

José Augusto Coelho da Rocha e Silva

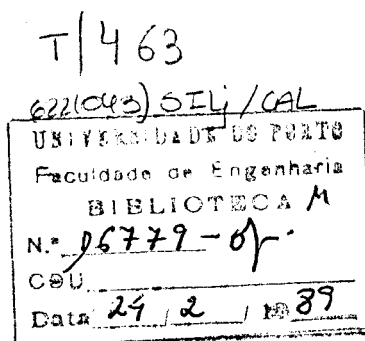
Calibre: conceito e medida



José Augusto Coelho da Rocha e Silva

(Engenheiro de Minas U. P.)

Calibre:
conceito e medida



Dissertação para doutoramento em Engenharia de Minas
na Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto

Publicação subsidiada pelo
Instituto Nacional de Investigação Científica

043D

SS8c

lx.1

1988

à minha mãe

à Conceição

Este é o tempo e o local dos agradecimentos, mas não vou agradecer a ninguém. Não que um homem viva sozinho, imune a influências e ajudas. Não. Mas são muitas as pessoas e incontáveis as formas com que a amizade ou a simples solidariedade humana se manifesta quotidianamente. Desde a contribuição directa, decisiva, do orientador, até à conversa amena, mesmo que o assunto seja o futebol, tudo conta.

Não será necessária, também, a pessoa que, detrás do balcão me serve o cafézinho de que tanto dependo? E como é importante quem me atura com paciência as más disposições...

E tem mais. Uma casa, uma estrada, uma mina, nascem pelas suas circunstâncias associadas a um conjunto de vontades. Assim é com este trabalho. Quem escreveu deixa a sua marca, mas não passa do agente, do braço que executa, duma parte do todo. É esse conjunto de pessoas e as suas particularidades, que todos os dias de um modo informal se juntam para trabalhar (mas trabalhar mesmo...) e trocar ideias, seja a dar aulas, a limpar o pó, ou a batucar nas teclas de um computador, que é o legítimo proprietário deste trabalho.

Por isso, como uma parte de um todo, embora seja este o tempo e o local dos agradecimentos, não posso, nem vou agradecer a ninguém.

Porto, 9 de Setembro de 1988

"As I drove I began to consider my new job.

A geologist who goes for volcanoes, I said to myself, must be called a volcanologist... The idea of the mission pleased me more and more, but I began to feel some uneasiness when I thought of how little knowledge I had on the subject. ...

Still, I thought to myself, while the truck was contending with the most wanton corckscrew bends in the road, had it not always been thus in any colony? There everyone learns for himself, by sheer trial and error, how to do what, in theory, he knows nothing about, and nobody does the thing he has been trained for. The mechanic builds houses, the prospector nurses the sick, the retired sea-faring man plants coffee ... and in the long run everyone manages somehow. A geologist who has done some surface-mining should be able to get along quite well in volcanology!"

Haroun Tazieff (1952): Craters of fire.

SUMÁRIO

Capítulo 0: Introdução

1. A proposta inicial de trabalho	14
2. O modelo não-linear de fragmentação batch em moinho de barras de M. Leite (1984)	18
2.1 Função destruição e função formação	18
2.2 Condensação de parâmetros	22
2.3 Não-linearidades: escudo e colchão.	23
2.4 O programa "NLINEAR"	27
2.5 Trabalho experimental	28
3. Moagem batch: trabalho executado e conclusões	31
3.1 Os objectivos da investigação preliminar	31
3.2 Escolha do minério	34
3.3 Determinação da alimentação do moinho	36
3.4 As atribuições das primeiras moagens	42
3.5 O novo equipamento laboratorial	47
3.6 Resultados dos ajustes	50
4. Redefinição de objectivos	55
4.1 O problema dos tempos de tamisagem	55
4.2 Os novos objectivos	60

Capítulo 1: Objecto e método

1. Exórdio	64
2. Objecto: os sistemas particulados	66
2.1 Conceito de calibre: dificuldade da definição	68
2.2 Repartições de calibres: significado e limite	71
2.3 O formalismo de Bastenaire	76
2.4 A cominuição: processo de Markov de 1ª ordem	78
2.5 Equação prospectiva da fragmentação	81
2.6 A cominuição: processo irreversível	83
2.7 Os limites da descrição dinâmica	84
2.8 Evolução no tempo duma população de partículas	87
3. Método	
3.1 Descrição de fenómenos colectivos	92
3.2 Dificuldades de amostragem	95
3.3 Modelo de base estatística	96
3.4 Critérios de validade dos modelos	99
3.5 Dificuldades experimentais	103
3.6 Experimentação numérica	105
condensação de parâmetros	
3.7 Estrutura do modelo numérico	109
3.8 Validação do modelo	111

Capítulo 2: O modelo e as conclusões

1. Introdução	
1.1 Propósitos iniciais	115
1.2 O que conseguimos aprender	117
2. Análise granulométrica por tamisação	120
2.1 Âmbito de utilização	120
2.2 Equipamento e rotinas laboratoriais	121
tamisação abaixo de 200 mesh	
2.3 Factores da cinética da tamisação	127
calibre e forma	
erro das malhas	
cegagem dos peneiros	
2.4 Precisão da medida e controlo do erro	136
importância do problema	
qualidade da separação por tamisação	
duas questões	
3. Trabalho experimental	144
3.1 Os ensaios	144
3.2 As amostras de minério	146
4. O modelo de tamisação	149
4.1 Um pouco de história	149
modelo de Whitby, K. T. (1958)	
modelo de Kaye, B. H. (1962)	

modelo de Kapur, P. C. <i>et al</i> (1977)	
4.2 Cinética linear de primeira ordem	155
4.3 Probabilidade de passagem	158
4.4 A não-linearidade	163
4.5 O isocrivo	167
4.6 Configuração operativa mínima de parâmetros	171
5. Validação do modelo e análise dos resultados	180
5.1 Os resíduos	186
5.2 Técnicas estatísticas	188
coeficiente de correlação de Spearman	
6. Os parâmetros e os seus valores	194
6.1 Parâmetro VCr	194
6.2 Parâmetro Sat e a não-linearidade	195
6.3 Parâmetro Fliso[i]:	198
forma e isocrivo	
o Axioma de Bayes	
6.4 Parâmetro Pliso:	211
calibre equivalente por tamisagem	
calibre equivalente do isocrivo	
7. O modelo como previsor	221
7.1 Capacidade de previsão do modelo	221
7.2 O ponto de paragem e o erro	228
8. O que há ainda a fazer	236
8.1 Os calibres nominais como parâmetros	236

8.2 Eliminação do factor forma	238
8.3 Cinética em regime contínuo: perspectivas.	239

Capítulo 3: Os métodos numéricos

1. Exórdio	243
2. Estabelecimento da função objectivo e caracterização do mínimo	246
2. A primeira tentativa de optimização - o polítopo	250
3.1 Descrição do algoritmo	251
3.2 Modificações possíveis	256
3.3 As restrições	257
3.4 Critério de paragem e precisão da solução	260
3.5 Razões do abandono do método	263
4. A segunda tentativa: algoritmo de Levenberg-Marquardt	266
4.1 Fundamentação teórica	268
método de Newton-Raphson	
somatório de mínimos quadrados	
convergência global	
o parâmetro de Marquardt	
4.2 Estratégias na determinação de σ	283
5. A decomposição de Choleski	288
5.1. Descrição do algoritmo	289
5.2. Controlo do parâmetro de Marquardt	294

6. Cálculo das derivadas	301
6.1. Erro de cancelamento e erro de truncatura	302
6.2. Cálculo das derivadas junto do mínimo	307
7. O escalamento em R^n	310
7.1. Escalamento nas derivadas	310
7.2. Escalamento dos parâmetros	313
8. As restrições nos parâmetros	316
8.1. Subrotina saturação	317
8.2. Problema do intervalo temporal	320
8.3. Transformações de variáveis	327
8.4. Explicitação das restrições	330
8.5. Caracterização do mínimo com restrições	332
8.6. Limites simples do domínio dos parâmetros	339
8.7. As restrições e o algoritmo de L.-Marquardt	344
9. O critério de paragem	348
9.1. Papel do critério de paragem	348
9.2. Critério de paragem proposto	353
10. A integração numérica	357
10.1. Os métodos utilizados	357
10.2. Controlo do erro de truncatura	360
10.3. Controlo do intervalo de integração	362
11. A existência de mínimos múltiplos	366

Bibliografia

Il ne faut pas laisser les intellectuels jouer avec les
allumettes

Parce que Messieurs quand on le laisse seul

Le monde mental Messssieurs

N'est pas du tout brillant

Et sitôt qu'il est seul

Travaille arbitrairement

S'érigeant pour soi-même

Et soi-disant généreusement en l'honneur des travail-

leurs du bâtiment

Un auto-monument

Répêtons-le Messssssieurs

Quand on le laisse seul

Le monde mental

Ment

Monumentalement.

Jacques Prévert (1948): Paroles (Il ne faut pas ...)

"Já semeei isto três vezes. As terras foram passadas duas vezes. E quando semeava, vinham estas trovoadas de água, arrasavam isto tudo com a água e matavam tudo. Neste momento continuamos a lutar a ver o que isto vai dar."

José Manuel Cardoso, seareiro do Ribatejo, a propósito das chuvas de Julho de 1988.

O. INTRODUÇÃO

A espantosa realidade das coisas

É a minha descoberta de todos os dias.

Cada coisa é o que é,

E é difícil explicar a alguém quanto isso me alegra,

E quanto isso me basta.

Fernando Pessoa (1915): Poemas de Alberto Caeiro

1. A proposta inicial de trabalho

O primeiro trabalho de doutoramento executado integralmente neste Departamento de Minas, foi o de M. R. Machado Leite (1984) que, com base em dois anteriores trabalhos de Madureira e Regueiras (1972a e 1972b), estudou a cinética da moagem batch em moinho de barras, através do ajuste de um modelo numérico não-linear.

Para atingir esse fim, o autor desenvolveu um método próprio de determinação conjunta dos parâmetros cinéticos da moagem e, através da análise dos resultados dos ajustes do seu modelo, pôde identificar um certo número de efeitos não-lineares que crismou de: "escudo", "colchão", "ângulo mordente" e "calibre crítico". O passo seguinte dado pelo mesmo autor, consistiu na elaboração sumária de um "modelo de moagem contínua, transporta-

dor perfeito, por andares e com os efeitos de percolação e saturação incluídos".

Existia assim, pela primeira vez, dentro do Departamento de Minas, um capital acumulado de conhecimentos teóricos e de experiência de trabalho laboratorial que permitiria, a quem retomasse o trabalho de investigação sobre a moagem, avançar com muito maior segurança sobre os caminhos que já tinham sido traçados.

Por isso, o tema de investigação que originalmente me foi proposto consistia em retomar o trabalho de simulação da moagem no ponto em que Machado Leite o tinha deixado, explicitando alguns aspectos marginais da moagem batch que não tinham ficado completamente esclarecidos e seguindo de imediato para a moagem em contínuo.

O cerne do trabalho consistiria na obtenção de um modelo fenomenológico, a validar pela experimentação física, que esclarecesse o fenómeno do transporte diferencial da polpa que se verifica dentro do moinho de barras.

Na verdade, sabe-se, desde os trabalhos de Myers e Lewis (1946), que, na polpa que se encontra dentro de um moinho de barras existe uma seriação granulométrica, decrescente da alimentação do moinho até à descarga que, segundo se crê, influencia (e é influenciada), pelo bem conhecido efeito de acunhamento das barras (Fig. 0.1). Estes autores amostraram e analisaram

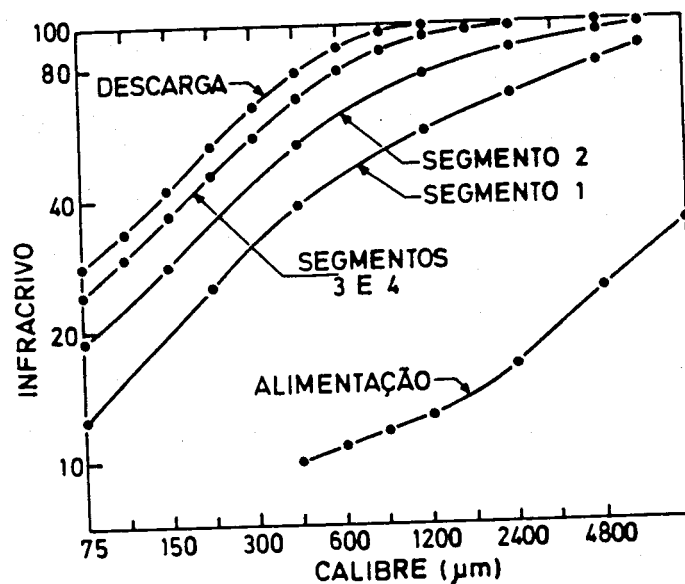


Fig 0.1: Variação da composição granulométrica da carga de um moinho de barras - adaptado de Myers & Lewis (1946).

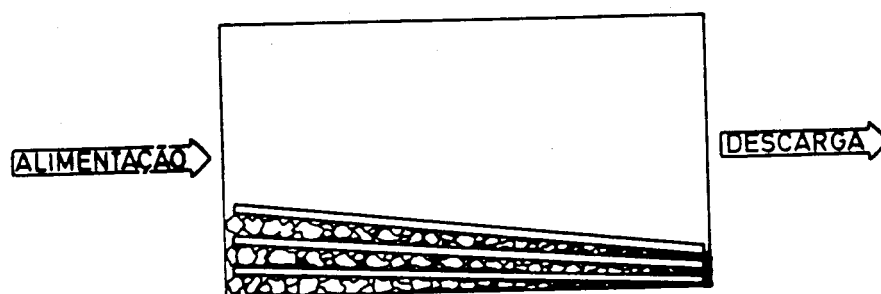


Fig 0.2: Acunhamento das barras no interior do moinho (esquemático) - adaptado de Lynch, A. J. (1977).

granulométricamente o minério que se encontrava dentro de um moinho de barras da Tennessee Copper Co. que, para o efeito, foi parado a meio da laboração normal. Na Fig 0.2 apresentam-se as composições granulométricas determinadas em quatro segmentos sucessivos da carga do moinho limitados por secções rectas.

O estudo deste fenómeno é, sem sombra de dúvidas, uma etapa indispensável de investigação a cumprir antes de tentar qualquer modelagem séria da moagem em contínuo, porque é este efeito simultâneo de classificação interna e fragmentação que individualiza os moinhos de barras.

Obtido um modelo satisfatório do moinho contínuo, o trabalho seria, muito provavelmente, rematado com uma primeira tentativa de simulação da moagem em moinho de barras trabalhando em circuito fechado com um crivo, dado que a simulação de hidro-classificadores ainda não está satisfatoriamente resolvida.

De seguida, com a brevidade necessária, vamos descrever o modelo não-linear de moagem batch de Machado Leite (1984), bem como os seus fundamentos conceptuais. Como é evidente, apenas estamos interessados nos seus aspectos relevantes em relação ao trabalho que por nós foi desenvolvido. Por isso, e pela concisão que tentámos imprimir ao texto, é natural que pormenores, porventura muito importantes para o leitor, tenham sido deliberadamente postos de lado. Se assim fôr, apelamos para a sua paciência e recomendamos-lhe vivamente a leitura do original.

2. O modelo não-linear da fragmentação batch em moinho de barras de Machado Leite (1984)

Leite, M. (1984, Cap. II) utilizando os conceitos de ponto de Bastenaire e de fragmentação de Bastenaire (1965), desenvolvidos por Madureira, C. e Regueiras, P. (1972) (que abordaremos sucintamente em (1.2.3) e (1.2.4)), considera a cominuição como um processo estocástico de nascimento e morte. Baseado nestas considerações e apoiando-se na equação prospectiva de Chapman- Kolmogorov-Smirnov (ver 1.2.5), passa a descrever a fragmentação que se opera entre os instantes t_0 e $t_1 = t + dt$ como a composição de duas funções: a destruição e a formação.

2.1. Função destruição e função formação

Dado que o calibre não é definível tecnologicamente como variável contínua, mas antes como uma sucessão de intervalos granulométricos (conceito de calibre equivalente por tamisagem), o autor passa a representar a função destruição e a função formação sob a forma matricial.

Então, para um conjunto de n_l lotes granulométricos, os elementos $s_i \cdot dt$, ($i=1, 2, \dots, n_l$) da matriz destruição S (matriz coluna), correspondem à probabilidade, não nula, de que

as partículas de um dado calibre ϕ_i , que se encontram dentro do fragmentador, tenham efectivamente sofrido uma redução de calibre no intervalo de tempo dt ; os elementos b_{ij} da matriz formação B (matriz triangular inferior), correspondem à probabilidade que as partículas de calibre ϕ_i têm, se sofreram fragmentação, de dar "filhas" de calibre $\phi_j < \phi_i$.

Deste modo, a transição das composições granulométricas que se opera dentro do fragmentador entre os instantes t e $t+dt$, pode ser escrita sob a forma da equação matricial

$$C(t+dt) = T C(t) dt \quad [0.1]$$

onde,

$C(t)$ é o vector das composições granulométricas da carga do fragmentador, tomado no instante t ;

T é a matriz transição, que descende em linha directa da equação fundamental da fragmentação [1.22] (Madureira, C. e Regueiras, P. (1972b)) e que pode ser definida através das matrizes destruição e formação do seguinte modo (*):

$$T_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{se } i > j \\ 1 - S_j, & \text{para } i = j \\ S_j \cdot B_{ij}, & \text{para } i < j, \end{cases} \quad [0.2]$$

com $(i, j = 1, 2, \dots, n1)$.

(*) Os calibres mais finos correspondem aos números designatórios mais altos.

Esta formulação deve ser lida do seguinte modo: a probabilidade instantânea de que uma partícula de calibre ϕ_i , durante a fragmentação:

1. produza "filhas" de calibre superior ao seu, é nula.
2. não veja o seu calibre reduzido, é igual ao complementar, para a unidade, da sua probabilidade de sofrer fragmentação.
3. produza "filhas" de calibre ϕ_j , é igual ao produto da probabilidade de sofrer fragmentação do lote a que pertence (que é i), multiplicada pela probabilidade condicional de ocorrência do calibre ϕ_j , se houve fragmentação.

Define-se, a partir de T a matriz alteração instantânea das composições granulométricas, F, através da expressão

$$T = I - F \, dt, \quad [0.3]$$

o que significa que [0.1], pode assumir a forma

$$C(t+dt) = C(t) - F C(t) \, dt. \quad [0.4]$$

Integrando [0.4] em t obtém-se a expressão formal

$$C(t) = e^{-F \cdot t} C(0), \quad [0.5]$$

em que $C(0)$ é o vector da composição granulométrica inicial.

Note-se que, ao contrário dos modelos casuísticos, *à la Lynch*, (1986) a equação [0.5] contém uma formulação explícita do tempo de residência do minério, o que advém do facto de

se tratar de um modelo de base fenomenológica (ver 1.3.4). Isso permite que o modelo se aplique às condições mais variadas, pese embora a necessidade da redefinição dos elementos da matriz F a cada mudança de fragmentador e/ou de minério.

Existe, contudo uma dificuldade conceptual e experimental importante pelo facto de, a rigor, para conhecermos a cinética da fragmentação, precisarmos de determinar todos os $n*(n+1)/2$ elementos da matriz F. Ora, a existência desta multidão de parâmetros levanta de imediato uma série de problemas:

- aumenta de forma exponencial o número de ensaios experimentais a realizar para obter toda a informação necessária a essa determinação;
- dificulta o domínio conceptual do modelo e do processo de simulação,
- está em completo desacordo com o princípio da máxima simplicidade e, finalmente,
- pode tornar completamente ineficaz o método de ajuste mais poderoso (ver 3.3.4).

Leite, M. (1984, pp.111-8/111-23) pôde ultrapassá-los recorrendo ao princípio da condensação de parâmetros de Madureira, C. (1988, pp. 84) (ver 1.3.6).

2.2 Condensação de parâmetros

Baseando-se no trabalho de Greenwood e Hiorns, (1967) pôde tomar os elementos b_{ij} da matriz B iguais ao longo de linhas paralelas à diagonal principal, ao mesmo tempo que considerou que cada coluna j da mesma matriz não é senão a densidade de repartição granulométrica que se obtém, em cada instante, por fragmentação do lote j . Estes raciocínios permitiram-lhe representar toda a matriz pelos dois parâmetros da "lei" de Harris das distribuições granulométricas que designou, para o seu caso, por:

P_W - que comanda o tramo dos finos da curva cumulante;

P_G - " " " " " grãos da mesma curva.

Utilizando o trabalho de Madureira, C. e Regueiras, P. (1977), pôde utilizar uma formulação em progressão geométrica para os elementos da matriz destruição, isto é,

$$s_j = s_0 r^j, \quad [0.6]$$

com o que conseguiu representar toda a matriz destruição S por dois parâmetros:

P_A - que corresponde ao valor da destruição para o lote mais grão;

P_K - que é função da razão da progressão geométrica.

Devido às particularidades da moagem batch, teve ainda necessidade de introduzir o parâmetro

T_0 - que corresponde ao tempo de arranque necessário à ultrapassagem da fase inicial, transitória, de arrumação da carga no interior do moinho.

Ficaram assim reduzidos a cinco os parâmetros necessários à descrição da moagem batch desde que, na equação [0.5], os elementos de F não dependam, nem de t , nem de $C(t)$, o que equivale a afirmar que a cinética de fragmentação é linear.

Se assim for, é possível prescindir da integração numérica, dado que o sistema representado pela equação matricial [0.4] tem integração analítica, na forma [0.5] (Angot, 1965).

Contudo, é fundamental a introdução de efeitos não-lineares nos processos que envolvem sistemas particulados (ver 1.2), o que foi feito por Leite, M. (1984, pp. VI-2/VI-5) ao considerar que os elementos da matriz F variam no tempo, por serem funções da composição granulométrica, ela própria variável ao longo da moagem.

2.3. Não-linearidades: escudo e colchão

Com esse fito foram introduzidos no modelo dois novos parâmetros:

P_E - efeito de escudo,

P_C - efeito de colchão,

o primeiro dos quais corresponde ao facto de as maiores partículas protegerem as mais pequenas da acção dos agentes fragmentadores, diminuindo-lhes a velocidade de destruição, enquanto que o segundo, deve o seu nome ao facto de as partículas mais finas poderem funcionar como amortecedores do choque dos agentes fragmentadores sobre os calibres mais graúdos, diminuindo-lhes, também, a velocidade de destruição.

Estes dois novos parâmetros fazem com a a destruição dos lotes granulométricos que se opera dentro do moinho de barras passe a ser influenciada pela composição granulométrica do modo que a seguir se exprime:

$$s(j|C) = s_j - \sum_{m=1}^{j-j_0} C_m P_E s_j - \sum_{m=j+i_0}^{n1} C_m P_C s_j \quad [0.7]$$

com

$i, j, m = 1, 2, \dots, n1$;

$j_0 \in \{1, 2, \dots, n1-1\}$;

$i_0 \in \{2, 3, \dots, n1\}$;

sendo:

$s(j|C)$ - a probabilidade de destruição do lote j , dada a composição granulométrica;

s_j - destruição do lote j no caso linear, dada por [0.6];

C_m - a fracção granulométrica correspondente ao lote m ;

j_0 - a diferença entre o índice do lote protegido pelo escudo dos graúdos e o do menor calibre dos seus protecto-

res; para cada calibre j são, portanto, seus protectores, os lotes de 1 a $j-j_0$;

P_E - parâmetro escudo;

P_C - parâmetro colchão;

i_0 - a diferença entre o índice do lote de maior calibre dos amortecedores e o do lote amortecido (por efeito-colchão); portanto, para cada lote j , são seus amortecedores os lotes de $j+i_0$, até ao mais fino.

Deste modo, a destruição, que em [0.6] tinha uma forma exponencial simples passa agora, no caso do moinho de barras, a ter o andamento representado na Fig. 0.3.

Assim, o modelo não-linear necessita do conhecimento de nove parâmetros, a saber:

$$P_A, P_K, P_W, P_G, T_0, P_E, P_C, i_0, j_0, \quad [0.8]$$

onde os primeiros quatro parâmetros representam a fragmentação "sensu latu", o quinto introduz um efeito característico dos processos batch e, finalmente, são os quatro últimos que dão ao modelo a capacidade de simular especificamente (se bem que não exclusivamente) a fragmentação em moinho de barras.

A introdução das duas não-linearidades acarreta o inconveniente de já não se poder passar sem a integração numérica do sistema de equações representado em [0.5], o que Leite, M. (1984) fez, utilizando um algoritmo de Runge-Kutta de 4ª ordem.

Tabela 0.1: Configuração de parâmetros ajustados para as amostras de calcário: modelo não-linear com efeito de escudo (adaptado de Leite, M. (1984)).

ENSAIO	J ₀	PA	PK	PW	PG	PE	TO	RM
CA121	7	.038	10 ⁻⁴	.645	1.041	1.210	34.71	2.8
CA221	6	.628	.203	.623	1.070	2.015	40.08	4.4
CAN221	6	.056	.202	.543	0.664	1.383	30.33	3.3
CAN222	6	.097	.474	.710	1.656	4.479	37.79	2.6

CA121 - c/ lote 15/25 mm, barras grossas, enchimento alto;

CA221 - s/ lote 15/25 mm, barras grossas, enchimento alto;

CAN221 - s/ lote 15/25 mm, barras grossas, enchimento alto;

CAN222 - s/ lote 15/25 mm, barras grossas, enchimento baixo;

RM - resíduo médio por lote.

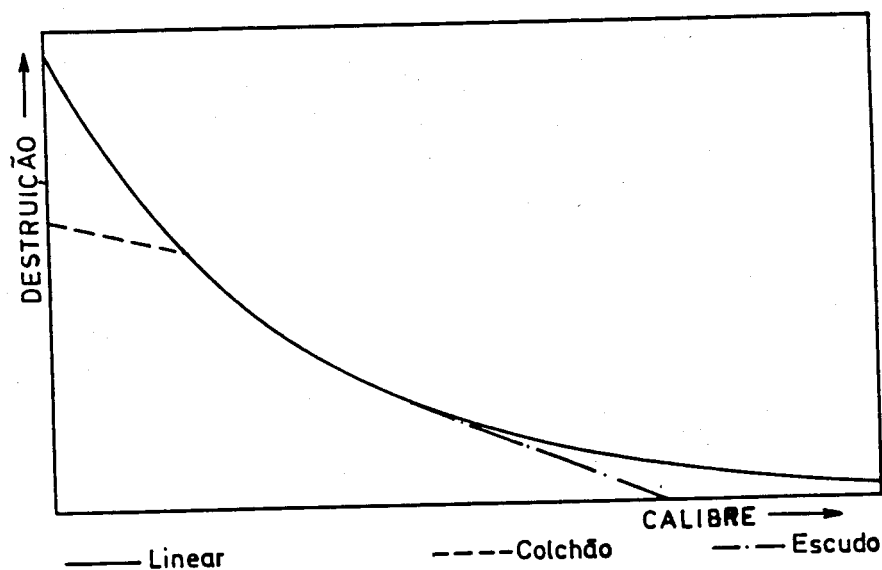


Fig. 0.3: A destruição e as não-linearidades.

2.4 O programa "NLINEAR"

A partir de [0.4] e de [0.7] Leite, M. (1984) produziu um algoritmo de simulação da moagem não-linear em moinho de barras, que serviu de base à construção do programa "NLINEAR", escrito em FORTRAN 5, para correr no computador Cyber 170/720 do Centro de Informática da Universidade do Porto e que foi por nós modificado e em seguida vertido para Pascal USDC, de modo a correr num super-micro computador STRIDE 460. A listagem desta versão modificada pode-se ver no Anexo 0.1.

O programa, que se representa em fluxograma sumário na Fig. 0.4 é constituído por duas partes fundamentais: a integração numérica do sistema de equações descrito matricialmente em [0.4] e o algoritmo de optimização de Levenberg-Marquardt (ver Capítulo 3).

Muito genericamente, cada ciclo do programa "NLINEAR" cumpre sequencialmente as seguintes tarefas:

- os parâmetros são determinados conjuntamente em R^7 , através da pesquisa do mínimo segundo Levenberg-Marquardt.
- a configuração de parâmetros é introduzida na subrotina de moagem, que calcula, para cada tempo de residência, as composições granulométricas que dela resultam ao fim dos tempos especificados pelos ensaios;
- calculam-se os resíduos, que correspondem à diferença en-

tre os valores calculados pelo algoritmo e os obtidos experimentalmente;

- a soma das quartas potências destes últimos vai constituir a função objectivo, cujo mínimo o algoritmo de optimização tenta atingir em sucessivas iterações.

2.5 Trabalho experimental

As composições granulométricas correspondentes a conjuntos de ensaios de moagem batch com vários tempos de residência do minério no moinho, foram efectuadas por Leite, M. (1984) utilizando um tambor de aço com um dos tampos amovível, de 285 mm de comprimento por 305 mm de diâmetro, apoiado em dois rolos de borracha que lhe transmitiam o movimento proporcionado por um motor com variação electrónica contínua de velocidade;

Foram ensaiados quatro tipos diferentes de material (dois xistos e dois calcários), cujas cargas de moagem foram preparadas por fragmentação num britador tipo "Blake". Do produto britado apenas se aproveitaram, para constituir as cargas de moagem, os lotes entre 15 mm e 1.5 mm.

A moagem foi conduzida nas seguintes condições operatórias:

- utilização alternativa de barras grossas (35 mm de diâme-

tro) e de barras finas (25 mm de diâmetro);

- carga de sólidos correspondendo, em volume, a 25% (enchimento baixo) ou a 40% (enchimento alto) do total do moinho;
- velocidade do tambor mantida a 57 rpm (75% da velocidade crítica teórica);
- relações volúmicas minério:barras e água:sólidos mantidas constantes, respectivamente a 1:4 e 1:2;

Cada conjunto de seis ensaios de moagem física (com mais dois tempos replicados, para minimizar os erros experimentais) foram submetidos conjuntamente por Leite, M. (1984) ao algoritmo de ajustamento. Na Tabela 0.1 (Leite, M. (1984, pp. VI-33)) reproduzem-se as quatro configurações de parâmetros mais favoráveis obtidas pelo autor para cada um dos grupos de ensaios efectuados sobre calcários(*).

O autor refere, finalmente, que, como consequência directa da exploração de seu programa "NLINEAR", para além do escudo e do colchão, detectou ainda outros efeitos não-lineares na cinética da moagem batch, dos quais o mais saliente, é o efeito de ângulo mordente, que se discutirá com um pouco mais de pormenor em (0.3.4).

(*) Apresentamos apenas os ensaios sobre calcários porque o seu comportamento, de entre os minérios ensaiados por Leite, (1984), é o que mais se assemelha ao do nosso granodiorito.

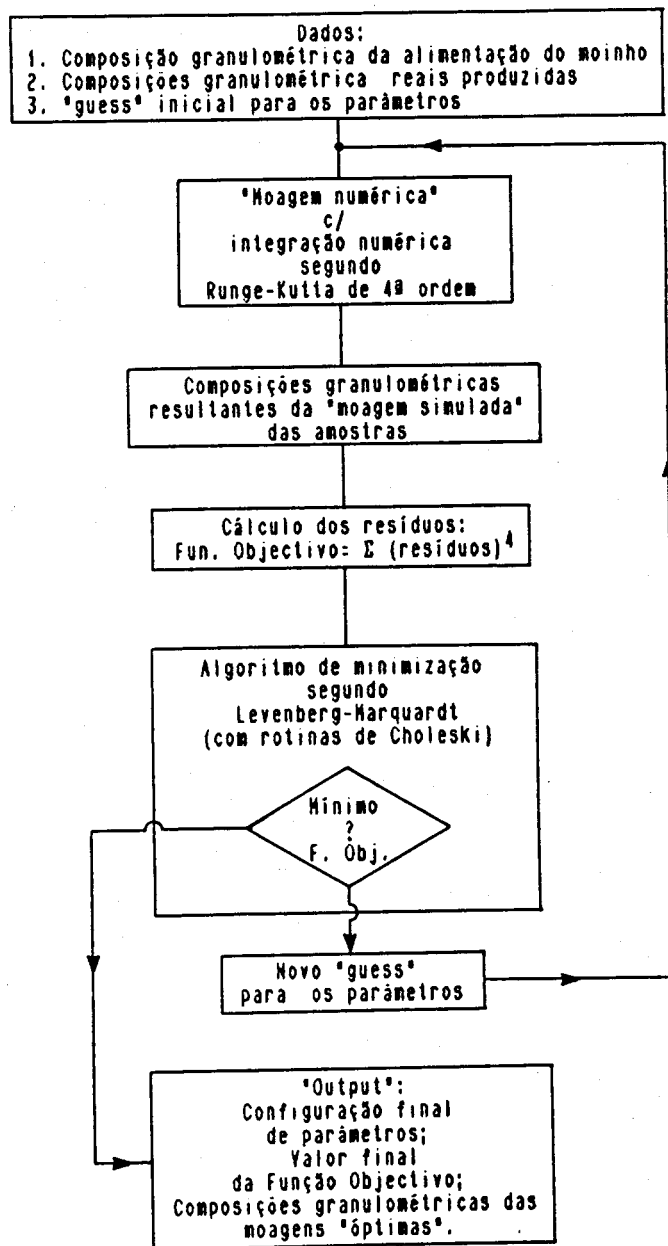


Fig. 0.4: Fluxograma sumário do programa NLINER.

3. Moagem batch: trabalho executado e conclusões

Como se disse em (0.1), a parte inicial do trabalho consistiria em tentar esclarecer alguns aspectos deixados em suspenso por Leite, M. no seu trabalho (1984, Cap.VIII), de modo a formar um quadro conceptual da moagem batch que fôsse o mais completo possível, antes de nos abalançarmos ao estudo do processo contínuo.

3.1 Os objectivos da investigação preliminar

Seria portanto necessário investigar de que modo é que a moagem em moinho de barras é influenciada pelos seguintes factores, combinados ou não entre si:

- diâmetro das barras;
- percentagem de enchimento;
- diluição da carga de minério;
- saturação/sobressaturação (*),

o que pressuporia, numa primeira fase, a execução de um mínimo de doze ajustes do programa "NLINEAR" de Leite, M. (1984) com as correspondentes oito moagens físicas por cada ajuste.

(*) sobressaturação: o facto de a carga a moer ultrapassar o valor estritamente necessário ao preenchimento dos vazios entre as barras.

Um outro ponto a investigar prender-se-ia com a necessidade de explorar outras formas para a lei da destruição, que não a simples exponencial decrescente truncada (Fig. 0.3). Seria necessário aumentar a flexibilidade da formulação da lei de destruição de modo a que, através de inflexões ascendentes da sua curva exponencial (Fig. 0.5) se pudesse simular o efeito de grão detectado por Leite, M. (1984, pp. VI-40/VI-43) durante a moagem de calcários oolíticos.

Para esse fim seria necessário executar séries de moagens, com tempos de residência muito curtos, sobre cada um dos lotes granulométricos tomados separadamente, obtendo, para cada um deles, uma primeira aproximação da sua velocidade de destruição, ao mesmo tempo que se tentaria fazer uma ideia prévia da lei de formação seguida pelo minério (Arbiter, N. & Harris, (1965)).

Uma terceira tentativa poderia ainda consistir no estabelecimento de um modelo de moagem batch com duas matrizes de destruição (a onze parâmetros), de modo a simular fragmentações bimodais.

Antes de mais nada, seria necessário cumprir as exigências do próprio modelo NLINEAR de Leite, M. (1984), isto é, investigar para o caso do minério escolhido, quais seriam os tempos de residência mais indicados e de que modo é que se apresentariam os efeitos não-lineares de escudo, colchão e ângulo mordente.

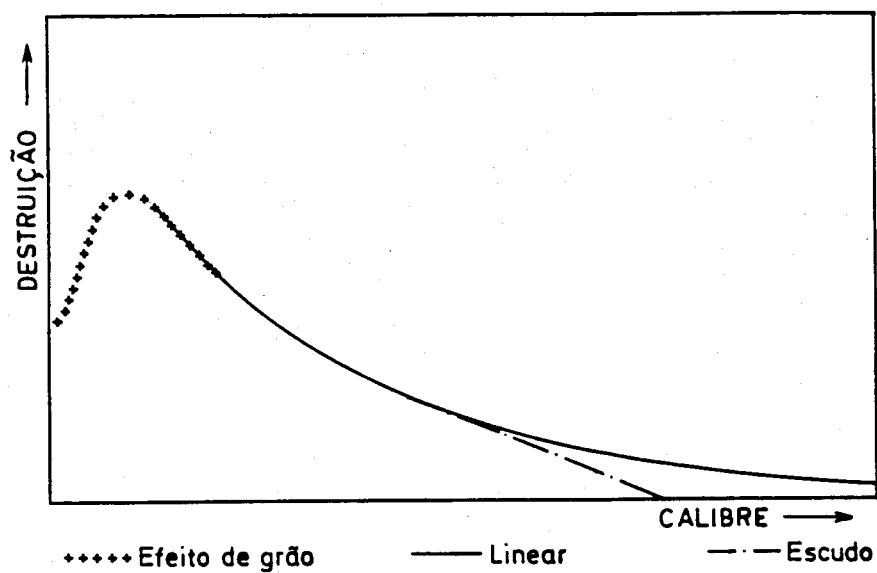


Fig 0.5: Forma alternativa da função destruição

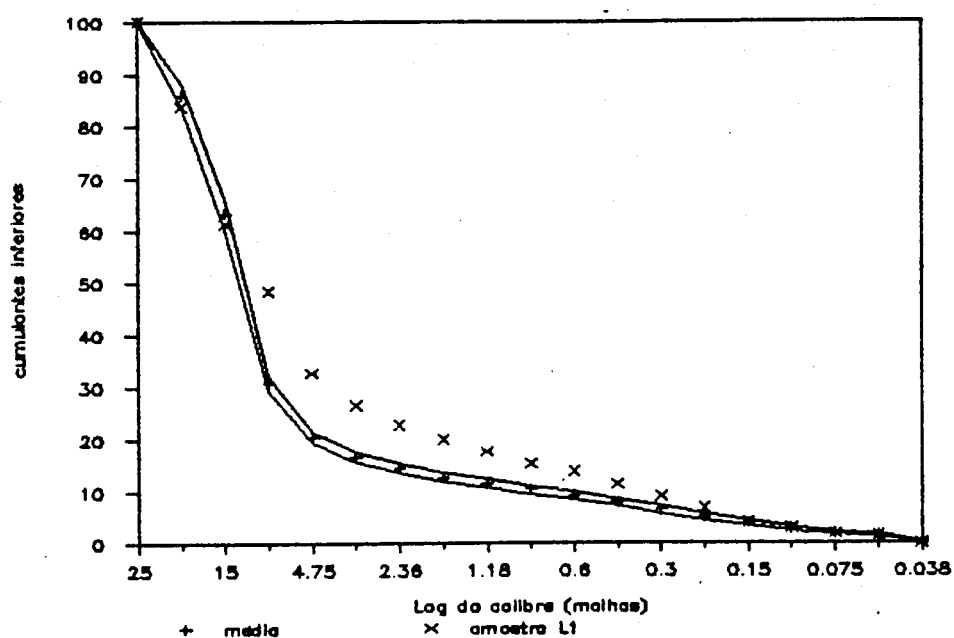


Fig 0.6: Composição granulométrica média das amostras moídas e canal de confiança.

Em particular, considerou-se que seria interessante saber se o efeito de colchão descrito por Leite, M. (1984, pp. V-13/V-15) existiria mesmo ou não, já que ele só foi utilizado como artifício por esse autor, para poder simular a fragmentação diferencial de um xisto com fracção quartzosa. Foi por esta última razão que, ao invés do procedimento utilizado por Leite, M. (1984) e que foi descrito em (0.2.5), a alimentação das moagens que por nós foram executadas continha todos os finos naturais.

Depois de estabelecido o plano prévio dos ensaios preliminares, a primeira tarefa a realizar consistiu na escolha de um minério que, tanto quanto possível, não provocasse o aparecimento de efeitos indesejados.

3.2 Escolha do minério

Um dos problemas mais difíceis com que nos defrontamos todos os dias durante o trabalho de laboratório é o da reprodutibilidade experimental, que na fragmentação assume proporções inquietantes, porque, como os minérios são heterogêneos em extremo, não podemos garantir nunca que duas amostras, obtidas de modo tanto quanto possível idêntico, exibam comportamentos mecânicos semelhantes. Este problema torna-se particularmente grave quando

a rocha mostra, em relação à fragmentação, um efeito de grão muito nítido e abrupto, produzindo preferencialmente certas granulometrias, como é o caso dos calcários oolíticos (ilusoriamente homogêneos) que Leite, M. utilizou (1984, pp. IV-3/IV-33).

Por isso, resolvemos utilizar uma rocha de heterogeneidade aleatória que não exibisse comportamentos com viés marcado e nos desse algumas garantias de só provocar na distribuição granulométrica um ruído de fundo estatístico. Por outras palavras: seria desejável que as flutuações do comportamento mecânico da rocha tendessem a anular as bifurcações características da fragmentação (ver 1.2.8).

Em consequência, decidimo-nos a utilizar na moagem uma rocha intrusiva equigranular, de grão médio a fino, o que, na zona em redor do Porto, corresponde inevitavelmente a um granito ou a um granodiorito. Para a escolher, visitámos diversas pedreiras num raio de cinquenta quilómetros, tendo sido escolhido, como o mais recomendável, um granodiorito de grão fino com duas micas, praticamente isento de fenocristais e de "mulas" (xenólitos), que é explorado pela Sociedade de Pedreiras do Marco, na zona de Roriz-Sanfins (concelho de Paços de Ferreira).

Por ser também muito importante que todo o material ensaiado provenha não só da mesma pedreira, mas também do mesmo degrau e, se possível, do mesmo bloco, foram desde logo encomendadas cinco toneladas de "mosaico de exportação" de dimensões

médias 4 cm x 6 cm, provenientes do degrau inferior da pedreira (Fig. 0.7)

Note-se que não conseguimos detectar em toda a exploração quaisquer sinais de ruborização e/ou saussuritização. Acontece mesmo que a rocha extraída do degrau inferior se encontrava tão pouco alterada que os sulfuretos (pirite) que nela preenchiam algumas fissuras não apresentavam nenhuns indícios de oxidação.

Após a recepção, o mosaico foi todo lavado e triado à mão, rejeitando-se os cubos que apresentassem à superfície fenocristais em excesso, "mulas" ou, ainda, sulfuretos, o que reduziu a quantidade de material a 95% da primitiva.

Sob o ponto de vista que nos interessava, o único inconveniente que nesta altura se poderia apontar à rocha residia no facto de a biotite ocorrer em percentagem muito elevada o que, como é evidente, iria (como veio) dificultar a tamizagem.

3.3 Determinação da alimentação do moinho

Escolheram-se inicialmente cerca de 100 Kg de mosaico, 73.5 kg dos quais foram divididos em 14 lotes, que foram fragmentados separadamente num britador "Blake" (100 mm x 200 mm), regulado a 32 mm (lado aberto).

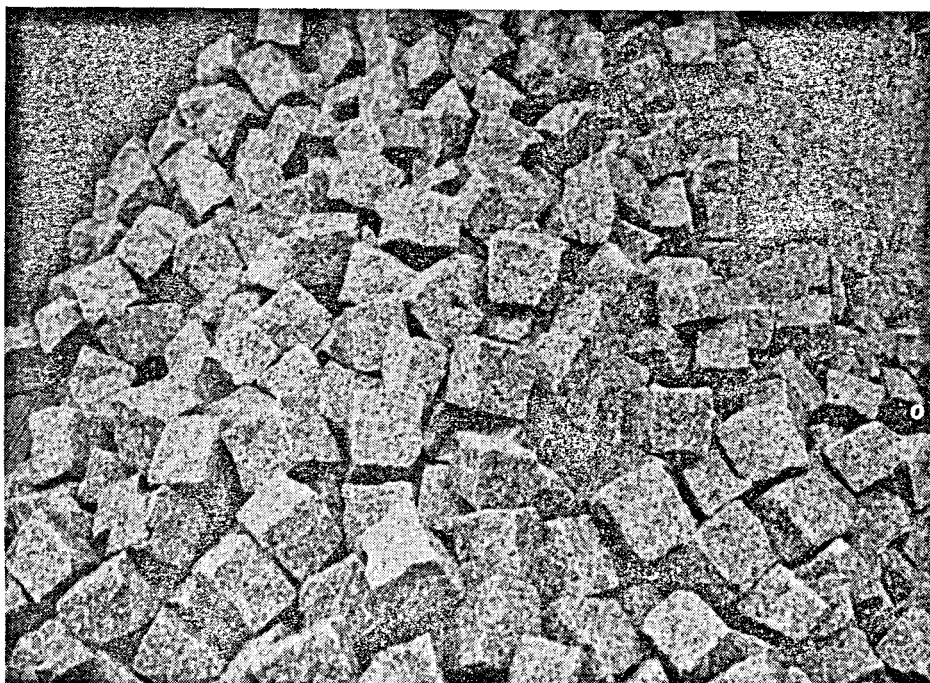


Fig. 0.7: ○ "minério" escolhido

Irônicamente, o minério que tinha sido escolhido com tanto cuidado, tinha um comportamento anômalo. Para nossa surpresa, os fragmentos resultantes da britagem, em vez de serem honestamente isométricos, tinham uma forma esquirolosa, perfeitamente semelhante à que resulta da passagem em máquinas estranguladas, o que de modo algum era o caso. Felizmente que as esquirolas estavam presentes em todos os calibres. Se não fosse o evidente exagero, poder-se-ia dizer que durante a britagem a rocha quase que "explodia". Supomos que este comportamento se deve à presença de zonas de fraqueza à escala do grão mineral, que se instalaram por via tectônica na rocha e que se revelaram durante a fragmentação ou, talvez, possa ser causado pela existência de orientações preferenciais de certos aspectos texturais da rocha (assim um pouco como o "correr" da pedra dos montantes).

Cada uma das amostras assim constituída foi analisada granulométricamente, podendo ver-se os resultados no Anexo 0.2.

Já nesta altura se começaram a notar problemas na precisão das análises granulométricas que, como consequência, levaram a longos tempos de operação. Para tentar fazer uma primeira ideia dos tempos operatórios convenientes realizaram-se alguns ensaios da cinética de tamizagem, que referiremos em pormenor em (0.4) e que nos indicaram tempos de preparação da amostra de minério a moer (Tab. 0.6) que, embora conservativos, nos colocaram do lado da segurança.

A grande variabilidade das composições granulométricas que já se notavam deixaram-nos um pouco receosos. Na verdade, o minério tinha sido cuidadosamente triado, mas não poderíamos asseverar nunca que não existissem "mosaicos" nítidamente diferentes da média, porque o nosso critério de escolha se tinha baseado apenas na inspecção visual da sua superfície.

