

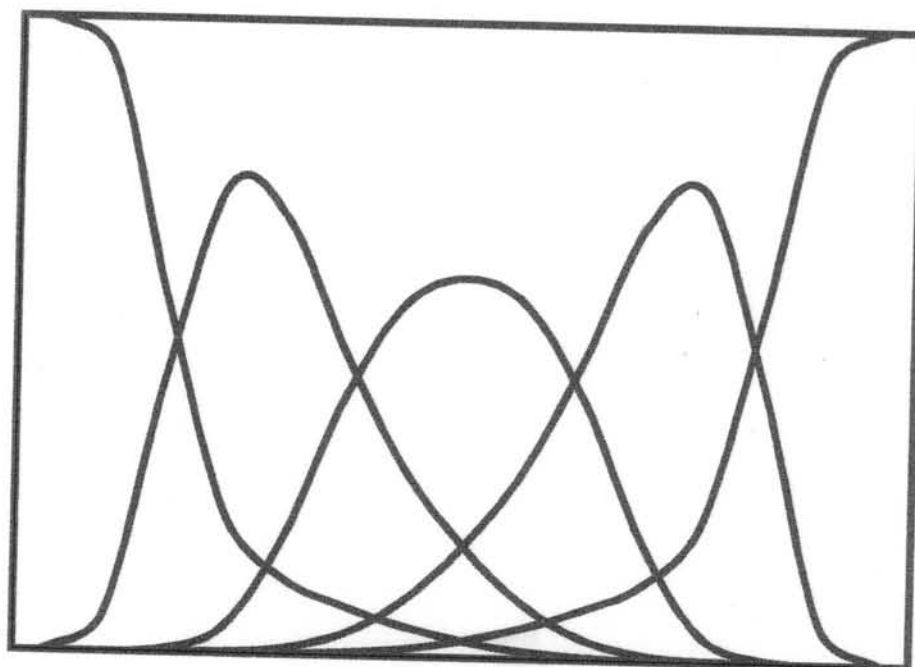
23

Universidade do Porto

Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Estratificação de Leitos de Jigagem

Modelo Cinético Multicomponente



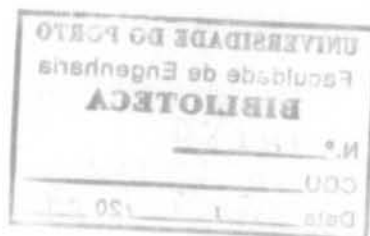
Dissertação para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia de Minas

Eduardo Filipe Júdice Nunes Vilhena Crespo
(Engenheiro de Minas; Mestre)

Setembro 2003

Estratificação de Leitos de Jigagem

Modelo Cinético Multicomponente



Eduardo Filipe Júdice Nunes Vilhena Crespo
(Bolsheiro no âmbito do programa PRAXIS XXI)

Resumo

A jigagem é um dos principais processos de separação hidrogravítica, sendo largamente utilizada no tratamento de carvão, na preparação de minérios de ferro e manganês, em aluviões ricos em estanho, titânio ou zircônio, em areias auríferas, etc. Embora a jigagem de minérios seja praticada à vários séculos, ainda não existe uma descrição física do processo considerada satisfatória. Este desconhecimento tem limitado, de certa forma, o seu desenvolvimento tecnológico. Até muito recentemente, a previsão dos resultados da jigagem era apenas possível utilizando o método empírico, baseado em curvas de partição.

Nos últimos anos, surgiram diversos modelos matemáticos que procuram superar as carências do método empírico, assim como as limitações das descrições teóricas existentes. As principais dificuldades encontradas na modelação da jigagem têm sido a descrição cinética (dinâmica) do processo e a descrição da estratificação com base na diferença de calibre.

Neste contexto, pareceu pertinente desenvolver um modelo cinético, aplicável a leitos formados por n componentes, onde a estratificação tanto pode ter origem na diferença de densidade, como na diferença de calibre. O modelo usa elementos da teoria dos fenómenos de transferência de massa. Fundamentalmente, a jigagem é descrita como um processo de segregação-dispersão multicomponente.

O modelo foi ajustado a dados experimentais. Os dados referem-se à jigagem de misturas artificiais de magnetite e calcário, com dois e com quatro componentes. O tratamento estatístico dos resultados do ajuste permitiu validar o modelo.

Abstract

Jigging is one of the most important methods of gravity concentration. It is widely used for beneficiation of ores of ferrous metals (iron and manganese), dispersed deposits of tin, titanium and zirconium, gold-bearing sands, coal, etc. Jigging is also one of the oldest forms of mineral processing, but the existing theories of jigging have little practical use from design and operational standpoint. The empirical method, based on partition curves, is until now the standard method for the calculation of coal washing unit performance.

In the last years, a great deal of effort has been expended by many researchers to model the jigging mechanism. The main difficulties are the kinetic (dynamic) description of the process and the description of the separation based on size difference.

In this context, it seems pertinent to develop a kinetic model, suitable for multicomponent jig beds, where the stratification takes place as a result of density and size differences. The model uses elements of the theory of mass transfer phenomena. Basically, the jigging mechanism is described as a segregation-dispersion multicomponent process.

The model was fitted to experimental data. The data refers to the batch jigging of artificial mixtures of magnetite ore and limestone, with two and four components. The statistical treatment of the fitting results validates the model.

Résumé

Le jiggage est un des principales méthodes de valorisation des minerais basées sur la gravité, étant largement utilisé dans la préparation du charbon, des minerais du fer, des alluvions riches en étain, titane et zirconium, des sables aurifères, etc. Le jiggage des minerais est pratiqué de puis plusieurs siècles, cependant il n'existe pas encore une description physique du processus considérée satisfaisant, ce qui limite, d'une certaine façon, son développement technologique. Jusque très récemment, la prévision des résultats du jiggage était seulement possible en utilisant la méthode empirique basée sur courbes de partage.

Dans les dernières années beaucoup de modèles mathématiques apparaissent qui cherchent à surmonter les carences de la méthode empirique, bien comme les limitations des descriptions théoriques existantes. Les principales difficultés trouvées dans la modélisation du jiggage sont la description cinétique (dynamique) du processus, et la description de la stratification basée sur la différence de la dimension du grains.

Dans ce contexte, un modèle cinétique a été développé, applicable à des lit formes par n components, ou la stratification peut tant avoir origine dans la différence de densité, comme dans la différence de dimension. Le modèle utilise des éléments de la théorie des phénomènes de transport de masse. Fondamentalement, le jiggage est décrit comme un processus de ségrégation-dispersion multicomponent.

Le modèle a été ajusté à des données expérimentales. Les données referant au jiggage de mélanges artificiels de magnétite et calcaire, avec deux et quatre components. L'analyse statistique des résultats de l'ajustement a permis de valider le modèle.

Estou grato aos Profs. Machado Leite e Novais Madureira
e ao Sr. Victor Cerveira.

Aos meus pais.
À Ana e ao Bernardo.

“Sejamos sinceros connosco próprios.

Não vamos chegar aos cem por cento, vamos ficar nos cinquenta. [...]

Por isso vou até ao fim, sabendo que, em relação ao ideal que me fixei,
a minha acção é metade inútil, ou melhor, só em metade é útil.”

Pepetela, *Mayombe* (1980)

Índice

1 Introdução

1.1 Apresentação (1-6)

Jigagem e estratificação, Gaudin e Mayer, O método empírico,
O modelo proposto, Etapas no desenvolvimento do modelo

1.2 Revisão bibliográfica (7-19)

Rong, Lyman (1991, 1993), Beck, Holtham (1993),
Mishra, Mehrotra (1998, 2001), Costa (1993), Tavares, King (1995),
Tavares (1999)

2 Estratificação de sistemas binários (20)

2.1 Introdução (20)

2.2 Conservação da massa dos componentes (21-24)

Concentração pontual e concentração média, Concentrações reduzidas,
Balanço de massa num volume finito do leito, Forma diferencial
da equação da continuidade

2.3 Modelo cinético para sistemas binários (25-27)

Equação da continuidade, Segregação binária, Dispersão binária
Segregação-dispersão binárias

2.4 Discretização e integração das equações de conservação (28-39)

Método dos volumes finitos – Apresentação, Segregação binária,
Erro local de truncatura, Precisão de segunda ordem no tempo – Esquema
preditor corrector, Dispersão binária, Precisão de segunda ordem
no tempo – Método de Crank-Nicolson, Segregação-dispersão – Método
dos incrementos fraccionários, Simulação

2.5 Trabalho experimental com misturas de dois componentes (40-45)

Dispositivo laboratorial, Procedimentos, Dados experimentais

2.6 Ajuste do modelo binário (46)

2.6.1 Função objectivo (46-49)

Modelos candidatos, Mínimos quadrados, Mínimos quadrados
como um estimador de máxima verosimilhança,
Natureza dual do erro

2.6.2 Erro experimental (50-53)

Decomposição dos resíduos, Homogeneidade e distribuição
do erro experimental

2.6.3 Minimização da função objectivo (54-63)

Algoritmo geral, Métodos para mínimos quadrados, Direcção de Gauss-Newton, Garantindo a descida e a convergência, Cálculo da direcção de pesquisa, Cálculo do comprimento do passo, Aproximação das derivadas, Condições de paragem

2.6.4 Resultados do ajuste (64-82)

Parâmetros ajustados, Matriz de variância-covariância dos parâmetros ajustados – Caso não-linear, Intervalos de confiança para os parâmetros ajustados, Discriminação entre os modelos candidatos, Qualidade do ajuste – Teste de Kolmogorov-Smirnov, Análise dos resíduos – Distribuição, Análise dos resíduos – Testes das sequências e do sinal, Intervalos de confiança para observações futuras

Anexos A a D

A Dados experimentais – dois componentes (83-98)

B Análise do erro experimental – dois componentes (99-104)

C Análise dos resíduos – dois componentes (105-110)

D Previsão de observações futuras – dois componentes (111-118)

3 Estratificação de sistemas multicomponente (119)

3.1 Introdução (119)

3.2 Movimento de partículas sólidas num fluido (120-129)

Força de arrasto, Leis de Stokes e de Newton. Regime intermédio, Velocidade terminal, Coeficiente de arrasto para partículas não-esféricas, Período de aceleração,

3.3 Trabalho experimental com misturas de quatro componentes (130-134)

Leito multicomponente, Procedimentos, Dados experimentais, Porosidade *versus* composição

3.4 Modelo cinético para sistemas multicomponente (135)

3.4.1 Segregação e dispersão multicomponente (135-145)

Segregação multicomponente, Dispersão multicomponente, Segregação-dispersão multicomponente, Aspectos computacionais, Simulação

3.4.2 Coeficientes de segregação e dispersão (146-149)

Introdução, Coeficientes de segregação, Primeira estimativa dos tempos de queda, Coeficientes de dispersão

3.5 Ajuste do modelo multicomponente (150)

3.5.1 Função objectivo e erro experimental (151-153)

Função objectivo, Erro experimental

3.5.2 Resultados do ajuste (154-162)

Parâmetros ajustados, Intervalos de confiança para os parâmetros ajustados, Testes baseados na distribuição t ,
Qualidade do ajuste – Teste de Kolmogorov-Smirnov,
Análise dos resíduos – Distribuição, Análise dos resíduos – Teste das sequências e do sinal, Previsão de observações futuras

Anexos E a I

E Dados experimentais – quatro componentes (163-190)

F Análise do erro experimental – quatro componentes (191-193)

G Análise dos resíduos – quatro componentes (194-196)

H Previsão de observações futuras – quatro componentes (197-202)

Bibliografia (203-206)

Capítulo 1

1 Introdução

Sumário

1.1 Apresentação

1.2 Revisão bibliográfica

1.1 Apresentação

Jigagem e estratificação

A jigagem é um processo de separação que consiste na repetida expansão e contracção vertical de uma leito de partículas, pelo movimento de pulsação de um fluido. Embora existam outras possibilidades, o fluido é invariavelmente água ou ar. É apenas considerado o primeiro caso. O resultado da jigagem é a estratificação do leito, ou seja, a separação das partículas em camadas ou estratos horizontais. A estratificação reflecte, sobretudo, uma separação com base na densidade das partículas: a densidade dos estratos é crescente do base para o topo do leito. No entanto, sabe-se que o calibre e a forma das partículas também influenciam a estratificação. Normalmente, o leito é sustentado por uma rede que permite a passagem da água. O movimento cíclico da água é provocado por um êmbolo ou por um diafragma, ou ainda por ar comprimido. A duração do ciclo e a sua amplitude são dois dos mais importantes parâmetros do processo. Tipicamente, as frequências de ciclo variam entre 100 e 300 ciclos por minuto. A jigagem é largamente utilizada no tratamento de carvão, na preparação de minérios de ferro e manganês, em aluviões ricos em estanho, titânio ou zircónio, em areias auríferas, etc.

Gaudin e Mayer

O mecanismo da jigagem tem interessado os investigadores à mais de 100 anos. Muitos estudos têm sido efectuados com o objectivo de explicar a estratificação operada em jigas. Destes estudos resultaram diversas teorias, das quais as mais frequentemente aceites são os princípios (ou mecanismos) da aceleração diferencial, da sedimentação-perturbada e da percolação intersticial, sistematizados por Gaudin (1939), e o princípio da minimização da energia potencial do leito de Mayer (1964).

De acordo com o princípio da aceleração diferencial, o movimento das partículas, nos primeiros instantes da queda, faz-se com acelerações, e logo com velocidades, que são

função da sua densidade, mas que são independentes do seu calibre (e forma). A fundamentação deste princípio pode ser facilmente entendida se considerarmos a equação do movimento de uma partícula em sedimentação no interior de um fluido

$$m \frac{dv}{dt} = (m - m')g - R, \quad (1.1.1)$$

onde m representa a massa da partícula, m' representa a massa deslocada de fluido, g é a aceleração da gravidade, R é a resistência oposta ao movimento pelo fluido, v é a velocidade da partícula (na direcção vertical) e t é o tempo. Nos primeiros instantes da queda, a resistência, que é função da velocidade, é negligenciável, pelo que a equação de movimento se pode escrever

$$\frac{dv}{dt} = \frac{m - m'}{m} g. \quad (1.1.2)$$

Agora, fazendo intervir as massas específicas da partícula e do fluido, temos

$$\frac{dv}{dt} = \left(1 - \frac{\rho_f}{\rho_p}\right) g, \quad (1.1.3)$$

ou seja, o movimento da partícula é função da sua densidade, mas é independente do seu calibre e forma. Pode, então, inferir-se que a repetição de ciclos de jigagem, com duração suficientemente curta, conduz a uma estratificação fundamentalmente com base na densidade das partículas.

Se observamos o movimento das partículas após um intervalo de tempo mais longo, estas terão tido tempo de atingir a sua velocidade terminal. Neste caso, a velocidade de queda é dependente não só da densidade, mas também do calibre (e da forma). Num leito constituído por partículas com massa específica ρ_A e ρ_B , com ρ_A maior que ρ_B , as partículas mais densas concentram-se no fundo da jiga, sem se misturarem com as menos densas, se (Burt, 1984)

$$\frac{d_B}{d_A} < \left(\frac{\rho_A - \rho_b}{\rho_B - \rho_b} \right)^n, \quad (1.1.4)$$

onde d_A e d_B são os diâmetros das partículas e o expoente n é igual a 1 no regime de Newton e é igual a 0.5 no regime de Stokes. Utiliza-se a densidade do leito ρ_b , porque se considera que a queda ocorre em condições perturbadas. A expressão (1.1.4) constitui o enunciado do princípio da sedimentação-perturbada. A sedimentação-perturbada é importante, sobretudo, quando se utilizam frequências de ciclo mais baixas ou quando é inibido o efeito de sucção.

Durante a fase final do ciclo, quando ocorre a contracção do leito, as partículas com maior dimensão são as primeiras a imobilizar-se, enquanto as mais pequenas podem ainda

deslocar-se através dos intervalos e canais formados pelas maiores. Este mecanismo é frequentemente designado por percolação intersticial (*“interstitial trickling”*, *“tassement”*). A percolação intersticial pode ser especialmente importante na recuperação de finos densos, em alimentações com alguma extensão granulométrica. O efeito de sucção na fase final do ciclo pode potenciar este mecanismo.

Contrariamente às ideias de Gaudin (e de outros investigadores), em que se considera o movimento de partículas individuais, a abordagem proposta por Mayer considera o leito como um todo. De acordo com Mayer, um leito de partículas, com diferente massa específica, define um nível de energia potencial: a energia potencial gravítica do leito. Com a pulsação, as partículas deslocam-se para novas posições, de tal modo que a energia potencial do leito diminui; por outras palavras, o leito estratifica. A estratificação está, assim, ligada à redução de energia potencial do sistema e, na opinião de Mayer, a redução de energia é a única causa física da estratificação. Então, a energia fornecida ao leito pela pulsação não é directamente responsável pela estratificação, mas é apenas um meio de libertar a energia potencial contida na mistura granular. Mayer verificou que a redução da energia potencial, durante a jigagem, obedece à seguinte lei

$$y_n = S(1 - k)^n, \quad (1.1.5)$$

onde y_n é a coordenada do centro de gravidade após n pulsações, S é o abaixamento total do centro de gravidade e k é um parâmetro que mede a rapidez com que o sistema tende para o estado final (a estratificação perfeita). A equação (1.1.5) indica que a única limitação à estratificação perfeita é de ordem cinética.

O método empírico

É amplamente reconhecido que os princípios atrás apresentados proporcionam apenas uma descrição qualitativa do processo, e como tal não podem ser utilizadas na previsão do desempenho de operações industriais. Na ausência de uma teoria útil que descreva o processo de jigagem, utilizam-se frequentemente modelos empíricos. O modelo empírico com maior aceitação é método da curva de partição (ou curva de Tromp). As curvas de partição são ainda o método *standard* no cálculo da performance de unidades que tratam carvão (Tavares, King, 1995). O método da curva de partição é muito eficaz em aparelhos que usam um meio com densidade fixa para alcançar a separação (como acontece na separação em líquidos densos ou em meios densos). No entanto, o método é muito menos satisfatório em aparelhos onde a separação tem lugar num meio com características criadas pelas próprias partículas. De facto, a principal desvantagem do método empírico,

quando aplicado à jigagem, é a dificuldade em prever a variação da curva de partição em função das propriedades do material da alimentação (nomeadamente, a composição densitária e granulométrica). A curva de partição é também muito dependente do caudal de alimentação e da regulação do aparelho (por exemplo, a posição das comportas de saída do material denso).

O modelo proposto

Nos últimos anos, surgiram diversos modelos matemáticos que procuraram superar as carências do método empírico, assim como as limitações das teorias de Gaudin e Mayer. Os trabalhos mais frequentemente referidos são apresentados, com algum detalhe, no ponto 1.2. As principais dificuldades encontradas na modelação da jigagem têm sido a descrição cinética (dinâmica) do processo e a descrição da estratificação com base na diferença de calibre. Assim, por exemplo, no modelo de Tavares-King (1995), só é possível determinar o perfil de densidades do leito no estado final de equilíbrio (isto é, quando o tempo de jigagem tende para infinito), e só para leitos monogranulométricos. O modelo de Costa (1993) permite a descrição cinética do processo, mas limita-se a leitos binários (isto é, leitos constituídos por duas classes de partículas).

A descrição cinética do processo tem grande utilidade, pois torna possível simular estados transientes. Um modelo cinético pode, então, reagir a alterações da composição da alimentação, ou a alterações nos caudais de entrada ou saída de material. Por outro lado, é frequente utilizarem-se alimentações com alguma extensão granulométrica, pelo que, em muitos casos, a diferença de calibre também tem influência na estratificação do leito. Assim, orientámos os nossos esforços no sentido de criar um modelo cinético e verdadeiramente *multicomponente*, isto é, capaz de descrever a estratificação com origem nas diferenças de densidade e calibre.

Etapas no desenvolvimento do modelo

No desenvolvimento do modelo cinético multicomponente estabelecemos duas etapas:

– *Modelo cinético binário*. Neste primeira etapa, que corresponde ao capítulo 2, é considerado o problema da evolução da estratificação de um leito *batch*, formado por dois componentes. Consideramos, em primeiro lugar, a resolução deste problema, pois desde o início tivemos a convicção de que o problema multicomponente pode ser tratado como uma sobreposição de problemas binários. Do ponto de vista formal, o desenvolvimento

do modelo parte da equação da continuidade, aplicada ao leito de jigagem. Em seguida, admite-se que os fluxos de massa podem ter origem em dois mecanismos: um *mecanismo de segregação (concentração)* e um *mecanismo de dispersão (mistura)*. Esta hipótese foi primeiramente formulada no modelo de Costa (1993). Também adoptámos as expressões para os fluxos de segregação e dispersão propostas por este autor (que se baseiam num trabalho anterior de Rowe e Gibilaro (1974), sobre leitos fluidizados por ar). O modelo foi ajustado a dados experimentais. Os dados utilizados dizem respeito à jigagem de leitos binários, constituídos por uma mistura artificial de magnetite e calcário. O tratamento estatístico dos resultados do ajuste permitiu validar o modelo.

– *Modelo cinético multicomponente*. Na segunda etapa do desenvolvimento do modelo, que corresponde ao capítulo 3, é considerado o problema da estratificação de um leito *batch* formado por n componentes. A segregação multicomponente é descrita como uma sobreposição de segregações binárias. (Na realidade, a equação da segregação binária apresenta alguma semelhança formal com a equação para a difusão de Maxwell-Stefan. Este facto, sugere que o processo de generalização da equação de Maxwell-Stefan, de dois para n componentes, pode também ser aplicado à equação da segregação.) Para o problema da dispersão multicomponente é adoptado o formalismo de Onsager (lei de Fick generalizada). Surge, assim, um conjunto de coeficientes cinéticos, cujo número cresce muito rapidamente com o número de componentes. Isto sugere que os coeficientes não são independentes, devendo existir entre eles determinadas relações. Procurámos estabelecer estas relações ligando os coeficientes cinéticos às propriedades das partículas. Neste ponto, clarifica-se o papel da densidade e do calibre na estratificação. O modelo foi, também, ajustado a dados experimentais. Os dados dizem respeito à jigagem de leitos formados por quatro componentes. O leito era constituído por uma mistura de partículas de magnetite e calcário, mas agora pertencentes a dois lotes granulométricos. O tratamento estatístico dos resultados do ajuste permitiu validar o modelo multicomponente. De facto, os indicadores da qualidade do ajuste são comparáveis aos do problema binário.

Embora o modelo multicomponente possa simular uma estratificação com origem, simultaneamente, em diferenças de densidade e calibre, apresenta, no entanto, alguma limitação em relação a esta última propriedade. Como veremos, o cálculo dos fluxos de segregação e dispersão baseia-se num *mecanismo de troca de posição entre partículas*, que admite que o volume dos espaços intersticiais não se altera. Ora, existindo contraste granulométrico entre as espécies que compõem o leito, não é possível garantir que a porosidade se mantém constante. Para lidar com este problema, encontra-se em fase adiantada de desenvolvimento um modelo que inclui uma correcção empírica para a variação da

porosidade. Em leitos onde a razão entre o calibre das partículas maiores e mais pequenas é inferior a 4, verificámos que, na prática, se pode considerar que a porosidade é constante, sem prejuízo da segregação com base na diferença de calibre. Em leitos onde as diferenças de calibre forem muito grandes, e onde podem surgir fenómenos de percolação intersticial, o cálculo dos fluxos, assente no mecanismo de troca de posição, talvez não seja aplicável.

Encontra-se, igualmente, em fase adiantada de desenvolvimento, um modelo cinético multicomponente para a estratificação de leitos em regime contínuo.

1.2 Revisão bibliográfica

Rong, Lyman (1991, 1993)

Trata-se de um modelo empírico muito simples que relaciona a extensão da estratificação, no regime descontínuo, com o tempo de jigagem (tempo de residência). A extensão da estratificação é quantificada mediante o índice *CPI* (*concentration profile index*). Este índice define-se como a área entre a curva de concentração *versus* profundidade, de uma dada fracção granulométrica e densitária, e a linha correspondente de concentração num leito perfeitamente misturado. As concentrações são expressas em termos de percentagem de massa. O valor do *CPI* cresce com a extensão da estratificação. A relação do *CPI* com o tempo de jigagem é estabelecida pela seguinte equação

$$CPI = \frac{10000}{ce^{-kt}}, \quad (1.2.1)$$

onde c e k são duas constantes positivas. Rong e Lyman, baseados apenas no critério do melhor ajuste, propuseram também a equação alternativa

$$CPI = \frac{10000}{c_1 t^{-c_2}}, \quad (1.2.2)$$

onde c_1 e c_2 são, igualmente, duas constantes positivas. As constantes k e c_2 constituem uma medida da rapidez (eficiência) da estratificação.

O trabalho experimental, que está na base das relações anteriores, foi efectuado numa jiga piloto Baum. Para além do estudo da relação do *CPI* com o tempo de jigagem, os autores procuraram ligar este índice aos parâmetros operatórios do aparelho.

Beck, Holtham (1993)

No modelo de Beck e Holtham é simulado o movimento de um número limitado de partículas esféricas (elementos discretos) que representam o leito de uma jiga *batch*. São considerados os movimentos de translação e de rotação de cada partícula, num sistema de coordenadas xy . O sistema de equações que descreve o movimento da cada partícula é o seguinte

$$\text{translação} \quad (m + m') \frac{d^2 y}{dt^2} = (m_f - m)g + f_y \quad (1.2.3)$$

$$(m + m') \frac{d^2 x}{dt^2} = f_x \quad (1.2.4)$$

$$\text{rotação} \quad I \frac{d^2\theta}{dt^2} = \tau, \quad (1.2.5)$$

onde m é a massa da partícula, m_f é a massa deslocada de fluido, m' é a massa acrescentada (avaliada em $m_f/2$), I é o momento de inércia da esfera, θ é o ângulo de rotação e τ é o momento aplicado na partícula. A força exterior $F=(f_x, f_y)$ é o resultado de interações do tipo partícula-fluido e partícula-partícula (ou partícula-parede). O momento exterior τ é apenas o resultado de interações do tipo partícula-partícula.

No modelo, para além da impulsão hidrostática, é considerada, como interacção com o fluido, a força de arrasto, que actua na direcção da velocidade relativa do fluido. Admite-se que a velocidade da corrente de fluido é a mesma em qualquer ponto do escoamento, num dado instante. A equação utilizada no cálculo da força de arrasto é a seguinte

$$F_{\text{arrasto}} = \frac{\pi}{8} \rho_f d^2 C_D |w_{\text{rel}}| w_{\text{rel}}, \quad (1.2.6)$$

$$\text{com} \quad w_{\text{rel}} = w_{\text{fluido}} - w_{\text{part}}, \quad (1.2.7)$$

onde ρ_f é a massa específica do fluido, d é o diâmetro da partícula e C_D é o coeficiente de arrasto, função do número de Reynolds.

São considerados dois mecanismos de interacção partícula-partícula. Um mecanismo diz respeito a colisões ou a contactos com muito curta duração. O outro mecanismo refere-se a contactos com duração mais longa. A passagem do primeiro para o segundo mecanismo é determinada, portanto, pelo tempo de contacto entre as partículas. Inicialmente, é activado o mecanismo de colisão, mas se as partículas permanecerem em contacto mais do que dois incrementos de tempo é activado o mecanismo para contactos com duração mais longa.

Duas partículas ao colidirem, se a sua velocidade relativa for diferente de zero, sofrem um impulso. Aplicando o teorema da conservação da quantidade de movimento, as componentes normal e tangencial deste impulso podem ser calculadas mediante as seguintes equações

$$J_n = -\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (1+e) c_{12n} \quad (1.2.8)$$

$$J_s = -\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} (1+e) c_{12s}, \quad (1.2.9)$$

onde m_1 e m_2 são as massa das partículas em colisão, e é o coeficiente de restituição e c_{12n} e c_{12s} são as componentes normal e tangencial da velocidade relativa da partícula 1

em relação à partícula 2. A componente tangencial do impulso é ainda limitada por um coeficiente de atrito μ , relativo à fricção entre a superfície das duas partículas

$$|\mathbf{J}_s| \leq \mu |\mathbf{J}_n|. \quad (1.2.10)$$

Conhecidas as componentes $\mathbf{J}_s$ e $\mathbf{J}_n$ podem ser determinadas as alterações (instantâneas) nas velocidades de translação e de rotação das partículas.

Quando duas partículas estabelecem um contacto com duração mais longa, a força normal, que exercem uma sobre a outra, é calculada com base num modelo do tipo massa-mola-amortecedor, criticamente amortecido. A força da mola, que é considerada função do grau de sobreposição das duas partículas, é dada pela equação

$$\mathbf{F}_n = (m_r k_n d_n) \mathbf{n}, \quad (1.2.11)$$

onde k_n é a constante de elasticidade da mola, d_n é a sobreposição das duas partículas, m_r é uma função da massa das duas partículas e $\mathbf{n}$ é o vector unitário normal às superfícies em contacto. A força de contacto na direcção perpendicular a $\mathbf{n}$, que tende a anular a rotação das partículas, é dada pela equação

$$\mathbf{F}_s = -k_s c_{12s}, \quad (1.2.12)$$

onde k_s é um parâmetro do modelo. A força de contacto $\mathbf{F}_s$ é também limitada pelo coeficiente de atrito μ

$$|\mathbf{F}_s| \leq \mu |\mathbf{F}_n|. \quad (1.2.13)$$

Assim, as forças e os momentos, gerados pelo contacto entre as partículas 1 e 2, são os seguintes

$$\text{partícula 1} \quad \mathbf{F}_{cont,1} = (\mathbf{F}_n + \mathbf{F}_a) + \mathbf{F}_s \quad (1.2.14)$$

$$\tau_{cont,1} = |\mathbf{F}_s| a_1 \quad (1.2.15)$$

$$\text{partícula 2} \quad \mathbf{F}_{cont,2} = -\mathbf{F}_{cont,1} \quad (1.2.16)$$

$$\tau_{cont,2} = |\mathbf{F}_s| a_2, \quad (1.2.17)$$

onde $\mathbf{F}_a$ é a força de amortecimento e a_1 e a_2 são os raios das esferas. Estas forças e momentos são incluídos nas equações de movimento (1.2.3) a (1.2.5).

O modelo que acabámos de descrever foi utilizado, pelos seus autores, na simulação de um leito de jigagem constituído por 200 partículas esféricas, com 5 cm de diâmetro e pertencentes a 8 classes de densidade, variando entre 1.3 e 2.0. Com base nos *outputs* do simulador foram montadas sequências animadas. O movimento simulado foi considerado razoavelmente realista, sugerindo que o modelo captou os aspectos essenciais do processo de jigagem. As simulações efectuadas sugeriram, também, que o leito é elevado em bloco durante a fase de subida do fluido, não ocorrendo, por isso, estratificação durante esta

fase. A estratificação só tem início quando a velocidade da água muda de sentido, prosseguindo até o leito compactar sobre a rede.

A principal carência do modelo, apontada por Beck e Holtham, é não permitir simular a percolação de partículas mais pequenas. Isto acontece porque num leito compacto 2D não há comunicação entre os espaços intersticiais. Assim, só são possíveis simulações realistas de intervalos granulométricos estreitos. Outra carência, indicada pelos autores, é a excessiva simplicidade do modelo de circulação do fluido.

Mishra, Mehrotra (1998, 2001)

No modelo de Mishra e Mehrotra é simulado o movimento tridimensional de um certo número de partículas esféricas que representam o leito de uma jiga *batch*. As equações de movimento, três para a translação e três para a rotação, têm uma forma semelhante às equações desenvolvidas por Beck e Holtham. Assim, por exemplo, para o movimento vertical é válida a equação

$$m \frac{d^2 y}{dt^2} = mg + f_{yc} + f_{yf}, \quad (1.2.18)$$

onde f_{yc} é a componente vertical das forças geradas pelos contactos partícula-partícula (ou partícula-parede) e f_{yf} é a componente vertical das forças devidas à interacção com o fluido. São consideradas como forças de interacção partícula-fluido, a força de impulsão hidrostática e a força de arrasto.

Neste modelo não é feita a distinção entre contactos com curta e longa duração. Todos os contactos entre partículas (ou com as paredes) são modelados com base num sistema do tipo massa-mola-amortecedor. A força normal de contacto entre duas partículas, F_n , é dada pelas seguintes equações

$$f_n^i = f_n^{i-1} - (k_n \Delta t) v_n^i \quad (1.2.19)$$

$$d_n^i = -\beta_n v_n^i \quad (1.2.20)$$

$$F_n^i = f_n^i + d_n^i, \quad (1.2.21)$$

onde o índice i indica o número da iteração, Δt é o passo de integração, f_n e d_n são as componentes normais da força da mola e da força do amortecedor, v_n é a componente normal da velocidade relativa das duas partículas, k_n é a constante de rigidez da mola e β_n é a constante de amortecimento. A componente tangencial da força de contacto, F_s , é determinada de uma forma análoga. O módulo de F_s é ainda limitado pelo módulo de F_n , de acordo com a seguinte relação

$$|F_s^i| < \mu |F_n^i| + c, \quad (1.2.22)$$

onde μ é um coeficiente de fricção e c é um coeficiente de coesão, característicos dos materiais das partículas.

As forças de arrasto são calculadas pela seguinte correlação, que inclui a influência da porosidade do leito

$$f_d = \frac{1}{2} C_D \rho_f \frac{\pi d^2}{4} \varepsilon^2 |\Delta v| \Delta v \varepsilon^{-(\chi+1)}, \quad (1.2.23)$$

onde C_D é o coeficiente de arrasto, ρ_f é a massa específica do fluido, ε é a porosidade do leito, d é o diâmetro da esfera e Δv é a velocidade relativa entre a partícula e o fluido. Os coeficientes C_D e χ são funções do número de Reynolds. A relação (1.2.23) tem origem num trabalho de Di Felice (1994).

O modelo foi utilizado, por Mishra e Mehrotra, na previsão do perfil de densidade de um leito real de jigagem. O leito, com 12 cm de altura, era constituído por 1600 partículas esféricas, com 9.5 mm de diâmetro, metade com densidade 2.65 e a outra metade com densidade 3.0. O número de partículas do modelo era igual ao número de partículas do leito real. Os perfis de densidade previstos mostraram uma razoável concordância com os resultados experimentais.

Costa (1993)

Estratificação de um leito binário. Seja um leito constituído por partículas com igual calibre e pertencentes a duas classes de densidade. Durante a jigagem, as camadas inferiores tendem a enriquecer no componente denso, enquanto as camadas superiores tendem a enriquecer no componente leve, conservando-se o volume total do leito. Esta evolução pode, então, ser descrita como um processo de troca de posição entre partículas densas, situadas na altura $h+dh$, e partículas leves, situadas na altura h . Assim, o fluxo volumétrico do componente pesado (componente A), que atravessa a secção do leito em h , é igual a $K C_{A(h+dh)} C_{B(h)}$, onde C_A e C_B são as fracções de sólidos (em volume) dos dois componentes e K é uma constante cinética.

Quando o leito é expandido pela corrente ascendente de água, é admitida a possibilidade de algumas partículas trocarem de posição. Esta acção é acentuadamente não-selectiva e tende, por isso, a amortecer ou a eliminar os efeitos do mecanismo de segregação anteriormente descrito. O fluxo volumétrico de componente pesado, que atravessa a secção do

leito na altura h , devido a esta acção de mistura é, então, igual a $D(dC_A/dh)_{(h)}$, onde D é um coeficiente de difusão.

Efectuando o balanço (de volume sólido) do componente A , num elemento do leito com altura dh , somos conduzidos à seguinte equação

$$(C_{A(t+dt)} - C_{A(t)})dh = \left(D \frac{dC_A}{dh} \Big|_{(h)} - D \frac{dC_A}{dh} \Big|_{(h-dh)} + K C_{A(h+dh)} C_{B(h)} - K C_{A(h)} C_{B(h-dh)} \right) dt. \quad (1.2.24)$$

A esta equação de balanço corresponde a seguinte equação diferencial

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_A}{\partial h^2} + K \frac{\partial C_A C_B}{\partial h}, \quad (1.2.25)$$

que é equivalente a

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_A}{\partial h^2} + K(1 - 2C_A) \frac{\partial C_A}{\partial h}, \quad (1.2.26)$$

atendendo a que, por definição, $C_A + C_B = 1$. A equação anterior pode ainda ser escrita na seguinte forma adimensional

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = \beta \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + (1 - 2C_A) \frac{\partial C_A}{\partial z}, \quad (1.2.27)$$

$$\text{com} \quad z = \frac{h}{H}, \quad \theta = K \frac{t}{H}, \quad \text{e} \quad \beta = \frac{D}{KH},$$

onde H é a altura total do leito. O grupo adimensional β é designado número de dispersão do separador. Este número mede importância relativa dos mecanismos de dispersão (mistura) e segregação (concentração). Se β tende para ∞ a separação é impossível e o separador comporta-se como um misturador perfeito. Se β tende para zero a separação dá-se na ausência de difusão.

Regime contínuo. Para uma jiga que opera em regime contínuo, com dispersão axial, a equação (1.2.27) escreve-se, agora, do seguinte modo

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = \beta \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \right) + (1 - 2C_A) \frac{\partial C_A}{\partial z} - \frac{\partial C_A}{\partial x} \quad (1.2.28)$$

$$\text{com} \quad x = \frac{X}{KL} v_x,$$

onde X é a coordenada da posição num eixo horizontal, correspondendo $X=0$ à entrada e $X=L$ à saída; v_x é a velocidade (horizontal) de progressão do material no interior do separador.

Um resultado que julgamos ser importante, e para o qual o autor chama a atenção, é o que se obtém quando a solução da equação anterior é calculada no estado estacionário ($t \rightarrow \infty$), na ausência de dispersão axial. As derivadas em ordem ao tempo anulam-se, e a equação passa a escrever-se

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \beta \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + (1 - 2C_A) \frac{\partial C_A}{\partial z}, \quad (1.2.29)$$

a qual é igual à equação para o regime batch, se substituirmos x por θ . Portanto, neste caso, a solução para o regime contínuo, no estado estacionário, é formalmente idêntica à solução do regime batch, no estado transiente. Esta equivalência justifica o uso de testes descontínuos na previsão de resultados para o regime contínuo (Costa, 1993).

Tavares, King (1995)

Estratificação de um leito multicomponente em regime batch. Consideremos um leito constituído por partículas esféricas com igual diâmetro e densidade. Suponhamos, agora, que uma partícula com a mesma forma e dimensão, mas com densidade diferente, é introduzida no leito. A energia potencial gravítica do leito varia com a mudança de posição da partícula introduzida. Esta variação de energia é dada por

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{\text{final}} - E_{\text{inicial}} = \\ &= \rho g V_p H_2 - \rho g V_p H_1 + \rho' g V_p H_1 - \rho' g V_p H_2, \end{aligned} \quad (1.2.30)$$

onde V_p é o volume de uma partícula, ρ é a densidade da partícula introduzida, ρ' é a densidade das partículas vizinhas e H_1 e H_2 (com $H_1 > H_2$) são as alturas inicial e final da partícula introduzida, medidas a partir da rede. Fazendo

$$\Delta H = H_2 - H_1,$$

a equação anterior pode escrever-se

$$\Delta E = g V_p (\rho - \rho') \Delta H. \quad (1.2.31)$$

Fazendo, agora,

$$\Delta H \rightarrow 0,$$

e substituindo ρ' por $\bar{\rho}$, onde $\bar{\rho}$ é a densidade média das partículas do leito, obtemos

$$\frac{dE}{dH} = g V_p (\rho - \bar{\rho}). \quad (1.2.32)$$

A densidade média $\bar{\rho}$ (função de H) é definida pela combinação linear das densidades dos componentes

$$\bar{\rho}(H) = \sum_{i=1}^n C_i(H) \rho_i, \quad (1.2.33)$$

$$\text{com } \sum_{i=1}^n C_i(H) = 1, \quad (1.2.34)$$

onde n é o número de intervalos densimétricos e $C_i(H)$ é a fracção de sólidos em volume (a concentração volumétrica) do componente i .

O gradiente de energia potencial dE/dH (ou o peso aparente) determina que uma partícula migre para cima ou para baixo, dependendo do sinal de $\rho - \bar{\rho}$. Se $\rho > \bar{\rho}$ a partícula move-se para baixo; no caso contrário, a partícula move-se para cima. Assim, considera-se que o fluxo de partículas de densidade ρ_i , resultante do gradiente de energia potencial, é dado por

$$n_{Si}(H) = C_i u \frac{dE}{dH}, \quad (1.2.35)$$

onde u é um coeficiente de mobilidade. Substituindo (1.2.32) em (1.2.35), obtemos

$$n_{Si}(H) = C_i u g V_p (\rho_i - \bar{\rho}). \quad (1.2.36)$$

Na direcção oposta ao fluxo de segregação é admitida a existência de um fluxo difusivo. Este fluxo é descrito pela equação

$$n_{Di}(H) = -D \frac{dC_i}{dH}, \quad (1.2.37)$$

onde o coeficiente D , e também u , são dependentes do calibre e da forma das partículas, mas são independentes da sua densidade.

De acordo com o princípio da minimização da energia potencial de Mayer (1964), o perfil final de estratificação seria o resultado apenas dos fluxos n_S . No entanto, na prática, observa-se que existe mistura de partículas com diferente densidade, mesmo ao fim de um tempo muito longo de jigagem. Considera-se, então, que as concentrações evoluem até se estabelecer um estado de equilíbrio dinâmico entre os fluxos de estratificação e difusão. A condição que define este equilíbrio é dada por

$$n_S + n_D = 0. \quad (1.2.38)$$

Então,

$$\frac{dC_i}{dH} = -\frac{u g V_p}{D} C_i [\rho_i - \bar{\rho}(H)]. \quad (1.2.39)$$

Definindo a altura relativa

$$h = H / H_b, \quad (1.2.40)$$

onde H_b é a altura do leito, podemos escrever

$$\frac{dC_i}{dh} = -\alpha C_i [\rho_i - \bar{\rho}(h)], \quad (1.2.41)$$

$$\text{com } \alpha = \frac{u g V_p H_b}{D}. \quad (1.2.42)$$

O coeficiente α varia entre zero, para um leito perfeitamente misturado, e infinito, para um leito perfeitamente estratificado. Num leito constituído por partículas do mesmo calibre e com formas semelhantes, todas as partículas têm o mesmo valor de α .

Para determinar o perfil de concentração de equilíbrio é necessário resolver o sistema de n equações diferenciais definido por (1.2.41), sujeito as restrições

$$\sum_{i=1}^n C_i(h) = 1 \quad (1.2.43)$$

$$\text{e } \int_0^1 C_i(h) dh = C_i^f, \quad (1.2.44)$$

onde C_i^f é a concentração da espécie i na alimentação. Para $n > 2$, isto é, para sistemas multicomponente, não existe solução analítica. Existe, no entanto, um processo iterativo de resolução desenvolvido pelos autores. Notar que a solução das equações (1.2.41), sujeita a (1.2.43) e (1.2.44), é dificultada pelo facto de não ser possível especificar *a priori* as condições fronteira, uma vez que não é possível saber de antemão a concentração de qualquer espécie no topo ou na base do leito.

Estratificação em regime contínuo. Na jigagem em regime contínuo podem ser distinguidos três subprocessos: a estratificação do leito, produzida pela pulsação vertical da água, o transporte lateral do leito, devido ao escoamento axial da água, e a divisão do leito estratificado em dois produtos (*overflow* e descarga do produto sobre a rede; não é considerada a possibilidade de descarga através da rede).

Na simulação dos subprocessos de estratificação e de transporte é usado o artifício de ponderar as concentrações iniciais C_i^f por um perfil vertical de velocidades $v(h)$, do seguinte modo

$$C_i^f = \frac{\int_0^1 C_i(h) v(h) dh}{\sum_{j=1}^n \int_0^1 C_j(h) v(h) dh}. \quad (1.2.45)$$

Portanto, o sistema de n equações diferenciais (1.2.41) é, agora, sujeito às restrições (1.2.43) e (1.2.45). As velocidades $v(h)$ são definidas pela seguinte equação empírica

$$v(h) = k h + (1 - k) h^2, \quad (1.2.46)$$

onde k é um parâmetro do modelo. Admite-se, assim, que as velocidades $v(h)$ aumentam monotonamente da base para o topo leito, segundo um perfil parabólico.

Na simulação da divisão do leito em dois produtos, considera-se que uma camada, com espessura 2δ , é perfeitamente misturada por este processo. Assim, o fluxo de massa (relativo) do produto denso e a recuperação do componente i são dados por

$$Y(\mu, \delta) = \frac{\int_0^{\mu-\delta} \bar{\rho}(h) v(h) dh + \frac{1}{2} \int_{\mu-\delta}^{\mu+\delta} \bar{\rho}(h) v(h) dh}{\int_0^1 \bar{\rho}(h) v(h) dh} \quad (1.2.47)$$

$$e \quad R_i(\mu, \delta) = \frac{\int_0^{\mu-\delta} C_i(h) v(h) dh + \frac{1}{2} \int_{\mu-\delta}^{\mu+\delta} C_i(h) v(h) dh}{\int_0^1 C_i(h) v(h) dh}, \quad (1.2.48)$$

onde μ é a altura do corte.

Ajuste do modelo a dados experimentais. O modelo *batch* foi ajustado a dados recolhidos na literatura, referentes à jigagem de dois sistemas ternários. Um dos sistemas era constituído por cubos de PVC com igual dimensão. O outro sistema era formado por uma mistura sintética de partículas de carvão e calcário. No caso dos cubos de PVC, o leito, no estado final de equilíbrio, foi segmentado em três estratos. No caso da mistura de carvão e calcário, o leito foi dividido em seis estratos. Em ambos os casos, o modelo descreve bem os resultados das experiências. Os valores ajustados do parâmetro α são 0.113, para os cubos de PVC, e 0.098, para o sistema mineral.

No ajuste do modelo ao regime contínuo foram, igualmente, utilizados dados recolhidos na literatura. Os dados dizem respeito a jigas Baum e Batac, utilizadas na lavagem de carvões. Em alguns casos tratava-se de unidades com dois compartimentos. Especificamente, os dados referem-se à distribuição granulométrica e densitária da alimentação, e à curva de partição da separação. Para os parâmetros k e δ foram conjecturados os valores de 0.3 e 0. Portanto, apenas foram ajustados os parâmetros α e μ . Não foi considerado o efeito de variação do calibre. Verifica-se que o modelo, também neste caso, descreve bem os dados experimentais. Este resultado levou os autores a concluir que α é, de facto, independente da densidade das partículas; assim, o modelo pode, em princípio, prever o resultado de variações na composição da alimentação (embora, de modo não-dinâmico).

Tavares (1999)

Introdução. Este trabalho constitui uma extensão do modelo de Tavares-King (1995). Permite calcular o perfil final de concentração de um leito *batch*, mas neste caso, formado por uma mistura de partículas com densidade e calibre variáveis. O procedimento de cálculo assenta numa técnica de Monte Carlo desenvolvida pelo autor.

Cálculo da energia potencial do leito. Consideremos o leito de uma jiga *batch* representado por um *array* bidimensional de células. Cada linha do *array* corresponde a um estrato horizontal. Cada célula contém o mesmo volume de sólidos (que é constante durante a simulação). Sejam N e M o número de estratos horizontais e o número de células que formam cada estrato. A energia potencial do leito, no caso geral, é dada pela seguinte expressão

$$E = \sum_{i=1}^N m_i g h_i, \quad (1.2.49)$$

onde m_i e h_i são a massa e a posição do centro de gravidade do estrato i . O volume total de sólidos no leito é NMV_c , onde V_c é o volume de sólidos em cada célula.

Se assumirmos que os sólidos estão perfeitamente misturados em cada estrato horizontal, a fracção de sólidos (em volume) em cada estrato é dada por

$$\phi_i = \frac{MV_c}{\Delta h_i A}, \quad (1.2.50)$$

onde A é a área da secção transversal do leito e Δh_i é a altura do estrato i .

A massa total da mistura de sólidos mais líquido que forma cada estrato é dada pela expressão

$$m_i = MV_c \left(\bar{\rho}_i + \rho \frac{1-\phi_i}{\phi_i} \right), \quad (1.2.51)$$

onde ρ é a densidade do líquido e $\bar{\rho}_i$ é a densidade média dos sólidos, definida por

$$\bar{\rho}_i = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \rho_{ij}, \quad (1.2.52)$$

onde ρ_{ij} é a densidade dos sólidos na posição ij .

O centro de gravidade de cada estrato é dado por

$$h_i = \frac{\Delta h_i}{2} + \sum_{j=1}^{i-1} \Delta h_j. \quad (1.2.53)$$

Agora, atendendo a que a fracção de sólidos do leito pode ser expressa por

$$\phi = \frac{MNV_c}{h_b A}, \quad (1.2.54)$$

onde h_b é a altura do leito, a equação (1.2.53) pode ser rescrita do seguinte modo

$$h_i = \frac{\phi h_b}{N} \left(\frac{1}{2\phi_i} + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{\phi_j} \right). \quad (1.2.55)$$

Substituindo (1.2.51) e (1.2.53) em (1.2.49), obtemos

$$E = g h_b V_c \phi \left[\frac{M}{N} \sum_{i=1}^N \left(\bar{\rho}_i + \rho \frac{1-\phi_i}{\phi_i} \right) \left(\frac{1}{2\phi_i} + \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{\phi_j} \right) \right] \quad (1.2.56)$$

Notar que

$$h_b = \sum_{i=1}^N \Delta h_i = \frac{MV_c}{A} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\phi_i}. \quad (1.2.57)$$

A fracção de sólidos em cada estrato pode ser calculada a partir da distribuição granulométrica usando, por exemplo, um modelo empírico de empacotamento. O autor usou o modelo para misturas binárias de Westman-Hugill (1930).

Procedimento de simulação. A cada célula do leito é atribuído um volume de sólidos com uma determinada densidade e calibre, de acordo com a composição da alimentação. Esta atribuição é feita ao acaso de modo a simular um leito perfeitamente misturado. (Quanto maior for o número de células, maior é a precisão da simulação).

O procedimento começa por escolher, ao acaso, duas células. A posição destas duas células é trocada, produzindo uma configuração de teste. A energia potencial do leito é calculada para a configuração de teste e para a configuração original, usando a equação (1.2.56). A configuração de teste é incondicionalmente aceite como o novo estado se a energia diminuir ($\Delta E < 0$). No entanto, se a energia potencial aumentar ($\Delta E > 0$), a configuração de teste é aceite com uma probabilidade dada pela distribuição de Boltzmann, que é expressa por

$$P(\Delta E) = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right). \quad (1.2.58)$$

O termo kT fornece, empiricamente, uma indicação sobre a intensidade do efeito de dispersão no leito de jigagem. Para a aceitação com probabilidade dada por (1.2.58), é gerado um número aleatório ζ no intervalo $[0,1]$; se $\zeta \leq P(\Delta E)$ a configuração de teste passa a constituir o novo estado; mas se $\zeta > P(\Delta E)$ a configuração original é mantida. Este procedimento é repetido até o leito atingir uma configuração estável, que corresponde ao estado de equilíbrio entre os efeitos de estratificação e dispersão.

Resultados. Em leitos constituídos por partículas com igual calibre, verificou-se que os resultados produzidos pelo procedimento atrás descrito e pelo modelo de Tavares-King (1995) são coincidentes. Assim, fica comprovada a validade da utilização empírica da distribuição de Boltzmann para descrever o efeito de dispersão. A validade do procedimento de simulação foi também testada através da comparação com dados recolhidos na literatura. Os dados dizem respeito à jigagem de leitos binários em que existe, simultaneamente, contraste densitário e granulométrico. Verificou-se que o modelo descreve bem os dados experimentais.

Capítulo 2

2 Estratificação de sistemas binários

Sumário

2.1 Introdução

2.2 Conservação da massa dos componentes

2.3 Modelo cinético para sistemas binários

2.4 Discretização e integração das equações de conservação

2.5 Trabalho experimental com misturas de dois componentes

2.6 Ajuste do modelo binário

2.1 Introdução

Neste capítulo, que corresponde à primeira etapa no desenvolvimento do modelo, é considerado o problema da estratificação de um leito *batch*, formado por dois componentes. Trata-se de um passo preliminar que se justifica, porque, por hipótese, admite-se que o problema multicomponente é uma sobreposição de problemas binários.

2.2 Conservação da massa dos componentes

Concentração pontual e concentração média

Consideremos, num leito de jigagem, um volume V , fixo no espaço, com dimensões finitas (que passaremos a designar por *volume finito* ou *célula*). Seja C_{iV} a fracção deste volume ocupada por partículas da espécie i . Então, é válida igualdade

$$\sum_{i=1}^n (C_{iV}) + C_{0V} = 1, \quad (2.2.1)$$

onde n é o número espécies, ou *componentes*, e C_{0V} representa a fracção do volume não ocupada por partículas. Neste contexto, a espécie i refere-se a partículas com igual (ou aproximadamente igual) composição mineralógica e que pertencem a um lote granulométrico suficientemente cerrado (que assegura uma certa regularidade da forma e calibre das partículas). Por convenção, as fracções de volume, ou *concentrações*, dizem respeito ao ponto do ciclo de jigagem em que o leito atinge a máxima contracção. Dada a curta duração de um ciclo de jigagem, consideramos que as concentrações, na prática, variam continuamente no tempo.

Agora, se o leito for constituído por um grande número de partículas sólidas, é também possível considerar que as concentrações são variáveis contínuas no espaço geométrico. Por outras palavras, estamos a considerar que o leito, a um nível macroscópico, constitui um *meio contínuo*. Assim, em qualquer ponto do leito, existirá (por abstracção) o limite

$$C_i = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta V_i}{\Delta V}, \quad (2.2.2)$$

onde ΔV_i representa a parte do volume ΔV ocupada por partículas do componente i e C_i representa a *concentração pontual* deste componente. Atendendo à definição (2.2.2), podemos escrever

$$\sum_{i=1}^n (C_i) + C_0 = 1. \quad (2.2.3)$$

As concentrações C_i e C_{iV} encontram-se ligadas pela seguinte relação

$$C_{iV} = \frac{\int_V C_i dV}{\int_V dV}, \quad (2.2.4)$$

onde se torna claro que C_{iV} é a *concentração média* no componente i , no volume finito V . Notar que os integrais sobre o volume são integrais triplos.

Concentrações reduzidas

Frequentemente, ao longo do texto, na apresentação de dados e resultados, utilizamos *concentrações reduzidas*, que definimos do seguinte modo

$$c_i = \frac{C_{iV}}{1 - C_{0V}} = \frac{C_{iV}}{1 - \varepsilon}, \quad (2.2.5)$$

$$\text{com } \sum_{i=1}^n c_i = 1, \quad (2.2.6)$$

onde c_i é a concentração (média) reduzida do componente i no volume V e ε representa a porosidade média do leito.

Balanço de massa num volume finito do leito

Seja, novamente, o volume finito V , e seja S a superfície que o rodeia. Na análise que vamos efectuar é habitual designar-se V por *volume de controlo* e S por *superfície de controlo*. Num leito de jigagem, a massa dos componentes não é destruída ou criada, isto é, a massa dos componentes conserva-se. Assim, em relação a um volume de controlo, para um dado componente i , podemos escrever

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{taxa de acumulação} \\ \text{de massa no interior} \\ \text{do volume de controlo} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} \text{caudal de saída} \\ \text{de massa através} \\ \text{da superfície de controlo} \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} \text{caudal de entrada} \\ \text{de massa através} \\ \text{da superfície de controlo} \end{array} \right\} = 0.$$

A primeira parcela da expressão anterior é traduzida pelo integral

$$\rho_i \int_V \frac{\partial}{\partial t} C_i dV, \quad (2.2.7)$$

onde ρ_i é a massa específica do material que constitui as partículas do componente i . A segunda e terceira parcelas, por sua vez, são traduzidas pelo seguinte integral, calculado sobre a superfície de controlo S , que é uma superfície fechada,

$$\oint_S \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.2.8)$$

Neste integral, $\mathbf{F}_i$ representa o fluxo de massa do componente i , medido sobre a superfície de controlo. A grandeza $d\mathbf{S}$ simboliza o produto $n dS$, onde $\mathbf{n}$ é o vector unitário normal ao elemento de superfície dS . O vector $\mathbf{n}$ tem o sentido positivo dirigido para fora do volume de controlo V . O produto escalar $\mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{S}$ traduz, então, o caudal elementar de massa do componente i , que atravessa o elemento de superfície dS . Notar que o integral sobre S é um integral duplo.

Em conclusão, a equação que exprime a conservação da massa do componente i , num volume de controlo finito V , pode escrever-se

$$\rho_i \int_V \frac{\partial}{\partial t} C_i dV + \oint_S \mathbf{F}_i \cdot d\mathbf{S} = 0. \quad (2.2.9)$$

Esta equação é habitualmente designada por *forma integral da equação da continuidade*.

Forma diferencial da equação da continuidade

Uma via para obter a *forma diferencial da equação da continuidade*, a partir da equação anterior, consiste em aplicar o *teorema da divergência de Gauss*, ao integral sobre a superfície de controlo S , e transformá-lo, assim, num integral sobre o volume V , isto é,

$$\rho_i \int_V \frac{\partial}{\partial t} C_i dV + \int_V \nabla \cdot \mathbf{F}_i dV = 0. \quad (2.2.10)$$

Agora, como a equação (2.2.10) foi escrita para uma volume de controlo arbitrário, é válida a seguinte equação diferencial

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \nabla \cdot \mathbf{F}_i = 0. \quad (2.2.11)$$

Adoptando o sistema de coordenadas rectangulares, a equação anterior, por extenso, escreve-se

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \frac{\partial}{\partial x} F_{ix} + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy} + \frac{\partial}{\partial z} F_{iz} = 0, \quad (2.2.12)$$

onde F_{ix} , F_{iy} e F_{iz} , são as componentes do fluxo nas direcções do espaço x , y e z . As equações (2.2.11) e (2.2.12), traduzem, portanto, a evolução instantânea dos campos escalares $C_i(x, y, z, t)$.

Por hipótese, para descrever a estratificação de um leito em regime *batch*, bastará considerar a evolução das concentrações na direcção vertical y . Assim, a equação anterior, para este caso, poderá a escrever-se, simplesmente,

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy} = 0. \quad (2.2.13)$$

Na descrição do regime contínuo, para incluir o movimento lateral do leito, será também necessário considerar a evolução das concentrações segundo o eixo horizontal x . Neste caso a equação (2.2.12), escreve-se

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \frac{\partial}{\partial x} F_{ix} + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy} = 0. \quad (2.2.14)$$

(Em jigas com secção transversal variável, como na patente IHC, será igualmente necessária a coordenada z).

