Kalman para o Mn.



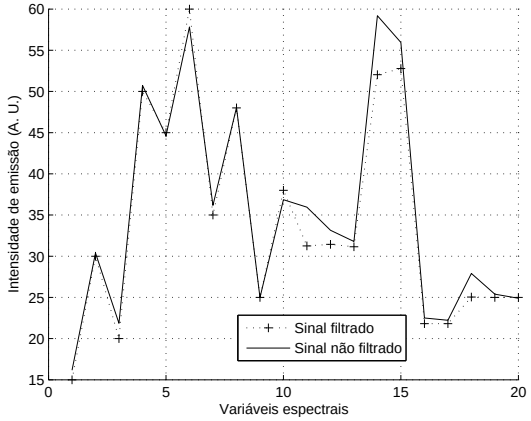
(b) Espectro não filtrado e filtrado com Kalman para o Mo.



(c) Espectro não filtrado e filtrado com Kalman para o Cr.



(d) Espectro não filtrado e filtrado com Kalman para o Ni.



(e) Espectro não filtrado e filtrado com Kalman para o Fe.

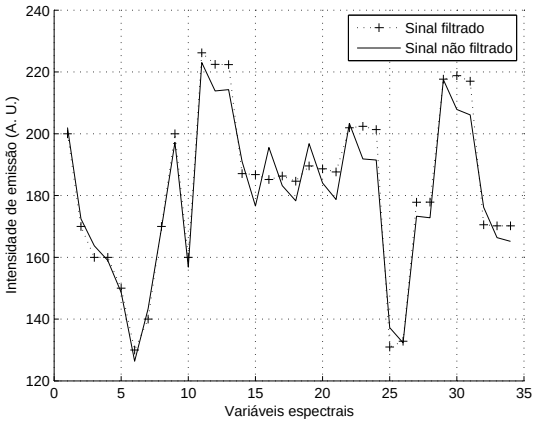


Tabela 1 – RMSEP para cada analito com melhor capacidade predidiva em função do fator a e tempo de execução.

	Mn	Mo	Cr	Ni	Fe	Valor médio
MLR - $\mathbf{X}_{cal}$	0,2282	0,3706	2,8239	2,3317	6,0749	2,3659
MLR - $\mathbf{X}_{cal_filt}$	0,0939	0,2210	1,3549	1,4484	2,9822	1,2201
Melhora (%)	58,85	40,37	52,02	37,88	50,91	48,01
Fator a	0,01	0,02	0,1	0,86	6,8	-
Execução (min)	28	26	22	25	21	24

A Tabela 1 mostra o RMSEP calculado para cada analito a partir da matriz de espectros não filtrados, $\mathbf{X}_{cal_filt}$ e com espectros filtrados, MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$. Apresenta o valor em percentual da melhora da capacidade preditiva do modelo MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$ em relação ao modelo MLR-$\mathbf{X}_{cal}$ e os valores atribuídos ao fator a utilizados no processo de filtragem para cada analito. Finalmente, a Tabela 1 mostra o tempo de execução para cada analito do conjunto de dados de plasma.

O custo computacional para o filtro de Kalman pode ser deduzido de forma intuitiva a partir das Equações apresentadas na Seção 3. Observe na Figura 2 que algoritmo de Kalman é dividido em duas etapas: predição e atualização. A etapa de predição é composta pela Equação (2) que contém uma multiplicação de matriz por vetor com uma complexidade da ordem de $O(n^2)$. A etapa de atualização compreende às Equações (6), (7) e (8).

A Equação (6) apresenta uma operação de transposição de vetor e duas operações de multiplicação de vetores com a complexidade da ordem $O(n)$ e duas operações de multiplicação de matriz por vetor com a complexidade $O(n^2)$. As demais operações da Equação (6) têm a ordem de complexidade $O(1)$. A Equação (7) é composta por três operações com a ordem de complexidade $O(n)$.

Duas operações de subtração, uma de soma de matrizes, três multiplicações de vetores com a complexidade $O(n^2)$ e duas multiplicações de matrizes de ordem $O(n^3)$. Na Equação (8) a maior ordem de complexidade é $O(n^3)$.

Assim, a complexidade do algoritmo de Kalman é da ordem $O(n^3)$ que é a ordem de complexidade mais alta entre todas as operações realizadas pelo algoritmo. Como existe n estados no vetor de observações, Equação (9), tem-se $O(n^3) \times n$. Então, a complexidade geral é da ordem $O(n^4)$.

A Figura 3 mostra os espectros de todos os analitos para os dados de plasma não filtrados e filtrados pelo filtro de Kalman. A Figura 3a apresenta os sinais do Mn, a Figura 3b do Mo, a Figura 3c mostra os espectros do Cr, a Figura 3d do Ni e, por fim, a 3e apresenta os sinais do Fe. A linha contínua corresponde ao sinal não filtrado. O sinal filtrado é representado pela linha contínua seguida do sinal de adição (+). Visualmente, pode ser visto que o sinal filtrado pode produzir melhor predição devido à suavização dos picos.