Impunha-se saber até que ponto as composições granulométricas determinadas para cada amostra de minério britado pertenceriam ou não à mesma população.

Para fins de teste estatístico considerámos a população formada pelo universo das amostras de granodiorito britado como normal. Este procedimento foi legítimo, porque a aleatoriedade das composições granulométricas tinha a ver fundamentalmente com a amostragem e, também, porque cada um dos lotes fragmentados era constituído por um número muito elevado de indivíduos (as partículas).

O teste estatístico foi conduzido por comparação das curvas cumulantes e não dos histogramas. Embora à primeira vista este procedimento se deva considerar errado, por não estarmos a trabalhar com valores independentes, existe uma razão poderosa para que assim tenhamos procedido.

É que estamos a comparar distribuições de elementos que são as partículas minerais e estas são muito mais numerosas nos calibres finos que nos grãos. Por isso, e a rigor, cada uma

das classes granulométricas que formam o histograma deve, antes da estatística actuar, ser afectada de um peso inversamente proporcional ao volume médio das partículas que contêm (supondo que o material é de densidade uniforme). Ora, como este procedimento, embora não seja impossível teoricamente, é inexecutável na prática, é necessário encontrar um outro método de ponderação mais expedito.

Ao mesmo tempo, a experiência, longa de anos, dos "preparadores de minérios"(*), tem mostrado que só se conseguem comparar cumulantes e nunca histogramas. Isto acontece porque a soma repetida das fracções granulométricas introduz um efeito de ponderação que diminui, na aparência gráfica final da curva cumulante, o elevado peso relativo que as fracções graúdas, com poucas partículas, mas com percentagem em massa elevada, tendem a desempenhar.

Dadas estas considerações, efectuámos um teste estatístico, do tipo "bootstrapping" (cujos resultados se podem ver no Anexo 0.2) cotejando cada uma das composições granulométricas, tomadas isoladamente, contra os intervalos de confiança a 99.9% e a 96% construídos em torno da média aritmética das treze restantes. Não seria sensato, pela enorme variabilidade própria das composições granulométricas que resultam dos processos de frag-

(*) Designação de H. S. Botelho de Miranda.

Tabela 0.2: Alimentação do 1º moinho (285mm x 385 mm)

Malhas		Cumulative infer.	Frac. gran. %	Enchimento baixo (gr)
(#)	(mm.)			
20	20.0	100.00		
15	15.0	75.11	24.89	497.8
8	8.0	36.33	38.78	775.6
4	4.75	24.26	12.07	241.4
6	3.35	19.94	4.32	86.4
8	2.36	17.37	2.57	51.4
12	1.70	15.41	1.96	39.2
16	1.18	13.95	1.46	29.2
20	0.85	12.50	1.45	29.0
30	0.600	11.28	1.22	24.4
40	0.425	9.64	1.64	32.8
50	0.300	7.97	1.67	33.4
70	0.212	6.32	1.65	33.0
100	0.150	4.93	1.39	27.8
140	0.106	3.54	1.39	27.8
200	0.075	2.54	1.00	20.0
270	0.053	2.01	0.53	10.6
-270	infra		1.99	39.8

mentação graúda, utilizar intervalos de menor amplitude.

Verificou-se que apenas a amostra L1 não cumpria o teste (Fig. 0.6), porque uma parte substancial dos seus pontos ultrapassa ambos os intervalos de confiança. Por podermos assim dizer que não é crível que a amostra L1 pertença à mesma população, eliminamo-la e repetimos o procedimento para as treze restantes: estas últimas passaram todas no segundo teste. Segundo cremos este facto pode explicar-se por diferenças de procedimento experimental durante a fragmentação da amostra recusada.

Pudemos, deste modo, tomar a média aritmética das composições granulométricas destas treze amostras (Fig. 0.6) como alimentação-padrão do moinho batch, mas com uma modificação: por termos que se viessem a verificar problemas de deficiência de ângulo mordente, retiramos o lote 20/15 mm e redistribuímos a parte que lhe cabia pelos restantes (Tab. 0.2).

3.4 As atribuições da primeiras moagens

A partir do mosaico escolhido prepararam-se dez amostras de 2000 gr. cada uma, com a composição granulométrica da Tabela 0.2, que foram moídas no mesmo tambor utilizado por Leite, M. (1984) (ver 0.2.5). Por o nosso minério ser muito resiliente, escolhemos a 2ª configuração de moagem mais energética utilizada por Leite, M. (1984, pp.V-30), ou seja:

- barras de 35 mm de diâmetro,
- enchimento baixo (carga de 2000 gr de minério),

mantendo as relações (em volume) minério/barras e água/sólidos e a velocidade de rotação referidas em (0.2.5).

Começaram então os problemas. Das dez moagens efectuadas só três foram levadas a bom termo: duas com tempo de residência de 90 seg. e uma de 240 seg.. Quanto às restantes, em cinco delas as barras atravessaram-se, enquanto que nas outras, o moi-

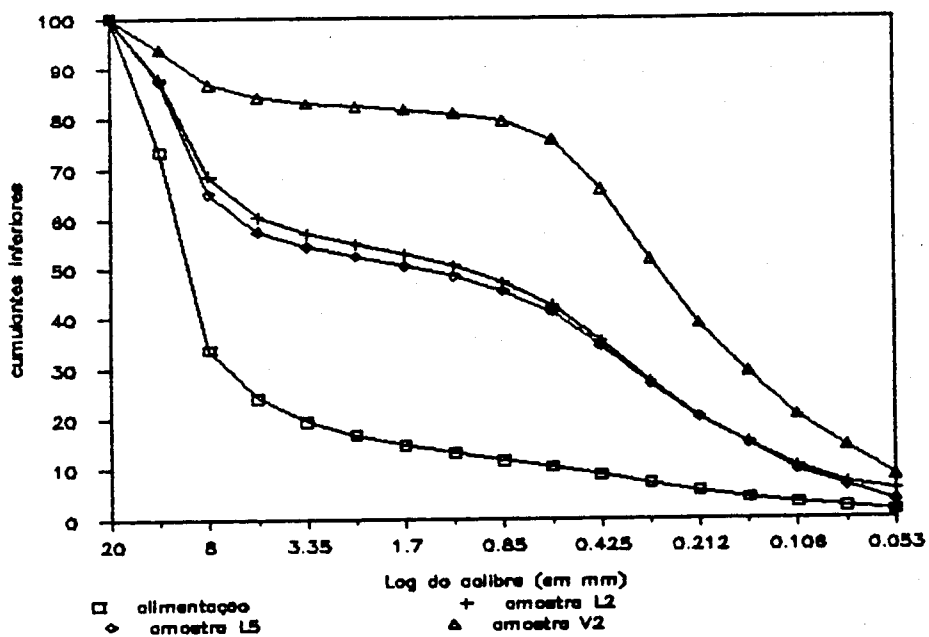


Fig. 0.8: As primeiras moagens

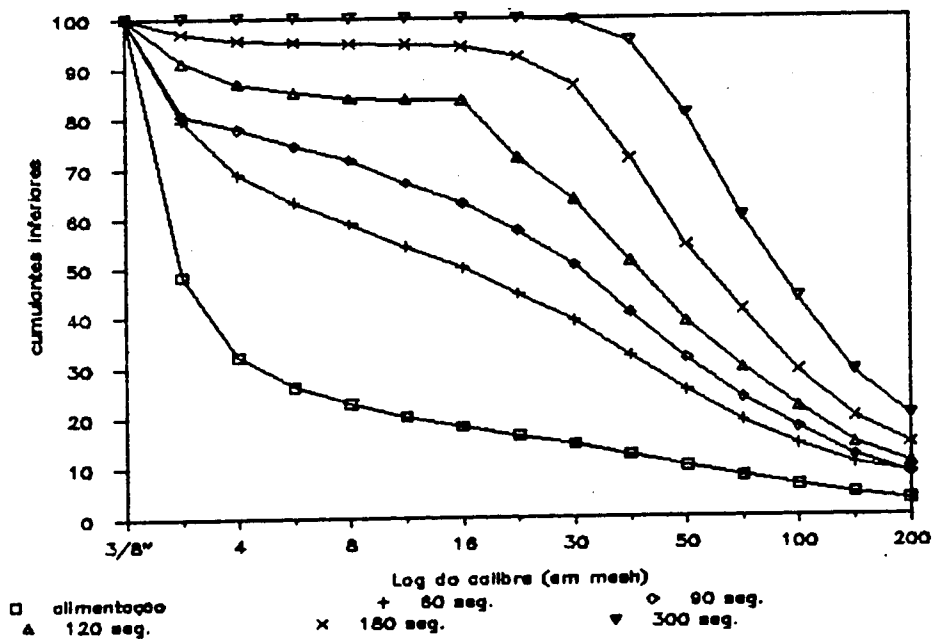


Fig. 0.9. O segundo conjunto de moagens

nho perdeu a aderência com os rolos de borracha que lhe transmitiam o movimento, parando por completo.

Um fenómeno constante ao longo deste grupo de ensaios (mesmo nos que foram levados até ao fim) foi o facto de o ruído constante e cadenciado, característico da queda das barras em regime de catarata, ter dado lugar a um outro, muito mais irregular, que pressagiava a perda de aderência da carga em relação à parede do moinho. Muito provavelmente esta apenas oscilava para a frente e para trás, ao ritmo da rotação do tambor, ao mesmo tempo que, sintomaticamente, a velocidade de rotação acusada pelos rolos de borracha aumentava.

Como seria de esperar, os resultados das três moagens sobreviventes (Anexo 0.3) espelham as dificuldades encontradas. Em todas elas se verifica o aparecimento de uma distribuição granulométrica bimodal dos moídos onde, à presença de finos resultantes da moagem, se alia a permanência de quantidades importantes de grãos com calibre superior a 1 mm, ao mesmo tempo que os calibres intermédios deixam de existir quase por completo (Fig. 0.8 e Anexo 0.3). A inspecção visual da carga confirmou as nossas suspeitas: os grãos retirados do moinho estavam completamente arredondados, o que nos leva a dizer que a produção de finos se deveu fundamentalmente a fenómenos de atrito.

Estavamos portanto em presença de um fenómeno idêntico,

mas de muito maior expressão, ao que Leite, M. (1984, pp.VI-49-VI-52) detectou para o caso da moagem do primeiro calcáreo. Este autor considerou que a ineficiência da moagem que encontrou se deveu à inexistência de ângulo mordente suficiente das barras em relação ao minério.

No nosso caso o fenómeno foi muito ampliado pelo facto de o minério ser bastante duro. As barras foram assim impedidas de seguir a trajectória mais correcta, ressaltando sobre os fragmentos e, pelo facto de o moinho ser demasiado curto, atravessavam-se quase inevitavelmente.

Enquanto Leite, M. (1984) detectou a ausência de ângulo mordente nos seus calcáreos para calibres compreendidos entre 25 mm e 15 mm, curiosamente, no nosso granodiorito o fenómeno manifestava-se ainda para o lote 15mm/8mm, embora as partículas sejam esquirolosas. Por isso, acreditamos que este efeito não-linear não tem a ver apenas com os calibres ou com a forma dos fragmentos, mas também com a resistência que o minério apresenta à fragmentação.

Quer isto dizer que, provavelmente, o factor que deve ser considerado relevante é o modo como os esforços compressivos se transferem das barras para as partículas, em relação ao qual o ângulo mordente deve ser considerado, no caso da moagem em moinho de barras, apenas como um aspecto parcial. Um minério frágil é menos sensível às deficiências na transmissão de esforços com-

Tabela 0.3: Alimentação do 2º moinho (464 mm. x 309.7 mm.)

Malhas (#)	(mm.)	Frac. gran. %	Cumu- lante infer.	Enchim. baixo (gr)	Enchim. alto (gr)
3/8"	9.5		100		
0.265"	6.7	51.66	48.34	1808.6	2842.1
4	4.75	16.07	32.27	562.5	883.9
6	3.35	6.01	26.26	210.1	330.2
8	2.36	3.44	22.82	120.5	189.4
12	1.70	2.65	20.17	92.9	146.0
16	1.18	2.00	18.17	70.1	110.2
20	0.85	1.96	16.21	68.2	107.2
30	0.600	1.67	14.54	58.3	91.6
40	0.425	2.22	12.32	77.7	122.1
50	0.300	2.24	10.08	78.3	123.0
70	0.212	2.14	7.94	75.0	117.9
100	0.150	1.81	6.13	63.4	99.6
140	0.106	1.72	4.41	60.0	94.3
200	0.075	1.28	3.13	44.9	70.6
270	0.053	0.71	2.42	24.7	38.8
-270	infra	2.41	0.01	84.8	133.3
Totais				3.500.0	5.500.2 (gr.)

pressivos que os minérios resistentes. Por isso, no primeiro caso, a deficiência de ângulo mordente que, ao fim e ao cabo, traduz o modo como a compressão se transmite, aparece a calibres mais graúdos que no segundo.

É por isso que, no granodiorito, e nas condições ensaiadas, o esmagamento efectuado pelas barras é pouco eficaz, predominando os efeitos de cisalhamento entre a superfície das barras e a das partículas, o que se traduz numa importante cominuição por abrasão.

Destes ensaios também ficou a impressão, confirmada mais

tarde, que os tempos de moagem utilizados eram demasiado curtos para o nosso granodiorito.

Para resolver o problema havia que tomar duas medidas complementares:

- recalcular a alimentação (Tab. 0.3), retirando o calibre 15/8 mm, que é o causador de problemas;
- projectar e mandar construir um moinho que não causasse problemas de perda de aderência e de atravessamento das barras.

3.5 O novo equipamento laboratorial

Assim se fez e o novo tambor, (dimensões internas: 464 mm de comprimento x 309.7 mm de diâmetro) foi construído na firma Alberto Guimarães e Co. (Porto), sendo-lhe acrescentada uma pista externa de borracha na EICHAP (S. João da Madeira) (Fig. 0.10).

Para lá das considerações relativas ao atrito com os rolos de borracha e ao atravessamento das barras, o novo moinho foi construído de modo a que, pela simples substituição da sua tampa de fundo, fosse possível utilizá-lo para os ensaios em contínuo, o que trazia consigo, desde logo, a vantagem de tornar possível a comparação da cinética batch com a cinética em contínuo.

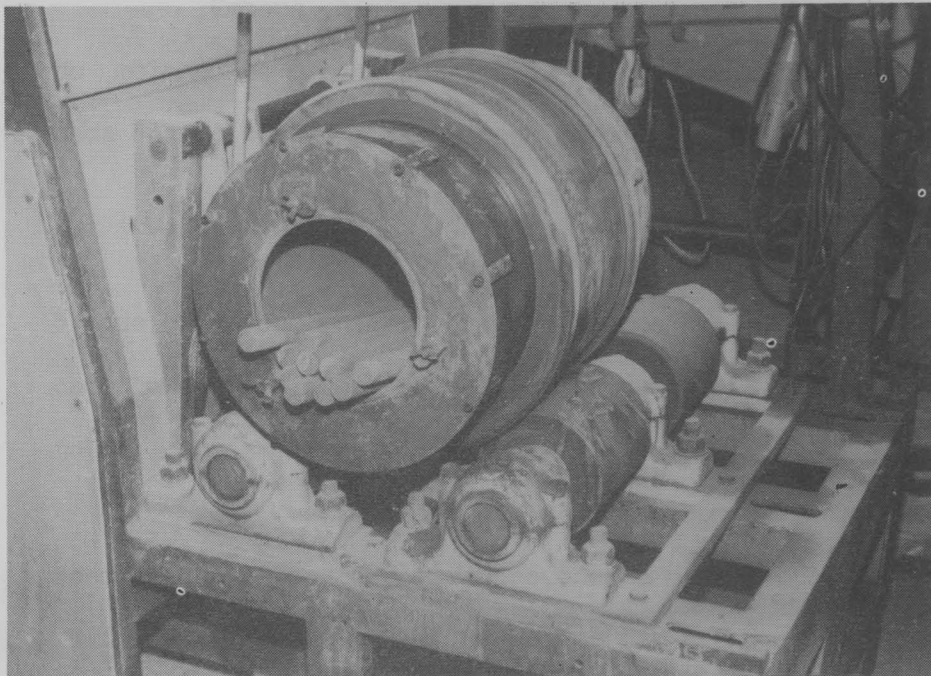


Fig. 0.10: O novo moinho

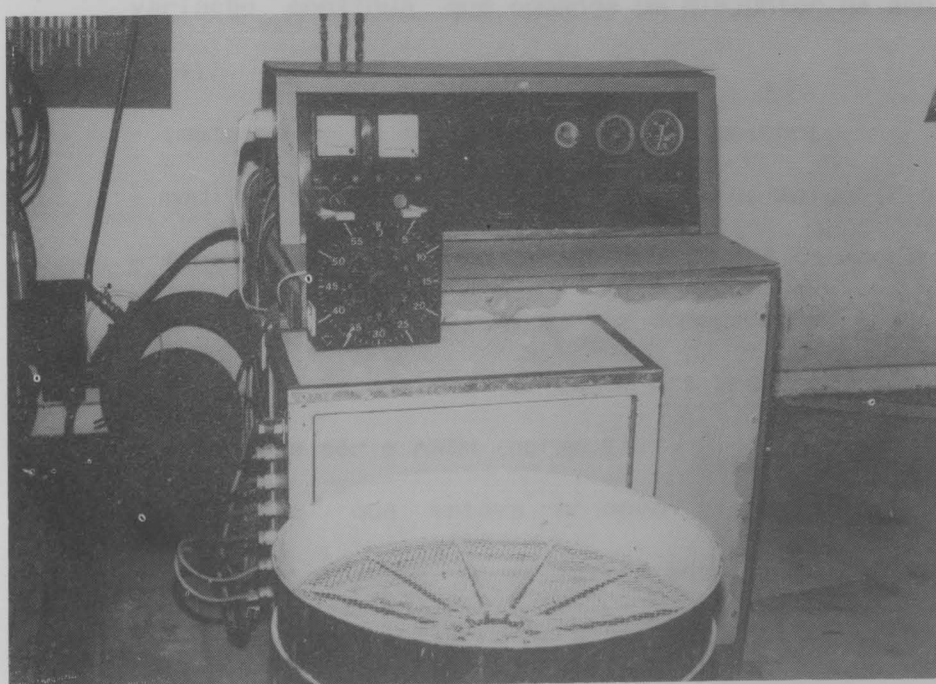


Fig. 0.11: Temporizador e dispositivo de descarga

Embora tivéssemos tido o cuidado de manter as dimensões do moinho no mínimo estrito, a quantidade de minério necessária a cada ensaio passou a ser a seguinte:

- enchimento baixo: 3500 gr,
- enchimento alto: 5 500 gr,

o que agravou muito, quer os tempos necessários à preparação de cada amostra, quer os da consequente análise granulométrica do moído, como se verá mais adiante.

Já que tinha que se interromper a marcha dos ensaios aproveitou-se o ensejo para proceder a mais alguns melhoramentos:

- o tempo de moagem, em vez de ser cronometrado à mão, passou a ser controlado automaticamente por um temporizador de variação contínua que comanda um disjuntor de arranque (Fig. 0.11);
- instalou-se um conta-revoluções no moinho;
- modificou-se o processo de descarga do moído (Fig. 0.11);
- foram adquiridas e montadas em molduras de madeira redes metálicas de tamizagem, de luz compreendida entre 0.265" e 3", passando assim a tamizagem dos grãos a ser feita segundo a série ASTM (norma E11).

Pronto que estava o novo dispositivo experimental, recomeçaram as moagens. Os primeiros ensaios serviram para afinar os tempos de residência e para aquilatar da existência de "colchão". Manteve-se a alimentação com finos naturais, embora corrigi-

da para evitar a falta de ângulo mordente e recalculada de modo a corresponder aos novos peneiros da série ASTM acima de 4 mesh (Anexo 0.4), bem como a configuração energética da moagem que já tinha sido utilizada nas moagens anteriores; apenas os tempos de residência foram aumentados para valores entre os 90 e os 360 seg.

3.6 Resultados dos ajustes

Como se pode ver na Fig. 0.9, não existem agora os problemas de baixa destruição, por ausência de ângulo mordente capaz, com que nos defrontávamos. No total, foram efectuadas doze moagens sucessivas, das quais oito (duas delas com tempos replicados) foram submetidas em conjunto, no computador Cyber 170/720 do Centro de Informática da Universidade do Porto, a um ajuste do programa NLINEAR de Leite, M. (1984), apenas com escudo. As curvas granulométricas das moagens simuladas e a sua comparação com os ensaios reais podem ser vistas no Anexo 0.4.

Durante os ajustes foram ensaiados vários valores de J_0 , obtendo-se o valor mais baixo da função objectivo para $J_0=7$ (Tab. 0.4A). Em seguida, mantendo este valor, foi introduzido na simulação o efeito de colchão, variando-se o valor de i_0 entre 3 e 13 (Tab. 0.4B). Repetiu-se o mesmo procedimento para $J_0=8$ (Tab. 0.4C). Deste conjunto de ensaios puderam tirar-se algumas conclusões.

Tabela 0.4A: Configuração de parâmetros ajustados pelo modelo não-linear para o granodiorito, barras grossas e enchimento baixo), sem parâmetro colchão.

Ensaio I			Programa "ESCOL"			Só com escudo				
J0	IO	F. Obj.	R. M.	PA	PK	PW	PG	Esc.	Col.	t0
3	--	750433.2	9.05	0.0179	0.4338	1.5931	229.2507	27.7529	--	31.89
4	--	39259.68	4.33	0.7171	1.3639	1.7877	209.1792	113.1039	--	135.98
5	--	146944.2	6.02	0.0172	0.4966	2.1927	855.8464	0.0602	--	27.51
6	--	158346.7	6.13	0.0173	0.5643	2.0905	627.298	0.0545	--	27.58
7	--	212283.7	6.6	0.0251	0.0079	1.0229	5.3162	3.5042	--	36.13
8	--	22344.47	3.76	0.0210	0.0728	2.0025	24.2926	1.7800	--	25.94
9	--	35762.60	4.23	0.0243	0.1607	1.4276	4.1201	5.9665	--	19.23

Tabela 0.4B: Configuração de parâmetros ajustados pelo modelo não-linear para o granodiorito, barras grossas e enchimento baixo), com parâmetro colchão.

Ensaio I			Programa "ESCOL"				Com Escudo e com Colchão			
J0	IO	F. Obj.	R. M.	PA	PK	PW	PG	Esc.	Col.	t0
7	--	212283.7	6.60	0.0251	0.00790	1.0229	5.3160	3.5042	0	36.13
7	3	212283.9	6.60	0.0251	0.00795	1.0231	5.3227	3.5118	0	36.15
7	5	212284.4	6.60	0.0252	0.00829	1.0233	5.3367	3.5116	0	36.15
7	7	212284.4	6.60	0.0251	0.00790	1.0231	5.3451	3.5080	0	36.14
7	9	212284.2	6.60	0.0251	0.00819	1.0230	5.3272	3.5045	0	36.15
7	11	212284.6	6.60	0.0252	0.00828	1.0229	5.3170	3.5070	0	36.15
7	13	212284.7	6.60	0.0251	0.00819	1.0231	5.3218	3.5069	0	36.13

Tabela 0.4C: Configuração de parâmetros ajustados pelo modelo não-linear para o granodiorito, barras grossas e enchimento baixo) , com parâmetro colchão.

Ensaio I				Programa "ESOL"			Com Escudo e com Colchão			
JO	IO	F. Obj.	R. M.	PA	PK	PW	PG	Esc.	Col.	to
8	--	22344.61	3.76	0.021	0.073	2.0042	24.383	1.7792	0	25.94
8	3	22344.65	3.76	0.021	0.0731	2.0041	24.376	1.7808	0	25.95
8	7	22344.56	3.76	0.021	0.0731	2.0042	24.383	1.7801	0	25.94
8	9	22344.61	3.76	0.021	0.073	2.0042	24.383	1.7792	0	25.94
8	10	22382.70	3.76	0.021	0.074	2.0059	24.463	1.7537	0	25.95
8	12	22344.73	3.76	0.021	0.078	2.0049	24.417	1.7769	0	25.92
8	13	22344.86	3.76	0.021	0.0727	2.0055	24.441	1.7747	0	25.90

F.Obj.- valor final da função objectivo

R. M.- resíduo médio por pesagem.

Em primeiro lugar, o valor mínimo da função objectivo que se obteve para o ajuste do modelo não-linear de Leite, M. (1984) é superior à maioria dos que este autor obteve com os minérios que ensaiou, sendo só ultrapassado pelo valor obtido por esse autor para a moagem não-linear da amostra de calcário CAN221 (Tab. 0.1), o que parece indicar que a resposta do modelo, no que se refere à moagem de materiais bastante resilientes, pode ainda ser melhorada significativamente.

Em segundo lugar, em todos os ajustes efectuados o valor do parâmetro colchão que se obteve foi invariavelmente zero, quaisquer que fossem os valores de i_0 e j_0 que se ensaiassem, sem que o valor do resíduo obtido diferisse significativamente dos que se verificaram nos ajustes só com colchão. Podemos dizer, portanto, que para a rocha ensaiada e nas condições experimentais seguidas, não se observou qualquer amortecimento da fragmentação dos grãos por acção dos finos, isto é, não se notou qualquer efeito de colchão.

Muito embora não existam ensaios de moagem do nosso minério em número suficiente para que possam ser comparados entre si, podemos, apesar de tudo, comparar os resultados que obtivemos com os de Leite M. (1984), que se apresentaram na Tabela 0.1.

Verificou-se, invariavelmente, que os valores de P_A (que, recordemos, correspondem à velocidade de destruição do lote mais grão) são muito mais baixos que os correspondentes de Leite, M.

(1984), quer para o caso do calcário, quer para o caso do xisto, o que, devido aos calibres que por nós foram utilizados, não se pode já atribuir a deficiência de ângulo mordente, mas, antes pelo contrário, à elevada resiliência do minério. Ao mesmo tempo, os valores de P_K são semelhantes aos da Tabela 0.1.

Enquanto que os valores encontrados para o parâmetro P_W são bastante semelhantes aos seus homólogos de Leite, M. (1984), pelo contrário, os valores de P_G são muito mais elevados, o que pode ser lido dizendo que a formação provoca o aparecimento directo de calibres mais finos, sem que, intermêdiamente, se formem quantidades importantes dos lotes contíguos aos que estão a desaparecer por fragmentação.

Em consequência, podemos dizer que o granodiorito que elegemos para nosso minério é uma rocha que, embora resistente à fragmentação, quando parte, esmilha-se, o que está de acordo com as observações que fizemos em relação à britagem (ver 0.3.3).

4. Redefinição de objectivos

A partir deste momento, porque, apesar das precauções tomadas, a capacidade do novo tambor aumentou bastante e, ainda, devido à necessidade adicional de determinar as composições granulométricas do material retirado do moinho, agudizou-se um problema que se vinha a sentir quase desde o início do trabalho: o dos tempos requeridos pela tamisagem(*).

4.1 O problema dos tempos de tamisagem

Já durante as análises granulométricas referidas em (0.3.3), se tinha notado que a cinética da peneiração do minério era bastante lenta. Nessa altura, para aquilatar dos tempos operatórios mais correctos foram feitos vários ensaios de tamisagem sobre o produto britado, tendo sempre como paradigma o critério de Taggart (1948) de determinação do ponto terminal da peneiração, que diz que: "a análise granulométrica executada num único peneiro deve considerar-se completa quando menos de 0.05% da massa original de partículas passar através do peneiro no es-

(*) Quando nos referirmos à separação por calibres, descontínua, efectuada em laboratório, utilizaremos sem distinção, os termos tamisagem e peneiração. Reservaremos a designação de crivagem para o processo industrial ou semi-industrial.

Tabela 0.5A: Variação do infracrivo para os peneiros de luz inferior a 3 mesh (Amostra L4).

Lotes granulométricos						
tempo (min.)	-4 #	-16 #	-20 #	-70 #	-100 #	-270 #
15	0.984	0.968	0.987	0.953	0.927	0.381
30	0.992	0.983	0.997	0.980	0.958	0.645
45	0.997	0.992	0.998	0.989	0.977	0.814
60	0.999	0.996	1.000	0.995	0.978	0.834
75	1.000	1.000	1.000	1.000	0.989	0.926
90	1.000	1.000	1.000	1.000	0.996	0.960
105	1.000	1.000	1.000	1.000	0.998	0.968
120	1.000	1.000	1.000	1.000	0.999	0.977
135	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

paço de um minuto".

Como é habitual proceder-se, dividimos os peneiros redondos da série ASTM E11, de luz inferior a 4 mesh em três grupos de cinco peneiros cada um: o primeiro de 4# a 16#, o segundo de 20# a 70# e o terceiro de 100# a 200#. Utilizando cada um destes conjuntos, fizemos tamisagens a tempos muito longos de uma amostra de granodiorito moído (amostra L4) num vibrador Retsch determinando, a cada 15 minutos, a massa de minério presente sobre cada peneiro (Anexo 0.5).

Pudemos assim estimar os tempos ao fim dos quais se poderia dizer que 99% da massa de partículas de infracrivo tinha passado através da malha dos tamises. Pode ver-se na Tabela 0.5A que tal acontece, para o primeiro grupo de peneiros, ao fim de 30

minutos, para o segundo ao fim de 45 e, finalmente, para o terceiro quase que se poderá dizer que a tamisagem estaria completa em 90 minutos.

Chegou-se assim à conclusão de que, para nos aproximarmos do critério de Taggart (1948), e carregando o primeiro conjunto de peneiros apenas com um máximo de 2000 gr de produto britado, seriam necessários, no mínimo, os tempos de peneiração que figuram na Tabela 0.5B. Permita-se-nos dizer, como comentário breve, que, se o critério fôr correcto, duas hipóteses se põem

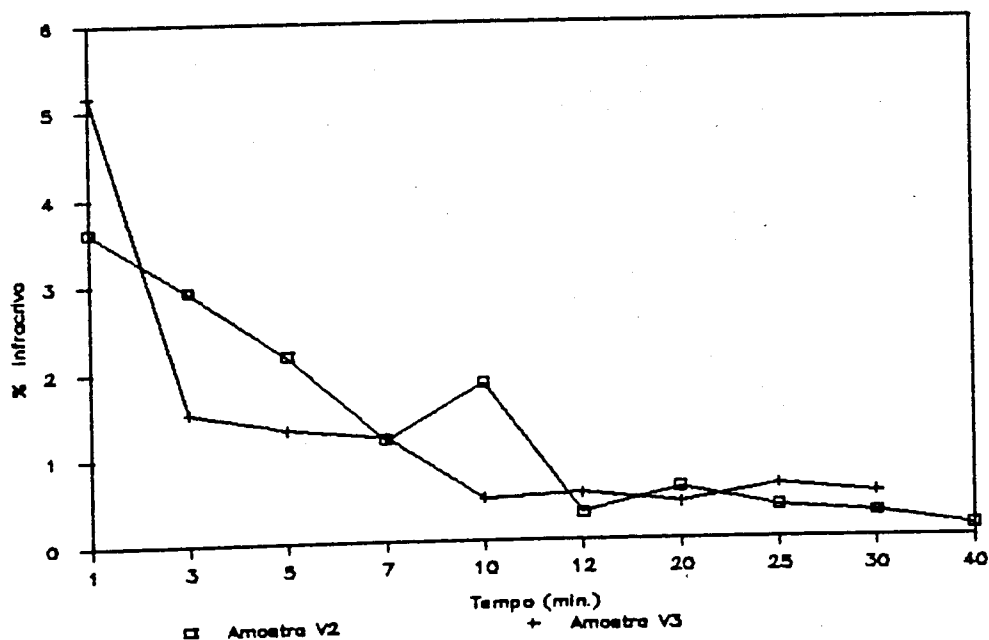


Fig 0.12: Ritmo de variação do infracrivo (luz > 4 mesh).

Tabela 0.5B: tempos de tamizagem estimados

Peneiros utilizados	Tempo de tamizagem
> 4#	20
4 # a 16 #	30
20 # a 70 #	45
100# a 400#	90

Tempo total= 2h:50 min.

quanto à maior parte do trabalho laboratorial que por esse mundo fora se faz: ou se peneira sem critério nenhum ou se passa o tempo todo a peneirar.

No que respeita às tamisagens em peneiros acima do nº4 (peneiros rectangulares com malhas metálicas de fabrico nacional), embora se tenham feito alguns ensaios que figuram no Anexo 0.6, existe um problema adicional: o da precisão das luzes. Como é evidente, não se pode exigir a um processo que fabrica em série malhas para fins industriais, que cumpra as especificações em vigor para a construção de peneiros laboratoriais. As variações máxima e média das luzes dos peneiros acima do nº 4 são sempre muito elevadas (o erro chega a atingir 13.4% da luz nominal e a sua média rondará os 10%), não permitindo a execução de ensaios de cinética de peneiração com rigor experimental suficiente.

Então não é de estranhar que o ritmo de passagem do infracrivo (percentagem/unidade de tempo) não seja monótonamente

decrecente (Fig. 0.12). Por isso, para lá destes ensaios preliminares, que nos permitiram estimar o tempo de tamisagem acima de 4 mesh em 20 minutos, não se voltaram a efectuar ensaios nestes peneiros.

Como a alimentação do moinho, pelos problemas de ausência de ângulo mordente, deve estar toda abaixo de 8 mm, necessitámos de peneirar, para a sua preparação, cerca de 10.5 kg de produto britado no caso do enchimento baixo e 16.5 kg no caso do enchimento alto, o que significa que os tempos necessários à preparação de cada carga do moinho (sem incluir tempos mortos para pesagem, limpeza dos peneiros, etc.), passariam a ser os que se indicam na Tabela 0.6.

Quanto à análise granulométrica do produto moído, se não se fizer amostragem e utilizando os mesmos tempos, mesmo sem levarmos em linha de conta que a quantidade de finos é agora muito maior, obtemos tempos de peneiração que chegam a 13 h 45 min., como se pode ver na Tabela 0.7.

Significa isto que apenas para preparar o material a moer nos 12 ensaios preliminares de moagem batch, seriam necessárias 1180 horas, enquanto que se lhe adicionarmos o tempo de análise granulométrica do moído o total chegaria a 2236 horas. Imagine-se então o que iria acontecer durante os ensaios de moagem contínua. Claramente não estávamos dispostos a ir por aí.

Tab 0.6: Tempos de preparação das amostras a moer

Preparação de amostra para moagem batch	Tempo de tamisagem
Enchimento baixo com finos naturais	9h 10 min.
Enchimento alto com finos naturais	15h 25 min.
Enchimento baixo, desenlameada(*)	5h 30 min.
Enchimento alto, desenlameada	9h

(*) - minério todo acima de 16 mesh.

Tab 0.7: Tempos necessários às análises granulométricas

Análise granulométrica do produto de moagem	Tempo de tamizagem
Enchimento baixo	8h 15 min.
Enchimento alto	13h 45 min.

4.2 Redefinição dos objectivos

Por isso, a primeira hipótese que pusemos foi a de que o critério de Taggart (1948) era excessivamente severo. Cabia-nos então a tarefa de tentar encontrar na literatura uma outra norma qualquer que nos permitisse, com fundamento, reduzir os tempos de tamisagem. Para nosso espanto a literatura técnica, embora teça uma teia de lamentações a propósito do assunto, é quase comple-

tamente omissa sobre o modo de o resolver. Por exemplo a especificação ASTM-276 diz que "a análise granulométrica se pode considerar como completa quando períodos adicionais de peneiração não produzem variações da massa inicial de partículas contida sobre o peneiro em mais de 3%". Visivelmente os redactores da norma não tinham o conceito da cinética do processo.

Uma outra possibilidade existia ainda: seria que as partículas que passavam ao infracrivo para tempos longos de tamisagem não resultariam da fragmentação por abrasão dos fragmentos mais grosseiros?

Para eliminarmos a dúvida adoptámos a seguinte rotina, utilizando todos os peneiros até 20 mesh:

1. "Scalping" do material durante 5 min. no peneiro imediatamente anterior ao que seria utilizado na tamisagem, de modo a eliminar todo o isocrivo;

2. peneiração sistemática, com determinação da variação da massa do conjunto peneiro+minério de 15 em 15 minutos.

Não se detectaram, por este processo, quaisquer fragmentações por abrasão para os peneiros de luz inferior a 4 mesh. Contudo, nos tamises montados em caixilhos de madeira, de luzes iguais ou superiores a 9.50 mm., notaram-se arredondamentos dos fragmentos mais graúdos, para tempos de peneiração longos, bem como perdas por abrasão (os finos produzidos eram, na sua larga maioria, constituídos por biotite).

Porém, as perdas em massa por fragmentação durante a tamisagem, medidas para tempos de residência de 2 horas e meia, nunca ultrapassaram, em qualquer circunstância, os 0.6% da massa total lançada sobre o peneiro. Note-se, contudo, que devido ao modo de construção dos peneiros, não podemos garantir que pelo menos uma parte deste material, não fosse constituída por finos que se soltassem das fendas das molduras. Um facto é certo: as perdas por abrasão não são nunca significativas, para as condições experimentais utilizadas e concentram-se, na sua totalidade, nas classes granulométricas acima de 4 mesh.

Encontrávamo-nos assim perante um dilema: diminuir aos tempos de peneiração para tornar possível o trabalho sobre a moagem sem minorar a precisão experimental.

Já que não parecia possível à primeira vista qualquer redução significativa nos tempos de preparação das amostras a moer, os nossos esforços centraram-se na obtenção de um método que, pelo menos, pudesse reduzir os tempos da análise granulométrica do produto moído.

Para esse fim, resolvemos fazer uma derivação, que se julgava temporária, no plano original do trabalho e construir um modelo fenomenológico simples da tamisagem..

"Si le monde tends vers l'uniformité ce n'est pas parce que ses parties ultimes, d'abord dissemblables, tendent à devenir de moins en moins différentes, c'est parce que, en se déplaçant au hasard, elles finissent pour se mélanger. Pour un oeil qui distinguerait tous les éléments, la variété resterait toujours aussi grande; chaque grain de cette poussière conserve son originalité et ne se modèle pas sur ses voisins; mais comme le mélange devient de plus en plus intime, nos sens grossiers n'aperçoivent plus que l'uniformité".

Henri Poincaré (1909): La valeur de la science.

1. OBJECTO E METODO

O Universo é feito essencialmente de coisa nenhuma.
Intervalos, distâncias, buracos, porosidade etérea.
Espaço vazio, em suma.
O resto é a matéria.

Daí que este arrepio,
este chamá-lo e tê-lo, esquecê-lo e defrontá-lo,
esta fresta de nada aberta no vazio,
deva ser um intervalo.

Antônio Gedeão (1961): Máquina de fogo

1. Exórdio

Para vencer as dificuldades que decorreram do facto de os raciocínios próprios da Preparação de Minérios me serem, no início do trabalho, largamente estranhos, foi-me fundamental estabelecer os fundamentos epistemológicos do trabalho que estava a realizar ou, como se diz correntemente em psicanálise, racionalizar a crise, integrando os conceitos tecnológicos que me eram estranhos num conceito teórico que já possuía.

São estas as razões circunstanciais do aparecimento do presente capítulo e não, talvez contra todas as aparências, a

pretensão de fazer um pouco a gnoseologia da Preparação de Minérios, objectivo que para mim sinto como ambicioso em excesso. Daí resultou esta olhadela de pássaro, obrigatoriamente "de lado, como olham as aves".

2. OBJECTO: Os sistemas particulados

Tanto na natureza como na indústria estamos em cada momento a deparar com massas de partículas, mais ou menos semelhantes entre si, que se submetem conjuntamente a processos de transformação. Basta que nos lembremos da carga sólida transportada pelos rios ou dos múltiplos pós de que a indústria farmacêutica tão bem vive. São também conjuntos de grãos minerais que devemos processar no caso que nos é mais familiar, o Tratamento de Minérios, e é deles que vamos tratar, muito embora a larga maioria dos raciocínios que se seguem, ressalvando as respectivas adaptações, tenham uma aplicabilidade muito mais lata.

Na definição de Madureira (1985) podemos, com toda a propriedade, chamar a esses conjuntos de grãos minerais, quer sistemas particulados, quer populações de partículas. A primeira designação põe em realce o facto de as partículas competirem ou cooperarem entre si quando submetidas a um qualquer processo colectivo de transformação, enquanto que o apodo de população realça o carácter variável das propriedades e do comportamento dos constituintes individuais do conjunto. Isto significa, em ambos os sentidos, que o comportamento de cada um dos elementos do conjunto é ditado, não só pelas suas propriedades particula-

res(*), mas também pelo modo como elas se distribuem pelos seus vizinhos.

Se estamos interessados em estudar o comportamento colectivo de uma população (finita ou infinita) constituída por n grãos minerais em face de um processo tecnológico, necessitamos descrever de modo tão completo quanto possível, as características colectivas das partículas que consideramos importantes em relação ao dito processo.

Do ponto de vista estatístico, a escolha ao acaso de um dos elementos dessa população, é uma operação que permite definir uma variável aleatória multidimensional, com tantas dimensões quantas as propriedades das partículas relevantes para o fim que temos em vista.

Desde já devemos fazer a distinção entre as propriedades definíveis unívocamente (pelo menos em princípio) para cada partícula, através de uma determinação empírica simples, como a massa m_i , a densidade d_i , o volume v_i e as outras, cuja definição, frequentemente por conter elementos subjectivos, é ambígua, como é o caso da forma e do tamanho.

Numa classe à parte, podemos colocar as propriedades ditas tecnológicas que, sendo definidas através de normas de ensaio mais ou menos rígidas, embora não percam totalmente a am-

(*) particular $\equiv$ das partículas

biguidade, vêm-na suficientemente atenuada para permitir a sua determinação e utilização na prática corrente, como é o caso do calibre, seja ele definido por tamisagem, por técnicas de sedimentação, ou por qualquer outro processo.

Esta propriedade puramente geométrica que é o calibre, apesar das dificuldades que existem quanto à sua determinação, tem para nós a maior importância. Por um lado, já que representa as dimensões das partículas, dá indicações directas sobre o modo como decorre a cominuição; por outro lado, embora indirectamente, através das suas ligações ao "grau de libertação" do minério, informa da adequação deste aos diferentes métodos de separação.

Por estas razões, e ainda pelo facto de o equipamento utilizado ser comparativamente barato e fácil de utilizar (e os fenómenos subjacentes serem ilusoriamente simples), a tamisagem é o método universalmente aceite para estabelecer as distribuições granulométricas das populações.

2.1 Conceito de calibre: dificuldade da sua definição(*)

Ao conceito de classificação por equivalência no seio um fluido que se sabe que depende das propriedades volume, teor,

(*) Note-se, a propósito, como é curioso o facto de a palavra calibre (do árabe Kálīb) se adequar muito melhor à descrição da

e forma das partículas, é habitual opôr-se o conceito de classificação dimensional, ou tamisagem, ao qual, regra geral, só se associa a propriedade tamanho ou dimensão. Mas os grãos minerais são de tal modo irregulares que, pela impossibilidade de atribuir de modo inequívoco e expedito a cada partícula uma dimensão característica, qualquer processo de classificação dimensional terá forçosamente que envolver não só a propriedade tamanho, como a propriedade forma (para a qual, pelo menos de momento, não dispomos de nenhum descritor escalar, ou vectorial de baixa dimensionalidade, que seja mínimamente capaz).

Para ultrapassar este impasse seria razoavelmente lógico que, para o estabelecimento das distribuições granulométricas se utilizasse como variável de referência quer o volume, quer a massa (no caso de partículas monofásicas e com porosidade bem determinada) dos elementos da população. Contudo, a utilização destas variáveis pressupõe a execução de medidas partícula a partícula o que, se já seria uma tarefa árdua para as maiores dentre elas, tornar-se-ia impraticável para as mais finas. O mesmo se passa com o esquema formal que Bastenaire (1965) concebeu para caracterizar a propriedade calibre. Este autor, para o estabelecimento dos raciocínios teóricos que se abordarão em

propriedade do que a designação anglo-saxônica "size" (= tamanho, dimensão), por implicar a comparação da partícula com um estalão e a sua subsequente colocação numa dada categoria.

em (1.2.3), definiu unívocamente o calibre de uma partícula como o diâmetro do orifício circular mínimo através do qual ela ainda pode passar.

Esta impossibilidade manifesta deve-se, uma vez mais, ao facto de (como veremos mais adiante em 1.2.3, 1.2.4 e 1.3.1) estarmos a lidar com populações e com as suas distribuições de propriedades e, em consequência, qualquer método de análise das propriedades colectivas dos grãos minerais dever ser um processo colectivo que analise o comportamento do conjunto face a um certo processo de separação.

Tal é o caso da tamisagem que efectua, através de um processo colectivo de índole estocástica, em que intervêm as dimensões e a forma dos grãos, uma partição da população em várias classes limitadas por dois valores numéricos: os calibres superior e inferior da fracção (habitualmente cada classe granulométrica é designada apenas pela malha do peneiro que a retém). As peculiaridades deste método laboratorial serão referidas no Capítulo 2.

Adiantemos apenas que a tamisagem é um verdadeiro método de análise granulométrica em que, tal como em qualquer método de análise química, predominam os conceitos de qualidade da separação. No entanto distingue-se dos métodos de análise química por várias características (Madureira 1985), a saber:

- reporta-se a uma propriedade de variação contínua (o cali-

bre) e não de variação booleana (presença ou ausência de dada espécie química);

- pode praticar-se não-destrutivamente sobre sistemas particulados;
- presta-se extremamente mal a aplicações analíticas em contínuo, isto é, do tipo "on line".

2.2 Repartições de calibres(*): significado e limites

Consideremos uma amostra constituída por N grãos minerais com volume total V e massa total M . Façamos sobre ela uma análise granulométrica por tamisagem utilizando um conjunto de nc peneiros cujas luzes nominais são os elementos do vector $\phi \equiv \{\phi_1, \dots, \phi_i, \dots, \phi_{nc}\}^T$. Medindo a quantidade de material que passa em cada um dos tamises da pilha e é retida no peneiro seguinte, e considerando ϕ_i como sendo a luz nominal do peneiro que detém a fracção granulométrica em causa, podemos descrever cada uma das nl fracções ($nl=nc+1$) em que a população fica dividida sob a forma de:

- nº de partículas: $N(\phi_i)$,
- volume das partículas: $V(\phi_i)$,

(*) na abordagem ingênua tradicional

- massa das partículas: $M(\phi_i)$, $(i=1, 2, \dots, n)$

valores que podemos agrupar nos vectores N , V e M .

Com os valores obtidos constroem-se tabelas, (Tab. 1.1) que vão servir de base a posteriores representações gráficas.

A partir destes dados empíricos podemos definir as funções cumulantes da repartição de calibres:

$$\text{- em número: } F_N(\phi) = N(\phi)/N \quad [1.1]$$

$$\text{- em volume: } F_V(\phi) = V(\phi)/V \quad [1.2]$$

$$\text{- em massa : } F_M(\phi) = M(\phi)/M \quad [1.3]$$

onde N , V , M , são, respectivamente, o número o volume e a massa do total da amostra.