Chegados a este ponto, parece razoável admitir que os fluxos F_{ix} e F_{iy} podem ser decompostos na soma de duas parcelas: uma relativa ao *mecanismo de transporte*, que representa a corrente de partículas, que se estabelece no regime contínuo, entre a entrada e as saídas do aparelho; e outra relativa ao *mecanismo de estratificação*, propriamente dito, que representa a separação (concentração) dos componentes. Para o mecanismo de transporte consideram-se as componentes horizontal e vertical. Para o mecanismo de estratificação, que é o único presente no regime *batch*, bastará a direcção vertical. Assim, a equação (2.2.14) passa a escrever-se

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \frac{\partial}{\partial x} F_{ix}^{trans.} + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy}^{trans.} + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy}^{estrat.} = 0. \quad (2.2.15)$$

2.3 Modelo cinético para sistemas binários

Equação da continuidade

Seja, por agora, o problema da jigagem, em regime *batch*, de um leito constituído por duas espécies de partículas. As partículas que tendem a concentrar-se na parte de baixo do leito constituem o *componente A*. As partículas que tendem a concentrar-se na parte de cima do leito, sobre o componente *A*, constituem o *componente B*.

Como vimos no ponto 2.2, a equação que traduz a conservação da massa do componente *A* pode ser escrita do seguinte modo

$$\rho_A \frac{\partial}{\partial t} C_A + \nabla \cdot \mathbf{F}_A = 0. \quad (2.3.1)$$

Para o componente *B* pode ser escrita uma equação do mesmo tipo. Agora, se admitirmos, como primeira aproximação, que no regime *batch* a variação das concentrações na secção transversal do leito é negligenciável, a equação anterior pode escrever-se

$$\rho_A \frac{\partial}{\partial t} C_A + \frac{\partial}{\partial y} F_{Ay} = 0, \quad (2.3.2)$$

onde F_{Ay} é a componente do fluxo de massa da espécie *A*, na direcção vertical *y*. Por convenção, o eixo *y* tem a origem no topo do leito e é orientado para baixo. Recordar que as concentrações referem-se ao ponto do ciclo de jigagem em que o leito atinge a máxima contracção.

Consideramos que os fluxos de massa F_{Ay} e F_{By} têm origem em dois mecanismos: um *mecanismo de segregação (concentração)* e um *mecanismo de dispersão (mistura)*. Esta hipótese, como vimos na introdução (ponto 1.2), foi anteriormente formulada por Costa, 1993 e Tavares, King, 1995. Tratando-se do regime descontinuo, não parece razoável admitir a existência de fluxos de natureza convectiva. Na tradução matemática dos dois mecanismos, em que a ideia central é a *troca de posição entre partículas*, baseámo-nos especificamente no trabalho de Costa (1993).

Segregação binária

O mecanismo de segregação descreve o modo como as partículas dos dois componentes trocam de posição selectivamente: as partículas do componente *A*, situadas em $y-dy/2$,

trocam de posição com as partículas do componente B , situadas em $y+dy/2$. Assim, o fluxo volumétrico de segregação do componente A , que atravessa a secção do leito à cota y , será proporcional à concentração C_A , em $y-dy/2$, e à concentração C_B , em $y+dy/2$, ou seja,

$$f_{Ay}|_y = k C_A(y-dy/2) C_B(y+dy/2), \quad (2.3.3)$$

sendo o respectivo contra-fluxo do componente B dado por

$$f_{By}|_y = -f_{Ay}|_y. \quad (2.3.4)$$

Por outras palavras, estamos a admitir que a *força motora* (“*driving force*”) da segregação dos componentes A e B é o produto das suas concentrações em $y-dy/2$ e $y+dy/2$. Aos fluxos volumétricos dos componentes A e B correspondem os fluxos de massa

$$F_{Ay}|_y = \rho_A k C_A(y-dy/2) C_B(y+dy/2) \quad (2.3.5)$$

$$\text{e} \quad F_{By}|_y = -\rho_B k C_A(y-dy/2) C_B(y+dy/2), \quad (2.3.6)$$

onde ρ_A e ρ_B têm o significado anteriormente atribuído.

O coeficiente k , com dimensões L/T , é uma medida da velocidade a que ocorre a separação entre os componentes A e B . Este coeficiente pode ser função da coordenada y e, eventualmente, pode também ser função das concentrações.

Dispersão binária

O mecanismo de dispersão está ligado à possibilidade de as partículas trocarem de posição do um modo não-selectivo. O seu resultado é amortecer, ou mesmo eliminar, os efeitos da segregação. No caso limite, em que o mecanismo de dispersão anula completamente o mecanismo de segregação, a jiga comportar-se-ia como um misturador perfeito. A dispersão pode ter origem em diferentes fenómenos físicos. Assim, pode estar relacionada com a acção das correntes ascendentes de água, durante a fase de expansão do leito (Costa, 1993). A dispersão pode também ocorrer durante o período de queda das partículas. Se duas partículas, pertencentes a espécies diferentes, tiverem velocidades de queda próximas, a turbulência do meio líquido, ou outra perturbação, pode determinar que a troca de posição seja não-selectiva (isto é, com se fosse *ao acaso*).

Na descrição matemática da dispersão adoptámos a equação da difusão (lei de Fick). Esta equação está de acordo com o principal efeito (macroscópico) do mecanismo de dis-

persão: anular os gradientes de concentração. Assim, o fluxo volumétrico (líquido) do componente A , que atravessa a secção do leito à cota y , é dado por

$$f_{Ay}|_y = -D \frac{\partial C_A}{\partial y} \Big|_y. \quad (2.3.7)$$

Porque se trata da troca de posição entre partículas, ao fluxo do componente A opõe-se um contra-fluxo (líquido) do componente B , tal que

$$f_{By}|_y = -f_{Ay}|_y. \quad (2.3.8)$$

Ou seja, a *força motora* da dispersão dos componentes A e B é o gradiente de concentração do componente A (ou, de um modo equivalente, o gradiente de concentração do componente B). O coeficiente de dispersão D tem dimensões L^2/T . Este coeficiente pode ser função da coordenada y e (ou) função das concentrações. Aos fluxos volumétricos (2.3.7) e (2.3.8) correspondem os fluxos de massa

$$F_{Ay}|_y = -\rho_A D \frac{\partial C_A}{\partial y} \Big|_y \quad (2.3.9)$$

$$\text{e} \quad F_{By}|_y = \rho_B D \frac{\partial C_A}{\partial y} \Big|_y. \quad (2.3.10)$$

Segregação-dispersão binárias

Substituindo as equações dos fluxos (2.3.5) e (2.3.9) na equação que traduz a conservação da massa do componente A , obtemos, finalmente,

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (k C_A C_B) - \frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) = 0, \quad (2.3.11)$$

$$\text{com} \quad \frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{\partial C_B}{\partial t} = 0. \quad (2.3.12)$$

As equações (2.3.11) e (2.3.12) mostram que, num sistema binário, existem apenas uma concentração independente, um fluxo de segregação independente e um fluxo de dispersão independente. Existem, também, apenas um único coeficiente de segregação e um único coeficiente de dispersão. É importante notar que a dedução das equações (2.3.11) e (2.3.12) pressupõe sempre que a concentração de vazios C_0 é constante e uniforme em todo o leito. Por outras palavras, considera-se que a troca de posição entre partículas se dá sem alteração do volume dos espaços intersticiais.

2.4 Discretização e integração das equações de conservação

Método dos volumes finitos – Apresentação

Na integração da equação diferencial (2.3.11), referente à segregação-dispersão binárias, recorreremos ao *método dos volumes finitos*. Este é o nome dado à técnica que permite discretizar, directamente no espaço físico, a forma integral de uma lei de conservação. A aplicação desta técnica assegura que as quantidades básicas, como a massa, a quantidade de movimento, a energia, também se conservam ao nível discreto. O método dos volumes finitos pode, também, ser entendido com uma variante do método das diferenças finitas, aplicada à forma diferencial conservativa de uma lei de conservação, em que se usam coordenadas arbitrárias (Hirsch, 1988).

Como vimos nos pontos 2.2 e 2.3, a conservação da massa do componente A é traduzida pela equação diferencial (2.3.11) ou, de um modo equivalente, pela forma integral

$$\rho_A \int_V \frac{\partial}{\partial t} C_A dV + \oint_S \mathbf{F}_A \cdot d\mathbf{S} = 0, \quad (2.4.1)$$

onde os fluxos $\mathbf{F}_A$ são definidos pela equações (2.3.5) e (2.3.9). Para o componente B é possível escrever uma equação do mesmo tipo. Agora, o primeiro passo na aplicação do método dos volumes finitos, consiste em substituir a equação anterior pela seguinte forma discretizada

$$\rho_A V_i \frac{\partial C_{Ai}}{\partial t} + \sum_{\text{faces}} \mathbf{F}_A \cdot \mathbf{S} = 0, \quad (2.4.2)$$

ou seja, o espaço físico é dividido (discretizado) num conjunto de células (volumes finitos), onde V_i é o volume dessas células. A concentração C_{Ai} refere-se ao volume finito i . O somatório refere-se às faces externas do mesmo volume finito.

Apresentamos, em seguida, um conjunto de importantes características gerais do método dos volumes finitos, tomando como exemplo a equação (2.4.2):

1. A soma dos volumes finitos deve cobrir a totalidade do sistema em estudo. (Em certas condições, pode haver sobreposição de dois ou mais volumes).
2. A localização precisa da variável C_A , no interior do volume finito, não é explícita. Assim, a concentração C_{Ai} não se refere a nenhum ponto em particular dentro do volume finito i , devendo ser considerada como um valor médio da variável C_A no volume i . Neste caso, C_{Ai} representa a fracção do volume finito

- i ocupada por partículas do componente A (ou seja, é a concentração média do componente A no volume i).
3. As coordenadas dos vértices das células aparecem apenas na determinação do seu volume e no cálculo das áreas das faces.
 4. A equação (2.4.2) exprime que a variação do valor médio da C_A , num intervalo de tempo, é igual à soma dos fluxos trocados com as células vizinhas. Quando são consideradas duas células adjacentes, o fluxo através da face comum contribui para as duas células, com sinais opostos.
 5. As condições fronteira do sistema podem facilmente ser postas em equação. Por exemplo, no caso de uma parede sólida, a componente dos fluxos normal à parede é nula: $F \cdot S = 0$.
 6. A equação (2.4.2) corresponde apenas à formulação geral do método dos volumes finitos, tendo o utilizador que definir como calcular o volume de cada célula, como calcular as áreas das faces, e como *aproximar* os fluxos que atravessam essas faces.

Como veremos, em pormenor, no ponto 2.5, dedicado à descrição do trabalho experimental, a solução da equação diferencial (2.3.11), calculada pelo método dos volumes finitos, está em harmonia com o modo como foi efectuada a análise do leito de jigagem. A análise consistiu, fundamentalmente, em segmentar o leito em estratos horizontais. Em seguida, foram calculadas as concentrações *médias* dos componentes, em cada estrato.

Segregação binária

Na aplicação do método dos volumes finitos, à resolução da equação (2.3.11), o leito foi dividido em N volumes finitos, com forma paralelepipedica, como mostra a figura 2.4.1. As dimensões Δx e Δz correspondem, respectivamente, à largura máxima e à profundidade máxima do leito. A dimensão Δy corresponde à altura dos volumes finitos. Assim, se H representar a altura total do leito: $\Delta y = H/N$.

No caso em que os fluxos têm origem apenas na segregação dos dois componentes, atendendo à equação (2.3.5), podemos escrever

$$\begin{aligned} \sum_{\text{faces}} F_A \cdot S &= (F_A \cdot S)_{i-1/2} + (F_A \cdot S)_{i+1/2} \approx \\ &\approx \rho_A (k_{i+1/2} C_{Ai} C_{Bi+1} - k_{i-1/2} C_{Ai-1} C_{Bi}) \Delta x \Delta z, \end{aligned} \quad (2.4.3)$$

onde $\Delta x \Delta z$ é a área das faces horizontais dos paralelepípedos. Substituindo este resultado na equação (2.4.2), obtemos

$$\rho_A \Delta x \Delta y \Delta z \left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i + \rho_A (k_{i+1/2} C_{Ai} C_{Bi+1} - k_{i-1/2} C_{Ai-1} C_{Bi}) \Delta x \Delta z = 0, \quad (2.4.4)$$

onde $\Delta x \Delta y \Delta z$ representa o volume das células em que o leito foi discretizado. Dividindo por $\rho_A \Delta x \Delta y \Delta z$, a equação anterior passa a escrever-se

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i + \frac{k_{i+1/2} C_{Ai} C_{Bi+1} - k_{i-1/2} C_{Ai-1} C_{Bi}}{\Delta y} = 0. \quad (2.4.5)$$

Finalmente, se aproximarmos a derivada parcial no tempo por

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^n \approx \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t}, \quad (2.4.6)$$

obtemos a seguinte equação às diferenças

$$\frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} + \frac{k_{i+1/2}^n C_{Ai}^n C_{Bi+1}^n - k_{i-1/2}^n C_{Ai-1}^n C_{Bi}^n}{\Delta y} = 0. \quad (2.4.7)$$

O índice n diz respeito ao instante t_n , sendo válida a expressão $t_{n+1} = t_n + \Delta t$. A equação anterior pode ser facilmente resolvida (explicitamente), isolando a concentração relativa ao instante t_{n+1} .

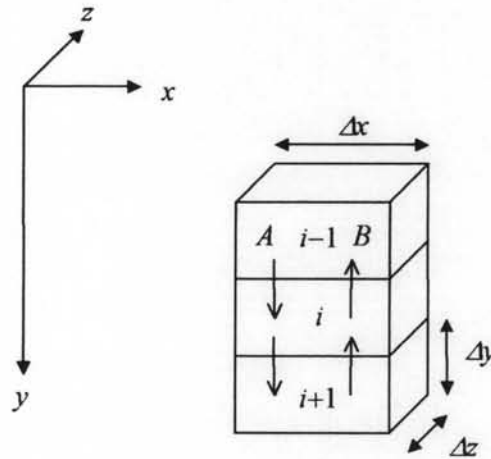


Figura 2.4.1

As condições fronteira determinam que os fluxos de partículas para fora do sistema são nulos. Então, para as células 1 e N , temos

$$\frac{C_{A1}^{n+1} - C_{A1}^n}{\Delta t} + \frac{k_{1+1/2}^n C_{A1}^n C_{B2}^n}{\Delta y} = 0 \quad (2.4.8)$$

$$\text{e} \quad \frac{C_{AN}^{n+1} - C_{AN}^n}{\Delta t} - \frac{k_{N-1/2}^n C_{AN-1}^n C_{BN}^n}{\Delta y} = 0. \quad (2.4.9)$$

Erro local de truncatura

Como vimos no ponto anterior, a derivada parcial no tempo da equação diferencial (2.3.11) é aproximada por

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^n \approx \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t}, \quad (2.4.6)$$

ou seja, é usada uma *diferença à direita* de primeira ordem. Então, o esquema numérico (2.4.7) tem precisão de primeira ordem no tempo. Por sua vez, a derivada parcial no espaço, referente à segregação, é aproximada por

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} (k C_A C_B) \right)_i^n \approx \frac{k_{i+1/2}^n C_{Ai}^n C_{Bi}^n - k_{i-1/2}^n C_{Ai-1}^n C_{Bi}^n}{\Delta y}, \quad (2.4.10)$$

ou seja, neste caso, é usada uma *diferença centrada* de primeira ordem, onde a função é avaliada nos pontos $(i-1/2, n)$ e $(i+1/2, n)$. Então, podemos concluir que o esquema numérico (2.4.7) tem precisão de segunda ordem no espaço. Nestas condições, a equação às diferenças (2.4.7), como aproximação à equação diferencial (2.3.11), quando D é igual a zero, tem um erro local de truncatura que tende a ser proporcional a Δt e a Δy^2 , quando Δt e Δy tendem para zero, isto é,

$$\varepsilon_T = O(\Delta t) + O(\Delta y^2). \quad (2.4.11)$$

Precisão de segunda ordem no tempo – Esquema preditor-corrector

Para obter um esquema com precisão de segunda ordem no tempo, considerámos a equação diferencial (2.3.11), com D igual a zero, satisfeita no ponto intermédio

$$t_{n+1/2} = (n + \frac{1}{2}) \Delta t$$

e, em seguida, substituímos a derivada

$$\frac{\partial}{\partial t} (k C_A C_B)$$

pela média das suas aproximações nos instantes n e $n+1$. Por outras palavras, a equação

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^{n+1/2} + \left(\frac{\partial}{\partial y} (k C_A C_B) \right)_i^{n+1/2} = 0 \quad (2.4.12)$$

foi aproximada por

$$\frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left[\frac{k_{i+1/2}^n C_{Ai}^n C_{Bi+1}^n - k_{i-1/2}^n C_{Ai-1}^n C_{Bi}^n}{\Delta y} + \right.$$

$$+ \frac{k_{i+1/2}^{n+1} C_{Ai}^{n+1} C_{Bi+1}^{n+1} - k_{i-1/2}^{n+1} C_{Ai-1}^{n+1} C_{Bi}^{n+1}}{\Delta y} \Big] = 0. \quad (2.4.13)$$

Neste novo esquema, a derivada parcial no tempo é aproximada por uma diferença centrada de primeira ordem, o que permite, então, alcançar precisão de segunda ordem.

No entanto, o esquema (2.4.13) tem uma grande desvantagem: o cálculo (implícito) das concentrações no instante $n+1$ exige a resolução de um sistema de equações não-lineares. Com o objectivo de evitar esta dificuldade, adoptámos o seguinte procedimento do tipo predictor-corrector:

$$\text{preditor: } \frac{\hat{C}_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} + \frac{k_{i+1/2}^n C_{Ai}^n C_{Bi+1}^n - k_{i-1/2}^n C_{Ai-1}^n C_{Bi}^n}{\Delta y} = 0, \quad (2.4.14)$$

as concentrações *previstas* para o instante $n+1$ e as concentrações no instante n são, agora, usadas no corrector,

$$\begin{aligned} \text{corrector: } \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \Bigg[& \frac{k_{i+1/2}^n C_{Ai}^n C_{Bi+1}^n - k_{i-1/2}^n C_{Ai-1}^n C_{Bi}^n}{\Delta y} + \\ & + \frac{\hat{k}_{i+1/2}^{n+1} \hat{C}_{Ai}^{n+1} \hat{C}_{Bi+1}^{n+1} - \hat{k}_{i-1/2}^{n+1} \hat{C}_{Ai-1}^{n+1} \hat{C}_{Bi}^{n+1}}{\Delta y} \Bigg] = 0. \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

Neste esquema, a derivada parcial no tempo é, ainda, aproximada por uma diferença centrada de primeira ordem, o que permite alcançar precisão de segunda ordem no tempo. A resolução das equações (2.4.14) e (2.4.15) pode ser efectuada explicitamente, isolando as concentrações $\hat{C}_{Ai}^{n+1}$ e C_{Ai}^{n+1} .

Nota bibliográfica: A fórmula (2.4.13) é baseada no esquema de Crank-Nicolson, que é usado frequentemente na resolução da equação da difusão (Hirsch, 1988, Smith, 1985). As fórmulas (2.4.14) e (2.4.15), por sua vez, baseiam-se no esquema de McCormack, que se usa, por exemplo, para resolver equações hiperbólicas de primeira ordem (Hirsch, 1988).

Dispersão binária

Consideremos, agora, o problema da integração numérica da equação (2.3.11), quando k é igual a zero, isto é, quando existem apenas fluxos de dispersão. Na aplicação do método dos volumes finitos, o leito é, novamente, dividido em N volumes finito com forma paralelepipedica (ver figura 2.4.2).

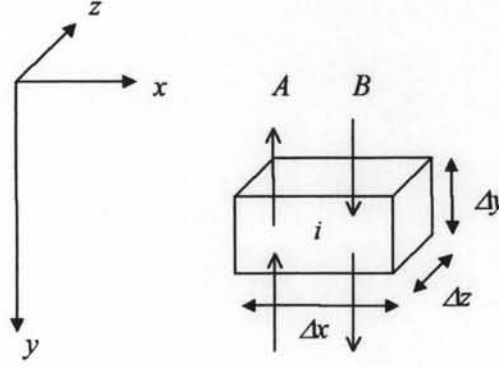


Figura 2.4.2

Para a célula i é válida a seguinte forma discretizada da equação da continuidade do componente A

$$\rho_A \Delta x \Delta y \Delta z \left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i + (F_A \cdot S)_{i-1/2} + (F_A \cdot S)_{i+1/2} = 0, \quad (2.4.16)$$

onde, tal como anteriormente, $\Delta x \Delta y \Delta z$ representa o volume da célula. De acordo com a equação (2.3.9), a componente vertical dos fluxos de dispersão, que entram e (ou) saem da célula i , é dada por

$$F_{Ay(i-1/2)} = -\rho_A D_{i-1/2} \left(\frac{\partial C_A}{\partial y} \right)_{i-1/2}, \quad (2.4.17)$$

$$F_{Ay(i+1/2)} = -\rho_A D_{i+1/2} \left(\frac{\partial C_A}{\partial y} \right)_{i+1/2}. \quad (2.4.18)$$

Agora, se considerarmos as seguintes aproximações

$$F_{Ay(i-1/2)} \approx -\rho_A D_{i-1/2} \frac{C_{Ai} - C_{Ai-1}}{\Delta y}, \quad (2.4.19)$$

$$F_{Ay(i+1/2)} \approx -\rho_A D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1} - C_{Ai}}{\Delta y}, \quad (2.4.20)$$

podemos escrever

$$(F_A \cdot S)_{i-1/2} = \rho_A D_{i-1/2} \frac{C_{Ai} - C_{Ai-1}}{\Delta y} \Delta x \Delta z, \quad (2.4.21)$$

$$(F_A \cdot S)_{i+1/2} = -\rho_A D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1} - C_{Ai}}{\Delta y} \Delta x \Delta z, \quad (2.4.22)$$

onde $\Delta x \Delta z$ é a área das faces horizontais da célula i . Substituindo as equações (2.4.21) e (2.4.22) na equação de balanço do componente A , obtemos

$$\rho_A \Delta x \Delta y \Delta z \left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i - \rho_A \Delta x \Delta z \left[D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1} - C_{Ai}}{\Delta y} - D_{i-1/2} \frac{C_{Ai} - C_{Ai-1}}{\Delta y} \right] = 0 \quad (2.4.23)$$

e se dividirmos a equação anterior por $\rho_A \Delta x \Delta y \Delta z$, podemos escrever

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i - D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1} - C_{Ai}}{\Delta y^2} + D_{i-1/2} \frac{C_{Ai} - C_{Ai-1}}{\Delta y^2} = 0. \quad (2.4.24)$$

Tal como no caso da segregação, a derivada parcial no tempo é aproximada por

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^n \approx \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t}, \quad (2.4.6)$$

pelo que, substituindo esta aproximação na equação (2.4.24), obtemos, finalmente,

$$\frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} - \left(D_{i+1/2}^n \frac{C_{Ai+1}^n - C_{Ai}^n}{\Delta y^2} - D_{i-1/2}^n \frac{C_{Ai}^n - C_{Ai-1}^n}{\Delta y^2} \right) = 0. \quad (2.4.25)$$

As condições fronteira determinam que os fluxos de partículas para fora do leito são nulos. Assim, para as células 1 e N são válidas as seguintes equações

$$\frac{C_{A1}^{n+1} - C_{A1}^n}{\Delta t} - D_{1+1/2}^n \frac{C_{A2}^n - C_{A1}^n}{\Delta y^2} = 0, \quad (2.4.26)$$

$$\frac{C_{AN}^{n+1} - C_{AN}^n}{\Delta t} + D_{N-1/2}^n \frac{C_{AN}^n - C_{AN-1}^n}{\Delta y^2} = 0. \quad (2.4.27)$$

Precisão de segunda ordem no tempo – Método de Crank-Nicolson

Como vimos no ponto anterior, a derivada parcial no tempo da equação diferencial (2.3.11), é aproximada por uma *diferença à direita* de primeira ordem. A derivada parcial no espaço, referente à dispersão, é aproximada por uma *diferença centrada* de primeira ordem, onde a função é avaliada nos pontos $(i-1/2, n)$ e $(i+1/2, n)$. Então, o esquema numérico (2.4.25), como aproximação à equação diferencial (2.3.11), quando k é igual a zero, tem precisão de primeira ordem no tempo e precisão de segunda ordem no espaço. Neste ponto, deduzimos um esquema alternativo, que permite alcançar precisão de segunda ordem, simultaneamente, no tempo e no espaço. O novo esquema constitui o *método de Crank-Nicolson*.

Seja a equação diferencial (2.3.11), com k igual a zero, satisfeita no ponto intermédio

$$t_{n+1/2} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \Delta t,$$

isto é,

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^{n+1/2} - \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) \right)_i^{n+1/2} = 0. \quad (2.4.28)$$

Agora, se a derivada

$$\left(\frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) \right)_i^{n+1/2},$$

for substituída pela média das suas aproximações nos instantes n e $n+1$, ou seja,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial y} \left(D \frac{\partial C_A}{\partial y} \right) \right)_i^{n+1/2} \approx \frac{1}{2} \left[D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1}^n - C_{Ai}^n}{\Delta y^2} - D_{i-1/2} \frac{C_{Ai}^n - C_{Ai-1}^n}{\Delta y^2} + \right. \\ \left. + D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1}^{n+1} - C_{Ai}^{n+1}}{\Delta y^2} - D_{i-1/2} \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right] \end{aligned} \quad (2.4.29)$$

e se a derivada no tempo for aproximada por

$$\left(\frac{\partial C_A}{\partial t} \right)_i^{n+1/2} \approx \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t}, \quad (2.4.30)$$

podemos escrever

$$\begin{aligned} \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai}^n}{\Delta t} - \frac{1}{2} \left[D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1}^n - C_{Ai}^n}{\Delta y^2} - D_{i-1/2} \frac{C_{Ai}^n - C_{Ai-1}^n}{\Delta y^2} + \right. \\ \left. + D_{i+1/2} \frac{C_{Ai+1}^{n+1} - C_{Ai}^{n+1}}{\Delta y^2} - D_{i-1/2} \frac{C_{Ai}^{n+1} - C_{Ai-1}^{n+1}}{\Delta y^2} \right] = 0. \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

No esquema (2.4.31), isto é, no método de Crank-Nicolson, a derivada no tempo é aproximada por uma diferença finita centrada de primeira ordem. Então, é possível alcançar precisão de segunda ordem no tempo. Notar que considerámos o coeficiente de dispersão constante no tempo, embora seja função da coordenada espacial y .

A resolução do sistema de equações (2.4.31), em ordem às concentrações no instante $n+1$, é facilitada se o escrevermos sob a seguinte forma matricial

$$A C_A^{n+1} = B C_A^n, \quad (2.4.32)$$

onde os vectores das concentrações são definidos por

$$C_A^n = [C_{A1}^n, C_{A2}^n, \dots, C_{AN}^n]^T. \quad (2.4.33)$$

A matriz A dos coeficientes é uma matriz tridiagonal, cujas características permitem aplicar o *algoritmo de Thomas*, sem necessidade de pivotagem.

Segregação-dispersão – Métodos dos incrementos fraccionários

Neste ponto, consideramos o problema da resolução numérica da equação diferencial (2.3.11), quando os coeficientes k e D são simultaneamente diferentes de zero. Para tal,

recorremos a um procedimento, muito simples, que se baseia no *método dos incrementos fraccionários* (“*method of fractional steps*” ou “*time splitting method*”). Este método é frequentemente utilizado em problemas do tipo advecção-difusão e em problemas multidimensionais (Press et al., 1986, Ames, 1992).

Suponhamos que pretendemos resolver a seguinte equação diferencial parcial

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu, \quad (2.4.34)$$

onde L é um determinado operador. O operador L não é necessariamente linear, mas pode ser escrito como uma soma linear de m parcelas, ou seja,

$$\frac{\partial u}{\partial t} = L_1 u + L_2 u + \dots + L_m u. \quad (2.4.35)$$

Agora, suponhamos que para cada equação

$$\frac{\partial u}{\partial t} = L_1 u,$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = L_2 u, \text{ etc.},$$

é conhecido um esquema numérico que permite actualizar a variável u , do instante n para o instante $n+1$. Assim, podemos escrever

$$\begin{aligned} u^{n+1} &= U_1(u^n, \Delta t), \\ u^{n+1} &= U_2(u^n, \Delta t), \\ &\dots \\ u^{n+1} &= U_m(u^n, \Delta t), \end{aligned} \quad (2.4.36)$$

onde os operadores U_1 , U_2 , etc., representam os esquemas numéricos parcelares. Uma versão do método dos incrementos fraccionários, consiste em passar do instante n ao instante $n+1$, através da seguinte sequência de cálculos (Press et al., 1986)

$$\begin{aligned} u^{n+1/m} &= U_1(u^n, \Delta t) \\ u^{n+2/m} &= U_2(u^{n+1/m}, \Delta t) \\ &\dots \\ u^{n+1} &= U_m(u^{n+(m-1)/m}, \Delta t). \end{aligned} \quad (2.4.37)$$

O método que acabamos de apresentar pode, por exemplo, aplicar-se à resolução da equação para o *transporte advectivo-difusivo*

$$\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} - D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0. \quad (2.4.38)$$

Neste caso, com vantagem, pode usar-se um esquema explícito para o operador advecção (o método de Lax-Wendroff, por exemplo) e um esquema implícito para o operador difusão (o método de Crank-Nicolson, por exemplo) – Press et al., 1986.

À semelhança do exemplo anterior, na resolução da equação (2.3.11), aplicámos o esquema predictor-corrector ao operador segregação e o método de Crank-Nicolson ao operador dispersão, ou seja,

$$C_A^{n+1/2} = U_{PC}(C_A^n, \Delta t), \quad (2.4.39)$$

$$C_A^{n+1} = U_{CN}(C_A^{n+1/2}, \Delta t). \quad (2.4.40)$$

No entanto, como os operadores U_{PC} e U_{CN} não são comutativos, para alcançar precisão de segunda ordem no tempo, o método dos incrementos fraccionários foi implementado do seguinte modo

$$C_A^{n+1/2} = U_{PC}(C_A^n, \Delta t), \quad (2.4.41)$$

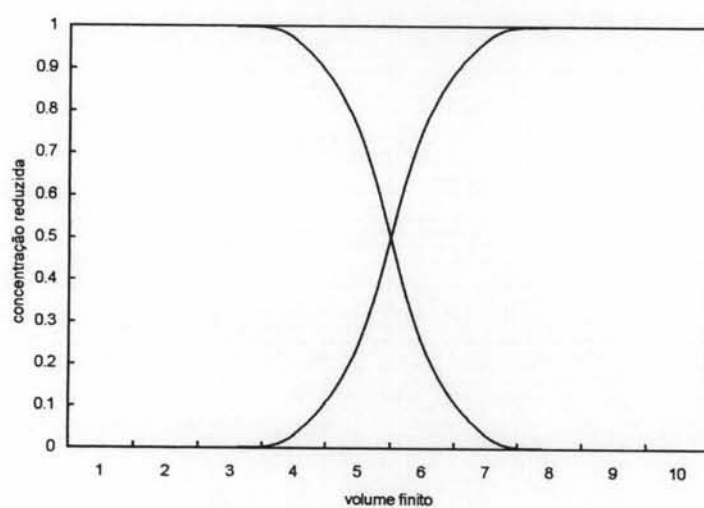
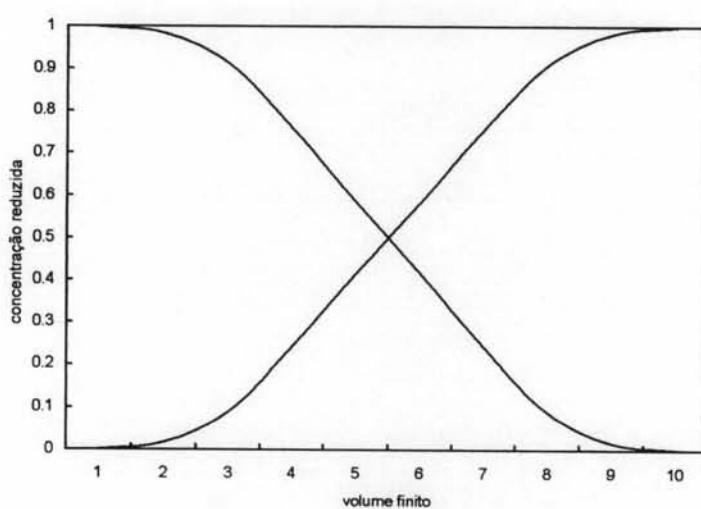
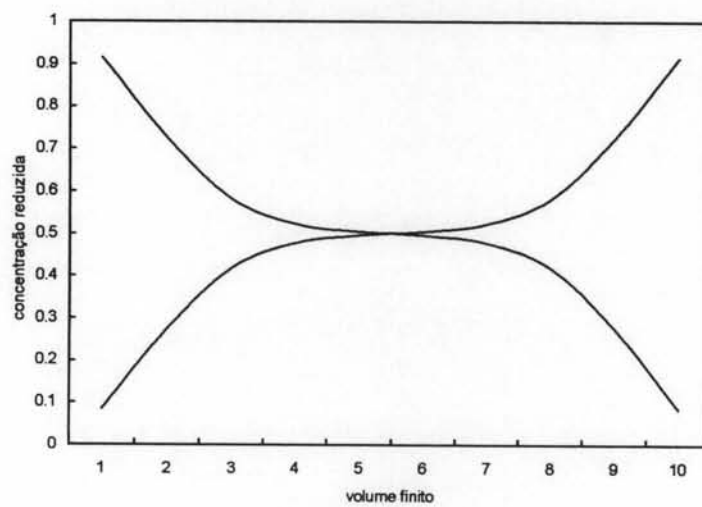
$$C_A^{n+1} = U_{CN}(C_A^{n+1/2}, \Delta t). \quad (2.4.42)$$

$$C_A^{n+3/2} = U_{CN}(C_A^{n+1}, \Delta t). \quad (2.4.43)$$

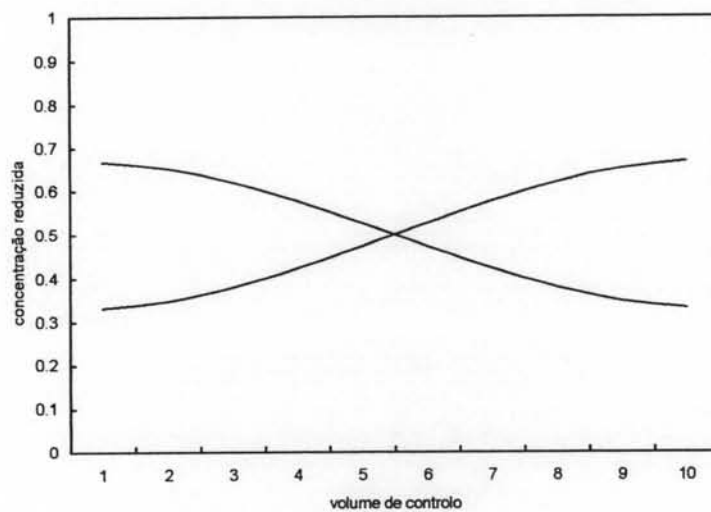
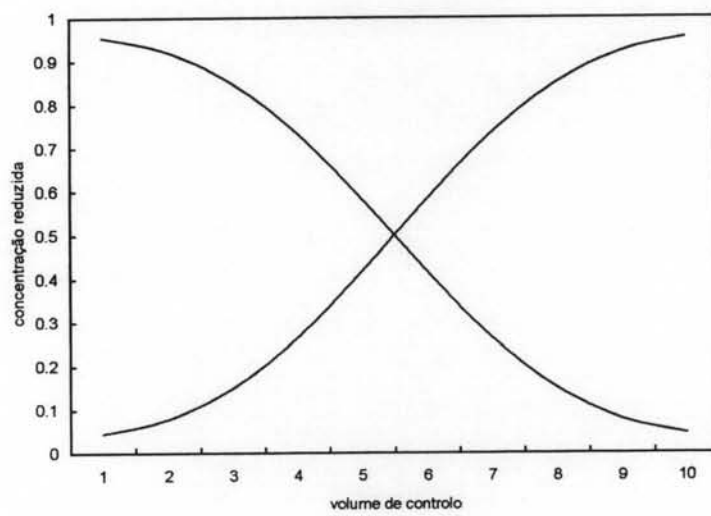
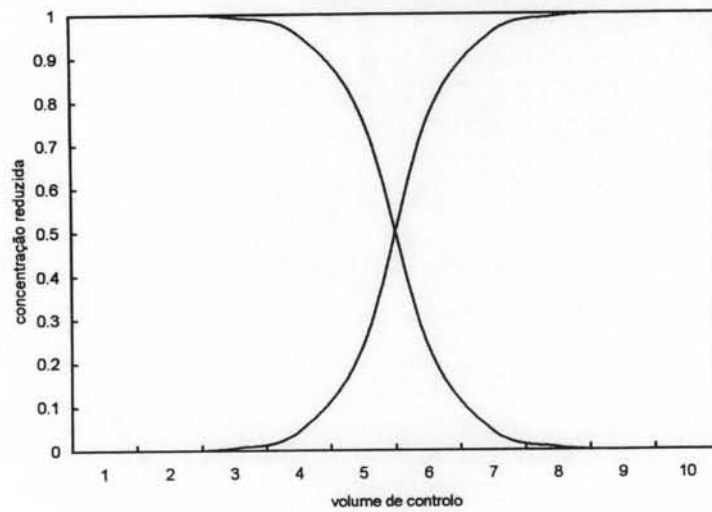
$$C_A^{n+2} = U_{PC}(C_A^{n+3/2}, \Delta t), \quad (2.4.44)$$

Simulação

Nos gráficos 2.4.1 exemplifica-se um processo de segregação (estratificação) com dois componentes. O sistema, no estado inicial, encontra-se perfeitamente misturado. Os dois componentes existem na proporção de 50/50. O coeficiente de segregação vale 0.1 cm/s. Nos gráficos 2.4.2 é exemplificado um processo de dispersão (mistura), também com dois componentes. Neste caso, o sistema, no estado inicial, encontra-se perfeitamente estratificado. Os dois componentes existem, igualmente, na proporção de 50/50. O coeficiente de dispersão foi fixado em 0.1 cm²/s. Nos dois casos, a porosidade média do leito é igual a 0.5, o passo de integração Δt é igual a 0.5 s e altura dos volumes finitos Δy é igual a 1 cm.



Gráficos 2.4.1: Segregação (estratificação) de dois componentes.
Tempo de simulação: 60, 150 e 235 s.



Gráficos: 2.4.2: Dispersão (mistura) de dois componentes.

Tempo de simulação: 4, 30 e 135 s.

2.5 Trabalho experimental com misturas de dois componentes

Dispositivo laboratorial

A jiga. Trata-se de uma jiga Denver. É, portanto, um aparelho com crivo fixo, sendo a pulsação da água provocada pelo movimento de um diafragma de borracha. O diafragma sobe e desce, num movimento harmónico, por acção de um sistema de biela-manivela, accionado, por sua vez, por um motor eléctrico. A excentricidade da manivela é regulável, sendo assim possível controlar a amplitude do ciclo de jigagem. O dispositivo conta ainda com uma válvula rotativa, sincronizada com o movimento do diafragma, que controla a entrada de água pelo *hutch*. É, então, possível reforçar a expansão do leito durante a descida do diafragma ou, em alternativa, anular o efeito de sucção durante a subida. A frequência da pulsação produzida é de cerca de 200 ciclos por minuto. Para compartimento de jigagem foram fabricadas duas células em vidro acrílico (*perspex*). Uma célula destina-se à observação do leito. A outra célula é destinada à sua análise, permitindo segmentá-lo em estratos horizontais.

A célula de observação tem uma altura total de 40 cm. A sua secção interna tem a forma de um rectângulo com os cantos arredondados e mede 152 cm². O minério é sustentado por uma rede metálica, com malha quadrada, com 2 mm de luz. Na parte superior da célula, a secção é dividida em quatro subsecções, com o objectivo de eliminar o movimento de balanço da água gerado pela pulsação.

A célula de análise é formada pela sobreposição de 25 anéis com a altura de 10 mm e, na parte superior, por um segmento inteiriço com 15 cm de altura. O sistema de anéis destina-se a segmentar o leito em estratos horizontais com altura conhecida. A secção interna dos anéis e da parte inteiriça tem a forma de um rectângulo com os cantos arredondados. Esta secção mede 156 cm². A rede e o sistema de *buffers* são idênticos aos da célula de observação.

O minério. Utilizámos uma mistura artificial de calcário e minério de magnetite. O minério de magnetite foi recolhido na mina abandonada de Vila Cova (distrito de Vila Real). O calcário existia em depósito no laboratório. Ambos os materiais começaram por ser fragmentados, primeiro num britador Blake e depois num granulador de rolos, de modo a adquirirem a granulometria pretendida – 100% abaixo dos 10 mm. Em seguida, os materiais foram crivados, produzindo os seguintes lotes:

- 8.0 a 6.7 mm,
- 6.7 a 4.75 mm,
- 4.75 a 3.35 mm,
- 3.35 a 2.36 mm.

Após a crivagem, o minério de magnetite foi concentrado num separador magnético de disco, de baixa intensidade e com funcionamento por via seca. Existia a possibilidade de regular a intensidade do campo magnético do separador, fazendo variar a tensão de alimentação das bobinas. Assim, durante a separação foi usada uma tensão muito baixa, com o objectivo de produzir um concentrado com elevado teor e reduzida dispersão. Para controlar o teor médio dos concentrados foram recolhidas 4 amostras, uma por cada lote granulométrico. Após a sua moagem num moinho de anéis, onde adquiriram uma granulometria 100% abaixo de 100#, as amostras foram tratadas num tubo Davis. As fracções do material magnético retido são apresentadas no quadro 2.5.1. Os resultados indicam que o teor dos concentrados é relativamente elevado, 70% de minerais magnéticos, e que é aproximadamente igual para os quatro lotes.

Ensaio no tubo Davis – Quadro 2.5.1

lote	massa total (g)	massa retida (g)	fracção retida
8.0 / 6.7 mm	102	71	0.696
6.7 / 4.75 mm	101	71	0.703
4.75 / 3.35 mm	103	73	0.709
3.35 / 2.36 mm	103	72	0.699

Para determinar a densidade média de cada lote de concentrado foram recolhidas mais 4 amostras e, após a sua pesagem, foi medido, numa proveta graduada, o volume de água deslocado. Para os valores de densidade obtidos foram calculados intervalos de confiança aproximados. Para tal, considerámos que o erro de pesagem é desprezável em relação ao erro de medida do volume e que este último erro, em aproximadamente 95% dos casos, é de ± 2 ml ($\pm$ uma divisão da escala). Os resultados destes ensaios, assim como os intervalos de confiança aproximados, são apresentados no quadro 2.5.2. Podemos, então, concluir que o teor é aproximadamente igual para os quatro lotes e que a densidade média dos sólidos, retendo apenas uma casa decimal, vale 4.1.

Foi também determinada a densidade média dos lotes de calcário. Os resultados são apresentados no quadro 2.5.3. Para este material a densidade média dos sólidos tem um valor aproximado de 2.7.

Ensaio com proveta graduada – Magnetite – Quadro 2.5.2

lote	massa (g)	vol. deslocado (ml)	densidade	erro estimado*
8.0 / 6.7 mm	251	62	4.05	± 0.13
6.7 / 4.75 mm	272	66	4.12	± 0.13
4.75 / 3.35 mm	284	70	4.06	± 0.12
3.35 / 2.36 mm	261	64	4.08	± 0.13

Ensaio com proveta graduada – Calcário – Quadro 2.5.3

lote	massa (g)	vol. deslocado (ml)	densidade	erro estimado*
8.0 / 6.7 mm	179	66	2.71	± 0.09
6.7 / 4.75 mm	159	60	2.65	± 0.09
4.75 / 3.35 mm	182	68	2.68	± 0.08
3.35 / 2.36 mm	167	62	2.69	± 0.09

* valor aproximado do intervalo de confiança a 95%

Procedimentos

Observação em câmara lenta. Filmámos, em video, a jigagem de uma mistura de partículas de calcário e magnetite, na proporção 70/30 em volume de sólidos. Foi utilizada a célula de observação. As partículas pertenciam ao lote 4.75 mm a 3.35 mm e o leito tinha uma altura de 10 cm. No instante inicial as concentrações eram uniformes. Passando as imagens em câmara lenta, observou-se:

Quando o diafragma desce, o leito sobe em bloco, afastando-se cerca de 1 cm da rede. Durante a subida, o leito não expande e não se registam trocas de posição entre partículas. As partículas na base do leito são as primeiras a cair. Assim, durante a descida do leito, forma-se uma onda de expansão que progride da base até ao topo. A expansão é consideravelmente maior na metade inferior do leito. Também nesta região a acção de concentração é visivelmente mais rápida. Ao fim de cerca de três minutos encontram-se formados dois estratos horizontais, constituídos quase só por magnetite ou quase só por calcário.

Num ensaio prévio, com um leito formado só por partículas de calcário, o padrão de movimento é semelhante ao atrás descrito. Num outro ensaio foi usado um caudal continuo de entrada de água pelo *hutch* de 10 l/min. Nestas condições, a subida do leito atinge cerca de 1.5 cm, mas o padrão de movimento mantém-se.

Jigagem e segmentação do leito. Um ensaio de jigagem, realizado na célula de análise, constava do seguinte encadeamento de procedimentos:

homogeneização da mistura de partículas,
enchimento da célula de jigagem, primeiro com o minério e depois com água,
jigagem durante um certo intervalo tempo,
esvaziamento da água,
segmentação do leito em estratos horizontais com cerca de 10 mm de altura,
para cada estrato, secagem e separação (com ajuda de um íman) das partículas de magnetite e calcário,
pesagem.

Na prática, a segmentação do leito em estratos com altura uniforme, era difícil. Foram frequentes desvios à altura preestabelecida de 10 mm. Para permitir a quantificação do erro experimental, devido a esta e a outras causas, optámos por efectuar duas observações independentes, isto é, repetir cada ensaio duas vezes. Como veremos no ponto 2.6.2, verificou-se que o erro experimental se situa dentro de limites aceitáveis.

Em todos os ensaios efectuados a proporção entre partículas de magnetite e calcário foi de 50/50, em volume de sólidos. No instante inicial, em resultado da homogeneização, as concentrações eram uniformes. Os ensaios foram divididos em quatro grupos. Os parâmetros usados em cada grupo são indicados no quadro 2.5.4. A altura do leito foi fixada seguindo as indicações de Taggart (1951). A excentricidade refere-se à regulação do sistema de biela-manivela. O caudal de água indicado diz respeito ao caudal contínuo de entrada de água pelo *hutch*. Optámos por não fazer uso da válvula rotativa, porque a carga dinâmica que era gerada poderia danificar a instalação de água. Foram considerados os seguintes tempos de jigagem (tempos de residência): 15 s, 30 s, 60 s, 90 s, 120 s e 180 s, os quais, como se disse, foram repetidos duas vezes. No quadro 3.3.5, para cada granulometria, é indicada a massa total de partículas de magnetite e calcário. Para determinar estes valores a célula de análise foi enchida e depois sujeita a agitação.

Ensaios com misturas de dois componentes – Parâmetros – Quadro 2.5.4

grupo	granulometria	altura do leito	excentricidade	caudal de água
I	3.35 / 2.36 mm	8 cm	máxima	0
II	3.35 / 2.36 mm	8 cm	máxima	10 l/min
III	6.7 / 4.75 mm	8 cm	máxima	0
IV	8.0 / 6.7 mm	8 cm	máxima	0

Ensaio com misturas de dois componentes – Massas totais – Quadro 2.5.5

granulometria	volume do leito	magnetite	calcário	porosidade
3.35 / 2.36 mm	1248 cm ³	1249 g	795 g	0.518
6.7 / 4.75 mm	1248 cm ³	1406 g	894 g	0.458
8.0 / 6.7 mm	1248 cm ³	1438 g	914 g	0.446

Nos lotes sujeitos a jigagem a razão entre os calibres das partículas maiores e mais pequenas é inferior a 1.5. Esta uniformidade granulométrica permite considerar que a concentração de vazios C_0 é aproximadamente constante e uniforme em todo o leito. São, portanto, aplicáveis as equações de balanço desenvolvidas nos pontos anteriores e é possível definir um valor constante de porosidade média do leito.

Dados experimentais

No anexo B, para cada ensaio, são indicadas as massas de magnetite e calcário recolhidas em cada estrato. São indicados, igualmente, os volumes de sólidos e as concentrações reduzidas correspondentes. No cálculo dos volumes de sólidos foram utilizados os valores de densidade apresentados nos quadros 2.5.2 e 2.5.3, aproximados à primeira casa decimal. As concentrações reduzidas, foram calculadas com base nas seguintes fórmulas

$$c_A = \frac{V_A}{V_A + V_B} \quad (2.5.1)$$

$$e \quad c_B = \frac{V_B}{V_A + V_B}, \quad (2.5.2)$$

onde V_A e V_B são os volumes de sólidos de magnetite e calcário. Notar que as fórmulas (2.5.1) e (2.5.2) estão de acordo com a definição (2.2.5). A soma de controlo das concentrações reduzidas, na maior parte dos casos, é diferente de 4. Isto deve-se, fundamentalmente, a deficiências na segmentação do leito. Sempre que o desvio à soma de controlo foi superior a 0.2, o ensaio foi rejeitado e repetido. Este critério implicou a rejeição de um em cada dez ensaios.

No anexo E, entre outras informações, representa-se graficamente a concentração reduzida de magnetite em função da posição. Nestes gráficos, assinalamos:

- Na metade inferior do leito a acção de concentração é mais rápida, o está de acordo com a observação em câmara lenta.
- Para os tempos de residência de 15 e 30 s, em qualquer dos quatro grupos de ensaios, pode ser notada uma reentrância na curva de concentração. Este facto le-

vou-nos a formular a hipótese de que o leito se divide em duas regiões: uma região com cinética mais rápida, na parte de baixo do leito, e uma região com cinética mais lenta, na parte de cima; a transição entre as duas regiões é brusca, como se existisse um degrau na função $k(y)$.

- A segregação progride até à quase estratificação perfeita do leito. Assim, formam-se dois estratos, um quase só com magnetite e outro quase só com calcário. Portanto, o efeito de dispersão, que contraria a segregação, deverá ser pequeno.
- A acção de concentração é mais rápida nos leitos com menor granulometria. É também ligeiramente mais rápida quando existe entrada de água pelo *hutch*.

2.6 Ajuste do modelo binário

2.6.1 Função objectivo

Modelos candidatos

No ajuste da equação da segregação-dispersão, aos dados apresentados no anexo A, considerámos os seguintes modelos candidatos:

Modelos Candidatos	Parâmetros
modelo com uma região, sem dispersão	k
modelo com duas regiões, sem dispersão	k_1, k_2, y_0
modelo com duas regiões, com dispersão	k_1, k_2, D, y_0

No primeiro modelo, admite-se que o coeficiente de segregação é constante ao longo da coordenada vertical y . No segundo modelo, o leito é dividido numa região superior e numa região inferior. Como vimos no ponto anterior, as curvas experimentais de concentração sugerem esta divisão. A região superior do leito tem o coeficiente de segregação k_1 . A região inferior, junto à rede, tem o coeficiente de segregação k_2 . O parâmetro y_0 (um inteiro) indica o último volume finito que pertence à região superior. No terceiro modelo candidato, são igualmente consideradas duas regiões na descrição da segregação. Os parâmetros k_1 e k_2 designam os coeficientes de segregação nas regiões superior e inferior. O parâmetro D designa o coeficiente de dispersão comum às duas regiões.

Mínimos quadrados

Os dados experimentais, como vimos atrás, referem-se às concentrações em magnetite e calcário, observadas em estratos horizontais do leito, após um certo tempo de residência. Em cada estrato verifica-se sempre

$$c_{mag.} + c_{cal.} = 1,$$

isto é, existe apenas uma concentração independente. Assim, para efectuar o ajuste é suficiente a concentração de um componente. Escolhemos a concentração em magnetite.

Sejam os resíduos do ajuste definidos do seguinte modo

$$g_i(\mathbf{x}) = r_w(t_j) - s_w(\mathbf{x}, t_j), \quad (2.6.1)$$

onde $r_w(t_j)$ é a concentração em magnetite observada no estrato w , após o tempo de residência t_j e $s_w(\mathbf{x}, t_j)$ é a concentração correspondente prevista pelo modelo. O vector $\mathbf{x}$ ($n \times 1$) representa os parâmetros do modelo (excluindo o inteiro y_0). Na resolução da equação da segregação-dispersão, equação 2.3.11, foram utilizados oito volumes finitos, com altura Δy igual a 1 cm. Existe, assim, uma correspondência directa entre o volume finito w e o estrato w .

Uma vez definidos os resíduos, o ajuste pode ser formulado como um problema de minimização da norma de $\mathbf{g}(\mathbf{x})$, onde são manipulados os parâmetros $\mathbf{x}$. Adoptando a minimização do quadrado da norma Euclidiana, o problema escreve-se, então,

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{g}(\mathbf{x})\|_2^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m g_i(\mathbf{x})^2, \quad (2.6.2)$$

onde m é o número de observações. Como as funções $g_i(\mathbf{x})$ são não-lineares em relação aos parâmetros do modelo, trata-se, portanto, de um problema *não-linear de mínimos quadrados*.

Mínimos quadrados como um estimador de máxima verosimilhança

Suponhamos que a cada observação r_{wj} está associado um erro aleatório. Sejam estes erros independentes entre si e distribuídos em torno do *verdadeiro valor* da observação, de acordo com a lei normal. Suponhamos, também, que a variância dos erros é a mesma para todas as observações. Agora, se considerarmos que o modelo é correcto, ou seja, que o verdadeiro valor de cada observação é igual a $s_w(\bar{\mathbf{x}}, t_j)$, onde $\bar{\mathbf{x}}$ é o verdadeiro valor dos parâmetros, temos que

$$r_{wj} = s_w(\bar{\mathbf{x}}, t_j) + e_i, \quad (2.6.3)$$

$$\text{com } E(e_i) = 0, \quad (2.6.4)$$

onde e_i é o erro associado a r_{wj} e $E(e_i)$ é o *valor esperado* de e_i . Sob este ponto de vista, os resíduos anteriormente definidos, calculados no ponto $\bar{\mathbf{x}}$, correspondem aos erros e_i .

Nas equações anteriores, cada observação é considerada como se fosse uma variável aleatória formada pela soma duas partes: uma parte determinística, que é constituída pelo verdadeiro valor da observação, e que se supõe ser dada pelo modelo; e uma parte estocástica (aleatória), que é dada pelo erro, e para a qual foram consideradas uma série de propriedades. Notar que o erro tanto pode ter origem em deficiências do método experimental,

como pode ser resultado da variabilidade inerente aos sistemas particulados (existência de *bifurcações* associadas às não-linearidades do processo – Rocha e Silva, 1988).

As propriedades dos erros, que por hipótese serão válidas, podem ser resumidas na seguinte expressão vectorial

$$e \sim N(0, I\sigma^2), \quad (2.6.5)$$

onde $I\sigma^2$ é a matriz de variância-covariância de e . Nesta matriz, os elementos da diagonal principal são iguais a σ^2 e os restantes elementos, $Cov(e_i, e_j)$, com $i \neq j$, são iguais a zero. Esta última propriedade é consequência dos erros serem considerados independentes entre si. A normalidade dos erros é justificada pelo *teorema do limite central*. Assim, se cada erro e_i for o somatório de pequenos erros com diversas origens, independentemente da distribuição de probabilidade de cada pequeno erro, e_i terá uma distribuição que tende para a lei normal, quanto maior for o número de erros parcelares.

Se o modelo é correcto, e se x é próximo de $\bar{x}$, então os resíduos

$$r_w(t_j) - s_w(x, t_j)$$

são próximos de e . Nestas condições, a densidade de probabilidade conjunta dos valores observados, dados os parâmetros x , escreve-se

$$L(r|x) = \prod_j \prod_w \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r_w(t_j) - s_w(x, t_j)}{\sigma} \right)^2 \right] \right\}, \quad (2.6.6)$$

porque, aproximadamente,

$$\left(\frac{r_w(t_j) - s_w(x, t_j)}{\sigma} \right) \sim N(0,1). \quad (2.6.7)$$

Por definição, $L(r|x)$ é a *função de verosimilhança* dos valores observados. O *método da máxima verosimilhança* consiste, precisamente, em maximizar a função de verosimilhança, ou seja, em pesquisar os valores de x para os quais a probabilidade dos valores observados é máxima. Maximizar (2.6.6) é equivalente a maximizar o seu logaritmo, ou a minimizar o simétrico do seu logaritmo, ou seja, é equivalente a

$$\min_x \frac{1}{2} \sum_j \sum_w \left(\frac{r_w(t_j) - s_w(x, t_j)}{\sigma} \right)^2 - m \log \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right). \quad (2.6.8)$$

Como σ é constante, minimizar (2.6.8) é também equivalente a minimizar (2.6.2). Em conclusão, os parâmetros x , estimados pela técnica dos mínimos quadrados, são estimadores de máxima verosimilhança, quando os erros são independentes entre si e seguem a lei normal com variância constante.

Natureza dual do erro

O valor de uma observação pode, também, ser escrito do seguinte modo

$$r_{wj} = \bar{r}_{wj} + e_{exp\ i}, \quad (2.6.9)$$

onde $\bar{r}_{wj}$ é o verdadeiro valor da observação e $e_{exp\ i}$ é o *erro experimental* associado a r_{wj} .

No caso em que o modelo é correcto,

$$\bar{r}_{wj} = s_w(\bar{x}, t_j), \quad (2.6.10)$$

pelo que substituindo (2.6.10) em (2.6.9), obtemos a equação (2.6.3). Agora, no caso em que o modelo é incorrecto,

$$\bar{r}_{wj} = s_w(x, t_j) + e_{mod\ i}, \quad (2.6.11)$$

onde $e_{mod\ i}$ é o *erro do modelo* associado ao valor previsto $s_w(x, t_j)$. Se substituirmos a equação anterior em (2.6.9), obtemos

$$r_{wj} = s_w(x, t_j) + e_{mod\ i} + e_{exp\ i}, \quad (2.6.12)$$

ou seja, quando o modelo é incorrecto, os erros têm uma origem dupla: têm origem nas determinações experimentais e têm origem em deficiências do modelo. Neste caso, a técnica dos mínimos quadrados é equivalente a pesquisar os parâmetros para os quais a probabilidade de

$$r_{wj} - e_{mod\ i}$$

é máxima.