Os resultados obtidos demonstram que o filtro de Kalman pode ser aplicado com vantagens em relação a outras técnicas tradicionais em quimiometria como filtro de média móvel. O filtro de Kalman é capaz de suavizar o ruído presente nos dados e reduzir o erro de predição no

processo de calibração multivariada.

5 CONCLUSÃO

É feita a calibração com dois modelos denominados, respectivamente, de MLR-$\mathbf{X}_{cal}$ e MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$ que correspondem, respectivamente, à calibração com sinais não filtrados e sinais filtrados com o filtro de Kalman. Observa-se a melhora da capacidade preditiva do modelo MLR-$\mathbf{X}_{cal_filt}$ em relação ao modelo MLR-$\mathbf{X}_{cal}$ em média de 48,01%. O tempo de execução do filtro de Kalman é de, em média, 24 minutos. A análise do custo computacional para o filtro de Kalman e a melhora da capacidade preditiva dos modelos estimula o uso do filtro de Kalman como ferramenta de pré-processamento para os sinais em estudo. Em geral, o ganho com a capacidade preditiva do modelo é alto. Como trabalho futuro, pretende-se implementar algumas variações do filtro de Kalman como o filtro de Kalman robusto.

AGRADECIMENTOS

Esta é uma contribuição do Instituto Nacional de Ciências e Tecnologias Analíticas Avançadas (INCTAA) (CNPq - proc. no. 573894/2008-6 e FAPESP proc. no. 2008/57808-1). À Professora Dr^a Maria Fernanda Pimentel da Universidade Federal de Pernambuco do departamento de engenharia química, por ter cedido os dados utilizados neste trabalho. Aos professores, Dr. Roberto Kawakami Harrop Galvão do Instituto Tecnológico de Aeronáutica e Dr. Mário César Ugulino de Araújo da Universidade Federal da Paraíba (UFPB), pela colaboração com a pesquisa. À Pró-Reitoria de Pesquisa da PUC Goiás pelo suporte financeiro ao projeto de pesquisa. Ao CNPq pela bolsa de Iniciação Científica sob o contrato número 128918/2009-8.

ANEXO 1 - LISTA DE SÍMBOLOS

Escalares são representados em itálico; vetores e sequências em minúsculo e negrito e matrizes, em maiúsculo e negrito.

$\mathbf{x}(k)$ - vetor de estados

$\mathbf{F}(k, k\text{-}1)$ - matriz de transição de estados

$\mathbf{w}(k)$ - ruído do sistema

$\mathbf{y}(k)$ - vetor de medição dos sinais analíticos (absorbância)

$\mathbf{h}(k)$ - função de medição

$\mathbf{e}(k)$ - ruído de medição

k - iteração do processo ao longo do tempo

$\mathbf{Q}$ - matriz de covariância do ruído do sistema

$\mathbf{R}$ - matriz de covariância do ruído de medição

$\mathbf{P}(k)$ - matriz de covariância do sistema

$\mathbf{g}(k)$ - ganho de Kalman

$\mathbf{r}(k)$ - variância do ruído de medição

$\mathbf{I}$ - matriz identidade

$\mathbf{X}_{cal}$ - Matriz de respostas instrumentais em J canais analíticos para as M amostras de calibração (M x J)

$\mathbf{Y}_{cal}$ - Matriz contendo as propriedades de interesse

$\mathbf{X}testei$ - Matriz de respostas instrumentais teste em J canais analíticos para as M amostras de calibração (M x J) onde i = Mn, Mo, Ni, Cr, Fe

$\hat{y}_i$ - Concentração predita para a i-ésima amostra

ANEXO 2 - ALGORITMO DO FILTRO DE KALMAN

Algoritmo 1: Algoritmo *Filtro de Kalman*

Entrada: Vetor de dados com ruídos
Saída: Vetor de dados filtrados
r ← 10 (atribui a variância do erro)
i ← 0 (fator auxiliar)
for todas as linhas de DADOS **do**
    y ← Dados[i]
    P ← I*100
    g ← 0
    x ← 0
    k ← 1
    for todas as colunas de y **do**
        x(k,1) ← **x**(k-1,1)
        g ← **P***h*((**h'***P*h**)+**r**)-1
        x ← **x***g(**y**(1,k)-(**h'***x))
        P ← (**I**-g*h')*P*(**I**-g*h')'+g*r*g'
    end for
    xFiltrado ← **x**
end for

REFERÊNCIAS

BEEBE, Kenneth R; PELL, Randy J; SEASHOLTZ, Mary Beth. **Chemometrics: a practical guide**. New York: John Wiley & Sons, 1998.

BERETON, R. G. Introduction to multivariate calibration in analitical chemistry. **The Royal Society of Chemistry**, n. 125, p. 2125–2154, 2000.

BERETON, R. G. **Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2003.