Como as determinações em volume ou em número de partículas se tornam difíceis, ou mesmo impraticáveis, as distribuições granulométricas são quase sempre descritas em massa de partículas. Por isso daqui em diante, salvo indicação expressa em contrário, apenas utilizaremos descrições em massa.

Das funções cumulantes conhecemos apenas um número limitado de valores $F \equiv \{F(\phi_1), \dots, F(\phi_n)\}^T$, $(i=1, \dots, n)$ que correspondem aos calibres de corte executados pela tamisagem. Se sobre estes valores efectuarmos uma interpolação pelo ajuste de uma função analítica, que derivamos em seguida, podemos obter as funções densidade de repartição de calibre em massa de partículas

$$f(\phi_i) = dF(\phi_i)/d\phi_i \quad (i=1, \dots, n). \quad [1.4]$$

Tabela 1.1: Alimentação de um moinho de barras

Malhas (#)	(mm.)	Frac. gran. %	Cumu- lante sup.	Cumu- lante inf.	Massa (gr)
20	20.0			100.00	
15	15.0	28.79	28.79	71.21	597.8
8	8.0	37.79	66.58	33.42	784.6
4	4.75	11.82	78.40	21.60	245.4
6	3.35	2.72	81.12	18.88	56.4
8	2.36	2.28	83.40	16.60	47.4
12	1.700	1.189	84.59	15.41	39.2
16	1.18	1.69	86.98	13.02	35.2
20	0.85	1.40	88.38	11.62	29.0
30	0.600	1.18	89.56	10.44	24.4
40	0.425	1.10	90.66	9.34	22.8
50	0.300	1.61	92.27	7.73	33.4
70	0.212	2.17	94.44	5.56	45.0
100	0.150	1.34	95.78	4.22	27.8
140	0.106	0.91	96.69	3.31	18.8
200	0.075	0.96	97.65	2.35	20.0
270	0.053	0.57	98.22	1.78	11.8
-270	infra	1.78	100.00	— — —	36.8

Mas a forma analítica da função interpoladora é livremente arbitrada porque, para lá de depender dos pontos-ancoragem da interpolação, depende também do método numérico utilizado, o que significa que nem sequer podemos garantir que a sua derivada coincida com a função densidade (dada por [1.4]) nos pontos $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$. Como ainda por cima não temos quaisquer indicações seguras sobre a forma analítica que a curva cumulante toma, não nos é possível utilizar o conceito de densidade de repartição de ca-
libres, que abandonaremos em favor do de composição granulométrica

trica que é definida no universo dos calibres do seguinte modo:

$$f_i = \int_{\phi_i}^{\phi_{i-1}} f(\phi) d\phi = F(\phi_{i-1}) - F(\phi_i) = \Delta F(\phi_i). \quad [1.5]$$

(i = 1, 2, ..., n)

Agruparemos estes valores sob a forma de um vector $f \equiv \{f_1, \dots, f_n\}^T$ a que chamaremos composição granulométrica.

Os raciocínios anteriores traduzem-se no facto de a cumulante da repartição granulométrica ser a única função representável graficamente (Fig. 1.1) e apenas sob a forma de uma interpolação efectuada sobre os pontos amostrais de ϕ (o vector das luzes nominais dos peneiros).

Quanto à curva diferencial, está-nos vedado o seu conhecimento no interior de todos os intervalos granulométricos. Contudo, invocando o Axioma de Bayes, podemos perfeitamente postular que a função densidade é uniforme dentro de cada intervalo. Então, e aplicando o segundo teorema da média,

$$f_i = \int_{\phi_i}^{\phi_{i-1}} f(\phi) d(\phi) = C_i \int_{\phi_i}^{\phi_{i-1}} d(\phi) = C_i (\phi_{i-1} - \phi_i) \quad [1.6]$$

com

$$C_i = f_i / (\phi_{i-1} - \phi_i), \quad [1.7]$$

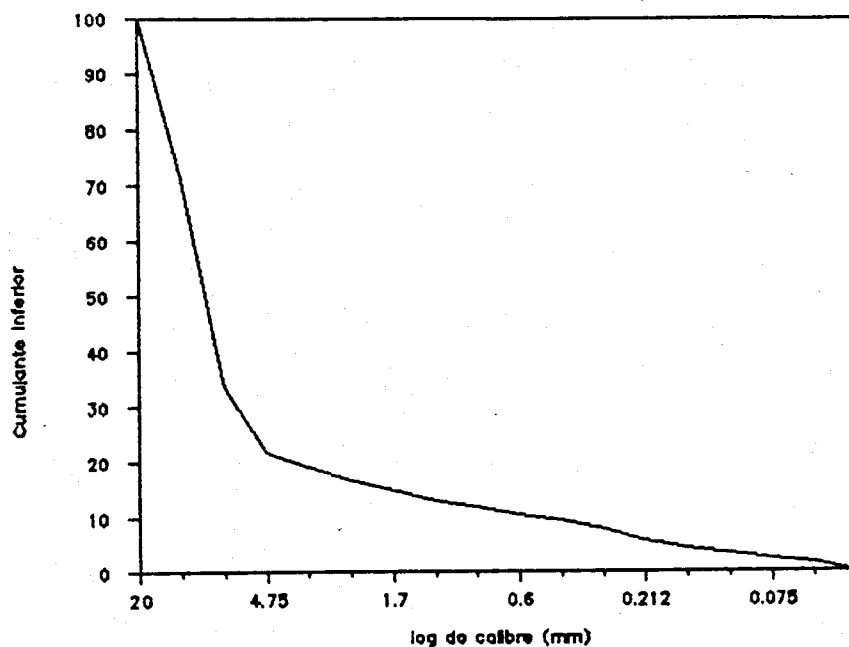


Fig. 1.2: Representação em cumulante (dados da Tab. 1.1)

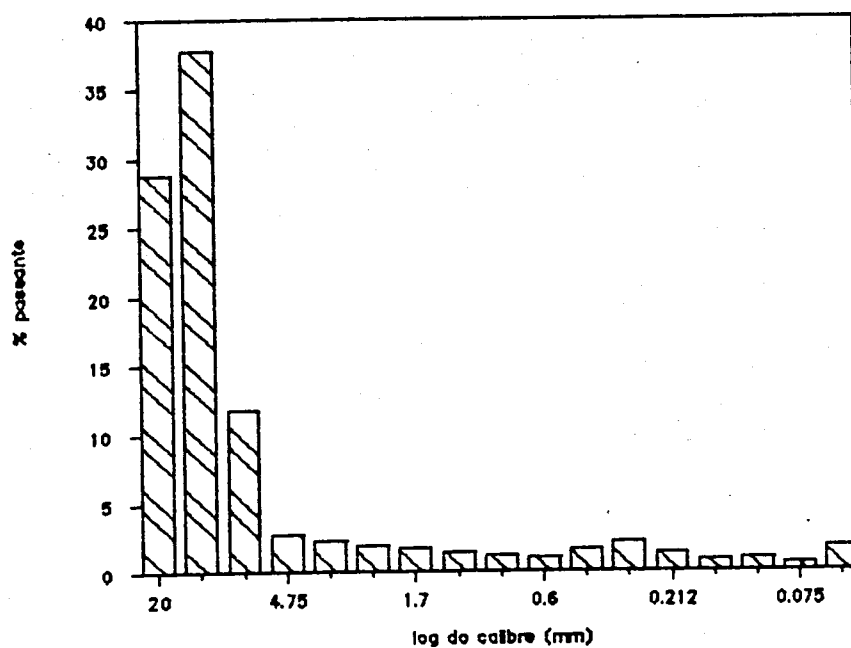


Fig. 1.2: Representação em histograma (dados da Tab. 1.1)

ou seja, com:

$$C = \{c_i\} \equiv M; \quad [1.8]$$

isto é, trata-se do vector das fracções granulométricas. Gráficamente, isto traduz-se nos omnipresentes histogramas (Fig. 1.2)

2.3 O formalismo de Bastenaire

Vamos analisar as funções densidade $f(\phi)$ e cumulante $F(\phi)$ da repartição de calibres, definidas sobre o conceito empírico de análise granulométrica, de um modo muito mais fecundo, através do conceito de ponto amostral que se deve a Bastenaire (1965). Para esse fim lançemos ao acaso na população cujas propriedades de conjunto pretendemos descrever um ponto imaginário P_B (ponto de Bastenaire) com probabilidade uniformemente repartida no volume total da população V . A probabilidade de ele se encontrar na partícula p_i (com volume v_i , massa m_i e calibre ϕ_i) é dada por

$$\text{Prob } [P_B \in p_i] = v_i/V, \quad [1.9]$$

de modo que a escolha aleatória de uma partícula obtida por este processo amostral é proporcional ao volume da partícula. Utilizando o axioma da probabilidade total, tira-se imediatamente que

a probabilidade de que o ponto tenha caído sobre uma partícula de calibre inferior a ϕ^* é dada por:

$$\text{Prob } [P \in p_i : \phi < \phi^*] = \sum_{\phi_i < \phi^*} v_i / V = F_V(\phi). \quad [1.10]$$

Esta probabilidade coincide, qualquer que seja o calibre considerado ϕ^* , com a cumulante em volume da distribuição granulométrica.

Se, em vez de o ponto de Bastenaire ser lançado com probabilidade uniformemente distribuída em volume, fosse lançado com probabilidade uniformemente distribuída na massa total M do sistema particulado, obteríamos do mesmo modo

$$\text{Prob } [P \in p_i : \phi < \phi^*] = \sum_{\phi_i < \phi^*} m_i / M = F_M(\phi), \quad [1.11]$$

valor que coincide com a cumulante ponderal da distribuição granulométrica.

Põe-se assim em evidência o carácter aleatório das distribuições granulométricas das populações de partículas, através da definição puramente formal de variáveis aleatórias que com elas coincidem, o que pode levar a pensar que a coincidência encontrada é falaciosa. Por isso é necessário mostrar que os processos físicos que levam à produção de conjuntos de partículas são, eles próprios, geradores da incerteza que se vai reflectir no carácter estocástico das distribuições das propriedades

particulares. Para esse fim vamos utilizar o ponto de Bastenaire, não apenas como artifício amostral, mas também como marcador, o que nos vai permitir seguir a evolução da população de grãos minerais durante a cominuição.

2.4 A cominuição: processo de Markov de 1ª ordem

Tomemos o material que constitui o sistema particulado num instante t_0 , a que corresponde um dos seus estádios iniciais de divisão. Lançemos sobre esse conjunto de n partículas o ponto de Bastenaire com probabilidade uniformemente distribuída no volume total da população $V = \sum v_i$ ($i = 1, \dots, n$). Seja p_i , com calibre ϕ_i e volume v_i , a partícula onde ele caiu.

Consideremos agora o sistema num estágio ulterior de cominuição ou seja, no instante t_1 . Provavelmente p_i fragmentou-se, dando origem a m "filhas". Seja p_{ki} , com calibre ϕ_{ki} e volume v_{ki} ($i = 1, \dots, n$; $k = 1, \dots, m$) a "partícula-descendente" de p_i onde agora se encontra o marcador de Bastenaire, tal que se verifica

$$\sum_{k=1}^m v_{ki} = v_i \quad [1.12]$$

Chamemos $\underline{A}$ ao evento composto do lançamento do ponto de Bastenaire e da ulterior fragmentação a que as partículas p_i foram sujeitas. A probabilidade, condicionada ao acontecimento A , de que o calibre da partícula que contém o marcador seja inferior a ϕ^* , é dada por

$$\text{Prob} [(P \in p_{ki} : \phi_{ki} < \phi^*) | A] = \sum_{k: \phi_{ki} < \phi^*} v_{ki} / v_i = \quad [1.13]$$

$$= F(\phi | A), \quad [1.14]$$

onde $F(\phi | A)$ representa a cumulante inferior dos calibres, condicionada ao acontecimento A . Como a probabilidade de um acontecimento é igual à esperança matemática da sua probabilidade condicional, tomada sobre o total dos acontecimentos condicionantes, podemos escrever:

$$\text{Prob} [P \in p_{ki} : \phi_{ki} < \phi^*] = E \left[\text{Prob} [(P \in p_{ki} : \phi_{ki} < \phi^*) | A] \right] = \quad [1.15]$$

$$= \sum_{k: \phi_{ki} < \phi^*} \frac{v_{ki}}{v_k} \cdot \text{Prob} [A] \quad [1.16]$$

Como

$$\text{Prob} [A] = \text{Prob} [P \in p_i] = v_i / V, \quad [1.17]$$

vem:

$$\text{Prob} [P \in p : \phi_{ki} < \phi^*] = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m \frac{v_{ki}}{v_i} \frac{v_i}{v} = \quad [1.18]$$

$$= \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^m \frac{v_{ki}}{v} = \quad [1.19]$$

$$= \sum_{i=1}^n \frac{v_i}{v} = F_v(\phi). \quad [1.20]$$

Confirma-se assim que a natureza aleatória da distribuição de calibres se deve ao processo evolutivo a que a população está sujeita. A este propósito, a análise da expressão [1.16] mostra claramente que a repartição granulométrica em volume num estágio qualquer da fragmentação depende:

- da distribuição granulométrica volúmica do estágio anteriormente considerado, o que é o mesmo que dizer que a fragmentação é um processo de Markov de 1ª ordem;
- do modo como se processa a fragmentação, dado que depende do evento A.

Tudo que foi dito pode, sem dificuldades de maior, ser transposto para a repartição dos calibres em massa, que é a que habitualmente é utilizada, bem como para qualquer outra distribuição que possa ser unívocamente definida em relação à população de partículas.

Pelo modo como o ponto de Bastenaire foi definido parece que nos remetemos de novo ao velho problema da amostragem

das propriedades particulares, isto é, que em cada estágio de cominuição abandonamos a descrição do sistema para seguir apenas uma partícula. Tal não é o caso, dado que, pelo modo como o ponto marcador foi definido, ele pertence, em média, um pouco a cada partícula do sistema. Permite, portanto, definir o estágio de evolução do sistema durante a cominuição.

Este conceito do ponto de Bastenaire, entendido como marcador da população, é de tal modo profícuo que permitiu a Madureira, C. e Regueiras, P. (1972) o estabelecimento da equação fundamental da fragmentação.

2.5 Equação prospectiva da fragmentação

Tomemos as densidades da repartição granulométrica $f(\phi_i, t_0)$ e $f(\phi_{ki}, t_1)$ da nossa população uma, tomada no instante em que o ponto de Bastenaire foi lançado e a outra, quando foi feita a análise do resultado da fragmentação. Pela definição de processo markoviano de 1ª ordem, a segunda depende da primeira, pelo que é legítimo falar em probabilidades condicionais do tipo

$$P(\phi_{ki}, t_1 | \phi_i, t_0) \quad [1.21]$$

que exprime a probabilidade de encontrar, no instante t_1 uma partícula de calibre ϕ_{ki} , proveniente da fragmentação de uma

outra, que no instante t_0 tinha o calibre ϕ_i .

Em termos de densidade de repartição granulométrica, e com o tempo expresso explicitamente, a expressão [1.21], passa a ter a formulação

$$f(\phi_{ki}, t) = \int_0^{\infty} P(\phi_{ki}, t | \phi_i, t_0) \cdot f(\phi_i, t_0) \cdot d\phi_i \quad [1.22]$$

Trata-se do que em teoria dos processos estocásticos é conhecido por equação prospectiva de Chapman-Kolmogorov-Smirnov e que, em Preparação de Minérios se pode designar por equação fundamental da fragmentação, que nos diz que basta conhecer a distribuição granulométrica no instante t_0 e a lei da fragmentação para podermos prever o estado futuro do sistema particulado. Há a notar três pontos de particular importância no que se refere a esta equação:

1. como foi contruída através de uma análise puramente formal, é válida qualquer que seja o processo de fragmentação considerado;
2. dado que as composições granulométricas foram definidas como densidades de probabilidade, a previsão que a equação proporciona assume sempre um carácter estocástico;
3. conjuntamente com o segundo ponto, como o tempo aparece como um factor explícito, a expressão afirma que a frag-

mentação pode ser lida como a evolução no tempo de uma população de partículas. Vamos analisar de seguida este conceito.

2.6 A cominuição: processo irreversível

A nossa incerteza quanto à localização do ponto de Bastenaire vai aumentando quando aumenta o estado de divisão da população, o que é o mesmo que dizer que se vai perdendo informação à medida que a cominuição prossegue. Bastará lembrarmo-nos que, se tivermos no instante $t=0$ apenas um fragmento, só precisaremos de fazer uma determinação para termos o sistema definido sob o ponto de vista do calibre; num estágio posterior de divisão seremos obrigados a incontáveis determinações individuais.

Passando estes factos de observação simples para a linguagem da Termodinâmica, diremos que, com o aumento do número de partículas causado pela cominuição, vai aumentando também o número de configurações possíveis para o sistema, ou que, a entropia do sistema particulado aumenta com o grau de fragmentação. Trata-se, portanto, de um processo irreversível, mesmo no sentido mezinho do termo que é dado pelo facto de já não ser possível a reconstituição da forma primitiva de um conjunto de partículas que é passado por um britador.

Daqui decorre que as transformações que executamos so-

bre os fragmentos não são invariantes em relação ao tempo e, por isso, pode-se dizer que os sistemas particulados, no que concerne as operações da Preparação de Minérios, são sistemas em evolução, o que se deve reflectir em todas as distribuições das suas propriedades características: calibre, teor, propriedades superficiais, volume, massa,

2.7 Os limites da descrição dinâmica

Se compararmos em detalhe o processo de fragmentação que se desenvolve em duas máquinas distintas, alimentadas ao mesmo ritmo, com uma mesma composição granulométrica, retirada do mesmo afloramento rochoso, verificaremos que, após um curto período de tempo de transformação (ainda que seja apenas o tempo de residência dentro de um fragmentador primário), as duas populações resultantes passarão a diferir substancialmente, mesmo que só consideremos o seu aspecto macroscópico. Essa diferença acentuar-se-á cada vez mais à medida que o tempo total de transformação (que é o somatório de todos os tempos médios de residência nas diferentes máquinas que constituem a nossa instalação de fragmentação) vai passando.

Mas existe aqui uma contradição fundamental: é que as

leis gerais que regem estes processos tecnológicos são as da Mecânica Clássica e entre as suas características não cabe a indeterminação que, provou-se atrás, é uma consequência lógica da fragmentação.

Na verdade, as equações da Mecânica Clássica são invariantes em relação ao tempo e, nessas circunstâncias, dado um sistema físico qualquer, desde que conheçamos com exactidão suficiente as condições iniciais e as equações descritoras do processo de transformação, podemos sempre determinar tanto o seu estado futuro, como o seu estado passado; o Universo é determinístico.

Deste princípio é paradigma a célebre afirmação de Laplace (1776):

"O estado presente do sistema da natureza é, evidentemente, uma consequência do que era no momento precedente e, se concebermos uma inteligência que, num dado instante consiga abranger todas as relações entre as entidades do Universo, ela conseguirá conceber as respectivas posições, movimentos e relações gerais de todas essas entidades em qualquer momento do passado e do futuro."

Como Bergson, entre outros, sublinhou, as transformações que a Mecânica Clássica propõe não são senão um desmentido

da evolução e o tempo passa, na sua descrição, a ser um simples parâmetro de escala. A dinâmica de Newton e os trabalhos dos seus grandes sucessores dão-nos a imagem coerente de um mundo estável, mundo que escapa aos processos da evolução. Quase por definição, relega-se para a classe dos pseudo-problemas todas as questões às quais a Dinâmica clássica não consegue dar resposta. O objectivo principal da Física, nesta óptica, não é senão a descrição de um nível microscópico ao qual a dinâmica possa ser aplicada e que sirva de base à explicação de todos os fenómenos observáveis. Sob este ponto de vista a mecânica clássica reedita os atomistas primitivos: "Não há senão átomos e o vazio".

Imbuídos deste mesmo "orgulho científico", a maior parte dos técnicos ligados ao Tratamento de Minérios acreditava (e em larga maioria continua hoje a acreditar) que, com base nas curvas características dos aparelhos e dado o conhecimento do minério obtido através dos ensaios laboratoriais, é sempre possível fazer uma previsão correcta do comportamento do minério na lavaria industrial. Mesmo quando os cálculos lhes saem furados, atribuem o facto à falta de pormenor descritivo, quer dos processos de transformação (os métodos de tratamento), quer das condições iniciais (as características do minério).

Esta última ideia, tão divulgada, leva a acreditar que, pela simples passagem da observação macroscópica para o detalhe do universo microscópico, quer no parâmetro tempo, quer nas

coordenadas espaciais, poderemos obter uma visão mais completa dos fenómenos envolvidos e, por isso mesmo uma descrição mais exacta dos processos e dos minérios. Poderíamos assim, com o "avanço da ciência", aproximarmo-nos do desiderato final, que é a previsão sem limite de tempo.

Assim se compreende a construção de aparelhos de separação em material transparente, para que se conseguisse observar os fluxos de material no seu interior. Este refinamento da observação permitiria, em tempo devido, aceder à essência dos fenómenos.

Pensamos que ficou patente, de modo claro, que este tipo de abordagem, por não considerar o carácter intrinsecamente estatístico dos sistemas de partículas que impedem a total previsibilidade dos fenómenos, não serve os nossos propósitos.

2.8 Evolução no tempo de uma população de partículas

A que se deve então a variabilidade incontornável que observamos na fragmentação, que habitualmente consideramos que se baseia apenas nos processos, ditos determinísticos, da Mecânica Newtoniana?

Existem duas ordens de razões para explicar este facto que se ligam, umas, com a determinação das condições iniciais e

outras, com as características da própria cominuição.

Em primeiro lugar, mesmo que os sistemas com que trabalhamos fôssem de mais fácil descrição, existiria sempre um limite finito para a precisão dos nossos processos de medida. No caso dos sistemas particulados a dificuldade é incomparavelmente maior, porque nos restringimos a determinações colectivas que não conseguem apreender as flutuações das propriedades particulares. Para nos assegurarmos da veracidade desta afirmação basta que recordemos a infinidade de aspectos texturais que mesmo as mais simples paragêneses apresentam (Bromley, 1986).

Em segundo lugar, mesmo que pudéssemos determinar com precisão infinita as nossas condições iniciais, no que respeita às propriedades relevantes da alimentação, temos ainda que lidar com os pequenos acontecimentos fortuitos que ocorrem em sucessão e que levam as incertezas a crescer tão rapidamente que ao fim de pouco tempo os seus efeitos já sejam do domínio do macroscópico.

Consideremos um fragmentador de maxilas (para que resultem minimizados os aspectos colectivos da cominuição) e suponhamos, por hipótese, que duas partículas exactamente iguais entram nele exactamente no mesmo instante. Bastará, por exemplo, que o ângulo de entrada difira num infinitésimo de arco para que as "partículas-filhas" que delas resultam já não possam ser exactamente iguais.

A entrada das partículas no fragmentador, o movimento

da maxila e o próprio processo de fragmentação, são a parte do processo que obedece a leis perfeitamente determinadas; os minúsculos acasos que são o choque dos fragmentos minerais entre si, o tempo diferido de entrada e um sem número de possibilidades de variação, introduzem o aspecto estocástico que se traduz pelo aparecimento de bifurcações (bifurcação: existência de uma solução múltipla das variáveis definidoras do sistema para certos valores críticos), isto é, aparece num dado instante, mais do que uma possibilidade para a evolução do sistema.

Suponhamos que era possível descrever a evolução do sistema em função do seu numero de partículas, ele próprio função do tempo, através de uma única variável (Fig. 1.3). Então, a

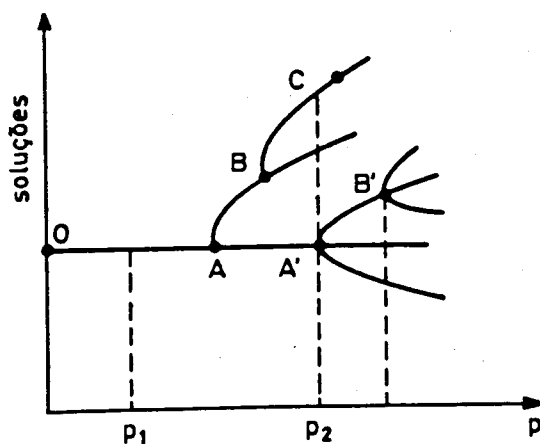


Fig 1.3: As bifurcações e a evolução de um sistema - adaptado de Prigogine, I. (1982).

evolução do sistema de O a A obedece a leis determinísticas e não aparecem surpresas no comportamento do sistema. Na vizinhança das bifurcações (pontos A, A', B, B') existe indeterminação quanto à trajectória a seguir, cuja escolha é fortemente influenciada pelas flutuações das propriedades do sistema.

Mas é facto assente em Preparação de Minérios que é sempre possível fazer previsões para tempos de transformação razoavelmente longos, embora por vezes com largas margens de erro. Por isso deve existir (é necessário prová-lo!...) um cancelamento parcial das bifurcações causado pelas flutuações, substituindo-as por uma evolução gradual do sistema.

É curioso verificar como, num certo sentido o conceito de bifurcação introduz a necessidade da abordagem histórica dos acontecimentos em Física. Suponhamos que a observação nos mostra que o sistema cujo diagrama de bifurcações está representado na Fig. 1.3 se encontra no estado C. A existência deste estado está ligada a toda a história anterior do sistema, que teve de passar pelos pontos de bifurcação A e B. Através do conceito de processo de Markov utilizada em (1.2.4) somos levados a aceitar um ponto de vista histórico na Preparação de Minérios, situação que até aqui parecia estar reservada apenas às ciências que têm como objecto os fenómenos biológicos, sociais e culturais.

Assim, aos processos característicos da Preparação de

Minérios está associada a noção de evolução, nossa conhecida de longa data da Geologia, a que se liga o conceito de um sentido privilegiado da seta do tempo. É este mesmo tempo que se refere quando, embora de um modo inconsciente, se fala do tempo de residência dentro de um fragmentador. Significa isto que a noção de evolução do sistema de partículas está intimamente ligada ao somatório dos tempos de residência necessários para efectuar a transformação.

Por muito que se afirme o contrário, as margens de erro com que somos obrigados a trabalhar nas nossas tentativas de previsão dos fenómenos da Preparação de Minérios não são de molde a que, com os conhecimentos que possuímos no presente sejamos capazes de fazer o "scale-up", isto é, o dimensionamento de aparelhos à escala industrial a partir de ensaios laboratoriais.

Por isso temos que deixar de lado um modelo do mundo estritamente determinista e fica-nos vedada a capacidade futuro-lógica do demónio de Laplace. Resta-nos então a possibilidade de formular predições estatísticas que conduzam a resultados "médios".

3. Método

As peculiaridades que apontamos atrás ao objecto da nossa atenção, os sistemas particulados, têm que se reflectir, inevitavelmente, nos métodos de abordagem utilizados.

3.1 Descrição de fenómenos colectivos

Da própria definição de sistema particulado se retira que, se na análise fenomenológica de um qualquer processo de transformação colectiva tentarmos descer ao pormenor do comportamento da partícula isolada estamos a cometer um erro duplo dado que:

1. Não faz sentido analisar o comportamento de uma partícula isolada porque na verdade ele depende fortemente do comportamento interactuante das suas congêneres.

2. Ao tomarmos uma partícula isolada, ou idealizamos as suas propriedades (p. ex. consideramos o diâmetro de uma partícula idealmente esférica), o que só vagamente faz recordar a realidade, ou tomamos uma partícula considerada como padrão ou média. Mas ao contrário do que é habitual considerar nas moléculas, as propriedades dos grãos minerais têm uma variabilidade que estamos muito longe de controlar. Então, ao analisar o comporta-

mento da partícula padrão (e falta saber qual é o padrão correcto) está-nos a escapar toda a população(*)).

No que respeita à Preparação de Minérios e, verosimilmente também em todas as outras disciplinas, a tentativa, tantas vezes ensaiada, de reduzir a análise dos fenómenos colectivos à descrição mecanicista do comportamento de um indivíduo isolado, tem sempre produzido análises que roçam a caricatura, isto é, não se limitam a ser representações grosseiras, pecado que desculparíamos, mas deformam de modo grotesco a realidade.

Tomando um exemplo geológico: a mim não me interessa em nada o trajecto de um dado grão de quartzo desde a sua separação da matriz rochosa até que chega (se chegar ...) ao oceano; pelo contrário, estou profundamente interessado na distribuição de calibres ao longo de todo o perfil longitudinal do rio e, se possível, que as minhas conclusões sejam extensíveis a todos os outros cursos de água. Por outras palavras: devemos sempre privilegiar as descrições de conjunto, em detrimento das representações individuais.

Existe ainda um outro problema relativo à particularização dos fenómenos: Se tentamos ir muito fundo na descrição atomística dos processos colectivos, pormenorizando o comporta-

(*) Por isso não subscrevemos posições como a de Khilstedt, P. G. (1962), que afirma ter obtido, após longos anos de aturada experimentação, uma relação simples entre a superfície específica das partículas e o seu calibre.

mento individual dos grãos minerais, mergulhamos de cabeça no ruído estatístico que tão difícil é de filtrar. Continuando com o nosso exemplo fluvial, mesmo que fosse possível acompanhar o trajecto de uma amostra representativa das partículas transportadas pelo rio, ser-nos-ia indispensável, por exemplo, que as observações se prolongassem por um período suficientemente longo para que pudéssemos filtrar as variações de caudal decorrentes das flutuações metereológicas.

No antigo atomismo de Demócrito e Leucipo já se admitia que os processos de conjunto têm lugar graças à concorrência de muitos processos irregulares de detalhe. Que os factos se podem passar assim em princípio, provam-no inúmeros exemplos da vida quotidiana. Ao agricultor, por exemplo, basta-lhe saber que uma nuvem produz chuva que molha a terra, mas não lhe interessa em nada saber como caem as gotas de água. Também todos nós sabemos muito bem o que entendemos pela palavra "granito", apesar de não conhecermos com precisão nem a forma nem a composição química de cada cristal particular, ou sequer a sua cor. Significa isto que, repetidamente, usamos conceitos que se referem ao comportamento de um conjunto sem que nos interessem em detalhe os processos individuais, ou que precisemos de nos debruçar sobre eles. O mesmo se deve passar na descrição dos fenómenos colectivos que são próprios da Preparação de Minérios.

3.2 Dificuldades de amostragem

Todavia, a noção de população que reivindicamos para os nossos conjuntos de partículas implica: uma amostragem individual, a determinação das propriedades das partículas e, finalmente, o estabelecimento das distribuições das características da população. Mas acabamos de dizer que não devemos ou, pelo menos, que não consideramos desejável tal procedimento.

Esta nossa assunção deve-se ao facto de as características peculiares das populações de grãos minerais tornarem extremamente difícil uma amostragem consequente da população e com algumas perspectivas de sucesso, no que respeita à extracção das tendências gerais ou das leis de comportamento do conjunto. Para se aquilatar das dificuldades bastará compararmos a multiplicidade de formas, calibres e teores presentes numa população de grãos minerais com a razoável homogeneidade de um conjunto de moléculas gasosas.

E verdade que não podemos negar a importância dos trabalhos laboratoriais em que se segue a evolução de um lote restrito de partículas durante um processo de transformação colectiva, que têm proporcionado indicações preciosas sobre tendências de comportamento dentro de sistemas particulados. Mas em todos eles tem sido patente uma evidente desproporção entre os meios materiais e financeiros empregues e a escassez de resulta-

dos, o que corresponde, na nossa óptica, a caçar moscas com espingarda (note-se que a morte da mosca depende essencialmente da pontaria do atirador). Para exemplificar este ponto de vista basta lembrarmo-nos dos trabalhos de marcação radioactiva dos minérios sujeitos a cominuição (Gardner & Austin (1962)) e comparemo-los com o trabalho de Leite, M. (1984) que se baseia na técnica de marcação conceptual que foi detalhada em (1.2.3).

Portanto, existe aqui um paradoxo aparente que necessitamos de resolver: por um lado, temos a necessidade de determinar as características da população e, por outro lado, sabemos que essa determinação é indesejável, por excessivamente árdua e pouco produtiva.

3.3 Modelo de base estatística

Ora, tanto quanto sabemos, nem Boyle nem Mariotte, fizeram qualquer amostragem estatística para estabelecerem a célebre equação

$$PV = C^{te}, \quad [1.23]$$

que representa o comportamento macroscópico da população de moléculas gasosas. Pelo contrário, todo o seu raciocínio, tal como o do nosso amigo lavrador referido atrás, se fundamentou

numa observação cuidadosa do comportamento observável dos fenómenos naturais a que aplicaram um modelo, que está resumido na equação anterior. É verdade que existem desvios comportamentais dos gases reais em relação ao modelo representado por [1.23], que só podem ser resolvidos (*et encore ...*) por uma abordagem do tipo atomístico. Todavia os desvios, na maior parte dos casos, são de somenos importância e, ainda, a abordagem atomística, muito posterior, apenas revelou o carácter estatístico da equação anterior. Podemos dizer que, tal como em tantos outros ramos da ciência, o modelo só revela as suas insuficiências quando observado numa perspectiva para a qual não foi criado.

Explicando os fenómenos perceptíveis pelos sentidos mediante a acção conjunta de muitíssimos pequenos processos individuais, torna-se inevitável considerar as leis da natureza unicamente como leis estatísticas, o que corresponde a admitir que os sistemas físicos que estudamos só se podem conhecer incompletamente.

Não podemos ter a pretensão de aplicar *ipsis verbis* o caso dos modelos moleculares aos sistemas particulados mas, ressaltando as devidas diferenças, a abordagem conceptual pode e deve ser a mesma.

Temos à nossa disposição as medições experimentais (necessariamente com carácter macroscópico) do processo colectivo

que pretendemos descrever. Com base nelas e nos princípios gerais da Física e da Química construímos representações simbólicas da natureza a que chamamos modelos (que pretendemos sejam fenomenológicos), apoiando-nos constantemente em toda a nossa vivência passada e nas experiências pretéritas dos outros.

Por isso, a construção de um modelo é, antes de mais nada, um acto cultural, entendendo como cultura todo o conjunto de experiências físicas e intelectuais que foram povoando a nossa mente desde a concepção até ao momento presente. Os nossos modelos, pelo menos parcialmente, são o nosso passado.

Assim, não é para admirar que os conceitos que um aldeão utiliza para prever o tempo não tenham semelhanças nenhuma com o modelo matemático de circulação atmosférica utilizado em Reading (U.K.) no European Meteorological Forecast Center. Claro que neste caso é fácil estabelecer comparações de qualidade entre as duas representações conceptuais e concerteza que o nosso lavrador sai a perder. Mas o mesmo já não se poderá dizer se pusermos em confronto as dores dos joanetes da tia Ricardina com os pretensos prognósticos metereológicos, ditos "dos americanos", que para aí se vendem. Do mesmo modo, devemos ter alguma relutância em preferir o modelo metalogenético do engenheiro de minas, ou do geólogo, ao "conhecimento da mina" do capataz experiente.

3.4 Critérios de validade dos modelos

É tal a multiplicidade de representações conceptuais que podem ser construídas, dependendo do nosso passado cultural, da informação recolhida e, ainda, do tipo de abordagem utilizado, que se torna imperioso definir critérios que nos permitam qualificar o seu grau de validade (Hertz, 1876).

Em primeiro lugar, para que as imagens fictícias que construímos dentro de nós a propósito dos objectos exteriores sejam adequadas ao fim em vista (a previsão e controlo dos processos naturais) é necessário que as consequências lógicas do que ideamos sejam sempre, por sua vez, imagens das consequências naturais dos objectos representados.

Esta necessidade arrasta consigo a obrigação imperiosa da verificação experimental. Nesse sentido os modelos não verificáveis são gratuitos, no que esta palavra possui de mais pejorativo e, por isso mesmo, carecem de qualquer utilidade. Por outras palavras: os modelos hipotéticos que descrevem causalmente um acontecimento, e com que pretendemos sintetizar os acontecimentos naturais, devem mostrar-se utilizáveis na experiência empírica.

Mas, mesmo antes da confrontação com a natureza, são devemos aceitar os modelos admissíveis, ou seja, os que não contradizem as leis do nosso próprio pensamento, muito em especial no que diz respeito aos princípios gerais da química e da fí-

sica. Embora perfeitamente válido, este princípio contém em si o perigo do preconceito, que tantas vezes nos impede de aceitar ideias novas, só por que as sentimos como estranhas. Pode mesmo fazer cair os mais incautos em situações caricatas, como a do engenheiro de minas, chefe de uma repartição do estado que, no princípio dos anos setenta se recusou a satisfazer o pedido de aquisição de uma máquina de calcular por parte de um seu subordinado, por não acreditar que ela fôsse capaz de calcular funções matemáticas.

Temos também que exigir dos modelos que se mostrem adequados, ou, como se disse atrás, que constituam uma imagem adequada dos objectos reais. Mas dois modelos que, como descritores e previsores, sejam idênticamente adequados e admissíveis podem ainda diferir num outro nosso conceito fundamental que é a utilidade.

Será sempre mais útil (e portanto mais "verdadeiro") o que conseguir estabelecer com a natureza uma relação mais clara, isto é, o que reproduza de um modo tanto quanto possível exacto um maior número de comportamentos do fenómeno modelado. Podemos então dizer que será tanto mais válido um modelo, quanto mais prolífico nas suas relações com os objectos se mostrar.

Este raciocínio leva-nos a recusar liminarmente os modelos de simples ajuste estatístico, sem conteúdo fenomenológico, por não permitirem extrair outras relações que não sejam as

simples correlações para que foram construídos. O mesmo se passa, como já referimos em (0.2.1), quanto aos modelos matriciais em Preparação de Minérios em que o tempo não é declarado como variável explícita (Lynch, 1977) e que pertencem, tal como os anteriores, à escola do pragmatismo absoluto. Os adeptos desta corrente dirão, na sua forma mais simplificada, e inconfessadamente: "Estou a construir um modelo para um fim ou uso específico; se cumprir esse propósito é um modelo válido", afirmação que de modo nenhum subscrevemos.

Pelo contrário, devemos realçar a espantosa adequação multímada de certos formalismos (frequentemente de índole matemática) que, por analogia, e com uma beleza extraordinária, se adaptam, com pequenas variações, a aspectos muito diferentes da natureza. Por isso são tão profícuos os raciocínios analógicos que são executados em regime de interdisciplinaridade, o que também nos leva a recusar a estreiteza de vistas que é provocada por uma especialização excessiva.

Como critério adicional de validade, podemos ainda dizer que, em igualdade de circunstâncias, será mais útil a a representação ideal que contiver menor número de relações supérfluas com os objectos representados, ou seja, a que for mais simples. Este conceito não é mais do que uma outra forma de enunciar o velhinho Princípio da Parcimónia que William de Ockham descrevia sob a forma mais hermética: *Entia non sunt multiplican-*



da praeter necessitatem.

Também este raciocínio nos permite efectuar uma nova restrição apriorística sobre o universo dos modelos possíveis, por rejeição dos modelos do tipo "força-bruta", em que os ajustes são conseguidos através da redundância de parâmetros. Nestes casos torna-se impossível o seu controle conceptual, já que não é mais possível manter separados os diferentes fenómenos físicos envolvidos.

Nestes mesmos raciocínios se filia o princípio da condensação de parâmetros na experimentação numérica enunciado por Madureira, C. & Soares, A. (1988, pp. 88), que se exporá em (2.3.6).

Resumindo, as proposições que estabelecemos sobre o mundo físico não têm a capacidade, e por isso não podem ter a pretensão, de atingir a essência dos fenómenos naturais tal como eles são em si mesmos. Os modelos que construimos são apenas imagens ideais de que podemos afirmar a concordância com os fenómenos naturais apenas num ponto: se as consequências lógicas do que foi ideado coincidem ou não com as consequências, experimentalmente observáveis, dos fenómenos que tentam descrever. Por isso as nossas hipóteses de trabalho devem sempre ser referendadas pelo recurso à experimentação e, quando se revelem insuficientes, devem ser modificadas. Através desta relação dialética constante entre o processo de construção do modelo e a sua con-

frontação com a natureza vamos conseguindo uma melhor compreensão dos fenómenos.

3.5 Dificuldades experimentais

Devemos pôr em evidência que, para além das dificuldades que se põem a qualquer tarefa de aquisição de dados, qualquer que seja a área do conhecimento escolhido, que obrigam a uma grande disciplina e rigor operatórios e conceptuais, a investigação em Preparação de Minérios reveste-se de problemas particulares só ultrapassáveis através de métodos de abordagem correctos.

Podemos dar-nos conta das dificuldades intrínsecas ao método experimental se nos lembrarmos que não foi por acaso que a partir dos anos trinta se assistiu, com Fisher (1933), ao início de uma abordagem sistemática do projecto experimental. Este autor, tal como os seus seguidores, tinha em mente conseguir eliminar, ou pelo menos reduzir, o viés com que os factos experimentais são criados e interpretados e, através de um planeamento racional, diminuir o trabalho necessário à obtenção dos resultados pretendidos, ao mesmo tempo que mantinha sob controle o erro experimental. Se dissermos que mesmo neste momento esta multiplicidade de desideratos está longe de ser conseguida, mesmo pelos experimentadores mais calejados, realçaremos as enormes dificul-

dades que se põem a quem pretenda executar trabalho experimental com um mìnimo de verdade.

Dessa dificuldade nos dão conta as palavras de um dos mais fecundos homens de laboratório:

"I am very sorry Pyrophilus, that to the many (elsewhere enumerated) difficulties wich you may meet with, and must therefore surmount, in the serious and effectual prosecution of experimental philosophy I must add one discouragement more, wich will perhaps as much surprise and dishearten you; and it is, that besides that you will find (as we elsewhere mention) many of the experiments published by authors, or related to you by the persons you converse with, false and unsuccessfull (besides this, I say), you will meet with several observations and experiments which, though communicated for true by candid authors or undistrusted eye-witnesses, or perhaps recommended by your own experience may, upon further trial, disappoint your expectation, either not at all succeeding constantly or at least varying much from what you expected."

Robert Boyle (1673): "Concerning the unsuccessfulness of experiments"

No caso específico da Preparação de Minérios, a inferência indutiva tem dificuldades adicionais. Vimos que não temos

acesso observacional directo aos processos colectivos de índole estocástica, mas só os conhecemos pelos seus resultados macroscópicos, sob a forma do produto das operações unitárias. Particularizando: num processo de estudo de uma moagem batch (Leite, M. (1984)) conhecemos a composição granulométrica da alimentação e a do produto final, bem como o tempo de residência do material dentro do tambor, mas renunciámos à descrição da trajectória de cada partícula e da sua prole dentro do aparelho. Quererá isto dizer que abandonamos a tentativa de interpretação dos mecanismos internos dos processos tecnológicos?

3.6 Experimentação numérica

É evidente que não. As representações ideais que são os modelos contêm em si a inextinguível vantagem de proporcionarem a realização numérica de experiências conceptuais a que chamamos simulações. Na verdade, eles podem ser representados com toda a exactidão sob a forma de expressões matemáticas que, por sua vez, podem dar origem a algoritmos. Muito embora estes não sejam de modo algum isomorfos dos sistemas reais, mas antes sigam as leis neles contidas (que podem tomar qualquer forma com coerência interna), através das suas propriedades operatórias permitem que trabalhem com eles como se de verdadeiros aparelhos laborator-

ais se tratasse, comparando o comportamento do modelo com o do fenômeno real e deduzindo, das discrepâncias observadas, correções ou refinamentos a introduzir na hipótese de trabalho formulada.

Nesse sentido, executar um programa coerente de simulação fenomenológica da tamisagem é como trabalhar com um tamis autêntico, o que significa que podemos utilizá-lo para investigar o modo como o peneiro real se comporta.

Contudo, e ao invés do que ocorre nos sistemas reais, o programa de simulação não está limitado pelas leis da natureza, mas sim pela sua lógica interna, o que confere características peculiares à experimentação numérica a saber:

- a sua reprodutibilidade é absoluta: podemos sempre repetir experiências exactamente nas mesmas circunstâncias;
- não está dependente do fluxo de tempo real: podemos parar e recomeçar uma experiência em qualquer instante;
- a variabilidade experimental está sob controle do operador: podemos executar análises de sensibilidade, investigando as respostas do modelo às variações dos parâmetros que introduzimos controladamente;
- são executadas num universo hipotético: podemos proceder a experiências à ruptura, atribuindo às variáveis valores para lá dos seus limites físicos sensatos;

Por outro lado, a experimentação em computador também

pode alargar o campo da ciência teórica, por tornar possível o estudo de sistemas muito complexos, através de modelos em que se conseguem produzir convergências assintóticas e, assim, produzir novas leis teóricas que podem ser expressas de um modo simples e tratável analiticamente (Cavalheiro, 1984). Estes modelos, que habitualmente trabalham com amostragem numérica (Monte-Carlo ou semelhantes) implicam massas enormes de cálculos que só se tornaram possíveis com o aumento da velocidade e capacidade de memória que se têm verificado nos computadores na última dezena de anos.

Contudo, pelo menos no que toca à descrição dos fenómenos colectivos da Preparação de Minérios, estes métodos devem ser evitados (veja-se 1.3.1) porque correspondem, tal como os métodos de marcação radioactiva referidos em (1.3.2) a uma amostragem partícula a partícula; devem por isso, tal como elas, ser utilizados apenas para fornecer indicações que permitam a descoberta de leis mais gerais do comportamento das populações de partículas.

Mesmo no campo da própria matemática têm surgido ultimamente resultados surpreendentes pela utilização da matemática sob um aspecto estritamente heurístico e repetitivo, que levaram à elaboração de novos conceitos, como o de fractal (Mandelbrot, 1983) ou mesmo o de atractor caótico (Crutchfield, 1986).

Embora a utilização do computador na investigação científica seja relativamente recente, já mudou radicalmente o ponto de vista com que muitas das disciplinas científicas são encaradas, enfatizando as abordagens quantitativas e, muito particularmente, os aspectos estatísticos dos fenómenos. Através da introdução da experimentação numérica está-se a introduzir uma nova maneira de pensar a ciência.

Condensação de parâmetros

Quase sempre se nos depara uma dificuldade adicional quando queremos passar do modelo teórico ao algoritmo de simulação: o número de variáveis necessário à descrição quantitativa revela-se muito elevado.

Esta redundância de parâmetros para além de levar à impossibilidade de controlo conceptual do modelo, como já se referiu, produz ainda instabilidades do modelo que se reflectem no seu comportamento numérico durante o processo de optimização e, acarretam, também, o aumento da complexidade do programa de simulação com o conseqüente crescimento exponencial do tempo de cálculo ("maldição da dimensionalidade" - ver 3.3.4).