2.6.2 Erro experimental

Decomposição dos resíduos

Como vimos no ponto 2.5, em cada estrato, para cada tempo de residência, foram efectuadas duas observações independentes. Seja

$$\tilde{r}_{wj} = \frac{r_{wj1} + r_{wj2}}{2} \quad (2.6.13)$$

a média das duas observações. Se as propriedades dos erros experimentais, apresentadas atrás, forem válidas, então

$$E(\tilde{r}_{wj}) = E(r_{wj}) = \bar{r}_{wj}, \quad (2.6.14)$$

ou seja, $\tilde{r}_{wj}$ constitui uma estimativa *não-enviesada* do verdadeiro valor da observação.

Agora, atendendo a que as duas observações têm o mesmo valor previsto pelo modelo, podemos escrever os resíduos do seguinte modo

$$g_i(\mathbf{x}) = r_{wjk} - s_w(\mathbf{x}, t_j) \quad (2.6.15)$$

$$\text{ou} \quad g_i(\mathbf{x}) = (r_{wjk} - \tilde{r}_{wj}) + (\tilde{r}_{wj} - s_w(\mathbf{x}, t_j)), \quad (2.6.16)$$

com $k = 1, 2$ e $i = 1, \dots, 2m$.

Nesta equação, o termo

$$r_{wjk} - \tilde{r}_{wj}$$

é, portanto, uma estimativa do erro experimental associado à observação r_{wjk} . Na mesma equação, o termo

$$\tilde{r}_{wj} - s_w(\mathbf{x}, t_j)$$

é uma estimativa do erro do modelo associado ao valor previsto $s_w(\mathbf{x}, t_j)$.

Homogeneidade e distribuição do erro experimental

De acordo com a prática habitual, para verificar se o erro experimental pode ser considerado *homogéneo* (isto é, com variância constante), representámos graficamente a relação entre os erros

$$r_{wjk} - \tilde{r}_{wj}$$

e as variáveis mais relevantes do processo. Nesta análise, considerámos a relação com as seguintes variáveis:

tempo de residência,
posição,
concentração média das duas observações.

Os gráficos efectuados dizem respeito aos grupos I a IV e encontram-se no anexo B.

Podemos ver que a dispersão vertical dos pontos, ao longo das escalas de tempo e de posição, é aproximadamente uniforme, o que leva a crer que a grandeza do erro experimental é independente destas duas variáveis. No que se refere à relação com a concentração média, observa-se que, junto dos extremos da escala, a grandeza do erro é menor. Trata-se, no entanto, de um efeito muito localizado e que envolve um número reduzido de pontos. Assim, como primeira aproximação, julgamos poder considerar que a variância do erro experimental é constante.

(No caso em que o erro experimental não é homogéneo, os resíduos devem ser ponderados pelo inverso do desvio padrão do seu erro experimental. Os parâmetros estimados por esta técnica de *mínimos quadrados ponderados*, são ainda estimativas de máxima verosimilhança – Draper, Smith, 1998.)

Como a magnitude do erro experimental é igual (ou aproximadamente igual) para todas as observações, o *erro quadrático médio* dos desvios

$$r_{wj} - \tilde{r}_{wj}$$

pode ser calculado pela seguinte expressão (Ross, 1987)

$$s_{exp}^2 = (\text{soma do quadrado dos desvios}) / (\text{n.º de graus de liberdade}),$$

ou seja, neste caso

$$s_{exp}^2 = \frac{1}{\nu} \sum_w \sum_j (r_{wj1} - \tilde{r}_{wj})^2 + (r_{wj2} - \tilde{r}_{wj})^2 \quad (2.6.17)$$

$$\text{ou} \quad s_{exp}^2 = \frac{1}{2\nu} \sum_w \sum_j (r_{wj1} - r_{wj2})^2, \quad (2.6.18)$$

onde ν é o número de *graus de liberdade* da soma de quadrados. Por definição, o número de graus de liberdade de uma soma de quadrados é igual ao número de termos da soma, menos o número de relações lineares (constrições) existentes entre os termos (Ross, 1987).
Atendendo às constrições

$$\tilde{r}_{wj} = \frac{r_{wj1} + r_{wj2}}{2}, \quad (2.6.13)$$

então, o número de graus de liberdade da soma de quadrados (2.6.18) é igual a

$$\nu = (\text{n.º de estratos}) \times (\text{n.º de tempos de residência}). \quad (2.6.19)$$

O erro s_{exp}^2 , assim calculado, constitui uma estimativa não-enviesada do verdadeiro valor da variância do erro experimental σ_{exp}^2 (Ross, 1987). Notar que, devido ao erro na soma das concentrações reduzidas, não considerámos as constrições

$$\sum_w r_{wjk} = 1. \quad (2.6.20)$$

Se as propriedades dos erros, anteriormente apresentadas, forem válidas, pode provar-se que a variável

$$\nu s_{exp}^2 / \sigma_{exp}^2$$

segue uma distribuição do qui-quadrado com ν graus de liberdade (Hoel, 1984), isto é,

$$\nu s_{exp}^2 / \sigma_{exp}^2 \sim \chi_\nu^2. \quad (2.6.21)$$

Para um número de graus de liberdade ν , podem ser encontrados os valores ${}_1\chi^2$ e ${}_2\chi^2$ tais que

$$P \{ \chi^2 > {}_1\chi^2 \} = 1 - \alpha / 2 \quad (2.6.22)$$

$$\text{e} \quad P \{ \chi^2 > {}_2\chi^2 \} = \alpha / 2. \quad (2.6.23)$$

Então, atendendo a (2.6.21),

$$P \left\{ {}_1\chi^2 < \frac{\nu s_{exp}^2}{\sigma_{exp}^2} < {}_2\chi^2 \right\} = 1 - \alpha, \quad (2.6.24)$$

ou seja, a probabilidade do intervalo

$$\frac{\nu s_{exp}^2}{{}_2\chi^2} < \sigma_{exp}^2 < \frac{\nu s_{exp}^2}{{}_1\chi^2} \quad (2.6.25)$$

conter o verdadeiro valor σ_{exp}^2 é igual a $1 - \alpha$. Por outras palavras, (2.6.25) é o *intervalo de confiança* do verdadeiro valor σ_{exp}^2 , para um *nível de significado* de $100(1 - \alpha)\%$.

No quadro seguinte, apresentam-se a estimativa da variância do erro experimental e o respectivo intervalo de confiança, para os grupos I a IV. Apresentam-se, também, outras estatísticas que caracterizam a distribuição dos desvios $r_{wjk} - \tilde{r}_{wj}$. Da leitura do quadro destacamos:

– Os valores máximo e mínimo, a média e o coeficiente de assimetria, reflectem o facto das distribuições serem simétricas em relação à origem.

– O intervalo de confiança a 95% para a variância do erro experimental, em termos relativos, é de $\pm 35\%$ (aproximadamente); assim, o rigor das estatísticas calculadas com base no erro quadrático médio é reduzido.

– O intervalo de confiança a 95% para o erro experimental, que é aproximadamente dado por $\pm 2 \times$ erro padrão, apresenta valores que rondam os 5% para os grupos I a III e 6.5% para o grupo IV. Julgamos que este nível de erro é consentâneo com a utilização dos dados na validação e discriminação dos modelos candidatos.

– O coeficiente de curtose, nos grupos I e II, é um pouco elevado. Isto indica que o ajuste à lei normal não é muito perfeito. Para complementar esta informação, no anexo B, é representada graficamente a comparação entre as distribuições dos desvios e a lei normal. Julgamos, em função desta informação adicional, que as distribuições dos desvios não contrariam a hipótese da *normalidade*. Assim, como primeira aproximação, vamos supor que a distribuição dos erros experimentais segue a lei normal.

Estatísticas do erro experimental

Quadro 2.6.1

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
número de desvios	96	96	96	96
média	0	0	0	0
máximo	0.0526	0.0488	0.0473	0.0524
mínimo	- 0.0526	- 0.0488	- 0.0473	- 0.0524
soma de quadrado dos desvios	0.032346	0.025204	0.031289	0.050692
n.º de graus de liberdade	48	48	48	48
erro quadrático médio	0.000674	0.000525	0.000652	0.001056
intervalo de confiança	0.000469;	0.000365;	0.000453;	0.000735;
da variância a 95%	0.001052	0.000820	0.001017	0.001648
erro padrão*	0.0260	0.0229	0.0255	0.0325
$\pm 2 \times$ erro padrão	± 0.0520	± 0.0458	± 0.0510	± 0.0650
coeficiente de assimetria	0	0	0	0
coeficiente de curtose	2.420	2.242	0.6082	- 0.0498

*erro padrão = (erro quadrático médio)^{1/2}

Todo o trabalho de inferência estatística que temos vindo a efectuar, considera que os erros experimentais são independentes entre si. Esta propriedade, como é prática habitual, será testada *a posteriori*, sobre os valores dos resíduos.

2.6.3 Minimização da função objectivo

Algoritmo geral

O modo como anteriormente definimos a função n -dimensional $f(x)$, sugere que se trata de uma função *suave*, isto é, as suas primeira e a segunda derivadas existem e são contínuas. Nestas condições, é aplicável o seguinte algoritmo para a minimização, sem restrições, de $f(x)$ (Gill, Murray, Wright, 1986):

Seja x_k a estimativa do ponto mínimo, x^* , na iteração k .

1. Teste de convergência.

Se as condições de convergência são satisfeitas, o algoritmo pára, com x_k como solução.

2. Cálculo da direcção de pesquisa.

Calcular o vector não-nulo p_k , a direcção de pesquisa.

3. Cálculo do comprimento do passo.

Calcular o escalar positivo α_k , o comprimento do passo, para o qual se verifica a condição

$$f(x_k + \alpha_k p_k) < f(x_k). \quad (2.6.26)$$

4. Cálculo da nova estimativa do mínimo.

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \quad (2.6.27)$$

Retornar ao passo 1.

Em ordem a que a condição (2.6.26) possa ser satisfeita, isto é, para que $f(x)$ seja reduzida em cada iteração, p_k e α_k devem possuir certas propriedades. Assim, a direcção definida por p_k deve ser uma *direcção de descida*, isto é, p_k deve ser um vector que satisfaz a condição

$$\nabla f(x_k)' p_k < 0, \quad (2.6.28)$$

onde $\nabla f(x_k)$ é o gradiente de f no ponto x_k . Se p_k é uma direcção de descida, então pode provar-se que existe sempre um escalar positivo α , tal que (Gill et al., 1986)

$$f(x_k + \alpha p_k) < f(x_k). \quad (2.6.29)$$

Métodos para mínimos quadrados

Embora o problema da minimização de f , sem restrições, possa ser resolvido por um método geral, por exemplo, por um método que usa a direcção de Newton (ou uma apro-

ximação quasi-Newton), as propriedades da função f fazem com que seja compensador usar métodos específicos. Em particular, o gradiente e a Hessiana de um problema de mínimos quadrados têm uma estrutura especial. Seja $\nabla g(x)$ a matriz Jacobiana ($n \times m$) de $g(x)$ e seja $\nabla^2 g_i(x)$ a matriz Hessiana ($n \times n$) de $g_i(x)$. Então, pode provar-se que (Nash, Sofer, 1996)

$$\nabla f(x) = \nabla g(x)g(x), \quad (2.6.30)$$

$$\nabla^2 f(x) = \nabla g(x)\nabla g(x)' + Q(x), \quad (2.6.31)$$

$$\text{onde } Q(x) = \sum_{i=1}^m \nabla^2 g_i(x)g_i(x). \quad (2.6.32)$$

Analisando as equações (2.6.31) e (2.6.32), podemos ver que a Hessiana da função objectivo de um problema de mínimos quadrados, consiste numa combinação especial de informação de primeira e de segunda ordem. Os métodos para mínimos quadrados assentam na suposição de que o termo de primeira ordem $\nabla g(x)\nabla g(x)'$ dominará o termo de segunda ordem $Q(x)$. Este pressuposto não se justifica se os resíduos no ponto mínimo forem grandes, isto é, se a norma $\|g(x^*)\|_2$ for comparável ao maior valor próprio de $\nabla g(x^*)\nabla g(x^*)'$. Neste caso, será aconselhável usar um método geral (Gill, et. al., 1986).

Direcção de Gauss-Newton

Dado um ponto x_k , a *direcção de Gauss-Newton* pode obter-se linearizando $g(x)$, em torno do ponto x_k

$$\tilde{g}(x, x_k) = g(x_k) + \nabla g(x_k)'(x - x_k) \quad (2.6.33)$$

e, depois, minimizando o quadrado da norma da função linearizada

$$\min_x \frac{1}{2} \|\tilde{g}(x, x_k)\|_2^2. \quad (2.6.34)$$

Uma via para a resolução do problema (2.6.34), passa por efectuar o desenvolvimento (Bertsekas, 1999)

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|\tilde{g}(x, x_k)\|_2^2 &= \\ &= \frac{1}{2} \|g(x_k)\|_2^2 + 2(x - x_k)' \nabla g(x_k)g(x_k) + \\ &\quad + (x - x_k)' \nabla g(x_k) \nabla g(x_k)' (x - x_k) \end{aligned} \quad (2.6.35)$$

e, em seguida, derivar $\frac{1}{2} \|\tilde{g}(x, x_k)\|_2^2$ em ordem a x e igualar a zero

$$\frac{1}{2} [2\nabla g(x_k)g(x_k) + 2\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'(x - x_k)] = 0, \quad (2.6.36)$$

de onde resulta, finalmente,

$$\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)' (x - x_k) = -\nabla g(x_k) g(x_k). \quad (2.6.37)$$

Agora, admitindo que a matriz $\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)'$ tem inversa, podemos escrever

$$x_{k+1} = x_k - [\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)']^{-1} \nabla g(x_k) g(x_k). \quad (2.6.38)$$

Esta última equação constitui a iteração *pura* do método de Gauss-Newton. Se $g(x)$ for uma função linear, temos que

$$\|g(x)\|_2^2 = \|\tilde{g}(x, x_k)\|_2^2$$

e o método converge numa única iteração. Ao vector definido por

$$d_k = -[\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)']^{-1} \nabla g(x_k) g(x_k) \quad (2.6.39)$$

chama-se *direcção de Gauss-Newton*. Pode provar-se que esta direcção constitui uma aproximação à direcção de Newton, quando os termos de segunda ordem da Hessiana são negligenciados. Nesta medida, um método baseado na direcção de Gauss-Newton é um método específico para problemas de mínimos quadrados.

Podemos, com facilidade, verificar que a direcção de Gauss-Newton é uma direcção de descida, se a matriz $\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)'$ (ou, de um modo equivalente, a sua inversa) for definida positiva e se o gradiente em x_k não for nulo. Assim, atendendo a que o gradiente em x_k é o vector $\nabla g(x_k) g(x_k)$, a condição de direcção de descida escreve-se

$$-[\nabla g(x_k) g(x_k)]' [\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)']^{-1} \nabla g(x_k) g(x_k) < 0. \quad (2.6.40)$$

Garantindo a descida e a convergência

Para garantir a descida no caso em que $\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)'$ é singular, e também para melhorar as propriedades de convergência quando esta matriz é quase singular, os algoritmos baseados na direcção de Gauss-Newton são, habitualmente, implementados da seguinte forma

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k [\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)' + \Delta_k]^{-1} \nabla g(x_k) g(x_k), \quad (2.6.41)$$

onde α_k é o passo de descida, anteriormente definido, e Δ_k é uma matriz diagonal tal que

$$\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)' + \Delta_k$$

é definida positiva.

Uma via para determinar os elementos da matriz Δ_k , consiste em modificar o algoritmo que faz a factorização de $\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)'$. Na nossa implementação do método de

Gauss-Newton, recorremos a um *algoritmo modificado da factorização de Cholesky* que, simultaneamente, factoriza a matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$ e calcula Δ_k , tal que a direcção de pesquisa é sempre uma direcção de descida (excepto no caso em que o gradiente em x_k é nulo).

A implementação do método de Gauss-Newton, que acabamos de apresentar, forma explicitamente a matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$ e, depois, calcula a direcção de pesquisa resolvendo o sistema

$$[\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)' + \Delta_k] p_k = -\nabla g(x_k)g(x_k). \quad (2.6.42)$$

A principal desvantagem desta abordagem, consiste no facto de o número de condição da matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$ ser o quadrado do número de condição de $\nabla g(x_k)$, e de o majorante do erro, no cálculo da direcção p_k , ser proporcional a este número (Gill et al., 1986, Nash, Sofer, 1996). O caminho normalmente seguido para evitar a exacerbação do número de condição, consiste em resolver o problema de mínimos quadrados lineares definido pela expressão (2.6.34), efectuando a factorização QR de $\nabla g(x_k)$. No entanto, considerando a menor complexidade algorítmica (e conceptual) da factorização de Cholesky, e a possibilidade de produzir um algoritmo modificado que controla (e diminui) o número de condição, optámos por um método baseado nesta última factorização.

Mesmo no caso em que a matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)' + \Delta_k$ é definida positiva, pode suceder que as direcções dos vectores $\nabla f(x_k)$ e p_k venham quase ortogonais. Nesta situação, a direcção p_k é quase paralela à aproximação de primeira ordem da linha de nível $f(x)=f(x_k)$ e, portanto, $f(x)$ é quase constante ao longo de p_k . Pode também acontecer que a norma de p_k venha arbitrariamente próxima de zero. Estes dois casos, que se traduziriam numa convergência muito lenta, ou mesmo na paragem extemporânea do algoritmo, podem ser evitados se o maior valor próprio da matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$ for limitado superiormente (Bertsekas, 1999). No nosso algoritmo, não é tomada nenhuma medida específica para limitar o maior valor próprio da matriz $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$. No entanto, a matriz Δ_k é escolhida de modo a evitar um crescimento prejudicial dos valores próprios de $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)' + \Delta_k$. Por outro lado, para impedir que a norma de p_k venha arbitrariamente grande, o menor valor próprio de $\nabla g(x_k)\nabla g(x_k)'$ deve ser limitado inferiormente. O algoritmo efectua este controlo através da adição de Δ_k .

Ainda com o objectivo de garantir a convergência do algoritmo, o comprimento do passo α_k não deve respeitar apenas a condição (2.6.26). De facto, o passo deve ser escolhido de modo a que f seja *suficientemente decrescida* em cada iteração. Na prática, este

objectivo pode ser alcançado se α_k satisfizer, por exemplo, a *condição de Armijo*. Esta questão é retomada mais à frente.

Cálculo da direcção de pesquisa

Seja o sistema de equações lineares

$$[\nabla g(x_k) \nabla g(x_k)'] p_k = -\nabla g(x_k) g(x_k), \quad (2.6.43)$$

escrito na forma simplificada $Ax=b$. Se a matriz A é simétrica e definida positiva, pode provar-se que é sempre possível efectuar, sem troca de linhas, a factorização

$$A = LU, \quad (2.6.44)$$

onde L é uma matriz triangular inferior, com os elementos da diagonal principal iguais a um, e U é uma matriz triangular superior. A matriz U corresponde ao sistema de equações triangularizado que é obtido como resultado da eliminação Gaussiana. A matriz L é um registo dos factores utilizados para produzir U . A factorização de Cholesky, como veremos, pode obter-se pela manipulação da equação (2.6.44).

Seja D a matriz diagonal tal que $d_{ii} = u_{ii}$. Seja, também, a matriz $\hat{U}$ definida por $\hat{U} = D^{-1}U$ e, portanto, $D\hat{U} = U$. Podemos, assim, escrever a matriz A como o produto $A = LD\hat{U}$, e sendo A uma matriz simétrica,

$$A' = \hat{U}' D' L' = \hat{U}' D L' = A = LD\hat{U}. \quad (2.6.45)$$

Então, $\hat{U}' = L$ ou, de um modo equivalente, $\hat{U} = L'$ e, portanto,

$$A = LDL'. \quad (2.6.46)$$

Como a matriz A é definida positiva, verifica-se que $x'Ax > 0$, para todo o $x \neq 0$. Utilizando a factorização anterior,

$$x'Ax = x'LDL'x = (L'x)'D(L'x) = y'Dy, \quad (2.6.47)$$

onde $y = L'x$. Como L é uma matriz não-singular, $y \neq 0$ se e só se $x \neq 0$. Então,

$$0 < y'Dy = \sum_i d_{ii} y_i^2, \text{ para todo o } y \neq 0. \quad (2.6.48)$$

A condição anterior é verdadeira se se verificar $d_{ii} > 0$, para todo o i . Em conclusão, se A é simétrica e definida positiva, D é uma matriz com os elementos da diagonal principal positivos.

Em função da conclusão anterior, podemos escrever $D = \hat{D}\hat{D}$, onde $\hat{D}$ é uma matriz diagonal com $\hat{d}_{ii} = \sqrt{d_{ii}}$. Agora, se definirmos a matriz triangular inferior $\hat{L} = L\hat{D}$,

$$A = L\hat{D}\hat{D}L' = \hat{L}(\hat{L})' = \hat{L}\hat{L}' \quad (2.6.49)$$

e omitindo o sinal $\wedge$, obtemos, finalmente,

$$A = LL' . \quad (2.6.50)$$

Esta última factorização é referida como a factorização (ou decomposição) de Cholesky da matriz A .

Os factores de Cholesky l_{ij} podem ser calculados directamente a partir da igualdade elemento-a-elemento entre as matrizes A e LL' . Para tal, é mais conveniente escrever a factorização definida pela equação (2.6.50), do seguinte modo

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \cdots & l_{n1} \\ & l_{22} & l_{32} & \cdots & l_{n2} \\ & & l_{33} & \cdots & l_{n3} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & l_{nn} \end{bmatrix} \quad (2.6.51)$$

Igualando os elementos (1, 1), obtemos

$$a_{11} = l_{11}^2 \quad \text{ou} \quad l_{11} = \sqrt{a_{11}} . \quad (2.6.52)$$

Igualando os restantes elementos da primeira coluna, obtemos

$$a_{i1} = l_{i1}l_{11} \quad \text{ou} \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (2.6.53)$$

Agora, igualando os elementos (2, 2),

$$a_{22} = l_{21}^2 + l_{22}^2 \quad \text{ou} \quad l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} . \quad (2.6.54)$$

Os restantes elementos da segunda coluna podem ser calculados pelas equações

$$a_{i2} = l_{i1}l_{21} + l_{i2}l_{22}$$

$$\text{ou} \quad l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1}l_{21}}{l_{22}}, \quad i = 3, \dots, n. \quad (2.6.55)$$

Após o cálculo das colunas 1, 2, ..., $j-1$, o factor l_{jj} pode ser calculado de acordo com as seguintes equações

$$a_{jj} = l_{j1}^2 + l_{j2}^2 + \cdots + l_{jj}^2 \quad (2.6.56)$$

$$\text{ou} \quad l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2} . \quad (2.6.57)$$

Os restantes elementos da coluna j podem ser calculados pela equação

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm} l_{im}}{l_{jj}}, \quad i = j+1, \dots, n. \quad (2.6.58)$$

Pode provar-se que a instabilidade numérica de um algoritmo de factorização está, sobretudo, relacionada com o crescimento dos factores, em relação aos elementos da matriz original (Gill, et al., 1986, Burden, Faires, 2001). Analisando a equação (2.6.56), verificamos que o crescimento dos factores l_{ij} é limitado *a priori* pelos elementos da diagonal de A , mesmo que surjam pequenos *pivots* durante a factorização. Assim, não é necessário efectuar pivotagem de linhas para que o algoritmo de Cholesky seja numericamente estável.

Consideremos, agora, o caso em que à matriz A é adicionada uma matriz diagonal E ,

$$F = A + E, \quad (2.6.59)$$

onde E é tal que F é definida positiva. Os elementos da matriz E são calculados, sequencialmente, durante a factorização, quando

$$a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2$$

for negativo ou próximo de zero, o que indica, de acordo com (2.6.57), que A não é definida positiva ou é quase singular.

Os elementos da diagonal de E podem ser determinados aplicando o seguinte algoritmo modificado da factorização de Cholesky (Bertsekas, 1999). Sejam dois escalares μ_1 e μ_2 tal que se verifica $\mu_1 < \mu_2$. A primeira coluna da matriz L é calculada de acordo com as equações

$$l_{11} = \begin{cases} \sqrt{a_{11}} & \text{se } \mu_1 < a_{11} \\ \sqrt{\mu_2} & \text{se } \mu_1 \geq a_{11} \end{cases} \quad (2.6.60)$$

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (2.6.61)$$

Calculadas as colunas 1, 2, ..., $j-1$ da matriz L , podemos obter os elementos da coluna j através das seguintes equações

$$l_{jj} = \begin{cases} \sqrt{a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2} & \text{se } \mu_1 < a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2 \\ \sqrt{\mu_2} & \text{se } \mu_1 \geq a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2 \end{cases} \quad (2.6.62)$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm} l_{im}}{l_{jj}}, \quad i = j+1, \dots, n. \quad (2.6.63)$$

Em resumo, em termos da matriz E , o elemento jj desta matriz é igual a zero se

$$\mu_1 < a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2$$

e é igual a

$$\mu_2 - \left(a_{jj} - \sum_{m=1}^{j-1} l_{jm}^2 \right)$$

em caso contrário.

Bertsekas (1999) recomenda que inicialmente seja escolhido $\mu_1 = 0$, e que este valor só deve ser aumentado se surgirem dificuldades no cálculo da direcção de descida. O parâmetro μ_2 deve ser escolhido bastante maior de μ_1 . Para fixar o seu valor, pode-se começar por tentar um μ_2 relativamente pequeno, o qual deverá ser aumentado se a norma da direcção de pesquisa for substancialmente maior que a unidade. Seguindo estas recomendações, adoptamos os valores $\mu_1 = 0$ e $\mu_2 = 0.1$.

Uma vez factorizada a matriz F , o sistema de equações lineares

$$F x = LL' x = b \quad (2.6.64)$$

pode ser resolvido calculando, em primeiro lugar, a solução do sistema triangular

$$L y = b \quad (2.6.65)$$

e, depois, resolvendo o sistema, também triangular,

$$L' x = y. \quad (2.6.66)$$

A solução do primeiro sistema pode ser calculada, no *sentido descendente*, de acordo com as seguintes equações

$$y_1 = \frac{b_1}{l_{11}}, \quad (2.6.67)$$

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{m=1}^{i-1} l_{im} y_m}{l_{ii}}, \quad i = 2, \dots, n. \quad (2.6.68)$$

A solução do segundo sistema pode ser calculada, no *sentido ascendente*, de acordo com

$$d_n = \frac{y_n}{l_{nn}}, \quad (2.6.69)$$

$$d_i = \frac{y_i - \sum_{m=i+1}^n l_{mi} d_m}{l_{ii}}, \quad i = n-1, \dots, 1. \quad (2.6.70)$$

Cálculo do comprimento do passo

Como foi referido, para garantir a convergência, o comprimento do passo α_k deve ser escolhido de modo a que $f(x)$ sofra um decréscimo *não trivial* em cada iteração. É condição suficiente de decréscimo não trivial, que α_k seja escolhido respeitando a seguinte desigualdade

$$f(x_k) - f(x_k + \alpha_k p_k) \geq -\sigma \alpha_k \nabla f(x_k)' p_k, \quad (2.6.71)$$

onde σ é um escalar compreendido entre zero e um (Gill et al., 1986, Bertsekas, 1999). A condição imposta por (2.6.71) designa-se, habitualmente, *condição* (ou *regra*) *de Armijo*. Notar que o decréscimo na função $f(x)$ não tem que ser apenas positivo; tem que ser suficientemente grande para passar no teste (2.6.71).

Nos algoritmos baseados na condição de Armijo, o comprimento do passo é, frequentemente, definido em termos de um passo inicial s e de um escalar β compreendido entre zero e um. O passo escolhido é o primeiro membro da sucessão

$$\{\beta^m s\}, \quad \text{com } m = 0, 1, \dots, \quad (2.6.72)$$

que satisfaz a condição (2.6.71). Na nosso algoritmo, considerámos s igual à unidade, com o objectivo de maximizar a taxa de convergência do método na vizinhança do mínimo. Respeitando os limites aconselhados por Bertsekas (1999), escolhemos β igual a 0.1 e σ igual a 10^{-3} .

Aproximação das derivadas

Em cada nova estimativa x_k , é necessário calcular o Jacobiano dos resíduos $\nabla g(x_k)$, a partir do qual se obtêm o gradiente e a aproximação à Hessiana. No entanto, dada a impossibilidade de obter uma expressão analítica para as derivadas dos resíduos, seguimos a alternativa habitual, e calculámos uma aproximação do Jacobiano, mediante *diferenças finitas*. Assim, recorrendo à fórmula das *diferenças finitas à direita*, o elemento (i, j) do Jacobiano é dado por

$$\frac{\partial g_j(x)}{\partial x_i} \approx \frac{g_j(x + h_j e_i) - g_j(x)}{h_j}, \quad (2.6.73)$$

com $i = 1, 2, \dots, n$ e $j = 1, 2, \dots, m$,

onde e_i é o vector unitário que indica a direcção i , h_j é o passo escalar dado nessa direcção, n é o número de parâmetros e m é o número de resíduos.

Tendo em conta as duas principais fontes de erro envolvidas nesta aproximação, o erro de truncatura e os erros de arredondamento no cálculo de g_j e na divisão por h_j , Nash e Sofer (1996) recomendam a escolha do passo

$$h_j = \sqrt{\frac{2|g_j|\varepsilon_{maq}}{|g''_j|}}, \quad (2.6.74)$$

onde ε_{maq} é a precisão da máquina. Agora, se o módulo dos resíduos e o módulo das suas segundas derivadas forem da mesma ordem de grandeza, o que sucede frequentemente, temos que

$$h_j \approx \sqrt{\varepsilon_{maq}}. \quad (2.6.75)$$

Então, considerando que os cálculos são efectuados com precisão dupla (64 bits), a que corresponde

$$\varepsilon_{maq} \approx 10^{-14},$$

adoptámos h_j igual a 10^{-6} .

Condições de paragem

A decisão de que x_k é uma aproximação adequada da solução do problema foi fundamentada em dois tipos de teste:

- tipo 1: x_k quase satisfaz as condições suficientes para poder ser considerado um mínimo local: o gradiente é quase nulo e a aproximação à matriz Hessiana é definida positiva,
- tipo 2: a sequência de pontos x_k parece ter convergido.

Assim, se as duas condições seguintes forem verdadeiras, o algoritmo pára e assume x_k como solução:

$$\text{- condição 1: } \|\nabla f(x_k)\|_2 < \delta_1, \quad (2.6.76)$$

$$\text{- condição 2: } \|x_k - x_{k-1}\|_2 < \delta_2. \quad (2.6.77)$$

Após a paragem do algoritmo, é efectuado um terceiro teste, baseado na factorização de Cholesky, que permite concluir se $\nabla g \nabla g'$ é definida positiva ou não. Apoiados na experiência, para a nossa implementação do método de Gauss-Newton, e para o nosso problema de ajuste, considerámos δ_1 igual a 10^{-3} e δ_2 igual a 10^{-6} .

2.6.4 Resultados do ajuste

Parâmetros ajustados

Parâmetros ajustados – Estimativas pontuais – Quadros 2.6.2

Modelo com uma região, sem dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
k	0.190936	0.206506	0.139854	0.119638
f	1.371 E-1	1.248 E-1	1.914 E-1	1.949 E-1

f = valor da função objectivo

Modelo com duas regiões, sem dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
y_0	5	5	5	5
k_1	0.178986	0.194836	0.115814	0.096302
k_2	0.345949	0.378632	0.239587	0.203949
f	6.103 E-2	5.357 E-2	7.855 E-2	6.678 E-2

Modelo com duas regiões, com dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
y_0	5	5	5	5
k_1	0.178271	0.194120	0.113330	0.096160
k_2	0.341322	0.372552	0.226450	0.203263
D	2.299 E-8	6.581 E-8	1.594 E-7	8.659 E-7
f	6.109 E-2	5.363 E-2	8.015 E-2	6.679 E-2

Numa primeira leitura, nos quadros 2.6.2 destacamos:

- Os parâmetros k_1 e k_2 apresentam valores claramente distintos. Verifica-se, igualmente, que quando passamos de uma para duas regiões, o valor da função objectivo desce para cerca de metade. Estes factos parecem indicar que o modelo com duas regiões possibilita uma melhor descrição do mecanismo de segregação.

- O valor ajustado do coeficiente de dispersão é muito pequeno. Simultaneamente, com a inclusão deste parâmetro, o valor da função objectivo permanece quase inalterado. O mecanismo de dispersão parece, assim, estar ausente.

- Os valores dos parâmetros k_1 e k_2 encontram-se sempre numa razão aproximada de 1:2.

- O parâmetro y_0 , que controla a dimensão relativa das duas regiões, assume o mesmo valor nos quatro grupos.

– Por ordem crescente dos coeficientes de segregação, temos:

grupo IV – grupo III – grupo I – grupo II.

Assim, tudo indica que a cinética de segregação cresce com a diminuição da granulometria e cresce, também, com a entrada de água pelo *hutch*.

Matriz de variância-covariância dos parâmetros ajustados – Caso não-linear

Como vimos no ponto 2.6.3, a iteração *pura* do método de Gauss-Newton é definida pela seguinte equação

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - (\mathbf{J}_k \mathbf{J}'_k)^{-1} \mathbf{J}_k \mathbf{g}_k. \quad (2.6.78)$$

onde $\mathbf{J}_k$ representa a matriz Jacobiana dos resíduos, calculada no ponto $\mathbf{x}_k$. Se considerarmos um ponto $\mathbf{x}_0$, suficientemente próximo do mínimo da função $f(\mathbf{x})$, para que os resíduos sejam aproximadamente lineares em relação aos parâmetros, podemos escrever

$$\hat{\mathbf{x}} \approx \mathbf{x}_0 - (\mathbf{J}_0 \mathbf{J}'_0)^{-1} \mathbf{J}_0 \mathbf{g}_0, \quad (2.6.79)$$

onde $\hat{\mathbf{x}}$ representa o mínimo de $f(\mathbf{x})$. Notar que a validade desta aproximação não depende do método de optimização utilizado. Depende, no entanto, da *linearidade* da função $f(\mathbf{x})$ na vizinhança do mínimo.

Se, em vez de $\mathbf{x}_0$, tomarmos como ponto de partida $\bar{\mathbf{x}}$, que anteriormente definimos como o verdadeiro valor dos parâmetros, e se $\hat{\mathbf{x}}$ e $\bar{\mathbf{x}}$ se encontrarem suficientemente próximos, para que a variação linear dos resíduos seja válida, podemos escrever

$$\hat{\mathbf{x}} \approx \bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{J}\mathbf{J}')^{-1} \mathbf{J} \mathbf{g}(\bar{\mathbf{x}}), \quad (2.6.80)$$

e, de acordo com a equação (2.6.3),

$$\hat{\mathbf{x}} \approx \bar{\mathbf{x}} - (\mathbf{J}\mathbf{J}')^{-1} \mathbf{J} \mathbf{e}. \quad (2.6.81)$$

Atendendo à expressão (2.6.81) e à propriedade dos erros

$$E[\mathbf{e}] = \mathbf{0},$$

temos que,

$$E[\hat{\mathbf{x}}] \approx \bar{\mathbf{x}}, \quad (2.6.82)$$

ou seja, $\hat{\mathbf{x}}$ constitui, aproximadamente, uma estimativa não-enviesada do verdadeiro valor dos parâmetros, conquanto a aproximação (2.6.81) seja válida. Combinando (2.6.81) e (2.6.82), obtemos

$$\hat{\mathbf{x}} - E[\hat{\mathbf{x}}] \approx -(\mathbf{J}\mathbf{J}')^{-1} \mathbf{J} \mathbf{e}. \quad (2.6.83)$$

Agora, por definição,

$$VarCov [\hat{x}] = E[(\hat{x} - E[\hat{x}])(\hat{x} - E[\hat{x}])'], \quad (2.6.84)$$

assim,

$$VarCov [\hat{x}] \approx E[(JJ')^{-1} J e e' J' (JJ')^{-1}]. \quad (2.6.85)$$

Como

$$\begin{aligned} E[(JJ')^{-1} J e e' J' (JJ')^{-1}] &= \\ &= (JJ')^{-1} J E[ee'] J' (JJ')^{-1} \\ &= (JJ')^{-1} J I \sigma^2 J' (JJ')^{-1} \\ &= (JJ')^{-1} \sigma^2, \end{aligned} \quad (2.6.86)$$

temos, finalmente,

$$VarCov [\hat{x}] \approx (JJ')^{-1} \sigma^2. \quad (2.6.87)$$

Intervalos de confiança para os parâmetros ajustados

Analisando a expressão (2.6.81), vemos que a estimativa $\hat{x}$ é, aproximadamente, uma combinação linear da variável e . Como e segue uma distribuição normal multivariada, então $\hat{x}$ segue, aproximadamente, uma distribuição do mesmo tipo, ou seja,

$$\hat{x} \sim N(\bar{x}, (JJ')^{-1} \sigma^2). \quad (2.6.88)$$

Para cada parâmetro individual $\hat{x}_i$ podemos, assim, escrever

$$\hat{x}_i \sim N(\bar{x}_i, a_{ii} \sigma^2), \quad (2.6.89)$$

onde a_{ii} é o elemento i da diagonal principal da matriz $(JJ')^{-1}$. Se convertermos a distribuição normal, na distribuição normal padrão, obtemos

$$\frac{\hat{x}_i - \bar{x}_i}{\sigma \sqrt{a_{ii}}} \sim N(0,1). \quad (2.6.90)$$

Nas expressões anteriores, os elementos da matriz $(JJ')^{-1}$ podem ser estimados a partir do cálculo do Jacobiano no ponto $\hat{x}$. No caso em que o modelo é correcto, a variância dos erros σ^2 pode ser estimada pela variância (amostral) dos resíduos, calculados, também, no ponto $\hat{x}$ (Bates, Watts, 1988), ou seja,

$$s^2 = \frac{g(\hat{x})' g(\hat{x})}{m - p}. \quad (2.6.91)$$

Nesta equação, $g(\hat{x})' g(\hat{x})$ representa a soma do quadrado dos resíduos no ponto mínimo, m representa o número de observações e p é o número de parâmetros ajustados.

Tratando-se de um problema não-linear, não existe garantia de que a estimativa s^2 , calculada pela equação (2.6.91), seja não-enviesada. No entanto, se o problema for razoavelmente linear na vizinhança do mínimo (e se o modelo for correcto), é válida a aproximação (Bates, Watts, 1988).

$$E[s^2] \approx \sigma^2. \quad (2.6.92)$$

Num problema de regressão linear, pode provar-se que $(m-p)s^2/\sigma^2$ é uma variável aleatória que segue uma distribuição do qui-quadrado com $m-p$ graus de liberdade (Ross, 1987). Então, extrapolando para um problema quase-linear, verifica-se aproximadamente que

$$(m-p)\frac{s^2}{\sigma^2} \sim \chi_{m-p}^2. \quad (2.6.93)$$

Por definição, a variável t com ν graus de liberdade é dada por

$$t_\nu = \frac{N(0,1)}{\sqrt{\chi_\nu^2/\nu}}. \quad (2.6.94)$$

Assim, se combinarmos as expressões (2.6.90), (2.6.93) e (2.6.94), obtemos

$$\frac{(\hat{x}_i - \bar{x}_i) / (\sigma\sqrt{a_{ii}})}{\sqrt{s^2/\sigma^2}} = \frac{\hat{x}_i - \bar{x}_i}{s\sqrt{a_{ii}}} \sim t_{m-p}. \quad (2.6.95)$$

Com base na expressão anterior, podemos, finalmente, determinar os intervalos de confiança para os parâmetros ajustados. Para um nível de significado de $100(1-\alpha)\%$, temos que

$$P\left\{t_{m-p}(\alpha/2) \leq \frac{\hat{x}_i - \bar{x}_i}{s\sqrt{a_{ii}}} \leq t_{m-p}(1-\alpha/2)\right\} = 1-\alpha, \quad (2.6.96)$$

ou seja, a probabilidade do intervalo

$$\hat{x}_i - t_{m-p}(1-\alpha/2)s\sqrt{a_{ii}} \leq \bar{x}_i \leq \hat{x}_i + t_{m-p}(1-\alpha/2)s\sqrt{a_{ii}} \quad (2.6.97)$$

conter o verdadeiro valor de x_i é igual a $1-\alpha$.

Nos quadros seguintes, para os três modelos candidatos, apresentam-se as estimativas pontuais dos parâmetros ajustados e os respectivos intervalos de confiança a 95%. No cálculo da inversa da matriz JJ' utilizámos o *método de Gauss-Jordan*, com pivotagem e escalamento de linhas.

Parâmetros ajustados – Estimativas pontuais e intervalos de confiança a 95%

Quadros 2.6.3

Modelo com uma região, sem dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
k	0.190936 (± 0.010909)	0.206506 (± 0.011507)	0.139854 (± 0.008831)	0.119638 (± 0.007543)
f	1.371 E-1	1.248 E-1	1.914 E-1	1.949 E-1

f = valor da função objectivo

Modelo com duas regiões, sem dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
y ₀	5	5	5	5
k ₁	0.178986 (± 0.006776)	0.194836 (± 0.007088)	0.115814 (± 0.004609)	0.096302 (± 0.003473)
k ₂	0.345949 (± 0.041824)	0.378632 (± 0.044048)	0.239587 (± 0.030588)	0.203949 (± 0.022909)
f	6.103 E-2	5.357 E-2	7.855 E-2	6.678 E-2

Modelo com duas regiões, com dispersão

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
y ₀	5	5	5	5
k ₁	0.178271 (± 0.007344)	0.194120 (± 0.007622)	0.113330 (± 0.005102)	0.096160 (± 0.003842)
k ₂	0.341322 (± 0.041838)	0.372552 (± 0.043757)	0.226450 (± 0.030165)	0.203263 (± 0.024659)
D	2.299 E-8 (± 0.001244)	6.581 E-8 (± 0.001066)	1.594 E-7 (± 0.002124)	8.659 E-7 (± 0.002245)
f	6.109 E-2	5.363 E-2	8.015 E-2	6.679 E-2

Discriminação entre os modelos candidatos

A equação (2.6.95) permite utilizar o teste *t* para verificar a hipótese

$$H_0 : \bar{x}_i = \mu, \quad (2.6.98)$$

contra a hipótese alternativa

$$H_1 : \bar{x}_i \neq \mu \quad (2.6.99)$$

$$(\text{ou } H_1 : \bar{x}_i > \mu,$$

$$\text{ou } H_1 : \bar{x}_i < \mu),$$

onde μ é um certo valor fixo.

Assim, com o objectivo de discriminar entre os modelos candidatos, aplicámos o teste t para verificar se o coeficiente de dispersão é significativamente diferente de zero, ou seja, testámos a hipótese

$$H_0 : \bar{D} = 0, \quad (2.6.100)$$

contra a hipótese alternativa

$$H_1 : \bar{D} > 0. \quad (2.6.101)$$

Neste caso, a estatística do teste (supondo H_0 verdadeira) calcula-se de acordo com a seguinte equação

$$\tau = \frac{\hat{D}}{s\sqrt{a_{33}}} \sim t_{m-3}. \quad (2.6.102)$$

Calculando (2.6.102), chegamos aos seguintes valores:

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
τ	3.670 E-5	1.226 E-4	1.491 E-4	7.658 E-4
p	0.500	0.500	0.500	0.500

Quadro 2.6.4

No quadro anterior, p representa o *valor de prova* do teste (o “ p -value”), ou seja, é a probabilidade

$$p = P\{\tau > t_{m-3}(1-p)\}. \quad (2.6.103)$$

Em conclusão, os testes indicam claramente que a hipótese H_0 não é rejeitada. Em consequência deste resultado, que está de acordo com o comportamento observado do sistema (ponto 2.5), abandonámos o modelo que inclui o mecanismo de dispersão.

Consideremos, agora, o problema da discriminação entre os dois modelos só com segregação. Com este objectivo, testámos a hipótese

$$H_0 : \bar{k}_1 = \bar{k}_2 \quad (= \bar{k}) \quad (\text{uma região}), \quad (2.6.104)$$

contra a hipótese alternativa

$$H_1 : \bar{k}_1 \neq \bar{k}_2 \quad (\text{duas regiões}). \quad (2.6.105)$$

Neste caso, para testar H_0 aplicámos o teste F , e verificámos se o decréscimo na variância do erro, quando passamos de uma para duas regiões, é significativo.

Assim, sejam as variáveis

$$(m-1) \frac{s_1^2}{\sigma_1^2} \quad \text{e} \quad (m-2) \frac{s_2^2}{\sigma_2^2},$$

onde s_1^2 , s_2^2 , σ_1^2 e σ_2^2 têm o significado anteriormente atribuído, indicando os índices 1 e 2 que as grandezas se referem aos modelos com uma região e duas regiões. Como vimos atrás (expressão 2.6.93), estas variáveis seguem, aproximadamente, uma distribuição do qui-quadrado com $m - p$ graus de liberdade, ou seja,

$$(m-1) \frac{s_1^2}{\sigma_1^2} \sim \chi_{m-1}^2 \quad (2.6.106)$$

$$\text{e} \quad (m-2) \frac{s_2^2}{\sigma_2^2} \sim \chi_{m-2}^2 \quad (2.6.107)$$

Por definição, a variável F , com ν_1 e ν_2 graus de liberdade, é dada por

$$F_{\nu_1 \nu_2} = \frac{\chi_{\nu_1}^2 / \nu_1}{\chi_{\nu_2}^2 / \nu_2}, \quad (2.6.108)$$

então, combinando (2.6.106), (2.6.107) e (2.6.108), obtemos

$$\frac{s_1^2 / \sigma_1^2}{s_2^2 / \sigma_2^2} \sim F_{m-1 \ m-2}. \quad (2.6.109)$$

Agora, supondo que H_0 é verdadeira, isto é,

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2, \quad (2.6.110)$$

podemos escrever

$$\phi = \frac{s_1^2}{s_2^2} \sim F_{m-1 \ m-2}. \quad (2.6.111)$$

No quadro seguinte, apresentam-se os valores da estatística ϕ para os quatro grupos de ensaios. O valor p representa o valor de prova do teste, ou seja, é a probabilidade

$$p = P\{\phi > F_{m-1 \ m-2}(1-p)\}. \quad (2.6.112)$$

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
ϕ	2.246	2.330	2.437	2.919
p	5.467 E-5	2.696 E-5	1.089 E-5	1.979 E-7

Quadro 2.6.5

Em conclusão, a hipótese H_0 é rejeitada, ou seja, quando passamos de uma para duas regiões, existe um decréscimo (acentuado) da variância estimada do erro. Este resultado está de acordo com a observação do sistema, que sugere claramente a existência de duas regiões. Assim, o modelo com duas regiões é aceite, em detrimento do modelo com uma região.

Qualidade do ajuste – Teste de Kolmogorov-Smirnov (teste KS)

Para quantificar a qualidade dos ajustes efectuados recorremos ao *teste de Kolmogorov-Smirnov*. O teste KS tem, sobretudo, a vantagem de ser independente de uma estimativa do verdadeiro valor da variância do erro experimental (o que não sucede, por exemplo, com o teste do qui-quadrado ou com o teste F). Dado que a solução das equações do modelo se encontra na forma discretizada, aplicámos o teste na versão para duas amostras (retiradas de uma população desconhecida, com distribuição de probabilidade contínua e univariável).

De acordo com a prática habitual, o teste foi aplicado individualmente a cada curva ajustada. Assim, uma das amostras é constituída pelos dados referentes a um certo tempo de residência e a outra amostra é constituída pelos valores previstos pelo modelo, para o mesmo tempo de residência.

Se numa amostra existirem N dados, localizados em x_i , com $i=1, \dots, N$, então a distribuição cumulativa empírica, $S_N(x)$, é a fracção de pontos localizados à esquerda de x , isto é,

$$S_N(x) = \frac{\text{maior número } i : x_i \leq x}{N} \quad (2.6.113)$$

Sejam $S_{N1}(x)$ e $S_{N2}(x)$, respectivamente, as distribuições cumulativas empíricas dos dados e dos valores previstos. (A variável independente x , neste caso, representa a concentração em magnetite).

Para comparar as duas amostras, mediante $S_{N1}(x)$ e $S_{N2}(x)$, o teste KS utiliza a estatística D , que é definida do seguinte modo

$$D = \max_x |S_{N1}(x) - S_{N2}(x)| \quad (2.6.114)$$

Supondo que a hipótese nula é válida ($S_{N1}(x)$ e $S_{N2}(x)$ são *consistentes* com a mesma população), a distribuição de probabilidade de D pode ser calculada. Neste cálculo é utilizada a função

$$Q_{KS}(\lambda) = 2 \sum_{j=1}^{+\infty} (-1)^{j-1} \exp(-2j^2 \lambda^2), \quad (2.6.115)$$

onde $Q_{KS}(\lambda)$ é uma função monótona com

$$Q_{KS}(0) = 1 \quad \text{e} \quad Q_{KS}(+\infty) = 0.$$

Em termos de Q_{KS} , o valor de prova do teste, para um valor observado de D igual a d , é aproximadamente dado pela equação (Press et al., 1986)

$$P\{D > d\} = Q_{KS} \left(\sqrt{\frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2}} d \right). \quad (2.6.116)$$

O erro associado ao cálculo da probabilidade P , quando se utiliza a equação anterior, decresce assintoticamente com o crescimento de N_1 e N_2 . No nosso caso, em que

$$N_1 = 16 \quad \text{e} \quad N_2 = 8,$$

a equação (2.6.116) garante apenas um algarismo significativo. Nos quadros seguintes, para cada curva ajustada, apresentam-se os valores calculados da estatística d e da probabilidade P .

Atendendo aos valores relativamente elevados de P ($P > 0.05$, em todos os casos), podemos pensar que os dados experimentais e os valores previstos provêm da mesma população (possivelmente, a distribuição dos verdadeiros valores das observações). Assim, de acordo com os resultados do teste KS, o modelo não é rejeitado.

Modelo com duas regiões, sem dispersão
Teste KS – Quadros 2.6.7

grupo I						
seg.	15	30	60	90	120	180
N_1	16	16	16	16	16	16
N_2	8	8	8	8	8	8
d	0.250	0.250	0.125	0.125	0.250	0.313
P^*	0.893	0.893	0.999	0.999	0.893	0.675
grupo II						
seg.	15	30	60	90	120	180
N_1	16	16	16	16	16	16
N_2	8	8	8	8	8	8
d	0.313	0.125	0.125	0.125	0.250	0.188
P^*	0.675	0.999	0.999	0.999	0.893	0.992
grupo III						
seg.	15	30	60	90	120	180
N_1	16	16	16	16	16	16
N_2	8	8	8	8	8	8
d	0.250	0.250	0.250	0.125	0.188	0.375
P^*	0.893	0.893	0.893	0.999	0.992	0.441

grupo IV						
seg.	15	30	60	90	120	180
N ₁	16	16	16	16	16	16
N ₂	8	8	8	8	8	8
d	0.250	0.188	0.188	0.125	0.125	0.188
P *	0.893	0.992	0.992	0.999	0.999	0.992

* valorizar apenas o primeiro algarismo significativo

Análise dos resíduos – Distribuição

Se o modelo é correcto, os resíduos no ponto mínimo, aproximadamente, são o valor dos erros experimentais. Assim, os resíduos devem confirmar as hipóteses anteriormente feitas sobre as propriedades dos erros (ou, pelo menos, não devem exibir um comportamento contrário a estas hipóteses). Recordando o que atrás foi escrito, as hipóteses sobre as propriedades dos erros são as seguintes:

- os erros experimentais são independentes (e, portanto, os resíduos devem constituir uma *amostra aleatória*),
- têm média zero,
- têm variância constante,
- seguem a lei normal.

Analizamos, em seguida, os aspectos relacionados com a distribuição dos resíduos e só depois passamos ao estudo da sua aleatoriedade.

Para percebermos o modo com os resíduos se distribuem, começámos por representar graficamente a sua relação com as variáveis do modelo. Estas variáveis, como vimos anteriormente, são:

- o tempo de residência (variável independente),
- a posição no leito (variável independente),
- a concentração prevista em magnetite (variável dependente).

Os gráficos encontram-se no anexo C.

Podemos ver que a dispersão vertical dos pontos, ao longo das escalas de tempo e de posição, é aproximadamente uniforme, o que confirma a hipótese da variância constante. No que diz respeito à relação entre os resíduos e a concentração prevista, verifica-se que, junto dos extremos da escala de concentração, a dispersão dos pontos é menor. Este comportamento sugere que o erro, associado a estes pontos, é também menor. Tratando-se, no

entanto, de um efeito muito localizado e que envolve um número relativamente pequeno de resíduos, julgamos que a hipótese da homogeneidade do erro pode ser mantida. Os gráficos efectuados indicam, também, que não existem desvios sistemáticos importantes entre o modelo e as observações (isto é, os resíduos, aparentemente, distribuem-se de uma forma aleatória).

Num problema de regressão linear pode provar-se que o somatório dos resíduos é igual a zero (Draper, Smith, 1998). Então, a média dos resíduos

$$m_g = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m g_i(\hat{x}), \quad (2.6.117)$$

é também igual a zero. Para um problema não-linear (embora, no nosso caso, quase-linear) não existe esta garantia. Assim, para verificar se o verdadeiro valor da média μ_g (estimado por m_g) é igual a zero, aplicámos o teste t. Seguindo uma linha de argumentação semelhante à que nos permitiu escrever a expressão (2.6.102), temos que

$$\tau_g = \frac{m_g}{s / \sqrt{m}} \sim t_{m-2}, \quad (2.6.118)$$

onde $s / \sqrt{m}$

é o erro padrão da media m_g , s é a estimativa do desvio padrão dos resíduos e m é o número de observações. No quadro seguinte, apresenta-se a média dos resíduos, a estatística τ_g e o valor de prova do teste, isto é, a probabilidade

$$p = P\{|\tau_g| > t_{m-2}(1 - p/2)\}. \quad (2.6.119)$$

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
m_g	- 0.004194	0.002788	- 0.007337	- 0.008882
τ_g	- 1.1405	0.8091	- 1.7585	- 2.3087
p	0.257	0.420	0.082	0.023

Quadro 2.6.8

Em conclusão, para todos os grupos, a hipótese nula (μ_g é igual a zero) não é rejeitada, se fixarmos o nível de significado do teste em 1%. Este resultado, aponta no sentido de que não existe tendência sistemática (acentuada) para a subestimação, ou para a sobreestimação, dos valores observados.

No quadro 2.6.9, para os grupos I a IV, apresenta-se um conjunto de estatísticas referentes às distribuições dos resíduos. No quadro destacamos:

– O intervalo de confiança a 95% para o erro experimental, estimado a partir dos valores dos resíduos (e que é aproximadamente dado por $\pm 2 \times$ erro padrão), varia entre 6.8 e 8.2%. Isto significa um crescimento entre 1.1 e 3.1%, em relação aos valores anteriormente estimados. Assim, se existir, o erro do modelo parece ser tolerável.

– Os coeficientes de assimetria e curtose indicam que o ajuste à lei normal é, pelo menos, razoável. Portanto, as distribuições dos resíduos não contrariam a hipótese da *normalidade* dos erros experimentais. No anexo C comparam-se graficamente as distribuições cumulativas dos resíduos com a lei normal.

Estatísticas dos resíduos

Quadro 2.6.9

	grupo I	grupo II	grupo III	grupo IV
número de resíduos	96	96	96	96
média	- 0.00419	0.00279	- 0.00734	- 0.00888
máximo	0.1196	0.0956	0.1098	0.0880
mínimo	- 0.1147	- 0.0701	- 0.1098	- 0.1286
soma de quadrado dos resíduos	0.1221	0.1071	0.1571	0.1336
n.º de graus de liberdade	94	94	94	94
erro quadrático médio	0.00130	0.00114	0.00167	0.00142
intervalo de confiança	0.00099;	0.00087;	0.00128;	0.00109;
da variância a 95%	0.00177	0.00155	0.00228	0.00193
erro padrão *	0.0360	0.0338	0.0409	0.0377
$\pm 2 \times$ erro padrão	± 0.0720	± 0.0675	± 0.0818	± 0.0754
coeficiente de assimetria	0.2647	0.7924	0.1185	0.0183
coeficiente de curtose	1.733	0.5309	0.3095	1.094

* erro padrão = (erro quadrático médio)^{1/2}

Análise dos resíduos – Testes das sequências e do sinal

Como dissemos atrás, se o modelo é correcto, os resíduos são estimativas dos erros experimentais. Então, se os erros não forem independentes, os resíduos podem revelá-lo. Seguindo a prática habitual, para verificar a *independência* dos erros, testámos a *correlação sequencial* dos resíduos. A correlação sequencial pode, fundamentalmente, ser de dois tipos:

- correlação positiva (*atração*), isto é, os valores sucessivos dos resíduos tendem a agrupar-se,
- correlação negativa (*repulsão*), isto é, um resíduo positivo tende a ser seguido por um resíduo negativo, e *vice versa*.

Na ausência de correlação sequencial (e de qualquer outro tipo de correlação) os resíduos constituem uma amostra aleatória.

Os resíduos podem assumir valores positivos ou negativos, mas se forem verdadeiramente aleatórios, o seu sinal varia também de um modo aleatório. A aleatoriedade dos sinais dos resíduos, ou a sua ausência, neste caso, a presença de correlação sequencial, pode ser detectada aplicando o *teste das sequências*. Descrevemos, em seguida, o princípio deste teste.

Seja $X_1, \dots, X_N$ um conjunto de dados. Pretendemos testar a hipótese H_0 de que os dados constituem uma amostra aleatória. Suponhamos que cada dado é um 0 ou um 1, isto é, que cada dado pode ser dicotomizado em *verdadeiro* ou *falso*. No nosso caso, um 1 corresponde a um resíduo positivo e um 0 corresponde a um resíduo negativo. Qualquer sucessão consecutiva de 1's ou 0's é chamada uma *sequência* ("run"). Esta definição inclui, como excepção, sequências formadas por um único elemento. Assim, por exemplo, o conjunto de oito dados

1 1 0 0 0 1 0 1

contém cinco sequências, três de 1's e duas de 0's.

Suponhamos, agora, que o conjunto de dados $X_1, \dots, X_N$ contém n 1's e m 0's, onde $n+m=N$, e que R é o número de sequências. Se H_0 é verdadeira, qualquer das permutações de n 1's e m 0's é igualmente provável. Assim, dado um número total de n 1's e m 0's, se H_0 é verdadeira, a probabilidade de ocorrer um número R de sequências igual a r é dada por

$$\begin{aligned} P_{H_0} \{R=r\} &= \\ &= (\text{n.º de permutações de } n \text{ 1's e } m \text{ 0's resultando em } r \text{ sequências}) / \\ & / (\text{n.º de permutações de } n \text{ 1's e } m \text{ 0's}). \end{aligned} \quad (2.6.120)$$

Estes dois números de permutações podem ser determinados explicitamente, conduzindo às seguintes fórmulas (Ross, 1987)

$$P_{H_0} \{R=2k\} = 2 \frac{\binom{m-1}{k-1} \binom{n-1}{k-1}}{\binom{n+m}{n}} \quad (2.6.121)$$

$$P_{H_0} \{R=2k+1\} = \frac{\binom{m-1}{k-1} \binom{n-1}{k} + \binom{m-1}{k} \binom{n-1}{k-1}}{\binom{n+m}{n}}. \quad (2.6.122)$$

No quadro seguinte (quadro 2.6.10), a probabilidade de ocorrência de r sequências, quando $n = m = 4$, é calculada recorrendo às fórmulas (2.6.121) e (2.6.122).