CERQUEIRA, E. O. et al. Utilização de filtro de transformada de fourier para a minimização de ruídos em sinais analíticos. **Química Nova**, v. 23, n. 5, p. 690–698, Out. 2000.

CHATTERJEE, S.; HADI, A. S.; PRICE, B. **Regression Analysis by Example**. 3. ed. NEW YORK: John Wiley & Sons, 2000.

CHAU, Foo-tim et al. **Chemometrics: from basics to wavelet transform**. Hoboken, New Jersey: Wiley-Interscience, 2004.

DRAPER, Norman Richard; SMITH, Harry; POWNELL, Elizabeth. **Applied regression analysis**. 3. ed. New York: Wiley, 1999.

FARIA, M. C. P. de; SOUZA, M. L. de O. E. Aplicação do filtro de kalman para a estimação de estados em um problema de rastreamento. In: INPE - INSTITUTO NACIONAL DE PESQUISAS ESPACIAIS, 2004. **Anais do Congresso Temático de Dinâmica e Controle (SBMAC), 3**. Ilha Solteira, SP:, 2004. p. 1824 – 1827. Curso de Engenharia e Tecnologia Espaciais.

FERREIRA, Márcia M.C et al. Quimiometria i: calibração multivariada, um tutorial. **Química Nova**, v. 22, n. 9, p. 724–731, 1999.

JOHNSON, Richard Arnold; WICHERN, Dean W. **Applied multivariate statistical analysis**. 5. ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice hall, 2002.

KALMAN, Rudolph Emil et al. A new approach to linear filtering and prediction problems. **Journal of basic Engineering**, v. 82, n. 1, p. 35–45, 1960.

KAY, Steven M. **Fundamentals of Statistical signal processing**. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall PTR, 1998.

KLEINBAUM, David G; KUPPER, Lawrence L; MULLER, Keith E. **Applied regression analysis and other multivariable methods**. 3. ed. North Scituate, Mass.: Duxbury Pr, 1998.

LIBONATI, Renata; TRIGO, Isabel; CAMARA, Carlos Da. Aplicação do filtro de kalman na correção das previsões de temperatura a 2 metros do ecmwf. In: INSTITUTO DE METEOROLOGIA E FACULDADE DE CIÊNCIAS DA UNIVERSIDADE DE LISBOA., 2004. **Anais do XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia**. Fortaleza, CE, Brasil, 2004.

MARTENS, Harald; NAES, Tormod. **Multivariate calibration**. New York: Wiley, 1989.

MEINHOLD, Richard J; SINGPURWALLA, Nozer D. Understanding the kalman filter. **The American Statistician**, Taylor & Francis, v. 37, n. 2, p. 123–127, 1983.

NUNES, Pedro Germano Antônio. **Uma nova técnica para seleção de variáveis em calibração multivariada aplicada às espectrometrias UV-VIS e NIR**. 2008. Tese (Doutorado) — Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, tese de doutorado em Química. Programa de Pós-Graduação em Química.

OTTO, Matthias. **Chemometrics**. Weinheim: Wiley-Vch, 2005.

PIMENTEL, Maria Fernanda et al. Simultaneous multielemental determination using a low-resolution inductively coupled plasma spectrometer/diode array detection system. **Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy**, Elsevier, v. 52, n. 14, p. 2151–2161, 1997.

PIZZINGA, A. H. **Filtro de Kalman Restrito: Teoria, Métodos e Aplicações**. 2008. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica.

SILVA, C. C. da; PEREIRA, A. Juliano. Implementação e análise de localização em robótica móvel por filtro de kalman. In: IX ENCONTRO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E PÓS-GRADUAÇÃO DO ITA, 2003. **Instituto Tecnológico da Aeronáutica (ITA)**. 2003, São José dos Campos.

SKOOG, Douglas A; HOLLER, F James; NIEMAN, Timothy A. **Principles of instrumental analysis**. Philadelphia: Saunders College, 1998.

VANDEGINSTE, BMG et al. **Handbook of Chemometrics and Qualimetrics: Part B**. Amsterdam: Elsevier Science, 1998.

VILLOSLADA, Fernando Navarro. **Calibración Multivariante para la Determinacion de Clorofenoles Contaminantes Prioritarios Mediante Espectrofotometría de Diodos Integrados y Fía**. 1997. Tese (Doutorado) — Universidad Complutense de Madrid, facultad de Ciencias Químicas.

WELCH, Greg; BISHOP, Gary. **An Introduction to the Kalman Filter**. Chapel Hill, NC, USA, 1995.

WENTZELL, Peter D; VANSLYKE, Stephen J. Parallel kalman filter networks for kinetic methods of analysis. **Analytica chimica acta**, Elsevier, v. 257, n. 1, p. 173–181, 1992.

WILLIAMS, Douglas B; MADISETTI, Vijay. **Digital signal processing Handbook**. Boca Raton, FL: CRC Press, Inc., 1997.

WOLD, Svante; SJöSTRöM, Michael. Chemometrics, present and future success. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Elsevier, v. 44, n. 1, p. 3–14, 1998.