Torna-se, por isso, imperiosa a diminuição do número de graus de liberdade do sistema. Como acontece que, regra geral, os

parâmetros que assim impomos aprioristicamente ao nosso modelo são, em geral, função uns dos outros, podemos reuni-los pelas suas afinidades funcionais e substituir cada um dos grupos assim formados por um número menor de variáveis, das quais os conjuntos assim formados dependem funcionalmente. Esta implementação do princípio da parcimônia foi designada por Madureira (1988) por condensação de parâmetros.

3.7 Estrutura do modelo numérico

Enquanto que os processos físicos são inevitavelmente complexos, a estrutura matemática dos modelos que os representam deve ser invariavelmente muito simples devido a dois motivos principais: primeiro porque é necessário que assim seja para que o operador os possa manter sob o seu controlo conceptual e, em segundo lugar, porque a descrição matemática conceptual é necessariamente sucinta.

No caso específico dos processos tecnológicos, de que temos vindo a tratar, o aspecto cinético é determinante. Por isso, e colocando-nos sob o ponto de vista fenomenológico que temos vindo a privilegiar, descrevê-los-emos através de sistemas de equações diferenciais em que a variável independente é o tempo. Como no caso dos processos colectivos o aspecto não-li-

near é de extrema importância, a possibilidade de tratamento analítico anula-se completamente: a possibilidade que nos resta é a da integração numérica das equações descritoras. O modelo tem, segundo a designação de Bard Y. (1974), uma estrutura de modelo dinâmico padrão, em que as relações funcionais ligam entre si os seguintes componentes:

o vector dos parâmetros: as variáveis do sistema a que o algoritmo pode atribuir valores diversos;

o vector das condições iniciais: que, no nosso caso, correspondem às fracções granulométricas em massa, que, no instante $t=0$, são lançadas sobre o primeiro tamis;

os vectores das variáveis independentes: que contêm as luzes e diâmetros dos fios das malhas dos peneiros;

o conjunto das restrições: as limitações impostas aos domínios de variação dos parâmetros, quer pela necessidade de coerência nas correspondências entre o modelo e o processo de tamisagem, quer por o próprio operador considerar indesejáveis alguns conjuntos de valores que eles possam tomar.

Externamente ao modelo propriamente dito situa-se a matriz dos resultados experimentais que são comparados com os resultados produzidos pelo modelo para gerar uma função critério ou função objectivo. Então, através de técnicas numéricas ditas de optimização, o algoritmo, em tentativas sucessivas, vai procu-

rando a configuração de parâmetros que permita um ajuste capaz do modelo aos resultados experimentais (Capítulo 3).

Mas o que é um ajuste capaz?

3.8 Validação do modelo

Avaliar um modelo significa desenvolver um certo nível de confiança relativamente a poder dizer que as inferências que dele retiramos são correctas e aplicáveis ao mundo real. O conceito de validação implica assim uma apreciação qualitativa graduada e não uma resposta booleana de sim ou não.

Deste modo, é de esperar que não exista um teste único para assegurar a validade do modelo, mas antes o experimentador deve, ao longo de todo o trabalho, ir verificando se o modelo está ou não a corresponder às premissas que conceptualmente colocou quando estabeleceu a hipótese de trabalho.

Utilizando o conceito de modelo que estabelecemos em (1.3.4) podemos dizer que o primeiro passo a tomar para a validação do modelo é o de nos assegurarmos que ele possui coerência interna, ou validade *a priori*, o que facilmente pode ser comprovado através de testes à ruptura efectuados sobre o algoritmo, que consistem em assegurar que o modelo não produz resultados absurdos quando os parâmetros são levados até aos seus limites.

Precisamos também de verificar se o modelo é adequado ou não. Uma verificação simples consiste em comparar, apenas "a olho", os resultados calculados, com os resultados das experiências físicas reais, ou dizendo de outro modo, em nos assegurarmos que os valores dos resíduos não pareçam excessivamente altos.

Um dos métodos mais simples de, ao mesmo tempo, testar a adequação de um modelo e de ir executando experiências numéricas, é o recurso à análise de sensibilidade, que pode ser feita de modo sistemático com recurso a técnicas estatísticas (Espain 1984), ou informalmente, por simples variação dos parâmetros dentro de certos limites, verificando em seguida se a resposta do modelo é ou não a adequada. Uma outra técnica utilizada consiste em introduzir na matriz dos dados um certo ruído estatístico controlado e verificar as correspondentes evoluções da configuração de parâmetros. Estes tipos de teste têm, como não podia deixar de ser, as suas implicações numéricas (que serão analisadas, embora sucintamente no Cap. 3).

Um modelo de simulação tomado no seu aspecto mais simples é um transformador *input-output* da matriz das condições iniciais nos resultados finais de cada ajuste. Por isso, um dos métodos mais óbvios de validar um modelo é compará-lo com o objecto modelado apenas sob este ponto de vista, isto é, garantindo que, quer num caso, quer no outro, a partir das mesmas condições iniciais, conseguimos produzir resultados finais similares.

Para esse fim devem ser utilizadas técnicas estatísticas que, para o nosso modelo, serão descritas, e os seus resultados comentados, em (2.5.2).

"... we conclude by remarking that really efficient high-speed computing devices may, in the field of non-linear partial differential equations, as well as in many other fields which are now difficult or entirely denied of access, provide us with heuristic hints which are needed in all parts of mathematics for genuine progress... This should lead ultimately to important analytical advances."

John von Neumann (1946): On the principle of large scale computing machines.

2. O MODELO E AS CONCLUSOES

Vêm-me às vezes dizer,
Talvez por peça de Entrudo,
Que o abade de Arcozelo
Depois de um profundo estudo
Fez um método-modelo.
A mim não me custa a crer:
Eu acho-o capaz de tudo.

João de Deus: Campo de flores (1893)

1. Introdução

Como se viu no final do Capítulo 0 tínhamo-nos resolvido a construir um modelo simulador da tamisagem que nos ajudasse a minorar os enormes tempos necessários à execução das análises granulométricas dos produtos moídos.

1.1 Propósitos iniciais

O modelo foi organizado em torno de um número de parâmetros tanto quanto possível diminuto, através dos quais se

simula a cinética da tamisação que ocorre nos conjuntos de peneiros quando são agitados.

Os parâmetros foram recuperados por ajuste do modelo sobre conjuntos de dados experimentais. Estes são constituídos pelas massas de partículas presentes em cada peneiro e determinadas a intervalos de tempo regulares (regra geral de 15 em 15 minutos) durante a tamisação efectuada durante períodos muito longos.

Após a validação do modelo seria então possível adoptar a seguinte rotina, aplicável não só ao nosso granodiorito mas também em qualquer outro caso de peneiração difícil, desde que fossem mantidas constantes ao longo do processo as características operativas:

1. Execução de 3 a 5 (para minimizar o erro experimental) tamisações com condições operatórias fixas e com tempos finais muito longos; determinação, a intervalos de tempo regulares, das massas dos lotes granulométricos resultantes.

2. Recuperação, por ajuste do modelo, para o minério analisado e para o agitador e peneiros utilizados, das configurações de parâmetros.

3. A duração de qualquer análise granulométrica executada sobre o mesmo minério, mantendo as condições operatórias de 1, poderia, então, ser reduzida para tempos bastante curtos.

4. Em seguida, o modelo, utilizando a configuração de parâmetros determinada em 2, conduziria a peneiração até ao seu ponto terminal.

Contávamos que os tempos de análise granulométrica pudessem ser assim substancialmente reduzidos, o que, se constituiria um ganho nítido de tempo, não resolveria ainda o problema mais grave que é o da preparação das amostras a moer.

1.2 O que conseguimos aprender

Contudo, como o homem põe e os modelos dipõem, o que não era senão uma simples derivação do plano original de investigação foi-se tornando, a pouco e pouco, no trabalho fundamental.

Analisando retrospectivamente o sucedido, para lá de razões idiossincráticas, o facto deveu-se a várias causas concorrentes.

Em primeiro lugar, aprendemos, pela prática directa, que construir um modelo com propósitos muito direccionados e impregnado de imediatismo é, concerteza, construir um mau modelo. Foi por isso que renunciámos desde a partida ao pragmatismo absoluto (ver 1.3.4) e enveredámos pela construção de um modelo fenomenológico.

Mas, apesar de os processos físicos de tamisagem se

apresentarem despidos da complexidade que, por exemplo, associamos à moagem em tambor, isso não quer dizer que a sua descrição seja fácil. Por outras palavras: uma coisa é a simplicidade dos fenómenos e outra é o descrevê-los(*). Por isso o nosso modelo se foi a pouco e pouco complicando e nisso, ao fim e ao cabo, consiste a riqueza dos conceitos com que foi construído.

Acontece, também que, por paradoxal que pareça, que escasseiam os artigos sobre tamisagem e sobre crivagem, ao mesmo tempo que proliferam os que tratam da fragmentação, talvez pela simplicidade que sempre é atribuída aos primeiros processos, o que, logo à partida, nos privou da base de apoio que já existia no caso da moagem.

Ao mesmo tempo, como não dispúnhamos de nenhuma rotina numérica para a pesquisa de somatórios de mínimos quadrados e, também, porque sentimos muitas dificuldades em aceitar a utilização cega de programas do tipo "caixa negra", tivemos que construir (ou reconstruir) as rotinas de optimização. E isso leva o seu tempo ...

Contudo, esta necessidade teve a virtude de nos mostrar "ao vivo" como é que os métodos de optimização representam, embora com "refracção", o comportamento do modelo.

(*) Lynch (comunicação pessoal) disse em 1986 que a modelação das operações unitárias da Preparação de Minérios Ihe não oferecia problemas de maior (afirmação de que, com o devido respeito, duvidamos muito ...) com uma única excepção: a peneiração.

Foi possível, através da exploração do modelo, investigar os conceitos de forma e de isocrivo das distribuições granulométricas e, assim, iludir a vigilância tutelar que é imposta pelo axioma de Bayes (Madureira, comunicação pessoal, 1988).

Conseguiu-se, ainda, lançar bases para o estabelecimento consequente do calibre equivalente por tamisação como propriedade total.

Finalmente, com base nos conceitos da cinética da tamisação e na caracterização do isocrivo pudemos estabelecer bases normativas para a determinação do ponto final da tamisação e para a estima do erro que lhe está associado. Isto habilitou-nos a resolver o problema que tínhamos detectado em relação aos longos tempos "necessários" para a execução das análises granulométricas, bem como a enfrentar quaisquer outros casos em que os peneiros funcionem como separadores.

2. Análise granulométrica por tamisagem

2.1 Âmbito de utilização

A tamisagem é com certeza a técnica mais antiga e mais simples de análise granulométrica. Devido à sua simplicidade de execução e baixo custo do equipamento laboratorial é utilizada em larga escala sobre todos os materiais pulverulentos ou granulares, apesar de todo o equipamento sofisticado que hoje em dia está disponível. Com ela podemos facilmente classificar partículas desde os 125 mm até aos 20 μm , se utilizarmos redes de tecido metálico e mesmo descer até diâmetros de 5.5 μm , se usarmos peneiros obtidos por electrodeposição.

A utilização desta técnica para materiais com grande percentagem de partículas de calibre inferior a 75 μm é encarada normalmente com algumas reticências, devido ao elevado custo dos peneiros com luzes muito pequenas e à dificuldade em obter malhas uniformes.

Apesar de ser um método pouco sofisticado ainda é largamente utilizado para calibrar outras técnicas, exigindo-se, neste caso, que as análises sejam executadas com o máximo de precisão.

2.2 Equipamento e rotinas laboratoriais

Uma descrição exhaustiva do método laboratorial de tamisagem pode ser encontrada, por exemplo, na norma americana ASTM E276, ou na norma inglesa BS1796, para onde remetemos o leitor. Aqui preocupar-nos-emos, não com os aspectos normativos, mas com as características fenomenológicas do processo, nomeadamente com as de índole estocástica.

Básicamente o método consiste em fazer passar (ou não passar) uma amostra de grãos minerais através de um conjunto de n tamises seriados por ordem decrescente das suas luzes $l_1, \dots, l_n$, admitindo-se que todos os grãos retidos sobre o peneiro $k+1$ e que passaram através do tamis k têm o seu calibre compreendido entre as luzes nominais desses tamises.

Na prática corrente da Preparação de Minérios são quase sempre utilizados peneiros de malha metálica com 8 polegadas de diâmetro que obedecem à norma ASTM-E11 (Standard Specifications for wire cloth sieves for testing purposes), ou à sua congénere da série de Tyler. Estas especificações, para onde uma vez mais remetemos o leitor, além de se referirem às características construtivas necessárias a que a estrutura do peneiro mantenha a conveniente rigidez, a garantir que a malha se mantenha suficientemente esticada e, ainda, a não permitir que se percam partículas durante o processo, normalizam as luzes dos peneiros e os

Tabela 2.1: Dimensões nominais e variações permissíveis para peneiros de malha metálica (norma ASTM E11) de luzes inferiores a 4.75 mm.

Peneiro nº mesh	luz nomin. (mm)	Variação permissível média	Luz individual máxima	Diâmetro nominal do fio metálico
4	4.75	±0.15 mm	5.14 mm	1.54
6	3.35	±0.11 mm	3.66 mm	1.23
8	2.36	±0.080 mm	2.515 mm	1.00
12	1.70	±0.060 mm	1.820 mm	0.810
16	1.18	±0.015 mm	1.270 mm	0.650
20	0.85	±35 µm	925 µm	0.510
30	0.60	±25 µm	605 µm	0.390
40	0.425	±19 µm	502 µm	0.290
50	0.300	±14 µm	363 µm	0.215
70	0.212	±10 µm	263 µm	0.152
100	0.150	±8 µm	192 µm	0.110
140	0.106	±6 µm	147 µm	0.076
200	0.075	±5 µm	103 µm	0.053
270	0.053	±3 µm	85 µm	0.041
400	0.038	±2 µm	61 µm	0.025

diâmetros dos fios metálicos que constituem o seu tecido (Tabela 2.1). Segundo as normas, as luzes devem estar dispostas segundo uma progressão geométrica de razão $4\sqrt[4]{2}$. Na larga maioria dos ensaios usa-se a série reduzida que consiste em tomar peneiros alternados da série completa, de modo a que a razão da progressão geométrica que os une passa a ser $\sqrt[4]{2}$. As normas referem também as variações máximas admissíveis das luzes de tamisagem.

Em Preparação de Minérios continua em vigor a antiga designação de Tyler, que corresponde a nomear os peneiros pelo número de malhas quadradas (mesh) que um segmento com uma polegada linear consegue abarcar. Nesta designação, que aqui também utilizaremos, os calibres mais finos correspondem aos peneiros de maior número designatório.

Embora não existam limites teóricos para o calibre das partículas submetidas a peneiração, a boa prática laboratorial recomenda que não se vá acima do peneiro nº4 (4.76 mm) ou abaixo do nº 200 (0.074 mm). Este limite inferior é ditado, tanto pelo facto de calibres inferiores serem já de passagem muito morosa, tanto porque a partir daqui se torna cada vez mais difícil a obtenção de malhas com precisão suficiente. O limite superior deve-se ao facto de a introdução de calibres superiores a 4 mesh ir concerteza falsear a representatividade de amostras já de si tão reduzidas, como são as que se submetem à tamisagem.

Regra geral, a peneiração é efectuada num agitador

mecânico onde os peneiros são colocados em pilha, por ordem decrescente (de cima para baixo) dos valores das suas luzes nominais, juntamente com um recipiente de fundo e com uma tampa que cobre o conjunto (Fig. 2.1A).

O vibrador é ligado e a tamisagem decorre durante o tempo julgado suficiente (em regra, o período de tamisagem não vem especificado nas normas) para que as partículas se distribuam pelos seus respectivos lotes. Em seguida, o material que se encontra sobre cada um dos peneiros e no recipiente do fundo, é recolhido com os indispensáveis cuidados (norma ASTM E276) e pesado. Com os valores obtidos constrói-se a respectiva tabela.

Como as luzes dos peneiros utilizados se encontram em progressão geométrica, a sua representação em escala directa resultaria num congestionamento do número de pontos do lado dos finos. Por isso se recorre à representação das abcissas em escala logarítmica, o que tem a vantagem de espaçar equidistantemente os calibres. Para o eixo das ordenadas, regra geral, contentamo-nos com a escala directa.

Quanto ao tipo de curva, regra geral afirma-se que podemos sempre escolher uma representação em função cumulante (inferior ou superior) ou em histograma. A fundamentação teórica de ambas as representações e o seu campo de aplicação, foram discutidos em (1.2.2).

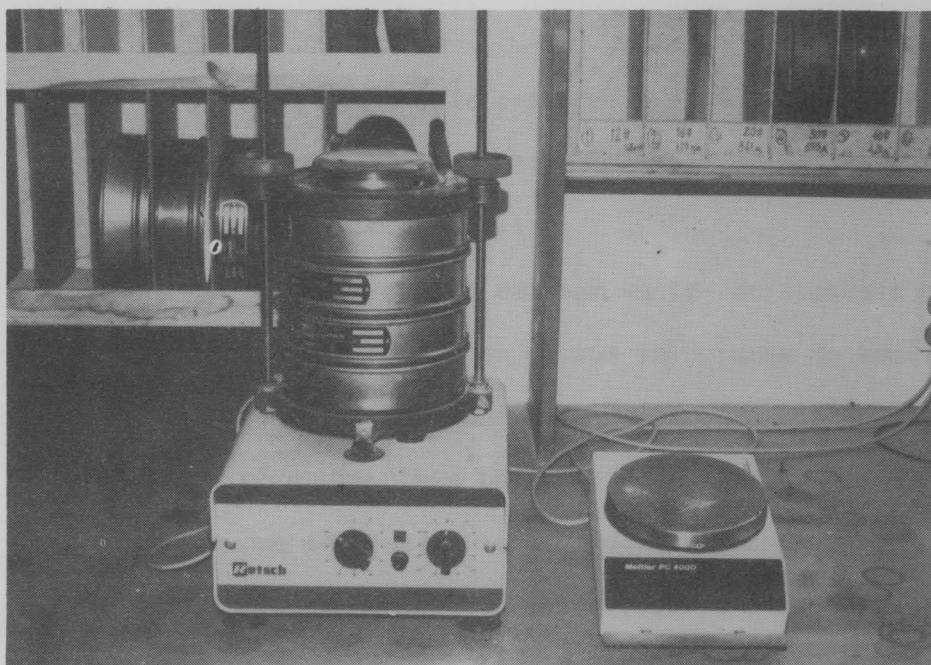


Fig. 2.1A: Agitador e peneiros Retsch.

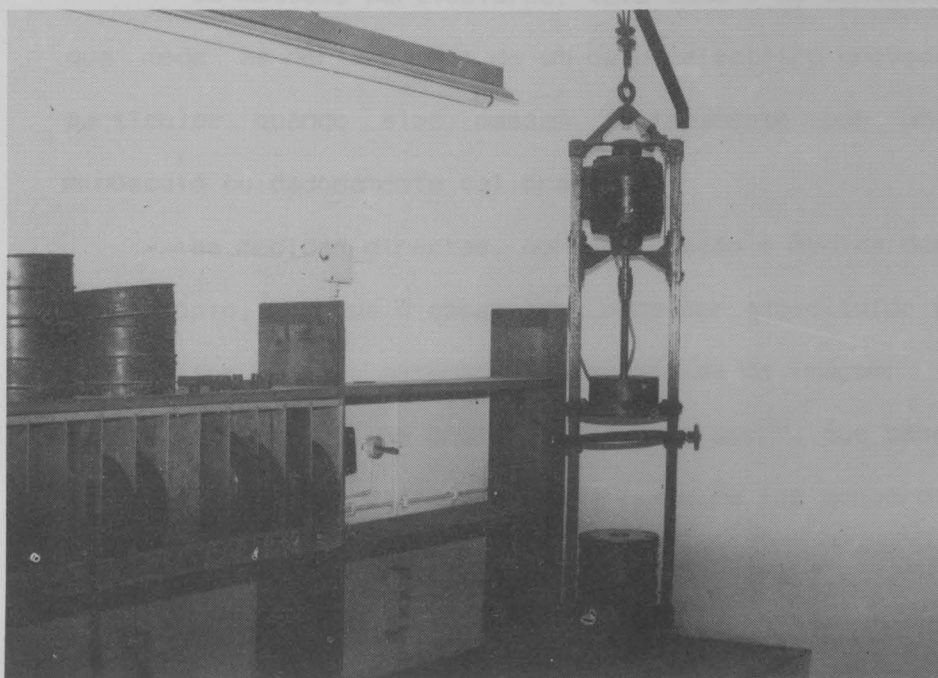


Fig. 2.1B: Agitador suspenso da Denver.

Análise granulométrica abaixo de 200 mesh

Abaixo do limite prático de 200 mesh temos que passar a utilizar um dos vários métodos específicos para os calibres finos. Entre eles podemos citar:

- os métodos que se baseiam na lei de Stokes e que separam os grãos minerais em função da sua velocidade de sedimentação no seio de um líquido. Existem múltiplos aparelhos que aplicam este princípio, nomeadamente a habitual pipeta de Andreasen;

- os que se baseiam na separação em corrente de ar combinada, ou não, com um efeito centrífugo. É o caso do elutriador Bahco e o do "cyclosizer" Warman;

- os métodos particulares, tais como o do contador Coulter, que mede as perturbações de um campo eléctrico provocadas pelas partículas quando elas passam isoladamente por um orifício minúsculo cuidadosamente calibrado;

- as medidas directas, por observação e medida dos grãos ao microscópio, em que o observador pode ser substituído vantajosamente pelos métodos automáticos de análise de imagem;

- finalmente, os granulómetros a "laser", que baseiam o seu funcionamento na difracção de um feixe de luz monocromática por uma dispersão de partículas.

Como seria de esperar de uma tão grande multiplicidade de métodos dedicados a um único fim, todos eles padecem de sérias

desvantagens que não caberia mencionar aqui. Refiramos, contudo, que o granulômetro a "laser" tem vindo a suplantar todos os outros métodos, devido à sua simplicidade de operação, rapidez e reprodutibilidade de determinações.

2.3 Factores da cinética de tamisagem

As distribuições do calibre das populações de partículas, quando efectuadas por peneiração são influenciadas por vários factores operatórios dos quais destacamos, por mais importantes:

- a carga dos peneiros;
- o tipo de agitação e a sua transmissão aos peneiros;
- o erro da malha de tamisagem;
- o tempo de operação.

Este último é uma característica intrínseca da cinética, e, como tal, foi integrado directamente como variável independente no modelo.

Ao mesmo tempo, e como não podia deixar de ser, as características da população influenciam de modo decisivo a cinética da tamisagem. De entre elas, as mais importantes são, sem dúvida alguma, a própria distribuição granulométrica (que pretendemos determinar), a forma das partículas e, muito acessó-

riamente, a distribuição de teores (por influenciar a densidade das partículas).

Calibre e forma

Pomos em dúvida, no nosso estado actual de conhecimentos a utilidade da introdução do conceito de forma das partículas no estudo da cinética de tamisagem. Senão vejamos.

A descrição da forma das partículas é afectada por várias dificuldades que não parecem ultrapassáveis a curto prazo. Isto traduz-se no facto comezinho de, mesmo em linguagem natural, ser muito difícil, senão mesmo impossível, uma descrição do seu contorno que seja mínimamente precisa e útil. Este obstáculo deve-se, no nosso entender a duas causas principais.

Em primeiro lugar, como demonstrou Serra (1971) o descriptor da forma deve ser um vector de dimensão tanto maior quanto maior for a finura da análise que pretendemos.

Em segundo lugar, a forma das partículas não é unívoca, mas, pelo contrário, segundo Kaye (1984), que utilizou o trabalho de Mandelbrot (1983), as partículas possuem diferentes contornos fractais consoante a escala de observação.

Acrescentemos a estas duas observações o facto de que a forma das partículas é, em geral, analisada no plano perpendicular

lar ao da sua menor dimensão, quando é esta que é determinante na definição do isocrivo (veja-se 2.6.3).

Por outro lado, temos que aceitar que, sob o estrito ponto de vista da tamisagem, a forma e o calibre das partículas são indiscerníveis. Se uma partícula não passa através da malha do tamis devido às suas dimensões ou devido ao que se convencionou chamar de forma não é relevante; o que é um facto é que não passa e essa é a única indicação que podemos retirar da peneiração.

Isto não significa de modo algum que estejamos a negar a importância da forma das partículas na cinética do processo, mas apenas afirmamos que os peneiros, como instrumentos de análise, não conseguem separar partículas pela sua forma.

Erro das malhas

Quando executamos uma análise granulométrica por peneiração consideramos que os calibres das partículas que assim são separadas estão contidos no intervalo $]l_{i-1}, l_i[$, em que l_i é a luz do peneiro que retém o lote granulométrico.

Na prática não é exactamente assim que acontece. Por um lado, os orifícios dos peneiros comuns (de tecido metálico) não são, nem exactamente quadrados, nem todos exactamente iguais

existindo uma tolerância máxima dos erros de fabrico que é dada, por exemplo, pela norma ASTM E11 (Tabela 2.1).

Assim, um dos erros introduzidos numa análise por peneiração é o que se deve à variação do diâmetro de corte que é provocada, quer pelas tolerâncias admissíveis no fabrico das redes, quer pelas deformações que elas sofrem após um uso mais ou menos prolongado. Este erro aumenta com a diminuição das luzes dos peneiros devido às dificuldades em manter as normas de fabrico e pela acrescida deformabilidade e fragilidade dos fios que formam as malhas.

Como se sabe, nos primeiros momentos da tamisagem as partículas de dimensão largamente inferior à luz do peneiro passam na sua quase totalidade, ficando apenas sobre a malha as que fazem parte do sobrecrivo e as que têm dificuldade em passar (o isocrivo). Ora, à medida que o tempo vai decorrendo, assim também vai aumentando (em média) o calibre das partículas que se encontram sobre a malha. Como para qualquer peneiro existe sempre uma certa distribuição estatística das luzes, também com o tempo vai diminuindo o número de orifícios por onde essas partículas podem passar. Deste modo, o desvio padrão da distribuição das luzes dos orifícios atravessáveis reduz-se à medida que o tempo vai passando. No limite, é a maior luz da malha que passa a controlar a operação e determina assim o calibre de corte. É por isso que o calibre de corte dos peneiros não se mantém cons-

tante, aumentando ao longo da análise (Fig 2.2), muito embora a partir de certo momento a variação seja perfeitamente desprezável.

Quanto ao erro que decorre das tolerâncias de fabrico, que se podem ver na Tabela 2.1, ignorámo-lo deliberadamente ao considerarmos sempre que a malha dos peneiros era perfeita.

Com efeito, Panou *et al* (1966, pp. 87) fizeram algumas medições que não se enquadravam em nenhum dos esquemas teóricos que propuseram para explicar a passagem das partículas individuais através das malhas de um peneiro e que supuseram corresponder a casos de passagem através de irregularidades da malha.

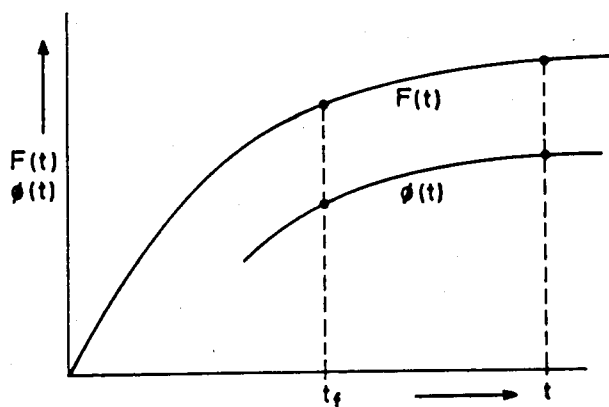


Fig 2.2: Variação do calibre de corte com o tempo de residência:
 $\phi(t)$ - calibre de corte; $F(t)$ - cumulante do infracrivo;
 t_f - tempo terminal da tamisagem.

Pode verificar-se, através dos dados experimentais que estes autores apresentam, que o comportamento dessas partículas quase não difere do da maioria das suas congêneres, ao mesmo tempo que o seu número é apenas uma ínfima porção do total.

Admitimos, portanto, que as variações do calibre de corte que são causadas pelas imprecisões da malha não se conseguem distinguir das que resultam da variabilidade das partículas e são bastante menores que as causadas por estas últimas.

Cegagem dos peneiros

Um problema grave que surge frequentemente durante as análises granulométricas é o da obstrução dos orifícios pelas partículas que estão a ser peneiradas. O ritmo a que a colmatação se dá depende da carga de minério que está sobre o peneiro, da forma das partículas e da luz do peneiro.

Como é evidente, no que respeita à carga, quanto maior ela for, maiores as quantidades de isocribo e, conseqüentemente, mais rapidamente se dá a cegagem da malha. Por isso mesmo é hábito em certas normas e recomendações de ensaio que se estipule a massa máxima de material a submeter à peneiração. Contudo, a limitação do tamanho das amostras tem alguns inconvenientes:

- exige amostragem, com a conseqüente introdução de no-

vos erros;

- é impraticável nos casos de preparação de amostras de grande dimensão, quando os peneiros funcionam como separadores;
- não deve ser levada aos limites propostos por certos autores, sob pena de retardar a cinética (ver 2.6.3).

Quanto à forma, quanto mais irregulares forem as partículas tanto mais tempo demorará a dar-se a colmatção das malhas, o que se deve ao facto de as partículas deste tipo serem mais facilmente desalojadas dos orifícios; o material é peneirado mais lentamente mas o tempo que demora a dar-se a obstrução aumenta também.

Mas, segundo cremos, o factor mais importante a ter em conta na prevenção da colmatção é o tipo de vibração produzida pelo agitador e modo como ela é transmitida aos peneiros.

Com efeito, no início do trabalho, por na altura não haver outra máquina disponível, utilizamos um agitador suspenso da Denver (Fig. 2.1B), velho de mais de trinta anos. Rápidamente nos demos conta que os peneiros abaixo do de 70 mesh ficavam largamente colmatados ao fim de quinze minutos (se tanto) de tamisagem. A colmatção aumentava, como não podia deixar de ser, com a diminuição da luz dos peneiros. Pelo contrário, a colmatção que ocorre no agitador da Retsch que foi utilizado em todos

os ensaios de tamisagem subsequentes é muito inferior.

Realmente, o movimento que o vibrador da Denver transmite às partículas tem uma componente vertical diminuta enquanto que o da Retsch, devido ao facto de o prato que suporta a pilha de peneiros chocar constantemente contra dois batentes de borracha, permite, para lá do movimento vertical das partículas, a vibração das malhas o que, certamente, tem um importante efeito de descolmatação.

Mais tarde tivemos ocasião de comparar a cinética de tamisagem dos dois agitadores (Tabela 2.2). Verificou-se que existia um atraso considerável no ritmo de passagem das partículas através das malhas quando era utilizada a máquina da Denver; a cinética tornava-se mesmo insuportavelmente lenta para os calibres mais finos. A nossa leitura dos acontecimentos leva-nos a acreditar que é a cegagem das malhas que atrasa a tamisagem.

Porque o efeito de cegagem pode influenciar de modo tão vincado a cinética de peneiração é indispensável entrar em linha de conta com este efeito no modelo.

Note-se ainda, no que respeita ao modo como o movimento é transmitido às partículas, que a máquina Retsch que foi por nós utilizada não está também isenta de críticas. Na verdade, quer a amplitude da vibração, quer a força da pancada contra o batente variam inversamente com a distância ao prato do agitador. Por isso, concerteza que a cinética da tamisagem deve variar também

Tabela 2.2: Comparação de duas cinéticas de tamisagem: I- com componente vertical da vibração (vibrador Retsch); II - apenas com agitação horizontal (vibrador suspenso Denver);

I	tempo	100#	140#	200#	270#	400#	infra
	15	33.3	32.8	32.4	10.5	28.9	6.6
	30	31.7	32.5	31.5	8.3	25.5	15.1
	45	31.1	32.2	31.4	7.5	20.8	21.4
	60	30.7	32.6	30.3	7.9	18.3	25.0
	75	30.3	32.7	30.3	7.9	15.5	28.2
	90	30.1	32.5	30.2	7.8	13.1	31.0
	105	29.8	32.3	30.2	7.5	12.8	31.9
	120	29.8	32.3	30.1	7.5	12.3	32.7
	135	29.6	32.5	30.2	7.4	11.7	33.4

II	tempo	100#	140#	200#	270#	400#	infra
	15	54.3	40.1	15.7	7.8	27.2	0.0
	30	43.3	44.7	16.1	7.0	33.7	0.1
	45	38.2	45.3	18.6	7.3	35.4	0.6
	60	34.7	42.8	21.8	7.8	36.4	1.3
	75	31.6	39.0	25.5	8.5	36.6	2.5
	90	30.5	37.5	26.8	9.7	36.9	2.9
	105	29.5	36.6	27.0	10.5	36.3	4.5
	120	28.9	35.7	27.0	11.4	35.3	6.3
	135	28.6	35.3	26.5	12.3	35.0	6.9

no mesmo sentido, facto que, a rigor, deveria também ser incluído no modelo.

2.4. Precisão da medida e controlo do erro

Muito embora durante a moagem o problema não fôsse posto dessa forma, o problema que na realidade nos afligiu desde o início foi o da precisão da medida na análise granulométrica. Trata-se, sem sombra de dúvidas, de uma questão universal para todos os ensaios sobre materiais particulados que está longe de se encontrar resolvida e que, regra geral, os técnicos de laboratório tratam com soberba indiferença.

Importância do problema

Esta questão é crucial para a Preparação de Minérios, porque a variável de referência com que trabalhamos sempre é o calibre e, assim, os erros das análises granulométricas vão inevitavelmente repercutir-se, mais ou menos gravosamente, nos resultados dos ensaios de fragmentação e de concentração.

E, apesar disto, é muito raro ver os *preparadores de minérios*, mesmo os mais experientes e responsáveis, a fazer qualquer controlo, mesmo que sumário, da precisão da peneiração. Em geral, baseados na sua experiência, postulam que um certo tempo de residência do minério nos peneiros deve proporcionar a precisão suficiente. Mas o que é então a precisão suficiente?

Surpreendentemente (ou talvez não ...) se passarmos em revista algumas das recomendações, mais ou menos oficiais sobre o assunto, vemos que o panorama não é brilhante o que, até certo ponto, permite compreender as atitudes dos nossos homens de laboratório.

Taggart (1948), como se viu em (0.4.1), diz que o ponto final da tamisagem é obtido quando menos de 0.05% da massa original deposita sobre o peneiro passa ao infracrivo durante um minuto.

Pelo seu lado, Anderson (*in* Rasteiro, 1984) afirma que a peneiração se deve dar por concluída quando, durante o intervalo de um minuto, a quantidade de material que passa através da malha do peneiro é inferior a 0.2% da massa inicial da amostra.

Finalmente, a norma ASTM E276 esclarecidamente indica que "o ponto final da peneiração foi encontrado quando períodos adicionais de vibração dos peneiros já não conseguem modificar a massa de qualquer um dos lotes granulométricos em mais de 0.3%".

Como se pode ver, estas propostas não primam pela concordância nem, muito menos, podem ser consideradas como modelos de sensatez. Experimente o leitor aplicá-las sistematicamente e verá. E então se, em vez de um único peneiro, utilizar quatro ou cinco dispostos em pilha?

Um pormenor que nos intriga é o modo como foram obtidas, pelos autores das propostas acima, os valores que indicam

para limite do fluxo de infracrivo (0.05% e 0.2%, ambos por minuto). Que fundamento é que possuirão?

Por outro lado uma das chaves do êxito de qualquer trabalho experimental é a capacidade de manter sob controlo os erros experimentais cometidos. Por isso, no nosso entender, mais grave ainda que não existir qualquer indicação segura sobre qual deve ser o ponto terminal da tamisagem, é o facto de não possuímos nenhuma estimativa do erro instrumental cometido durante a análise granulométrica.

No nosso entender esta situação raia os limites do absurdo porque não acreditamos que os técnicos que com ela convivem diariamente se resolvessem a comprar qualquer aparelho de medida para o seu laboratório, nem que de uma simples balança se tratasse, sem saber qual o seu grau de precisão. Talvez por causas análogas é que sempre tivemos a sensação difusa de que há qualquer coisa de errado no modo como os *preparadores de minérios* encaram o trabalho laboratorial.

Qualidade da separação

No que respeita à questão da precisão da medida, o trabalho de Kapur *et al* (1977) fornece algumas indicações sobre o modo como o erro da análise granulométrica varia no

tempo, se aceitarmos as limitações do modelo que construíram (será sucintamente descrito em 2.4.1).

Assim, verificaram que a variância do número de partículas de "undersize" remanescentes sobre o peneiro cresce inicialmente, atingindo um máximo para

$$t = \log_2 2 / \lambda \quad [2.1]$$

e tendendo depois assintoticamente para zero (Fig. 2.3). Em [2.1], t é o tempo de residência do minério e λ é um parâmetro que está ligado à frequência dos choques das partículas com a malha do peneiro.

Mas mais significativo que a variância é o quadrado do coeficiente de variação, já que mede o erro relativo no número de partículas do infracrivo que ainda não passaram ao lote seguinte e que decresce monotonamente com o tempo de peneiração (Fig. 2.4).

Mais tarde, Madureira, C. M. (1985) retomou estes resultados em termos de trabalho teórico e pôde estabelecer a evolução das curvas inferiores de partição da peneiração em função do tempo (Fig. 2.5).

Os resultados deste último autor concordam com o que já é sabido, isto é, que as partículas do lote granulométrico que têm dificuldade em passar se encontram na classe granulométrica imediatamente acima do calibre de corte feito pelo peneiro. São elas, em função do tempo, que vão constituir os "misplaced" da

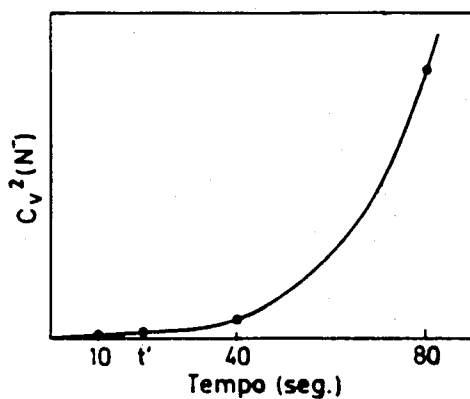
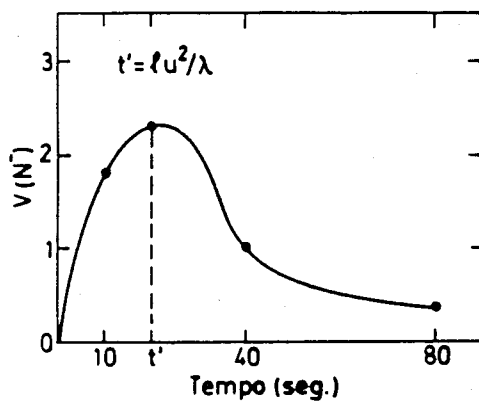


Fig. 2.3: Evolução da variância do infracrivo.

Fig. 2.4: Variação no tempo do C_v^2 do infracrivo.

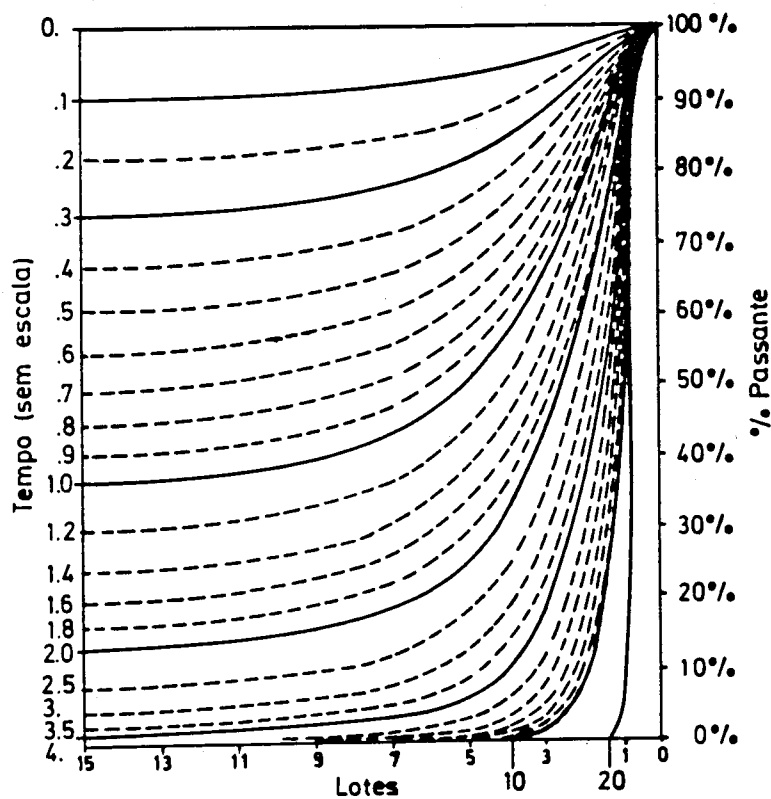


Fig 2.5: Evolução no tempo das curvas de partição.

curva de Trompp (sobre a definição e papel da curva de Trompp, veja-se Testut, R. J. (1955, pp. 32-41)) e causam, por isso, o erro da separação.

Habitualmente considera-se que o tramo superior da curva de partição por tamisação, ao contrário do que acontece com os outros processos de classificação, corresponde a um degrau de Heaviside. Isto é, os "misplaced" só ocorrem no sobrecrivo e nunca no infracrivo, porque, como as partículas de calibre superior ao da luz do peneiro não conseguem nunca passar ao lote

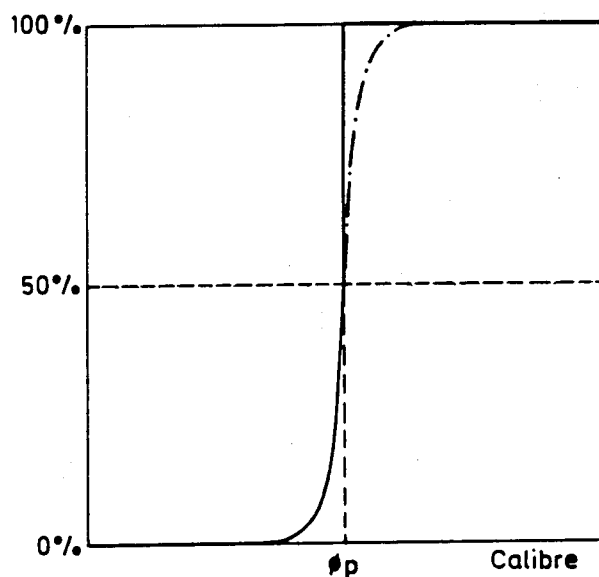


Fig 2.6: A curva de Trompp da tamisação;

- : "misplaced" apenas no sobrecrivo;
- .-.- : "misplaced" no infracrivo.

granulométrico imediato (desde que a malha esteja em boas condições), a peneiração produz sempre um corte exacto.

Contudo, se levarmos em linha de conta o facto de que o calibre de corte varia no tempo durante a peneiração (Fig 2.2), concluir-se-á que também se podem considerar "misplaced" no infracrivo (Fig. 2.6)

Duas questões

Este problema da precisão da tamisagem pode revestir-se de duas formas, tal como aconteceu no nosso caso, já que a tamisagem pode ter dois propósitos distintos: a simples análise granulométrica que se pode (e deve) efectuar sobre amostras representativas de dimensão tanto quanto possível reduzida e a preparação de amostras com vista a posteriores ensaios de fragmentação ou de concentração.

No primeiro caso, estamos interessados em ter um controlo eficaz sobre a precisão com que a peneiração está a ser conduzida, de modo a que, idealmente, apenas existam em cada infracrivo as partículas que na realidade lá devem estar. Esta preocupação pode ser resumida numa única pergunta: "Quando é que devo parar?"

No segundo caso as coisas tomam uma forma ligeiramente

diferente. Agora já não podemos trabalhar com amostras de pequena dimensão mas, pelo contrário, estamos a utilizar os peneiros como separadores (de alta precisão, espera-se ...) manipulando, frequentemente, amostras com vários quilogramas. Então, se quisermos levar a separação em lotes granulométricos aos extremos da precisão, vamos ter que nos defrontar com tempos de peneiração que são perfeitamente inoportáveis. Aqui a pergunta deve ser posta de outro modo: "Como é que posso reduzir responsavelmente o tempo de preparação da amostra sem que os resultados dos meus ensaios de fragmentação ou de concentração sofram com isso?

Só podemos dar uma resposta cabal a estas duas questões se possuirmos um conhecimento razoável dos factores que determinam a cinética de tamisagem e, ainda, do modo como os erros instrumentais influenciam o processo.

3. Trabalho experimental

3.1 os ensaios

Os ensaios físicos consistiram em tamisagens efectuadas sobre amostras providas de materiais diversos que foram executadas numa série completa de peneiros ASTM (norma E11-70) da marca Retsch com as luzes seriadas em progressão geométrica de razão $(2)^{1/2}$. O erro no calibre de corte que se pode atribuir à deformação da malha metálica foi minimizado pela utilização exclusiva de peneiros novos.

Os peneiros foram colocados num agitador Retsch (Fig. 2.1A) em três grupos de cinco: o primeiro de 4 a 16 mesh, o segundo de 20 a 70 e o terceiro de 100 a 400 mesh. Procedeu-se à análise granulométrica dos materiais a tempos totais longos que variaram, consoante a finura das partículas entre 90 e 360 minutos. Os lotes granulométricos foram pesados sistematicamente a intervalos de 15 minutos numa balança Mettler PC 4000 de precisão 0.1 gr.

Os ensaios (e respectivos ajustes) foram designados pelas iniciais(*) do material que foi analisado granulométrica-

(*) VGN significa: minério de Vale de Gatas, nova toma.

mente, seguidas por um ordinal que corresponde ao número de ordem (cronológica) do ensaio e ainda por um outro, retirado do conjunto {1,2,3} que designa o grupo de peneiros utilizado. Assim, por exemplo, U23, significa minério da Urgeiriça, segunda amostra, terceiro grupo de peneiros.

Com os valores assim obtidos formaram-se as matrizes dos dados experimentais que foram introduzidas, como "input", nos programas de simulação.

As versões iniciais destes últimos foram desenvolvidas em BASIC, num computador Cyber 170/720, no Centro de Informática da Universidade do Porto e em Pascal HiSoft, correndo num Sinclair Spectrum 48k.

A versão final dos programas foi desenvolvida em TurboPascal (versão 3.00B) num compatível IBM (com processador Intel 8086). Os programas foram depois transpostos, através de um protocolo de ligação -Kermit- para um minimicro Stride 460 (com processador Motorola 68020), onde, depois de alguns acertos de compatibilização, se efectuaram as corridas finais de ajuste, correndo em Pascal USDC, sob Unix.

Foram produzidos os seguintes programas relativos à tamisagem:

CRM2N1.PAS - recupera os vectores dos parâmetros para cada ensaio físico;

TEMPO.PAS - versão do programa anterior que determina o

ponto final e o erro da tamisagem;

NOSTRADAMUS.PAS - versão de CRM2N1.PAS que actua como previsor (veja-se 2.7.1);

GRAF.PAS - programa auxiliar de execução dos gráficos de ajuste.