Probabilidade da ocorrência de r sequências ($n = m = 4$)

Quadro 2.6.10

r	$P_{H_0}\{R=r\}$
2	2 / 70
3	6 / 70
4	18 / 70
5	18 / 70
6	18 / 70
7	6 / 70
8	2 / 70

Numa amostra que contém n 1's e m 0's, se o número observado de sequências for muito grande ou muito pequeno para ser explicado pelo acaso, a hipótese H_0 é rejeitada pelo teste. Um número elevado de sequências indica a possibilidade de correlação negativa entre os dados, ao passo que um número reduzido de sequências indica a possibilidade de correlação positiva. Especificamente, se r é o número observado de sequências, o valor de prova do teste é dado por (Ross, 1987)

$$p = 2 \min(P_{H_0}\{R \geq r\}, P_{H_0}\{R \leq r\}). \quad (2.6.123)$$

Para o nosso problema, aplicámos o teste das sequências a cada sucessão de oito resíduos, referentes a cada curva ajustada. Nos quadros 2.6.10, para cada teste é indicado:

- o número n de resíduos positivos,
- o número m de resíduos negativos,
- o número r de sequências,
- a probabilidade P de ocorrerem r ou menos (ou mais) sequências.

Modelo com duas regiões, sem dispersão – Teste das sequências – Quadros 2.6.11

grupo I

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	3	4	4	4	2	3	6	3	3	3	4	4
m	5	4	4	4	6	5	2	5	5	5	4	4
r	3	5	2	4	5	4	3	4	3	6	3	6
P	0.143	0.629	0.029	0.371	0.357	0.429	0.286	0.429	0.143	0.286	0.114	0.371

grupo II

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	5	3	4	4	2	4	4	4	4	5	4	2
m	3	5	4	4	6	4	4	4	4	3	4	6
r	3	4	6	5	3	3	5	5	5	5	3	2
P	0.143	0.429	0.371	0.629	0.286	0.114	0.629	0.629	0.629	0.571	0.114	0.071

grupo III

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	4	4	3	4	3	2	2	3	2	2	2	1
m	4	4	5	4	5	6	6	5	6	6	6	7
r	3	5	5	5	2	2	4	4	4	4	4	2
P	0.114	0.629	0.571	0.629	0.036	0.071	0.643	0.429	0.643	0.643	0.643	0.250

grupo IV

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	4	2	4	3	2	3	3	1	4	3	3	2
m	4	6	4	5	6	5	5	7	4	5	5	6
r	5	4	6	6	3	4	5	3	3	4	4	4
P	0.629	0.643	0.371	0.286	0.286	0.429	0.571	0.750	0.114	0.429	0.429	0.643

Em função dos resultados dos testes, não é rejeitada a hipótese de que os resíduos constituem uma amostra aleatória. Assim, também não é rejeitada a hipótese de que os erros experimentais são independentes.

Como podemos ver no quadro 2.6.10, se surgirem sucessões de sinais do tipo

+ - + - + - + -

ou + + + + - - - -,

o teste das sequências rejeita a hipótese da aleatoriedade dos dados. No entanto, no caso de aparecerem sucessões do tipo

+ + + + + - +

ou - + - - - - - -,

o teste indica uma elevada probabilidade de ocorrência do número de sequências, não rejeitando a hipótese da aleatoriedade. Como a probabilidade dos sinais positivo e negativo é igual, as sucessões anteriores deveriam, em princípio, implicar a rejeição da hipótese da aleatoriedade. Assim, com o objectivo de detectar este último tipo de sucessões, aplicámos, como complemento ao teste das sequências, o teste do sinal. Apresentamos, em seguida, o princípio deste teste.

Seja $X_1, \dots, X_n$ uma amostra, onde cada $X_i \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. Seja, também, $I_1, \dots, I_n$, com I_i definido do seguinte modo

$$I_i = \begin{cases} 1 & \text{se } X_i > 0 \\ 0 & \text{se } X_i < 0 \end{cases} \quad (2.6.124)$$

Pretende-se testar a hipótese H_0 de que os dados $I_1, \dots, I_n$ formam um conjunto de variáveis aleatórias independentes, em que a probabilidade de I_i ser igual a 1 é igual a $1/2$. Por outras palavras, pretendemos testar a hipótese de que os resíduos são independentes e que têm igual probabilidade de ser positivos ou negativos.

Seja v o número observado de resíduos positivos, isto é, o somatório

$$\sum_{i=1}^n I_i.$$

Se H_0 é verdadeira, a probabilidade de ocorrência de v resíduos positivos, numa amostra com n dados, é, então, dada por

$$P\{\text{Bin}(n, p) = v\} = \binom{n}{v} p^v (1-p)^{n-v}, \quad (2.6.125)$$

onde $\text{Bin}(n, p)$ representa a lei binomial com parâmetros n e $p (=1/2)$. Se o número observado de resíduos positivos for muito grande ou muito pequeno para ser explicado pela lei binomial, com parâmetros n e $p=1/2$, a hipótese H_0 é rejeitada pelo teste. Para v resíduos positivos, o valor de prova do teste pode ser calculado pela fórmula (Ross, 1987)

$$p = \begin{cases} 2P\{\text{Bin}(n, 0.5) \leq v\} & \text{se } v \leq n/2 \\ 2P\{\text{Bin}(n, 0.5) \leq n-v\} & \text{se } v \geq n/2 \end{cases} \quad (2.6.126)$$

Nos quadros seguintes apresentam-se os resultados do teste do sinal. O teste foi aplicado às sucessões de oito resíduos que foram objecto do teste das sequências. Para cada teste é indicado:

- o número n de resíduos não nulos,
- o menor número de resíduos com o mesmo sinal, v ,
- a probabilidade P de ocorrerem v , ou menos, resíduos.

Modelo com duas regiões, sem dispersão – Teste do sinal – Quadros 2.6.12

grupo I												
seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	3	4	4	4	2	3	2	3	3	3	4	4
P	0.363	0.637	0.637	0.637	0.145	0.363	0.145	0.363	0.363	0.363	0.637	0.637

grupo II

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	3	3	4	4	2	4	4	4	4	3	4	2
P	0.363	0.363	0.637	0.637	0.145	0.637	0.637	0.637	0.637	0.363	0.637	0.145

grupo III

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	4	4	3	4	3	2	2	3	2	2	2	1
P	0.637	0.637	0.363	0.637	0.363	0.145	0.145	0.363	0.145	0.145	0.145	0.035

grupo IV

seg.	15	15'	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	4	2	4	3	2	3	3	1	4	3	3	2
P	0.637	0.145	0.637	0.637	0.145	0.363	0.363	0.035	0.637	0.363	0.363	0.145

Nos grupos I e II a configuração mais *invulgar* de sinais é do tipo 2 em 8, à qual corresponde uma probabilidade de 0.145. Assim, para estes dois grupos, não é rejeitada a hipótese de que os resíduos são independentes. Nos grupos III e IV verifica-se que existe uma sucessão do tipo 1 em 8, a que corresponde uma probabilidade de apenas 0.035. No entanto, atendendo à expressão (2.6.126), que dá o valor de prova do teste, se fixarmos o nível de significado em 5%, a hipótese H_0 ainda não é rejeitada. Assim, julgamos que se mantém a hipótese da independência dos resíduos e, por extensão, mantém-se a hipótese da independência dos erros experimentais.

Intervalos de confiança para observações futuras

Para finalizar, consideramos o problema da *previsão de observações futuras*, sob a forma de intervalos de confiança. Isto é, se se realizasse um nova série de ensaios, qual seria o valor das observações previsto pelo modelo? Na literatura, o problema da previsão de observações futuras é também referido como *previsão da resposta do modelo*. A extensão dos intervalos calculados, permitirá avaliar, com grande rigor, a capacidade efectiva de previsão do modelo.

Como vimos anteriormente, se o modelo é correcto,

$$r_i = s_i(\bar{x}) + e_i \quad (2.6.127)$$

com

$$e_i \sim N(0, \sigma^2) \quad (2.6.128)$$

$$\text{e} \quad \text{Cov}(e_i, e_j) = 0, \quad i \neq j. \quad (2.6.129)$$

Então, para uma observação futura r_i , verifica-se que

$$r_i \sim N(s_i(\bar{x}), \sigma^2). \quad (2.6.130)$$

Por definição,

$$\text{Cov}(r_i, r_j) = E[(r_i - E[r_i])(r_j - E[r_j])] \quad (2.6.131)$$

Como

$$\begin{aligned} E[(r_i - E[r_i])(r_j - E[r_j])] &= \\ &= E[r_i r_j] - E[r_i]E[r_j] \\ &= E[(s_i(\bar{x}) + e_i)(s_j(\bar{x}) + e_j)] - E[s_i(\bar{x}) + e_i]E[s_j(\bar{x}) + e_j] \\ &= E[e_i e_j] - E[e_i]E[e_j] \\ &= \text{Cov}(e_i, e_j), \end{aligned} \quad (2.6.132)$$

então,

$$\text{Cov}(r_i, r_j) = \text{Cov}(e_i, e_j) \quad (2.6.133)$$

e uma vez que as variáveis r_i e r_j seguem a lei normal, as observações são independentes entre si.

Nos desenvolvimentos seguintes vamos supor que, aproximadamente, se verifica

$$s_i(\hat{x}) \sim N(s_i(\bar{x}), \text{Var}(s_i(\hat{x}))), \quad (2.6.134)$$

ou seja, que, para pequenas variações dos parâmetros, o modelo é razoavelmente linear, e que $\hat{x}$ é próximo de $\bar{x}$. Atendendo a que os parâmetros $\hat{x}$ são calculados com base num conjunto de observações anteriores, os valores $s_i(\hat{x})$ são independentes das observações futuras r_i (porque, como vimos, as observações são independentes). Então,

$$r_i - s_i(\hat{x}) \sim N(0, \sigma^2 + \text{Var}(s_i(\hat{x}))). \quad (2.6.135)$$

Se na expressão anterior convertermos a lei normal, na lei normal padrão, temos que

$$\frac{r_i - s_i(\hat{x})}{\sigma^2 + \text{Var}(s_i(\hat{x}))} \sim N(0, 1). \quad (2.6.136)$$

Agora, seja a variável b definida do seguinte modo

$$b = s^2 + se^2(s_i(\hat{x})), \quad (2.6.137)$$

onde s representa o erro padrão de e_i (isto é, a estimativa do desvio padrão dos erros) e $se(s_i(\hat{x}))$ representa o erro padrão do valor previsto pelo modelo. Então, pelos argumentos anteriormente apresentados, quando escrevemos a expressão (2.6.95), temos que

$$\frac{r_i - s_i(\hat{x})}{\sqrt{b}} \sim t_{m-p}. \quad (2.6.138)$$

Com base nesta expressão podemos determinar o intervalo de confiança para uma observação futura individual. Assim, para um nível de significado de $100(1-\alpha)\%$,

$$P\left\{t_{m-p}(\alpha/2) \leq \frac{r_i - s_i(\hat{x})}{\sqrt{b}} \leq t_{m-p}(1-\alpha/2)\right\} = 1-\alpha, \quad (2.6.139)$$

isto é, a probabilidade do intervalo

$$s_i(\hat{x}) - t_{m-p}(1-\alpha/2)\sqrt{b} \leq r_i \leq s_i(\hat{x}) + t_{m-p}(1-\alpha/2)\sqrt{b} \quad (2.6.140)$$

conter o valor da observação futura é igual a $1-\alpha$.

No cálculo do erro padrão dos valores previstos $se(s_i(\hat{x}))$, utilizámos a seguinte aproximação (Bates, Watts, 1988),

$$se(s_i(\hat{x})) \approx s \sqrt{\mathbf{v}_i' (\mathbf{J}\mathbf{J}')^{-1} \mathbf{v}_i}, \quad (2.6.141)$$

onde $\mathbf{v}_i$ é a coluna i do Jacobiano, ou seja, é o vector

$$\mathbf{v}_i = \nabla g_i(\hat{x}). \quad (2.6.142)$$

A aproximação (2.6.141) é apenas válida se o modelo for razoavelmente linear na vizinhança do mínimo. No cálculo da inversa da matriz $\mathbf{J}\mathbf{J}'$ foi, novamente, utilizado o *método de Gauss-Jordan*, com pivotagem e escalamento de linhas.

No anexo D, para os grupos de ensaios I a IV, representam-se graficamente os intervalos de confiança a 95% calculados pela expressão (2.6.140). Representam-se, também, os dados experimentais e as linhas de regressão. Verifica-se que o termo $se(s_i(\hat{x}))$, na prática, é inferior a s , em pelo menos uma ordem de grandeza. Assim, no grupo de ensaios I, a extensão dos intervalos de confiança varia entre 7.1 e 7.6%; no grupo de ensaios II, varia entre 6.7 e 7.2%; no grupo III, entre 8.1 e 8.5%; no grupo IV, entre 7.5 e 7.9%. Notar que os intervalos de confiança são truncados, sempre registam valores negativos ou superiores a um (100%).

Anexos A a D

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo I – Quadros A.1

Tempo de residência 15 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	95	23.2	0.32	127	48.8	0.68
2	148	36.1	0.47	107	41.2	0.53
3	160	39.0	0.48	111	42.7	0.52
4	156	38.0	0.48	106	40.8	0.52
5	136	33.2	0.43	114	43.8	0.57
6	121	29.5	0.37	128	49.2	0.63
7	173	42.2	0.54	92	35.4	0.46
8	259	63.2	0.95	9	3.5	0.05
total	1248	304.4	4.05	794	305.4	3.95

Tempo de residência 30 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	18	4.4	0.07	150	57.7	0.93
2	75	18.3	0.26	134	51.5	0.74
3	141	34.4	0.41	128	49.2	0.59
4	139	33.9	0.46	105	40.4	0.54
5	180	43.9	0.47	131	50.4	0.53
6	164	40.0	0.49	109	41.9	0.51
7	258	62.9	0.81	39	15.0	0.19
8	273	66.6	0.99	1	0.4	0.01
total	1248	304.4	3.96	797	306.5	4.04

Tempo de residência 60 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	163	62.7	1.00
2	5	1.2	0.02	185	71.2	0.98
3	68	16.6	0.20	170	65.4	0.80
4	156	38.0	0.45	119	45.8	0.55
5	167	40.7	0.51	101	38.8	0.49
6	267	65.1	0.77	50	19.2	0.23
7	291	71.0	0.96	8	3.1	0.04
8	290	70.7	0.99	1	0.4	0.01
total	1245	303.7	3.91	797	306.5	4.09

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo I – Quadros A.1

Tempo de residência 90 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	201	77.3	0.99
2	9	2.2	0.03	197	75.8	0.97
3	28	6.8	0.09	180	69.2	0.91
4	100	24.4	0.32	137	52.7	0.68
5	214	52.2	0.72	54	20.8	0.28
6	265	64.6	0.89	20	7.7	0.11
7	325	79.3	0.97	6	2.3	0.03
8	303	73.9	1.00	0	0.0	0.00
total	1246	303.9	4.02	795	305.8	3.98

Tempo de residência 120 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	158	60.8	1.00
2	1	0.2	0.00	195	75.0	1.00
3	3	0.7	0.01	214	82.3	0.99
4	58	14.1	0.19	162	62.3	0.81
5	259	63.2	0.76	53	20.4	0.24
6	324	79.0	0.95	11	4.2	0.05
7	303	73.9	0.99	2	0.8	0.01
8	297	72.4	1.00	0	0.0	0.00
total	1246	303.9	3.90	795	305.8	4.10

Tempo de residência 180 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	147	56.5	1.00
2	1	0.2	0.00	223	85.8	1.00
3	1	0.2	0.00	201	77.3	1.00
4	16	3.9	0.05	195	75.0	0.95
5	290	70.7	0.88	26	10.0	0.12
6	294	71.7	0.99	1	0.4	0.01
7	326	79.5	1.00	1	0.4	0.00
8	315	76.8	1.00	0	0.0	0.00
total	1244	303.4	3.93	794	305.4	4.07

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo I – Quadros A.1

Tempo de residência 15 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	85	20.7	0.30	125	48.1	0.70
2	161	39.3	0.47	116	44.6	0.53
3	157	38.3	0.48	107	41.2	0.52
4	158	38.5	0.47	113	43.5	0.53
5	151	36.8	0.46	113	43.5	0.54
6	132	32.2	0.39	130	50.0	0.61
7	145	35.4	0.54	78	30.0	0.46
8	259	63.2	0.94	11	4.2	0.06
total	1248	304.4	4.05	793	305.0	3.95

Tempo de residência 30 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	20	4.9	0.07	157	60.4	0.93
2	105	25.6	0.34	132	50.8	0.66
3	154	37.6	0.42	134	51.5	0.58
4	140	34.1	0.43	116	44.6	0.57
5	137	33.4	0.42	122	46.9	0.58
6	160	39.0	0.51	98	37.7	0.49
7	252	61.5	0.82	34	13.1	0.18
8	278	67.8	0.99	2	0.8	0.01
total	1246	303.9	4.00	795	305.8	4.00

Tempo de residência 60 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	156	60.0	0.99
2	26	6.3	0.08	181	69.6	0.92
3	96	23.4	0.30	144	55.4	0.70
4	140	34.1	0.43	119	45.8	0.57
5	171	41.7	0.48	117	45.0	0.52
6	202	49.3	0.67	64	24.6	0.33
7	309	75.4	0.94	12	4.6	0.06
8	301	73.4	1.00	0	0.0	0.00
total	1247	304.1	3.91	793	305.0	4.09

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo I – Quadros A.1

Tempo de residência 90 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	184	70.8	1.00
2	1	0.2	0.00	216	83.1	1.00
3	23	5.6	0.07	193	74.2	0.93
4	128	31.2	0.41	116	44.6	0.59
5	220	53.7	0.69	62	23.8	0.31
6	270	65.9	0.89	21	8.1	0.11
7	317	77.3	0.99	3	1.2	0.01
8	287	70.0	1.00	0	0.0	0.00
total	1246	303.9	4.05	795	305.8	3.95

Tempo de residência 120 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	151	58.1	1.00
2	1	0.2	0.00	214	82.3	1.00
3	1	0.2	0.00	189	72.7	1.00
4	28	6.8	0.09	188	72.3	0.91
5	269	65.6	0.81	40	15.4	0.19
6	331	80.7	0.95	10	3.8	0.05
7	318	77.6	0.99	2	0.8	0.01
8	297	72.4	1.00	0	0.0	0.00
total	1245	303.7	3.85	794	305.4	4.15

Tempo de residência 180 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	154	59.2	1.00
2	1	0.2	0.00	214	82.3	1.00
3	1	0.2	0.00	212	81.5	1.00
4	34	8.3	0.10	187	71.9	0.90
5	312	76.1	0.90	23	8.8	0.10
6	275	67.1	0.98	4	1.5	0.02
7	317	77.3	1.00	1	0.4	0.00
8	303	73.9	1.00	0	0.0	0.00
total	1243	303.2	3.98	795	305.8	4.02

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo II – Quadros A.2

Tempo de residência 15 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	95	23.2	0.27	162	62.3	0.73
2	112	27.3	0.44	91	35.0	0.56
3	167	40.7	0.46	123	47.3	0.54
4	144	35.1	0.45	111	42.7	0.55
5	148	36.1	0.44	118	45.4	0.56
6	135	32.9	0.42	118	45.4	0.58
7	173	42.2	0.64	63	24.2	0.36
8	274	66.8	0.96	8	3.1	0.04
total	1248	304.4	4.08	794	305.4	3.92

Tempo de residência 30 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	30	7.3	0.10	181	69.6	0.90
2	131	32.0	0.37	141	54.2	0.63
3	128	31.2	0.42	113	43.5	0.58
4	118	28.8	0.43	101	38.8	0.57
5	152	37.1	0.45	116	44.6	0.55
6	156	38.0	0.49	103	39.6	0.51
7	235	57.3	0.80	38	14.6	0.20
8	296	72.2	0.99	2	0.8	0.01
total	1246	303.9	4.04	795	305.8	3.96

Tempo de residência 60 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	181	69.6	1.00
2	9	2.2	0.03	187	71.9	0.97
3	99	24.1	0.29	152	58.5	0.71
4	150	36.6	0.44	120	46.2	0.56
5	159	38.8	0.54	85	32.7	0.46
6	246	60.0	0.72	60	23.1	0.28
7	286	69.8	0.95	9	3.5	0.05
8	297	72.4	0.99	1	0.4	0.01
total	1247	304.1	3.98	795	305.8	4.02

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo II – Quadros A.2

Tempo de residência 90 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	162	62.3	1.00
2	1	0.2	0.00	225	86.5	1.00
3	7	1.7	0.02	206	79.2	0.98
4	93	22.7	0.31	132	50.8	0.69
5	232	56.6	0.74	51	19.6	0.26
6	302	73.7	0.91	18	6.9	0.09
7	319	77.8	0.99	2	0.8	0.01
8	291	71.0	1.00	0	0.0	0.00
total	1246	303.9	3.98	796	306.2	4.02

Tempo de residência 120 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	187	71.9	1.00
2	2	0.5	0.01	207	79.6	0.99
3	2	0.5	0.01	206	79.2	0.99
4	41	10.0	0.14	161	61.9	0.86
5	277	67.6	0.87	26	10.0	0.13
6	314	76.6	0.98	5	1.9	0.02
7	279	68.0	0.99	2	0.8	0.01
8	327	79.8	1.00	0	0.0	0.00
total	1243	303.2	3.99	794	305.4	4.01

Tempo de residência 180 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	175	67.3	1.00
2	1	0.2	0.00	199	76.5	1.00
3	1	0.2	0.00	201	77.3	1.00
4	21	5.1	0.07	185	71.2	0.93
5	293	71.5	0.85	32	12.3	0.15
6	284	69.3	0.99	2	0.8	0.01
7	332	81.0	1.00	1	0.4	0.00
8	309	75.4	1.00	0	0.0	0.00
total	1242	302.9	3.91	795	305.8	4.09

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo II – Quadros A.2

Tempo de residência 15 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	71	17.3	0.22	156	60.0	0.78
2	145	35.4	0.46	109	41.9	0.54
3	156	38.0	0.49	103	39.6	0.51
4	152	37.1	0.46	112	43.1	0.54
5	139	33.9	0.44	112	43.1	0.56
6	114	27.8	0.37	123	47.3	0.63
7	175	42.7	0.61	72	27.7	0.39
8	296	72.2	0.96	7	2.7	0.04
total	1248	304.4	4.02	794	305.4	3.98

Tempo de residência 30 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	30	7.3	0.09	193	74.2	0.91
2	96	23.4	0.31	135	51.9	0.69
3	128	31.2	0.41	117	45.0	0.59
4	140	34.1	0.45	107	41.2	0.55
5	152	37.1	0.45	116	44.6	0.55
6	171	41.7	0.52	99	38.1	0.48
7	270	65.9	0.87	25	9.6	0.13
8	261	63.7	0.98	3	1.2	0.02
total	1248	304.4	4.09	795	305.8	3.91

Tempo de residência 60 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	226	86.9	0.99
2	14	3.4	0.04	197	75.8	0.96
3	79	19.3	0.28	128	49.2	0.72
4	151	36.8	0.47	108	41.5	0.53
5	190	46.3	0.58	87	33.5	0.42
6	251	61.2	0.82	35	13.5	0.18
7	279	68.0	0.94	12	4.6	0.06
8	280	68.3	0.99	1	0.4	0.01
total	1246	303.9	4.13	794	305.4	3.87

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo II – Quadros A.2

Tempo de residência 90 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	182	70.0	0.99
2	3	0.7	0.01	171	65.8	0.99
3	8	2.0	0.02	218	83.8	0.98
4	79	19.3	0.23	165	63.5	0.77
5	245	59.8	0.78	44	16.9	0.22
6	320	78.0	0.94	12	4.6	0.06
7	316	77.1	0.99	2	0.8	0.01
8	274	66.8	1.00	0	0.0	0.00
total	1247	304.1	3.99	794	305.4	4.01

Tempo de residência 120 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	220	84.6	1.00
2	1	0.2	0.00	190	73.1	1.00
3	1	0.2	0.00	213	81.9	1.00
4	67	16.3	0.23	141	54.2	0.77
5	294	71.7	0.90	21	8.1	0.10
6	285	69.5	0.96	7	2.7	0.04
7	308	75.1	0.99	2	0.8	0.01
8	288	70.2	1.00	0	0.0	0.00
total	1245	303.7	4.09	794	305.4	3.91

Tempo de residência 180 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	157	60.4	1.00
2	0	0.0	0.00	204	78.5	1.00
3	0	0.0	0.00	210	80.8	1.00
4	23	5.6	0.07	204	78.5	0.93
5	269	65.6	0.90	19	7.3	0.10
6	320	78.0	1.00	1	0.4	0.00
7	307	74.9	1.00	0	0.0	0.00
8	322	78.5	1.00	0	0.0	0.00
total	1241	302.7	3.96	795	305.8	4.04

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo III – Quadros A.3

Tempo de residência 90 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	219	84.2	0.99
2	13	3.2	0.04	175	67.3	0.96
3	74	18.0	0.20	192	73.8	0.80
4	159	38.8	0.42	140	53.8	0.58
5	187	45.6	0.53	106	40.8	0.47
6	238	58.0	0.75	50	19.2	0.25
7	385	93.9	0.96	11	4.2	0.04
8	344	83.9	1.00	0	0.0	0.00
total	1402	342.0	3.90	893	343.5	4.10

Tempo de residência 120 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	252	96.9	1.00
2	3	0.7	0.01	187	71.9	0.99
3	14	3.4	0.04	198	76.2	0.96
4	100	24.4	0.29	159	61.2	0.71
5	252	61.5	0.71	66	25.4	0.29
6	286	69.8	0.87	27	10.4	0.13
7	350	85.4	0.98	5	1.9	0.02
8	396	96.6	1.00	0	0.0	0.00
total	1401	341.7	3.89	894	343.8	4.11

Tempo de residência 180 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	198	76.2	1.00
2	0	0.0	0.00	246	94.6	1.00
3	0	0.0	0.00	207	79.6	1.00
4	27	6.6	0.08	202	77.7	0.92
5	275	67.1	0.85	31	11.9	0.15
6	379	92.4	0.99	3	1.2	0.01
7	368	89.8	0.99	2	0.8	0.01
8	349	85.1	1.00	0	0.0	0.00
total	1398	341.0	3.91	889	341.9	4.09

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo III – Quadros A.3

Tempo de residência 15 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	138	33.7	0.36	159	61.2	0.64
2	164	40.0	0.49	108	41.5	0.51
3	122	29.8	0.46	91	35.0	0.54
4	177	43.2	0.50	112	43.1	0.50
5	173	42.2	0.41	157	60.4	0.59
6	98	23.9	0.37	105	40.4	0.63
7	174	42.4	0.46	129	49.6	0.54
8	361	88.0	0.87	34	13.1	0.13
total	1407	343.2	3.92	895	344.2	4.08

Tempo de residência 30 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	107	26.1	0.24	210	80.8	0.76
2	128	31.2	0.43	106	40.8	0.57
3	162	39.5	0.45	127	48.8	0.55
4	112	27.3	0.41	104	40.0	0.59
5	155	37.8	0.39	151	58.1	0.61
6	163	39.8	0.45	124	47.7	0.55
7	233	56.8	0.70	63	24.2	0.30
8	346	84.4	0.97	7	2.7	0.03
total	1406	342.9	4.05	892	343.1	3.95

Tempo de residência 60 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	37	9.0	0.11	197	75.8	0.89
2	83	20.2	0.27	145	55.8	0.73
3	118	28.8	0.35	137	52.7	0.65
4	127	31.0	0.38	132	50.8	0.62
5	154	37.6	0.43	128	49.2	0.57
6	220	53.7	0.54	120	46.2	0.46
7	283	69.0	0.87	28	10.8	0.13
8	378	92.2	0.98	4	1.5	0.02
total	1400	341.5	3.92	891	342.7	4.08

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo III - Quadros A.3

Tempo de residência 90 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	221	85.0	1.00
2	3	0.7	0.01	192	73.8	0.99
3	52	12.7	0.13	220	84.6	0.87
4	113	27.6	0.36	126	48.5	0.64
5	236	57.6	0.60	100	38.5	0.40
6	244	59.5	0.83	31	11.9	0.17
7	325	79.3	0.98	4	1.5	0.02
8	433	105.6	1.00	0	0.0	0.00
total	1406	342.9	3.92	894	343.8	4.08

Tempo de residência 120 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	203	78.1	1.00
2	0	0.0	0.00	195	75.0	1.00
3	13	3.2	0.03	238	91.5	0.97
4	97	23.7	0.28	161	61.9	0.72
5	261	63.7	0.69	73	28.1	0.31
6	303	73.9	0.91	19	7.3	0.09
7	336	82.0	0.99	3	1.2	0.01
8	396	96.6	1.00	0	0.0	0.00
total	1406	342.9	3.90	892	343.1	4.10

Tempo de residência 180 s (bis)

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	221	85.0	1.00
2	0	0.0	0.00	223	85.8	1.00
3	0	0.0	0.00	225	86.5	1.00
4	52	12.7	0.15	186	71.5	0.85
5	238	58.0	0.82	33	12.7	0.18
6	386	94.1	0.98	5	1.9	0.02
7	357	87.1	1.00	1	0.4	0.00
8	373	91.0	1.00	0	0.0	0.00
total	1406	342.9	3.95	894	343.8	4.05

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo IV – Quadros A.4

Tempo de residência 15 s

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	142	34.6	0.38	149	57.3	0.62
2	132	32.2	0.48	91	35.0	0.52
3	172	42.0	0.49	115	44.2	0.51
4	186	45.4	0.49	124	47.7	0.51
5	161	39.3	0.43	135	51.9	0.57
6	158	38.5	0.41	147	56.5	0.59
7	153	37.3	0.46	115	44.2	0.54
8	330	80.5	0.86	34	13.1	0.14
total	1434	349.8	3.98	910	350.0	4.02

Tempo de residência 30 s

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	58	14.1	0.20	151	58.1	0.80
2	152	37.1	0.41	137	52.7	0.59
3	157	38.3	0.41	142	54.6	0.59
4	173	42.2	0.44	138	53.1	0.56
5	152	37.1	0.47	110	42.3	0.53
6	160	39.0	0.42	140	53.8	0.58
7	223	54.4	0.64	80	30.8	0.36
8	359	87.6	0.93	16	6.2	0.07
total	1434	349.8	3.92	914	351.5	4.08

Tempo de residência 60 s

estrato	magnetite			calcário		
	g	cm ³	conc. red.	g	cm ³	conc. red.
1	24	5.9	0.07	204	78.5	0.93
2	66	16.1	0.25	124	47.7	0.75
3	118	28.8	0.33	150	57.7	0.67
4	155	37.8	0.41	140	53.8	0.59
5	189	46.1	0.48	129	49.6	0.52
6	195	47.6	0.50	122	46.9	0.50
7	273	66.6	0.82	39	15.0	0.18
8	414	101.0	0.98	6	2.3	0.02
total	1434	349.8	3.85	914	351.5	4.15

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes – Grupo IV – Quadros A.4

Tempo de residência 90 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	7	1.7	0.02	231	88.8	0.98
2	37	9.0	0.13	164	63.1	0.87
3	107	26.1	0.31	153	58.8	0.69
4	128	31.2	0.34	156	60.0	0.66
5	176	42.9	0.48	120	46.2	0.52
6	269	65.6	0.71	69	26.5	0.29
7	317	77.3	0.93	14	5.4	0.07
8	397	96.8	0.98	4	1.5	0.02
total	1438	350.7	3.91	911	350.4	4.09

Tempo de residência 120 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	2	0.5	0.01	204	78.5	0.99
2	24	5.9	0.07	218	83.8	0.93
3	72	17.6	0.19	190	73.1	0.81
4	91	22.2	0.32	120	46.2	0.68
5	252	61.5	0.55	130	50.0	0.45
6	271	66.1	0.81	41	15.8	0.19
7	297	72.4	0.96	7	2.7	0.04
8	422	102.9	1.00	0	0.0	0.00
total	1431	349.0	3.91	910	350.0	4.09

Tempo de residência 180 s

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	170	65.4	1.00
2	1	0.2	0.00	195	75.0	1.00
3	3	0.7	0.01	235	90.4	0.99
4	41	10.0	0.09	249	95.8	0.91
5	221	53.9	0.71	56	21.5	0.29
6	423	103.2	0.98	6	2.3	0.02
7	323	78.8	1.00	0	0.0	0.00
8	425	103.7	1.00	0	0.0	0.00
total	1437	350.5	3.80	911	350.4	4.20

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes - Grupo IV – Quadros A.4

Tempo de residência 15 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	98	23.9	0.32	135	51.9	0.68
2	152	37.1	0.45	120	46.2	0.55
3	191	46.6	0.53	106	40.8	0.47
4	196	47.8	0.49	128	49.2	0.51
5	140	34.1	0.43	120	46.2	0.57
6	156	38.0	0.35	183	70.4	0.65
7	151	36.8	0.53	86	33.1	0.47
8	352	85.9	0.88	31	11.9	0.12
total	1436	350.2	3.97	909	349.6	4.03

Tempo de residência 30 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	50	12.2	0.17	156	60.0	0.83
2	113	27.6	0.41	102	39.2	0.59
3	191	46.6	0.47	137	52.7	0.53
4	195	47.6	0.51	117	45.0	0.49
5	180	43.9	0.43	152	58.5	0.57
6	133	32.4	0.34	164	63.1	0.66
7	200	48.8	0.61	80	30.8	0.39
8	373	91.0	0.98	4	1.5	0.02
total	1435	350.0	3.93	912	350.8	4.07

Tempo de residência 60 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	46	11.2	0.12	207	79.6	0.88
2	95	23.2	0.34	116	44.6	0.66
3	110	26.8	0.38	113	43.5	0.62
4	208	50.7	0.44	170	65.4	0.56
5	144	35.1	0.39	141	54.2	0.61
6	205	50.0	0.51	127	48.8	0.49
7	306	74.6	0.85	35	13.5	0.15
8	321	78.3	0.99	3	1.2	0.01
total	1435	350.0	4.02	912	350.8	3.98

Anexo A – Dados experimentais – Dois componentes - Grupo IV - Quadros A.4

Tempo de residência 90 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	5	1.2	0.01	228	87.7	0.99
2	22	5.4	0.08	163	62.7	0.92
3	89	21.7	0.27	153	58.8	0.73
4	161	39.3	0.37	174	66.9	0.63
5	162	39.5	0.49	108	41.5	0.51
6	298	72.7	0.73	70	26.9	0.27
7	302	73.7	0.94	13	5.0	0.06
8	399	97.3	1.00	1	0.4	0.00
total	1438	350.7	3.88	910	350.0	4.12

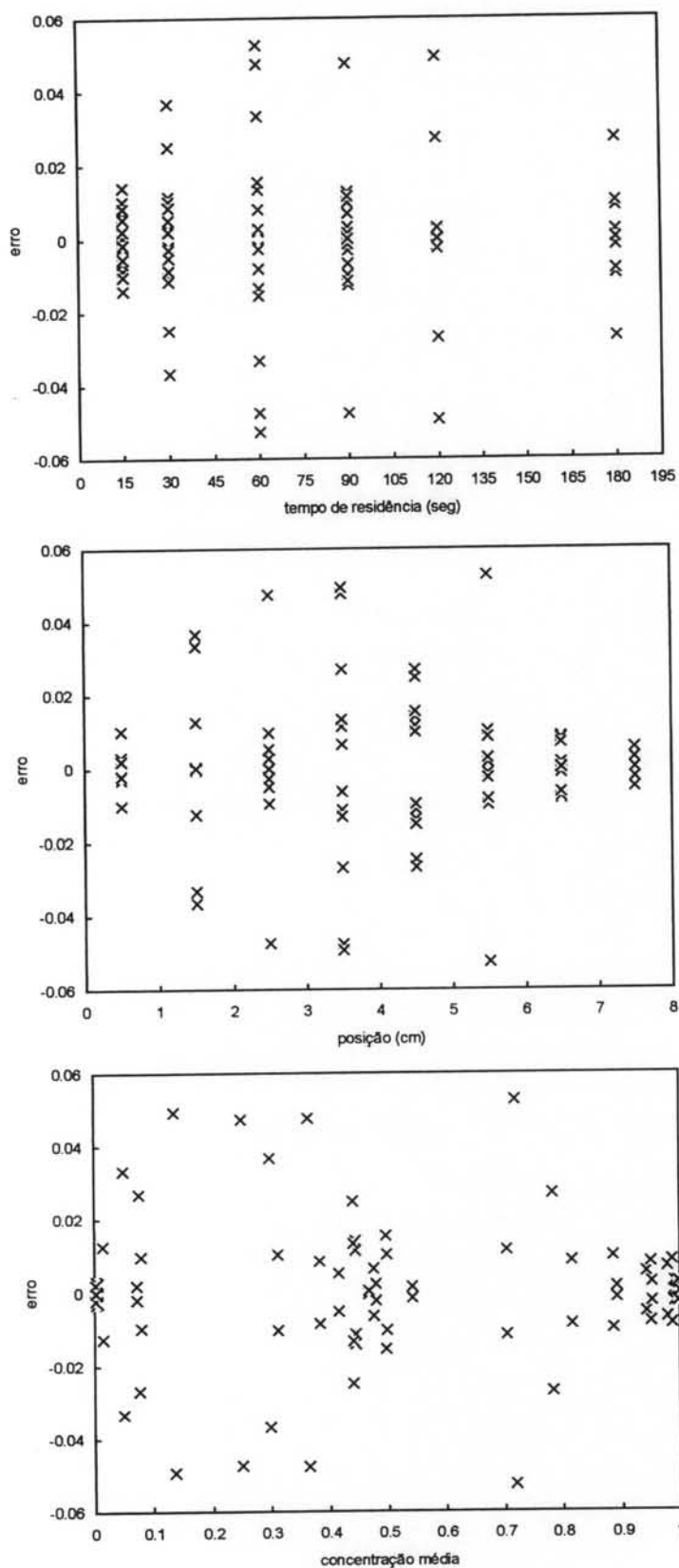
Tempo de residência 120 s (bis)

estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	1	0.2	0.00	251	96.5	1.00
2	5	1.2	0.01	210	80.8	0.99
3	53	12.9	0.15	194	74.6	0.85
4	122	29.8	0.36	135	51.9	0.64
5	239	58.3	0.65	83	31.9	0.35
6	274	66.8	0.83	35	13.5	0.17
7	302	73.7	0.99	2	0.8	0.01
8	437	106.6	1.00	0	0.0	0.00
total	1433	349.5	4.00	910	350.0	4.00

Tempo de residência 180 s (bis)

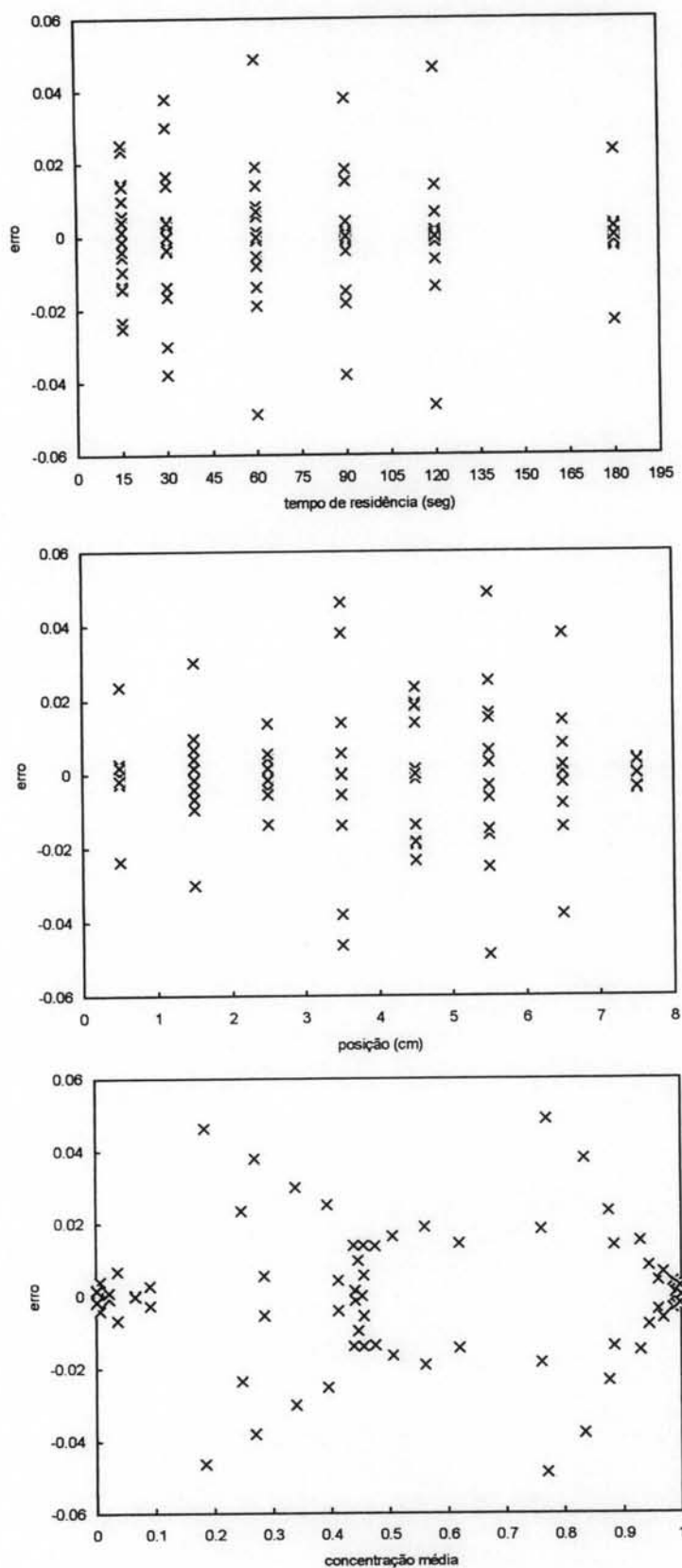
estrato	g	magnetite		g	calcário	
		cm ³	conc. red.		cm ³	conc. red.
1	0	0.0	0.00	230	88.5	1.00
2	0	0.0	0.00	232	89.2	1.00
3	3	0.7	0.01	232	89.2	0.99
4	66	16.1	0.20	168	64.6	0.80
5	291	71.0	0.82	41	15.8	0.18
6	281	68.5	0.96	7	2.7	0.04
7	352	85.9	1.00	1	0.4	0.00
8	442	107.8	1.00	0	0.0	0.00
total	1435	350.0	3.98	911	350.4	4.02

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição



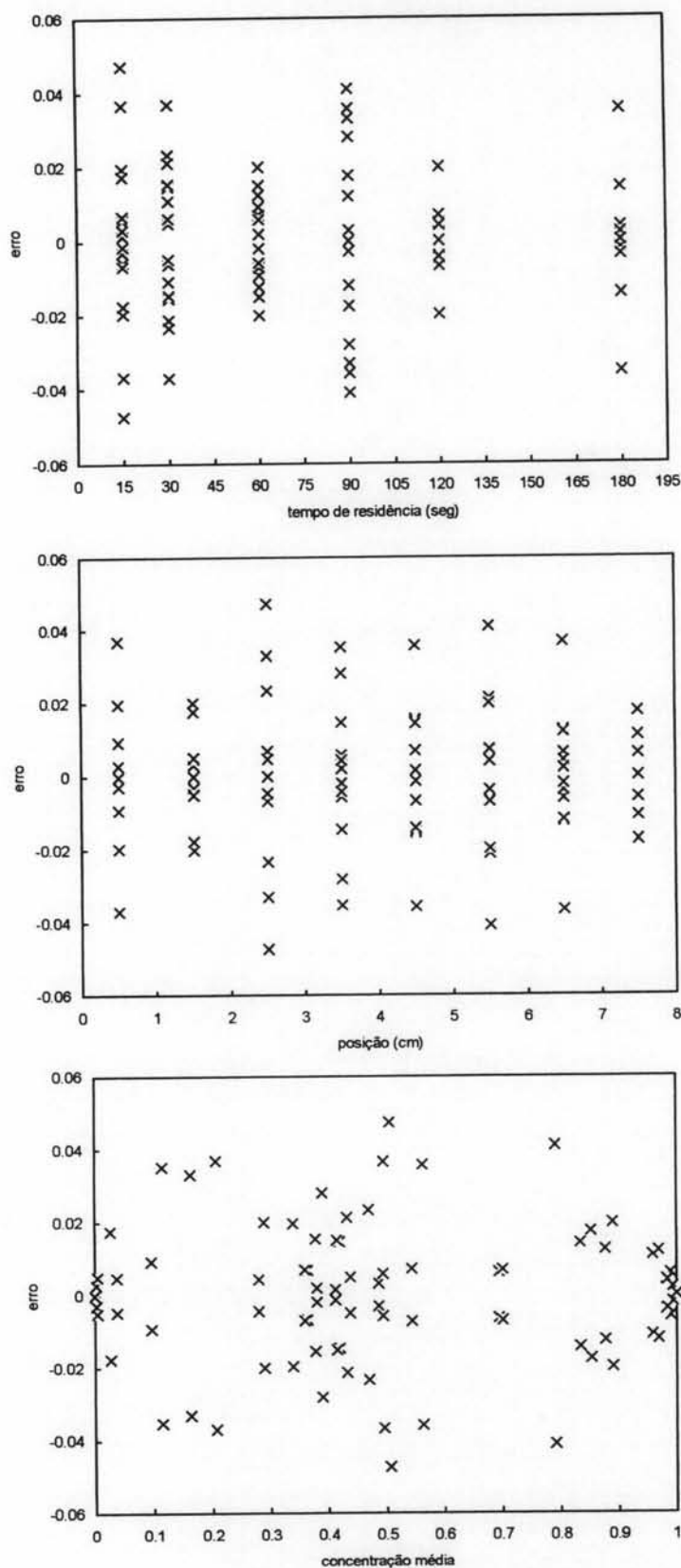
Gráficos B.1: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração média – Grupo I

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição



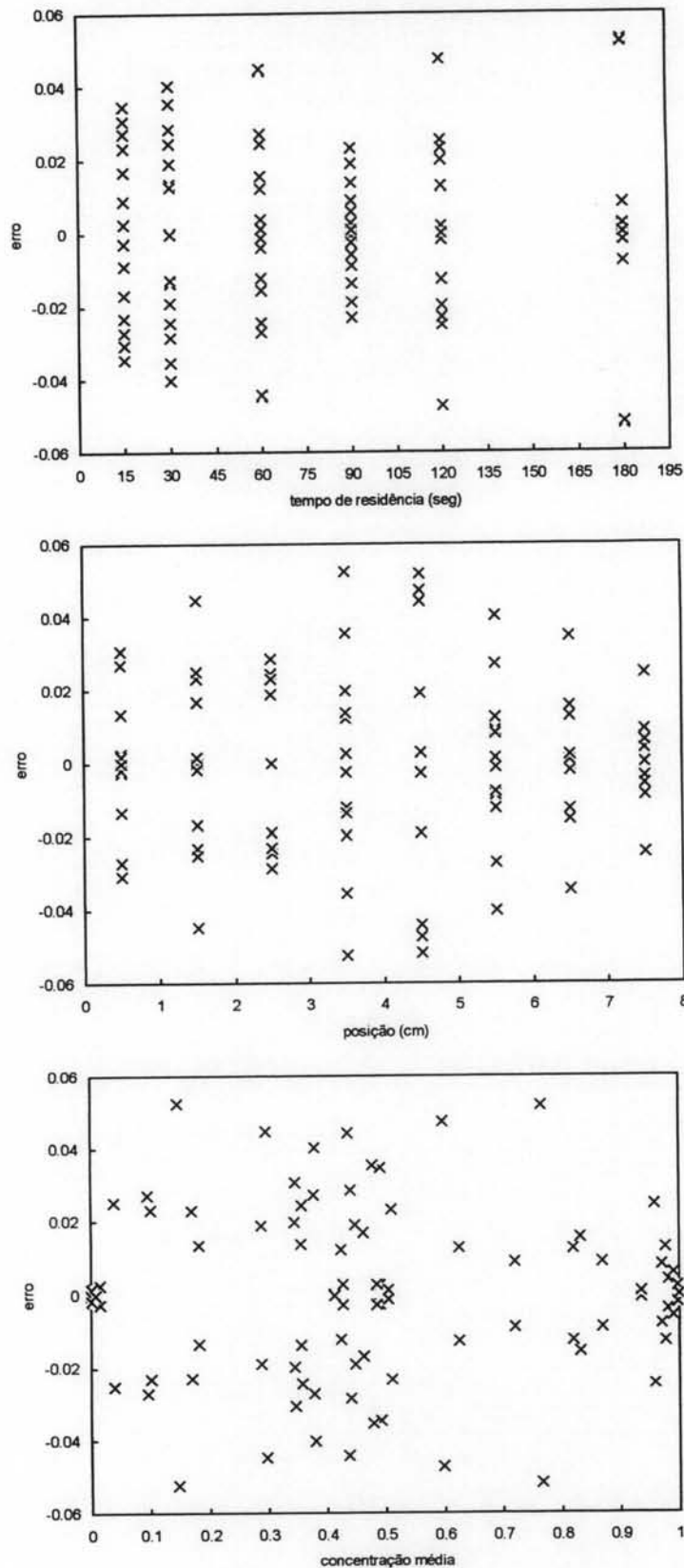
Gráficos B.2: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração média – Grupo II

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição



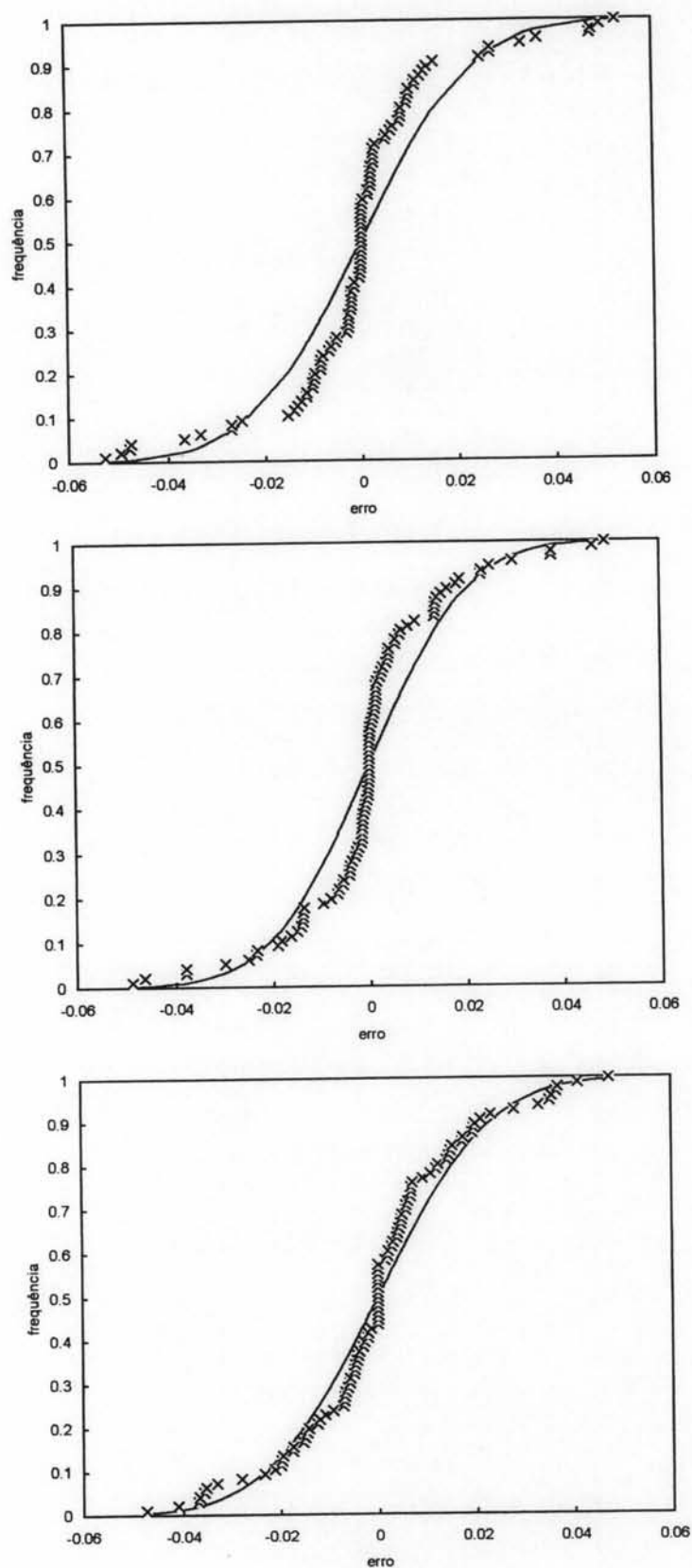
Gráficos B.3: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração média – Grupo III

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição



Gráficos B.4: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração média – Grupo IV

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição



Gráficos B.5: Comparação entre a distribuição acumulada do erro experimental e a lei normal – Grupos I a III

Anexo B – Análise do erro experimental – Distribuição

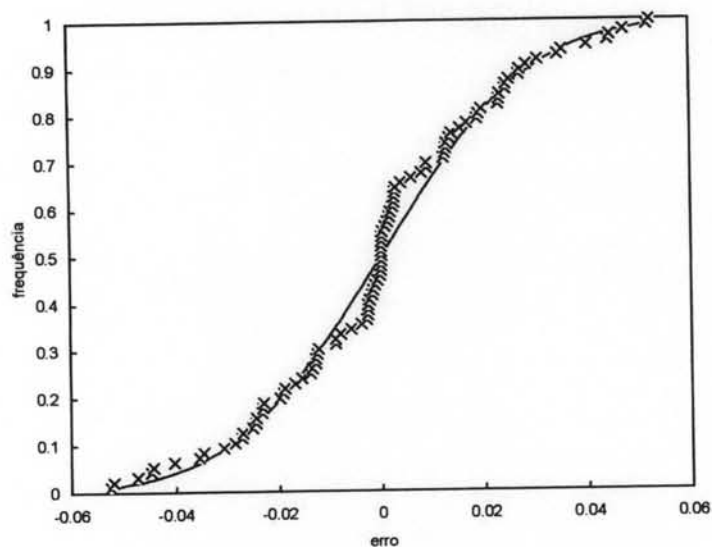
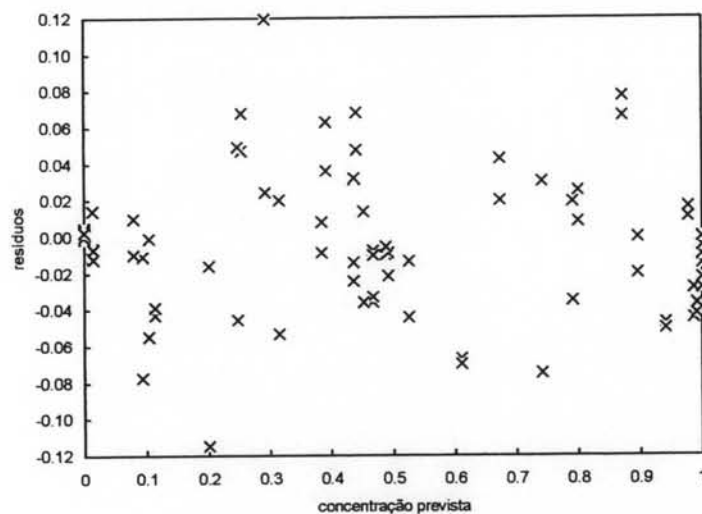
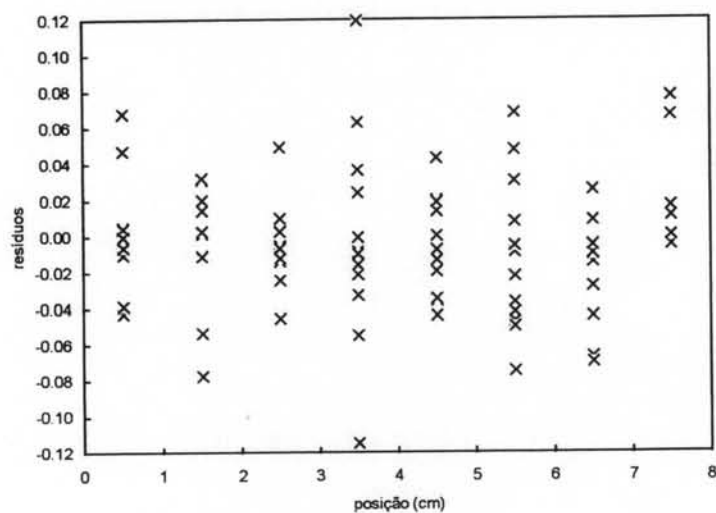
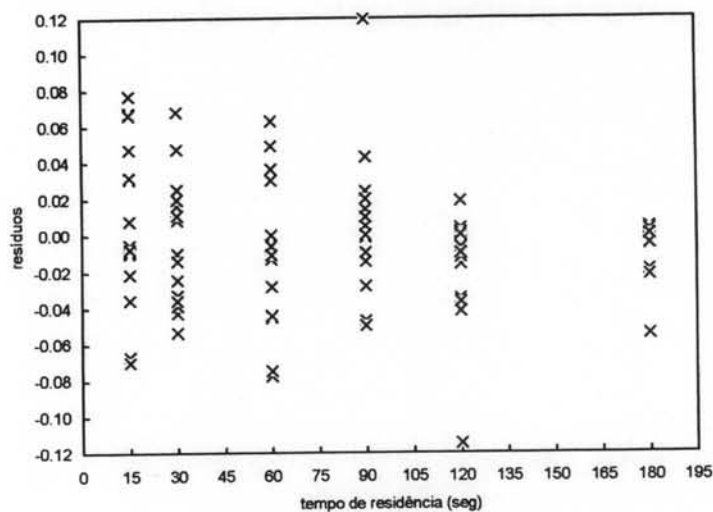