Finalmente, transferiram-se os resultados dos ajustes de volta para o compatível IBM, onde as tabelas e uma parte dos gráficos foram executados com o software integrado Symphony (versão 1.1). Os testes estatísticos foram feitos no compatível IBM, com o utilitário StatGraphics.

O presente texto foi escrito em IBM PC com o editor de texto DisplayWriteAssistant (versão 1.5), enquanto que os gráficos que ilustram os ajustes foram executados num "plotter" Epson HI-80.

3.2 As amostras de minério

Como o nosso propósito inicial se centrava na utilização do granodiorito, as quatro primeiras amostras foram obtidas a partir do mosaico de exportação descrito em (1.3.2), pelo mesmo processo que serviu para produzir as cargas do moinho.

Mais tarde surgiu-nos a necessidade de obter novos dados com outros materiais. Para esse fim utilizámos alguns miné-

rios já fragmentados (naturalmente ou não) e que se encontravam armazenados no Departamento de Minas. Vamos passar a descrevê-los muito sucintamente, apenas no que interessa mais directamente ao presente trabalho.

Minério de Vale de Gatas: amostras VG e VGN

Trata-se de um minério filoneano de estéril quartzoso e com encaixe de xisto bastante metamorfizado e mineralizado em volframite e cassiterite. A quantidade de mica (verosimilmente derivada das salbandas) é diminuta.

Aparecem partículas esquirolosas de quartzo, mas são curtas e em escassa percentagem. Pelo seu lado, o xisto não dá fragmentos muito alongados, mas sim predominantemente tabulares. Ocorrem ainda algumas partículas quase esféricas que são, segundo todas as evidências, concreções de limonites.

Minério da ENJ (mina???): amostras U

Trata-se de um micaxisto pouco metamorfizado (ou retrometamorfizado?) com quantidades importantes de mica e mineralizado em torbenite.

As partículas entre 4# e 50#, quando vistas à lupa, apresentam-se achatadas, equidimensionais em planta e praticamente sem esquirolas. Abaixo dos 100# acentua-se um pouco a irregularidade das formas.

Areia de duna (praia de Miramar): Amostras A

Como nos interessava testar o modelo com um material de características peculiares escolhemos uma areia de duna por se tratar de um sedimento muito maduro. Segundo as evidências disponíveis as partículas foram classificadas pelo menos duas vezes: a primeira pela acção da água, na linha de maré e a segunda, durante a construção da duna, por acção eólica. Por isso não admira que a quase totalidade das partículas se concentrem nos lotes +40 e +50 mesh.

Os grãos são largamente equidimensionais, com uma grande percentagem de arredondados e polidos ($\approx 20\%$). Mineralógicamente, o material é constituído, na sua quase totalidade, por quartzo, mas abaixo dos 50# começam a aparecer densos (principalmente magnetite) em proporção elevada. Abaixo de 70# aparecem micas em grande quantidade, oriundas dos micaxistos próximos e as esquilrolas tornam-se agora muito mais abundantes.

4. O modelo de tamisagem

4.1 Um pouco de história

Na última dezena e meia de anos tem-se vindo a assistir em quase todo o mundo a um importante esforço colectivo na tentativa de aplicar modelos numéricos às operações unitárias da Preparação de Minérios, chegando-se mesmo a propor "packages" para projecto integrado de lavarias (Lynch & Narayan, 1986).

Embora não emitamos quaisquer juízos de valor sobre este tipo de abordagem, uma certeza nos fica: preferem-se aspectos mais espectaculares e apelativos (como a flutuação ou a moagem) em detrimento de outros que, por serem mais obscuros (mas não menos importantes), são de longe em longe são contemplados com a esmola de um artigo.

É nesta última situação que se encontra a análise granulométrica por tamisagem, base de todo o trabalho laboratorial. Na verdade, só temos conhecimento de três trabalhos relevantes sobre o assunto, embora já um pouco antigos: Whitby, K. T. (1958); Kaye, B. K. (1962) e Kapur *et al* (1977). Vamos passá-los em revista muito sucintamente.

Whitby, K. T. (1954).

Trata-se de um trabalho muito curioso onde o autor, engº mecânico, utiliza a análise dimensional para estabelecer um modelo da tamisação descontínua que valida através de técnicas estatísticas diversas.

Com base no seu próprio trabalho experimental e num anterior artigo de Fagerholt (1945), afirma que o processo de peneiração se divide em dois períodos distintos, mas consecutivos no tempo, separados por um período de transição (Fig.2.7).

Para descrever o primeiro, propõe uma cinética linear de 1ª ordem e para o segundo, afirma que se pode ajustar com sucesso uma lei log-normal à cumulante do infracrivo.

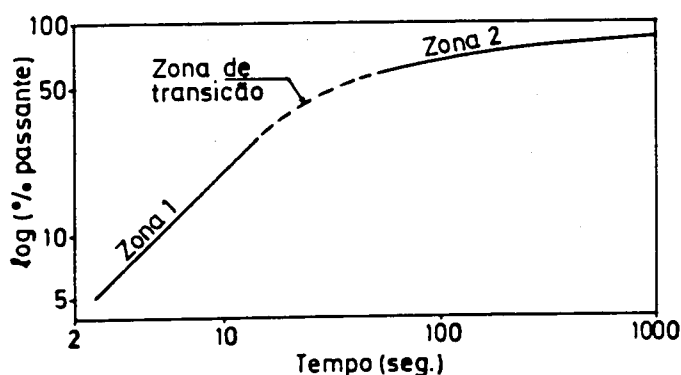


Fig 2.7: Duas fases sucessivas na peneiração - adaptado de Whitby, K. T. (1954).

Para lá de quaisquer reparos que o tipo de abordagem seguido pelo autor hoje em dia poderia suscitar, são de notar algumas das suas conclusões:

1. O ritmo da peneiração depende fortemente da carga de partículas sobre o peneiro e é tanto mais alto quanto mais arredondadas forem as partículas e mais liso o seu contorno.

2. O tipo de agitador utilizado na tamisagem tem um papel decisivo na cinética do processo. Isto mesmo pudemos comprovar às nossas custas quando, nos ensaios iniciais, utilizamos um agitador suspenso da Denver.

3. O autor indica que a duração do primeiro período da tamisagem é muito variável, indo desde menos de 1 minuto para as "pérolas" de vidro, até cerca de 30 minutos para partículas de farinha.

4. O aumento da carga de partículas a analisar atrasa de modo substancial a passagem do primeiro período de peneiração para o segundo.

Kaye, B. H. (1962).

O autor, físico de formação, dirigiu o seu trabalho no sentido da análise do erro associado às análises granulométricas feitas por tamisagem.

Para esse efeito desenvolveu um modelo da peneiração (cinética linear), bastante mais limitado que o de Whitby, K. T. (1958) que é aplicável, segundo o autor, apenas à parte terminal da separação e ao caso de partículas esféricas. Confrontou este modelo com resultados experimentais obtidos a partir de peneirações feitas à mão sobre um material constituído por esferas de bronze.

Em seguida, desenvolveu e aplicou um processo gráfico de determinação do valor do "oversize" para tempos de residência infinitos a partir de quatro tamisagens feitas à mão sobre amostras retiradas do mesmo material. Finalmente, comparou os seus valores com os que são obtidos quando é utilizada a norma BSS 1796 (análise granulométrica por peneiração).

Como seria de esperar, pelas datas de publicação, nestes dois trabalhos não são utilizadas quaisquer técnicas numéricas. O mesmo já não se dirá do artigo que descreveremos de seguida e que, tanto quanto julgamos saber, é, à data, o único caso de produção de um modelo numérico de tamisagem.

Kapur, P. C. *et al* (1977)

Os autores consideram que a passagem das partículas de infracrivo através da malha de um único peneiro obedece a uma ci-

nética linear de 1ª ordem, desde que, como eles, possamos admitir que as partículas são morfológicamente idênticas e não interatuam entre si. Em seguida utilizam as condições mais ou menos evidentes a que deve obedecer a probabilidade de passagem de uma partícula de infracrivo - "processo de morte simples" - para estabelecer uma equação diferencial em t e às diferenças finitas em N (nº de partículas de infracrivo que ainda se mantêm sobre o peneiro), que integram analiticamente, resultando

$$P[N(t) = n] = \binom{n_0}{n} p^n (1-p)^{n_0-n} \quad [2.1]$$

Esta equação afirma: a probabilidade de que o número de partículas de infracrivo $N(t)$ que ainda se encontram sobre o peneiro seja igual a n , ao fim do tempo t , corresponde a uma distribuição binomial, de parâmetros:

n_0 - nº de partículas de infracrivo sobre o peneiro para o instante $t = 0$;

$p = e^{-\lambda t}$, onde t é o tempo e λ é uma constante de proporcionalidade que representa a frequência dos choques das partículas com a malha do peneiro.

Posteriormente, introduziram no modelo o efeito de cegagem da malha, que consideraram que correspondia a um simples processo de Poisson.

Os autores informam que obtiveram com este modelo ajustes

razoáveis para tamisagens feitas com um "sonic sifter", enquanto que já não puderam dizer o mesmo para o caso da utilização de um agitador de peneiros do tipo "RoTap".

O modelo de Kapur *et al* (1977) é criticável nos seguintes aspectos:

1. Não é tomado em consideração o facto de a peneiração ser um processo colectivo em que existe interacção entre as partículas. Foi por isso que os autores apenas o testaram para muito pequenas dimensões amostrais (em massa).

2. Consideram que todas as partículas do "undersize" têm a mesma probabilidade de passagem, o que constitui, evidentemente, uma aproximação grosseira.

3. Não foi tomada em consideração a existência de isocri-vo, o que levou os autores a só utilizarem nos seus ensaios físicos amostras muito bem calibradas.

4. Finalmente, como as condições a que supõem que deve obedecer a probabilidade de passagem de uma partícula isolada são válidas para $\Delta t \rightarrow 0$, não é possível a sua implementação directa em casos mais complexos que tenham que fazer apelo à integração numérica (veja-se 3.8 e 3.10).

4.2. Cinética linear de primeira ordem

Consideremos que, após inspecção visual, decidimos utilizar na análise granulométrica um conjunto de n_c peneiros que, se forem bem escolhidos, repartirão a nossa amostra em $n_l = n_c + 1$ lotes de partículas. Fazemos uma pilha com os peneiros seriando-os, de cima para baixo, por ordem crescente do seu número de ordem (isto é, com o de maior luz no topo e o de menor luz no fundo), e coloquemo-los, com o respectivo recipiente do fundo, no vibrador.

Partamos do princípio que o ritmo de passagem das partículas através da malha do peneiro é, em cada intervalo temporal suficientemente diminuto (ver 3.8.2), proporcional ao seu número sobre o peneiro, o que é o mesmo que propor uma cinética de primeira ordem para a tamisação batch.

Tomemos o peneiro k da nossa pilha e analisemos o modo como varia com o tempo, durante a tamisação, a quantidade(*) m_{kl} de partículas pertencentes ao lote granulométrico l que sobre ele se encontra. Essa variação é dada por

$$\frac{d}{dt} c_{kl} = -l \frac{c_{kl}}{k_l} + l \frac{c_{k-1,l}}{k-1_l} \quad , \quad [2.2]$$

$$(k=1, 2, \dots, n_c); (l=k, \dots, n_c+1)$$

(*) A quantidade de material pertencente a cada lote granulométrico, embora tenha sido determinada em massa nas tamisações reais, foi depois transposta para número e/ou área ocupada pelas partículas, devido ao modo como o modelo foi construído.

onde a constante de proporcionalidade c_{kl} , é o coeficiente cinético do lote granulométrico l , quando se encontra sobre o peneiro k . A primeira parcela representa a quantidade do lote l que, no intervalo temporal dt , passa ao peneiro imediatamente inferior, enquanto que, simetricamente, a segunda parcela corresponde o número de grãos minerais que, no mesmo intervalo de tempo, chegam ao peneiro k , vindas do que lhe fica imediatamente acima. Como é evidente, esta parcela aditiva é a simétrica da parcela subtractiva para o peneiro $k-1$. Por isso, tanto no que respeita à integração (ver 3.10) como no que respeita à própria cinética, basta-nos tomar a fracção de cada lote que passa ao peneiro que está por baixo, ou seja, considerar apenas $(nc+1) \cdot nc/2$ equações cinéticas da forma

$$\frac{d}{dt} m_{kl} = -c_{kl} m_{kl} \quad [2.3]$$

$$(k= 1, 2, \dots, nc); (l= k, \dots, nc+1)$$

e proceder, para cada tempo t , às respectivas adições e subtracções.

Considerando o caso de um único peneiro e supondo que os coeficientes cinéticos são invariáveis no tempo, ou seja, que a cinética de 1ª ordem é linear, a integração de qualquer uma das equações do tipo [2.3] resulta em

$$m_{kl} = m_{kl}^0 \text{Exp} (-c_{kl} t) \quad [2.4]$$

onde m_{0k1} é o número de partículas do lote 1 que se encontram sobre o peneiro k no início da tamisagem. Nestas condições, a variação da massa dos lotes granulométricos contidos sobre um único peneiro teria a forma de uma exponencial decrescente (Fig 2.8).

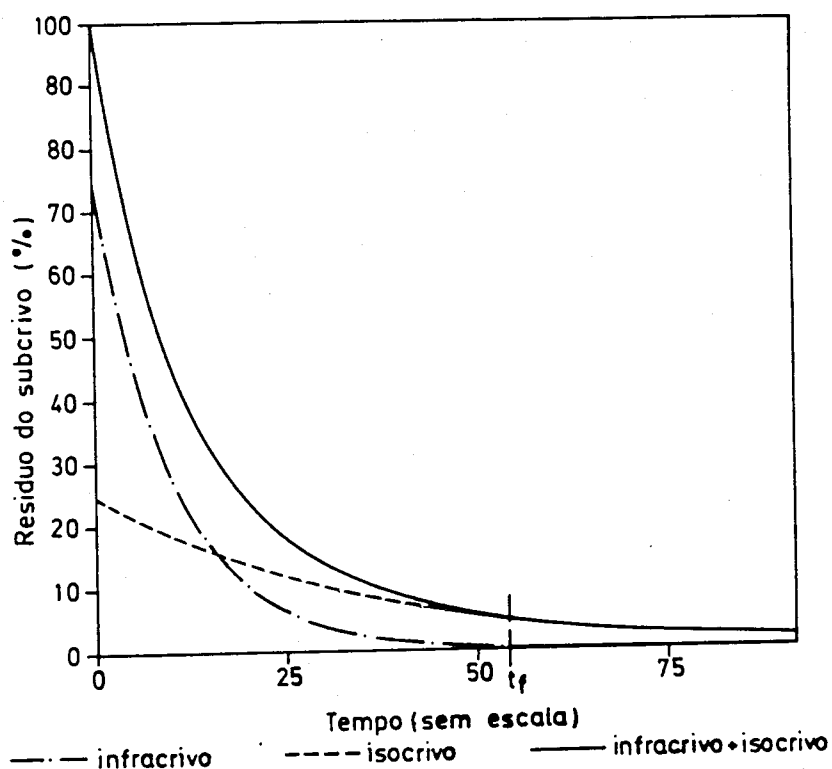


Fig. 2.8: Duas cinéticas simultâneas de tamisagem.

4.3 Probabilidade de passagem

Seja a cinética linear ou não, precisamos de saber que forma tomam os coeficientes cinéticos c_{k1} . Numa primeira análise, devem depender não só das distribuições das propriedades da população que sejam relevantes para o caso da tamisagem,

distribuição granulométrica,

forma das partículas,

quantidade de material,

mas também das condições operatórias em que ela decorre isto é:

agitação conferida ao material,

área dos peneiros,

estado de colmatção das malhas de tamisagem,

crivos utilizados (luzes e diâmetros dos fios).

Mas quando afirmamos que a peneiração depende da quantidade de partículas e do estado de colmatção das malhas, estamos implicitamente a considerar que o processo é não-linear, porque estes dois factores variam no decurso da operação. Realmente, trata-se de um processo de separação que actua sobre sistemas particulados e, forçosamente, existe interacção entre os grãos minerais, tanto mais intensa quanto maior for a agitação do meio e quanto maior o número de partículas. Então, o ritmo a que a tamisagem vai decorrer, mesmo que se consigam manter fixas as características operatórias do agitador dos peneiros, não se mantêm constan-

te, ou seja, o processo é não-linear: o modelo gráfico linear, que apresenta na Fig. 2.8, para o infracrivo, não passa de uma primeira aproximação.

Por outro lado, temos de levar em linha de conta que a tamisagem é, intrinsecamente, um processo estocástico de tentativa e erro, porque as partículas, a cada um dos impulsos a que são submetidas pelo mecanismo de vibração, adquirem uma certa probabilidade de passagem ao infracrivo, que depende tanto das suas próprias propriedades como das características (variáveis) do meio circundante: então os coeficientes cinéticos podem (e devem) ser formulados como probabilidades (de certo modo ligadas à lei binomial).

Para descrevermos convenientemente o mecanismo interno da tamisagem, atentemos no facto de podermos decompor cada tentativa bem sucedida de passagem de uma partícula ao lote inferior, por parte de uma partícula, na ultrapassagem de duas barreiras sucessivas:

- a primeira, criada pela presença dos outros grãos, que lhe impedem o acesso à malha do peneiro;
- a segunda, que é formada pela própria malha de tamisagem.

Quer isto dizer que a probabilidade instantânea de passagem de uma partícula deve ser escrita como o produto de dois factores:

- a probabilidade de a partícula entrar em contacto com a ma-

lha de tamisagem, que é devida ao carácter colectivo (e não-linear) do processo de tamisagem;

- a probabilidade de o fragmento passar ao infracrivo, se entrar em contacto com a malha, que representa o comportamento da partícula e depende apenas das suas propriedades individuais.

Resumindo o que foi dito sob a forma de uma expressão:

$$P_1[\text{pass.}] = P_1[\text{contacto}] * P_1[\text{pass.}|\text{contacto}], \quad [2.5]$$

em que P_1 designa a probabilidade instantânea.

Vejamos primeiro como é que $P_1\{\text{passagem}|\text{contacto}\}$ deve ser descrita. Para isso tomemos uma única partícula na população que se encontra sobre o peneiro e observê-mo-la durante um intervalo de tempo suficientemente curto (da ordem de um ciclo de vibração do agitador dos tamises) para que, verosimilmente, a sua trajectória não seja perturbada pela interacção com qualquer uma das suas congéneres. Nessas condições, ela só passará ao lote imediato se a sua trajectória intersectar a malha de tamisagem, sem que toque no tecido metálico.

Olhando para a Fig. 2.9., verifica-se que, nessas condições, uma partícula que incida sobre a malha de tamisagem segundo um ângulo próximo da normal, tem à sua disposição para passar uma área que é dada por

$$(l_k - \phi_1)^2 \quad [2.6]$$

$$(k = 1, 2, \dots, n_c); (l = k+1, \dots, n_l);$$

que corresponde apenas a uma fracção da área total ocupada por cada malha do tecido de tamisagem, que, por sua vez, é expressa por

$$(l_k - f_k)^2 \quad [2.7]$$

$$(k = 1, 2, \dots, n_c); (l = k+1, \dots, n_l);$$

com: l_k - luz nominal do peneiro; f_k - diâmetro do fio da malha de tamisagem; ϕ_1 - diâmetro nominal das partículas do lote 1.

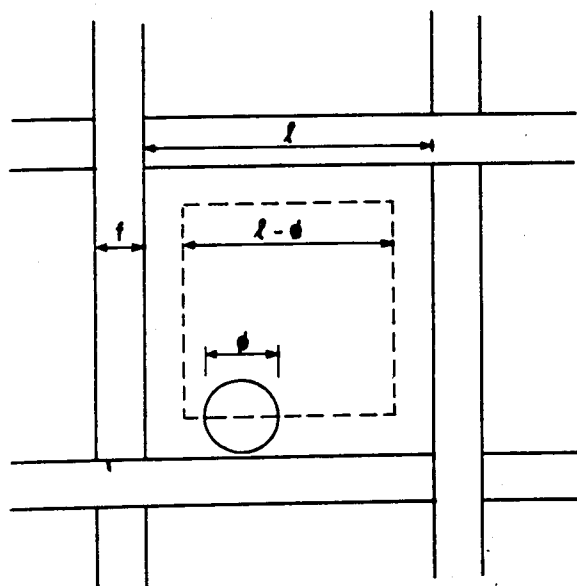


Fig 2.9: Passagem de uma partícula através da malha do tamis;

f - diâmetro nominal do fio; l - luz nominal; ϕ - calibre da partícula.

A determinação do calibre nominal das partículas l , indispensável ao cálculo da probabilidade de passagem *a posteriori*, bem como à determinação dos valores a_l e $np_{l,j}$ (respectivamente a área da secção recta nominal das partículas do lote l e o número de partículas do lote granulométrico l) contradiz frontalmente o princípio de não-ingerência dentro do intervalo granulométrico que foi enunciado em (1.2.2). Porém, como se verá mais adiante em (2.6.4), ϕ_l só tem valor operacional, por ser sempre possível atribuir-lhe novos valores dentro do intervalo $]l_{l-1}, l_l[$, limitado pelas luzes nominais dos peneiros, sem que os raciocínios que envolvem o estabelecimento do modelo percam a sua validade.

Assim sendo, a probabilidade de a partícula passar, quando entra em contacto com a malha de tamisagem, é dada por(*)

$$P[K, l] = \begin{cases} \frac{(l - d_l)^2}{\binom{l}{k} - \binom{d_l}{k}}, & \text{com } l < k; \\ \frac{(l - f_l)^2}{\binom{l}{k} - \binom{f_l}{k}}, & \text{com } l = k; \\ 0, & \text{com } l > k. \end{cases} \quad [2.8]$$

Note-se, a propósito, que as razões entre áreas ocupada por aberturas e áreas totais dos peneiros da série de Tyler, que correspondem ao limite superior da probabilidade de passagem *a posteriori* para as partículas de cada calibre, é muito menor do que se suporia à primeira vista, como se retira da Tabela 2.3.

(*) Os calibres mais finos são os de número de ordem mais alto.

Tabela 2.3: Probabilidade de passagem *a posteriori* para partículas de calibre desprezável.

4#	6#	8#	12#	16#
0.570	0.535	0.493	0.459	0.416
20#	30#	40#	50#	70#
0.387	0.367	0.353	0.339	0.339
100#	140#	200#	270#	400#
0.333	0.339	0.343	0.347	0.364

4.4 A não-linearidade

A probabilidade de a partícula entrar em contacto com a malha de tamisagem, dada a competição entre as partículas, deve ser inversamente proporcional à carga presente sobre o peneiro.

Consideremos a população de grãos minerais presente sobre o peneiro. Se as partículas não forem excessivamente leves em relação à agitação que lhes é transmitida pelo aparelho para que o efeito de levitação das partículas seja menosprezável forma-se sobre o peneiro um meio multi-camada. Nessas circunstâncias, a probabilidade instantânea de uma partícula aceder à rede de tamisagem é igual ao inverso do número de camadas formadas:

$$P_{lcont} = \frac{1}{N_c}, \quad [2.9]$$

com

P_{lcont} - probabilidade instantânea de contacto com a malha;

N_c - número de leitos de partículas sobre a malha.

É de esperar que a carga se distribua assimetricamente sobre o peneiro e, também que, no decurso do processo, as partículas com dimensões críticas tendam a colmatar as malhas, diminuindo o número de aberturas disponíveis. Estes dois factos fazem com que nem toda a superfície do peneiro possa ser efectivamente aproveitada. Por isso, no cálculo do número de camadas não pode figurar explicitamente a área total do peneiro, mas sim uma sua restrição, a que chamaremos área útil de tamisagem e designaremos por Sat.

Como é evidente, verifica-se $Sat = Sat(t)$, isto é, a área útil de tamisagem varia no tempo. Como não podemos ter a pretensão de representar o fenómeno modelado em toda a finura da análise atomística mas, pelo contrário, estamos interessados principalmente em que exista concordância entre os valores experimentais e os valores calculados, desde que esta premissa seja satisfeita por um "valor médio" de Sat, isso bastar-nos-á. Deste modo, Sat, constante durante toda a tamisagem, será tomado como parâmetro a ajustar.

Então, sendo:

k - nº de ordem do peneiro;

l - nº de ordem do lote granulométrico;

np_{kl} - nº de partículas do lote l presentes sobre o peneiro k ;

a_l - área nominal (*) da secção recta das partículas do lote l ;

Sat - a área de tamisagem útil,

o número de camadas que se formam à superfície do peneiro é dado pela expressão

$$Nc = \frac{Sat}{\sum_{l=k}^{nl} a_l np_l} \quad [2.10]$$

Dizer-se que a probabilidade de contacto com a malha de tamisagem é o inverso do número de camadas, é estritamente verdade apenas para o acontecimento instantâneo. Como o nosso modelo fenomenológico vai tomar a forma de uma sistema de equações diferenciais (em que a variável independente é o tempo), isso não deveria constituir óbice, porque é sempre possível considerar intervalos de tempo infinitesimos. Contudo, as equações diferenciais [2.3] são não-lineares e, por isso, temos que recorrer à integração numérica. Ora, qualquer que seja o método numérico utilizado, o incremento Δt da variável independente que utilizarmos tem forçosamente que ser, por diversas razões, (veja-se 3.10) várias vezes superior ao

(*) No seguimento do raciocínio estabelecido em (2.4.3), a propósito da determinação do calibre nominal, note-se que a utilização de uma área nominal da secção recta para cada calibre não implica, de modo algum, o estabelecimento de qualquer pressuposto relativamente à forma das partículas.

ciclo de funcionamento do vibrador. Por isso, e sem diminuir no que quer que seja a validade do modelo, tomaremos a probabilidade de contacto como inversamente proporcional ao número de camadas, o que significa que a expressão [2.9] passa a tomar a forma

$$P_{\text{cont}} = V_{\text{Cr}} \frac{1}{N_c}, \quad [2.11]$$

onde a constante de proporcionalidade, V_{Cr} , é designada por velocidade de tamisagem e passa a ser o segundo parâmetro a ajustar.

Na primeira versão do algoritmo de ajuste não se introduziu este parâmetro. Imediatamente se notou que a cinética do modelo era bastante mais lenta do que a real, ao mesmo tempo que se descobria que a qualidade do ajuste melhorava com a diminuição do intervalo de integração Δt , o que na altura, se nos afigurou como sendo um absurdo. Viu-se mais tarde (3.8.1) que tal não era o caso.

A necessidade de "acelerar" a cinética do modelo e de o tornar, até certo ponto, independente de Δt , levou-nos a introduzir V_{Cr} , que à altura, tinha um carácter puramente heurístico. Só mais tarde se encontrou a razão teórica que justificava a utilização do parâmetro. Verificou-se assim, mais uma vez, que "o modelo tem sempre razão".

O parâmetro V_{Cr} representa, pelo modo como foi introduzido, o número de tentativas de passagem ao infracrivo que, em média, cada partícula é capaz de fazer em cada intervalo de tempo

da integração numérica, ou seja, constitui uma medida do estado de agitação do meio separador.

Sendo assim, o modelo passa a ser representado por $(nc+1).nc/2$ equações diferenciais da forma

$$\frac{d}{dt} = - \frac{Sat \quad VCr}{\sum_{l=k}^{nl} a_l^{np} p_l} \frac{(l_k - \phi_l)^2}{(l_k - f_k)^2}, \quad [2.12]$$

que devem ser integradas, para cada configuração de parâmetros, ao longo de todo o intervalo $[t_0, t_{final}]$.

4.5 O isocrivo

Com este primeiro modelo, a aderência do modelo à tamisa-
gem física é bastante razoável, para $t=t_{final}$. Contudo, como se
pode ver no exemplo de Tabela 2.4, estes resultados conseguem-se à
custa de um estrutura dos resíduos em que os maiores valores se
concentram, de longe, nos primeiros instantes da tamisa-
gem: o mode-
lo não poderia nunca cumprir eficazmente a sua função de previsor
e, conseqüentemente, não teria a utilidade necessária.

Pela análise passo a passo do funcionamento do modelo
("tracing") e do modo como os resíduos se iam formando, chegou-se
então à conclusão de que, para o peneiro de ordem k , enquanto que

Tabela 2.4: Ensaio G11: resultados do ajuste do modelo a quatro parâmetros e respectiva matriz dos resíduos.

Tamisação numérica						
tempo	4#	6#	8#	12#	16#	infra
15	111.16	161.85	97.72	75.84	56.78	499.15
30	110.65	152.00	97.86	75.79	56.85	499.35
45	110.22	152.13	97.97	75.79	56.91	499.49
60	109.88	152.24	98.04	75.80	56.93	499.60
75	109.59	152.34	98.09	75.82	56.94	499.70
90	109.36	152.43	98.12	75.86	56.94	499.78

Tamisação física						
tempo	4#	6#	8#	12#	16#	infra
15	115.2	155.6	98.0	75.2	57.3	491.6
30	113.3	153.6	98.6	75.0	57.4	494.9
45	112.3	152.6	98.7	75.6	57.2	496.9
60	111.1	152.3	98.3	76.1	56.8	498.0
75	109.2	153.3	97.8	76.1	56.8	499.2
90	108.3	152.9	98.0	76.3	56.7	500.3

Matriz dos resíduos						
tempo	4#	6#	8#	12#	16#	infra
15	4.0	-6.3	0.3	0.6	0.5	-7.6
30	2.7	1.6	0.7	-0.8	0.5	-4.5
45	2.1	0.5	0.7	-0.2	0.3	-2.6
60	1.2	0.1	0.3	0.3	-0.1	-1.6
75	-0.4	1.0	-0.3	0.3	-0.1	-0.5
90	-1.1	0.5	-0.1	0.4	-0.2	0.5

as partículas pertencentes a, pelo menos dois intervalos granulométricos adiante, passavam ao infracrivo a uma velocidade que concordava com a do caso real, as do lote k+1 passavam excessivamente depressa.

Quer isto dizer que a peneiração das partículas do lote k+1 tomadas sobre o peneiro k, é frequentemente mais lenta que a que se verifica no caso geral, o que está de acordo, quer com as curvas de partição da Fig. 2.5, quer com as observações de Whitby, K. T. (1954), que referimos em (2.4.1).

Por isso, e mais uma vez apenas como necessidade heurística, tornava-se imperiosa a introdução de um efeito retardador neste lote, o que correspondia a admitir que existiam, para cada peneiro, pelo menos duas cinéticas de tamisagem concomitantes (Fig. 2.8), uma mais rápida e outra mais lenta. Enquanto que a primeira se esgota rapidamente pelo desaparecimento das partículas a que diz respeito, a segunda prolonga-se no tempo. A passagem de uma cinética à outra deve realizar-se através de um período de transição.

Para esse fim considerámos que em cada lote existe uma certa fracção de isocrivo, cuja velocidade de passagem, através da malha que o limitará superiormente, é menor que a que ocorre para as restantes partículas (note-se que só considerámos o "isocrivo superior", isto é, as partículas que, apesar das dificuldades, para $t \rightarrow \infty$ acabam por passar ao lote seguinte).

Introduzimos assim dois novos parâmetros no nosso

modelo:

- Fliso[1] - fracção de isocrivo;
- Pliso[1] - parâmetro multiplicador, contido no intervalo [0,1], que tem por objectivo a diminuição da probabilidade total de passagem das partículas do isocrivo.

Assim, em cada ciclo de ajuste, para $t = 0$, cada um dos lotes é decomposto em duas partes através da expressão

$$m_{kl} = \begin{cases} m_{kl} \cdot \text{Fliso}_1 \\ m_{kl} \cdot (1 - \text{Fliso}_1) \end{cases} \quad [2.13]$$

com $\text{Fliso}[1] \in [0,1]$, o que faz com que, para cada peneiro k , a equação diferencial que rege a passagem do lote $k+1$ seja desdobrada em duas: uma para as partículas "normais" e outra para o isocrivo, isto é, respectivamente:

$$\frac{d}{dt} = -\text{Pliso}_1 \frac{\text{Sat} \cdot \text{VCr}}{\sum_{l=k}^n a_l n p_l} \frac{(l_k - \phi_1)^2}{(l_k - f_k)^2}, \quad [2.14]$$

$$\frac{d}{dt} = - \frac{\text{Sat} \cdot \text{VCr}}{\sum_{l=k}^n a_l n p_l} \frac{(l_k - \phi_1)^2}{(l_k - f_k)^2}, \quad [2.15]$$

Como, em cada tamisagem real, foram normalmente utilizados 5 peneiros, isto significa que na verdade estamos a construir um modelo que simula o funcionamento simultâneo de cinco meios de separação, cada um dos quais com as suas particularidades. Então, e a rigor, cada um dos parâmetros referidos

$$\begin{aligned} & \text{Sat}[l], \text{VCr}[l], \text{Plso}[l], \text{Flso}[l], & [2.16] \\ & (l = 1, 2, \dots, n) \end{aligned}$$

deve ser tomado como dependendo do peneiro considerado, e, consequentemente, deve ser afectado de um índice. Passaríamos assim a ter que contar com 4.nc parâmetros para ajustar.

4.6 Configuração operativa mínima de parâmetros

Se bem que todos os parâmetros possuam conteúdo fenomenológico, conceder uma tal liberdade de movimentos ao modelo, faria com que ele deixasse de ser controlável conceptualmente. Ou seja: embora os resíduos provenientes do ajuste numérico resultassem provávelmente muito reduzidos, tanto o caminho seguido pelo algoritmo de pesquisa, como também o seu "ponto ótimo" de paragem seriam largamente indiferentes a variações importantes dos valores dos parâmetros; a solução encontrada seria numericamente instável. Deste modo tornar-se-ia impossível qualquer tentativa de

interpretação dos valores dos parâmetros e a comparação entre ajustes (veja-se Madureira, C. (1988) e Leite, M. (1984)). Ao mesmo tempo, o aumento inconsiderado do número de variáveis conduziria a tempos de ajuste numérico in comportáveis (ver 3.3.4).

Era por isso indispensável que decidíssemos, com base no nosso conhecimento directo do processo de peneiração e apoiados no bom senso, quantos parâmetros diferentes se deveriam considerar para obter um ajuste de boa qualidade, sem que com isso se impedisse a interpretação física dos resultados da modelação.

Muito embora seja de esperar que a superfície útil de tamisagem e a agitação conferida à carga que se encontra sobre cada peneiro dependam da distância ao contrapeso do vibrador e ao ponto onde são aplicadas as pancadas, considerámos que seria legítimo tomar VCr e Sat como invariáveis de peneiro para peneiro.

O mesmo se não poderá dizer dos dois restantes parâmetros, a não ser que acreditássemos que a forma das partículas se manteria imutável de classe granulométrica para classe granulométrica e que a distribuição de calibres dentro de cada intervalo granulométrico seria uniforme. Por isso, numa primeira aproximação, considerámos que Flso e Plso podiam tomar valores diferentes de lote para lote.

Contudo, verificou-se que, se tomassemos o mesmo valor de Plso para todos os lotes, o valor da função objectivo não piorava apreciavelmente. Ao mesmo tempo, através da análise de sensibili-

dade concluímos que, nestas circunstâncias, a resposta do modelo às variações exógenas das matrizes dos dados, ou à introdução de pequenas perturbações dos parâmetros, era muito mais pronta.

Em consequência, a configuração final de parâmetros escolhida e que foi implementada no programa CRM2N1.PAS(*) foi a seguinte:

Sat, VCr, Plso - iguais para todos os lotes,

Flso - um para cada lote.

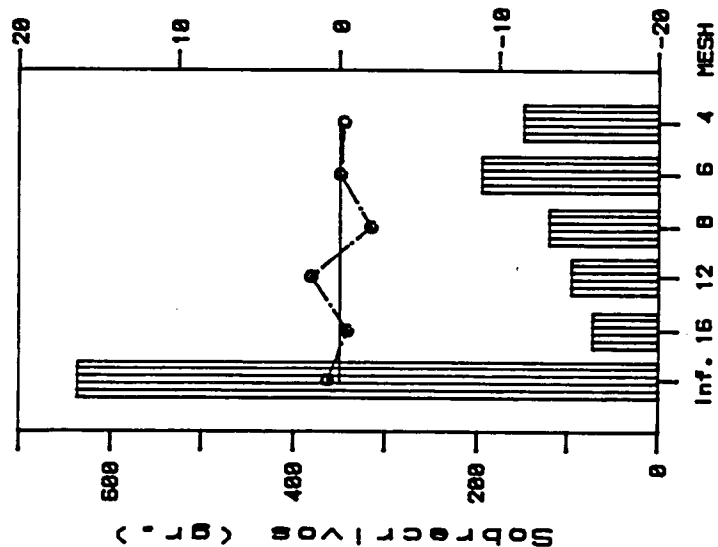
Então, para o número habitual de cinco peneiros passamos a dispor de um conjunto de oito parâmetros o que, permitindo que o modelo gozasse de uma certa flexibilidade, não negava o princípio da condensação de parâmetros (Madureira (1988)).

A qualidade da aderência do modelo aos resultados experimentais e a evolução dos resíduos com o tempo de residência pode ser vista, para cada ajuste no Anexo 2.3, sob a forma de tabelas e gráficos. Apenas com intuitos ilustrativos, escolhemos alguns exemplos mais significativos que se apresentam nas páginas seguintes.

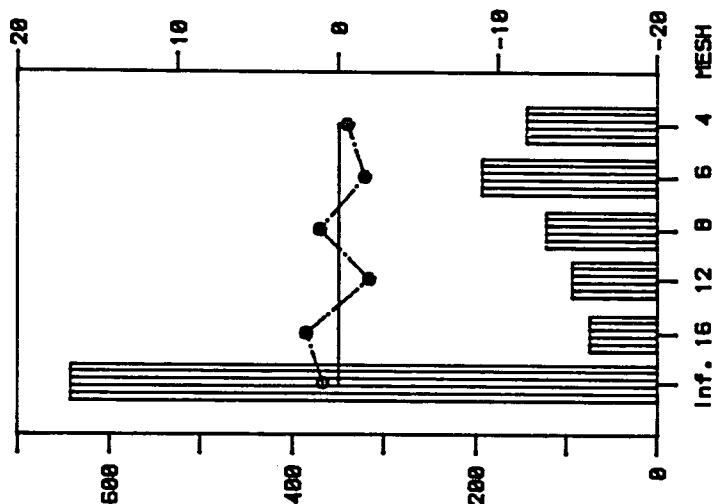
(*) A listagem deste programa apresenta-se no Anexo 3.2, enquanto que o seu fluxograma sumário pode ser visto na Fig. 3.2.

AMOSTRA G21

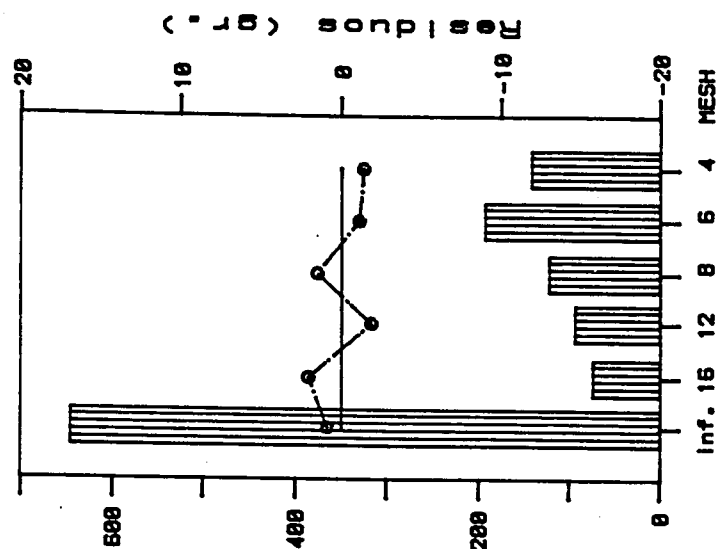
15 minutos



30 minutos

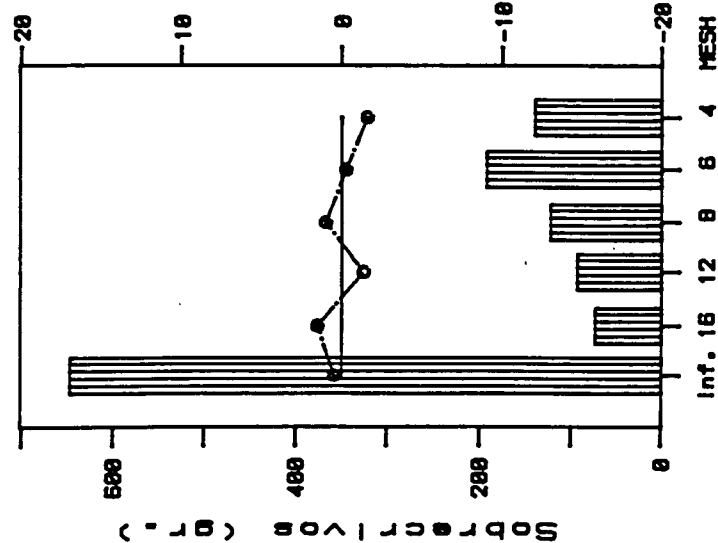


45 minutos

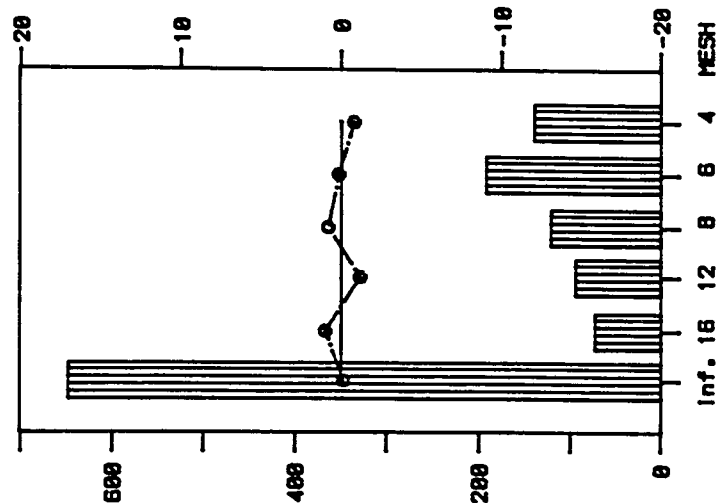


AMOSTRA G21

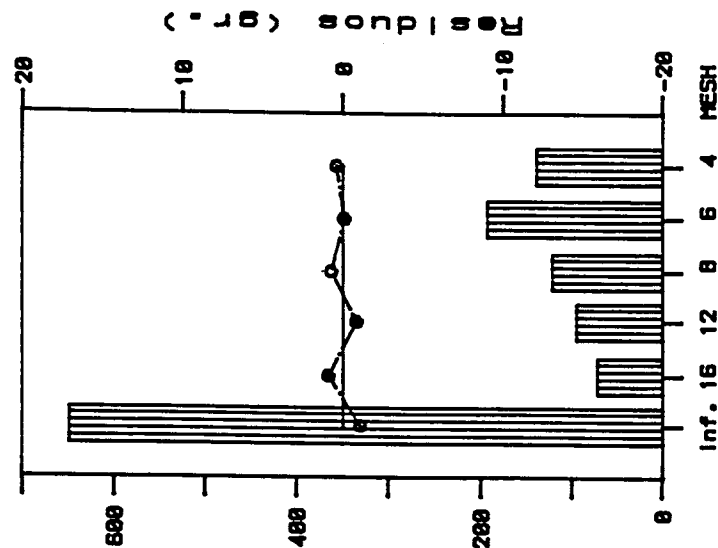
60 minutos



75 minutos



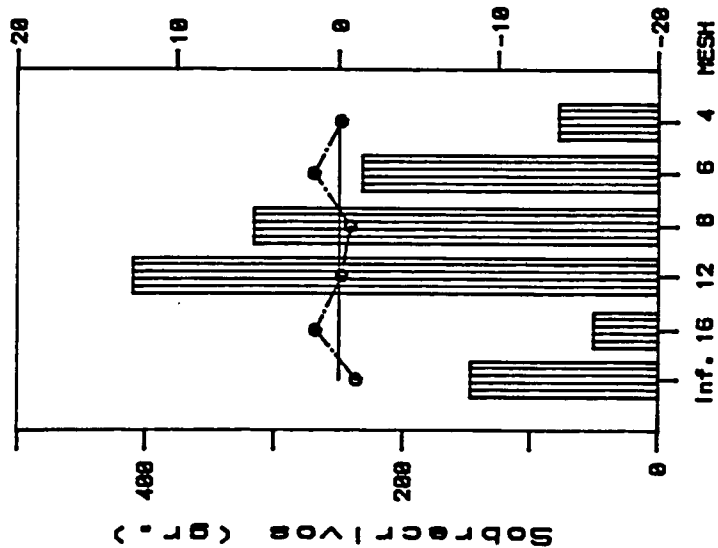
90 minutos



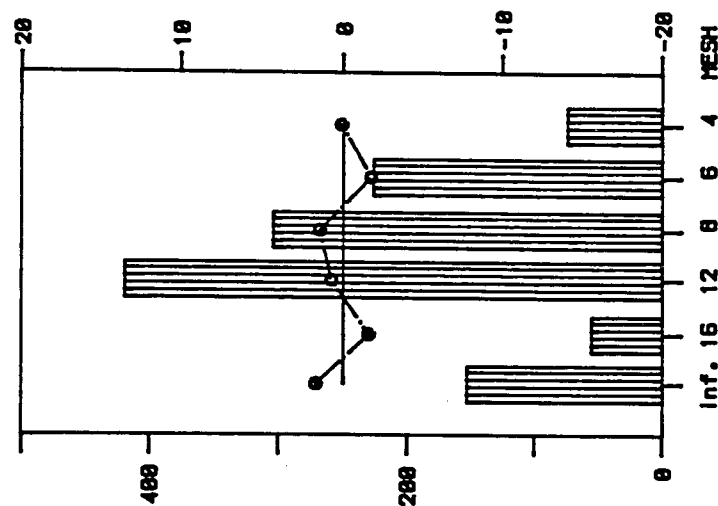
Modelo
Residuo

AMOSTRA VG11

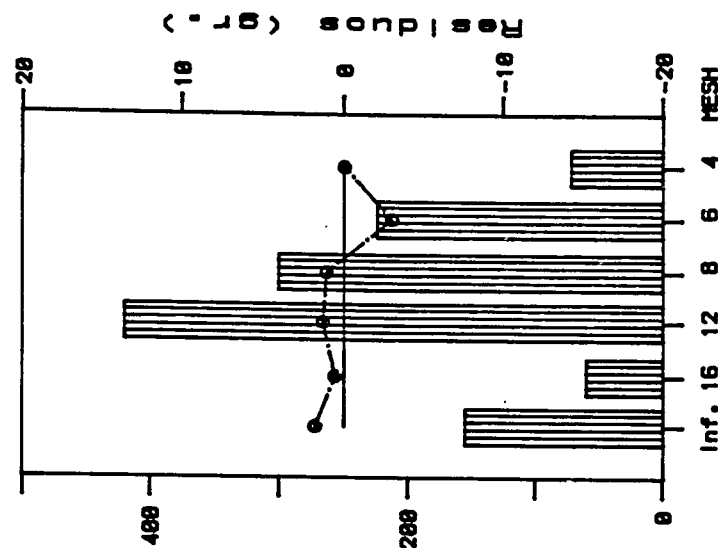
15 minutos



30 minutos



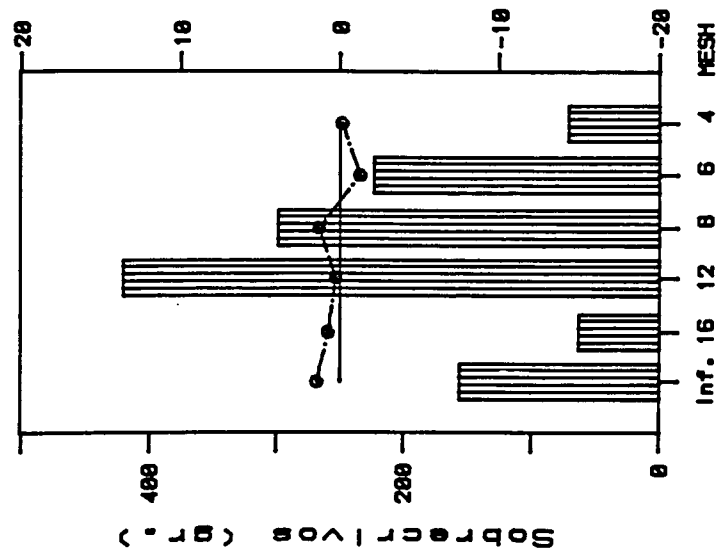
45 minutos



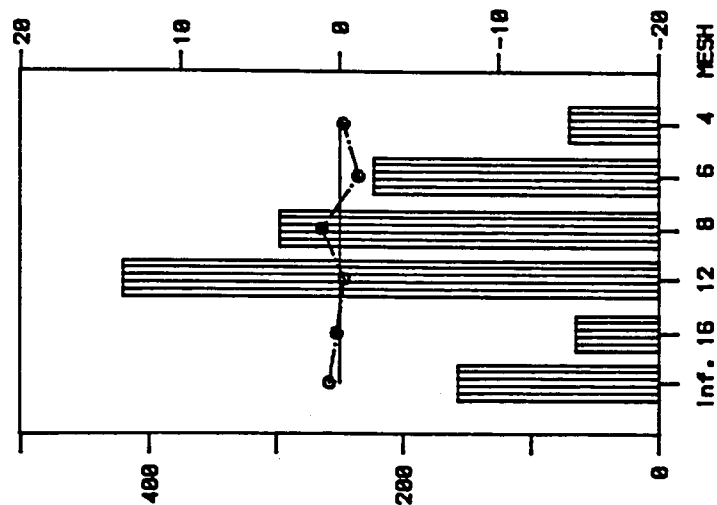
Modelo Resíduo

AMOSTRA VG11

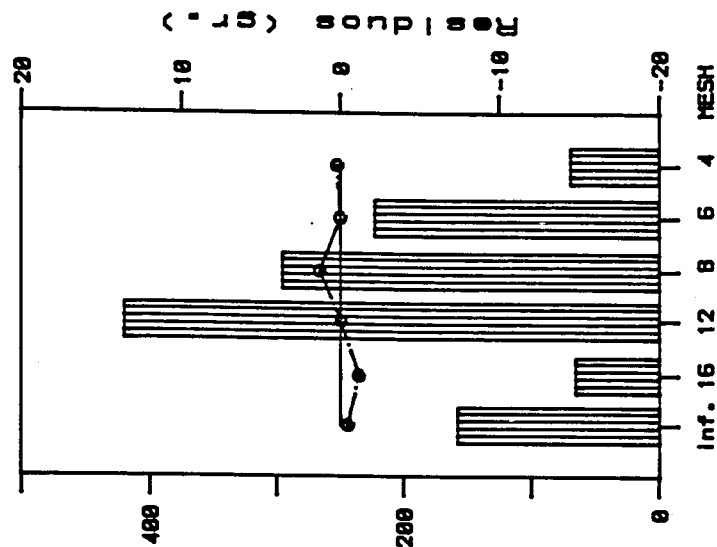
60 minutos



75 minutos



90 minutos



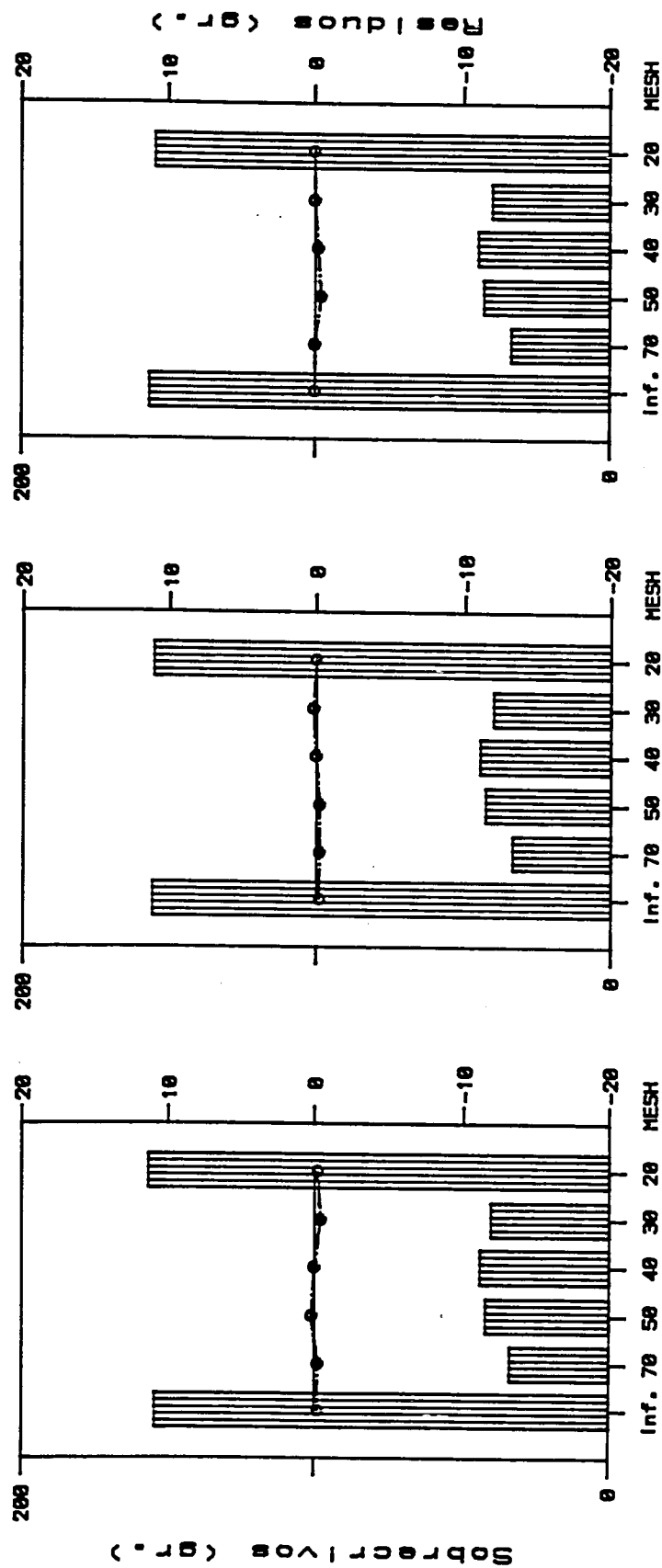
Modelo
Residuo

AMOSTRA U32

15 minutos

30 minutos

45 minutos

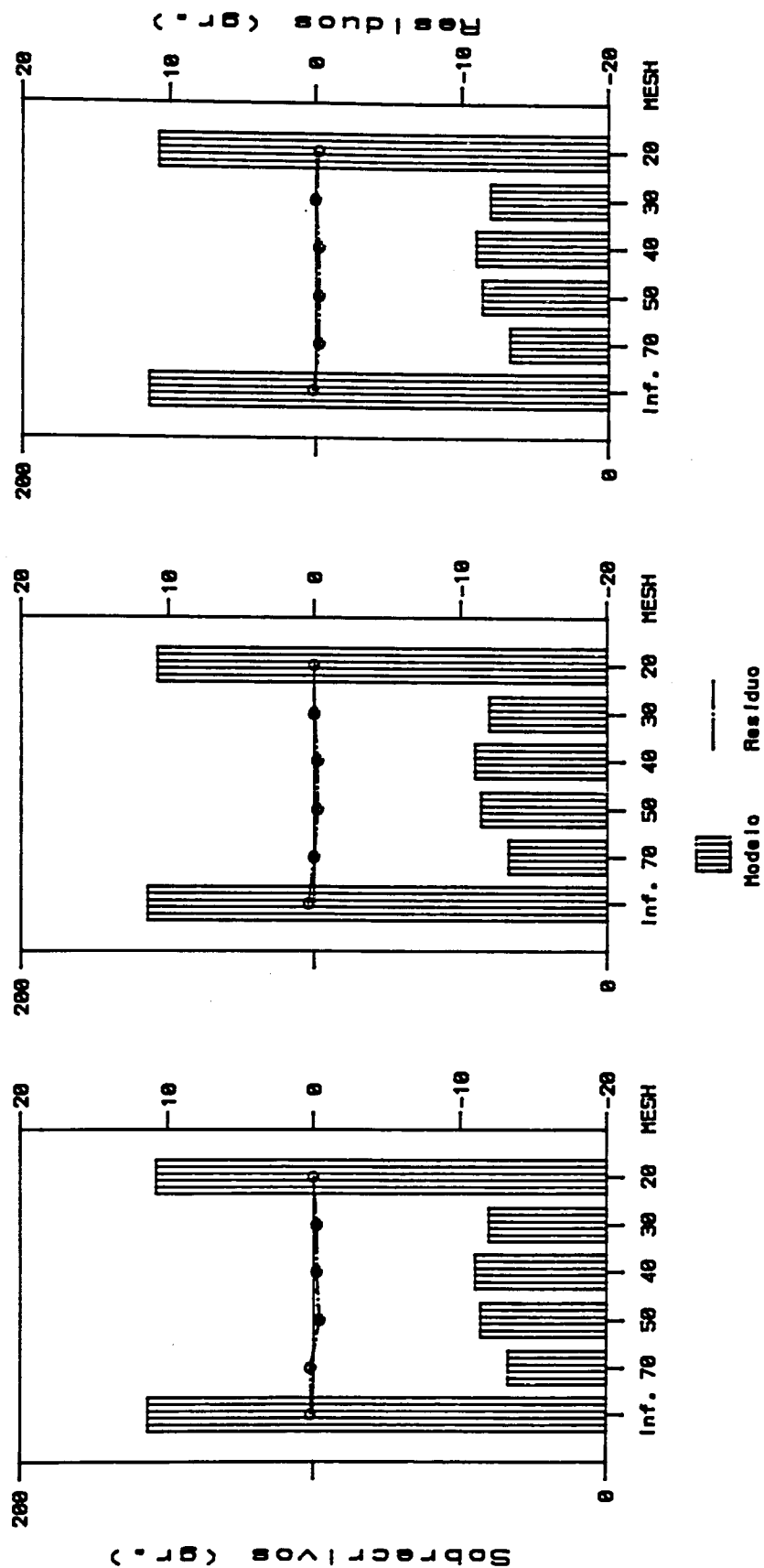


AMOSTRA U32

60 minutos

75 minutos

90 minutos



5. Validação do modelo

Até que ponto se pode afirmar que os ajustes que obtivemos são ou não de boa qualidade?

Esta pergunta corresponde a uma atitude anti-natural do investigador porque o obriga à posição esquizofrênica de tentar encontrar, a todo o custo, brechas no edifício mental que tão laboriosamente construiu, isto é, a constituir-se como implacável polícia de si mesmo. Contudo, a validação do trabalho é indissociável da fase de implementação do modelo e, se possível, é ainda mais importante para o bom sucesso do trabalho do que esta última.

À pergunta anterior, sobre a qualidade dos ajustes, pode responder-se através de processos de índole muito diferente que, se forem utilizados conjuntamente, se potenciam uns aos outros, aumentando muito as nossas certezas sobre as capacidades (ou incapacidades) que o modelo possui quanto à representação correcta dos fenómenos que estamos a modelar.

Contudo, é sempre bom ter presente que a nossa resposta à questão que acima foi enunciada não pode ser dada em termos absolutos, mas antes deve revestir-se de um aspecto gradativo: não existem modelos bons em absoluto ou completamente maus. Da nossa parte só pretendemos que o leitor considere o modelo que se apresentou em (2.4) como adequado à obtenção de novos pontos de

vista sobre as análises granulométricas efectuadas por tamisagem.

É o próprio valor que a função objectivo vai tomando durante o processo de pesquisa que indica ao método de minimização o caminho para o ponto de paragem(*) e indica também (pelo menos é esse o nosso desejo confessado) a configuração de parâmetros que, dentro das limitações impostas pelo modelo, melhor descreve a cinética do processo.

E por isso que o valor que a função objectivo toma no ponto de paragem constitui o primeiro critério da qualidade do ajuste. Contudo, não constitui senão uma sua condição necessária (mas nunca suficiente). Pormenorizemos. Muito embora não possamos asseverar que um valor baixo da função objectivo corresponde a um bom ajuste, é, pelo menos, um indicador fortíssimo nesse sentido; ao mesmo tempo, um valor alto da função objectivo corresponde, com toda a certeza, a um mau ajuste do modelo.

Embora a nossa crença na adequação do modelo quanto ao modo como representa os factos experimentais não seja nunca absoluta, ela pode ser muito aumentada. Existem vários métodos que podemos utilizar com esse intuito.

Para além das técnicas estatísticas habituais em casos semelhantes, que serão tratadas em (2.5.2), precisamos de verifi-

(*) No capítulo 3 discutiremos os métodos que se utilizaram (ou que se poderiam utilizar) para nos assegurarmos de que o ponto de chegada é um ponto de mínimo.

car se o modelo reage correctamente a diversas situações e se a sua reacção, analisável através da estrutura dos resíduos e da configuração dos parâmetros, é passível de leitura física.

Um outro caminho que podemos tomar é o da análise da sensibilidade, técnica que pode ser encarada de um modo teórico profundo, tal como fez Espain, C. (1984, pp. 183-209) ou, no sentido muito mais imediato da simples investigação heurística sobre o modo como a introdução de perturbações na matriz dos dados influencia os parâmetros e a estrutura dos resíduos, o que se fará no Capítulo 3.

Finalmente, a verificação mais sólida (no sentido pragmático do termo) que se pode conceber para um modelo de simulação, ocorre quando demosntramos que com ele podemos prever com sucesso eventos que ainda não aconteceram. Recordemos que foi com este intuito que o modelo de tamisagem laboratorial foi criado.

Mas o papel do modelo não pode ficar por aqui. Também deve ser útil (no sentido utilizado em 1.3.4) por não ser definitivo, isto é, através da análise das suas deficiências devemos poder partir para descrições mais aperfeiçoadas do objecto modelado. Por outras palavras: se com ele pudermos aprender.

Tabela 2.5A: Modelo de tamisagem - vectores dos parâmetros ajustados para as amostras G (granodiorito)

	M.T.	V. Cr.	Sat.	FI[2]	FI[3]	FI[4]	FI[5]	FI[6]	Piso	F.Ob.	R. M.
G11	992.9	118.00	656.70	0.080	0.165	0.154	0.25	0.021	0.023	20.51	0.75
G21	1268.6	104.63	960.36	0.100	0.198	0.199	0.36	0.030	0.031	50.06	1.18
G31	694.4	67.75	234.37	0.164	0.286	0.267	0.49	0.032	0.038	21.52	0.77
G41	603.4	54.33	972.98	0.144	0.206	0.169	0.36	0.029	0.047	16.19	0.67
G12	500.1	56.37	2970.74	0.289	0.207	0.224	0.27	0.046	0.088	4.86	0.37
G22	649.3	93.49	2699.67	0.128	0.018	0.097	0.14	0.053	0.056	57.41	1.26
G32	283.8	67.64	1556.42	0.326	0.297	0.300	0.28	0.081	0.094	2.47	0.26
G42	304.5	72.40	1893.45	0.235	0.213	0.245	0.22	0.052	0.058	0.93	0.16
G13	223.5	77.85	1245.72	0.274	0.733	0.445	-----	-----	0.104	49.49	1.17
G23	289.9	74.82	1563.54	0.329	0.633	0.320	-----	-----	0.082	46.81	1.14
G33	121.1	40.19	1500.06	0.336	0.709	0.561	-----	-----	0.114	34.35	0.97
G43	134.8	29.79	1802.20	0.288	0.691	0.333	-----	-----	0.116	7.95	0.47

M.T. - massa total da amostra

F.Ob.- valor final da função objectivo

R. M.- resíduo médio por pesagem.

Tabela 2.5B: Modelo de tamisação - vetores dos parâmetros ajustados para as amostras VG e VGN (minério de Vale de Gatas).

	M.T.	V. Cr.	Sat.	FI[2]	FI[3]	FI[4]	FI[5]	FI[6]	Piso	F.Ob.	R. M.
VG11	1234.2	37.298	64.008	0.072	0.124	0.103	0.712	0.074	0.101	23.98	0.82
VG21	1234.2	42.739	621.990	0.085	0.089	0.101	0.747	0.062	0.079	20.85	0.76
VGN11	1234.2	30.496	3470.738	0.136	0.100	0.120	0.438	0.169	0.067	61.99	1.31
VGN21	1234.2	23.963	2900.436	0.117	0.104	0.068	0.405	0.001	0.120	73.58	1.43
VGN31	1234.2	29.840	3343.477	0.225	0.183	0.181	0.832	0.712	0.142	97.73	1.65
VGN41	1234.2	18.851	2861.726	0.112	0.107	0.095	0.459	0.519	0.141	62.08	1.31
VGN51	1234.2	26.840	2538.663	0.163	0.118	0.110	0.434	0.327	0.087	108.92	1.74
VG12	161.8	91.81	1012.80	0.177	0.240	0.296	0.308	0.038	0.042	0.41	0.11
VG22	161.8	46.44	1123.18	0.204	0.282	0.314	0.389	0.038	0.092	1.71	0.22

Tabela 2.5C: Modelo de tamisação - vetores dos parâmetros ajustados para as amostras A (areia de duna)

	M.T.	V. Cr.	Sat.	FI[2]	FI[3]	FI[4]	FI[5]	FI[6]	Piso	F.Ob.	R. M.
A12	800.3	22.252	5204.880	0.000	0.015	0.133	0.15	0.048	0.092	25.76	0.78
A22	800.3	37.886	3590.390	0.000	0.022	0.105	0.13	0.107	0.099	11.66	0.53
A32	800.3	35.853	3363.915	0.007	0.022	0.081	0.10	0.098	0.103	6.32	0.39
A42	800.3	39.641	3847.150	0.008	0.036	0.120	0.18	0.137	0.103	4.53	0.33
A52	800.3	39.309	3557.756	0.014	0.017	0.101	0.13	0.055	0.095	11.48	0.52

Tabela 2.5C: Modelo de tamisação - vectores dos parâmetros ajustados para as amostras U (minério da Urgeiriça)

	M.T.	V. Cr.	Sat.	FI[2]	FI[3]	FI[4]	FI[5]	FI[6]	P Iso	F.Ob.	R. M.
U11	1995.6	126.94	1659.63	0.195	0.262	0.274	0.53	0.052	0.025	390.68	3.29
U31	611.6	53.03	741.62	0.053	0.092	0.120	0.16	0.013	0.044	4.71	0.36
U12	1230.0	66.88	3982.30	0.264	0.269	0.280	0.24	0.047	0.049	54.39	1.14
U32	473.3	86.99	1525.45	0.142	0.142	0.108	0.09	0.020	0.045	1.31	0.19
U13	518.9	45.23	2417.56	0.104	0.164	0.326	0.17	0.814	0.040	2657.11	6.07
U23	1822.6	64.73	1571.68	0.111	0.233	0.310	0.23	0.873	0.074	80500.72	23.64
U33	144.8	58.26	1964.40	0.174	0.199	0.154	-----	-----	0.066	1.09	0.17

5.1 Os resíduos

Não vamos preocupar-nos com a função objectivo, porque o número de pesagens é variável de amostra para amostra. Debruçar-nos-emos antes sobre um valor dela derivado, que é muito mais significativo: o resíduo médio por lote e por medida, que designaremos por R.M..

Como se pode ver na Tabela 2.5, o R.M. varia entre 0.11 gr.*(lote*tempo)⁻¹, para VG12 e 23.64 gr.*(lote*tempo)⁻¹, para a amostra U23 (veja o Anexo 2.3).

Com a excepção dos ajustes das amostras U11, U13 e U23, caso que trataremos mais adiante, os valores do resíduo médio quase nunca ultrapassam 1.5 gr.*(lote*tempo)⁻¹ (ressalve-se os casos das amostras VGN13 e VGN15) e, em 57% dos casos é mesmo inferior ao grama.

O R. M. médio, exceptuando os ensaios U11, U13 e U23, é de 0.8 gr.*(lote*tempo)⁻¹, o que pensamos que se pode considerar como satisfatório.

Contudo os valores de R. M. resultantes dos ajustes sobre as amostras U11, U13 e U23 (minério da Urgeiriça), são demasiado elevados. Será que este facto deve ser considerado como relevante para a avaliação da qualidade do modelo?

Em primeiro lugar, se reduzirmos a massa deste minério a níveis razoáveis, como acontece para U31/U32/U33, verificamos

que os valores dos resíduos médios se situam ao mesmo nível da quase totalidade das amostras restantes.

É que os ajustes de má qualidade foram feitos com o propósito de investigar se o modelo conseguiria reproduzir a cinética física para condições muito desfavoráveis, ou seja: com os peneiros a "deitar por fora". Podemos confirmar este facto se compararmos a massa total de partículas que foram peneiradas para as amostras U1 e UF3 (respectivamente de 1995.6 gr, para U11 e de 1822.6 gr para U23), por exemplo, com o que Pryor(*) (1965, pp. 155) recomenda sobre a dimensão máxima da amostra a peneirar.

O que podemos concluir é que o modelo não se encontra bem adaptado à simulação da tamisagem com excesso muito marcado de material, o que não lhe afecta em nada a validade, porque corresponde a condições de trabalho que devemos sempre excluir na prática.

Pior seria se os resíduos se distribuíssem assimetricamente, com os maiores valores nas primeiras pesagens, como acontecia quando utilizávamos um modelo a quatro parâmetros (Tabela 2.4), dado que, nessas circunstâncias, o modelo não poderia nunca funcionar eficazmente como previsor. Felizmente que não é esse o caso.

Quanto ao modo como os resíduos se distribuem pelos di-

(*) Para este autor as cargas máximas a utilizar são de 200 gr e 30 gr, respectivamente para os peneiros de 4# e de 200#.

ferentes lotes granulométricos, nos casos em que as amostras foram passadas através dos três conjuntos de peneiros nota-se que os valores mais altos são os dos lotes de +100# a -400# e nestes, para os lotes +400# e -400# (como, aliás, seria de esperar, dado que eles já se encontram fora do domínio prático da tamisagem).

Um pouco mais surpreendente é o facto de os resíduos mais baixos corresponderem, como regra geral, ao segundo conjunto de peneiros. Cremos que isso se deve ao maior número de partículas envolvidas na cinética (em comparação com o primeiro conjunto de cinco peneiros) o que dilui um pouco a aleatoriedade da passagem através das malhas dos tamises que é causada pela variação da forma das partículas.

5.2 Técnicas estatísticas

Como fizemos ajustes em norma euclidiana (veja-se 3.2), o teste estatístico mais bem adaptado a esta circunstância será o Qui-quadrado de Pearson e Fischer que determina a qualidade do ajuste da distribuição de uma população obtida experimentalmente sobre uma distribuição teórica. No caso presente temos em confronto, para cada tempo de tamisagem, pares de distribuições da variável calibre: uma produzida experimentalmente e a outra gerada pelo modelo. Para verificar se os resultados do modelo e

as análises granulométricas físicas podem ser consideradas ou não amostras retiradas da mesma população, devemos considerar que o domínio da variável aleatória (o calibre) é dividida em n intervalos (as classes granulométricas). Então utilizando a bem conhecida formulação do Qui-quadrado (Sachs, L. (1978)), poderemos comparar a frequência esperada (distribuição produzida pelo modelo) com a frequência observada (probabilidade de uma observação experimental cair no intervalo granulométrico).

Mas, se estamos a comparar duas distribuições da variável calibre, o número de observações que referimos acima, é nada mais nada menos que o número de partículas que caem em cada lote granulométrico. Significa isto que, para aplicarmos o teste, temos que passar da distribuição em massa que foi utilizada no ajuste para uma distribuição em número. Aqui começaram as dificuldades que nos levaram a rejeitar a utilização deste teste.

Na verdade, mesmo quando o Qui-quadrado foi aplicado às distribuições de baixo resíduo médio, como é o caso do ensaio G42, verificou-se a rejeição do ajuste (Anexo 2.1). Os valores obtidos no teste ultrapassaram sempre os seus correspondentes da distribuição do Qui-quadrado, mesmo que se utilizasse apenas o nível de significado de 5%. Contudo, se olharmos para os histogramas reais e calculados da amostra G42, verifica-se que eles são praticamente indiscerníveis (Anexo 2.3). Será que esta rejeição por parte do Qui-quadrado significa realmente que todos

Tabela 2.6: Resultados do teste Qui-Quadrado para a amostra G42

tempo	6 lotes	5 lotes
15	353.3	28.2
30	135.9	41.9
45	30.4	19.3
60	184.0	35.3
75	111.6	44.2
90	3913.6	22.9
105	4728.8	191.9

os ajustes que obtivemos são mesmo de má qualidade? Certamente que não.

Em primeiro lugar lembremo-nos que, devido à enorme variabilidade na forma das partículas é virtualmente impossível a obtenção de estimativas das distribuições em número com um mínimo de verosimilhança. Este facto é confirmado pela comparação dos resultados do Qui-quadrado obtidos para o total dos seis lotes ou para os cinco lotes mais grossos (Tab. 2.6): nesta última hipótese a rejeição não é tão categórica. Ora as maiores dificuldades na estimativa do número de partículas dão-se para os lotes mais finos.

Em segundo lugar, podemos dizer que, quer sob o ponto de vista industrial, quer mesmo sob o ponto de vista do trabalho de laboratório, a utilização das distribuições em número carece de qualquer sentido. Senão vejamos.

A precisão da balança com que trabalhámos é da ordem do

decigrama, valor que corresponde, por exemplo, para o lote granulométrico entre -270 μ e +400 μ a bem mais do que 100 000 partículas. Nestas circunstâncias, mesmo que os resíduos difiram apenas num valor da ordem de grandeza da precisão experimental, o Qui-quadrado resultante, será, concerteza, extremamente elevado.

Por outro lado, o evento singular "aparecimento de uma partícula num lote granulométrico (o que corresponde a uma observação independente da distribuição em número e que, por isso, conta para a elaboração do teste do Qui-quadrado) só deve ser tomada de *per si* estivéssemos interessados em jogos de probabilidades de passagem das partículas, o que não é o nosso caso.

Se se acrescentar a estas objecções ainda o facto de este teste ser excessivamente "miudinho", comprazendo-se em verificar as irregularidades locais do ajuste das distribuições, compreende-se por que razão não ficámos alarmados com os resultados que obtivemos.

Poderíamos ultrapassar este inconveniente através do recurso ao teste não-paramétrico de Kolmogorov-Smirnov que, ao invés do anterior, se preocupa mais com o andamento geral das curvas do que com os seus valores locais. Mas, pelo facto de ser também um teste para distribuições em número, os principais óbices apontados ao teste do Qui-quadrado mantinham-se também para ele.

Também não nos foi possível utilizar o teste (não-paramétrico) do U de Wilcoxon, Mann & Whitney, porque não é aplicável a pequenas dimensões amostrais.

Restou-nos a utilização do coeficiente de correlação (entre números de ordem) de Spearman. Trata-se de um teste não paramétrico menos potente que os anteriormente citados, mas, como se costuma dizer, quem não tem cão caça com gato.

Coeficiente de correlação de Spearman

No caso de duas distribuições contínuas quaisquer pode medir-se a dependência entre as duas variáveis aleatórias de cada uma delas através do coeficiente de Spearman. Para o calcular seriam-se por ordem crescente os valores de cada uma das amostras, atribuindo a cada um deles o seu respectivo número de ordem. Calculam-se as diferenças (D) entre os elementos das duas amostras com o mesmo número de ordem, que em seguida se quadram e somam, obtendo-se a seguinte expressão

$$r_s = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n1} D_i^2}{n(n^2-1)} \quad [2.17]$$

onde: D - é a diferença entre os elementos das duas amostras, n1-

é o número pares de elementos formados e r_s é o coeficiente de Spearman. O valor de r_s calculado por [2.17] mantém-se dentro do intervalo $[-1,1]$. Como acontece com o coeficiente de correlação comum, quanto mais próximo o valor de r_s se encontrar da unidade, mais forte é a possibilidade de existir dependência funcional entre as duas variáveis aleatórias o que, no nosso caso, pode ser lido dizendo que as duas amostras pertencem à mesma população.

No Anexo 2.2 apresentamos os valores do coeficiente de correlação de Spearman e o seu nível de significado, para os pares de amostras constituídos pelos lotes granulométricos que se obtêm para cada amostra crivada, cada conjunto de 5, 4 ou 3 peneiros e cada pesagem. Estes valores foram obtidos através do utilitário StatGraphicsTM (sob MsDOS).

Como seria de esperar e devido à fraca potência do teste, só foram rejeitados (e estes apenas parcialmente) os ajustes sobre U11, U13 e U23.

6. Os parâmetros e os seus valores

6.1 O parâmetro VCr

Relembremos que este parâmetro está relacionado com a frequência de contacto das partículas com a malha do peneiro. Tem, portanto, muito mais a ver com o regime do agitador de peneiros do que com as características do material que é analisado. Seria de esperar, por isso, que os valores que toma fossem bastante concordantes entre si para ajustes comparáveis, isto é, para tamisagens executadas sobre o mesmo minério, com os mesmos crivos e nas mesmas condições operatórias(*). É o que acontece com os ajustes relativos à areia de duna (amostra A) ou com o minério de Vale de Gatas (amostras VG e VGN).

Mas o mesmo já não se poderá dizer para os ajustes das amostras de granodiorito, já que os valores de G11 e G21, por um lado e de G13 e G23, por outro, são larguíssimamente superiores aos restantes, acontecendo o inverso com G12. Curiosamente, trata-se dos dois primeiros ensaios de tamisagem em que, tanto quanto nos lembramos, procedemos a diversas modificações da amplitude e da frequência de vibração do agitador, de tal modo

(*) Consideraremos, como comparáveis, caso não se diga nada em contrário, apenas os ensaios que cumpram estas condições.

que o aparelho chegou a entrar frequentemente em ressonância (pouco tempo depois partiu-se uma mola ...). Embora sem o intuito de explicar cabalmente estes valores aparentemente anómalos, pensamos que os dois factos devem estar ligados entre si.

6.2 O parâmetro Sat e a não-linearidade

É este o parâmetro que está ligado directamente às não-linearidades do processo, porque comanda o número de camadas monogranulares que idealmente se formam sobre cada peneiro. Por isso, "mede" o grau de dificuldade no acesso das partículas à malha do tamis.

Numa primeira fase tentou restringir-se o domínio de variação do parâmetro, impedindo que ele tomasse valores superiores à área (em cm^2) dos peneiros. Assim, tornar-se-ia possível uma leitura directa do seu valor físico, que seria interpretado como uma função da área ocupada pelo minério e da área da malha que se manteria livre (isto é, que não se encontraria obstruída pelas partículas encravadas).

Contudo, os ajustes que resultaram da introdução da constrição sobre o parâmetro Sat tinham resíduos muito elevados, o que nos obrigou a permitir que o parâmetro variasse livremente no intervalo $[0, +\infty[$. Então os resíduos puderam descer para os

valores que se podem ver na Tabela 2.5.

Significa isto que, por um lado, o parâmetro deixou de ter leitura directa e, por outro, que o número de camadas monogranulares que se formam à superfície de cada "peneiro numérico" diminui consideravelmente.

Realmente, na larga maioria dos casos, a partir do momento em que a cinética predominante passa a ser a do isocrivo, o número de camadas torna-se pouco superior à unidade. Por isso, a diminuição da probabilidade de passagem que resulta da formação das diversas camadas apenas é sensível, sob o ponto de vista do modelo, para os peneiros mais carregados e, preferencialmente, enquanto a maior parte do infracrivo ainda não tiver passado através da malha, isto é, nos primeiros minutos da tamisagem.

É o modelo que nos está a tentar dizer que a condição de não linearidade só é válida para os primeiros minutos da tamisagem, e que, em regime de isocrivo, o que condiciona a probabilidade de passagem da partícula já não é a interferência com as suas congêneres, mas antes o seu calibre.

É fácil compreender que a passagem das partículas do isocrivo é, em primeira aproximação, muito mais influenciada pelo acaso (a orientação da partícula em relação à abertura da rede) do que por quaisquer mecanismos de competição com as suas congêneres. Esta afirmação é fácil de aceitar se nos lembrarmos de que todas as partículas de isocrivo têm, praticamente, a mesma capa-

cidade de passar através da malha, o que se traduz no predomínio da influência do parâmetro P_{iso} no cálculo da probabilidade de passagem, em detrimento de Sat .

Por isso o modelo ajusta muitas vezes um Sat apenas marginalmente significativo, que só satisfaz a não-linearidade do processo na estrita medida do que é necessário, isto é, só para a primeira ou, quando muito, para as três primeiras pesagens (tal como é, aliás, a sua obrigação).

Tanto assim é que, sintomaticamente, nos casos em que os peneiros estavam sobrecarregados e em que, por isso, os ajustes foram de baixa qualidade, os valores de Sat ajustados não foram tão altos quanto se podia esperar, proporcionando assim a formação de várias camadas. O modelo informa-nos que o excesso de carga leva a que o regime não-linear se mantenha muito tempo para lá do que é habitual.

Até certo ponto pode dizer-se que os ajustes quase que rejeitam a condição de não-linearidade que impusemos desde o início ao modelo. Será que, ao invés do que acreditávamos, o processo é mesmo linear?

Não é esse o caso. Como o objectivo inicial com que foi empreendida a construção do modelo foi a previsão das distribuições em massa para $t \rightarrow \infty$, o espaçamento no tempo das pesagens foi tomado como constante e igual a 15 minutos. Mas este intervalo aumenta muito o peso relativo, na criação da função objectivo,

dos processos que envolvem a passagem das partículas do isocrivo, em prejuízo do regime não-linear.

Este é um aspecto da implementação experimental do modelo que deverá ser corrigido em explorações futuras, se com ele pretendermos estudar os mecanismos internos da interação entre elementos do sistema particulado, como é o caso da estratificação inversa e da crivagem interna que se verificam, ainda que transitóriamente, nos estágios iniciais da peneiração.

6.3 Parâmetro Fiso[1]

Este parâmetro informa-nos, para cada lote granulométrico, da percentagem de partículas que têm dificuldade em passar através da malha do peneiro. Como tal, a sua interpretação é imediata: é a fracção de cada lote granulométrico que, de acordo com o modelo, pode ser considerada como isocrivo.

Como se retira da análise da Tabela 2.5, na maioria das amostras (na realidade em 60% dos casos) o parâmetro toma valores inferiores a 20%. Verifica-se também que, em situações comparáveis (mesmo minério, mesma massa da amostra e mesmo lote granulométrico) os valores que o parâmetro toma são semelhantes entre si, haja em vista o que ocorre nas amostras A (areia de duna) e VG/VGN (minério de Vale de Gatas).

Para dizer a verdade, os valores de Flso[1] que se lêem na Tabela 2.5 não são iguais nem para lá caminham, mas, se nos lembrarmos da enorme variação em calibres, forma e composição litológica em que se incorre ao passar de amostra para amostra, dentro do mesmo minério, não nos parecem excessivas as diferenças que se observam no valor do parâmetro.

Contudo, de novo se voltam a notar discrepâncias importantes para as amostras de granodiorito que, tal como no caso do parâmetro Sat, formam dois grupos: um constituído pelas amostras G1 e G2, com valores relativamente baixos para Flso[1], enquanto que nas duas restantes, G3 e G4, os valores são um pouco mais altos.

De todo o material crivado, só a areia de duna tinha obrigação de apresentar um Flso[1] semelhante em todos os ensaios. Na realidade assim acontece, o mesmo se passando, embora de forma bastante mais atenuada para as amostras VG e VGN.

Se analisarmos o modo como os valores de Flso[1] se distribuem para cada amostra, ao longo dos diferentes lotes granulométricos, verificamos que neles não é possível detectar qualquer comportamento consequente, o que não é para admirar, porque nada nos garante que a distribuição do "teor" em isocrivo tenha obrigatoriamente que ser homogênea ao longo de todos os calibres.

Forma e isocrivo

Há uma pergunta que, nestas circunstâncias, surge inevitavelmente:

Será que a forma das partículas dos diferentes minérios e nos diferentes lotes justifica os valores que o parâmetro Fliso[1] toma, já que ele "mede" a dificuldade na passagem das partículas, que está, também, ligada à sua forma?

A resposta é simples e, à primeira vista é, também desanimadora:

Não sabemos, nem temos, num futuro próximo, grandes esperanças de vir a saber.

Muito embora uma espreitadela curiosa ao minério, através da lupa, seja sempre inevitável nestas circunstâncias, ela é, regra geral, bastante improdutiva e não privilegiamos, de modo nenhum, esse método de análise das características dos sistemas particulados (veja-se 1.3.1).

Realmente não conseguimos, para nenhum dos minérios estudados, estabelecer qualquer correlação entre a forma das partículas observadas à lupa e a percentagem de isocrivo detectada pelo modelo. Quererá isto dizer que o significado que atribuímos ao parâmetro é perfeitamente ilusório? De modo nenhum.

Para podermos ficar com uma ideia, ainda que algo imprecisa, das formas que causam dificuldades à passagem das par-

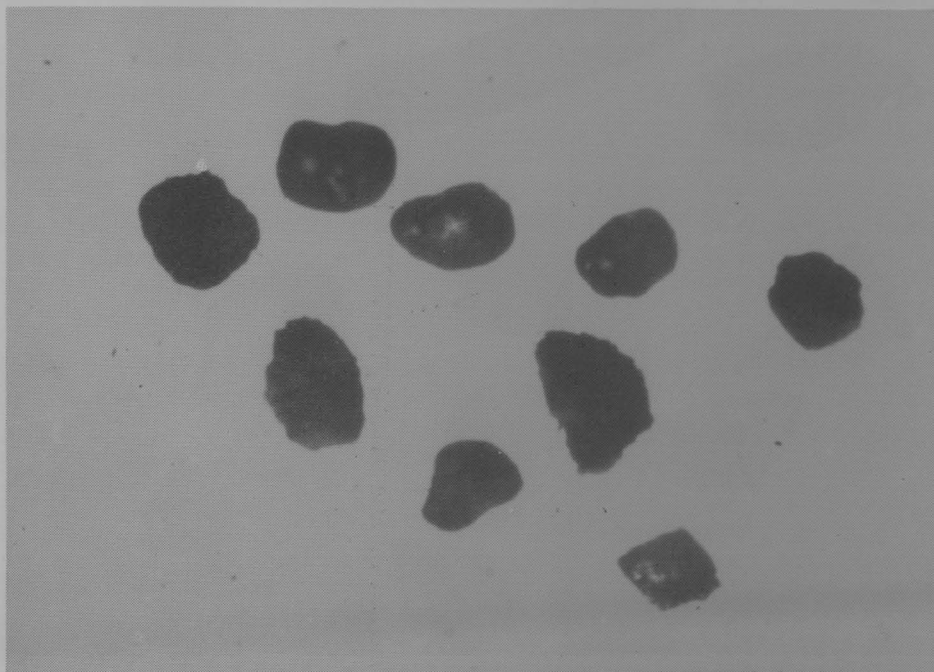


Fig. 2.10: Tempo de residência = 30 seg.

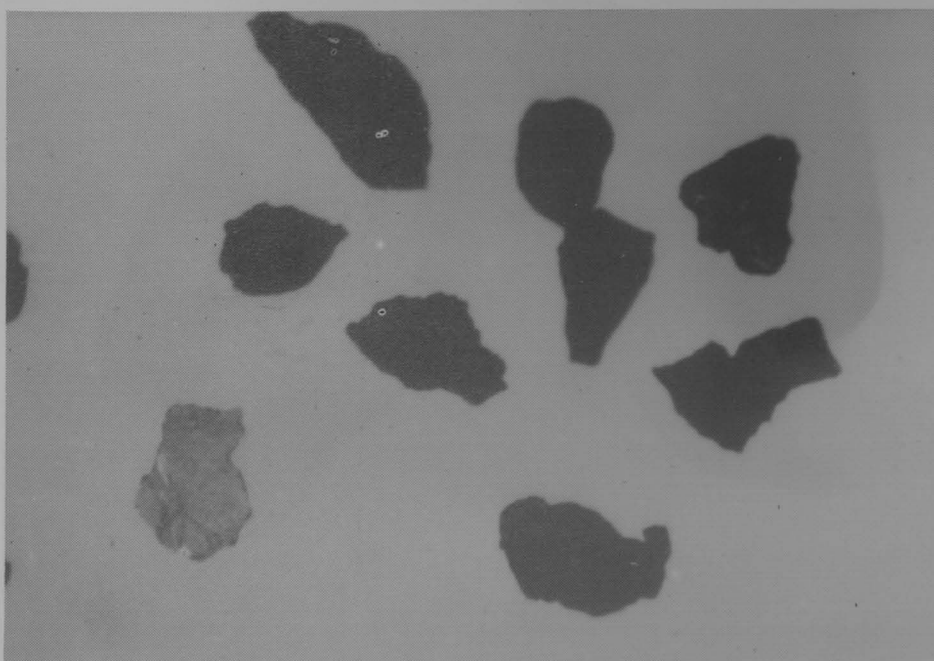


Fig. 2.11: Tempo de residência = 2 min.

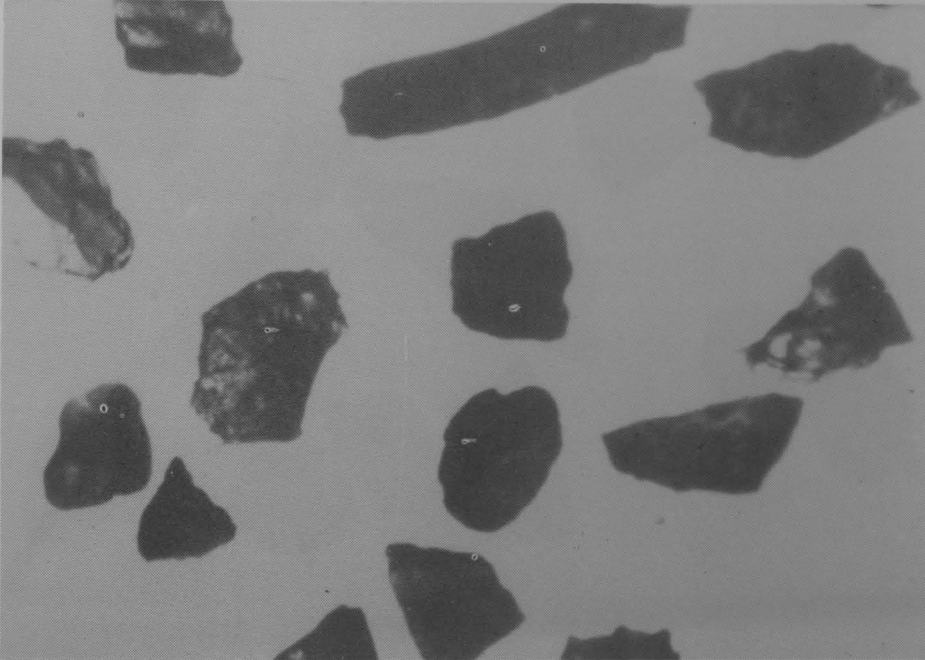


Fig. 2.12: Tempo de residência = 15 minutos

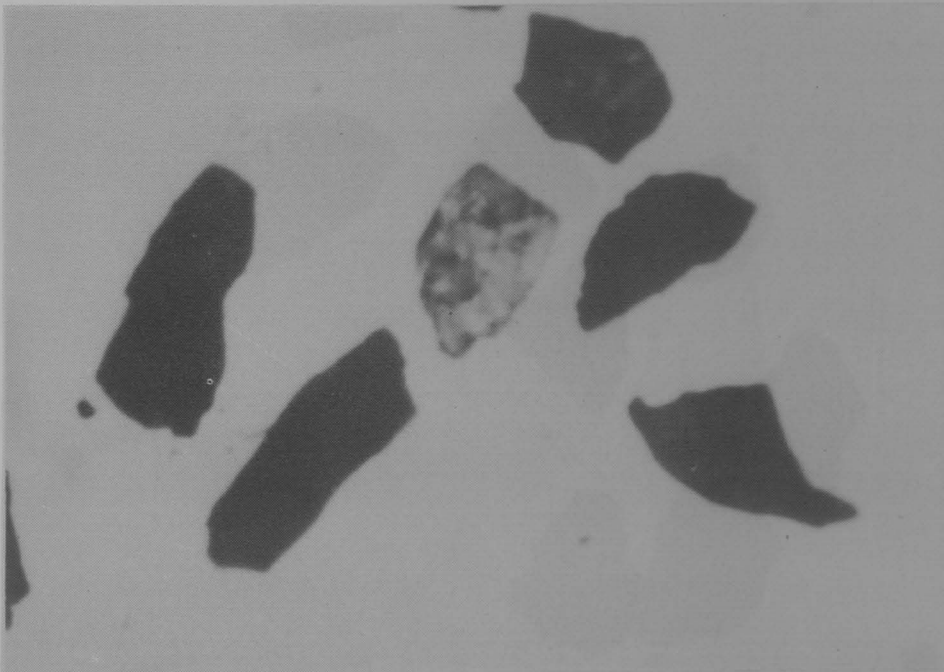


Fig. 2.13: Tempo de residência = 30 minutos



Fig. 2.14: Tempo de residência = 45 minutos

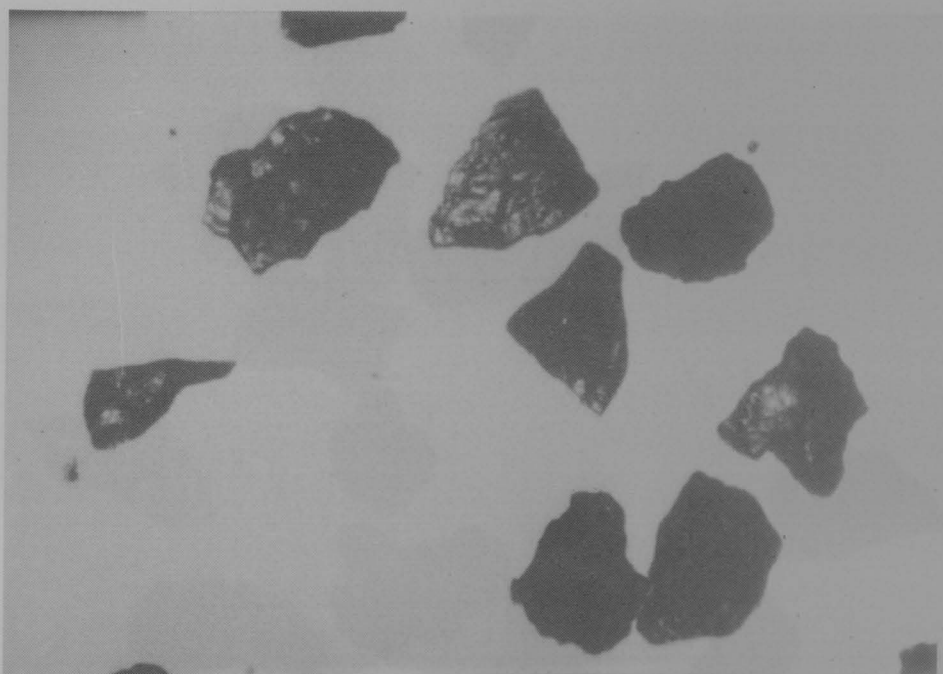


Fig. 2.15: Tempo de residência = 60 minutos

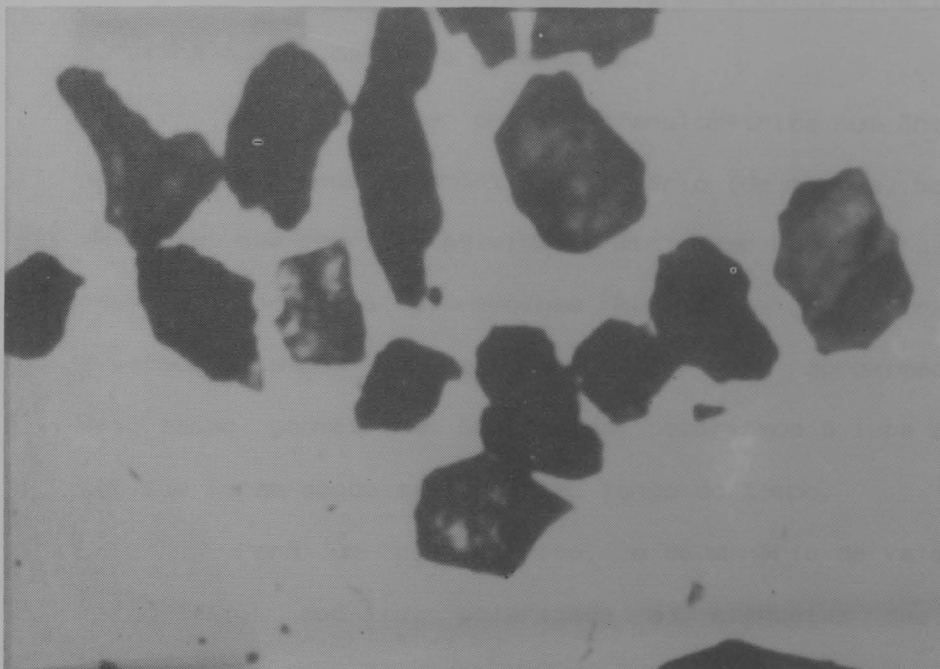


Fig. 2.16: Tempo de residência = 240 minutos.