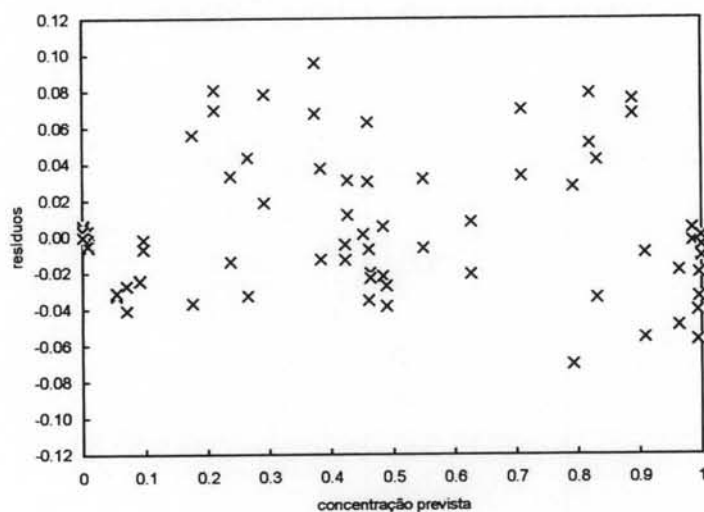
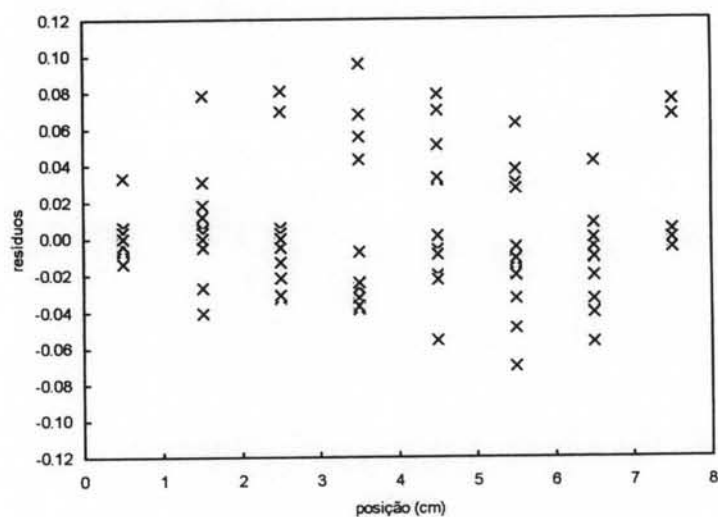
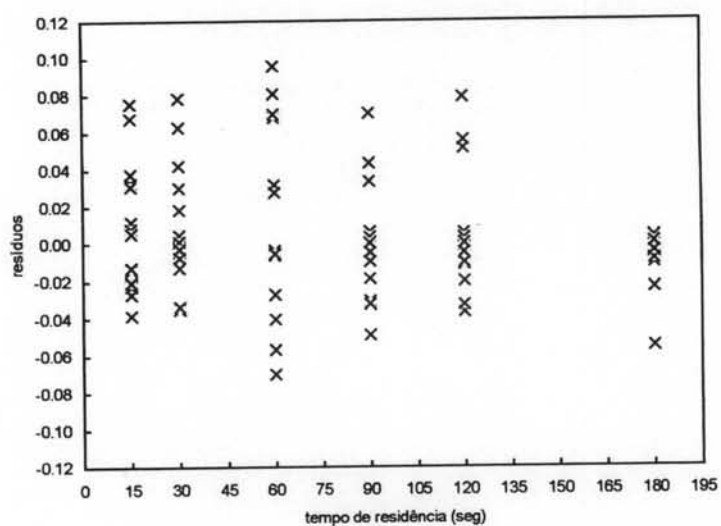
Gráfico B.6: Comparação entre a distribuição acumulada do erro experimental e a lei normal – Grupo IV

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição



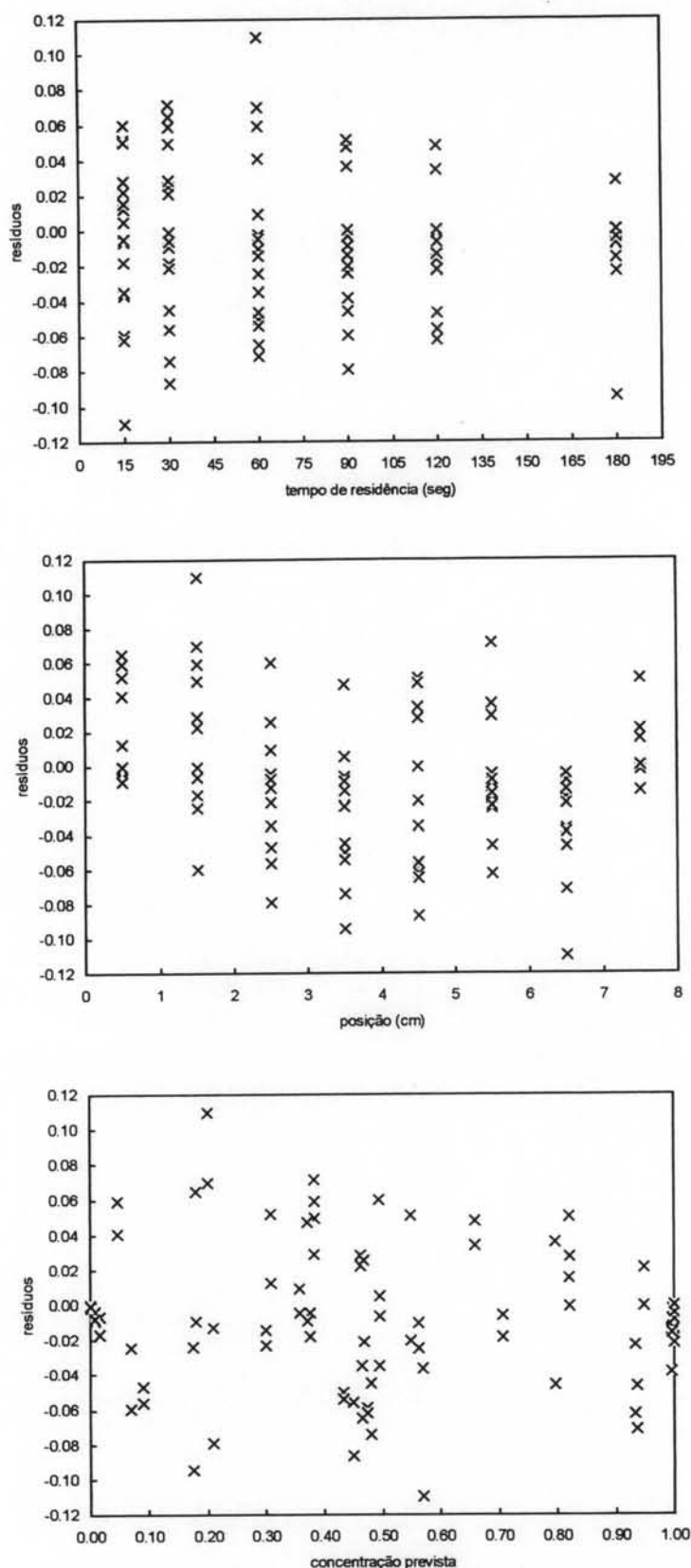
Gráficos C.1: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo I

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição



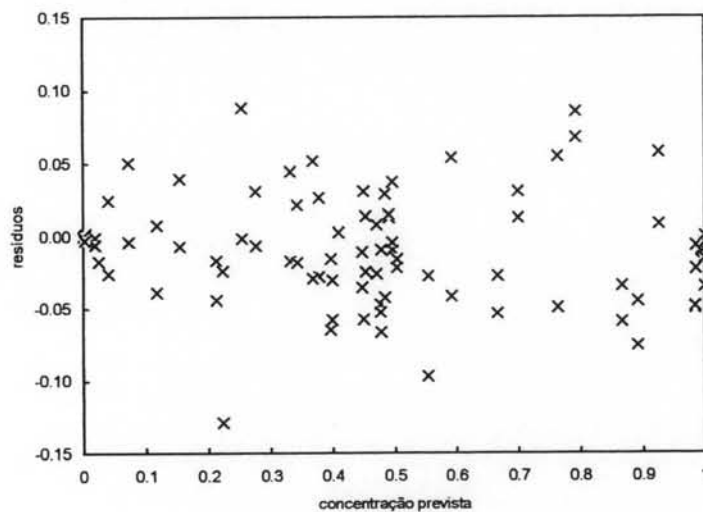
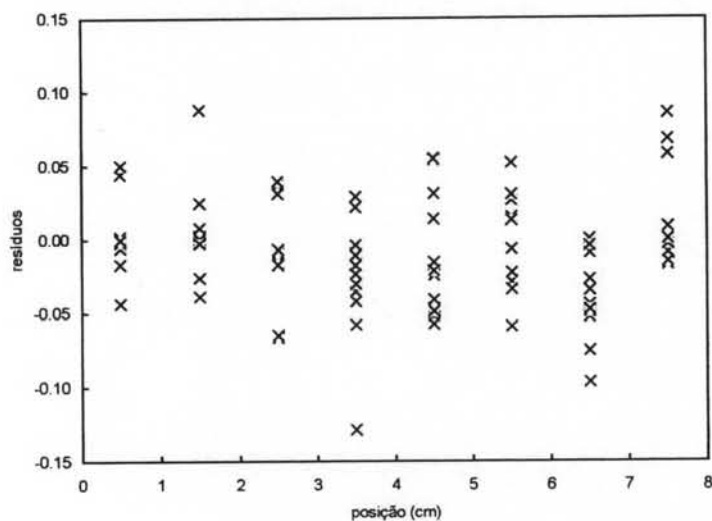
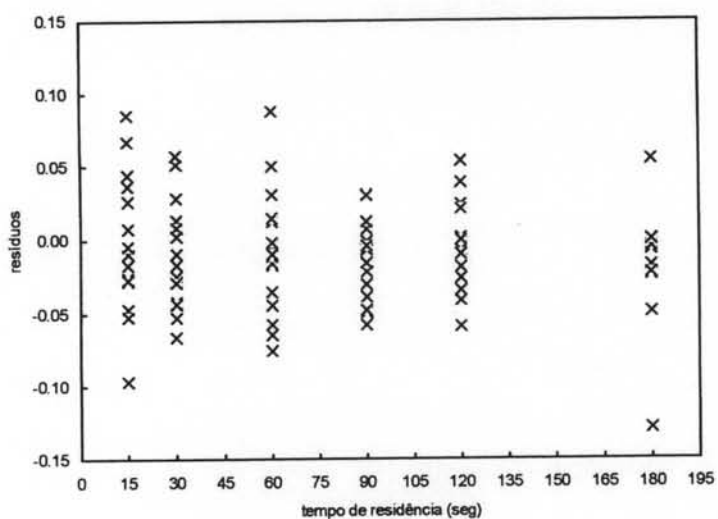
Gráficos C.2: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo II

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição



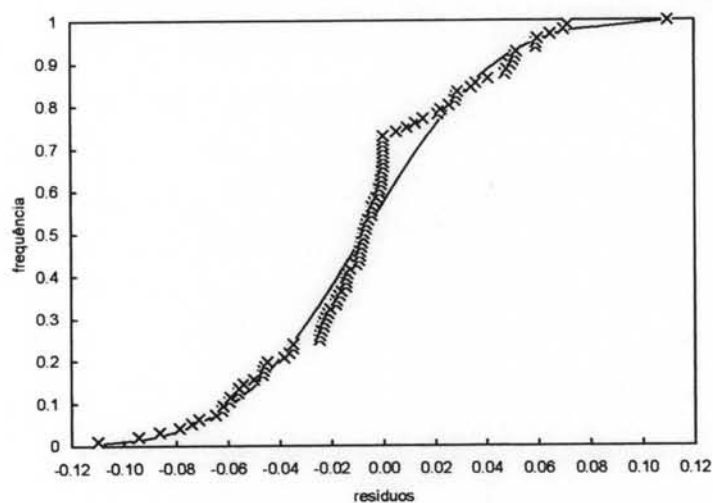
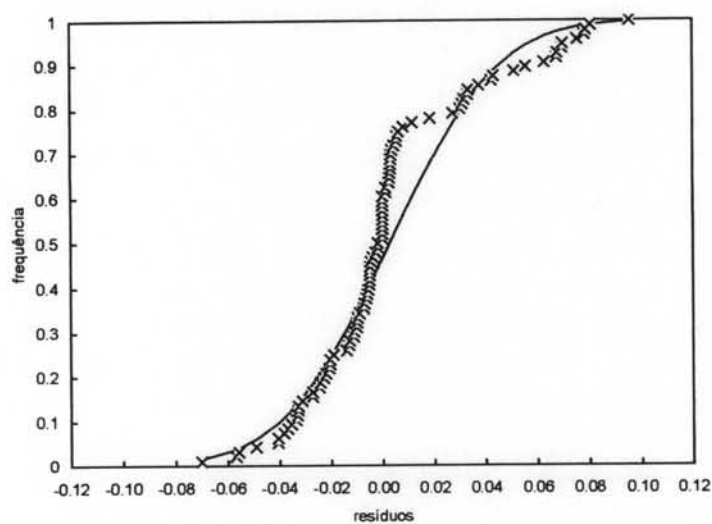
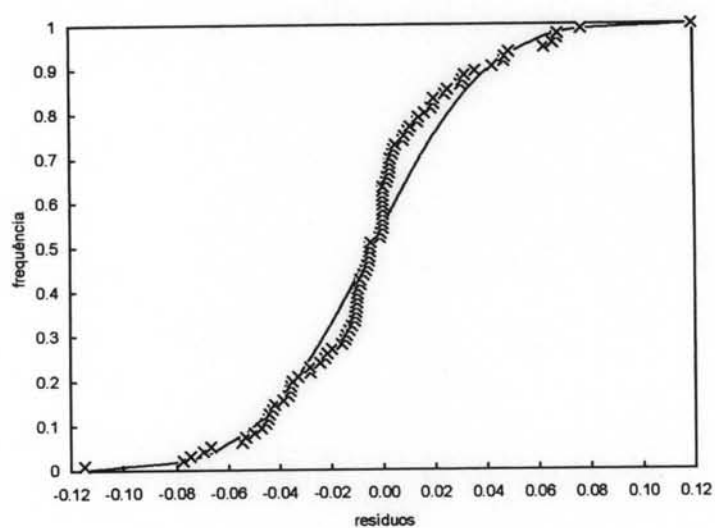
Gráficos C.3: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo III

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição



Gráficos C.4: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo IV

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição



Gráficos C.5: Comparação entre a distribuição acumulada dos resíduos e a lei normal – Grupos I a III

Anexo C – Análise dos resíduos – Distribuição

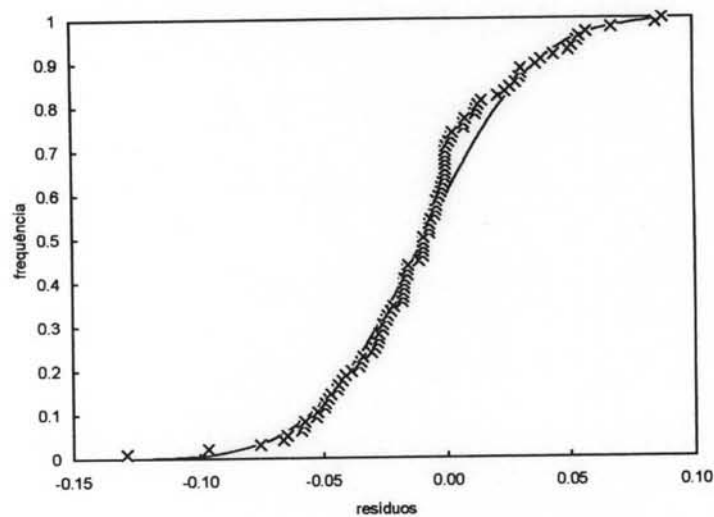
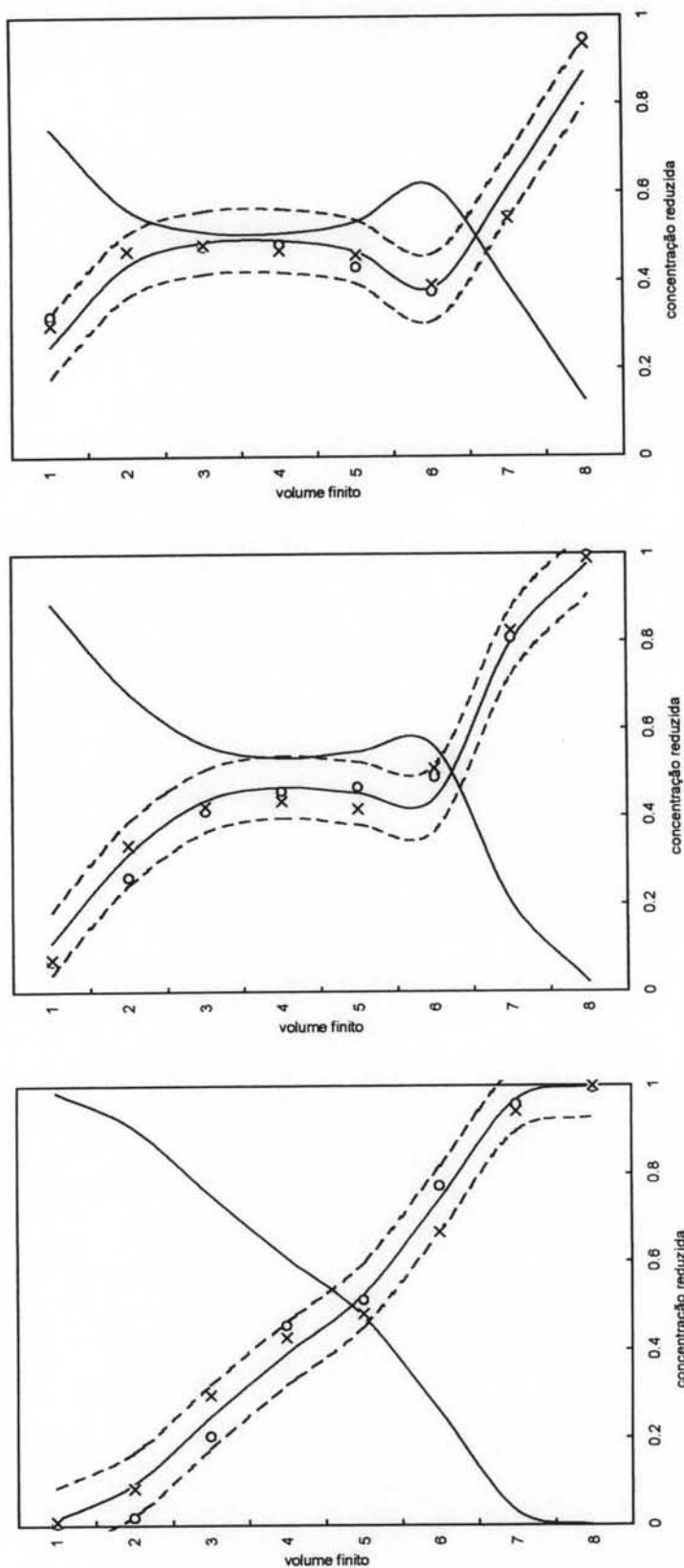


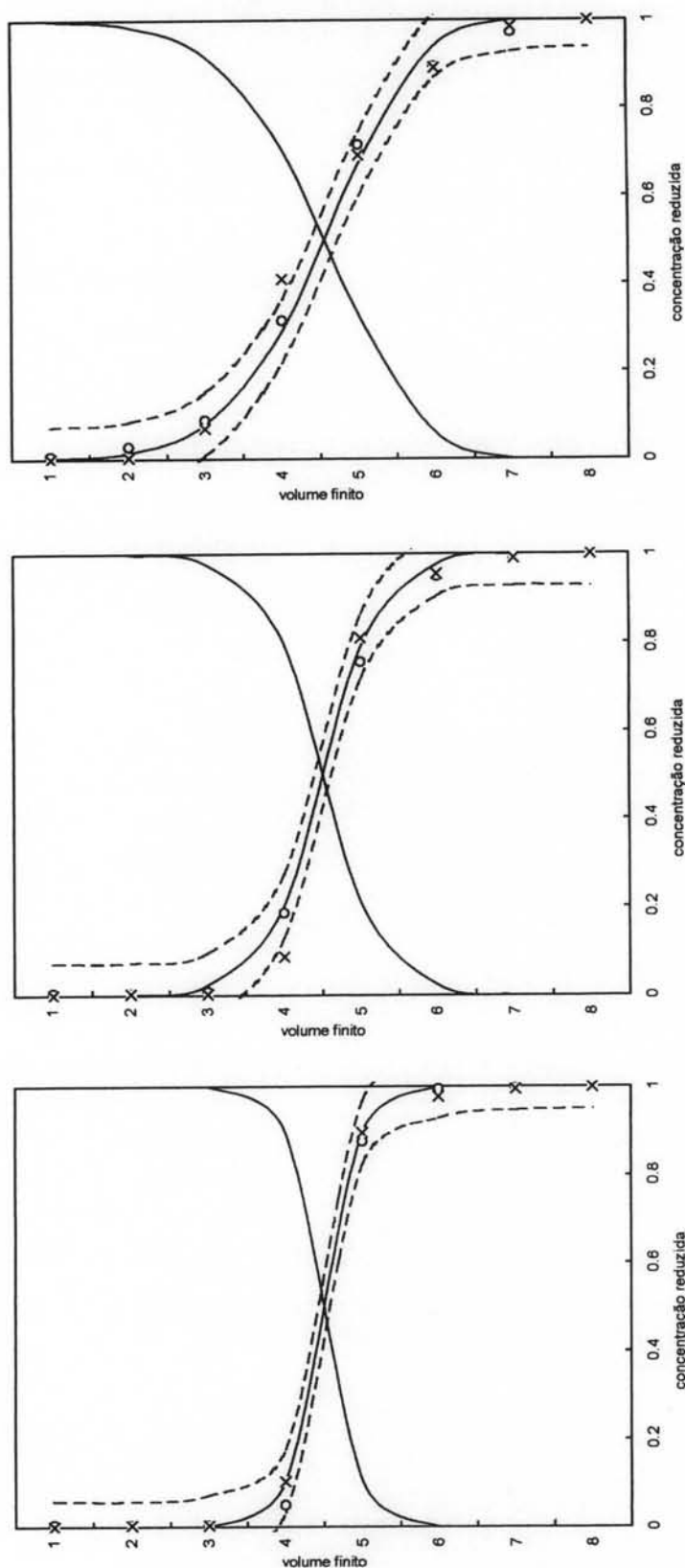
Gráfico C.6: Comparação entre a distribuição acumulada dos resíduos e a lei normal – Grupo IV

Anexo D – Previsão de observações futuras



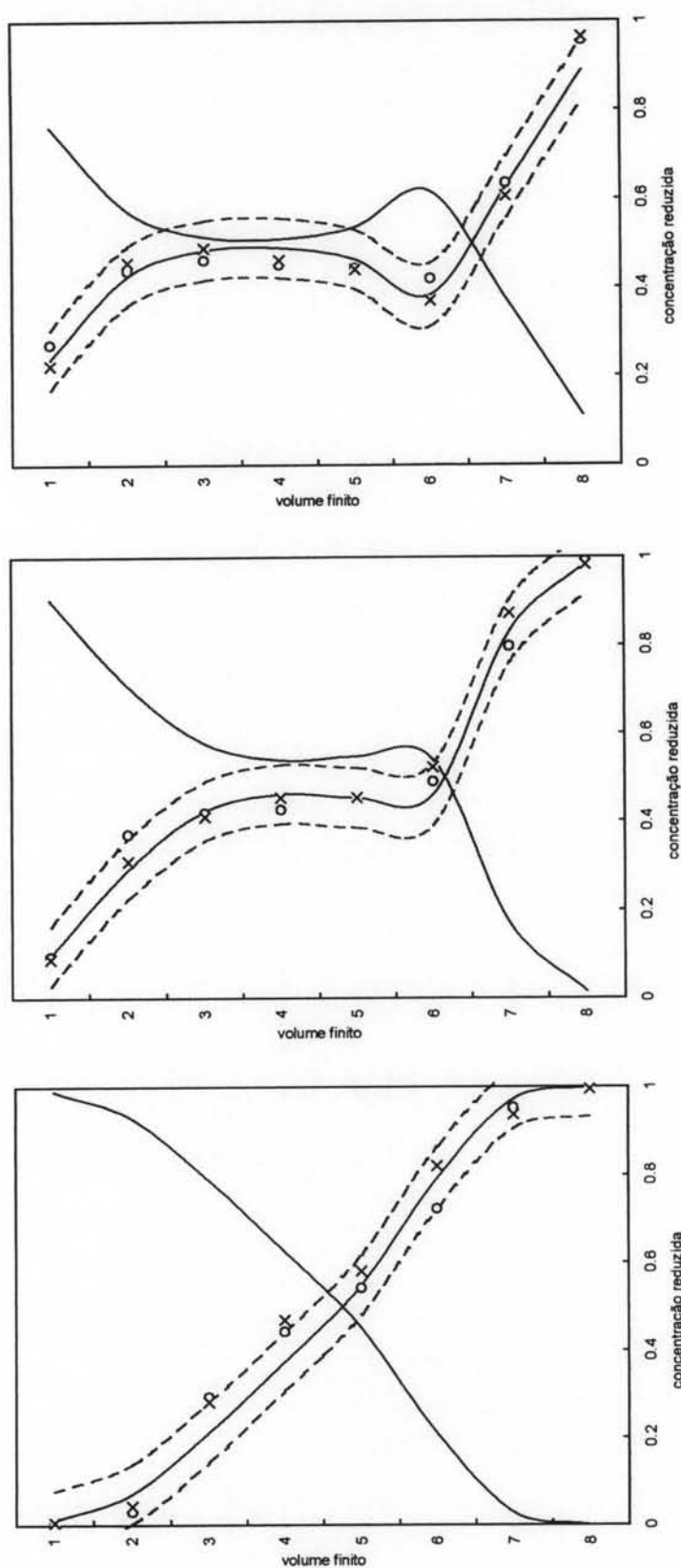
Gráficos D.1: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo I – Tempos de residência: 15 s, 30 s e 60 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



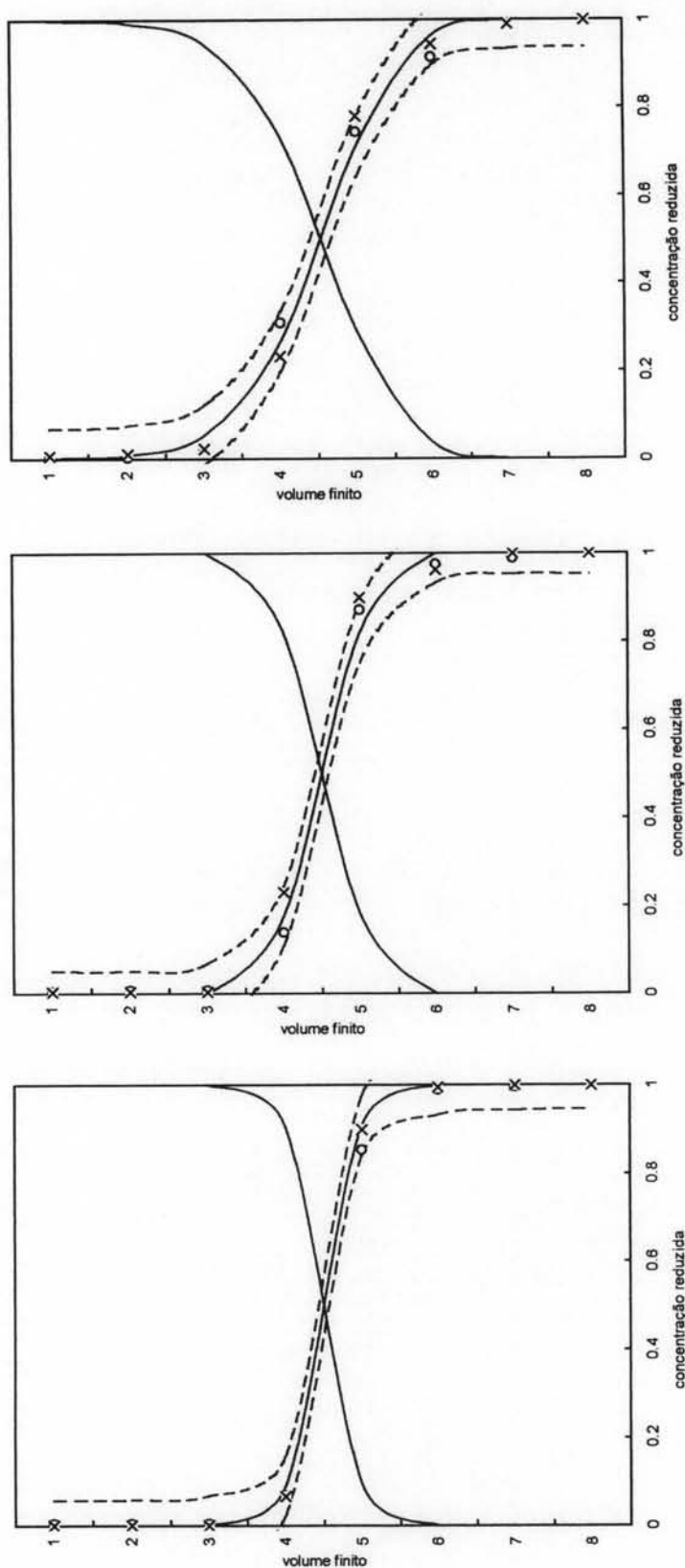
Gráficos D.2: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo I – Tempos de residência: 90 s, 120 s e 180 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



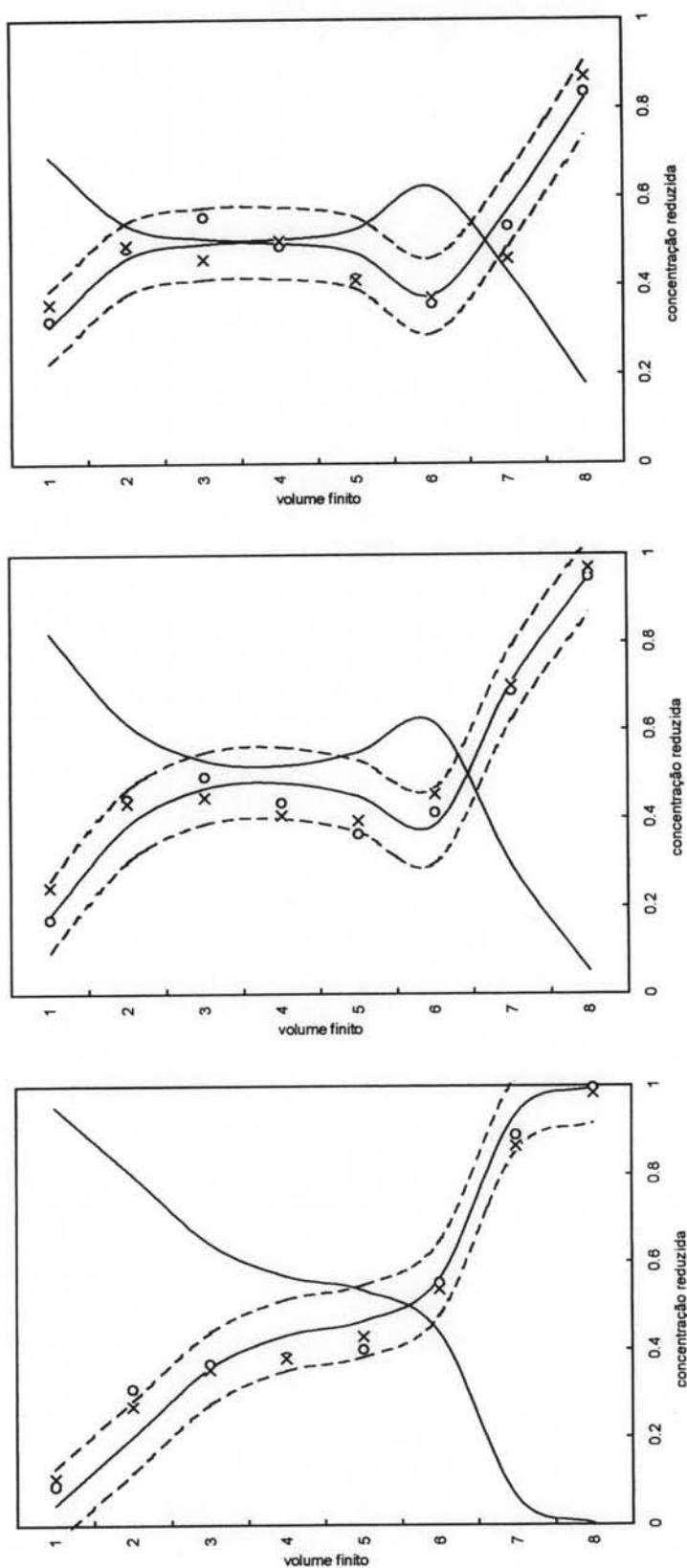
Gráficos D.3: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo II – Tempos de residência: 15 s, 30 s e 60 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



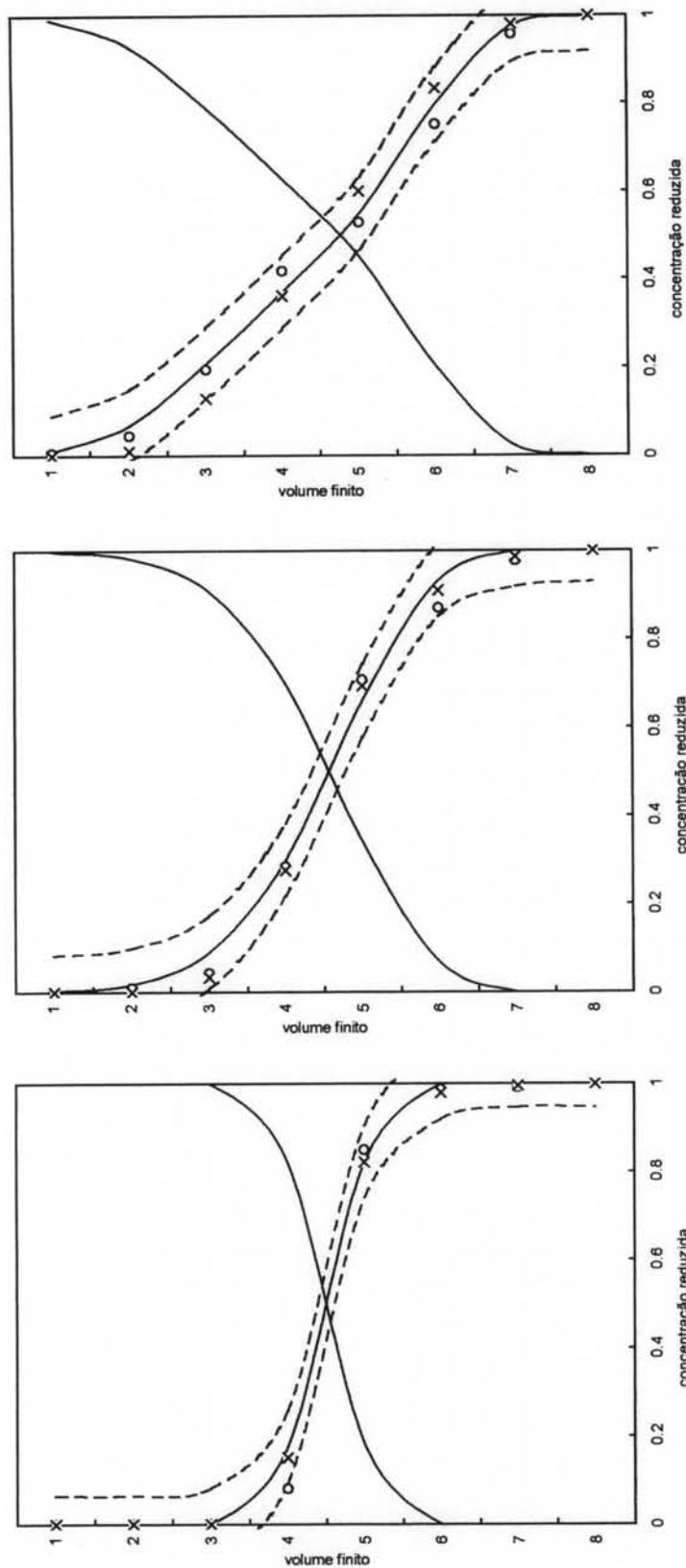
Gráficos D.4: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo II – Tempos de residência: 90 s, 120 s e 180 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



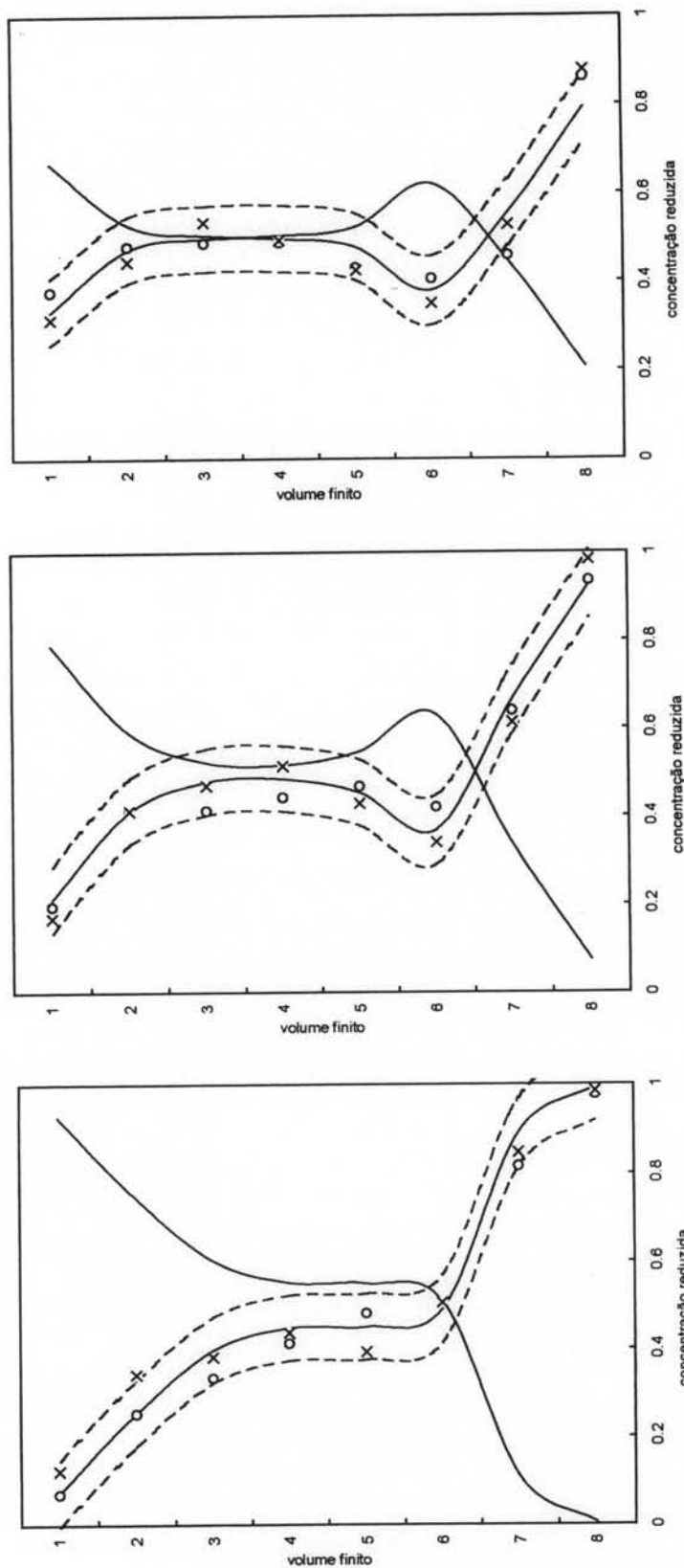
Gráficos D.5: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo III – Tempos de residência: 15 s, 30 s e 60 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



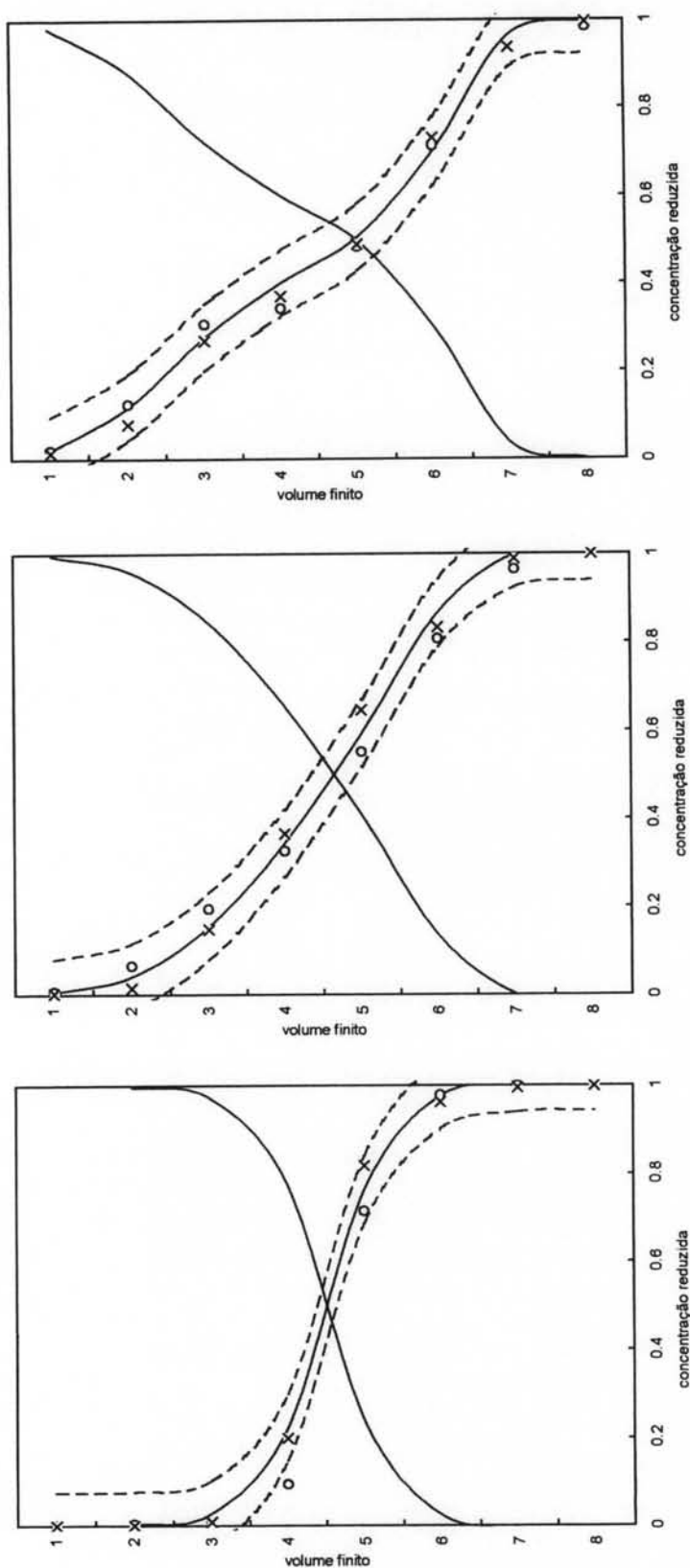
Gráficos D.6: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo III – Tempos de residência: 90 s, 120 s e 180 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



Gráficos D.7: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo IV – Tempos de residência: 15 s, 30 s e 60 s.

Anexo D – Previsão de observações futuras



Gráficos D.8: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo IV – Tempos de residência: 90 s, 120 s e 180 s.

Capítulo 3

3 Estratificação de sistemas multicomponente

Sumário

3.1 Introdução

3.2 Movimento de partículas sólidas num fluido

3.3 Trabalho experimental com misturas de quatro componentes

3.4 Modelo cinético para sistemas multicomponente

3.5 Ajuste do modelo multicomponente

3.1 Introdução

Neste capítulo é considerado o problema da estratificação de um leito constituído por n componentes. Faz-se a extensão dos operadores segregação e dispersão, de dois para n componentes, e tenta-se relacionar os coeficientes de segregação com as propriedades das partículas, nomeadamente, com a densidade e o calibre. Nesta questão, assume especial importância o movimento de queda das partículas, durante o período de aceleração.

3.2 Movimento de partículas sólidas num fluido

Força de arrasto

Considere-se um corpo em movimento no interior de um fluido. Sobre um elemento de área dA , na superfície do corpo, exerce-se uma força elementar de contacto dF . O sistema de forças elementares dF tem como resultante uma força única F (e, em certos casos, dá também origem a um momento). A componente da força F , paralela à direcção do movimento do corpo, é designada por *força de arrasto* (*resistência*, “*drag*”).

Dadas as dificuldades, nalguns casos superáveis, para a determinação, por via teórica, do sistema de forças elementares dF (sobretudo, em corpos com geometria irregular ou quando existe formação de uma região turbulenta a jusante do corpo), a força de arrasto, no caso geral, é calculada recorrendo à seguinte fórmula empírica

$$F_D = C_D A \frac{\rho v^2}{2}, \quad (3.2.1)$$

onde C_D é o coeficiente (adimensional) de arrasto, normalmente obtido por via experimental, A é a área projectada do corpo num plano normal à direcção do seu movimento, ρ é a massa específica do fluido e v é a velocidade do corpo em relação ao fluido.

A fórmula anterior é frequentemente deduzida através da aplicação do método da *análise dimensional*. Assim, do ponto de vista empírico, as grandezas que mais influenciam a força de arrasto são (Quintela, 1991):

1. a velocidade v do corpo em relação ao fluido,
2. as características físicas do fluido: a sua massa específica ρ e a sua viscosidade μ , no caso de se tratar de um líquido,
3. a forma do corpo, representada, em primeira aproximação, por um conjunto de dimensões lineares, $d, b_1, b_2, b_3, \dots, b_n$,
4. a orientação do corpo, relativamente à direcção do seu movimento, dada por um conjunto de três ângulos, $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$.

Então, temos que

$$f(F_D, \rho, \mu, v, d, b_1, b_2, \dots, b_n, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = 0 \quad (3.2.2)$$

e aplicando o teorema π de Buckingham, podemos escrever

$$f_1\left(\frac{F_D}{\rho v^2 d^2}, \frac{\mu}{\rho v d}, \frac{b_1}{d}, \dots, \frac{b_n}{d}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\right) = 0. \quad (3.2.3)$$

A expressão anterior é equivalente a

$$F_D = \rho v^2 d^2 f_2\left(\frac{\rho v d}{\mu}, \frac{b_1}{d}, \dots, \frac{b_n}{d}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\right), \quad (3.2.4)$$

sendo, porém, convencional apresentar-se F_D do seguinte modo

$$F_D = C_D A \frac{\rho v^2}{2}, \quad (3.2.5)$$

onde

$$C_D = C_D\left(Re, \frac{b_1}{d}, \dots, \frac{b_n}{d}, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3\right) \quad (3.2.6)$$

e A é área característica referente à dimensão linear d , em geral, é a área projectada do corpo num plano normal à direcção do seu movimento. No caso de uma esfera apenas intervém uma única grandeza geométrica, o seu diâmetro d , então

$$C_D = C_D(Re). \quad (3.2.7)$$

Leis de Stokes e de Newton. Regime intermédio

Para corpos esféricos, o sistema de forças elementares tem como resultante uma força única, na própria direcção do movimento, ou seja, tem como resultante F_D . Atendendo a que a área projectada de uma esfera é dada por

$$A = \frac{\pi d^2}{4}, \quad (3.2.8)$$

a força de arrasto, para um corpo esférico, escreve-se

$$F_D = C_D \frac{\pi \rho d^2 v^2}{8}. \quad (3.2.9)$$

O coeficiente C_D , neste caso, como vimos, é apenas função do número de Reynolds, para a definição do qual se adopta o diâmetro da esfera como dimensão linear.

A variação de C_D com Re , determinada experimentalmente, encontra-se representada no gráfico 3.2.1. Para valores do número de Reynolds inferiores a 0.2, a variação é traduzida por uma recta (em escala log-log) com equação

$$C_D = \frac{24}{Re}. \quad (3.2.10)$$

A este coeficiente de arrasto corresponde a *lei de resistência de Stokes*

$$F_D = 3\pi \mu D v, \quad (3.2.11)$$

a qual pode, também, ser obtida por via teórica.

Para valores de Re entre, aproximadamente, 500 e 2×10^5 , o coeficiente de arrasto toma um valor de cerca de 0.44. Este patamar, onde C_D é independente de Re , corresponde

à lei de resistência de Newton. Nesta região, a força de arrasto é, aproximadamente, proporcional ao quadrado da velocidade.

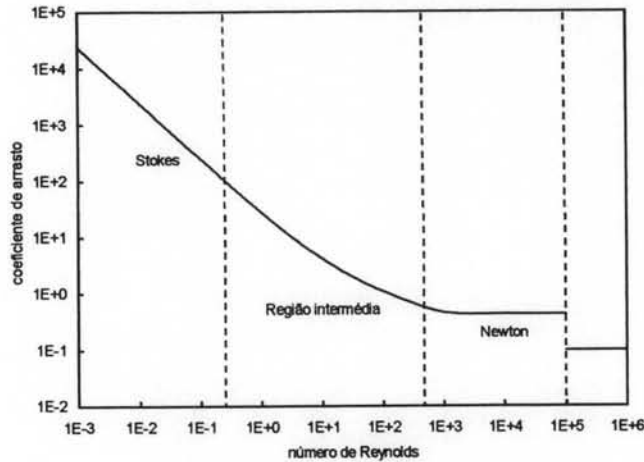


Gráfico 3.2.1: Variação do coeficiente de arrasto com o número de Reynolds para esferas.

Adaptado de Richardson et al., 2002.

Quando Re excede 2×10^5 , o valor de C_D diminui bruscamente para 0.1, o que é explicado pela considerável redução da esteira turbulenta, que passa a formar-se mais a jusante do corpo (Richardson et al., 2002). Nesta região, o coeficiente de arrasto é, também, independente de Re .

Para a região intermédia, entre os regimes de Stokes e de Newton, isto é, para números de Reynolds entre 0.2 e 1000, pode usar-se a seguinte aproximação

$$C_D = \frac{24}{Re} [1 + 0.15 Re^{0.687}], \quad (3.2.12)$$

que é referida como equação de Schiller-Naumann (1933).

Khan e Richardson (1987) propuseram a seguinte fórmula, válida para números de Reynolds entre 0.01 e 10^5 , a qual abarca, portanto, os regimes de Stokes, Newton, e inter-médio

$$C_D = (2.25 Re^{-0.31} + 0.36 Re^{0.06})^{3.45}. \quad (3.2.13)$$

Velocidade terminal

Um corpo homogêneo, mergulhado num fluido em repouso, desce ou sobe, consoante a sua massa específica for superior ou inferior à massa específica do fluido. O movimento do corpo é provocado pelo seu peso aparente, opondo-se-lhe a força de arrasto, que é

função da velocidade. Nestas condições, o movimento torna-se uniforme quando a força de arrasto iguala o peso aparente do corpo, isto é, quando

$$V(\rho_s - \rho)g = C_D A \frac{\rho v_0^2}{2}, \quad (3.2.14)$$

onde V é o volume do corpo, ρ_s é a sua massa específica e g é a aceleração da gravidade. A velocidade v_0 , definida pela equação anterior, designa-se habitualmente *velocidade terminal* (ou *velocidade de sedimentação*).

Para corpos esféricos, a equação (3.2.14) escreve-se

$$\frac{\pi d^3}{6} \frac{\rho_s - \rho}{\rho} g = C_D \frac{\pi d^2}{4} \frac{v_0^2}{2} \quad (3.2.15)$$

e, assim, no caso em que $\rho_s > \rho$, a velocidade v_0 de queda de uma esfera pode ser calculada por

$$v_0 = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{g d}{C_D} \frac{\rho_s - \rho}{\rho}}. \quad (3.2.16)$$

Conhecidas as características do fluido, o diâmetro e a massa específica de uma esfera, o valor de C_D a introduzir na equação anterior não pode, no caso geral, ser obtido directamente do gráfico 3.2.1, uma vez que o número de Reynolds não é conhecido *a priori*. Este problema, como veremos, pode ser resolvido através do cálculo do número de Galileu, que é independente da velocidade de queda. Os regimes de Stokes e de Newton, constituem, no entanto, excepções ao caso geral. Como vimos no ponto anterior, no regime de Stokes

$$C_D = 24 \left/ \frac{\rho v_0 d}{\mu} \right.$$

e, então, podemos escrever

$$v_0 = \frac{g d^2}{18 \mu} (\rho_s - \rho), \quad (3.2.17)$$

o que permite calcular directamente v_0 (desde que haja a garantia de que $Re < 0.2$). No regime de Newton, o coeficiente de arrasto é, aproximadamente, independente de Re

$$C_D \approx 0.44,$$

assim, v_0 pode ser calculada aplicando a fórmula (3.2.16) uma única vez (se houver a certeza de que $500 < Re < 2 \times 10^5$).

A condição de equilíbrio para corpos esféricos, expressa pela equação (3.2.16), pode ser rescrita do seguinte modo

$$C_D = \frac{4}{3} \frac{d}{\rho v_0^2} (\rho_s - \rho) g. \quad (3.2.18)$$

Agora, multiplicando ambos os membros por Re_0^2 , onde Re_0 é definido por

$$Re_0 = \rho v_0 d / \mu, \quad (3.2.19)$$

temos

$$C_D Re_0^2 = \frac{4}{3} \frac{d (\rho_s - \rho) g}{\rho u_0^2} \frac{v_0^2 d^2 \rho^2}{\mu^2} \quad (3.2.20)$$

$$\text{ou} \quad C_D Re_0^2 = \frac{4 (\rho_s - \rho) \rho d^3 g}{3 \mu^2}. \quad (3.2.21)$$

Definindo o número de Galileu

$$Ga = \frac{(\rho_s - \rho) \rho d^3 g}{\mu^2}, \quad (3.2.22)$$

podemos, finalmente, escrever

$$C_D Re_0^2 = \frac{4}{3} Ga. \quad (3.2.23)$$

Com base na equação anterior e na equação (3.2.13), que relaciona C_D com Re , Khan e Richardson (1987) deduziram as seguintes relações

$$Ga = (2.07 Re_0^{0.27} + 0.33 Re_0^{0.64})^{3.45}, \quad (3.2.24)$$

$$Re_0 = (2.33 Ga^{0.018} - 1.53 Ga^{-0.016})^{13.3}. \quad (3.2.25)$$

Esta última relação permite calcular v_0 , uma vez conhecido o número de Galileu (que é independente da velocidade),

$$v_0 = \frac{\mu}{\rho d} Re_0. \quad (3.2.26)$$

Coeficiente de arrasto para partículas não-esféricas

Actualmente, são seguidas duas abordagens no cálculo do coeficiente de arrasto de partículas não-esféricas (Chhabra et al., 1999):

- Desenvolvimento de correlações para partículas com forma e orientação fixas. As formas mais estudadas têm sido os cilindros, os discos e os poliedros. Estes estudos conduziram a correlações que funcionam bem para a forma e orientação escolhidas, mas a extrapolação para outras formas e/ou orientações não é possível.

- Desenvolvimento de uma única correlação para todas as formas e orientações de partículas não-esféricas. Claramente, esta abordagem tende a ser menos precisa que a

anterior. No entanto, permite fazer interpolações/extrapolações para formas não estudadas. Nesta linha, incluem-se os trabalhos de Haider e Levenspiel (1989) e Chhabra e Madhav (1995), que em seguida apresentamos.

Haider e Levenspiel (1989) propõem a seguinte correlação, válida, em princípio, para qualquer partícula esférica ou não-esférica

$$C_D = \frac{24}{Re} [1 + [8.1716 \exp(-4.0655\psi)] Re^{(0.0964 + 0.5565\psi)}] + \frac{73.69 \exp(-5.0748\psi)}{Re + 5.378 \exp(6.2122\psi)}, \quad (3.2.27)$$

onde ψ representa o coeficiente de esfericidade (definido como a razão entre a área da superfície de uma esfera – com volume igual ao da partícula – e a área da partícula). No cálculo de Re e da velocidade terminal deve ser utilizado o diâmetro da esfera com igual volume. Esta correlação foi estabelecida com base em ensaios com discos e poliedros (cubos, tetraedros, octaedros, etc.). Para partículas com forma irregular é difícil calcular a área da sua superfície, e logo o seu coeficiente de esfericidade, o que limita a aplicação prática da correlação (3.2.27).

Chhabra e Madhav (1995) chegaram à seguinte expressão

$$C_D = \frac{24}{Re} [1 + 0.604 Re^{0.529}] \quad (3.2.28)$$

onde deve ser notada a ausência de qualquer factor geométrico, além de d . Também, neste caso, no cálculo de Re e da velocidade terminal deve ser utilizado o diâmetro da esfera com igual volume. No trabalho experimental que sustenta a correlação (3.2.28), foram utilizadas partículas com formas distintas (prismas rectangulares, cilindros e agulhas) e diferentes condições cinemáticas ($0.095 < Re < 400$). O erro médio no uso da correlação (3.2.28) foi calculado em 11%. Portanto, a correlação anterior permite reconciliar as velocidades terminais de uma grande variedade de formas, apenas em termos do diâmetro equivalente, sem introduzir outro parâmetro geométrico. No gráfico 3.2.2 representa-se o andamento do coeficiente de arrasto em função de Re , para as expressões (3.2.12) e (3.2.28).

Período de aceleração

Em jigagem, normalmente, opera-se com frequências de pulsação relativamente elevadas – 100 a 300 ciclos por minuto – pelo que pode pensar-se que as partículas sedimentam durante intervalos de tempo muito curtos, não atingindo, assim, a velocidade termi-

nal. Por outras palavras, as partículas permanecem no período de aceleração ou, pelo menos, este período é importante no seu movimento.

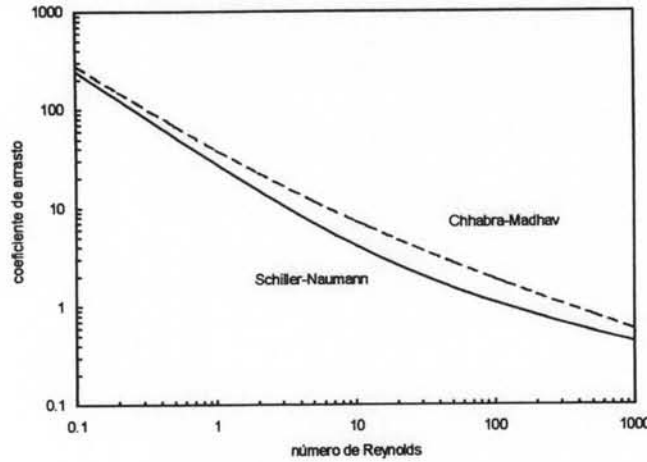


Gráfico 3.2.2: Variação do coeficiente de arrasto com o número de Reynolds.