Fig. 2.17: Tempo de residência = 405 minutos.

tículas, executámos ensaios sobre os diferentes minérios segundo a rotina que se descreve de seguida.

Submetemos a análise granulométrica num único peneiro de 100# uma pequena amostra de minério (de modo a, sem diminuir muito a sua representatividade, minimizar os efeitos não-lineares) e procedemos a recolhas sucessivas do infracrivo para diversos tempos de residência, seriados aproximadamente em progressão geométrica. Em seguida, observámos à lupa as partículas que foram sendo separadas ao longo do tempo.

Para um caso típico, o do minério de Vale de Gatas, fotografámos sob luz polarizada as silhuetas das partículas obtidas para tempos sucessivos de tamisagem, numa lupa binocular Nikon. Elas podem ser vistas, sob uma escala aproximada de 62:1 nas Figuras 2.10 a 2.17. Embora, como é evidente, não possamos de modo algum garantir a total ausência de viés na escolha das partículas que foram fotografadas, pensamos que as que surgem na fotografia são representativas do tempo de residência a que correspondem.

Para todos os minérios as observações coincidiram nos seguintes pontos:

1. Nota-se que as partículas que passam nos primeiros instantes são razoavelmente equidimensionais e de calibre nítidamente inferior à luz do tamis. À medida que o tempo de residência vai decorrendo vai também aumentando a percentagem de partí-

culas esquirolosas, atingindo-se um máximo para um certo instante, que depende do minério (cerca de 30 minutos para o minério de Vale de Gatas).

2. Curiosamente, verifica-se que as partículas que ainda conseguem passar para tempos muito longos, não são muito alongadas, ao contrário do que se poderia esperar. Pelo contrário, são partículas que, embora honestamente isométricas são bastante mais volumosas que as que conseguiram passar nos primeiros instantes. Significa isto que elas ultrapassam dificultosamente a barreira da malha do peneiro porque, como as suas dimensões são todas muito semelhantes, praticamente só uma posição em relação à abertura da malha lhes garante a passagem.

Esta observação está de acordo com o trabalho de Panou Tillé e Doyen (1966) que definiram vários esquemas teóricos que explicam o modo como os grãos isolados, assimilados a elipsóides, conseguem passar através de uma malha de aberturas quadradas. Segundo estes autores, um grão mineral passará ao infracrivo essencialmente de dois modos distintos: mantendo o eixo menor perpendicular à superfície da malha e basculando ao longo do seu eixo maior, colocado segundo a diagonal da abertura; introduzindo o seu eixo maior através da malha, desde que a secção recta (eixo menor $\times$ eixo intermédio) lhe permita passar através da abertura.

Significa isto que, relativamente às partículas cujas dimensões já estão bastante próximas da luz do peneiro e apenas

para efeitos da sua classificação quanto à dificuldade de passagem, só devemos dividi-las em: em esbeltas e maciças. Enquanto que as primeiras (primeiro isocrivo, ou isocrivo de tempo curto), com um pequeno jeitinho, que pode ser proporcionado pelas suas companheiras que se encontram nos leitos superiores, conseguem penetrar facilmente com o seu eixo maior através da malha, o mesmo já se não passa com as segundas (segundo isocrivo ou isocrivo de tempo longo(*)) que se vêm e desejam para conseguir passar. Estas considerações levam-nos também a admitir que a passagem do isocrivo é facilitada se o peneiro não estiver excessivamente descarregado.

O isocrivo de tempo curto será, pois, tipicamente constituído por partículas alongadas, mas que conseguem introduzir-se através das malhas do tamis. Na prática, o seu comportamento pouco diferirá do que é característico do infracrivo típico. Por isso acreditamos que são predominantemente estas partículas que causam a zona de transição da cinética de tamisação que é referida por Whitby, K. T. (1954), (Fig. 2.7).

Não é pelo facto de um minério apresentar grande número de grãos alongados ou aciculares (desde que o seu eixo maior não seja várias vezes maior que qualquer um dos outros dois) que

(*) Daqui em diante, salvo indicação expressa em contrário, quando nos referirmos ao isocrivo *tout court* será deste isocrivo que estaremos a falar.

ocorrerá uma fracção importante de isocrivo de tempo longo. Ela acontece, outrossim, quando os três eixos principais diferem pouco entre si. Como consequência do trabalho de Panou *et al* (*ibid*) e das nossas próprias conclusões, podemos afirmar que, na larga maioria dos casos, a dimensão crítica para decidir se uma partícula vai pertencer ou não ao isocrivo é a do seu eixo menor que, regra geral, é perpendicular à linha de visada da lupa. Isto significa, na prática, que não conseguimos distinguir entre o infracrivo de tempos curtos e o isocrivo de tempos longos.

Dai a nossas relutância em aceitar de boa mente as conclusões do tão conceituado Meloy, T. (1985), quando ele afirma que é possível medir(?) a forma das partículas utilizando um dispositivo experimental que baptizou pomposamente de cascadógrafo e que consiste, nada mais nada menos que numa pilha de 20 peneiros ASTM E11-70, todos com a mesma luz nominal que são colocados num agitador do tipo "Rotap". Sobre a rede do primeiro tamis depositam-se com cuidados superlativos, segundo este autor, menos de 2.5 gr. de material que irá posteriormente ser recolhido em tempos sucessivos como infracrivo da pilha total de peneiros.

Verifica-se, segundo Meloy, que há uma gradação contínua na forma das partículas *versus* tempo. O autor, que apresenta a silhueta de algumas partículas para tempo=7 horas, afirma que elas são mais alongadas para os mais longos tempos de residência.

Pelas evidências expostas atrás não podemos acreditar

nas conclusões de Meloy que, tanto quanto podemos adivinhar através da leitura de outros artigos seus, é muito dado a tiradas bombásticas e precipitadas.

Não acreditamos que a cinética de tamisagem possa servir para separar partículas pela sua forma, como pretende Meloy. T, (1985). Para isso é necessário recorrer a outros aparelhos que, embora extremamente simples no seu funcionamento e nos seus fundamentos, se adaptam particularmente bem a esse fim como, por exemplo, os que são propostos por Waldie, B. (1973) ou por Aravamudhan, S. et al (1984).

O nosso modelo serve para separar as partículas de infracrivo das partículas de isocrivo através das duas cinéticas de tamisagem que põe em evidência: só isto é que se lhe pode pedir. Isto é, o nosso conceito de isocrivo não se baseia nas tentativas de medição da forma ou da dimensão das partículas, como, por exemplo, sugere a norma DIN 52114 mas, pelo contrário, corresponde a uma análise comportamental do minério em relação ao método de separação utilizado.

O axioma de Bayes

Utilizando o parâmetro Flso[1], deixamos de ser obrigados a aceitar, como afirma o Axioma de Bayes e como tem vindo a

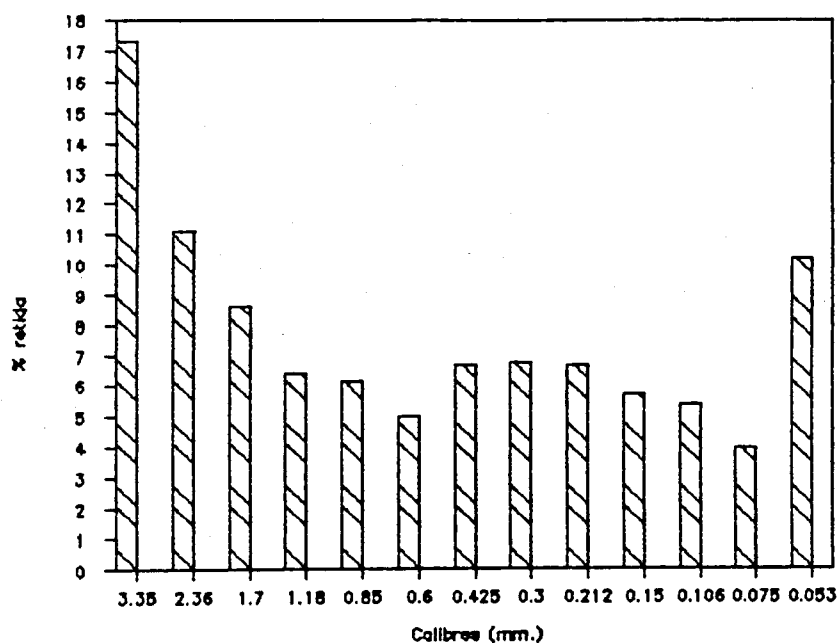


Fig. 2.18: Histograma da amostra G1, sem isocribo.

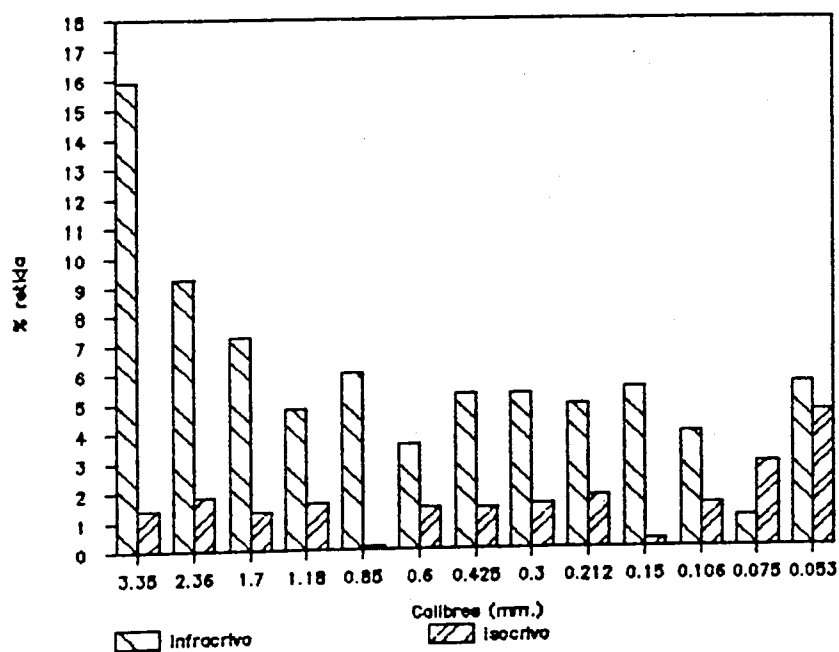


Fig. 2.19: Histograma da amostra G1, com isocribo.

ser implicitamente dito pela generalidade dos *preparadores de minérios*, que a distribuição da variável calibre é uniforme dentro de cada lote granulométrico.

Apresentam-se nas Figuras 2.18 e 2.19, para comparação, os histogramas sem isocrivo e os histogramas com isocrivo para uma das amostras que passaram através de todos os peneiros. Lembra-se que cada conjunto de duas barras foi gerado apenas por um único calibre de corte.

6.4 Parâmetro Plso

Este parâmetro não é senão a razão entre a probabilidade de passagem do isocrivo e a probabilidade de passagem do infracrivo médio, e é assim que deve ser lido directamente.

Se já se notava uma certa homogeneidade de comportamento para o parâmetro Flso[1], então ela é agora muito mais notória, com a costumeira excepção das amostras G13 e G23 (Tabela 2.5). Agora, apenas 20% dos valores do parâmetro se situam acima de 0.1.

Como se disse atrás, em (2.4.5), antes de nos decidirmos pelo modelo a oito parâmetros (para cinco peneiros), tentámos o ajuste do modelo a doze parâmetros, que diferia do actual pelo facto de se definir um Plso para cada lote granulométrico, dado

que não tínhamos nenhuma razão para admitir que os calibres do infracrivo e os do isocrivo se mantivessem numa relação constante para todos os lotes que são crivados simultaneamente.

Contudo, os ajustes do modelo a doze parâmetros não foram significativamente melhores que os do modelo com oito, ao mesmo tempo que o aumento do número de parâmetros nos agitava diante dos olhos o fantasma da "maldição da dimensionalidade" (veja-se 3.3.4). Acrescente-se ainda que aumentar o número de parâmetros sem ao mesmo tempo aumentar o número de medidas é quase sempre má política, porque pode retirar significado ao ajuste.

Realmente, podemos ter uma ideia do tipo de erro introduzido por esta simplificação se, na Tabela 2.5 analisarmos os valores de P_{50} que se obtiveram para um mesmo minério, mas para cada conjunto de cinco peneiros. Vê-se que as diferenças entre os valores do parâmetro δ , no máximo, de 78% do seu valor o que, sendo significativo em termos de probabilidade de passagem, já não o é em quanto à análise granulométrica.

A utilização deste parâmetro permitiu-nos definir um calibre do isocrivo, por comparação com o calibre nominal do lote granulométrico arbitrado *a priori*, como se verá de seguida.

Calibre equivalente por tamisação

É habitual contrapor ao conceito de classificação dimensional, que se obtém pela partição do material por tamisação e que se considera que envolve uma única propriedade da população (o calibre), o conceito de classificação por equivalência, originário da teoria da hidroclassificação, em que se combinam numa propriedade nova (a equivalência) o calibre e a densidade aparente das partículas.

Define-se, então a equivalência, através da expressão:

$$e = (\rho - \rho_m) \phi^m, \quad [2.18]$$

com ρ - massa específica da partícula;

ρ_m - massa específica do meio fluido de separação;

ϕ - calibre da partícula,

e onde n é uma constante que toma o valor 1 para o regime de Newton e 2 para o regime laminar, ou de Stokes.

Trata-se, segundo Madureira, C. (1985), de uma propriedade total cuja definição para um dado minério e um dado aparelho (ou conjunto de aparelhos), constitui um delicado problema teórico ainda sem solução na maior parte dos casos.

Contudo, como temos vindo a evidenciar ao longo deste trabalho, para lá dos problemas da definição unívoca da proprie-

dade calibre (que só podemos efectuar, mas num plano puramente teórico, se recorrermos à definição de calibre de Bastenaire (1965) dada em nota de rodapé na secção 1.2.1) a separação das partículas por tamisagem não depende apenas das dimensões das partículas. Na realidade, ela dá-se no seio de um sistema particulado cujos elementos dificultam uns aos outros o acesso à malha do tamis de um modo perfeitamente equivalente ao que ocorre num meio de separação (como uma jiga ou um separador de meios densos), onde são criados leitos fluidos, de densidade variável no tempo e no espaço, que constituem também um obstáculo na progressão das partículas do "sink" em direcção à zona de não-retorno.

Se considerarmos, como aliás começa já a ser norma, que os meios particulados de separação hidrogravítica funcionam exactamente como um meio denso onde a densidade do meio é proporcionada pela presença das partículas mais densas, independentemente do seu calibre, a analogia entre a equivalência das partículas na classificação hidrogravítica em queda perturbada e a probabilidade instantânea e total de passagem da partícula ao lote granulométrico imediatamente inferior (na tamisagem), resultará completa.

Parece assim ser legítimo tomar, em cada instante, para cada lote granulométrico, para cada amostra e para cada peneiro, a probabilidade instantânea de passagem das suas partículas e convertê-la no diâmetro respectivo (considerando, tal como se faz

no conceito de classificação por equivalência, que a partícula é esférica) e passar a chamar a essa dimensão calibre equivalente por tamisagem.

Trata-se, sem sombra de dúvida, de uma propriedade total, no sentido em que mede o comportamento de uma classe granulométrica em relação a um dado processo de separação, mas que, a rigor, só fará sentido definir para regimes contínuos de trabalho, em que a não-linearidade do processo esteja sempre presente, o que não é exactamente o nosso caso.

Realmente, como se disse em (2.6.4), o modo como foi feita a implementação experimental impede que os valores que Sat toma tenham uma correspondência directa e imediata com a área do peneiro. Tal facto inibe a definição consequente do calibre equivalente por tamisagem, por não permitir que sobre o "peneiro numérico" se formem várias camadas monogranulares. É por isso que os calibres equivalentes de cada lote que se retiram dos parâmetros recuperados pelos ajustes são, praticamente para todas as amostras, os valores funcionais que foram introduzidos como "input" nos programas e que se podem ver na Tabela 2.7.

A partir do momento em que este aspecto seja modificado, será possível o estudo mais correcto do comportamento das partículas no seio dos sistemas particulados, o que constitui passo imprescindível a dar antes de qualquer tentativa de simulação dos meios particulados de separação hidrográvica.

Tabela 2.7: Calibres nominais

+4#	+6#	+8#	+12#	+16#
5.691	4.013	2.872	2.037	1.414
+20#	+30#	+40#	+50#	+70#
1.018	0.719	0.509	0.359	0.254
+100#	+140#	+200#	+270#	+400#
0.180	0.127	0.090	0.063	0.046

Mas o mesmo problema já não acontece com o isocrivo, pois através dos parâmetros e do valor do calibre nominal arbitrado é sempre possível definir a relação: calibre do isocrivo / calibre nominal do lote granulométrico (Tab. 2.8).

Note-se, a propósito, que muito embora pareça arbitrária a atitude de, à partida, atribuir os valores da Tabela 2.7 aos calibre nominais de cada lote, a nossa atitude é perfeitamente justificada.

É que, como se retira do Axioma de Bayes que não é possível fazer qualquer juízo sobre a forma que a distribuição da variável aleatória que é o calibre toma dentro de cada intervalo granulométrico, a não ser o pressuposto de que a distribuição é uniforme, somos levados a admitir como representativos quaisquer calibres que se encontrem no intervalo definido pelas luzes dos tamises superior e inferior.

O leitor poderá agora notar através do conceito de calibre equivalente por tamisagem, que existe uma certa latitude na escolha do calibre nominal de cada classe granulométrica, quando integrado no modelo. Quer isto dizer que os calibres definidos em (2.4.3) e cujos valores se representam na Tabela 2.7, não constituem uma propriedade da distribuição granulométrica (não se trata de uma propriedade total) mas tão somente possuem valor funcional, desde que utilizados em conjunto com os parâmetros que foram ajustados.

Para conseguir que o calibre nominal apareça em pleno com o valor de uma propriedade total, será necessário obtê-lo através de ajuste. Fica deste modo ultrapassada a arbitrariedade que estava associada ao conceito de calibre nominal, tal como apareceu em (2.4.3).

Tabela 2.8A: Calibres do isocrivo- Granodiorito.

	+6#	+8#	+12#	+16#	+20#
G11	4.638	3.271	2.311	1.657	1.155
G21	4.620	3.258	2.303	1.650	1.152
G31	4.606	3.248	2.297	1.644	1.148
G41	4.590	3.237	2.290	1.638	1.145
	+30#	+40#	+50#	+70#	+100#
G12	0.811	0.573	0.406	0.286	0.202
G22	0.819	0.579	0.409	0.289	0.204
G32	0.810	0.572	0.405	0.286	0.202
G42	0.818	0.578	0.409	0.289	0.204
	+140#	+200#	+270#		
G13	0.143	0.101	0.071		
G23	0.143	0.101	0.072		
G33	0.142	0.101	0.071		
G43	0.142	0.101	0.072		

Tabela 2.8B: Calibres do isocrivo- Minério de Vale de Gatas.

	+6#	+8#	+12#	+16#	+20#
VG11	4.516	3.184	2.257	1.609	1.129
VG21	4.543	3.203	2.269	1.620	1.135
VGN11	4.559	3.215	2.276	1.626	1.138
VGN21	4.495	3.169	2.248	1.601	1.124
VGN31	4.472	3.153	2.238	1.592	1.119
VGN41	4.473	3.154	2.239	1.592	1.119
VGN51	4.533	3.196	2.265	1.616	1.132
	+30#	+40#	+50#	+70#	+100#
VG12	0.823	0.581	0.412	0.291	0.205
VG22	0.810	0.572	0.405	0.286	0.202

Tabela 2.8C: Calibres do isocrivo- Areia de duna.

	+30#	+40#	+50#	+70#	+100#
A12	0.810	0.572	0.405	0.286	0.202
A22	0.809	0.571	0.404	0.286	0.202
A32	0.808	0.571	0.404	0.285	0.202
A42	0.808	0.571	0.404	0.285	0.202
A52	0.810	0.572	0.405	0.286	0.202

Tabela 2.8D: Calibres do isocribo- Minério da Urgeirica.

	+6#	+8#	+12#	+16#	+20#
U11	4.634	3.267	2.309	1.655	1.154
U31	4.595	3.240	2.292	1.640	1.146
	+30#	+40#	+50#	+70#	+100#
U12	0.829	0.586	0.415	0.293	0.207
U32	0.822	0.581	0.411	0.290	0.205
	+140#	+200#	+270#	+400#	
U13	0.145	0.103	0.073	0.052	
U23	0.144	0.102	0.072	0.051	
U33	0.144	0.102	0.072		

7. O modelo como previsor

Relembremos, mais uma vez, que o primeiro objectivo que se teve em mente para a construção do actual modelo foi a redução dos longos tempos de tamisagem necessários à estabilização das massas de partículas de granodiorito presentes sobre os peneiros.

A pergunta óbvia é, pois: *Foi cumprido o objectivo inicial do trabalho?*

7.1 Capacidade de previsão do modelo

Para avaliar da capacidade previsional do modelo considerou-se necessário o estabelecimento da seguinte estratégia algorítmica:

1. Considerar em separado todos os ajustes que se efectuaram para o granodiorito e para cada conjunto de peneiros. Pondo de lado, de cada vez, um destes ajustes, determinar, para os restantes, as médias aritméticas dos parâmetros.

2. Do ajuste que não entrou para o cálculo das médias, reter as suas duas primeiras determinações experimentais (15 e 30 minutos), para os dois primeiros grupos de peneiros e as três primeiras (15, 30 e 45 minutos), para o grupo restante.

3. Em seguida, para prever as distribuições granulomê-

tricas a tempos muito longos, implementar-se-ia um algoritmo baseado no programa *CrMEN1*, mas com as seguintes modificações:

- os parâmetros cinéticos da tamisagem manter-se-iam constantes em cada ajuste e seriam as médias determinadas do modo indicado em 1;

- o "guess" das distribuições granulométricas em massa para $t \rightarrow \infty$, seria constituído pelos valores determinados experimentalmente para 30 minutos (12 e 22 pilhas de peneiros) ou para 45 minutos (32 grupo de peneiros).

- a função objectivo seria constituída pelo somatório dos quadrados dos resíduos que resultam das diferenças entre os valores calculados experimentalmente para os dois ou três primeiros tempos e os que foram determinados pelo modelo.

- os valores das distribuições granulométricas dados como "guess" devem variar, com uma certa latitude, em cada iteração do algoritmo de Levenberg-Marquardt, admitindo que cada um deles pode estar afectado, no máximo, de um erro de 15% em massa, ou seja:

$$m_k(\infty) \in [m_k(t) \times 0.85, m_k(t) \times 1.15], \quad [2.19]$$

$$(k = 1, 2, \dots, n1)$$

com: $m_k(t)$ - massa que se encontra sobre o peneiro k , com $t \in \{30, 45\}$. Queremos com isto dizer que se verifica

$$m_k(\omega) \equiv m_k(t) \pm x_k, \quad [2.20]$$

ou seja, que consideramos que $\{m_k(t)\}$ (com $t \in [30,45]$) representa $\{m_k(\omega)\}$ com um erro $\{x_k\}$. Esta última matriz-coluna, cujos valores podem variar no intervalo $[-0.15 \times m_k(t), +0.15 \times m_k(t)]$, constitui o vector dos parâmetros de pesquisa do algoritmo de Levenberg-Marquardt contido no programa. Pelo facto de a soma dos valores dos lotes granulométricos obtidos por simulação não poder ultrapassar nunca a massa total analisada granulométricamente, os valores do vector x têm que estar ligados entre si pela constrição

$$x_1 m_1(t) + \dots + x_n m_n(t) = 0. \quad [2.21]$$

Mas, como já se disse nas duas questões postas em (2.2.4), o verdadeiro problema não é o da previsão das massas dos lotes granulométricos para $t \rightarrow \omega$, mas sim a determinação e controlo da precisão da análise granulométrica. Executar a estratégia algorítmica nos estritos termos em que foi descrita acima já só teria interesse com o único intuito de validar o modelo.

Contudo, foi possível, de um modo muito mais expedito, fazer uma ideia razoavelmente precisa das capacidades previsionais do modelo.

Tomando o vector dos parâmetros calculado do modo descrito nos passos 1 e 2 e a matriz dos dados experimentais do ajuste que não entrou para o cálculo das médias, recuperámos sem ajuste, os seus lotes granulométricos em massa para $t \rightarrow \infty$. Os resultados desta nossa diligência podem ver-se na Tabela 2.9.

Como era previsível, dada a variabilidade que se detecta (Tabela 2.5) nos valores dos parâmetros para as amostras de Granodiorito e de minério de Vale de Gatas, a concordância entre os valores produzidos pelo programa e os valores físicos não é das melhores.

E mal seria se assim não acontecesse porque isso significaria que a cinética da peneiração era largamente indiferente aos valores que os parâmetros tomam, ou de modo mais sucinto: o modelo seria excessivamente robusto.

Mas o mesmo já não acontece com a areia de duna (Tabela 2.9). De facto, as capacidades de previsão do modelo são, neste caso, perfeitamente convincentes. Como é evidente, isto deve-se a que as amostras de areia que foram crivadas são muito semelhantes entre si, o que, aliás, permitiu que as configurações de parâmetros que resultam do ajuste não diferissem muito de amostra para amostra.

Tabela 2.9A: Recuperação dos lotes granulométricos (em massa) para tempos muito longos - Areia de duna

	20#	30#	40#	50#	70#	-70#	R.M.
A12							
M.	2.202	19.782	331.963	381.120	53.196	13.337	0.468
R.	2.200	19.700	331.300	380.900	54.100	13.400	
A22							
M.	2.203	19.929	330.879	384.346	52.813	12.329	0.571
R.	2.200	19.800	329.900	384.400	53.800	12.400	
A32							
M.	2.103	24.635	351.249	359.595	49.900	14.018	0.518
R.	2.100	24.500	350.300	359.800	50.700	14.100	
A42							
M.	2.604	33.840	388.621	326.500	39.887	9.448	0.635
R.	2.600	33.700	387.400	327.300	40.400	9.500	
A52							
M.	2.602	27.151	359.846	356.291	45.876	9.934	
R.	2.600	27.000	358.900	356.600	46.600	10.000	0.507

M - valor produzido pelo modelo

R - valor do ensaio físico

R. M. - resíduo médio

Tabela 2.9B: Recuperação dos lotes granulométricos (em massa) para tempos muito longos - Granodiorito

	4#	6#	8#	12#	16#	-16#	R.M.
G11							
M.	111.729	152.103	99.006	75.182	57.692	496.888	2.132
R.	108.3	152.9	98.0	76.3	56.7	500.3	
G21							
M.	142.313	192.638	121.853	94.075	73.042	644.879	2.730
R.	138.5	192.8	120.6	95.7	71.4	649.7	
G31							
M.	193.331	91.215	53.891	42.738	32.985	279.541	1.841
R.	190.7	91.2	53.6	43.3	32.4	283.1	
G41							
M.	67.410	97.701	57.502	44.792	33.774	301.622	1.657
R.	64.9	98.7	57.0	45.3	32.8	304.4	
	20#	30#	40#	50#	70#	-70#	R.M.
G12							
M.	56.162	44.885	58.841	61.377	57.999	220.937	1.531
R.	54.2	44.2	59.1	60.0	59.1	223.5	
G22							
M.	72.918	58.272	76.362	77.443	78.869	285.636	2.076
R.	70.2	57.8	76.3	76.5	78.7	289.8	
G32							
M.	32.449	26.981	35.330	35.535	33.704	119.800	0.823
R.	31.9	26.5	34.8	35.5	33.6	121.6	
G42							
M.	33.828	27.389	36.317	37.403	36.621	132.640	0.974
R.	32.7	27.1	36.0	36.8	36.8	134.6	
	100#	140#	200#	-200#			R.M.
G13							
M.	51.600	48.492	39.334	84.073			3.874
R.	50.7	47.6	34.9	90.3			
G23							
M.	68.118	65.028	51.603	104.652			8.183
R.	64.4	61.8	44.6	118.6			
G33							
M.	27.610	26.311	19.707	47.673			0.651
R.	27.2	26.3	19.2	48.8			
G43							
M.	30.509	30.312	22.727	51.352			1.573
R.	29.1	29.3	22.1	53.9			

Tabela 2.9C: Recuperação dos lotes granulométricos (em massa) para tempos muito longos - Minério de Vale de Gatas

	4#	6#	8#	12#	16#	-16#	R.M.
VG11							
M	71.181	223.467	297.992	417.944	67.4104	153.108	2.640
R	69.8	222.4	294.5	420.4	66.8	157.6	
VG21							
M	68.650	219.650	312.176	409.479	61.931	157.416	2.804
R	66.5	220.8	307.8	411.6	61.7	161.6	
VGN11							
M	149.997	485.231	332.628	181.077	45.1646	27.101	1.520
R	147.0	486.2	331.8	182.6	45.5	28.0	
VGN21							
M	158.453	450.778	338.040	195.033	53.465	25.232	1.962
R	154.5	452.0	337.8	197.0	53.9	26.6	
VGN31							
M	170.736	495.080	330.530	172.753	42.153	11.0478	1.830
R	167.8	495.0	329.0	175.4	43.5	11.6	
VGN41							
M	181.476	489.036	323.460	174.423	43.684	10.322	2.552
R	176.3	492.2	323.2	175.5	44.2	11.2	
VGN51							
M	166.589	481.434	323.498	186.035	49.88	16.968	6.418
R	155.7	489.4	323.0	178.1	50.8	18.0	

7.2 O ponto de paragem e o erro

Retomando as duas questões levantadas em (2.2.4), diremos que não devemos estar interessados nas previsões das massas dos lotes granulométricos para tempos de residência muito longos por duas razões:

- porque é impossível fazer previsões desse tipo (haja em vista a variabilidade dos parâmetros), pelo menos sem que sejam analisadas granulométricamente um número importante de amostras, o que retira todo o interesse à operação;

- porque, a partir de um certo momento as partículas que passam são apenas as do isocrivo que, tanto podem ser consideradas como pertencendo ao sobrecrivo, como à classe granulométrica seguinte.

A rigor, se tomarmos como definição de calibre a que é proposta por Bastenaire (1965), ao mesmo tempo que aumenta a massa do infracrivo, vai também aumentando o calibre de corte que é feito pelo peneiro (Fig. 2.2), como se viu, quando em (2.2.3) se tratou do erro das malhas. Por isso podemos dizer que, ao aumentarmos inconsideradamente o tempo de residência do minério, estamos a permitir que passem ao lote granulométrico seguinte partículas que nele não deviam figurar.

A questão, tal como foi dito em (2.2.4), deve ser posta sob a forma de duas interrogações complementares:

"Quando é que a tamisagem deve ser dada por concluída?"

"Se acabarmos a tamisagem para um dado t como é que podemos obter uma estimativa razoável do erro em que incorremos?"

Podemos dar resposta a estas duas questões. Na verdade, se detectámos duas cinéticas concorrentes para cada classe granulométrica, basta-nos simplesmente tomar como ponto de conclusão da análise o tempo tal que, para ele, todas as partículas do infracrivo tenham já passado. O erro que se comete ao proceder assim corresponde à quantidade de isocrivo que entretanto conseguiu passar.

Na Tabela 2.10 apresentam-se, para cada amostra, os tempos finais assim determinados, bem como os respectivos erros. Então vê-se que a peneiração do granodiorito devia ser dada por concluída cerca dos:

- 12 minutos para os cinco primeiros peneiros;
- 15 minutos para os segundos;
- 25 minutos, para os três restantes.

Da análise dos resultados da tabela 2.10 podem retirar-se as conclusões que se seguem.

1. Os tempos finais de de tamisagem calculados para cada minério e para cada peneiro são sempre bastante semelhantes.
2. Mas o mesmo já não se poderá dizer dos tempos finais, mantendo constante o minério e variando de peneiros.

3. Em consequência, verifica-se que é difícil determinar o tempo de tamisagem ótimo quando, como é habitual, trabalhamos com pilhas de peneiros, já que, quando optimizamos o tempo em relação a um deles, estamos a aumentar ao erro dos outros.

4. Contudo, a execução prévia de ensaios de ajuste, do género dos que fizemos, permite ficar com uma ideia bastante razoável do erro cometido e, em consequência, poder passar a utilizar um tempo de tamisagem que o minimize.

5. Vê-se também que os erros causados pela passagem indevida do isocribo em 30% dos casos são superiores a 10%, chegando mesmo a ultrapassar os 100%. Quer isto dizer que as representações em histograma das distribuições granulométricas podem ser afectadas por erros vultuosos; portanto, são sempre de evitar. Devemos preferir, outrossim, as representações em cumulante, dado que elas minoram a influência do erro causado pelo isocribo no andamento da curva, permitindo assim as comparações entre populações.

6. Finalmente, devemos ainda referir que tanto é incorrecta a sobrecarga dos peneiros como a utilização de amostras muito reduzidas. No primeiro caso, como nos aconteceu nas amostras U1 e U3, existe uma predominância excessiva de efeitos não -lineares que não conseguimos controlar conceptualmente. No segundo caso, não existe a possibilidade de

as partículas serem mantidas junto à malha do peneiro e serem "orientadas" em relação às aberturas pelas suas congêneres que se lhes sobrepõem.

Não podemos ainda afirmar com certeza inequívoca quais são as gamas de tamanho das amostras (em massa) que se devem considerar como correctas. Contudo, e em função dos resultados que obtivemos propomos tentativamente as seguintes:

600/800 gr	-	para os peneiros de	4 a 16 mesh;
300/400 gr	-	" " " "	20 a 70 ;
200/300 gr	-	" " " "	100 a 400 .

Tabela 2.10A: Tempos finais de tamisagem e erros - Granodiorito

		Crivo 1	Crivo 2	Crivo 3	Crivo 4	Crivo 5
G11	Tfinal	10	10	12	13	18
	Erro	2.38%	5.85%	4.28%	12.93%	0.70%
G21	Tfinal	10	10	12	13	18
	Erro	3.56%	8.57%	6.92%	25.50%	1.15%
G31	Tfinal	11	10	14	12	22
	Erro	4.88%	10.13%	8.84%	29.00%	1.02%
G41	Tfinal	11	11	15	12	22
	Erro	5.04%	8.34%	5.88%	18.90%	11.10%
G12	Tfinal	10	10	15	12	21
	Erro	19.86%	12.88%	14.07%	19.95%	2.82%
G22	Tfinal	9	10	12	15	19
	Erro	5.13%	0.00%	4.40%	6.27%	2.48%
G32	Tfinal	10	10	12	16	21
	Erro	21.93%	20.07%	20.87%	19.50%	5.06%
G42	Tfinal	9	10	12	14	18
	Erro	9.37%	9.56%	11.78%	17.32%	3.82%
G13	Tfinal	21	21	38		
	Erro	19.05%	117.00%	41.67%		
G23	Tfinal	23	23	39		
	Erro	20.81%	66.17%	21.65%		
G33	Tfinal	21	21	32		
	Erro	25.40%	104.20%	65.10%		
G43	Tfinal	27	23	36		
	Erro	20.41%	98.62%	26.71%		

Tabela 2.10B: Tempos finais de tamisagem e erros - Minério de vale de Gatas.

		Crivo 1	Crivo 2	Crivo 3	Crivo 4	Crivo 5
VG11	Tfinal	19	18	29	18	26
	Erro	4.55%	8.56%	6.95%	123.11%	4.60%
VG21	Tfinal	16	16	27	16	24
	Erro	4.47%	5.05%	5.80%	122.46%	3.33%
VGN11	Tfinal	23	21	29	16	25
	Erro	7.44%	5.16%	5.95%	29.98%	7.35%
VGN21	Tfinal	28	26	36	19	30
	Erro	8.72%	7.76%	4.61%	38.55%	0.00%
VGN31	Tfinal	23	21	29	14	19
	Erro	21.21%	16.26%	15.34%	282.74%	120.36%
VGN41	Tfinal	36	32	44	22	29
	Erro	9.15%	8.60%	7.18%	51.14%	54.07%
VGN51	Tfinal	25	23	32	18	25
	Erro	10.57%	7.24%	6.31%	36.05%	19.29%
VG12	Tfinal	7	8	9	12	17
	Erro	4.71%	8.33%	10.44%	10.95%	1.29%
VG22	Tfinal	13	12	14	17	26
	Erro	10.88%	16.34%	19.24%	24.69%	2.08%

Tabela 2.10C: Tempos finais de tamisagem e erros - Areia de duna

		Crivo 1	Crivo 2	Crivo 3	Crivo 4	Crivo 5
A12	Tfinal	26	36	40	43	36
	Erro	0.00%	0.84%	8.86%	8.55%	2.04%
A22	Tfinal	16	22	29	36	23
	Erro	0.00%	1.36%	7.04%	7.74%	5.17%
A32	Tfinal	18	24	32	38	25
	Erro	0.32%	1.40%	5.31%	6.02%	4.98%
A42	Tfinal	17	21	28	27	22
	Erro	0.40%	2.25%	8.23%	10.78%	6.97%
A52	Tfinal	16	22	29	32	22
	Erro	0.63%	1.01%	6.44%	7.13%	2.41%

Tabela 2.10D: Tempos finais de tamisagem e erros - Minério da Urgeiriça

		Crivo 1	Crivo 2	Crivo 3	Crivo 4	Crivo 5
U11						
	Tfinal	12	13	15	23	45
	Erro	6.12%	8.65%	7.21%	20.00%	1.23%
U31						
	Tfinal	12	11	16	13	23
	Erro	1.63%	2.99%	3.89%	6.77%	0.465%
U12						
	Tfinal	13	13	15	19	25
	Erro	11.72%	12.64%	13.42%	10.82%	1.87%
U32						
	Tfinal	9	10	12	14	19
	Erro	4.40%	5.27%	3.96%	2.95%	0.76%
U13						
	Tfinal	38	43	43	111	104
	Erro	3.08%	4.81%	11.31%	5.81%	253.16%
U23						
	Tfinal	158	178	167	258	118
	Erro	5.94%	13.90%	19.85%	13.41%	290.10%
U33						
	Tfinal	15	16	21		
	Erro	7.19%	8.83%	6.99%		

8. O que há ainda a fazer

Viu-se em (2.6.4) que os calibres nominais que foram arbitrados para cada lote granulométrico através de uma interacção com os parâmetros do modelo, podem ser transformados nos calibres equivalentes por peneiração, que medem a dificuldade total que as partículas de uma classe granulométrica experimentam em passar à classe seguinte, o mesmo se passando, de modo análogo em relação ao calibre equivalente do isocrivo.

8.1 os calibres nominais como parâmetros

Levando esta operação às suas últimas consequências é nossa convicção que o modelo deve ser reformulado utilizando como parâmetros

$$V_{Cr}, Sat, \phi[l], Flso[l], Plso \quad [2.22]$$

$$(l=1, 2, \dots, nc),$$

que obedecem às seguintes restrições:

$$1. \quad 0 \leq V_{Cr} \quad [2.23]$$

$$2. \quad 0 \leq Sat \leq S_{max} \quad [2.24]$$

$$3. \quad I_{uz}[l] \leq \phi[l] \leq I_{uz}[l-1] \quad [2.25]$$

A probabilidade de passagem *a posteriori* agora já não será fixada pelo operador no início da corrida, mas torna-se variável com o valor que $\phi[1]$ vai assumindo durante o ajuste. Pensamos que assim se conseguirá uma legibilidade física mais fácil e imediata do parâmetro $\phi[1]$ que corresponderá, na prática, a uma verdadeira propriedade global.

Contudo, será necessário ainda proceder a duas alterações fundamentais: uma no algoritmo de Levenberg-Marquardt e outra na rotina experimental.

Na rotina de Levenberg-Marquardt é necessário implementar a descrição explícita das restrições nos parâmetros, como se indica no fluxograma da Fig. 3.5, de modo a eliminar os inconvenientes descritos em (2.6.2).

Na rotina experimental é imprescindível aumentar o número de medidas (pesagens) efectuadas nos primeiros instantes da tamisagem, para assim acentuar o peso da componente não-linear no processo de simulação. Esta medida permitirá, assim o cremos, o ajuste de um parâmetro Sat mais racional o que levará, seguramente, à definição de um meio multicamada em cada peneiro.

Por outro lado, o aumento do número de pesagens minimizará, concerteza, o inconveniente causado pela elevação do número de parâmetros a ajustar.

Como é evidente, tudo o que foi dito pode ser (e deve!)

ser transcrito, numa primeira fase, para o caso de um único peneiro.

8.2 Eliminação do factor forma

Numa segunda fase, será possível retirar à cinética da peneiração a componente que lhe é conferida pela forma das partículas o que, se as nossas conjecturas de (2.6.3) forem correctas, permitirá definir mais claramente o ponto de intersecção das duas cinéticas, por eliminar a zona de transição (Fig 2.9). Para tal propomos que se siga a seguinte estratégia experimental.

1. Tamisagem cerrada da alimentação (peneiros seriados segundo $2^{1/4}$), para minimizar os efeitos do calibre na fase seguinte de separação.

2. Passagem de cada uma das fracções granulométricas assim obtidas através, por exemplo, do dispositivo experimental descrito por Aravamudhan, S. et al (1984) que separará as partículas em função da sua forma.

3. Recompôr, com os lotes "mono-forma" assim obtidos, a composição granulométrica que irá servir de alimentação às análises granulométricas.

4. Finalmente, proceder aos ajustes do modelo cinético

para recuperação dos parâmetros.

8.3 Cinética em regime contínuo: perspectivas

Se a cinética da crivagem em contínuo correspondesse a uma simples transposição do processo descontínuo, então o dimensionamento dos crivos seria imediato. Com efeito (Fig 2.18), considerando com Leite, M. (1987b) que a velocidade de deslocação v das partículas sobre a malha é constante ao longo de todo o crivo, resulta a transformação de variáveis

$$x = v t \quad [2.27]$$

que nos permite obter, a partir do tempo final da tamisagem (T_f), um X_f , que é o comprimento útil do crivo que corta a alimentação no fim da cinética do infracrivo.

Muito embora não seja de esperar que as características do processo laboratorial possam ter transposição imediata para a crivagem contínua, a mudança de variáveis [2.27] permite, em princípio, utilizar as equações [2.14] e [2.15] para a simulação de um crivo industrial, desde que mantenham os seguintes pressupostos:

- a composição granulométrica da alimentação (do crivo ou do circuito fechado) é constante e foi determinada à partida;

- nas equações [2.14] e [2.15] os valores m_{k1} ($k=1, 1 \in \{1,2\}$) não representam agora massas, mas sim as fracções granulométricas do infracrivo que passam através da rede de um crivo de largura unitária.