Na descrição do movimento acelerado de uma partícula deve considerar-se que uma porção do fluido também sofre aceleração (Richardson et al., 2002). Esta porção de fluido, a *massa acrescentada* (ou *massa hidrodinâmica*), é avaliada em $V\rho/2$. Assim, para uma esfera, temos que

massa virtual = *massa da partícula* + *massa acrescentada*,

$$m' = \frac{\pi d^3}{6} \rho_s + \frac{\pi d^3}{12} \rho, \quad (3.2.29)$$

$$\text{ou} \quad m' = \frac{\pi d^3}{6} \rho_s \left(1 + \frac{\rho}{2\rho_s} \right) = m \left(\frac{2\rho_s + \rho}{2\rho_s} \right). \quad (3.2.30)$$

A equação do movimento da massa m' , sobre a qual actuam o peso aparente e a força de arrasto, escreve-se

$$m' \ddot{y} = -F_D + w, \quad (3.2.31)$$

$$\text{com} \quad F_D = C_D A \frac{\rho \dot{y}^2}{2} \quad (3.2.32)$$

$$\text{e} \quad w = m g \left(1 - \frac{\rho}{\rho_s} \right). \quad (3.2.33)$$

Agora, substituindo (3.2.32) e (3.2.33) em (3.2.31), e dividindo por m' , obtemos

$$\ddot{y} = -C_D \frac{3\rho}{2d(2\rho_s + \rho)} \dot{y}^2 + \frac{2(\rho_s - \rho)}{2\rho_s + \rho} g. \quad (3.2.34)$$

Nos instantes iniciais da queda, a força de arrasto, que é função da velocidade, é negligenciável, pelo que a equação de movimento se pode escrever, simplesmente,

$$\ddot{y} = \frac{2(\rho_s - \rho)}{2\rho_s + \rho} g. \quad (3.2.35)$$

Por outras palavras, as partículas movem-se com acelerações, e logo com velocidades, que são função da sua massa específica, mas que são independentes do diâmetro d . Como referimos na introdução, podemos, então, inferir que a repetição de ciclos de jigagem, com duração suficientemente curta, conduz a uma estratificação que é controlada, essencialmente, pela massa específica das partículas e que é relativamente independente do calibre e da forma. A importância da aceleração diferencial na jigagem tem sido apontada por diversos autores: Gaudin (1939), Taggart (1951), Blazy (1970), Burt (1984).

Como referimos anteriormente, quando é atingida a velocidade terminal, as forças de arrasto e o peso aparente igualam-se, ou seja,

$$C_D \frac{3\rho}{2d(2\rho_s + \rho)} \dot{y}_0^2 = \frac{2(\rho_s - \rho)}{2\rho_s + \rho} g, \quad (3.2.36)$$

onde $\dot{y}_0^2$ é a velocidade terminal da partícula. Agora, resolvendo a equação (3.2.36) em ordem à velocidade $\dot{y}_0^2$, obtemos

$$\dot{y}_0 = \sqrt{\frac{4}{3} \frac{g d \rho_s - \rho}{C_D \rho}}, \quad (3.2.37)$$

equação que é equivalente a (3.2.16). Este resultado é consistente com o facto da massa acrescentada apenas alterar a inércia do movimento; as forças exteriores são as mesmas.

Durante o período de aceleração, com o crescimento da velocidade de queda e, portanto, com o crescimento do número de Reynolds, a sedimentação passa do regime de Stokes ao regime intermédio. Se a velocidade continuar a aumentar, é atingido o regime de Newton. Ou seja, a lei de resistência muda com o crescimento da velocidade de queda. Assim, durante o período de aceleração, a integração da equação de movimento (3.2.34) é facilitada se se adoptar a uma técnica numérica. Acresce que a maior parte das expressões para o coeficiente de arrasto, referentes à região intermédia, impedem mesmo a integração analítica da equação (3.2.34).

A equação (3.2.34) pode ser rescrita na seguinte forma compacta

$$\frac{d\dot{y}}{dt} = f(\dot{y}), \quad (3.2.38)$$

$$\text{com } \dot{y} = \frac{dy}{dt}, \quad (3.2.39)$$

onde a função $f(\dot{y})$ representa o segundo membro da equação (3.2.34) e y e $\dot{y}$ representam a posição e a velocidade da partícula, ao fim de t unidades de tempo. Aplicando o

método de Runge-Kutta de quarta ordem, a solução do sistema (3.2.38) e (3.2.39), num dado instante t_i e para um passo de integração h , é dada por

$$t_{i+1} = t_i + h, \quad (3.2.40)$$

$$y_{i+1} = y_i + \frac{1}{6}(k_{11} + 2k_{21} + 2k_{31} + k_{41}), \quad (3.2.41)$$

$$\dot{y}_{i+1} = \dot{y}_i + \frac{1}{6}(k_{12} + 2k_{22} + 2k_{32} + k_{42}), \quad (3.2.42)$$

com

$$k_{11} = h \dot{y}, \quad (3.2.43)$$

$$k_{12} = h f(\dot{y}), \quad (3.2.44)$$

$$k_{21} = h \dot{y} + \frac{1}{2} h k_{12}, \quad (3.2.45)$$

$$k_{22} = h f(\dot{y} + \frac{1}{2} k_{12}), \quad (3.2.46)$$

$$k_{31} = h \dot{y} + \frac{1}{2} h k_{22}, \quad (3.2.47)$$

$$k_{32} = h f(\dot{y} + \frac{1}{2} k_{22}), \quad (3.2.48)$$

$$k_{41} = h \dot{y} + h k_{32}, \quad (3.2.49)$$

$$k_{42} = h f(\dot{y} + k_{32}). \quad (3.2.50)$$

A partir da solução numérica da equação (3.2.34), calculada pela aplicação do método Runge-Kutta de 4ª ordem, podemos construir curvas que relacionam a velocidade média

$$y_i / t_i$$

com o tempo de duração da queda t_i . Se a velocidade média de duas partículas, para uma queda com duração t_i , for igual, significa que a distância percorrida pelas partículas, durante a queda, é também igual. Ou seja, as partículas comportam-se como se fossem equivalentes. No gráfico 3.2.3 podemos ver que a razão entre os diâmetros de uma partícula de quartzo e outra de galena, com igual velocidade média, cresce com a diminuição dos tempos de queda. Assim, quanto maior for a frequência de pulsação, maior poderá ser, em princípio, a largura do intervalo granulométrico a tratar. Na construção do gráfico foi utilizada a lei de resistência para corpos esféricos de Khan e Richardson (1987).

Para descrever o movimento de partículas não-esféricas devemos substituir a lei de resistência de Khan-Richardson pela lei de Chhabra-Madhav e utilizar o diâmetro da esfera com volume igual ao da partícula.

A equação (3.2.34) abstrai-se completamente da influência das partículas vizinhas. De facto, num leito, será mais realista considerar a equação

$$m' \ddot{y} = -F_D - F_P + w, \quad (3.2.51)$$

onde F_P é a resistência oposta ao movimento vertical da partícula, com origem nos choques e na fricção com outras partículas. Dada a dificuldade em avaliar a força F_P , frequentemente, considera-se que tudo se passa como se a queda ocorresse num meio com massa específica ρ_C , onde ρ_C correspondente à massa específica do leito (Burt, 1984). No gráfico 3.2.4 utilizou-se um valor de ρ_C igual a 1.7 g/cm^3 . Podemos ver que as condições de queda-perturbada favorecem a separação com base na densidade.

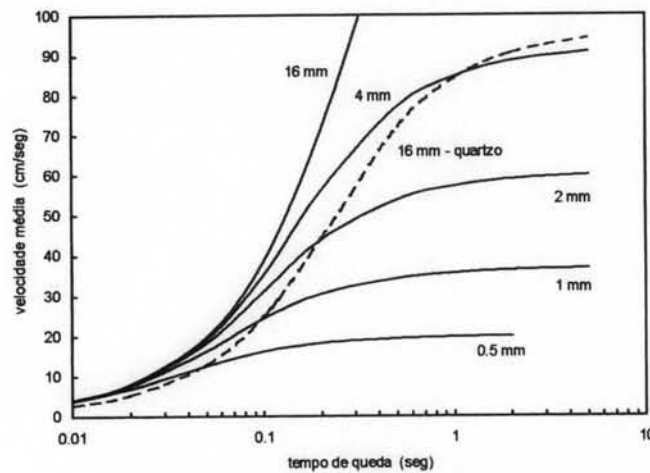


Gráfico 3.2.3: Velocidade média *versus* tempo de queda. Partículas esféricas.
Queda não-perturbada.

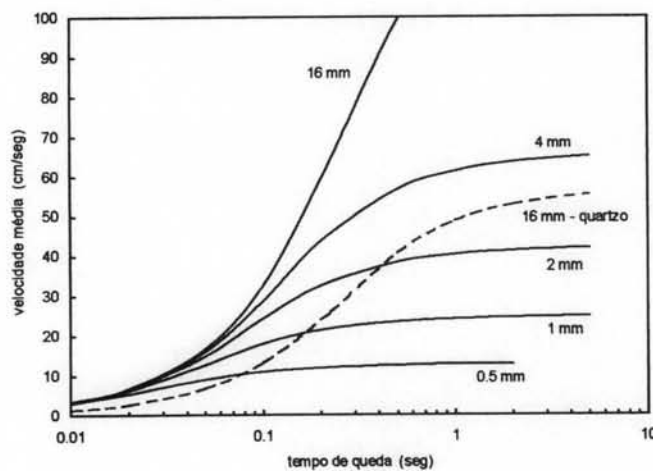


Gráfico 3.2.4: Velocidade média *versus* tempo de queda. Partículas esféricas.
Queda-perturbada.

3.3 Trabalho experimental com misturas de 4 componentes

Leito multicomponente

Na formação do leito multicomponente, utilizámos uma mistura artificial de magnetite e calcário, constituída por dois lotes granulométricos. Num primeiro grupo de ensaios, foram utilizados os lotes 8.0-6.7 mm e 3.35-2.36 mm; num segundo grupo, foram utilizados os lotes 6.7-4.75 mm e 3.35-2.36 mm. O leito era, assim, formado por quatro componentes, existindo, simultaneamente, contraste densitário e granulométrico. Em volume de sólidos, a proporção entre magnetite e calcário era de 50/50 e entre partículas grandes e pequenas era, igualmente, de 50/50.

No quadro 3.3.1 são indicados os parâmetros dos dois grupos de ensaios. Foi mantida a altura do leito, assim como a regulação do sistema de pulsação da água. Optámos, nestes ensaios, por não introduzir água pelo *hutch*. No quadro 3.3.2 são indicadas as massas totais de magnetite e calcário. Os valores apresentados correspondem a um leito misturado (com concentrações uniformes), com aproximadamente 8 cm de altura.

Ensaio com misturas de quatro componentes – Parâmetros – Quadro 3.3.1

grupo	granulometria	altura do leito	excentricidade	caudal de água
V	8.0 – 6.7 mm	8 cm	máxima	0
	3.35 – 2.36 mm			
VI	6.7 – 4.75 mm	8 cm	máxima	0
	3.35 – 2.36 mm			

Ensaio com misturas de quatro componentes – Massas totais – Quadro 3.3.2

grupo	granulometria	volume do leito	magnetite	calcário	porosidade
V	8.0 – 6.7 mm	1248 cm ³	1406 g	896 g	0.450
	3.35 – 2.36 mm				
VI	6.7 – 4.75 mm	1248 cm ³	1406 g	896 g	0.450
	3.35 – 2.36 mm				

Procedimentos

O trabalho experimental com misturas de quatro componentes implicou algumas alterações nos procedimentos descritos no ponto 2.5. As principais alterações foram as seguintes:

– O enchimento da célula de análise era efectuado por partes. O objectivo desta medida era evitar a segregação do minério durante o enchimento. Para tal, o minério foi dividido em oito fracções, com igual composição e com igual volume de sólidos. Cada fracção, depois de misturada, era depositada dentro da célula.

– Após a segmentação do leito, cada estrato, depois de seco, era primeiro crivado, e só depois era efectuada a separação entre partículas de magnetite e calcário (com o auxílio de um íman).

– Verificou-se que, para as granulometrias utilizadas, a cinética de segregação, com base na diferença de calibre, era relativamente lenta. Assim, os tempos de residência foram alterados: suprimimos o ensaio com 15 s e efectuámos um ensaio com 5 min e outro com 8 min.

Dados experimentais

No anexo E, para cada ensaio, são indicadas as massas dos quatro componentes, recolhidas em cada estrato. São indicados, igualmente, os volumes de sólidos e as concentrações reduzidas correspondentes. Nas conversões entre massa e volume de sólidos, utilizámos, novamente, as densidades indicadas nos quadros 2.5.2 e 2.5.3. Verifica-se, quase sempre, que existe um pequeno erro na soma de controlo das concentrações reduzidas. Pensamos que estes erros têm origem, sobretudo, na dificuldade em segmentar o leito em estratos com altura regular. Também neste caso, adoptámos o critério de rejeitar os ensaios em que os desvios eram superiores a 0.2.

No mesmo anexo, são também indicadas as massas totais de magnetite e de partículas grandes, recolhidas em cada estrato, bem com os volumes de sólidos e as concentrações reduzidas correspondentes. No anexo H (entre outras informações relativas ao ajuste do modelo), representa-se graficamente o andamento das concentrações reduzidas de magnetite total e de partículas grandes, em função da posição, para cada tempo de residência. Nestes gráficos, assinalamos os seguintes factos:

– Nos dois grupos de ensaios observa-se que o leito tende a estratificar, de baixo para cima, na seguinte sequência: partículas grandes de magnetite, partículas pequenas de magnetite, partículas grandes de calcário, partículas pequenas de calcário. No quadro 3.3.3, para os lotes indicados, são apresentadas as velocidades terminais de sedimentação, considerando as leis de resistência referidas no ponto 3.2. Assim, se a estratificação fosse controlada pelas velocidades terminais, qualquer que seja a lei de resistência considerada, a sequência seria: partículas grandes de magnetite, partículas grandes de calcário, parti-

culas pequenas de magnetite, partículas pequenas de calcário (existindo alguma mistura entre os lotes de calcário 6.7-4.75 mm e de magnetite 3.35-2.36 mm). Estes factos parecem indicar que as partículas não têm tempo de atingir as suas velocidades terminais, ou seja, a queda das partículas ocorre durante o período de aceleração.

– A curva de magnetite total, que traduz a evolução da segregação com base na diferença de densidade, tem um andamento semelhante à curva de magnetite dos ensaios com dois componentes. Assim, para o tempo de residência de 30 s, pode ser notada a reentrância característica da fronteira entre as regiões superior, com cinética lenta, e inferior, com cinética rápida. Nos tempos de residência mais longos, a separação entre magnetite e calcário é também quase total.

– A curva de partículas grandes, que traduz a evolução da segregação com base na diferença de calibre, apresenta uma cinética mais lenta e que tende para um estado incompleto de separação. Na realidade, comparando as concentrações referentes aos tempos de residência de 5 e 8 minutos, a segregação parece ter parado. Este facto sugere que poderá estar activo um efeito de dispersão que contraria a segregação.

Velocidades terminais de sedimentação (cm/s) – Quadro 3.3.3

lote	Schiller-Naumann	Khan-Richardson	Chhabra-Madhav
magnetite, 8.0-6.7 mm	85.82 – 78.54	92.11 – 83.80	74.75 – 68.41
magnetite, 6.7-4.75 mm	78.54 – 66.13	83.80 – 69.16	68.41 – 57.60
magnetite, 3.35-2.36 mm	55.53 – 46.61	56.14 – 44.80	48.37 – 39.85
calcário, 8.0-6.7 mm	63.55 – 58.16	67.74 – 61.43	55.35 – 50.66
calcário, 6.7-4.75 mm	58.16 – 48.97	61.43 – 50.32	50.66 – 42.65
calcário, 3.35-2.36 mm	41.13 – 33.11	40.48 – 31.96	35.82 – 26.73

Porosidade *versus* composição

No quadro 3.3.4 é indicado o modo como a porosidade varia com a composição granulométrica, nos seguintes sistemas:

- magnetite pertencente aos lotes 8.0-6.7 mm e 3.35-2.36 mm (curva 1),
- magnetite pertencente aos lotes 6.7-4.75 mm e 3.35-2.36 mm (curva 2),
- calcário pertencente aos lotes 8.0-6.7 mm e 3.35-2.36 mm (curva 3),
- calcário pertencente aos lotes 6.7-4.75 mm e 3.35-2.36 mm (curva 4).

A composição granulométrica é indicada pela fracção de partículas grandes, em volume de sólidos. A rotina experimental utilizada na obtenção dos valores de porosidade comportava os seguintes passos:

- pesagem dos produtos,
- mistura,
- deposição numa proveta graduada (com capacidade de 250 ml e escala com divisões de 2 ml),
- agitação mecânica, até o volume permanecer constante,
- medição do volume.

Nas conversões entre massa e volume de sólidos, utilizámos as densidades anteriormente calculadas (quadros 2.5.2 e 2.5.3).

Porosidade *versus* composição – Quadro 3.3.4

fracção de partículas grandes	porosidade			
	curva 1	curva 2	curva 3	curva 4
0	0.448	0.448	0.451	0.451
0.1	0.435	0.435	0.437	0.444
0.2	0.421	0.428	0.430	0.437
0.3	0.406	0.421	0.423	0.430
0.4	0.390	0.413	0.416	0.423
0.5	0.382	0.406	0.408	0.423
0.6	0.374	0.398	0.401	0.416
0.7	0.365	0.390	0.401	0.416
0.8	0.374	0.398	0.408	0.423
0.9	0.390	0.406	0.423	0.437
1	0.406	0.413	0.437	0.451

Podemos notar alguma discrepância entre os valores apresentados no quadro anterior e no quadro 3.3.2. Julgamos que esta diferença tem origem na forma da célula de jigagem, que é pouco adequada à medição do volume de partículas. Ou seja, muito provavelmente, as massas indicadas no quadro 3.3.2 não correspondem, exactamente, a um leito com 8 cm de altura.

No quadro 3.3.5 apresenta-se a composição granulométrica dos estratos ao fim de oito minutos de jigagem. Com excepção do estrato 5, a fracção de partículas grandes situa-se numa faixa que se estende, aproximadamente, entre 0.3 e 0.7. Ou seja, a composição granulométrica, entre o instante inicial e os 8 minutos, varia apenas ± 0.2 . Nesta faixa, a variação máxima da porosidade, que se verifica na curva 1 (quadro 3.3.4), é de apenas 0.024. Assim, parece-nos razoável considerar, como primeira aproximação, que a porosidade se mantém constante e uniforme em todo o leito.

Composição granulométrica dos estratos ao fim de 8 min

Quadro 3.3.5

estrato	fracção de partículas grandes			
	grupo V 1ª série	grupo V 2ª série	grupo VI 1ª série	grupo VI 2ª série
1	0.26	0.30	0.51	0.50
2	0.37	0.49	0.42	0.47
3	0.50	0.54	0.48	0.49
4	0.72	0.65	0.54	0.50
5	0.13	0.22	0.23	0.21
6	0.32	0.37	0.47	0.41
7	0.73	0.68	0.61	0.63
8	0.77	0.71	0.68	0.75

3.4 Modelo cinético para sistemas multicomponente

3.4.1 Segregação e dispersão multicomponente

Segregação multicomponente

Como vimos no ponto 2.3, num sistema binário, considera-se que a segregação ocorre pela troca de posição entre partículas do componente 1, situadas em $y-dy/2$, e partículas do componente 2, situadas em $y+dy/2$. Então, parece razoável admitir que o fluxo volumétrico do componente 1, que atravessa a secção do leito à cota y , é proporcional à concentração C_1 em $y-dy/2$ e à concentração C_2 em $y+dy/2$, ou seja,

$$f_{1y}|_y = k C_1 (y - dy/2) C_2 (y + dy/2). \quad (3.4.1)$$

Por outras palavras, a *força motora* da segregação dos componentes 1 e 2 é o produto das suas concentrações em $y-dy/2$ e $y+dy/2$. Ao fluxo (3.4.1) corresponde um contra-fluxo do componente 2, que é dado por

$$f_{2y}|_y = -f_{1y}|_y. \quad (3.4.2)$$

Assim, num sistema binário, existe um único fluxo de segregação independente, uma única força motora e um único coeficiente de proporcionalidade (coeficiente de segregação). Os fluxos anteriores podem ser convertidos em fluxos de massa

$$F_{iy}|_y = \rho_i f_{iy}|_y \quad (3.4.3)$$

e inseridos na equação de balanço para o regime batch

$$\rho_i \frac{\partial}{\partial t} C_i + \frac{\partial}{\partial y} F_{iy} = 0, \quad (2.2.13)$$

resultando

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} (k C_1 C_2) = 0 \quad (3.4.4)$$

$$\text{e} \quad \frac{\partial C_2}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial y} (k C_1 C_2) = 0. \quad (3.4.5)$$

Consideremos, agora, o que sucede num sistema multicomponente, constituído por três componentes. O componente 1 tende a concentrar-se no fundo do leito. O componente 2 tende a concentrar-se sobre o componente 1, e o componente 3 sobre o componente 2. Isto é, no sentido ascendente, observa-se que o leito tende a estratificar na sequência 1-2-3. Num leito com três componentes, as partículas do componente 1 trocam de posição, não só com partículas do componente 2, mas também com partículas do componente

3. Já vimos como se escrevem os fluxos resultantes da troca de posição entre partículas dos componentes 1 e 2. Então, bastará somar à equação (3.4.4) um termo referente à troca de posição entre as partículas das espécies 1 e 3, ou seja,

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(k_{12} C_1 C_2) + \frac{\partial}{\partial y}(k_{13} C_1 C_3) = 0. \quad (3.4.6)$$

A equação (3.4.6) não inclui um termo referente ao produto $C_2 C_3$, dado que não é razoável pensar que a troca de posição entre partículas das espécies 2 e 3 possa influenciar a concentração da espécie 1. Seguindo o mesmo raciocínio, podemos escrever

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y}(k_{23} C_2 C_3) - \frac{\partial}{\partial y}(k_{12} C_1 C_2) = 0 \quad (3.4.7)$$

$$\text{e} \quad \frac{\partial C_3}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial y}(k_{13} C_1 C_3) - \frac{\partial}{\partial y}(k_{23} C_2 C_3) = 0. \quad (3.4.8)$$

Notar que, das três equações anteriores, apenas duas são independentes, dado que

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} + \frac{\partial C_2}{\partial t} + \frac{\partial C_3}{\partial t} = 0. \quad (3.4.9)$$

Os coeficientes k_{ij} são coeficientes de segregação *binária*, no sentido em que dizem respeito à troca de posição entre partículas de dois componentes. Quando $i=j$, a troca de posição ocorre entre partículas do mesmo componente. Quando $i>j$, a troca de posição dá-se no sentido contrário ao da sequência de estratificação. Então, parece razoável admitir que

$$k_{ij} = 0 \text{ se } i \geq j, \text{ com } i = 1, \dots, n \text{ e } j = 1, \dots, n,$$

onde n é o número de componentes.

Finalmente, a generalização das equações (3.4.6), (3.4.7) e (3.4.8), para um sistema com n componentes, onde se observa a sequência de estratificação, no sentido ascendente, 1-2-3-...- n , escreve-se

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \sum_{k>i} \frac{\partial}{\partial y}(k_{ik} C_i C_k) - \sum_{k<i} \frac{\partial}{\partial y}(k_{ki} C_k C_i) = 0, \quad (3.4.10)$$

$$\text{onde} \quad \sum_i \frac{\partial C_i}{\partial t} = 0. \quad (3.4.11)$$

Dispersão multicomponente

Como vimos anteriormente (ponto 2.3), num sistema binário, constituído pelos componentes 1 e 2, a equação

$$f_{1y} = -D \frac{\partial C_1}{\partial y} \quad (3.4.12)$$

traduz uma relação linear entre o fluxo de dispersão independente f_{1y} e a *força motora* independente $\partial C_1 / \partial y$. Agora, no caso de um sistema ternário, existem dois fluxos independentes

$$f_{1y} + f_{2y} + f_{3y} = 0 \quad (3.4.13)$$

e duas *forças motoras* independentes

$$\frac{\partial C_1}{\partial y} + \frac{\partial C_2}{\partial y} + \frac{\partial C_3}{\partial y} = 0. \quad (3.4.14)$$

Então, assumindo uma relação linear entre os fluxos independentes e os gradientes de concentração independentes, podemos escrever (Taylor, Krishna, 1993)

$$f_{1y} = -D_{11} \frac{\partial C_1}{\partial y} - D_{12} \frac{\partial C_2}{\partial y} \quad (3.4.15)$$

$$\text{e} \quad f_{2y} = -D_{21} \frac{\partial C_1}{\partial y} - D_{22} \frac{\partial C_2}{\partial y}. \quad (3.4.16)$$

Os coeficientes D_{ij} indicam o efeito que o gradiente de concentração do componente j , tem no fluxo do componente i . Os valores de D_{ij} podem ser positivos ou negativos e, em geral, não são simétricos ($D_{ij} \neq D_{ji}$). Os coeficientes D_{ij} são coeficientes de dispersão *multicomponente*. De facto, estes coeficientes não se referem à troca de posição entre partículas das espécies i e j , não são, por isso, coeficientes *binários*. Desconhecem-se, assim, os fluxos que envolvem trocas de posição entre partículas das espécies 1 e 2, 1 e 3, 2 e 3, etc. Conhecem-se apenas os fluxos totais de dispersão de cada espécie.

Num sistema com n componentes, existem $n-1$ fluxos de dispersão independentes e $n-1$ gradientes de concentração independentes, assim,

$$f_{iy} = -\sum_{k=1}^{n-1} D_{ik} \frac{\partial C_k}{\partial y}, \quad \text{com } i = 1, \dots, n-1 \quad (3.4.17)$$

$$\text{e} \quad \sum_{i=1}^n f_{iy} = 0. \quad (3.4.18)$$

Segregação-dispersão multicomponente

Para um sistema multicomponente, com n espécies, combinando as equações (3.4.10), (2.2.13), (3.4.17) e (3.4.18), obtemos

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \sum_{k=i+1}^n \frac{\partial}{\partial y} (k_{ik} C_i C_k) - \sum_{k=1}^{i-1} \frac{\partial}{\partial y} (k_{ki} C_k C_i) - \sum_{k=1}^{n-1} \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{ik} \frac{\partial C_k}{\partial y} \right) = 0, \quad \text{para } i = 1, \dots, n-1, \quad (3.4.19)$$

$$\text{com } \sum_{i=1}^n \frac{\partial C_i}{\partial t} = 0. \quad (3.4.20)$$

Na análise que acabámos de efectuar, está implícito que a porosidade é constante e uniforme em todo o leito. Ou seja, a troca de posição entre partículas, que está na base dos mecanismos de segregação e de dispersão, ocorre sempre com a conservação do volume dos interstícios.

Aspectos computacionais

Na integração numérica das equações (3.4.19) e (3.4.20), aplicámos o método dos incrementos fraccionários, separando os problemas de segregação e dispersão multicomponente. Assim, por exemplo, para o caso em que temos três componentes, em linguagem simbólica, podemos escrever

$$(C_1, C_2, C_3)^{n+1/2} = U_{SM} [(C_1, C_2, C_3)^n, \Delta t] \quad (3.4.21)$$

$$\text{e } (C_1, C_2, C_3)^{n+1} = U_{DM} [(C_1, C_2, C_3)^{n+1/2}, \Delta t], \quad (3.4.22)$$

onde U_{SM} e U_{DM} representam os esquemas numéricos parcelares empregues na resolução separada dos problemas de segregação e dispersão multicomponente. Como os operadores U_{SM} e U_{DM} não são comutativos, para alcançar precisão de segunda ordem no tempo, à semelhança do que fizemos no caso binário, o método dos incrementos fraccionários é implementado da seguinte forma

$$(C_1, C_2, C_3)^{n+1/2} = U_{SM} [(C_1, C_2, C_3)^n, \Delta t], \quad (3.4.21)$$

$$(C_1, C_2, C_3)^{n+1} = U_{DM} [(C_1, C_2, C_3)^{n+1/2}, \Delta t], \quad (3.4.22)$$

$$(C_1, C_2, C_3)^{n+3/2} = U_{DM} [(C_1, C_2, C_3)^{n+1}, \Delta t], \quad (3.4.23)$$

$$(C_1, C_2, C_3)^{n+2} = U_{SM} [(C_1, C_2, C_3)^{n+3/2}, \Delta t]. \quad (3.4.24)$$

O operador U_{SM} consiste, fundamentalmente, numa generalização do esquema predictor-corrector apresentado no ponto 2.4 (equações 2.4.14 e 2.4.15). Assim, tomando, novamente, como exemplo o caso em que temos 3 componentes

$$\text{preditor: } \frac{\hat{C}_{1i}^{n+1/2} - C_{1i}^n}{\Delta t} + \frac{k_{i+1/2}^{12} C_{1i}^n C_{2i+1}^n - k_{i-1/2}^{12} C_{1i-1}^n C_{2i}^n}{\Delta y} +$$

$$+ \frac{k_{i+1/2}^{13} C_{1i}^n C_{3i+1}^n - k_{i-1/2}^{13} C_{1i-1}^n C_{3i}^n}{\Delta y} = 0, \quad (3.4.25)$$

sendo adoptado um processo de generalização análogo na determinação das concentrações *previstas* dos componentes 2 e 3. As concentrações *previstas* são, agora, utilizadas no cálculo do passo corrector

$$\begin{aligned} \text{corrector: } & \frac{C_{1i}^{n+1/2} - C_{1i}^n}{\Delta t} + \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{k_{i+1/2}^{12} C_{1i}^n C_{2i+1}^n - k_{i-1/2}^{12} C_{1i-1}^n C_{2i}^n}{\Delta y} + \frac{k_{i+1/2}^{12} \hat{C}_{1i}^{n+1/2} \hat{C}_{2i+1}^{n+1/2} - k_{i-1/2}^{12} \hat{C}_{1i-1}^{n+1/2} \hat{C}_{2i}^{n+1/2}}{\Delta y} \right] + \\ & + \frac{1}{2} \left[\frac{k_{i+1/2}^{13} C_{1i}^n C_{3i+1}^n - k_{i-1/2}^{13} C_{1i-1}^n C_{3i}^n}{\Delta y} + \frac{k_{i+1/2}^{13} \hat{C}_{1i}^{n+1/2} \hat{C}_{3i+1}^{n+1/2} - k_{i-1/2}^{13} \hat{C}_{1i-1}^{n+1/2} \hat{C}_{3i}^{n+1/2}}{\Delta y} \right] = 0, \end{aligned} \quad (3.4.26)$$

adoptando-se uma generalização semelhante no cálculo das concentrações *corrigidas* dos componentes 2 e 3.

Por sua vez, o operador U_{DM} , referente à dispersão multicomponente, consiste na aplicação sucessiva do esquema de Crank-Nicolson aos $n-1$ primeiros componentes. Assim,

$$C_1^{n+1} = U_{CN}[D_{11}, C_1^{n+1/2}, \Delta t], \quad (3.4.27)$$

$$C_2^{n+1} = U_{CN}[D_{22}, C_2^{n+1/2}, \Delta t], \quad (3.4.28)$$

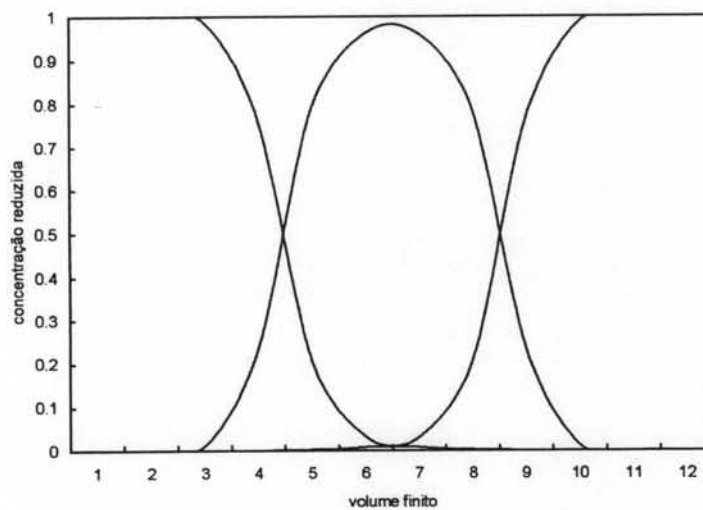
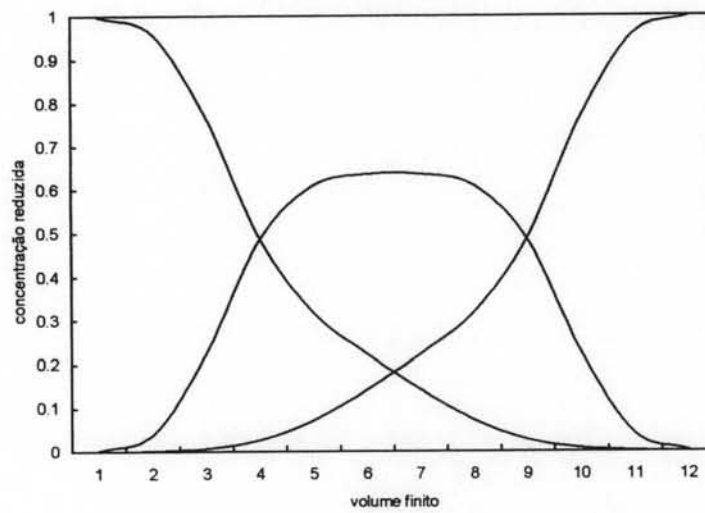
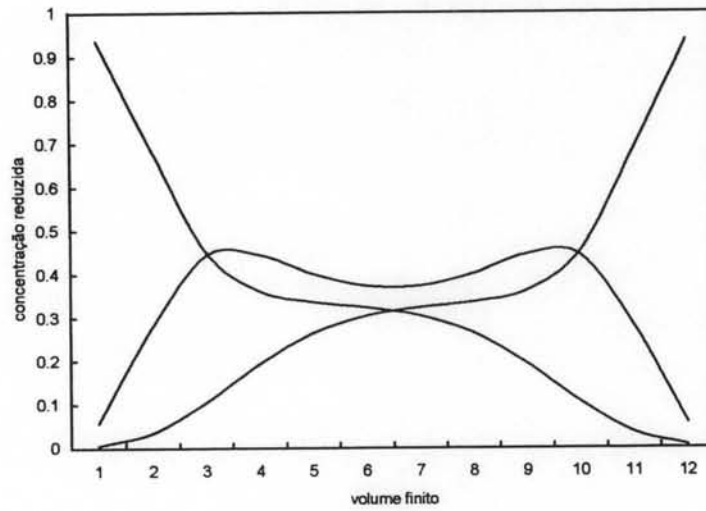
sendo a concentração do último componente obtida por subtração

$$C_3^{n+1} = C_3^{n+1/2} - (C_1^{n+1} - C_1^{n+1/2}) - (C_2^{n+1} - C_2^{n+1/2}). \quad (3.4.29)$$

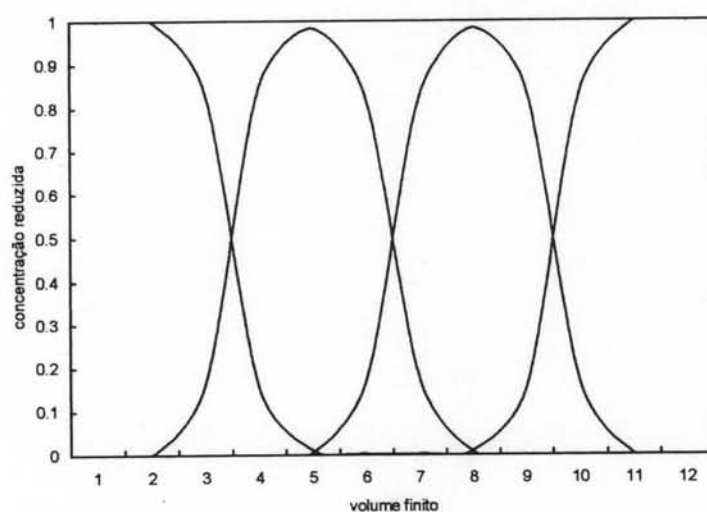
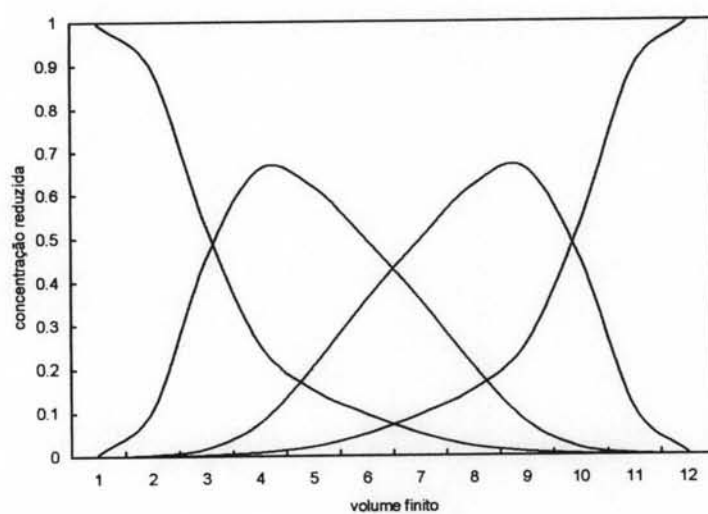
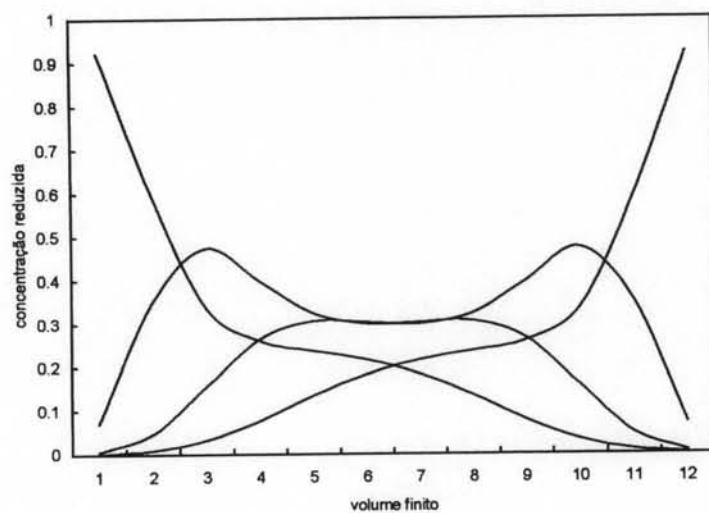
Notar que estamos a considerar os coeficientes D_{ij} , com $i \neq j$, iguais a zero.

Simulação

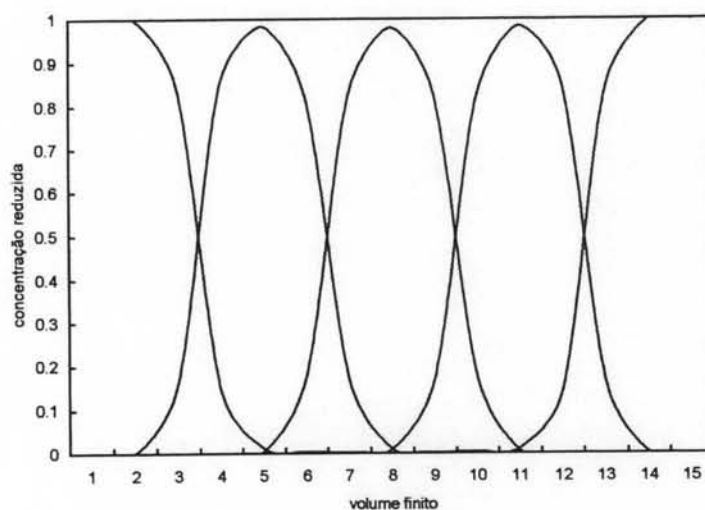
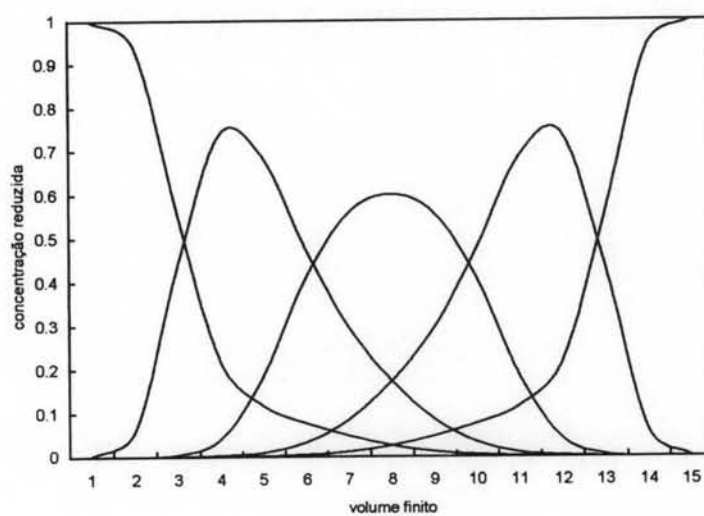
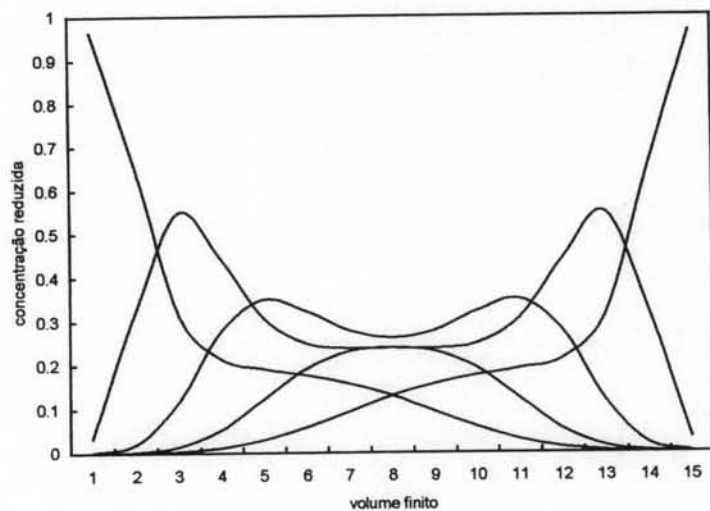
Nos gráficos 3.4.1 a 3.4.3 apresentam-se os resultados de um processo de segregação (estratificação) com três, quatro e cinco componentes. Nos gráficos 3.4.4 a 3.4.6 são apresentados os resultados de um processo de dispersão (mistura), para o mesmo número de componentes. No primeiro caso, considera-se que, no instante inicial, o sistema se encontra perfeitamente misturado. No segundo caso, no instante inicial, o sistema encontra-se perfeitamente estratificado. Os coeficientes de segregação k_{12} , k_{13} , etc., são iguais a 0.1 cm/s. Os coeficientes de dispersão D_{11} , D_{22} , etc., valem 0.1 cm²/s. O passo de integração Δt foi fixado em 0.5 s, e a altura dos volumes finitos Δy em 1 cm. A porosidade média do leito é igual a 0.5.



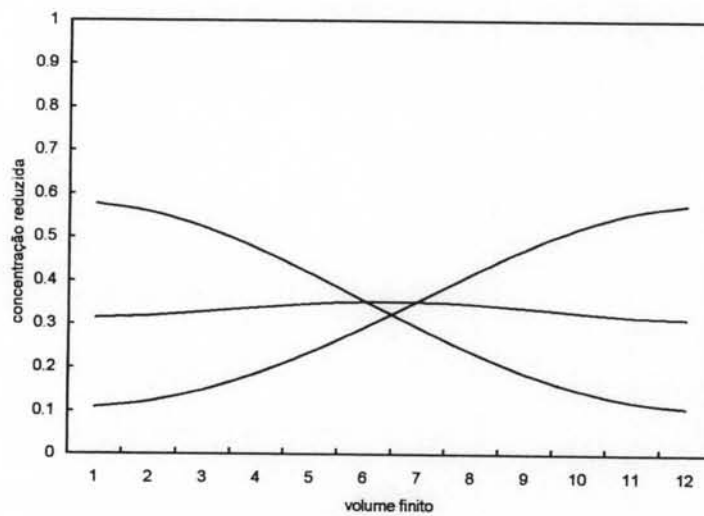
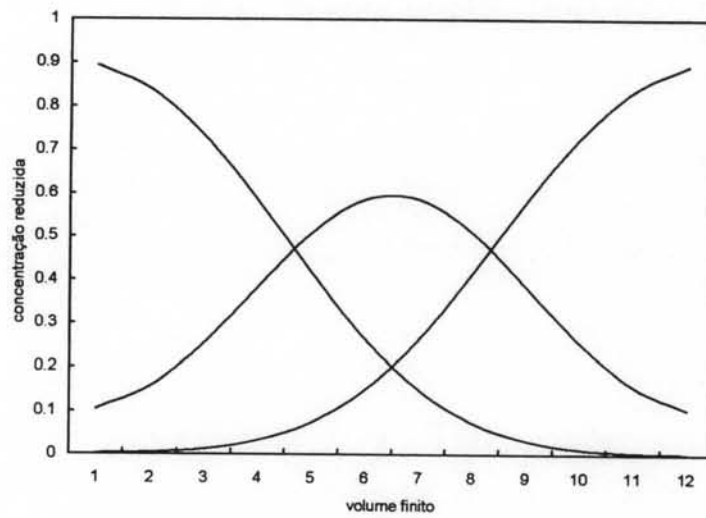
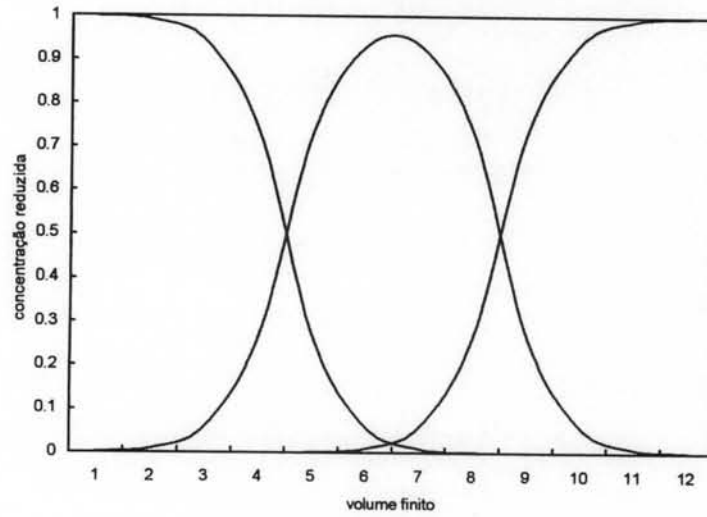
Gráficos 3.4.1: Segregação (estratificação) multicomponente. Três componentes.
Tempo de simulação: 100, 180 e 285 s.



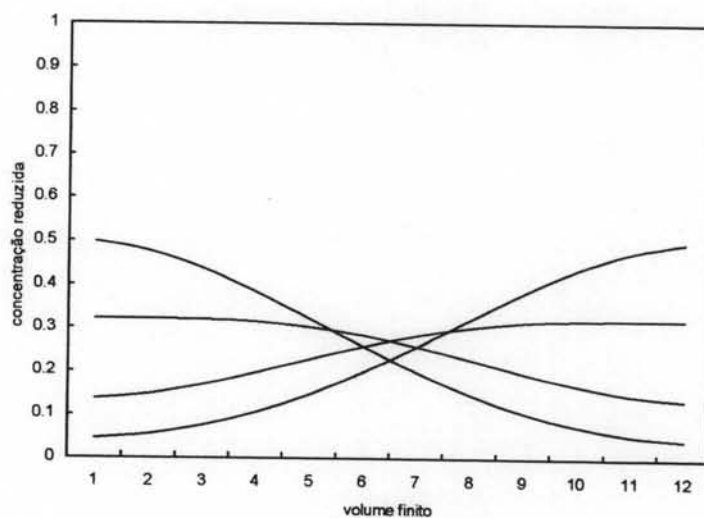
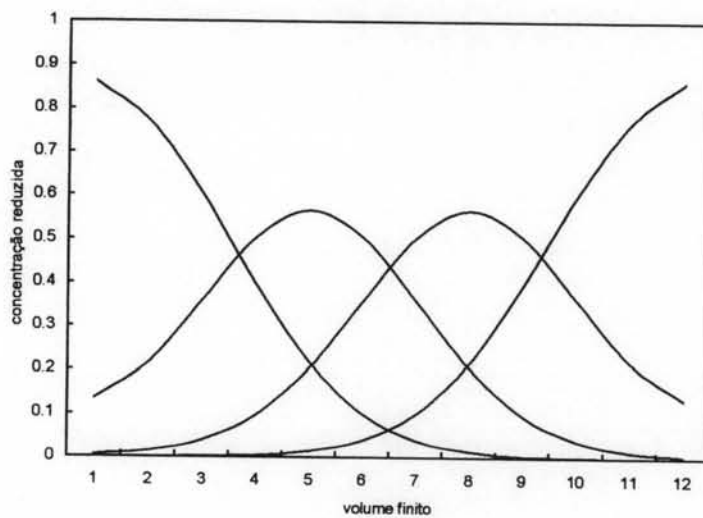
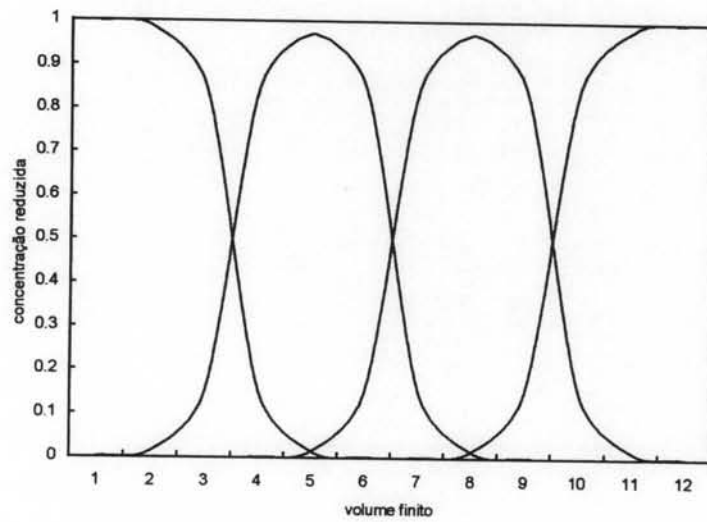
Gráficos 3.4.2: Segregação (estratificação) multicomponente. Quatro componentes.
Tempo de simulação: 120, 195 e 325 s.



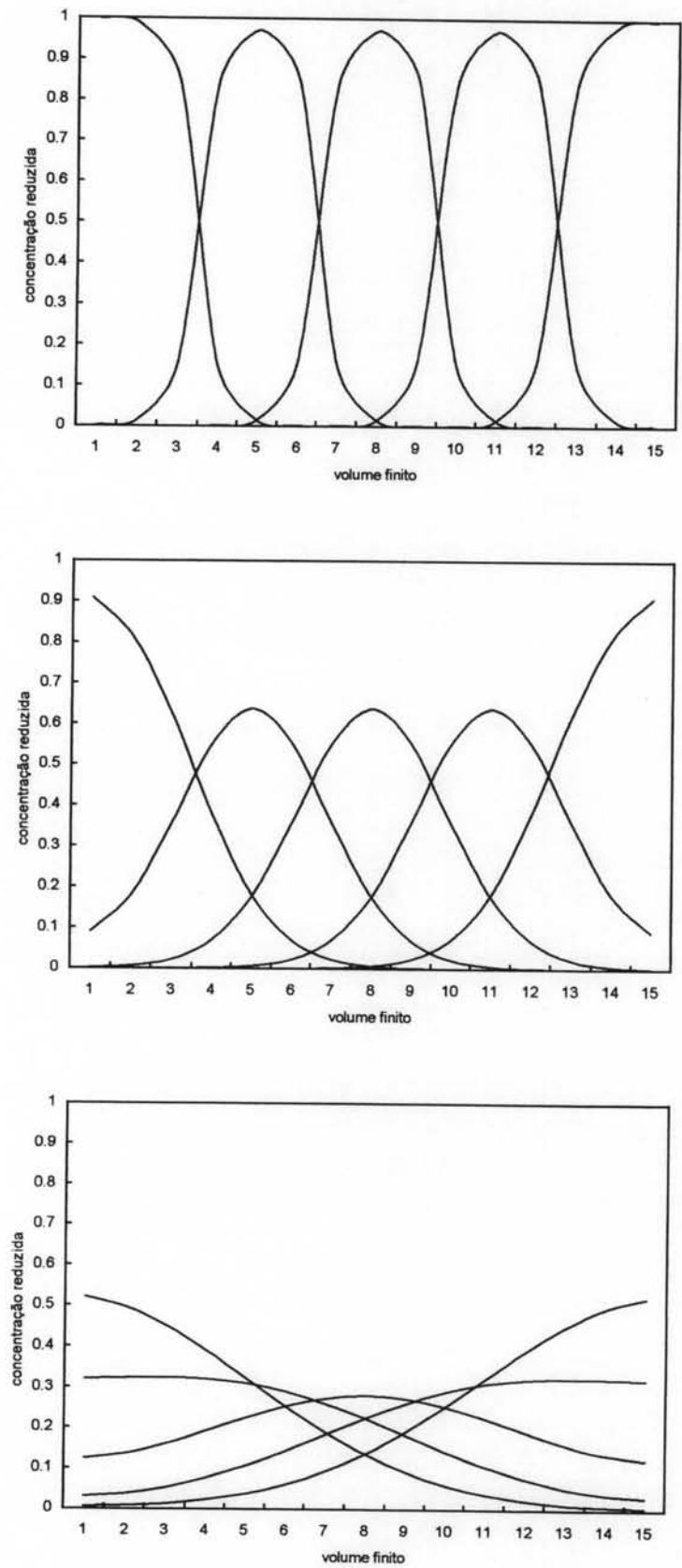
Gráficos 3.4.3: Segregação (estratificação) multicomponente. Cinco componentes.
Tempo de simulação: 170, 260 e 385 s.



Gráficos 3.4.4: Dispersão (mistura) multicomponente. Três componentes.
Tempo de simulação: 5, 30 e 125 s



Gráficos 3.4.5: Dispersão (mistura) multicomponente. Quatro componentes.
Tempo de simulação: 2, 20 e 100 s.



Gráficos 3.4.6: Dispersão (mistura) multicomponente. Cinco componentes.
Tempo de simulação: 2, 15 e 90 s.

3.4.2 Coeficientes de segregação e dispersão

Introdução

Como vimos no ponto anterior, a integração do sistema de equações que descreve a segregação-dispersão multicomponente, implica que sejam conhecidos os coeficientes k_{ij} e D_{ij} . Num problema com n componentes, atendendo a que

$$k_{ij} = 0 \quad \text{se } i \geq j$$

$$\text{e} \quad D_{ij} = 0 \quad \text{se } i \neq j,$$

$$\text{existem} \quad p = \binom{n}{2} + (n-1) \quad (3.4.30)$$

coeficientes diferentes de zero. No quadro 3.4.1 podemos avaliar o crescimento de p com o número de componentes. No caso em que se adopta a divisão do leito em duas regiões, o número de coeficientes é igual ao dobro do indicado.

componentes	coeficientes
2	2
3	5
4	9
6	20
10	54
20	109

Quadro 3.4.1

O crescimento, muito rápido, de p com n , sugere que os coeficientes não são independentes, devendo existir entre eles determinadas relações. Por outras palavras, deve ser possível impor um certo número de restrições à variação dos valores de k_{ij} e D_{ij} . Está subjacente a este raciocínio o *princípio da racionalidade* (ou da *parcimónia*), que determina que se deve adoptar o menor número possível de parâmetros. Como vimos no ponto 2.6.4, na fase de ajuste do modelo, mediante a análise estatística dos resultados, podem ser detectadas situações de excesso de parâmetros (parâmetros nulos, parâmetros numericamente iguais, etc.).

Coeficientes de segregação

Durante o período de pulsão de um ciclo de jigagem, o leito sobe e, eventualmente, dilata, até que a velocidade das partículas se anula. Nesse instante, inicia-se, a partir do

repouso, a queda das partículas. Dado que se opera, normalmente, com frequências de pulsação relativamente elevadas, os tempos de queda devem ser muito curtos, ou seja, a sedimentação deve ocorrer, principalmente, durante o período de aceleração. Assim, parece razoável considerar que os coeficientes de segregação estão relacionados com as velocidades de queda das partículas, medidas durante o período de aceleração. Especificamente, os coeficientes k_{ij} devem poder ser obtidos pela seguinte relação

$$k_{ij} = k_0 (u_i - u_j), \quad (3.4.31)$$

onde u_i é a velocidade média de uma partícula da espécie i , numa queda com duração t , e k_0 é uma constante (adimensional) de proporcionalidade. Ou seja, o coeficiente k_{ij} é considerado proporcional à diferença de distância percorrida pelas partículas das espécies i e j , numa queda com duração t . Pode verificar-se, por simulação, que num leito formado por partículas das espécies $1, 2, \dots, N$, a que correspondem as velocidades

$$u_1 > u_2 > \dots > u_n,$$

os coeficientes segregação k_{ij} , quando inseridos na equação da segregação multicomponente (4.2.10), dão origem à sequência de estratificação, no sentido ascendente,

$$1 - 2 - \dots - N.$$

Como vimos no ponto 3.2, a equação do movimento de uma partícula esférica, sob a acção da gravidade e no seio de um fluido viscoso, escreve-se

$$\ddot{y} = -C_D \frac{3\rho}{2d(2\rho_s + \rho)} \dot{y}^2 + \frac{2(\rho_s - \rho)}{2\rho_s + \rho} g, \quad (3.2.34)$$

onde os símbolos utilizados têm o significado anteriormente atribuído. Também como vimos atrás, o movimento de partículas não-esféricas pode ser descrito com base nesta equação, se for adoptada a lei de resistência de Chhabra-Madhav e ser for adoptado, como dimensão linear d , o diâmetro da esfera com igual volume.

Na definição das velocidades u_i , consideramos, por hipótese, que a equação (3.2.34) é representativa do movimento das partículas no leito. Ou seja, admitimos que a resistência ao movimento vertical tem origem, essencialmente, na força de arrasto. Por outras palavras, a influência das partículas vizinhas faz-se sentir, sobretudo, na medida em que estas interrompem a queda. Assim, em linguagem simbólica, podemos escrever

$$u_i = u_i(\rho_i, d_i, t), \quad (3.4.32)$$

onde ρ_i é a massa específica das partículas da espécie i , d_i é o seu diâmetro equivalente e t é a duração da queda. Na prática, a velocidade média u_i é calculada pela integração numérica da equação (3.2.34), aplicando o método de Runge-Kutta de 4ª ordem, anteriormente apresentado.

A relação (3.4.31) cumpre o objectivo de desligar o número de parâmetros do modelo do número de componentes. De facto, independentemente do número de componentes, os coeficientes k_{ij} podem ser calculados conhecendo apenas a constante de proporcionalidade k_0 e a duração t da queda. Na prática, como veremos, é necessário desdobrar o parâmetro t em dois parâmetros independentes: t_1 e t_2 . O tempo de queda t_1 refere-se à região superior do leito; o tempo de queda t_2 refere-se à região inferior. Verifica-se experimentalmente que $t_2 > t_1$. A relação (3.4.31) permite, também, que, dentro de certos limites, se possam fazer extrapolações para sistemas com diferente composição.

Como referimos na introdução, durante a fase final do ciclo de jigagem, quando ocorre a contracção do leito, as partículas com maior dimensão são as primeiras a imobilizar-se, enquanto as mais pequenas podem ainda deslocar-se através dos intervalos e canais formados pelas maiores. Então, em leitos constituídos por partículas com alguma diferença de tamanho, deve ser considerada a hipótese do tempo de queda de uma partícula ser função do seu calibre. Por outras palavras, às partículas com menor dimensão devem corresponder tempos de queda um pouco maiores.

Primeira estimativa dos tempos de queda

Nos gráficos 3.4.7 e 3.4.8 representa-se a velocidade média de sedimentação, em função do tempo de queda, para os lotes utilizados nos ensaios experimentais. Foi adoptada a lei de resistência para partículas não-esféricas de Chhabra-Madhav. Utilizámos, como diâmetro equivalente, a média das malhas que definem cada lote granulométrico.

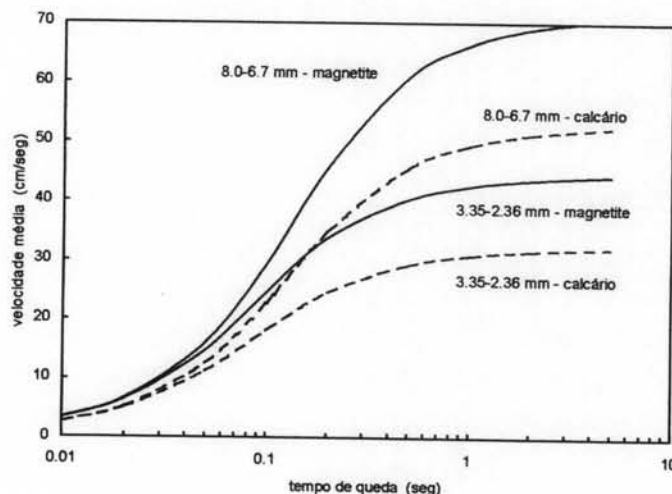


Gráfico 3.4.7: Velocidades médias de sedimentação, em função do tempo de queda, para os lotes utilizados nos ensaios experimentais. Grupo V.

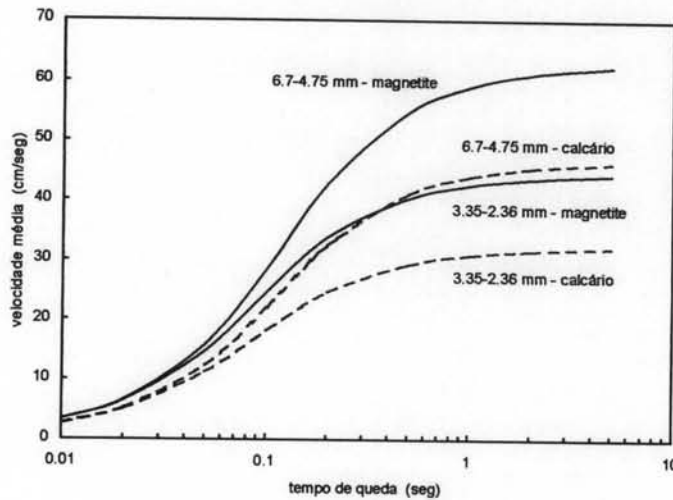


Gráfico 3.4.8: Velocidades médias de sedimentação, em função do tempo de queda, para os lotes utilizados nos ensaios experimentais. Grupo VI.

Os gráficos anteriores tornam possível fazer uma primeira estimativa dos tempos de queda. A curva de partículas grandes de calcário troca de posição com a curva de partículas pequenas de magnetite, cerca dos 0.15 segundos, no grupo V, e cerca dos 0.3 segundos, no grupo VI. Portanto, os tempos de queda t_1 e t_2 devem ser inferiores a estes valores, tendo em atenção a sequência de estratificação observada.

Coeficientes de dispersão

Como referimos na introdução deste ponto, consideramos que os coeficientes de dispersão D_{ij} , com $i \neq j$, são nulos. Assim, é excluída a possibilidade de ocorrerem efeitos de interferência (do tipo difusão inversa, difusão osmótica, barreira difusiva, etc.), que nos parecem muito improváveis em leitos de jigagem.

Os coeficientes D_{ii} , como primeira hipótese, são considerados independentes das propriedades das partículas, nomeadamente da sua densidade e do seu calibre. Pode verificar-se, por simulação, que esta hipótese não invalida que a dispersão (mistura) seja visível, sobretudo, na separação entre espécies com velocidades de queda aproximadamente iguais. Este aspecto está de acordo com a fenomenologia anteriormente atribuída ao mecanismo de dispersão (ponto 2.3). Na prática, como veremos, é necessário considerar dois coeficientes de dispersão: D_1 e D_2 . O primeiro coeficiente diz respeito à região superior do leito; o segundo coeficiente diz respeito à região inferior. Verifica-se experimentalmente que $D_2 > D_1$.

3.5 Ajuste do modelo multicomponente

3.5.1 Função objectivo e erro experimental

Função objectivo

Como assinalámos no ponto 3.3, nas curvas de concentração de magnetite total, observa-se a reentrância característica da fronteira entre as regiões superior, com cinética mais lenta, e inferior, com cinética mais rápida. Assim, no ajuste do modelo, são considerados dois tempos de queda, t_1 e t_2 , e dois coeficientes de dispersão, D_1 e D_2 . Os índices 1 e 2 indicam as regiões superior e inferior do leito. Pensamos que se justifica a inclusão do mecanismo de dispersão, pois, como vimos, a segregação com base na diferença de calibre tende para um estado incompleto de separação. Os tempos de queda t_1 e t_2 aplicam-se a todos os componentes, independentemente do seu calibre. Os coeficientes de dispersão D_1 e D_2 são também válidos para todos os componentes. Assim, em resumo, o modelo para sistemas multicomponente compreende seis parâmetros: k_0 , t_1 , t_2 , D_1 , D_2 e y_0 (um inteiro, que indica o último volume finito que pertence à região superior).

Os dados experimentais, como vimos no ponto 3.3, dizem respeito às concentrações reduzidas de quatro componentes: partículas grandes e pequenas de magnetite; partículas grandes e pequenas de calcário. A partir das quatro curvas de concentração, podem ser construídas duas curvas independentes: a curva de magnetite total, que caracteriza a separação com base na diferença de densidade, e a curva de partículas grandes, que caracteriza a separação com base a diferença de calibre. A partir destas duas curvas é possível reconstruir as quatro curvas originais.

Podemos, então, definir os resíduos do seguinte modo

$$g_i(\mathbf{x}) = r_w(t_j) - s_w(\mathbf{x}, t_j) \quad (3.5.1)$$

$$\text{e} \quad h_i(\mathbf{x}) = u_w(t_j) - v_w(\mathbf{x}, t_j), \quad (3.5.2)$$

onde $r_w(t_j)$ é a concentração de magnetite total, observada no estrato w , após o tempo de residência t_j e $s_w(\mathbf{x}, t_j)$ é a concentração correspondente prevista pelo modelo; do mesmo modo, $u_w(t_j)$ é a concentração de partículas grandes, observada no estrato w , após o tempo de residência t_j e $v_w(\mathbf{x}, t_j)$ é a concentração homóloga prevista pelo modelo. O vector $\mathbf{x}$ representa os parâmetros do modelo (excluindo y_0). Na integração da equação (3.4.19), foram utilizados oito volumes finitos, com Δy igual a 1 cm. Existe, assim, uma correspondência directa entre o volume finito w e o estrato w .

Se adoptarmos a minimização do quadrado da norma Euclidiana dos resíduos, o problema do ajuste escreve-se

$$\min_x f(x) = \frac{1}{2} \|g(x)\|_2^2 + \frac{1}{2} \|h(x)\|_2^2 \quad (3.5.3)$$

$$\text{ou} \quad \min_x f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m g_i(x)^2 + h_i(x)^2, \quad (3.5.4)$$

onde m é o número de estratos analisados (e, portanto, $2m$ é o número de resíduos). Como as funções $g_i(x)$ e $h_i(x)$ são não-lineares em relação aos parâmetros do modelo, trata-se, novamente, de um problema não-linear de mínimos quadrados. Notar que não é feita qualquer diferenciação entre os resíduos $g_i(x)$ e $h_i(x)$, opção que justificamos mais à frente.

Também neste caso, no tratamento estatístico do ajuste do modelo, considerámos que, a cada observação r_{wj} e u_{wj} , está associado um erro aleatório. Estes erros, por hipótese, são independentes entre si e distribuem-se, em torno do verdadeiro valor de cada observação, de acordo com a lei normal (têm, portanto, média zero). Considera-se, também, que a variância dos erros é igual em todas as observações. Supõe-se, igualmente, que o modelo é correcto. Sendo válidas estas considerações, pode provar-se, como fizemos anteriormente, que os parâmetros ajustados são estimadores de máxima verosimilhança.

Erro experimental

Como vimos atrás, cada ensaio foi repetido duas vezes. Então, ainda antes do ajuste, é possível calcular uma estimativa do erro experimental associado a cada observação. Seguindo um raciocínio análogo ao apresentado no ponto 2.6.2, podemos concluir que

$$r_{wjk} - \tilde{r}_{wj}, \quad \text{com } k = 1, 2, \quad (3.5.5)$$

é uma estimativa do erro experimental associado à observação r_{wjk} , onde $\tilde{r}_{wj}$ é a média das duas observações referentes à curva de magnetite total. Podemos, igualmente, concluir que

$$u_{wjk} - \tilde{u}_{wj}, \quad \text{com } k = 1, 2, \quad (3.5.6)$$

é uma estimativa do erro experimental associado à observação u_{wjk} , onde $\tilde{u}_{wj}$ é a média das duas observações referentes, neste caso, à curva de partículas grandes.

Com base nos valores dos desvios (3.5.5) e (3.5.6) é possível fazer uma primeira avaliação das hipóteses à cerca do erro experimental. Assim, para verificar a homogeneidade do erro, representámos graficamente a relação dos desvios (3.5.5) e (3.5.6), com

as variáveis mais relevantes do processo: o tempo de residência, a posição e as concentrações médias. Os gráficos efectuados encontram-se no anexo F.

Podemos ver que a dispersão vertical dos pontos, ao longo das escala de tempo e de posição, é bastante regular. De facto, a regularidade é superior à que se verifica nos ensaios com dois componentes. No que diz respeito à relação com as concentrações médias, verifica-se, novamente, que, junto dos extremos da escala, a grandeza dos erros é menor. Trata-se, também neste caso, de um efeito muito localizado e que envolve um pequeno número de resíduos. Assim, não parece existir fundamento para rejeitar a hipótese da homogeneidade do erro experimental.

Estatísticas do erro experimental

Quadro 3.5.1

	grupo V	grupo VI
número de desvios	224	224
média	0	0
máximo	0.0594	0.0686
mínimo	- 0.0594	- 0.0686
soma do quadrado dos desvios	0.091904	0.089041
n.º de graus de liberdade	112	112
erro quadrático médio	0.000821	0.000795
intervalo de confiança	0.000550;	0.000533;
da variância a 95%	0.000931	0.000902
erro padrão	0.0286	0.0282
$\pm 2 \times$ erro padrão	± 0.0572	± 0.0564
coeficiente de assimetria	0	0
coeficiente de curtose	0.6693	2.308

Como vimos, a grandeza do erro experimental é aproximadamente igual para todas as observações. Assim, à semelhança do que fizemos no ponto 2.6.2, podemos calcular o erro quadrático médio dos desvios (3.5.5) e (3.5.6) pela seguinte expressão

$$s_{exp}^2 = \frac{1}{2\nu} \sum_w \sum_j (r_{wj1} - r_{wj2})^2 + (u_{wj1} - u_{wj2})^2, \quad (3.5.7)$$

onde ν é o número de graus de liberdade da soma de quadrados, que neste caso é dado por

$$\nu = 2 \times (\text{n.º de estratos}) \times (\text{n.º de tempos de residência}). \quad (3.5.8)$$

Pode provar-se que o erro s_{exp}^2 constitui uma estimativa não-enviesada do verdadeiro valor da variância do erro experimental (Ross, 1987).

No quadro 3.5.1 apresentam-se as estimativas da variância do erro experimental e o respectivo intervalo de confiança a 95%, para os grupos de ensaios V e VI. São, também, apresentadas outras estatísticas que caracterizam a distribuição dos desvios (3.5.5) e (3.5.6). Da leitura do quadro destacamos:

- Os valores máximo e mínimo, a média e o coeficiente de assimetria, reflectem o facto das distribuições serem simétricas em relação à origem.
- O intervalo de confiança a 95% para o erro experimental, que é dado aproximadamente por $\pm 2 \times$ erro padrão, apresenta valores que rondam os 5.7%. Este nível de erro é semelhante ao registado nos ensaios com dois componentes.
- O coeficiente de curtose, no grupo de ensaios VI, é um pouco elevado. No entanto, a comparação gráfica da distribuição dos desvios com a lei normal (anexo F), indica que se pode considerar que os erros experimentais seguem, aproximadamente, esta lei.

3.5.2 Resultados do ajuste

Parâmetros ajustados

O modo como definimos a função n -dimensional $f(x)$ sugere, novamente, que se trata de uma função *suave*. Na realidade, em relação ao ajuste do modelo binário, em termos da minimização de $f(x)$, apenas aumenta o número de dimensões do problema. Assim, é aplicável o algoritmo de minimização, sem restrições, anteriormente apresentado, que se baseia na direcção de Gauss-Newton.

Parâmetros ajustados – Estimativas pontuais – Quadro 3.5.2
Modelo multicomponente

	grupo V	grupo VI
y_0	4	4
k_0	0.195603	0.569477
t_1 (seg)	0.011008	0.003444
t_2 (seg)	0.034607	0.037306
D_1 (cm ² /seg)	0.001222	0.000269
D_2 (cm ² /seg)	0.043146	0.256138
f	2.154 E-1	1.756 E-1

f = valor da função objectivo

No quadro 3.5.2 são apresentados os valores dos parâmetros ajustados, assim com o valor da função objectivo. Numa primeira leitura, destacamos os seguintes aspectos:

- Os tempos de queda t_1 e t_2 apresentam valores claramente distintos. Também, os coeficientes D_1 e D_2 apresentam uma diferença que parece ser significativa. Este factos sugerem que a divisão do leito em duas regiões é necessária para uma descrição adequada dos efeitos de segregação e dispersão.

- A duração de queda t_2 , na região inferior do leito, é maior que a duração de queda t_1 , na região superior. Este facto é consistente com as observações anteriores: a expansão do leito é maior na região inferior.

- As quedas com duração t_1 e t_2 proporcionam uma separação, acentuadamente, com base na diferença de densidade (ver gráficos 3.4.7 e 3.4.8).

- Tendo em conta que a frequência de pulsação utilizada é cerca de 200 ciclos por minuto, cada ciclo dura, aproximadamente, 0.3 s. Assim, os tempos efectivos de separação t_1 e t_2 são apenas uma pequena fracção da duração total do ciclo, mesmo na região inferior do leito.

- Os coeficientes de dispersão são maiores na região inferior do leito, o que está de acordo com a maior mobilidade das partículas nesta região.
- O parâmetro y_0 , que define a dimensão relativa das duas regiões, assume o mesmo valor nos dois grupos de ensaios.
- É muito limitada a possibilidade de extrapolar os parâmetros ajustados para leitos com outra composição. Efectivamente, os grupos de ensaios V e VI têm uma composição semelhante, mas os parâmetros ajustados, sobretudo, k_0 , D_1 e D_2 , têm valores muito diferentes.

Intervalos de confiança para os parâmetros ajustados

Se os erros experimentais seguem a lei normal, com média zero e variância constante, e se são independentes, então pode provar-se, como fizemos no ponto 2.6.4, que a probabilidade do intervalo

$$\hat{x}_i - t_{m-5}(1-\alpha/2)s\sqrt{a_{ii}} \leq \bar{x}_i \leq \hat{x}_i + t_{m-5}(1-\alpha/2)s\sqrt{a_{ii}} \quad (3.5.9)$$

conter o verdadeiro valor de x_i é igual a $1-\alpha$, conquanto, para pequenas variações dos parâmetros ajustados, os resíduos sejam lineares. Nesta expressão, o erro padrão s pode ser calculado com base na seguinte estimativa da variância dos erros experimentais

$$s^2 = \frac{\mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}})' \mathbf{g}(\hat{\mathbf{x}}) + \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})' \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}})}{m-5} \quad (3.5.10)$$

e a_{ii} , o elemento i da diagonal principal da matriz $(JJ')^{-1}$, pode ser estimado a partir do cálculo do Jacobiano no ponto $\hat{\mathbf{x}}$.

No quadro seguinte apresentam-se as estimativas pontuais dos parâmetros ajustados e os respectivos intervalos de confiança a 95%, calculados pela expressão (3.5.9). No cálculo da inversa da matriz JJ' utilizámos, novamente, o método de Gauss-Jordan.

Parâmetros ajustados – Estimativas pontuais e intervalos de confiança a 95%

Quadro 3.5.3 – Modelo multicomponente

	grupo V	grupo VI
y_0	4	4
k_0	0.195603 $\pm$ 0.027078	0.569477 $\pm$ 0.225365
t_1 (seg)	0.011008 $\pm$ 0.001342	0.003444 $\pm$ 0.001361
t_2 (seg)	0.034607 $\pm$ 0.007239	0.037306 $\pm$ 0.007814
D_1 (cm ² /seg)	0.001222 $\pm$ 0.000652	0.000269 $\pm$ 0.000375
D_2 (cm ² /seg)	0.043146 $\pm$ 0.022295	0.256138 $\pm$ 0.169159
f	2.154 E-1	1.756 E-1

Testes baseados na distribuição t

Como vimos, a divisão do leito em duas regiões implica que sejam incluídos dois parâmetros adicionais. Assim, na validação do modelo, assume grande importância verificar se esta divisão é pertinente. Sendo válidas as propriedades dos erros, atrás referidas, pode provar-se que

$$\frac{\hat{x}_i - \bar{x}_i}{s \sqrt{a_{ii}}} \sim t_{m-5} \quad (3.5.11)$$

No entanto, atendendo ao elevado número de graus liberdade da distribuição t , é válida a seguinte aproximação

$$\frac{\hat{x}_i - \bar{x}_i}{s \sqrt{a_{ii}}} \sim N(0,1) \quad (3.5.12)$$

Então, é possível testar a hipótese

$$H_0 : \bar{t}_1 = \bar{t}_2 \quad (\text{uma região}), \quad (3.5.13)$$

contra a hipótese alternativa

$$H_1 : \bar{t}_1 \neq \bar{t}_2 \quad (\text{duas regiões}), \quad (3.5.14)$$

mediante o cálculo da estatística

$$Z = \frac{\hat{t}_1 - \hat{t}_2}{\sqrt{s^2(a_{22} + a_{33})}} \sim N(0,1) \quad (3.5.15)$$

Para os parâmetros D_1 e D_2 pode ser efectuado um teste semelhante.

Nos quadros 3.5.4 e 3.5.5, para os grupos de ensaios V e VI, apresentam-se os resultados dos testes referentes à igualdade entre parâmetros. O valor p representa o valor de prova dos testes, ou seja, é a probabilidade

$$p = P\{|Z| > z(1 - p/2)\} \quad (3.5.16)$$

	grupo V	grupo VI
$t_1 - t_2$	- 0.02360	- 0.03386
Z	- 6.317	- 8.414
p	≈ 0	≈ 0

Quadro 3.5.4

	grupo V	grupo VI
$D_1 - D_2$	- 0.04192	- 0.2559
Z	- 3.704	- 2.981
p	0.000212	0.002872

Quadro 3.5.5

Em conclusão, para os dois grupos de ensaios, a hipótese nula (t_1 igual a t_2 , D_1 igual a D_2) é rejeitada. Assim, é confirmada a validade da descrição dos efeitos de segregação e dispersão, mediante duas regiões.

Qualidade do ajuste – Teste de Kolmogorov-Smirnov (teste KS)

Também neste caso, para quantificar a qualidade dos ajustes, recorreremos ao teste KS. O teste foi aplicado, individualmente, a cada curva ajustada. Os resultados encontram-se nos quadros seguintes.

Modelo multicomponente – Teste KS – Quadros 3.5.6

grupo V – magnetite total

seg.	30	60	90	120	180	300	480
N ₁	16	16	16	16	16	16	16
N ₂	8	8	8	8	8	8	8
d	0.188	0.250	0.250	0.375	0.375	0.375	0.375
P *	0.992	0.893	0.893	0.441	0.441	0.441	0.441

grupo V – partículas grandes

seg.	30	60	90	120	180	300	480
N ₁	16	16	16	16	16	16	16
N ₂	8	8	8	8	8	8	8
d	0.250	0.250	0.188	0.188	0.188	0.188	0.188
P *	0.893	0.893	0.992	0.992	0.992	0.992	0.992

grupo VI – magnetite total

seg.	30	60	90	120	180	300	480
N ₁	16	16	16	16	16	16	16
N ₂	8	8	8	8	8	8	8
d	0.188	0.125	0.250	0.250	0.375	0.375	0.375
P *	0.992	0.999	0.893	0.893	0.441	0.441	0.441

grupo VI – partículas grandes

seg.	30	60	90	120	180	300	480
N ₁	16	16	16	16	16	16	16
N ₂	8	8	8	8	8	8	8
d	0.313	0.188	0.188	0.188	0.250	0.250	0.188
P *	0.675	0.992	0.992	0.992	0.893	0.893	0.992

* valorizar apenas o primeiro algarismo significativo

Os resultados do teste KS indicam que os dados experimentais e os valores previstos podem ter origem na mesma população. Assim, de acordo com o teste KS, não existe fundamento para rejeitar o modelo. Verifica-se, também, que o modelo, em termos da qualidade do ajuste, não tende a privilegiar a curva de magnetite total ou a curva de partículas grandes. De facto, sob este ponto de vista, o ajuste é equilibrado. Assim, pensamos que se justifica a opção pelo tratamento não-discriminatório dos resíduos $g(x)$ e $h(x)$.

Análise dos resíduos – Distribuição

Como referimos no ponto 2.6.4, se o modelo é correcto, os resíduos no ponto mínimo são, aproximadamente, iguais aos erros experimentais. Assim, os resíduos devem confirmar as hipóteses que anteriormente fizemos sobre as propriedades dos erros ou, pelo menos, não devem contrariar estas hipóteses. Analisamos, em seguida, as propriedades ligadas à distribuição dos resíduos, e só depois verificamos se os resíduos podem ser considerados independentes.

Assim, para verificar a homogeneidade do erro experimental, representámos graficamente a relação dos resíduos com as variáveis mais importantes do modelo: o tempo de residência, a posição e as concentrações previstas. Os gráficos encontram-se no anexo G. Podemos ver que a dispersão vertical dos pontos, ao longo das escalas de tempo e posição, é bastante regular, o que confirma a hipótese da variância constante. Na relação com as concentrações previstas, verifica-se que, junto dos extremos da escala, a grandeza dos resíduos é menor. No entanto, também neste caso, trata-se de um efeito muito localizado e que envolve um número relativamente pequeno de resíduos. Em conclusão, julgamos que a hipótese da homogeneidade do erro experimental pode ser mantida.

	grupo V	grupo VI
m_r	- 0.002599	0.000465
τ	- 0.8682	0.1716
p	0.3862	0.8639

Quadro 3.5.7

Para verificar se a média dos resíduos difere significativamente de zero, aplicámos, novamente, o teste t. A estatística do teste é dada por

$$\tau = \frac{m_r}{s / \sqrt{m}} \sim t_{m-5}, \quad (3.5.17)$$

onde $s / \sqrt{m}$

é o erro padrão da média dos resíduos m_r . No quadro 3.5.7 apresentam-se os resultados do teste. O valor p indica o valor de prova do teste, isto é, a probabilidade

$$p = P\{|\tau| > t_{m-5}(1 - p/2)\}. \quad (3.5.18)$$

Podemos, então, concluir que não existe tendência sistemática para a sobrestimação, ou para subestimação, das observações.

No quadro 3.5.8 apresentam-se os principais indicadores estatísticos que caracterizam a distribuição dos resíduos. No quadro destacamos:

– O intervalo de confiança a 95% do erro experimental, estimado com base nos valores dos resíduos (e que é dado aproximadamente por $\pm 2 \times$ erro padrão), varia entre 8.0 e 8.9%. Isto significa um crescimento entre 2.4 e 3.1%, em relação aos valores anteriormente estimados (quadro 3.5.1). Assim, o erro do modelo, caso exista, parece ser tolerável. Estes valores confirmam, também, que não se verifica uma degradação da capacidade de previsão do modelo, quando passamos de um problema binário para um problema multicomponente.

– Embora os coeficientes de assimetria indiquem um bom ajuste à lei normal, os coeficientes de curtose indicam que o ajuste é um pouco imperfeito. No anexo G pode ser encontrada a comparação gráfica entre as distribuições dos resíduos e a lei normal. Em face desta informação adicional, julgamos que a hipótese da distribuição normal dos erros não é rejeitada.

Modelo multicomponente – Estatísticas dos resíduos

Quadro 3.5.8

	grupo V	grupo VI
número de resíduos	224	224
média	- 0.002599	0.000465
máximo	0.1129	0.1561
mínimo	- 0.1880	- 0.1462
soma do quadrado dos resíduos	0.430744	0.351251
n.º de graus de liberdade	219	219
erro quadrático médio	0.001967	0.001604
intervalo de confiança	0.001645;	0.001341;
da variância a 95%	0.002394	0.001952
erro padrão	0.0443	0.0401
$\pm 2 \times$ erro padrão	± 0.0886	± 0.0802
coeficiente de assimetria	- 0.6465	- 0.0153
coeficiente de curtose	1.759	2.108

Análise dos resíduos – Testes das sequências e do sinal

Nos quadros 3.5.9 e 3.5.10 apresentam-se os resultados da aplicação, a cada curva ajustada, dos testes das sequências e do sinal. Os dois testes, como vimos no ponto 2.6.4, visam verificar a hipótese de que os erros experimentais são independentes. Recordar-se o significado dos símbolos utilizados

– teste das sequências:

n , número de resíduos positivos

m , número de resíduos negativos

r , número de sequências

P , probabilidade de ocorrerem r ou menos (*ou mais*) sequências

– teste do sinal:

n , número de resíduos não nulos

v , número de resíduos com o mesmo sinal

P , probabilidade de ocorrerem v , ou menos, resíduos.

Modelo multicomponente – Teste das sequências – Quadros 3.5.9

grupo V – magnetite total

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	7	3	4	4	5	4	4	5	5	5	4	5	4	3
m	1	5	4	4	3	4	4	3	3	3	4	3	4	5
r	3	5	2	2	4	4	4	4	4	4	2	2	2	2
P	.750	.571	.029	.029	.429	.371	.371	.429	.429	.429	.029	.036	.029	.036

grupo V – partículas grandes

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	6	4	5	5	5	5	3	3	4	4	4	5	3	3
m	2	4	3	3	3	3	5	5	4	4	4	3	5	5
r	3	6	3	4	5	5	5	3	5	5	5	4	6	4
P	.286	.371	.143	.429	.571	.571	.571	.143	.629	.629	.629	.429	.286	.429

grupo VI – magnetite total

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	4	5	6	5	3	5	5	5	5	4	3	4	4	3
m	4	3	2	3	5	3	3	3	3	4	5	4	4	5
r	4	5	3	3	2	4	4	4	4	2	2	4	4	2
P	.371	.571	.286	.143	.036	.429	.429	.429	.429	.029	.036	.371	.371	.036

grupo VI – partículas grandes

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	3	4	4	2	5	5	4	3	3	3	4	4	3	3
m	5	4	4	6	3	3	4	5	5	5	4	4	5	5
r	5	5	4	4	4	6	4	4	3	3	6	4	4	3
P	.571	.629	.371	.643	.429	.286	.371	.429	.143	.429	.371	.371	.429	.143

Como vimos no ponto 2.6.4, o valor de prova do teste das sequências é calculado, com base na probabilidade P , pela expressão (2.6.123). Assim, em qualquer dos testes efectuados, a hipótese da aleatoriedade dos resíduos não é rejeitada, se fixarmos o nível de significado do teste em 5%. Em conclusão, não existe fundamento para acreditar que os resíduos estão correlacionados sequencialmente. Por extensão, também não existe fundamento para rejeitar a hipótese de que os erros experimentais são independentes.

Modelo multicomponente – Teste do sinal – Quadros 3.5.10

grupo V – magnetite total

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	1	3	4	4	3	4	4	3	3	3	4	3	4	3
P	.035	.363	.637	.637	.363	.637	.637	.363	.363	.363	.637	.363	.637	.363

grupo V – partículas grandes

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	2	4	3	3	3	3	3	3	4	4	4	3	3	3
P	.145	.637	.363	.363	.363	.363	.363	.363	.637	.637	.637	.363	.363	.363

grupo VI – magnetite total

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	4	3	2	3	3	3	3	3	3	4	3	4	4	3
P	.637	.363	.145	.363	.363	.363	.363	.363	.363	.637	.363	.637	.637	.363

grupo VI – partículas grandes

seg.	30	30'	60	60'	90	90'	120	120'	180	180'	300	300'	480	480'
n	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8	8
v	3	4	4	2	3	3	4	3	3	3	4	4	3	3
P	.363	.637	.637	.145	.363	.363	.637	.363	.363	.363	.637	.637	.363	.363

Os resultados do teste do sinal revelam apenas uma única curva ajustada com ν igual a 1. Em todos os outros casos o valor de ν é superior. Assim, também com base no teste do sinal, não deve ser rejeitada a hipótese de que os erros experimentais são independentes

Previsão de observações futuras

Para um nível de significado de $100(1-\alpha)\%$, o intervalo de confiança para uma observação futura é dado pela expressão

$$s_i(\hat{x}) - t_{m-5}(1-\alpha/2)\sqrt{b} \leq r_i \leq s_i(\hat{x}) + t_{m-5}(1-\alpha/2)\sqrt{b}, \quad (3.5.19)$$

no caso de se tratar de uma observação referente à curva de magnetite total. Para uma observação referente à curva de partículas grandes, temos

$$u_i(\hat{x}) - t_{m-5}(1-\alpha/2)\sqrt{b} \leq u_i \leq u_i(\hat{x}) + t_{m-5}(1-\alpha/2)\sqrt{b}. \quad (3.5.20)$$

Em ambos os casos,

$$b = s^2 + se^2(s_i(\hat{x})), \quad (2.6.137)$$

onde s pode ser estimado pela expressão (2.6.10) e $se(s_i(\hat{x}))$ pela seguinte aproximação

$$se(s_i(\hat{x})) \approx s \sqrt{v_i'(JJ')^{-1}v_i}, \quad (2.6.141)$$

onde v_i é a coluna i do Jacobiano.

No anexo H, para os grupos de ensaios V e VI, representam-se graficamente os intervalos de confiança a 95%, calculados pelas expressões anteriores. Representam-se, igualmente, os dados experimentais e as linhas de regressão. Na prática, verifica-se que o termo $se(s_i(\hat{x}))$ é inferior a s , em pelo menos uma ordem de grandeza. Assim, no grupo de ensaios V, a extensão dos intervalos de confiança varia entre 8.7 e 9.2%; no grupo de ensaios VI, varia entre 7.9 e 8.5%.

Anexos E a H

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 30 s

estrato	massa – g					
	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	100	110	27	28	55	127
2	69	64	40	45	85	109
3	65	66	73	71	144	138
4	68	66	70	81	151	138
5	80	74	56	70	126	136
6	59	52	49	114	163	108
7	6	11	146	166	312	152
8	0	0	239	119	358	239
total	447	443	700	694	1394	1147

estrato	volume de sólidos – cm ³					
	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	38.46	42.31	6.59	6.83	13.42	45.05
2	26.54	24.62	9.76	10.98	20.74	36.30
3	25.00	25.38	17.80	17.32	35.12	42.80
4	26.15	25.38	17.07	19.76	36.83	43.22
5	30.77	28.46	13.66	17.07	30.73	44.43
6	22.69	20.00	11.95	27.80	39.75	34.64
7	2.31	4.23	35.61	40.49	76.10	37.92
8	0.00	0.00	58.29	29.02	87.31	58.29
total	171.92	170.38	170.73	169.27	340.00	342.65

estrato	concentração – cm ³ / cm ³					
	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.41	0.45	0.07	0.07	0.14	0.48
2	0.37	0.34	0.14	0.15	0.29	0.51
3	0.29	0.30	0.21	0.20	0.41	0.50
4	0.30	0.29	0.19	0.22	0.41	0.49
5	0.34	0.32	0.15	0.19	0.34	0.49
6	0.28	0.24	0.14	0.34	0.48	0.42
7	0.03	0.05	0.43	0.49	0.92	0.46
8	0.00	0.00	0.67	0.33	1.00	0.67
total	2.01	1.99	2.00	2.00	4.00	4.01

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 60 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	129	150	0	3	3	129
2	91	77	3	10	13	94
3	101	91	12	32	44	113
4	87	78	25	68	93	112
5	39	41	64	166	230	103
6	3	7	132	202	334	135
7	0	0	241	135	376	241
8	0	0	226	83	309	226
total	450	444	703	699	1402	1153

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	49.62	57.69	0.00	0.73	0.73	49.62
2	35.00	29.62	0.73	2.44	3.17	35.73
3	38.85	35.00	2.93	7.80	10.73	41.78
4	33.46	30.00	6.10	16.59	22.69	39.56
5	15.00	15.77	15.61	40.49	56.10	30.61
6	1.15	2.69	32.20	49.27	81.47	33.35
7	0.00	0.00	58.78	32.93	91.71	58.78
8	0.00	0.00	55.12	20.24	75.36	55.12
total	173.08	170.77	171.46	170.49	341.95	344.54

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.46	0.53	0.00	0.01	0.01	0.46
2	0.52	0.44	0.01	0.04	0.05	0.53
3	0.46	0.41	0.03	0.09	0.12	0.49
4	0.39	0.35	0.07	0.19	0.26	0.46
5	0.17	0.18	0.18	0.47	0.65	0.35
6	0.01	0.03	0.38	0.58	0.96	0.39
7	0.00	0.00	0.64	0.36	1.00	0.64
8	0.00	0.00	0.73	0.27	1.00	0.73
total	2.01	1.95	2.05	2.00	4.05	4.06

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 90 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	85	148	0	0	0	85
2	124	109	0	4	4	124
3	108	90	0	18	18	108
4	91	77	13	90	103	104
5	38	23	55	199	254	93
6	5	3	100	160	260	105
7	0	0	238	133	371	238
8	0	0	295	91	386	295
total	451	450	701	695	1396	1152

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	32.69	56.92	0.00	0.00	0.00	32.69
2	47.69	41.92	0.00	0.98	0.98	47.69
3	41.54	34.62	0.00	4.39	4.39	41.54
4	35.00	29.62	3.17	21.95	25.12	38.17
5	14.62	8.85	13.41	48.54	61.95	28.03
6	1.92	1.15	24.39	39.02	63.41	26.31
7	0.00	0.00	58.05	32.44	90.49	58.05
8	0.00	0.00	71.95	22.20	94.15	71.95
total	173.46	173.08	170.98	169.51	340.49	344.44

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.36	0.64	0.00	0.00	0.00	0.36
2	0.53	0.46	0.00	0.01	0.01	0.53
3	0.52	0.43	0.00	0.05	0.05	0.52
4	0.39	0.33	0.04	0.24	0.28	0.43
5	0.17	0.10	0.16	0.57	0.73	0.33
6	0.03	0.02	0.37	0.59	0.96	0.40
7	0.00	0.00	0.64	0.36	1.00	0.64
8	0.00	0.00	0.76	0.24	1.00	0.76
total	2.00	1.98	1.96	2.06	4.02	3.98

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 120 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	68	131	0	0	0	68
2	76	108	0	0	0	76
3	119	110	0	3	3	119
4	150	84	6	33	39	156
5	36	12	81	211	292	117
6	0	0	129	213	342	129
7	0	0	186	121	307	186
8	0	0	299	117	416	299
total	449	445	701	698	1399	1150

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	26.15	50.38	0.00	0.00	0.00	26.15
2	29.23	41.54	0.00	0.00	0.00	29.23
3	45.77	42.31	0.00	0.73	0.73	45.77
4	57.69	32.31	1.46	8.05	9.51	59.15
5	13.85	4.62	19.76	51.46	71.22	33.61
6	0.00	0.00	31.46	51.95	83.41	31.46
7	0.00	0.00	45.37	29.51	74.88	45.37
8	0.00	0.00	72.93	28.54	101.47	72.93
total	172.69	171.15	170.98	170.24	341.22	343.67

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.34	0.66	0.00	0.00	0.00	0.34
2	0.41	0.59	0.00	0.00	0.00	0.41
3	0.52	0.48	0.00	0.01	0.01	0.52
4	0.58	0.32	0.01	0.08	0.09	0.59
5	0.15	0.05	0.22	0.57	0.79	0.37
6	0.00	0.00	0.38	0.62	1.00	0.38
7	0.00	0.00	0.61	0.39	1.00	0.61
8	0.00	0.00	0.72	0.28	1.00	0.72
total	2.00	2.10	1.94	1.96	3.90	3.94

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 180 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	61	156	0	0	0	61
2	84	130	0	0	0	84
3	158	107	0	2	2	158
4	119	50	3	63	66	122
5	24	5	54	220	274	78
6	0	0	135	196	331	135
7	0	0	229	108	337	229
8	0	0	280	106	386	280
total	446	448	701	695	1396	1147

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	23.46	60.00	0.00	0.00	0.00	23.46
2	32.31	50.00	0.00	0.00	0.00	32.31
3	60.77	41.15	0.00	0.49	0.49	60.77
4	45.77	19.23	0.73	15.37	16.10	46.50
5	9.23	1.92	13.17	53.66	66.83	22.40
6	0.00	0.00	32.93	47.80	80.73	32.93
7	0.00	0.00	55.85	26.34	82.19	55.85
8	0.00	0.00	68.29	25.85	94.14	68.29
total	171.54	172.31	170.98	169.51	340.49	342.52

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.28	0.72	0.00	0.00	0.00	0.28
2	0.39	0.61	0.00	0.00	0.00	0.39
3	0.59	0.40	0.00	0.00	0.00	0.59
4	0.56	0.24	0.01	0.19	0.20	0.57
5	0.12	0.02	0.17	0.69	0.86	0.29
6	0.00	0.00	0.41	0.59	1.00	0.41
7	0.00	0.00	0.68	0.32	1.00	0.68
8	0.00	0.00	0.73	0.27	1.00	0.73
total	1.95	1.99	1.99	2.07	4.06	3.94

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 300 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	54	179	0	0	0	54
2	88	129	0	0	0	88
3	113	83	0	0	0	113
4	182	58	0	46	46	182
5	11	2	45	244	289	56
6	0	0	141	188	329	141
7	0	0	238	118	356	238
8	0	0	274	101	375	274
total	448	451	698	697	1395	1146

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	20.77	68.85	0.00	0.00	0.00	20.77
2	33.85	49.62	0.00	0.00	0.00	33.85
3	43.46	31.92	0.00	0.00	0.00	43.46
4	70.00	22.31	0.00	11.22	11.22	70.00
5	4.23	0.77	10.98	59.51	70.49	15.21
6	0.00	0.00	34.39	45.85	80.24	34.39
7	0.00	0.00	58.05	28.78	86.83	58.05
8	0.00	0.00	66.83	24.63	91.46	66.83
total	172.31	173.46	170.24	170.00	340.24	342.55

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.23	0.77	0.00	0.00	0.00	0.23
2	0.41	0.59	0.00	0.00	0.00	0.41
3	0.58	0.42	0.00	0.00	0.00	0.58
4	0.68	0.22	0.00	0.11	0.11	0.68
5	0.06	0.01	0.15	0.79	0.94	0.21
6	0.00	0.00	0.43	0.57	1.00	0.43
7	0.00	0.00	0.67	0.33	1.00	0.67
8	0.00	0.00	0.73	0.27	1.00	0.73
total	1.95	2.01	1.97	2.07	4.04	3.92

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 480 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	56	163	0	0	0	56
2	62	105	0	0	0	62
3	111	112	0	0	0	111
4	204	66	5	22	27	209
5	14	2	18	256	274	32
6	0	0	108	227	335	108
7	0	0	251	93	344	251
8	0	0	321	97	418	321
total	447	448	703	695	1398	1150

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	21.54	62.69	0.00	0.00	0.00	21.54
2	23.85	40.38	0.00	0.00	0.00	23.85
3	42.69	43.08	0.00	0.00	0.00	42.69
4	78.46	25.38	1.22	5.37	6.59	79.68
5	5.38	0.77	4.39	62.44	66.83	9.77
6	0.00	0.00	26.34	55.37	81.71	26.34
7	0.00	0.00	61.22	22.68	83.90	61.22
8	0.00	0.00	78.29	23.66	101.95	78.29
total	171.92	172.3	171.46	169.52	340.98	343.38

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.26	0.74	0.00	0.00	0.00	0.26
2	0.37	0.63	0.00	0.00	0.00	0.37
3	0.50	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50
4	0.71	0.23	0.01	0.05	0.06	0.72
5	0.07	0.01	0.06	0.86	0.92	0.13
6	0.00	0.00	0.32	0.68	1.00	0.32
7	0.00	0.00	0.73	0.27	1.00	0.73
8	0.00	0.00	0.77	0.23	1.00	0.77
total	1.91	2.11	1.89	2.09	3.98	3.80

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 30 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	58	87	24	18	42	82
2	95	83	39	60	99	134
3	83	80	36	70	106	119
4	73	69	57	70	127	130
5	71	66	56	84	140	127
6	54	46	73	131	204	127
7	8	11	137	147	284	145
8	0	0	277	115	392	277
total	442	442	699	695	1394	1141

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	22.31	33.46	5.85	4.39	10.24	28.16
2	36.54	31.92	9.51	14.63	24.14	46.05
3	31.92	30.77	8.78	17.07	25.85	40.70
4	28.08	26.54	13.90	17.07	30.97	41.98
5	27.31	25.38	13.66	20.49	34.15	40.97
6	20.77	17.69	17.80	31.95	49.75	38.57
7	3.08	4.23	33.41	35.85	69.26	36.49
8	0.00	0.00	67.56	28.05	95.61	67.56
total	170.00	170.00	170.49	169.51	340.00	340.49

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.34	0.51	0.09	0.07	0.16	0.43
2	0.39	0.34	0.10	0.16	0.26	0.49
3	0.36	0.35	0.10	0.19	0.29	0.46
4	0.33	0.31	0.16	0.20	0.36	0.49
5	0.31	0.29	0.16	0.24	0.40	0.47
6	0.24	0.20	0.20	0.36	0.56	0.44
7	0.04	0.06	0.44	0.47	0.91	0.48
8	0.00	0.00	0.71	0.29	1.00	0.71
total	2.01	2.06	1.96	1.98	3.94	3.97

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 60 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	88	126	0	2	2	88
2	107	90	0	9	9	107
3	101	86	12	33	45	113
4	105	83	24	58	82	129
5	41	49	70	148	218	111
6	6	8	135	210	345	141
7	0	0	193	138	331	193
8	0	0	267	96	363	267
total	448	442	701	694	1395	1149

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	33.85	48.46	0.00	0.49	0.49	33.85
2	41.15	34.62	0.00	2.20	2.20	41.15
3	38.85	33.08	2.93	8.05	10.98	41.78
4	40.38	31.92	5.85	14.15	20.00	46.23
5	15.77	18.85	17.07	36.10	53.17	32.84
6	2.31	3.08	32.93	51.22	84.15	35.24
7	0.00	0.00	47.07	33.66	80.73	47.07
8	0.00	0.00	65.12	23.41	88.53	65.12
total	172.31	170.00	170.98	169.27	340.25	343.29

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.41	0.59	0.00	0.01	0.01	0.41
2	0.53	0.44	0.00	0.03	0.03	0.53
3	0.47	0.40	0.04	0.10	0.14	0.51
4	0.44	0.35	0.06	0.15	0.21	0.50
5	0.18	0.21	0.19	0.41	0.60	0.37
6	0.03	0.03	0.37	0.57	0.94	0.40
7	0.00	0.00	0.58	0.42	1.00	0.58
8	0.00	0.00	0.74	0.26	1.00	0.74
total	2.05	2.02	1.98	1.95	3.93	4.03

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 90 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	84	191	0	0	0	84
2	101	98	0	2	2	101
3	133	93	0	8	8	133
4	90	50	6	54	60	96
5	36	13	50	187	237	86
6	3	0	125	210	335	128
7	0	0	232	146	378	232
8	0	0	288	92	380	288
total	447	445	701	699	1400	1148

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	32.31	73.46	0.00	0.00	0.00	32.31
2	38.85	37.69	0.00	0.49	0.49	38.85
3	51.15	35.77	0.00	1.95	1.95	51.15
4	34.62	19.23	1.46	13.17	14.63	36.08
5	13.85	5.00	12.20	45.61	57.81	26.05
6	1.15	0.00	30.49	51.22	81.71	31.64
7	0.00	0.00	56.59	35.61	92.20	56.59
8	0.00	0.00	70.24	22.44	92.68	70.24
total	171.92	171.15	170.98	170.49	341.47	342.90

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.31	0.69	0.00	0.00	0.00	0.31
2	0.50	0.49	0.00	0.01	0.01	0.50
3	0.58	0.40	0.00	0.02	0.02	0.58
4	0.51	0.28	0.02	0.19	0.21	0.53
5	0.18	0.07	0.16	0.60	0.76	0.34
6	0.01	0.00	0.37	0.62	0.99	0.38
7	0.00	0.00	0.61	0.39	1.00	0.61
8	0.00	0.00	0.76	0.24	1.00	0.76
total	2.09	1.93	1.92	2.06	3.98	4.01

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 120 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	77	132	0	0	0	77
2	76	104	0	2	2	76
3	136	127	0	5	5	136
4	131	71	4	64	68	135
5	27	13	67	194	261	94
6	0	0	144	212	356	144
7	0	0	182	117	299	182
8	0	0	307	105	412	307
total	447	447	704	699	1403	1151

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	29.62	50.77	0.00	0.00	0.00	29.62
2	29.23	40.00	0.00	0.49	0.49	29.23
3	52.31	48.85	0.00	1.22	1.22	52.31
4	50.38	27.31	0.98	15.61	16.59	51.36
5	10.38	5.00	16.34	47.32	63.66	26.72
6	0.00	0.00	35.12	51.71	86.83	35.12
7	0.00	0.00	44.39	28.54	72.93	44.39
8	0.00	0.00	74.88	25.61	100.49	74.88
total	171.92	171.92	171.71	170.49	342.20	343.63

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.37	0.63	0.00	0.00	0.00	0.37
2	0.42	0.57	0.00	0.01	0.01	0.42
3	0.51	0.48	0.00	0.01	0.01	0.51
4	0.53	0.29	0.01	0.17	0.18	0.54
5	0.13	0.06	0.21	0.60	0.81	0.34
6	0.00	0.00	0.40	0.60	1.00	0.40
7	0.00	0.00	0.61	0.39	1.00	0.61
8	0.00	0.00	0.75	0.25	1.00	0.75
total	1.96	2.04	1.98	2.02	4.00	3.94

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 180 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	90	176	0	0	0	90
2	79	109	0	0	0	79
3	117	94	0	6	6	117
4	146	64	0	41	41	146
5	14	6	42	220	262	56
6	0	0	132	195	327	132
7	0	0	230	131	361	230
8	0	0	297	101	398	297
total	446	449	701	694	1395	1147

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	34.62	67.69	0.00	0.00	0.00	34.62
2	30.38	41.92	0.00	0.00	0.00	30.38
3	45.00	36.15	0.00	1.46	1.46	45.00
4	56.15	24.62	0.00	10.00	10.00	56.15
5	5.38	2.31	10.24	53.66	63.90	15.62
6	0.00	0.00	32.20	47.56	79.76	32.20
7	0.00	0.00	56.10	31.95	88.05	56.10
8	0.00	0.00	72.44	24.63	97.07	72.44
total	171.54	172.69	170.98	169.27	340.25	342.52

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.34	0.66	0.00	0.00	0.00	0.34
2	0.42	0.58	0.00	0.00	0.00	0.42
3	0.54	0.44	0.00	0.02	0.02	0.54
4	0.62	0.27	0.00	0.11	0.11	0.62
5	0.08	0.03	0.14	0.75	0.89	0.22
6	0.00	0.00	0.40	0.60	1.00	0.40
7	0.00	0.00	0.64	0.36	1.00	0.64
8	0.00	0.00	0.75	0.25	1.00	0.75
total	2.00	1.98	1.93	2.09	4.02	3.93

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 300 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	79	180	0	0	0	79
2	106	129	0	0	0	106
3	109	73	0	0	0	109
4	154	61	3	66	69	157
5	2	2	28	258	286	30
6	0	0	161	183	344	161
7	0	0	206	86	292	206
8	0	0	306	104	410	306
total	450	445	704	697	1401	1154

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	30.38	69.23	0.00	0.00	0.00	30.38
2	40.77	49.62	0.00	0.00	0.00	40.77
3	41.92	28.08	0.00	0.00	0.00	41.92
4	59.23	23.46	0.73	16.10	16.83	59.96
5	0.77	0.77	6.83	62.93	69.76	7.60
6	0.00	0.00	39.27	44.63	83.90	39.27
7	0.00	0.00	50.24	20.98	71.22	50.24
8	0.00	0.00	74.63	25.37	100.00	74.63
total	173.08	171.15	171.71	170.00	341.71	344.79

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.31	0.69	0.00	0.00	0.00	0.31
2	0.45	0.55	0.00	0.00	0.00	0.45
3	0.60	0.40	0.00	0.00	0.00	0.60
4	0.60	0.24	0.01	0.16	0.17	0.61
5	0.01	0.01	0.10	0.88	0.98	0.11
6	0.00	0.00	0.47	0.53	1.00	0.47
7	0.00	0.00	0.71	0.29	1.00	0.71
8	0.00	0.00	0.75	0.25	1.00	0.75
total	1.96	1.89	2.02	2.12	4.14	3.98

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo V – Quadros E.1

Tempo de residência: 480 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	73	168	0	0	0	73
2	104	109	0	0	0	104
3	103	86	0	0	0	103
4	151	76	3	11	14	154
5	16	9	43	225	268	59
6	0	0	136	231	367	136
7	0	0	223	106	329	223
8	0	0	298	121	419	298
total	447	448	703	694	1397	1150

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	28.08	64.62	0.00	0.00	0.00	28.08
2	40.00	41.92	0.00	0.00	0.00	40.00
3	39.62	33.08	0.00	0.00	0.00	39.62
4	58.08	29.23	0.73	2.68	3.41	58.81
5	6.15	3.46	10.49	54.88	65.37	16.64
6	0.00	0.00	33.17	56.34	89.51	33.17
7	0.00	0.00	54.39	25.85	80.24	54.39
8	0.00	0.00	72.68	29.51	102.19	72.68
total	171.93	172.31	171.46	169.26	340.72	343.39

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	6.7 mm	2.36 mm	6.7 mm	2.36 mm		
1	0.30	0.70	0.00	0.00	0.00	0.30
2	0.49	0.51	0.00	0.00	0.00	0.49
3	0.54	0.46	0.00	0.00	0.00	0.54
4	0.64	0.32	0.01	0.03	0.04	0.65
5	0.08	0.05	0.14	0.73	0.87	0.22
6	0.00	0.00	0.37	0.63	1.00	0.37
7	0.00	0.00	0.68	0.32	1.00	0.68
8	0.00	0.00	0.71	0.29	1.00	0.71
total	2.05	2.04	1.91	2.00	3.91	3.96

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 30 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	103	100	16	17	33	119
2	66	68	28	34	62	94
3	89	83	58	78	136	147
4	65	68	74	86	160	139
5	66	61	82	99	181	148
6	52	51	80	103	183	132
7	6	12	151	136	287	157
8	0	0	213	149	362	213
total	447	443	702	702	1404	1149

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	39.62	38.46	3.90	4.15	8.05	43.52
2	25.38	26.15	6.83	8.29	15.12	32.21
3	34.23	31.92	14.15	19.02	33.17	48.38
4	25.00	26.15	18.05	20.98	39.03	43.05
5	25.38	23.46	20.00	24.15	44.15	45.38
6	20.00	19.62	19.51	25.12	44.63	39.51
7	2.31	4.62	36.83	33.17	70.00	39.14
8	0.00	0.00	51.95	36.34	88.29	51.95
total	171.92	170.38	171.22	171.22	342.44	343.14

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.46	0.45	0.05	0.05	0.10	0.51
2	0.38	0.39	0.10	0.12	0.22	0.48
3	0.34	0.32	0.14	0.19	0.33	0.48
4	0.28	0.29	0.20	0.23	0.43	0.48
5	0.27	0.25	0.22	0.26	0.48	0.49
6	0.24	0.23	0.23	0.30	0.53	0.47
7	0.03	0.06	0.48	0.43	0.91	0.51
8	0.00	0.00	0.59	0.41	1.00	0.59
total	2.00	2.00	2.00	2.00	4.00	4.00

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 60 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	121	117	7	7	14	128
2	99	98	18	22	40	117
3	72	70	40	46	86	112
4	81	79	62	81	143	143
5	52	59	62	108	170	114
6	21	27	122	169	291	143
7	2	2	139	140	279	141
8	0	0	250	130	380	250
total	448	452	700	703	1403	1148

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	46.54	45.00	1.71	1.71	3.42	48.25
2	38.08	37.69	4.39	5.37	9.76	42.47
3	27.69	26.92	9.76	11.22	20.98	37.45
4	31.15	30.38	15.12	19.76	34.88	46.27
5	20.00	22.69	15.12	26.34	41.46	35.12
6	8.08	10.38	29.76	41.22	70.98	37.84
7	0.77	0.77	33.90	34.15	68.05	34.67
8	0.00	0.00	60.98	31.71	92.69	60.98
total	172.31	173.85	170.73	171.46	342.19	343.04

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.49	0.47	0.02	0.02	0.04	0.51
2	0.45	0.44	0.05	0.06	0.11	0.50
3	0.37	0.36	0.13	0.15	0.28	0.50
4	0.32	0.32	0.16	0.20	0.36	0.48
5	0.24	0.27	0.18	0.31	0.49	0.42
6	0.09	0.12	0.33	0.46	0.79	0.42
7	0.01	0.01	0.49	0.49	0.98	0.50
8	0.00	0.00	0.66	0.34	1.00	0.66
total	1.96	1.98	2.01	2.04	4.05	3.97

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 90 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	72	103	0	0	0	72
2	105	111	0	0	0	105
3	121	102	0	7	7	121
4	118	88	18	40	58	136
5	29	32	101	163	264	130
6	0	5	154	220	374	154
7	0	0	209	167	376	209
8	0	0	216	97	313	216
total	445	441	698	694	1392	1143

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	27.69	39.62	0.00	0.00	0.00	27.69
2	40.38	42.69	0.00	0.00	0.00	40.38
3	46.54	39.23	0.00	1.71	1.71	46.54
4	45.38	33.85	4.39	9.76	14.15	49.77
5	11.15	12.31	24.63	39.76	64.39	35.78
6	0.00	1.92	37.56	53.66	91.22	37.56
7	0.00	0.00	50.98	40.73	91.71	50.98
8	0.00	0.00	52.68	23.66	76.34	52.68
total	171.15	169.62	170.24	169.27	339.51	341.39

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.41	0.59	0.00	0.00	0.00	0.41
2	0.49	0.51	0.00	0.00	0.00	0.49
3	0.53	0.45	0.00	0.02	0.02	0.53
4	0.49	0.36	0.05	0.10	0.15	0.54
5	0.13	0.14	0.28	0.45	0.73	0.41
6	0.00	0.02	0.40	0.58	0.98	0.40
7	0.00	0.00	0.56	0.44	1.00	0.56
8	0.00	0.00	0.69	0.31	1.00	0.69
total	2.04	2.07	1.98	1.91	3.89	4.02

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 120 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	143	141	0	0	0	143
2	92	107	0	0	0	92
3	109	109	0	6	6	109
4	92	68	15	32	47	107
5	14	16	110	187	297	124
6	0	3	164	187	351	164
7	0	0	186	156	342	186
8	0	0	222	126	348	222
total	450	444	697	694	1391	1147

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	55.00	54.23	0.00	0.00	0.00	55.00
2	35.38	41.15	0.00	0.00	0.00	35.38
3	41.92	41.92	0.00	1.46	1.46	41.92
4	35.38	26.15	3.66	7.80	11.46	39.04
5	5.38	6.15	26.83	45.61	72.44	32.21
6	0.00	1.15	40.00	45.61	85.61	40.00
7	0.00	0.00	45.37	38.05	83.42	45.37
8	0.00	0.00	54.15	30.73	84.88	54.15
total	173.08	170.77	170.00	169.27	339.27	343.08

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.50	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50
2	0.46	0.54	0.00	0.00	0.00	0.46
3	0.49	0.49	0.00	0.02	0.02	0.49
4	0.48	0.36	0.05	0.11	0.16	0.53
5	0.06	0.07	0.32	0.54	0.86	0.38
6	0.00	0.01	0.46	0.53	0.99	0.46
7	0.00	0.00	0.54	0.46	1.00	0.54
8	0.00	0.00	0.64	0.36	1.00	0.64
total	2.01	1.97	2.01	2.01	4.02	4.02

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 180 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	102	146	0	0	0	102
2	91	109	0	0	0	91
3	101	104	0	2	2	101
4	137	80	10	45	55	147
5	14	8	102	192	294	116
6	0	0	164	195	359	164
7	0	0	187	147	334	187
8	0	0	245	114	359	245
total	445	447	708	695	1403	1153

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	39.23	56.15	0.00	0.00	0.00	39.23
2	35.00	41.92	0.00	0.00	0.00	35.00
3	38.85	40.00	0.00	0.49	0.49	38.85
4	52.69	30.77	2.44	10.98	13.42	55.13
5	5.38	3.08	24.88	46.83	71.71	30.26
6	0.00	0.00	40.00	47.56	87.56	40.00
7	0.00	0.00	45.61	35.85	81.46	45.61
8	0.00	0.00	59.76	27.80	87.56	59.76
total	171.15	171.92	172.68	169.51	342.19	343.83

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.41	0.59	0.00	0.00	0.00	0.41
2	0.46	0.55	0.00	0.00	0.00	0.46
3	0.49	0.50	0.00	0.01	0.01	0.49
4	0.54	0.32	0.03	0.11	0.14	0.57
5	0.07	0.04	0.31	0.58	0.89	0.38
6	0.00	0.00	0.46	0.54	1.00	0.46
7	0.00	0.00	0.56	0.44	1.00	0.56
8	0.00	0.00	0.68	0.32	1.00	0.68
total	1.97	1.99	2.03	2.00	4.03	4.00

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 300 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	121	139	0	0	0	121
2	92	120	0	0	0	92
3	85	101	0	0	0	85
4	133	77	2	14	16	135
5	14	9	63	219	282	77
6	0	0	183	214	397	183
7	0	0	206	136	342	206
8	0	0	251	111	362	251
total	445	446	705	694	1399	1150

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	46.54	53.46	0.00	0.00	0.00	46.54
2	35.38	46.15	0.00	0.00	0.00	35.38
3	32.69	38.85	0.00	0.00	0.00	32.69
4	51.15	29.62	0.49	3.41	3.90	51.64
5	5.38	3.46	15.37	53.41	68.78	20.75
6	0.00	0.00	44.63	52.20	96.83	44.63
7	0.00	0.00	50.24	33.17	83.41	50.24
8	0.00	0.00	61.22	27.07	88.29	61.22
total	171.15	171.54	171.95	169.27	341.22	343.10

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.47	0.53	0.00	0.00	0.00	0.47
2	0.43	0.57	0.00	0.00	0.00	0.43
3	0.46	0.54	0.00	0.00	0.00	0.46
4	0.60	0.35	0.01	0.04	0.05	0.61
5	0.07	0.04	0.20	0.69	0.89	0.27
6	0.00	0.00	0.46	0.54	1.00	0.46
7	0.00	0.00	0.60	0.40	1.00	0.60
8	0.00	0.00	0.69	0.31	1.00	0.69
total	2.03	2.04	1.96	1.97	3.93	3.99

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 480 s

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	136	133	0	0	0	136
2	80	109	0	0	0	80
3	110	118	0	0	0	110
4	112	84	2	22	24	114
5	5	9	68	243	311	73
6	0	0	152	171	323	152
7	0	0	192	125	317	192
8	0	0	281	135	416	281
total	443	453	695	696	1391	1138

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	52.31	51.15	0.00	0.00	0.00	52.31
2	30.77	41.92	0.00	0.00	0.00	30.77
3	42.31	45.38	0.00	0.00	0.00	42.31
4	43.08	32.31	0.49	5.37	5.86	43.57
5	1.92	3.46	16.59	59.27	75.86	18.51
6	0.00	0.00	37.07	41.71	78.78	37.07
7	0.00	0.00	46.83	30.49	77.32	46.83
8	0.00	0.00	68.54	32.93	101.47	68.54
total	170.39	174.22	169.52	169.77	339.29	339.91

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.51	0.49	0.00	0.00	0.00	0.51
2	0.42	0.58	0.00	0.00	0.00	0.42
3	0.48	0.52	0.00	0.00	0.00	0.48
4	0.53	0.40	0.01	0.07	0.08	0.54
5	0.02	0.04	0.20	0.73	0.93	0.22
6	0.00	0.00	0.47	0.53	1.00	0.47
7	0.00	0.00	0.61	0.39	1.00	0.61
8	0.00	0.00	0.68	0.32	1.00	0.68
total	1.99	2.03	1.97	2.04	4.01	3.93

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 30 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	92	88	36	36	72	128
2	66	69	45	69	114	111
3	70	74	64	72	136	134
4	71	69	65	78	143	136
5	72	72	50	69	119	122
6	59	56	75	116	191	134
7	10	12	145	143	288	155
8	0	0	213	128	341	213
total	440	440	693	711	1404	1133

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	35.38	33.85	8.78	8.78	17.56	44.16
2	25.38	26.54	10.98	16.83	27.81	36.36
3	26.92	28.46	15.61	17.56	33.17	42.53
4	27.31	26.54	15.85	19.02	34.87	43.16
5	27.69	27.69	12.20	16.83	29.03	39.89
6	22.69	21.54	18.29	28.29	46.58	40.98
7	3.85	4.62	35.37	34.88	70.25	39.22
8	0.00	0.00	51.95	31.22	83.17	51.95
total	169.23	169.23	169.02	173.41	342.43	338.25

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.41	0.39	0.10	0.10	0.20	0.51
2	0.32	0.33	0.14	0.21	0.35	0.46
3	0.30	0.32	0.18	0.20	0.38	0.48
4	0.31	0.30	0.18	0.21	0.39	0.49
5	0.33	0.33	0.14	0.20	0.34	0.47
6	0.25	0.24	0.20	0.31	0.51	0.45
7	0.05	0.06	0.45	0.44	0.89	0.50
8	0.00	0.00	0.62	0.38	1.00	0.62
total	1.96	1.97	2.01	2.05	4.06	3.97

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 60 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	122	127	2	5	7	124
2	85	87	13	23	36	98
3	87	86	30	45	75	117
4	82	76	41	60	101	123
5	49	54	81	125	206	130
6	14	17	115	162	277	129
7	2	2	186	150	336	188
8	0	0	226	128	354	226
total	441	449	694	698	1392	1135

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	46.92	48.85	0.49	1.22	1.71	47.41
2	32.69	33.46	3.17	5.61	8.78	35.86
3	33.46	33.08	7.32	10.98	18.30	40.78
4	31.54	29.23	10.00	14.63	24.63	41.54
5	18.85	20.77	19.76	30.49	50.25	38.61
6	5.38	6.54	28.05	39.51	67.56	33.43
7	0.77	0.77	45.37	36.59	81.96	46.14
8	0.00	0.00	55.12	31.22	86.34	55.12
total	169.62	172.69	169.27	170.24	339.51	338.89

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.48	0.50	0.01	0.01	0.02	0.49
2	0.44	0.45	0.04	0.07	0.11	0.48
3	0.39	0.39	0.09	0.13	0.22	0.48
4	0.37	0.34	0.12	0.17	0.29	0.49
5	0.21	0.23	0.22	0.34	0.56	0.43
6	0.07	0.08	0.35	0.50	0.85	0.42
7	0.01	0.01	0.54	0.44	0.98	0.55
8	0.00	0.00	0.64	0.36	1.00	0.64
total	1.97	2.00	2.01	2.02	4.03	3.98

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 90 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	111	134	0	0	0	111
2	113	107	0	5	4	113
3	131	119	3	13	16	134
4	78	63	19	47	66	97
5	14	18	122	216	338	136
6	0	2	145	192	337	145
7	0	0	186	112	308	186
8	0	0	225	111	336	225
total	447	443	700	696	1396	1147

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	42.69	51.54	0.00	0.00	0.00	42.69
2	43.46	41.15	0.00	1.22	1.22	43.46
3	50.38	45.77	0.73	3.17	3.90	51.11
4	30.00	24.23	4.63	11.46	16.09	34.63
5	5.38	6.92	29.76	52.68	82.44	35.14
6	0.00	0.77	35.37	46.83	82.20	35.37
7	0.00	0.00	45.37	27.32	72.69	45.37
8	0.00	0.00	54.88	27.07	81.95	54.88
total	171.92	170.38	170.73	169.76	340.49	342.65

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.45	0.55	0.00	0.00	0.00	0.45
2	0.51	0.48	0.00	0.01	0.01	0.51
3	0.50	0.46	0.01	0.03	0.04	0.51
4	0.43	0.34	0.07	0.16	0.23	0.50
5	0.06	0.07	0.31	0.56	0.87	0.37
6	0.00	0.01	0.43	0.56	0.99	0.43
7	0.00	0.00	0.62	0.38	1.00	0.62
8	0.00	0.00	0.67	0.33	1.00	0.67
total	1.95	1.91	2.11	2.04	4.15	4.06

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 120 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	127	111	0	0	0	127
2	93	97	0	3	3	93
3	130	147	0	7	7	130
4	74	70	16	37	53	90
5	18	17	110	157	267	128
6	0	3	177	209	386	177
7	0	0	172	153	325	172
8	0	0	225	132	357	225
total	442	445	700	698	1398	1142

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	48.85	42.69	0.00	0.00	0.00	48.85
2	35.77	37.31	0.00	0.73	0.73	35.77
3	50.00	56.54	0.00	1.71	1.71	50.00
4	28.46	26.92	3.90	9.02	12.92	32.36
5	6.92	6.54	26.83	38.29	65.12	33.75
6	0.00	1.15	43.17	50.98	94.15	43.17
7	0.00	0.00	41.95	37.32	79.27	41.95
8	0.00	0.00	54.88	32.20	87.08	54.88
total	170.00	171.15	170.73	170.24	340.97	340.73

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.53	0.47	0.00	0.00	0.00	0.53
2	0.48	0.51	0.00	0.01	0.01	0.48
3	0.46	0.52	0.00	0.02	0.02	0.46
4	0.42	0.39	0.06	0.13	0.19	0.48
5	0.09	0.08	0.34	0.49	0.83	0.43
6	0.00	0.01	0.45	0.53	0.98	0.45
7	0.00	0.00	0.53	0.47	1.00	0.53
8	0.00	0.00	0.63	0.37	1.00	0.63
total	1.98	1.98	2.01	2.02	4.03	3.99

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 180 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	95	126	0	0	0	95
2	89	110	0	0	0	89
3	86	115	0	0	0	86
4	163	88	6	14	20	169
5	12	8	105	200	305	117
6	0	0	191	201	392	191
7	0	0	173	157	330	173
8	0	0	233	122	355	233
total	445	447	708	694	1402	1153

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	36.54	48.46	0.00	0.00	0.00	36.54
2	34.23	42.31	0.00	0.00	0.00	34.23
3	33.08	44.23	0.00	0.00	0.00	33.08
4	62.69	33.85	1.46	3.41	4.87	64.15
5	4.62	3.08	25.61	48.78	74.39	30.23
6	0.00	0.00	46.59	49.02	95.61	46.59
7	0.00	0.00	42.20	38.29	80.49	42.20
8	0.00	0.00	56.83	29.76	86.59	56.83
total	171.15	171.92	172.68	169.27	341.95	343.83

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.43	0.57	0.00	0.00	0.00	0.43
2	0.45	0.55	0.00	0.00	0.00	0.45
3	0.43	0.57	0.00	0.00	0.00	0.43
4	0.62	0.33	0.01	0.03	0.04	0.63
5	0.06	0.04	0.31	0.59	0.90	0.37
6	0.00	0.00	0.49	0.51	1.00	0.49
7	0.00	0.00	0.52	0.48	1.00	0.52
8	0.00	0.00	0.66	0.34	1.00	0.66
total	1.98	2.07	1.99	1.96	3.95	3.97

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

Tempo de residência: 300 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	100	162	0	0	0	100
2	89	119	0	0	0	89
3	125	110	0	0	0	125
4	113	51	5	36	41	118
5	14	2	75	229	304	89
6	0	0	140	208	348	140
7	0	0	225	119	344	225
8	0	0	254	109	363	254
total	441	444	699	701	1400	1140

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	38.46	62.31	0.00	0.00	0.00	38.46
2	34.23	45.77	0.00	0.00	0.00	34.23
3	48.08	42.31	0.00	0.00	0.00	48.08
4	43.46	19.62	1.22	8.78	10.00	44.68
5	5.38	0.77	18.29	55.85	74.14	23.67
6	0.00	0.00	34.15	50.73	84.88	34.15
7	0.00	0.00	54.88	29.02	83.90	54.88
8	0.00	0.00	61.95	26.59	88.54	61.95
total	169.62	170.77	170.49	170.98	341.47	340.11

concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.38	0.62	0.00	0.00	0.00	0.38
2	0.43	0.57	0.00	0.00	0.00	0.43
3	0.53	0.47	0.00	0.00	0.00	0.53
4	0.59	0.27	0.02	0.12	0.14	0.61
5	0.07	0.01	0.23	0.70	0.93	0.30
6	0.00	0.00	0.40	0.60	1.00	0.40
7	0.00	0.00	0.65	0.35	1.00	0.65
8	0.00	0.00	0.70	0.30	1.00	0.70
total	2.00	1.94	2.00	2.06	4.06	4.00

Anexo E – Dados experimentais – Quatro componentes – Grupo VI – Quadros E.2

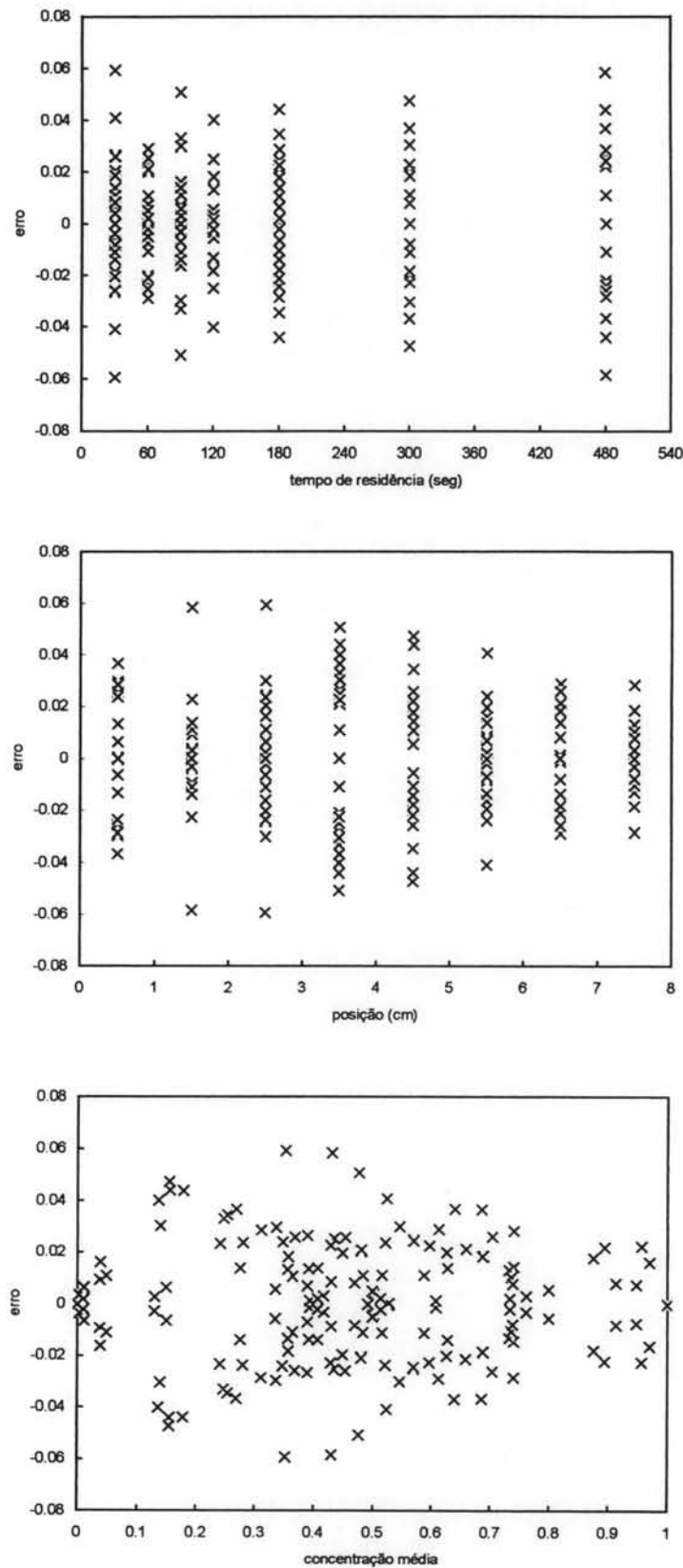
Tempo de residência: 480 s (bis)

massa – g						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	146	146	0	0	0	146
2	84	95	0	0	0	84
3	114	118	0	0	0	114
4	90	82	1	15	16	91
5	10	9	54	251	305	64
6	0	0	136	195	331	136
7	0	0	223	133	356	223
8	0	0	287	98	385	287
total	444	450	701	692	1393	1145

volume de sólidos – cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	56.15	56.15	0.00	0.00	0.00	56.15
2	32.31	36.54	0.00	0.00	0.00	32.31
3	43.85	45.38	0.00	0.00	0.00	43.85
4	34.62	31.54	0.24	3.66	3.90	34.86
5	3.85	3.46	13.17	61.22	74.39	17.02
6	0.00	0.00	33.17	47.56	80.73	33.17
7	0.00	0.00	54.39	32.44	86.83	54.39
8	0.00	0.00	70.00	23.90	93.90	70.00
total	170.78	173.07	170.97	168.78	339.75	341.75

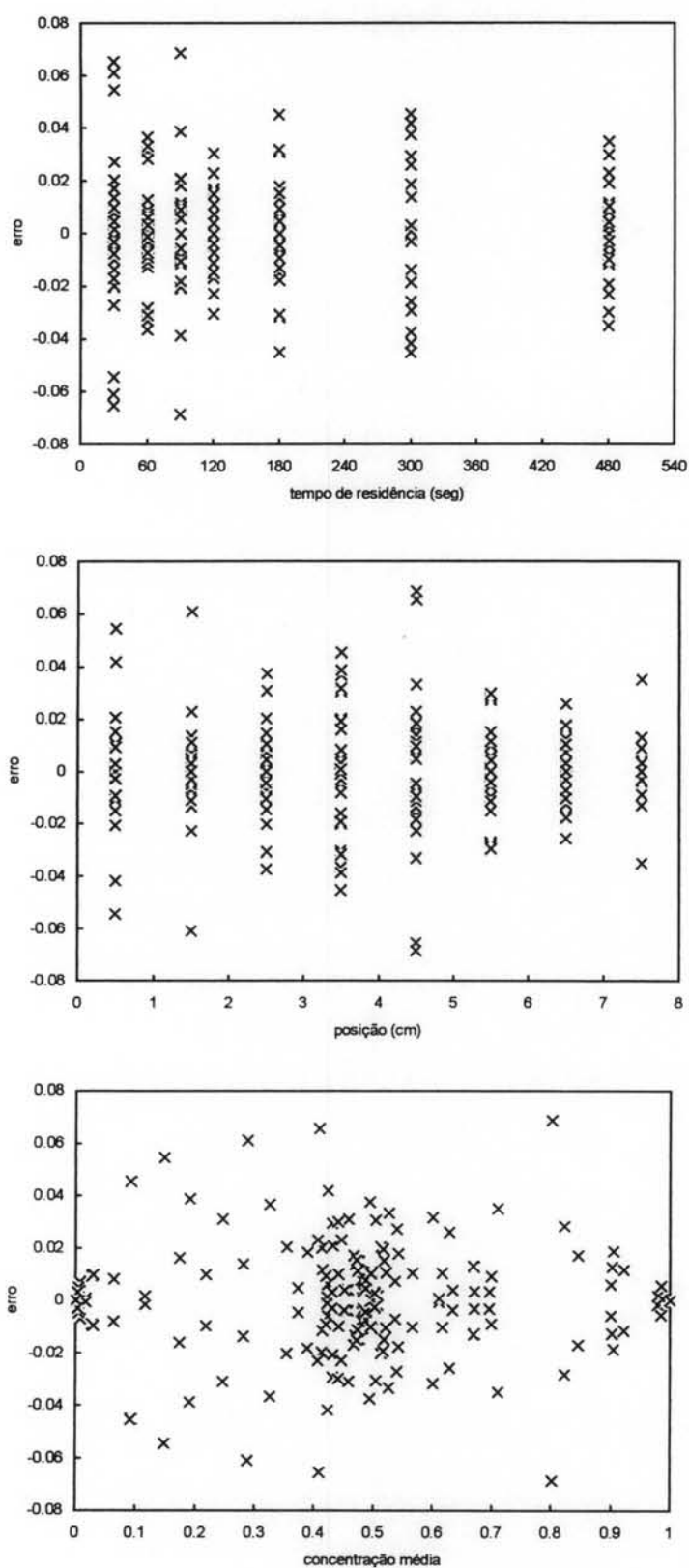
concentração – cm ³ / cm ³						
estrato	calcário		magnetite		magnetite total	partículas grandes
	4.75 mm	2.36 mm	4.75 mm	2.36 mm		
1	0.50	0.50	0.00	0.00	0.00	0.50
2	0.47	0.53	0.00	0.00	0.00	0.47
3	0.49	0.51	0.00	0.00	0.00	0.49
4	0.49	0.45	0.00	0.05	0.05	0.49
5	0.05	0.04	0.16	0.75	0.91	0.21
6	0.00	0.00	0.41	0.59	1.00	0.41
7	0.00	0.00	0.63	0.37	1.00	0.63
8	0.00	0.00	0.75	0.25	1.00	0.75
total	2.00	2.03	1.95	2.01	3.96	3.95

Anexo F – Análise do erro experimental – Distribuição



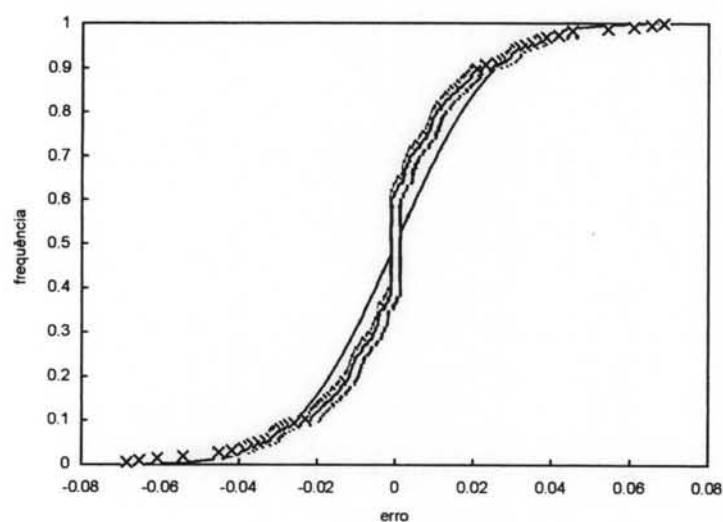
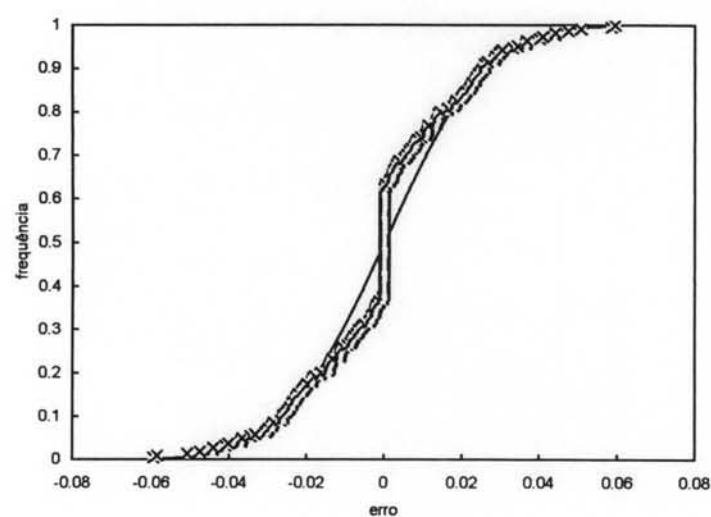
Gráficos F.1: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração – Grupo V

Anexo F – Análise do erro experimental – Distribuição



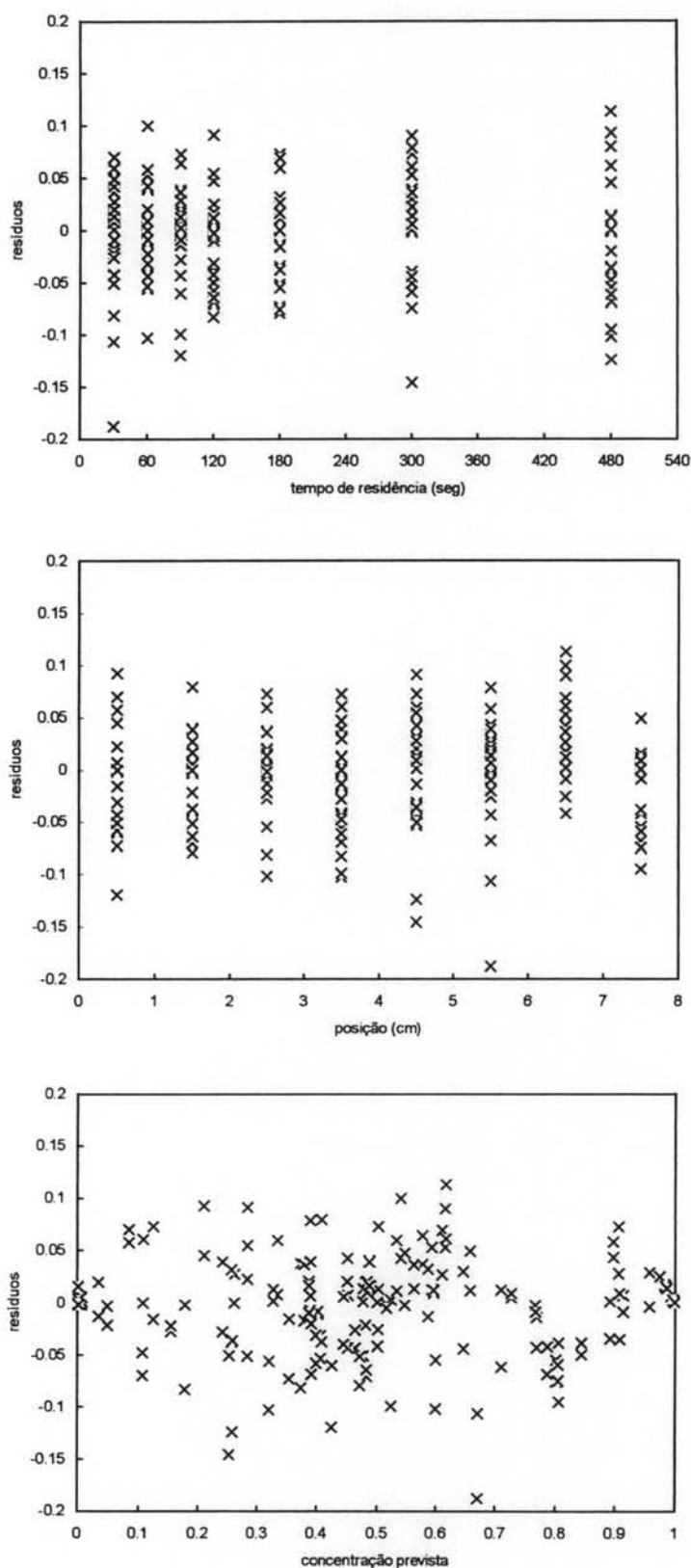
Gráficos F.2: Erro experimental em função do tempo de residência, da posição e da concentração – Grupo VI

Anexo F – Análise do erro experimental – Distribuição



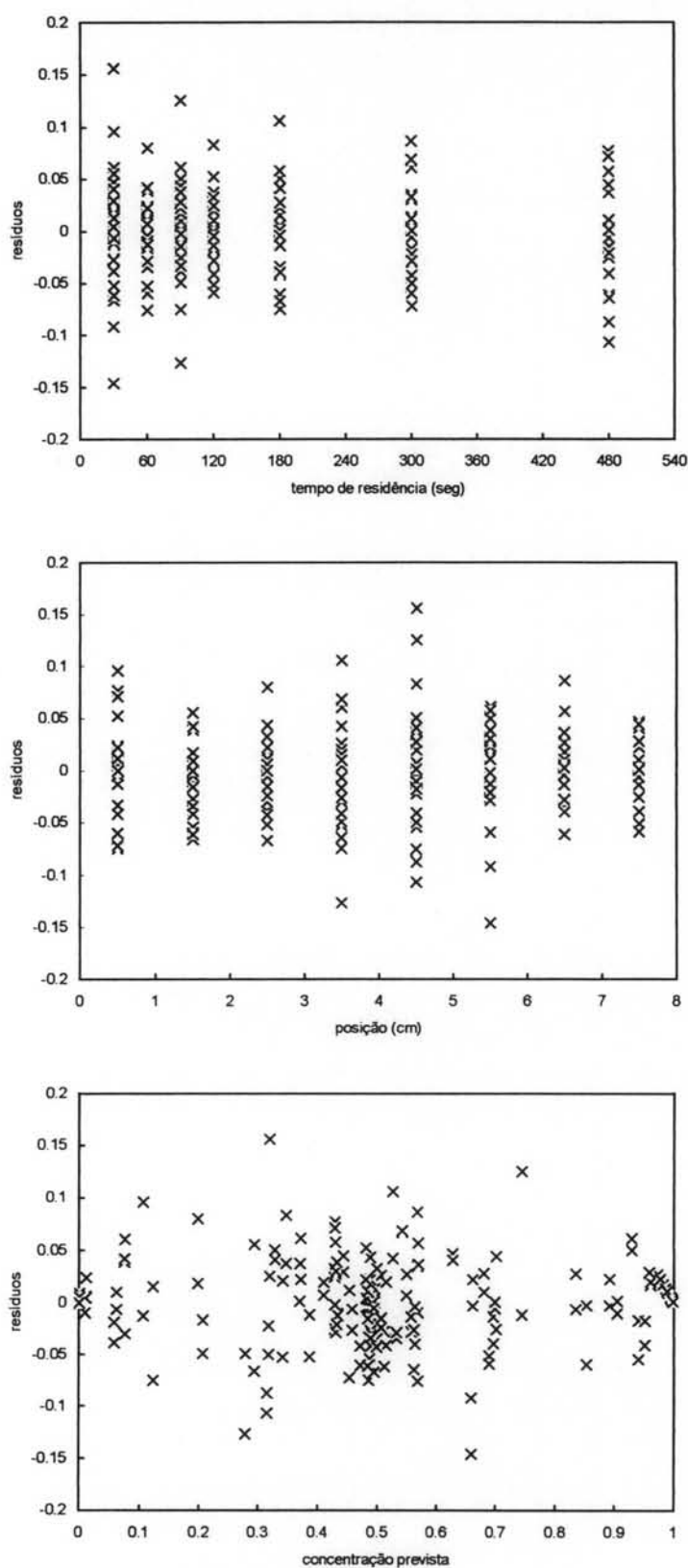
Gráficos F.3: Comparação entre a distribuição acumulada do erro experimental e a lei normal – Grupos V e VI

Anexo G – Análise dos resíduos – Distribuição



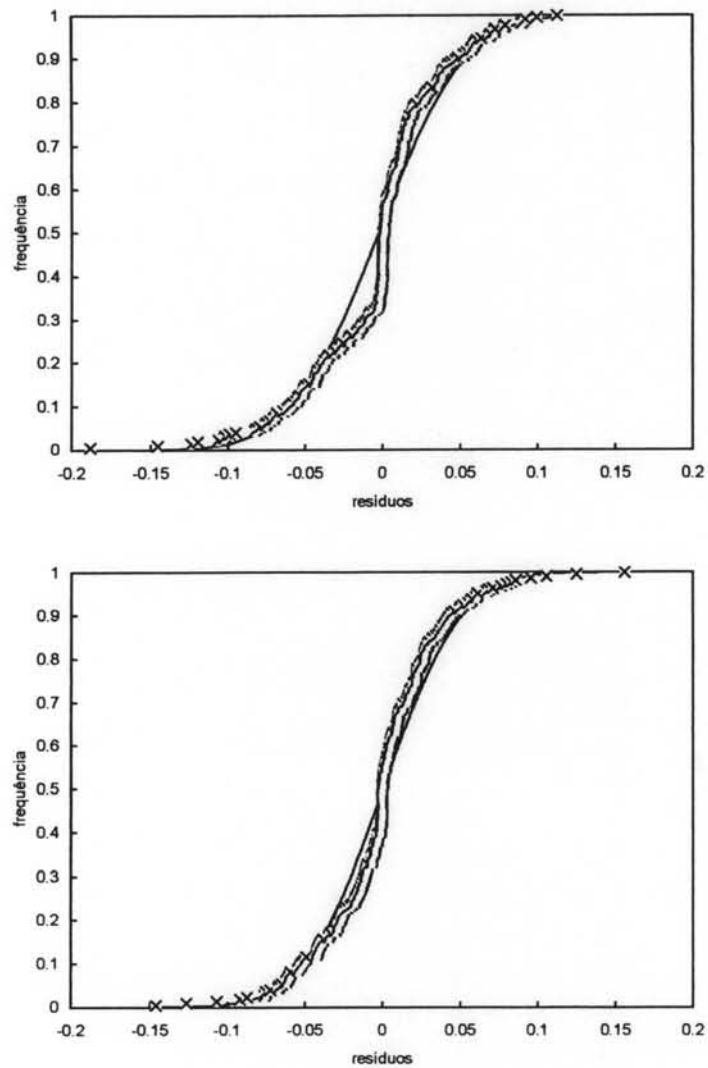
Gráficos G.1: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo V.

Anexo G – Análise dos resíduos – Distribuição



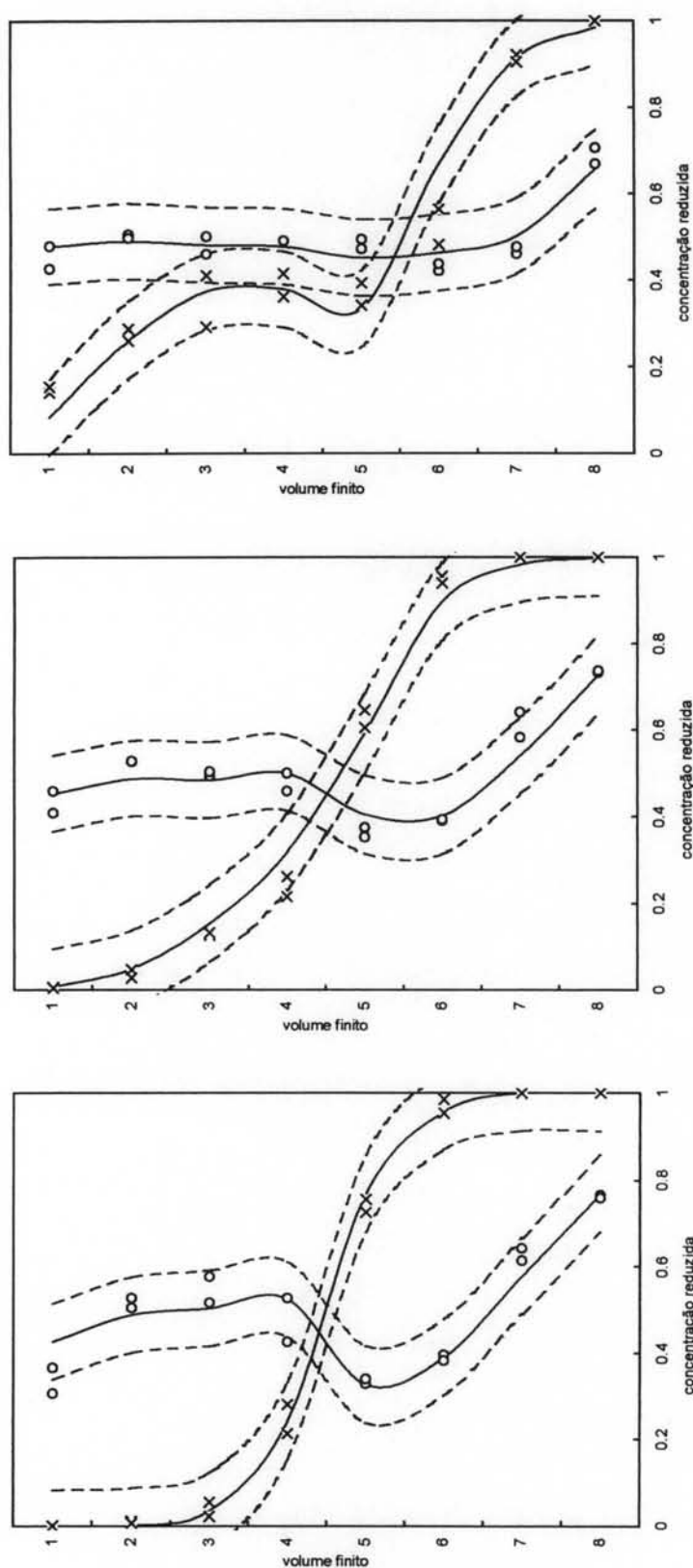
Gráficos G.2: Valor dos resíduos em função do tempo de residência, da posição e da concentração prevista – Grupo VI.

Anexo G – Análise dos resíduos – Distribuição



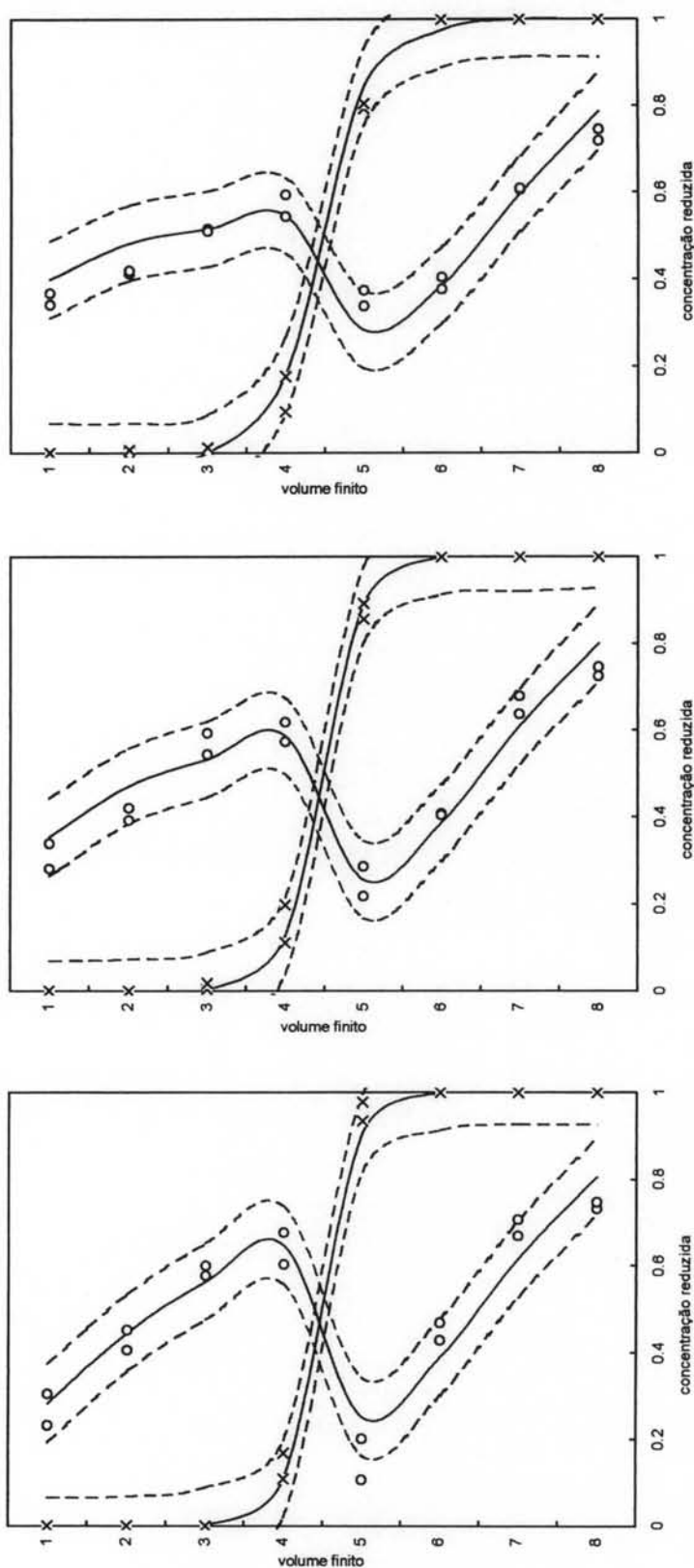
Gráficos G.3: Comparação entre a distribuição acumulada dos resíduos e a lei normal – Grupos V e VI.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes



Gráficos H.1: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo V – Tempos de residência: 30 s, 60 s e 90 s.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes



Gráficos H.2: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo V – Tempos de residência: 120 s, 180 s e 300 s.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes

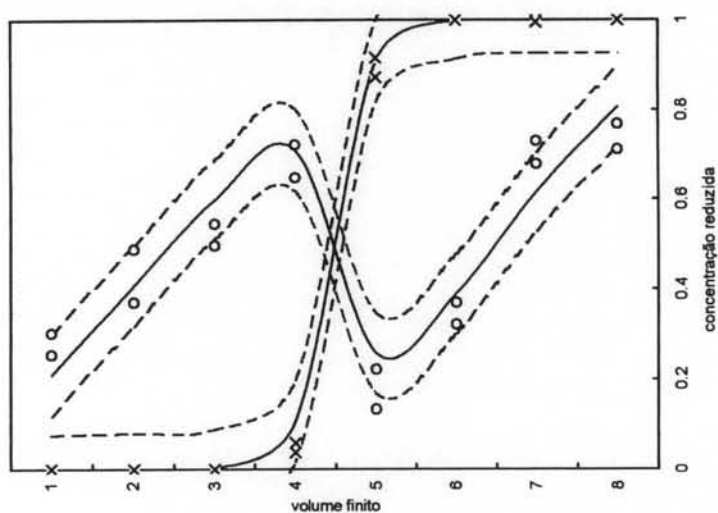
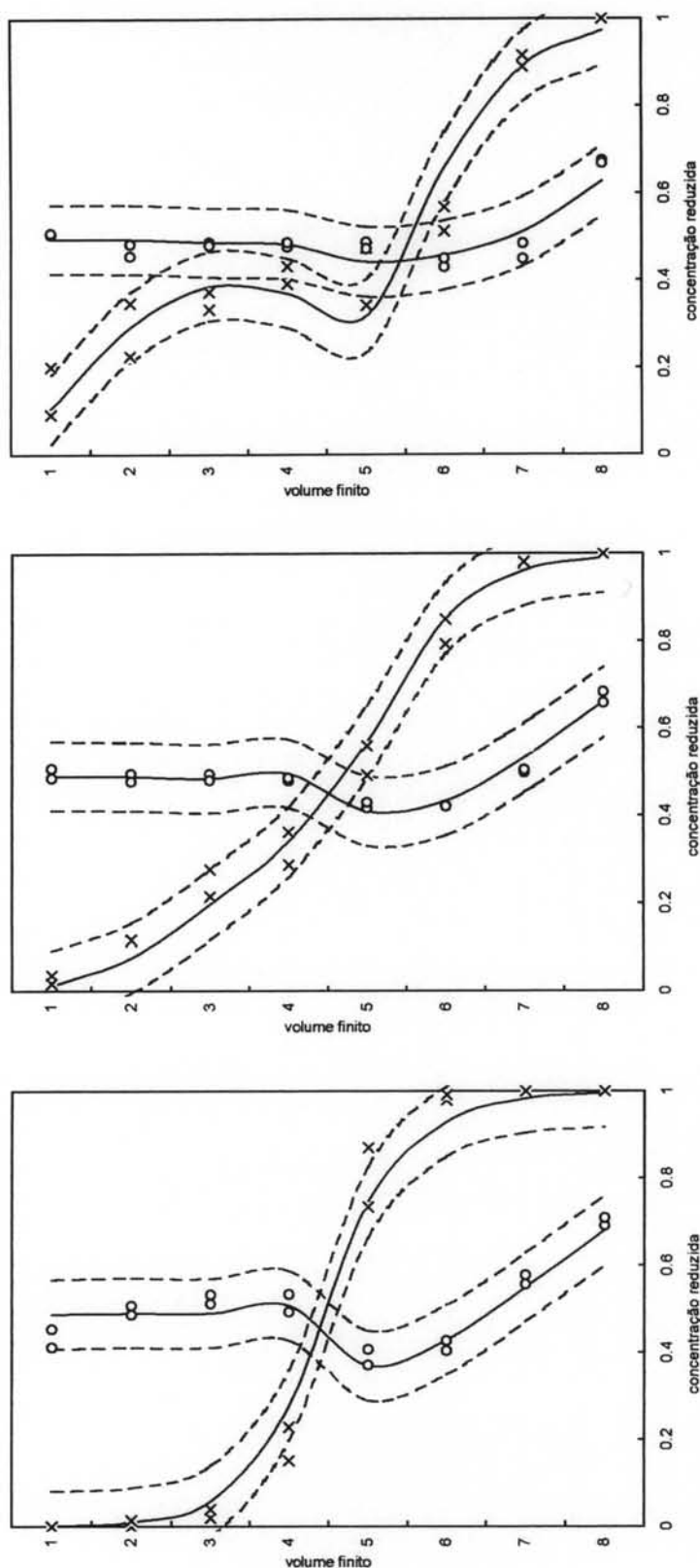


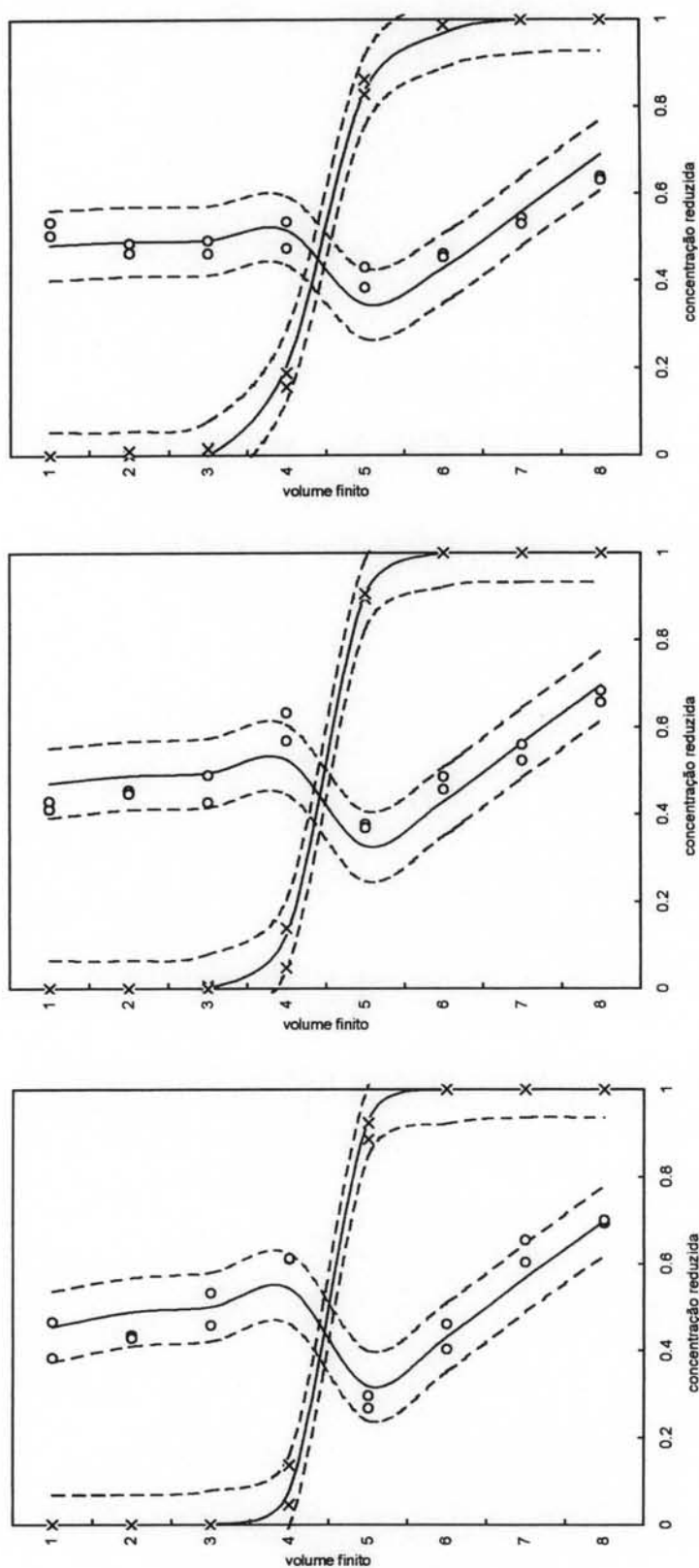
Gráfico H.3: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo V – Tempo de residência: 480 s.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes



Gráficos H.4: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo VI – Tempos de residência: 30 s, 60 s e 90 s.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes



Gráficos H.5: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo VI – Tempos de residência: 120 s, 180 s e 300 s.

Anexo H – Previsão de observações futuras – Quatro componentes

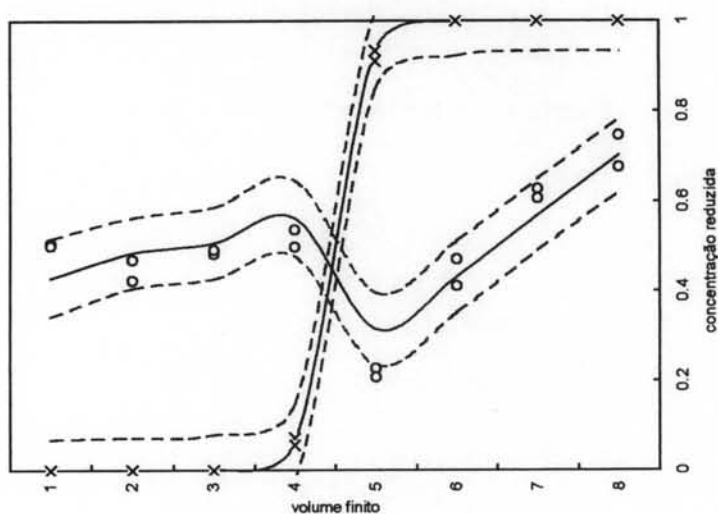


Gráfico H.6: Linhas de regressão e intervalos de confiança a 95% para a previsão de observações futuras. Grupo VI – Tempo de residência: 480 s.

Bibliografia

Bibliografia e referências bibliográficas

- Ames, W. F., “Numerical Methods for Partial Differential Equations”, Academic Press, San Diego, Terceira edição, 1992
- Bates, D. M., D. G. Watts, “Nonlinear Regression Analysis and Its Applications”, John Wiley & Sons, New York, 1988
- Beck, A. J., P. N. Holtham, “Computer Simulation of Particle Stratification in a Two-Dimensional Batch Jig”, *Minerals Engineering*, vol. 6, no. 5, pp. 523-536, 1993
- Bertsekas, D. P., “Nonlinear Programming”, Athena Scientific, Belmont, Massachusetts, Segunda edição, 1999
- Bird, R. B., W. E. Stewart, E. N. Lightfoot, “Transport Phenomena”, John Wiley & Sons, New York, 1960
- Blazy, P., “La Valorisation des Minerais”, Presses Universitaires de France, Paris, 1970
- Burden, R. L., J. D. Faires, “Numerical Analysis”, Brooks/Cole, USA, Sétima edição, 2001
- Burt, R. O., “Gravity Concentration Technology”, Elsevier, Amsterdam, 1984
- Chhabra, R. P., G. V. Madhav, “Drag on Non-Spherical Particles in Viscous Fluids”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 43, pp. 15-29, 1995
- Chhabra, R. P., L. Agarwal, N. Sinha, “Drag on Non-Spherical Particles: an Evaluation of Available Methods”, *Powder Thechnology*, vol. 101, pp. 288-295, 1999
- Concha, F., E. R. Almendra, “Settling Velocities of Particulate Systems, 1. Settling Velocities of Individual Spherical Particles”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 5, pp. 349-367, 1979a
- Concha, F., E. R. Almendra, “Settling Velocities of Particulate Systems, 2. Settling Velocities of Suspensions of Spherical Particles”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 6, pp. 31-41, 1979b
- Concha, F., A. Barrientos, “Settling Velocities of Particulate Systems, 4. Settling of Nonspherical Isometric Particles”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 18, pp. 297-308, 1986a
- Concha, F., A. Christiansen, “Settling Velocities of Particulate Systems, 5. Settling Velocities of Suspensions of Particles of Arbitrary Shape”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 18, pp. 309-322, 1986b
- Costa, L. R., “A Dynamic Model for Jigging”, *Geo-Sistemas*, no. 2, pp. 99-112, 1993
- Coulson, J. M., J. F. Richardson, “Chemical Engineering. Vol. 1: Fluid Flow, Heat Transfer and Mass Transfer”, Butterworth Heinemann, Oxford, Sexta edição, 1999
- Cumberland, D. J., R. J. Crawford, “The Packing of Particles”, Elsevier, Amsterdam, 1987

- Draper, N. R., H. Smith, “Applied Regression Analysis”, John Wiley & Sons, New York, Terceira edição, 1998
- Durão, F. O., “Modelagem e Simulação de Sistemas Mineralúrgicos”, Tese de Doutorado, Instituto Superior Técnico, Lisboa, 1988
- Emanuel, G., “Analytical Fluid Dynamics”, CRC Press, Boca Raton, Segunda edição, 2001
- Fox, R. W., A. T. McDonald, “Introduction to Fluid Mechanics”, John Wiley & Sons, New York, Terceira edição, 1985
- Fowles, G. R., G. L. Cassiday, “Analytical Mechanics”, Saunders College Publishing, Philadelphia, Quinta edição, 1993
- Gibilaro, L. G., P. N. Rowe, “A Model for a Segregating Gas Fluidised Bed”, Chemical Engineering Science, vol. 29, pp. 1403-1412, 1974
- Gill, P. E., W. Murray, M. H. Wright, “Practical Optimization”, Academic Press, San Diego, 1986
- Haider, A., O. Levenspiel, “Drag Coefficient and Terminal Velocity of Spherical and Non-Spherical Particles”, Powder Technology, vol. 58, pp. 63-70, 1989
- Himmelblau, D. A., K. B. Bischoff, “Process Analysis and Simulation. Deterministic Systems”, John Wiley & Sons, New York, 1968
- Hirsch, C., “Numerical Computation of Internal and External Flows. Fundamentals of Numerical Discretization”, John Wiley & Sons, New York, vol. 1, 1988
- Hoel, P. G., “Introduction to Mathematical Statistics”, John Wiley & Sons, New York, Quinta edição, 1984
- Hollander, M., D. A. Wolfe, “Nonparametric Statistical Methods”, John Wiley & Sons, New York, Segunda edição, 1999
- Incropera, F. P., D. P. DeWitt, “Fundamentals of Heat and Mass Transfer”, John Wiley & Sons, New York, Quarta edição, 1996
- Khan, A. R., J. F. Richardson, “The Resistance to Motion of a Solid Sphere in a Fluid”, Chemical Engineering Communications, vol. 62, pp. 135-159, 1987
- Khan, A. R., J. F. Richardson, “Pressure Gradient and Friction Factor for Sedimentation and Fluidisation of Uniform Spheres in Liquids”, Chemical Engineering Science, vol. 45, pp. 255-265, 1990
- Kunii, D., O. Levenspiel, “Fluidization Engineering”, Butterworth-Heinemann, Boston, Segunda edição, 1991
- Madureira, C. N., M. M. Leite, “Fundamentos Estatísticos do Estudo Fenomenológico dos Processos Tecnológicos de Tratamento de Sistemas Particulados”, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 1982

- Mishra, B. K., S. P. Mehrotra, “Modelling of Particle Stratification in Jigs by the Discrete Element Method”, *Minerals Engineering*, vol. 11, no. 6, pp. 511-522, 1998
- Mishra, B. K., S. P. Mehrotra, “A Jig Model based on the Discrete Element Method and its Experimental Validation”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 62, pp. 177-189, 2001
- Munson, B. C., D. F. Young, T. H. Okiishi, “Fundamentals of Fluid Mechanics”, John Wiley & Sons, New York, Terceira edição, 1998
- Nash, S. G., A. Sofer, “Linear and Nonlinear Programming”, McGraw-Hill, New York, 1996
- Nguyen, A. V., H. J. Schulze, S. Kmet, “A Simple Algorithm for the Calculation of the Terminal Velocity of a Single Solid Sphere in Water”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 41, pp. 305-310, 1994
- Nguyen, A. V., H. Stechemesser, Z. Zobel, H. J. Schulze, “An Improved Formula for Terminal Velocity of Rigid Spheres”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 50, pp. 53-61, 1997
- Noble, B., J. W. Daniel, “Applied Linear Algebra”, Prentice Hall, New Jersey, Terceira edição, 1998
- Potter, M. C., D. C. Wiggert, M. Hondzo, “Mechanics of Fluids”, Prentice Hall, New Jersey, Segunda edição, 1997
- Press, H. W., B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, “Numerical Recipes. The Art of Scientific Computing”, Cambridge University Press, Cambridge, 1986
- Quintela, A. C., “Hidráulica”, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa, Terceira edição, 1991
- Richardson, J. F., J. H. Harker, J. R. Backhurst, “Chemical Engineering. Vol. 2: Particle Technology and Separation Processes”, Butterworth Heinemann, Oxford, Quinta edição, 2002
- Rong, R. X., G. J. Lyman, “Modelling Jig Bed Stratification in a Pilot Baum Jig”, *Minerals Engineering*, vol. 4, no. 5/6, pp. 611-623, 1991
- Rong, R. X., G. J. Lyman, “A New Energy Dissipation Theory of Jig Bed Stratification. Part 1: Energy Dissipation Analysis in a Pilot Scale Baum Jig”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 37, pp. 165-188, 1993a
- Rong, R. X., G. J. Lyman, “A New Energy Dissipation Theory of Jig Bed Stratification. Part 2: A Key Energy Parameter Determining Bed Stratification”, *International Journal of Mineral Processing*, vol. 37, pp. 189-207, 1993b
- Ross, S. M., “Introduction to Probability and Statistics for Engineers and Scientists”, John Wiley & Sons, New York, 1987

- Silva, Rocha e, “Calibre: Conceito e Medida”, Tese de Doutoramento, Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, 1988
- Smith, G. D., “Numerical Solution of Partial Differential Equations. Finite Difference Methods”, Oxford University Press, Oxford, Terceira edição, 1985
- Taggart, A. F., “Elements of Ore Dressing”, John Wiley & Sons, New York, 1951
- Tavares, L. M., R. P. King, “A Useful Model for the Calculation of the Performance of Batch and Continuous Jigs”, *Coal Preparation*, vol. 15, pp. 99-128, 1995
- Tavares, L. M., “Monte Carlo Simulations on the Potencial Energy Theory of Jigging”, *Coal Preparation*, vol. 20, pp. 71-83, 1999
- Taylor, R., R. Krishna, “Multicomponent Mass Transfer”, John Wiley & Sons, New York, 1993
- Testut, R. J., “La Préparation des Minerais”, Document S.I.M., vol. 1, Paris, 1958
- Particles”, *Powder Technology*, no. 55, pp. 171-186, 1988
- Welty, J. R., C. E. Wicks, R. E. Wilson, “Fundamentals of Momentum, Heat and Mass Transfer”, John Wiley & Sons, New York, Terceira edição, 1984