Do nosso trabalho resulta ainda uma conclusão com aplicação industrial. Verificou-se que, apesar da propriedade tecnológica calibre ser a mesma para todas as partículas de uma dada classe granulométrica, se assimilarmos as partículas a elipsóides podemos afirmar (revejam-se as fotografias das Fig^s. 2.10 a 2.17) que existem diferenças sensíveis nas dimensões dos

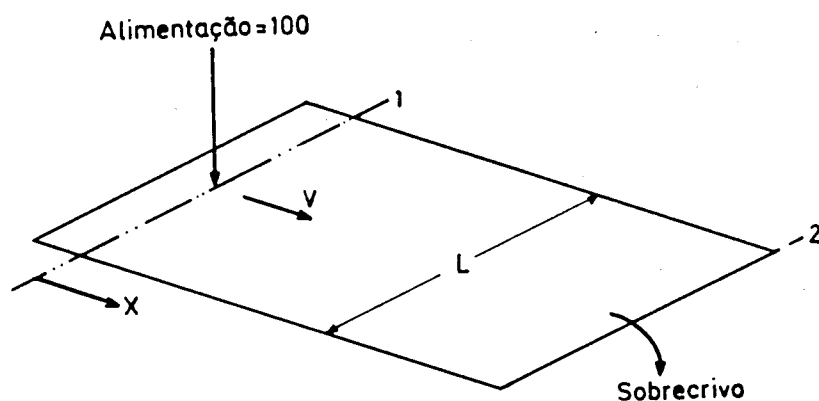


Fig. 2.20: Crivo ideal em regime estabilizado com percurso linear das partículas

"eixos" das partículas que passaram para tempos curtos (o infra-crivo) e das que passaram para os primeiros tempos longos (primeiro isocrivo). Por isso, o seu comportamento durante os processos de concentração será certamente diferente, isto é, não são equivalentes sob o ponto de vista do processo de concentração.

Assim, para diagramas de tratamento de minérios, (nomeadamente por via hidrogravítica) em que a fase anterior à concentração pode ser terminada por uma crivagem, seria útil a utilização de dois crivos em série: o primeiro, de comprimento dimensionado pelo processo indicado atrás, para separar o infra-crivo e o segundo, de tempo de residência mais longo(*), para separar o isocrivo de tempo curto (as duas malhas podem ser ligeiramente diferentes). Os dois lotes seriam tratados separadamente.

Relembremos ainda que tudo leva a crer que os crivos trabalhem mal quando descarregados. Acreditamos que é de toda a conveniência que se formem leitos plurigranulares durante a crivagem, mesmo na parte terminal do aparelho. Por isso consideramos que é sempre preferível trabalhar com crivos estreitos e alongados.

(*) Relembremos a nossa observação de (2.6.3), onde dissemos que a passagem das partículas de isocrivo depende essencialmente do seu posicionamento em relação à malha, o que as leva a tempos de residência mais longos.

"Computers have made this the golden age of modeling. Easy access to desktop computers and modern software allows people with modest statistical and programming backgrounds to construct and test elaborate formal models. Analysis that might have been considered dissertation topics fifty years ago can be completed in a few hours or days. Our current technology far surpasses that of earlier generations of students. We have reached the point where we just drop our data into the computer and push the button, right?

Wrong."

T. R. Houston (1986): Why models go wrong

3. OS METODOS NUMERICOS

The Waterbeetle

The waterbeetle here shall teach
A sermon far beyond your reach
He flabbergasts the Human Race
By gliding on the water's face
With ease, celerity and grace;
But if he ever stopped to think
Of how he did it, he would sink.

Hilaire Belloc: Cautionary Verses

1. Exórdio

A decisão de escrever um capítulo que descrevesse em profundidade os métodos numéricos utilizados durante o trabalho foi uma decisão tardia, dolorosa e arriscada. Deixem-me explicar-lhes porquê.

Sempre me encontrei, relativamente à matemática, na situação do aprendiz de feiticeiro que nem sequer sabe como pegar na varinha de condão, com medo que o feitiço lhe rebente na cara.

Este estado de espírito foi criado, como em tantos outros de nós, pela clássica formação matemática "apreendida" nos Preparatórios de Engenharia, que rapidamente enferrujou pela falta de uso e só deixou a veneração beata, já insinuada no Secundário, por tudo quanto fosse número, pela infalibilidade mágica da ciência e pelos raciocínios profundos daquelas mentes poderosas que se aventuravam a mexer-lhe. A passagem para a Faculdade de Engenharia, no terceiro ano da licenciatura destruiu-me o edifício das certezas determinísticas que com tanto gostinho me tinham ajudado a construir. Fui então mergulhado violentamente no domínio do possível e aprendi a repudiar o exacto. Ensinaram-me, com sólido bom senso, que a solução teóricamente correcta podia não ser a mais oportuna, ou nem sequer a que conduzisse ao maior lucro. E, talvez por que nas minas a previsão era uma utopia e o imprevisto era a Santa Bárbara de todos os dias, muito subliminarmente foram-me dizendo que isso da matemática só servia para floreios intelectuais já que uma boa regra de três resolvia todos os problemas.

Quando peguei neste trabalho de doutoramento, todo o meu passado e ignorância matemática se conjugaram para que aceitasse de boa fé servir-me, sob a forma de "caixa preta", de um algoritmo já testado. Só que o mundo dá muitas voltas e um doutoramento feito por um cabeçudo como eu, também. A curto prazo, o objectivo inicial do trabalho foi completamente modifi-

cado e assim surgiu a necessidade de abrir a "caixa negra", espreitar lá para dentro e, a pouco e pouco, ir descobrindo como é que as coisas se faziam (ou se não deviam fazer).

E qual não é o meu espanto quando um dia dou comigo a ler matemática a um ritmo perfeitamente convincente. Aprendi, maravilhado, que os métodos que eu utilizava estavam ainda em construção e, até que nem sequer era pacífico que tal ou tal estratégia algorítmica fosse a mais correcta. Como era inevitável, perdi o respeito à matemática.

Mas toda a bela tem senão. Ao espreitar para dentro do desconhecido passei, de executante, a crítico do próprio trabalho. E que quantidade de erros eu não cometi ...; davam, asseguro-o, para tornar mais humanos uma dúzia de primeiros ministros. Assim, este capítulo é, em si, uma história de descoberta e, em consequência, o relato de uma sucessão de erros que, nem por o serem, são menos assumidos. Tenham a bondade de lê-lo como tal.

2. Estabelecimento da função objectivo e caracterização do mínimo em R^n .

De posse de um modelo que, a partir de um conjunto de parâmetros passíveis de interpretação física, "efectua uma tamisagem" sobre uma alimentação com composição granulométrica bem conhecida, pretendemos minimizar o desvio que os resultados assim obtidos apresentam em relação ao caso real. Se $r_k(t)$ representar a massa que, ao fim de um dado intervalo de tempo t (expresso em minutos), se encontra sobre o crivo de ordem k e sendo $m_k(t, x)$ a massa calculada pelo modelo, que é função de:

k , o nº de ordem do crivo,

t , o tempo decorrido desde o início da crivagem,

x , o vector dos parâmetros do modelo,

a nossa tarefa resume-se a minimizar globalmente, e em relação aos parâmetros, os resíduos que tomam a forma

$$f_i(x) = r_i(t) - m_i(t, x) \quad (i = 1, 2, \dots, m), \quad [3.1]$$

representando $x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}^T$ o vector dos parâmetros a ajustar, n , o nº de parâmetros presentes na nossa configuração e m o nº de resíduos (igual ao nº de determinações experimentais).

Utilizando a notação matricial,

$$r = \{r_{kj}\} \quad [3.2]$$

e

$$m = \{m_{kj}\} \quad [3.3]$$

$$(k= 1, 2, \dots, n_c; j= 1, 2, \dots, n_t)$$

são as matrizes de dimensão $n_c \times n_t$, respectivamente, dos dados experimentais e dos resultados calculados, com k como nº de ordem do crivo e com j como nº de ordem do tempo decorrido desde o início da crivagem até ao momento em que se efectuou a pesagem. Pelo seu lado

$$f = \{f_1, f_2, \dots, f_m\} \quad (m= n_c \times n_t) \quad [3.4]$$

é o vector dos resíduos.

Existem diversos modos de agrupar estes últimos valores de modo a obter uma função a minimizar, real da variável vectorial $F(x)$, definida num espaço n -dimensional, que passará a constituir a nossa função objectivo. Caso se pretenda utilizar um teste final de aderência entre a matriz dos dados reais e a dos valores calculados, apenas se pode pensar em duas alternativas para a escolha da função objectivo:

- ou um somatório de mínimos quadrados (minimização em norma euclidiana), para o qual o teste é o Qui-quadrado;
- ou o resíduo de maior valor absoluto (minimização em norma infinita), cujo teste específico é o Kolmogorof-Smirnoff.

Apenas por ser o critério mais habitual de ajuste,

decidimo-nos pelos mínimos quadrados. Em boa hora o fizemos, dado que isso possibilitou, como se verá mais adiante, a utilização de um método optimizador específico, com todas as vantagens daí decorrentes.

A função a minimizar passa então a ter a forma

$$F(x) = \sum_{i=1}^m [f_i(x)]^2 \quad [3.5]$$

Note-se que, no caso presente, a função é não-linear e continuamente diferenciável em ordem aos parâmetros, como se pode retirar da leitura da secção (2.4.2).

É condição essencial para que um modelo numérico possua validade que o valor de $\|f(x)\|$, tomado no mínimo, seja pequeno e ainda que $\underline{n}$, o número de valores a ajustar seja, no máximo, igual ao número de resíduos, $\underline{m}$. Se esta última condição se não cumprir, corre-se o risco de tomar como válidas interpretações perfeitamente arbitrárias. De qualquer modo, é sempre preferível, sob um ponto de vista estatístico, que exista redundância quanto ao número de determinações experimentais, isto é, que $\underline{m}$ seja substancialmente superior a $\underline{n}$.

Vemos assim que existem à partida duas componentes principais do problema de optimização: as variáveis que, regra geral designaremos por parâmetros e que se agrupam sob a forma do vector x , e a função a minimizar, a que chamamos função objectivo

e que, no nosso caso, é um somatório de mínimos quadrados. Acrescente-se que, devido ao facto de os parâmetros não poderem tomar certos valores, física ou matematicamente sem sentido, existe um conjunto de condições, as constricções, que restringem os seus domínios de variação. Contudo, e porque as constricções apenas foram explicitamente introduzidas numa fase posterior do trabalho, vamos atacar o problema da minimização da função objectivo como se o seu domínio fosse todo o R^n (minimização sem constricções). Posteriormente daremos conta das diligências tomadas para lidar com elas.

3. A primeira tentativa de minimização - o polítopo

Muito embora sejam bem conhecidos métodos específicos que "pegam" neste tipo de problemas, o primeiro caminho de que lançámos mão para resolver o problema da minimização da função objectivo foi o que é habitualmente conhecido por Simplex. Dado que esta designação conduz a confusões com o método de programação linear com o mesmo nome, na discussão que se segue utilizaremos o termo polítopo (*poli-* + *-topo*= vários locais), particularmente bem adaptado por o método utilizar, para poder progredir, a determinação da função em diversos pontos.

As razões que nos levaram a este caminho, e que na altura se nos afiguravam mais que razoáveis, eram de ordem pragmática. Em primeiro lugar, o problema que nos propúnhamos resolver, a optimização da tamisagem era apenas um problema vicinal, ou se se quisesse, um desvio no plano inicial de trabalho. Por isso não pareceu aconselhável a utilização de artilharia pesada em caso de tão pouca monta, virando-nos para um método que pudesse ser levado a cabo sem grande esforço. Em segundo lugar, como o doutorando não possuía quaisquer inclinações específicas no campo das matemáticas, seria sempre preferível a construção de um algoritmo baseado em conceitos heurísticos, o que lhe permitiria "ver" mais facilmente como a pesquisa iria decorrendo.

Em suma, para a resolução de um problema que se presumia simples e secundário, colocado nas mãos de um não-matemático, a solução correcta passaria sempre pela utilização de um método "simples". Foi, sem sombra de dúvidas, um erro de principiante. Rápidamente se chegou à conclusão de que, nem o problema era de fácil abordagem, nem o método de minimização era satisfatório (sobre a discussão das virtualidades do método veja-se 3.3.5.).

Agora, à distância no tempo e no trabalho, vemos que as razões que nos levaram a esta nossa primeira escolha foram fúteis, resultado da tentativa de encurtar caminho, através da escolha de métodos que pudessem ser postos em prática rapidamente. A este propósito podemos citar Gill, Murray & Wright (1981), quando escreveram: "...modern numerical analysis has shown that even apparently simple computations must be implemented with great care, and that naïve implementations are subject to a high probability of serious error and numerical instability".

3.1 Descrição do algoritmo (Fig. 3.1)

No caso de uma pesquisa a n-parâmetros podemos assimilar o polítopo a uma aranha com n+1 patas telescópicas que se desloca sobre uma superfície (definida por $F(x)$) situada num espaço n-dimensional. Este bicharoco tem uma idiossincrasia

curiosa: tem um medo enorme das alturas. Por isso, sempre que muda de local, o seu primeiro cuidado é o de avaliar a cota de cada um dos seus pontos de apoio. Logo que determina qual é o mais alto, tira de lá a patinha e, com o maior método, procura na vizinhança próxima um outro que não esteja tão alto. Encontrando-o, aceita-o de imediato, em prejuízo do que o afligia, mantendo todos os restantes. Mas, para mal dos seus pecados, verifica sempre que ainda há uma patita que está mais alta que as outras e lá recomeça o processo. Consegue assim, a pouco e pouco, baixar o seu centro de gravidade. Só se dá por satisfeito quando, repetindo-se paciente e ordenadamente, sente (a sensibilidade é o nosso critério de paragem) as patinhas encostadas umas às outras. Sabe que encontrou por fim um ponto estacionário da função e, emitindo para o exterior um suspiro de alívio, descansa enfim.

Vejamos agora quais são os processos numéricos que fazem com que o nosso bichinho se mova.

De cada vez que o polítopo-aranhiço muda de posição, verifica as coordenadas e as "cotas" da função objectivo em cada um dos $n+1$ pontos de apoio ($x_1, x_2, \dots, x_n, x_{n+1}$) e anota quais são aqueles em que a função objectivo toma os valores mais alto (x_{n+1}), segundo mais alto (x_n) e mais baixo (x_1). Em seguida calcula o centróide dos n "melhores pontos", dado por

$$c = 1/n \sum_{j=1}^n x_j \quad . \quad [3.6]$$

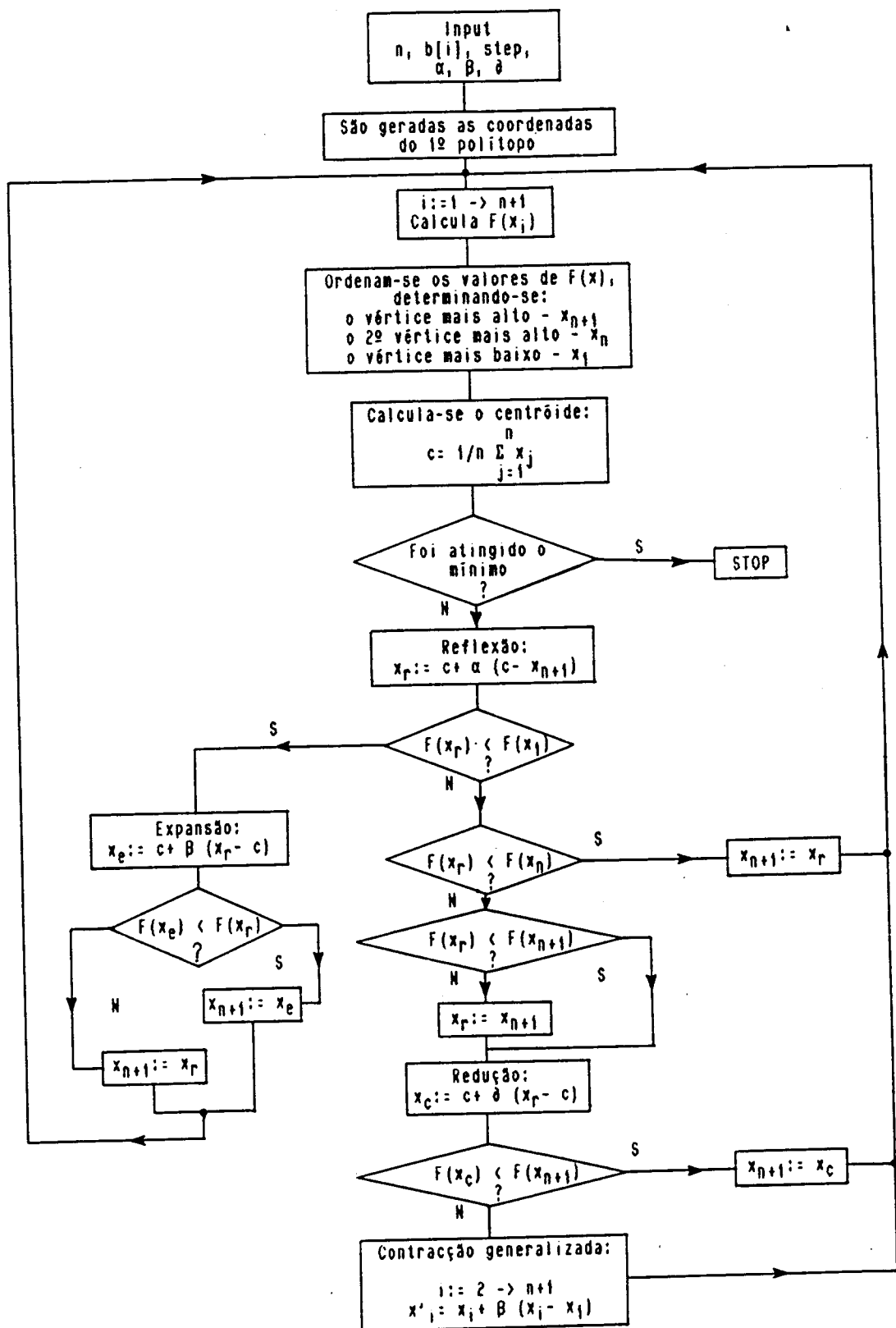


Fig 3.1: Fluxograma sucinto do algoritmo *Simplex*.

Finalmente, retem as "cotas" e as "coordenadas topográficas" dos $n+1$ pontos, juntamente com as coordenadas do centróide, numa matriz $\{B\}$, de $(n+1)$ linhas por $(n+2)$ colunas.

No início de cada ciclo, a primeira atitude que toma, para poder mudar de local, é a produção de um ponto tentativo x_r por reflexão da sua estrutura, através da expressão

$$x_r = c + \alpha(c - x_{n+1}), \quad [3.7]$$

sendo α ($\alpha > 0$) o coeficiente de reflexão, determinando também $F(x_r)$, o valor da função no novo ponto.

O bicharoco pode encontrar-se em três situações distintas:

$$1. \quad \boxed{F(x_r) > F(x_1)}$$

Encontrou um novo "melhor ponto" (melhor no sentido em que nele a função possui um valor mais baixo que em todos os outros) e, presumindo que a linha que o une ao ponto de cota mais alta é uma direcção de descida, tenta expandir-se nessa direcção através da relação

$$x_e = c + \beta(x_r - c), \quad [3.8]$$

sendo β ($\beta > 1$) o coeficiente de expansão. Se a expansão fôr bem sucedida, isto é, se $F(x_e) < F(x_r)$, o algoritmo substitui x_{n+1} por x_e ou, no caso contrário, por x_r .

$$2. \quad F(x_1) \leq F(x_r) \leq F(x_n)$$

Não obteve nem um novo "melhor ponto", nem um novo "pior ponto" e, portanto, opta por substituir x_{n+1} por x_r .

$$3. \quad F(x_r) \geq F(x_n)$$

O ponto tentativo é pior que o segundo "pior ponto" já existente e, por isso, a direcção definida por ele e por x_{n+1} é desfavorável. Tem que arrepiar caminho, o que só consegue encolhendo uma das suas patas telescópicas (redução). Dois casos podem ocorrer:

$$a. \quad F(x_r) < F(x_{n+1})$$

Produz-se um novo ponto entre c e x_r , através da relação

$$x_c = c + \delta(x_r - c); \quad [3.9]$$

$$b. \quad F(x_r) > F(x_{n+1})$$

A redução é feita encontrando um novo vértice entre c e x_{n+1} , pela relação

$$x_c = c + \delta(x_{n+1} - c), \quad [3.10]$$

com δ ($0 < \delta < 1$) como coeficiente de redução.

Em seguida, se verifica que $F(x_c) < \min \{F(x_r), F(x_{n+1})\}$, considera a contracção como bem sucedida. No caso contrário não tem outro remédio senão encolher-se, mantendo apenas uma pata em

x_1 , ou seja, usa a relação de contracção

$$x'_i = x_i + \beta' (x_i - x_1), \quad [3.11]$$

sendo β' ($0 < \beta' < 1$) o coeficiente de contracção e com $i \neq 1$. E de novo recomeça o seu fadário, até que se dê por satisfeito.

3.2. Modificações possíveis

Diversos autores têm sugerido algumas modificações ao esquema genérico proposto acima que corresponde, grosso modo, ao de Spendley, Hext & Himsworth (1962), modificado por Nelder & Mead (1965). Em particular, Gill Murray & Wright (1981, pág. 95) sugerem que a contracção deve ser executada por geração de um ponto enviesado em direcção a x_1 . Embora fundamentalmente correcta, na prática, esta modificação não nos levou a resultados visivelmente melhores. Contudo, esta medida acarreta consigo o perigo de alongar o polítopo, fazendo tender os vértices para a coplanaridade, o que força inevitavelmente o abortamento da pesquisa. A mesma crítica se pode fazer quanto aos algoritmos onde se não resiste à tentação de proceder à reflexão entre x_1 e c e não entre x_{n+1} e c .

Nash (1979, pág. 145) indica que O'Neil (1971), no seguimento do trabalho original de Nelder e Mead (1965), propõe

que para cada um dos parâmetros, na geração do polítopo de arranque, se usem incrementos diferentes e proporcionais ao seu domínio de variação, o que permitiria, no seu entender, melhorar a sua velocidade de convergência. Claramente, este caso resolve-se correctamente com um conveniente escalamento das variáveis (veja-se 3.7.2) e não com o método proposto, que só actua no arranque da pesquisa. Em particular, caso existam diferenças notórias de escala entre os parâmetros, corre-se mais uma vez o risco de as variáveis se aproximarem da dependência linear. É que, nestas circunstâncias, quando se dá a expansão ou a reflexão, as coordenadas do novo ponto de apoio podem diferir muito entre si e então o polítopo resultará muito alongado segundo um dos eixos: os pontos x_i correm o risco de se aproximar da coplanaridade.

3.3 As restrições

O método que originalmente foi seguido para assegurar a viabilidade física do problema (por exemplo, para impedir que as probabilidades ultrapassassem a unidade) foi o "método do pontapé para cima". Quando os parâmetros penetravam numa zona de impossibilidade, fazia-se simplesmente a função objectivo arbitrariamente muito elevada, ou, utilizando uma analogia topográfica, intro-

duzia-se uma escarpa em $F(x)$, que o aranhaço não tinha capacidade de escalar (sugestão de Nash(1979, pág. 145). À primeira vista, dado o carácter heurístico do algoritmo, uma solução deste tipo parece perfeitamente adaptada. Contudo, e mais uma vez, se verifica que uma análise ingénua neste tipo de problemas resulta quase sempre em asneira. Na verdade, ao utilizar a escarpa estamos a introduzir uma singularidade que corresponde a uma descontinuidade logo na primeira derivada. Embora, ao contrário da maior parte dos outros métodos, o polítopo pareça não se preocupar absolutamente nada, nem com a informação de primeira ordem nem com a informação de ordem superior, não é insensível a estas habilidades. Caso o mínimo numérico a atingir x^* se encontre na zona de impossibilidade física, o aranhaço é inevitavelmente atraído para a base da escarpa e rapidamente todos os seus vértices se sobrepõem no sopé, tornando-se quase colineares e, daí em diante, só se consegue progredir ao longo do limite da constrição. Por outras palavras, o algoritmo aborta.

Curiosamente, muito embora este método de rejeição dos pontos sem significado físico ocorra imediatamente ao optimizador mais incipiente, por mais que pesquisássemos a literatura da especialidade não encontrámos qualquer tratamento teórico deste processo. Apenas Swann (1972) indica, sem aduzir quaisquer razões teóricas, que, para que um algoritmo de pesquisa directa possa progredir ao longo da fronteira da constrição, o passo da

progressão deve ser de tal modo reduzido que é muito provável que os critérios de convergência sejam rapidamente satisfeitos e então a pesquisa se dê por terminada, sem que se verifique qualquer progresso sensível em direcção ao mínimo.

Keefer (1973, *in* Swann, (1972b)) propôs um método de pesquisa que, utilizando o polítopo na sua versão original, lida com as condições de restrição, no caso de simples limitações do intervalo de variação dos parâmetros, através de uma pesquisa axial auto-limitada. Para esse fim dividem-se os parâmetros em duas matrizes: uma constituída pelas variáveis adstritas ao polítopo e a outra, pelas que são utilizadas na pesquisa axial. Consoante as restrições se tornam ou não activas, os parâmetros são transferidos de uma para outra matriz.

A utilização deste método ou de qualquer um outro que utilizasse funções de penalização ou funções-barreira, aumentaria muito o esforço de programação para um método que, à partida, se pretendia que fôsse simples. Por isso, a nossa preferência dirigiu-se para a utilização de mudanças de variáveis que transformaram o nosso problema de minimização com restrições num problema de pesquisa de mínimos sem restrições, o que resolveu o problema da convergência extemporânea do algoritmo. Estas funções, bem como as vantagens e inconvenientes resultantes da sua utilização, serão analisadas em (3.8.3), a propósito da discussão do algoritmo de Levenberg-Marquardt.

3.4. Critério de paragem e precisão da solução

Nelder & Mead (1965) sugerem a utilização de um critério de paragem do tipo estatístico, baseado numa espécie de "erro padrão" dos valores que a função objectivo toma nos vértices do polítopo, isto é, o algoritmo pára quando o valor

$$e_s = \left[\left(\sum_{j=1}^{n+1} \left[F(x_j) - \sum_{j=1}^{n+1} F(x_j)/(n+1) \right]^2 \right) / n \right]^{1/2} \quad [3.12]$$

se torna menor que um valor pré-estabelecido. Nash (1979, pp. 144) indica que critérios deste tipo podem levar a paragens prematuras do algoritmo em "planaltos" (zonas de insensibilidade às variações dos parâmetros) e pretere-o em favor de um critério "mais matemático" e "menos estatístico", ou seja, o algoritmo só deverá parar quando a função objectivo toma o mesmo valor em todos os pontos, a menos da imprecisão da máquina. Critério a todos os títulos semelhante é o indicado por Gill Murray & Wright (1981, pp. 307-308), ou seja, a função deve parar quando numa qualquer iteração se verifique que a diferença entre os valores mais alto e mais baixo que a função toma nos vértices do polítopo é inferior a uma função de τ_F ,

$$F(x_{n+1}) - F(x_1) < \tau_F (1 + |F(x_1)|), \quad [3.13]$$

onde τ_F é a aproximação (número de algarismos significativos

correctos) estipulada para a função objectivo. Alternativamente, poder-se-ia utilizar como segundo membro de [3.13] a expressão $\tau_F |F(x_1)|$. Porém, se $|F(x_1)|$ se aproximasse de zero (por exemplo, devido a erros de cancelamento) o teste resultaria excessivamente rigoroso, levando a que a pesquisa se eternizasse sem sentido.

Recorrendo à metáfora anterior, o aranhão só se sentirá feliz quando sentir todas as patinhas à mesma cota. Dado que o algoritmo converge a uma velocidade extremamente baixa, qualquer esforço no sentido de obter mais do que uma precisão rudimentar, não é justificável, haja em vista o elevado esforço computacional necessário. Por isso, mesmo quando o polítopo é aplicado a uma função "bem comportada", não vale a pena utilizar uma precisão relativa τ_F inferior a 10^{-3} .

É evidente que, dependendo da precisão da solução final, corre-se o risco de que o processo de pesquisa se dê por concluído com um polítopo de dimensões generosas, de "cotas" iguais para todos os pontos e, eventualmente, com o mínimo num ponto mais baixo, localizado no seu interior. Por isso é também necessário acrescentar ao critério baseado na precisão com que a função objectivo é calculada, um outro, que controle o tamanho do polítopo. Este teste deve ser aproveitado para nos assegurarmos que, após uma contracção, houve efectivamente uma diminuição de tamanho, o que pode não ocorrer quando se trabalha com baixa

precisão (levando, em consequência, a iterações desnecessárias).

Numa primeira aproximação, parece que este último controle da precisão da solução é, além de necessário, também suficiente. Por isso foi este o critério por nós utilizado, ou seja, o algoritmo pára quando o "perímetro" do polítopo desce abaixo de um valor pré-determinado. Faz-se, então

$$s = \sum_{i=1}^n \|x_1 - x_i\| < \gamma_F, \quad [3.14]$$

onde s é o "tamanho" actual e γ_F é o "tamanho" mínimo do polítopo que estipulamos. Isto é, calcula-se a soma das normas unitárias dos vectores-distância entre cada um dos vértices e o de cota mais baixa, parando o algoritmo quando s se torna menor que um valor fixado previamente.

Contudo, a utilização de um tal critério só é defensável se a função a minimizar for continuamente diferenciável, o que era o nosso caso. No caso de funções com a primeira derivada descontínua, ou quando $F(x)$ é ela própria descontínua, caso a que o método de pesquisa está particularmente bem adaptado, esta estratégia leva inevitavelmente a falhar o mínimo se este se encontrar num ponto de descontinuidade.

Apesar de tudo o algoritmo é bastante robusto e, se lhe for permitido continuar a pesquisa por tempo suficiente, acaba

sempre por encontrar o ponto estacionário mais próximo e/ou mais evidente.

3.5 Razões do abandono do método

Apesar da sua pertinácia, o nosso amigo aranhaço é muito pouco eficaz na sua locomoção. Como só sabe o que são cotas e não possui o conceito de gradiente nem o de curvatura, é muito curto de vistas, não chegando nunca a utilizar a informação "topográfica" que a função proporciona.

Na verdade, os métodos que, como o polítopo, se baseiam na comparação de valores que a função objectivo vai tomando, são apropriados apenas aos problemas em que $F(x)$ é descontínua, ou quando o gradiente é descontínuo na vizinhança da solução ou, ainda, quando tem tantas descontinuidades que um método que se aplique ao caso de funções diferenciáveis, falhará quase certamente. Um método genérico, aplicável a funções "não-suaves" será, em geral, ineficaz, quando a função a minimizar possuir alguma continuidade. Se se decide utilizar um método deste tipo apenas devido à sua simplicidade e enganosa latitude de campos de aplicação, pagar-se-á sempre um elevado preço em velocidade e precisão. Poder-se-á erradamente pensar que, devido à sua generalidade, estes métodos são muito robustos. Muito embora não

sofram da doença dos erros de arredondamento que aflige os processos mais elaborados, deve-se salientar que aplicações correctas de métodos mais sofisticados são também muito robustas. Uma outra grande desvantagem de métodos como o polítopo é que não se pode garantir nunca (teóricamente) que o método possua convergência global, e, portanto o objectivo do método é mais produzir uma "boa solução" do que uma óptima solução, mas na secreta esperança de que, em termos práticos, "boa" signifique "óptima".

Contudo, e no nosso entender, o óbice principal que se pode levantar a métodos de pesquisa directa é o que é habitual designar-se por "maldição da dimensionalidade": quando o espaço dos parâmetros aumenta de dimensão, o número de avaliações da função objectivo necessárias para que o algoritmo progrida, aumenta quase que exponencialmente com ela.

Muito embora se tivesse iniciado o processo de optimização da crivagem apenas com três parâmetros para cada conjunto de cinco crivos laboratoriais, bem cedo as necessidades de refinar o modelo impuseram um drástico aumento do seu número, que, numa versão intermédia, chegou a atingir os doze. Significa isto que o polítopo passa a ter treze vértices. Portanto, para cada mudança completa de posição do "bicharoco", são necessárias treze avaliações da função objectivo em pontos distintos. Dizendo de outro modo: se considerarmos que se está a tentar um ajuste do modelo ao conjunto dos cinco crivos mais finos, sendo o tempo de

crivagem experimental de 135 minutos e o passo de integração numérica de 1 minuto, cada mudança completa de posição do "aranhão" corresponde a 52 500 iterações simples da subrotina de integração. Para um algoritmo que pretendia fundamentalmente poupar tempo de crivagem, os tempos de corrida correspondentes podiam, no mínimo, ser descritos como ridículos!

Como já foi dito atrás, o problema a tratar é um caso clássico de minimização de uma soma de quadrados. Por isso, e como devia ter sido feito desde o início, passou-se para um método específico: o método de Levenberg-Marquardt.

4. A 2ª tentativa: o algoritmo de Levenberg-Marquardt

Em contraste com o polítopo, que é completamente indiferente à forma da função que tenta minimizar, o algoritmo que a seguir se discute baseia-se na aplicação de um modelo quadrático à função objectivo. Existem duas justificações principais para esta escolha: a simplicidade do modelo e, mais importante ainda, o sucesso e a eficiência prática dos métodos que nele se baseiam. No caso particular em que a função objectivo é constituída por um somatório de quadrados, existe a razão adicional de terem sido desenvolvidos métodos de minimização próprios que aproveitam as suas características específicas, em particular, o facto de as "linhas de nível" de $F(x)$, tomadas em relação aos parâmetros, terem a forma de elipsóides na vizinhança do mínimo (embora bastante deformados no caso da não-linearidade).

A eficiência deste tipo de métodos baseia-se no aproveitamento das informações de primeira e de segunda ordem que a função transporta consigo, sem que seja necessário o recurso ao cálculo, quase sempre moroso, das suas segundas derivadas. Como veremos, o método de Levenberg-Marquardt faz a aproximação da informação de segunda ordem através do produto matricial $J^T J$ (a matriz J está definida mais adiante na expressão [3.24]), com a diagonal principal transformada por um parâmetro real e positivo, que é determinado heurísticamente pelo próprio algoritmo.

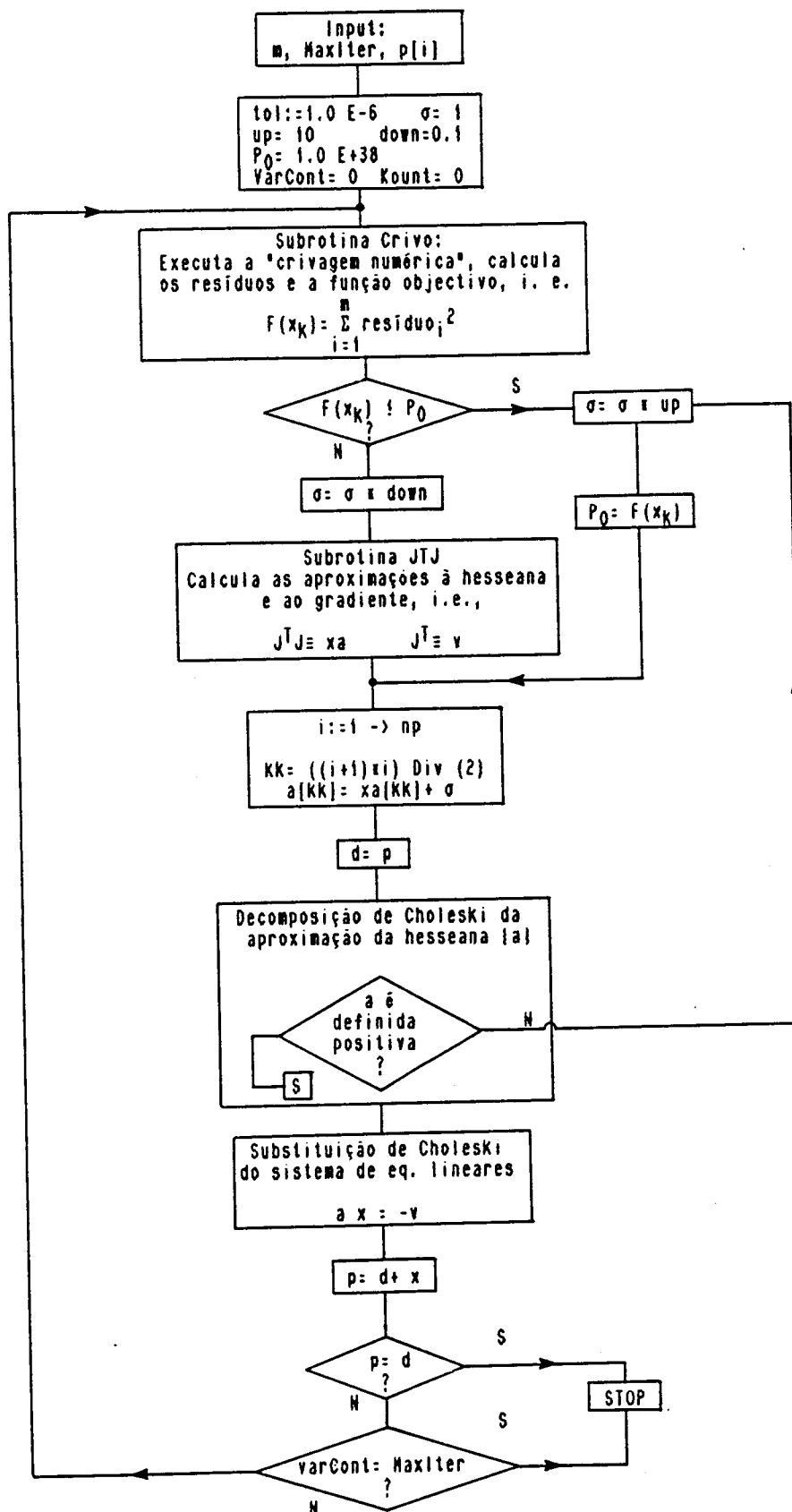


Fig. 3.2: Fluxograma sumário do algoritmo de Levenberg-Marquardt

Um fluxograma sumário que ilustra as relações do algoritmo de Levenberg-marquardt com as rotinas de Choleski de factorização matricial, com a rotina Crivo e, ainda, com o procedimento que calcula as aproximações à hesseana e ao gradiente, pode ser visto na Fig. 3.2.

4.1 Fundamentação teórica

Analogamente ao que acontece no caso das funções monovariadas, sabemos (é fácil verificá-lo através de raciocínios que envolvem a expansão de Taylor em torno do mínimo) que é necessário e suficiente para que um ponto x^* , seja mínimo sem restrições de uma função $F(x)$, escalar da variável vectorial, definida em R^n , que se cumpram as duas seguintes condições:

1. O gradiente de $F(x)$ (definido mais adiante em [3.25]) deve anular-se no ponto de mínimo

$$g(x^*) = 0, \quad [3.15]$$

o que é o mesmo que dizer que x^* é um ponto estacionário.

2. A Hesseana (definida mais adiante em [3.29]) de $F(x)$ tem também que ser aí definida positiva.

Devido ao facto de a função ser, pelo menos, duplamente diferenciável, é possível definir em torno do mínimo x^* da função

objectivo uma vizinhança, ϵ , mais ou menos lata, consoante as características de "suavidade" da função, onde é legítimo proceder ao seu desenvolvimento de Taylor

$$F(x+\epsilon v) = F(x) + \epsilon g(x) v^T + 1/2 \epsilon^2 v^T H(x) v + R(\epsilon^3), \quad [3.16]$$

em que x é o ponto do espaço n -dimensional onde estamos a considerar a função; ϵv , é o passo de iteração, que se supõe tomado em direcção ao mínimo (sendo v um versor definidor da direcção e ϵ um escalar que constitui uma medida do passo da expansão de Taylor); g e H representam, respectivamente, o gradiente e a hesseana de $F(x)$, tomados no ponto x ; $R(\epsilon^3)$ é o resíduo formado pelos termos de ordem superior.

Método de Newton-Raphson

Como se sabe, devido às características da função objectivo junto do mínimo, os termos superiores aos de 2ª ordem no desenvolvimento de Taylor são desprezáveis e, por isso, podemos aceitar uma aproximação quadrática da função objectivo, ou seja,

$$F(x+p) \approx F(x) + g(x)^T p + 1/2 p^T H(x) p, \quad [3.17]$$

com $p=\epsilon v$. Tomando como variável desta expressão o seu passo de

iteração, p , verifica-se que o mínimo do seu segundo membro se obtém para o valor que minimiza a função

$$\tilde{Q}(p) = g(x)p^T + 1/2 p^T H(x)p, \quad [3.18]$$

que sabemos ser quadrática, dado que $H(x)$, a hesseana da função objectivo, é positiva definida (e constante, quando consideramos x o ponto corrente do processo iterativo).

Ora a primeira derivada de $\tilde{Q}(p)$ anula-se no seu ponto de mínimo e, portanto,

$$\text{Grad } \tilde{Q}(p) = H(x^*) p + g(x^*) = 0. \quad [3.19]$$

Significa isto que o mínimo x^* da função $F(x)$, tomando como ponto de partida um ponto situado numa vizinhança restrita desse mesmo mínimo, pode ser atingido através do passo p que minimiza [3.18] o qual se pode obter pela resolução do sistema de equações lineares

$$H(x^*) p = -g(x^*) \quad [3.20]$$

com a Hesseana definida positiva. À direcção definida pelo vector solução de [3.20] dá-se o nome de direcção de Newton. Se o modelo quadrático representar, sem erro algum, a nossa função objectivo, a solução do sistema de equações lineares [3.20] corresponde ao passo único necessário para chegar do ponto de partida ao mínimo. Como a probabilidade de ocorrência deste caso

é nula, precisamos de encontrar um processo iterativo que lá nos conduza, mesmo que a representação [3.17] da função objectivo não seja perfeita. Ora garante-se, através do Teorema de Newton-Kantarovitch (Ortega & Rheinboldt, 1970, pp. 421) que, mantendo as condições enunciadas atrás quanto às características da função e partindo de um ponto situado na vizinhança próxima de x^* , pela resolução iterativa do mesmo sistema, utilizando o resultado de cada iteração como ponto de partida para o passo seguinte, ou seja, com

$$H(x_k) p_{k+1} = -g(x_k) \quad [3.21]$$

(sendo k o nº de ordem da iteração), podemos sempre atingir o mínimo da função.

Na aplicação deste método iterativo (Newton-Raphson) a uma função não-linear genérica, com ponto de partida situado numa vizinhança suficientemente próxima de x^* , para que aí a hessiana seja sempre definida positiva e utilizando um passo de iteração que converge para a unidade, verifica-se que (Ortega & Rheinboldt, 1970, pp. 313)

$$\text{O} \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x_k\|}{\|x_k - x^*\|^2} < \infty \quad [3.22]$$

ou seja, a convergência é quadrática, o que, grosso modo, corres

ponde a duplicar o número de algarismos correctos a cada iteração.

Somatório de mínimos quadrados

No nosso caso particular, dado que a função a minimizar é constituída por um somatório de mínimos quadrados, o gradiente e a hesseana têm formas particulares. Senão vejamos.

A nossa função objectivo, como ficou dito em (3.2), tem a forma

$$F(x) = \sum_{i=1}^m [f_i(x)]^2 \quad [3.23]$$

com $x = \{x_j\}$ ($j=1, 2, \dots, n$) o vector dos parâmetros e

$f = \{f_i\}$ ($i=1, 2, \dots, m$) o vector dos resíduos.

Defina-se o jacobiano como sendo a matriz $n \times m$ das derivadas parciais dos resíduos em ordem aos parâmetros, ou seja:

$$J(x) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad [3.24]$$

Por definição de gradiente de uma função escalar $F(x)$,

$$\begin{aligned} [\text{Grad } F(x)]^T &\equiv \\ &\equiv g(x)^T \equiv \left[\frac{\partial F(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial F(x)}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial F(x)}{\partial x_1} \right]^T \end{aligned} \quad [3.25]$$

Dado que $F(x)$ é o somatório dos quadrados do vector dos resíduos, vem:

$$2 g_j(x) = 2 \sum_{i=1}^m f_i(x) \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \quad [3.26]$$

o que se reduz a

$$g_j(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x) J_{ij}(x), \quad [3.27]$$

ou seja,

$$g(x) = J^T f. \quad [3.28]$$

Por seu lado, a Hesseana é a matriz, quadrada e simétrica, das segundas derivadas em ordem aos parâmetros, da função escalar da variável vectorial, $F(x)$, ou seja:

$$H(x) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial F(x)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial F(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial F(x)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial F(x)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial F(x)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial F(x)}{\partial x_1 \partial x_n} & \frac{\partial F(x)}{\partial x_2 \partial x_n} & \dots & \frac{\partial F(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad [3.29]$$

o que corresponde à divergência do gradiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_j(x)}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\sum_{i=1}^m f_i(x) \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} \right] = \\ &= \sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial f_i(x)}{\partial x_k} \frac{\partial f_i(x)}{\partial x_j} + f_i(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k} \right] \end{aligned} \quad [3.30]$$

(j, k = 1, 2, ..., n; i = 1, 2, ..., m).

Então:

$$\begin{aligned} H(x) &= J^T J + \sum_{i=1}^m f_i(x) \frac{\partial^2 f_i(x)}{\partial x_j \partial x_k} \\ &= J^T J + \sum_{i=1}^m f_i(x) H_i(x), \end{aligned} \quad [3.31]$$

sendo $H_i(x)$ a hesseana do resíduo de ordem i . Fica, então

$$H(x) = J^T J + Q(x), \quad [3.32]$$

com

$$Q(x) = \sum_{i=1}^m f_i(x) H_i(x) \quad [3.33]$$

Assim sendo, o sistema [3.21] transforma-se em

$$(J(x_k)^T J(x_k) + Q(x_k)) p_{k+1} = -g(x_k) \quad [3.34]$$

ou, atendendo a [3.28], vem

$$(J(x_k)^T J(x_k) + Q(x_k)) p_{k+1} = -J(x_k)^T f(x_k) \quad [3.35]$$

Embora, como se pode ver, a hesseana de um somatório de mínimos quadrados seja formada por informação de primeira e informação de segunda ordem, sabe-se que (Gill, Murray & Wright, 1981, pp.134), o termo de 1ª ordem será largamente predominante desde que os valores dos resíduos sejam suficientemente pequenos, isto é, tenham uma ordem de grandeza inferior ao maior valor próprio de $J(x^*)^T J(x^*)$. Consequentemente, se $\|f\| \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow x^*$, a matriz $Q \rightarrow 0$ e, então, podemos aproximar a hesseana por $J^T J$ e a direcção de Newton passa a ser dada pela solução do sistema

$$J^T J p = -J^T f, \quad [3.36]$$

ou, sob a forma iterativa,

$$(J(x_K)^T J(x_K)) p_{K+1} = -J(x_K)^T f \quad [3.37]$$

em que x_K é o ponto corrente no processo iterativo.

O vector solução da equação anterior, p_{K+1} , é comumente designado por direcção de Gauss-Newton e constitui uma boa aproximação da direcção de Newton, quando os termos de 2ª ordem são negligenciáveis, o que sempre acontece desde que as diferenças entre os valores experimentais e os valores calculados tendem para zero (em boa verdade, o único caso em que faz sentido tentar um ajuste dos mínimos quadrados).

Verifica-se assim que, num processo de minimização de uma função somatório de mínimos quadrados, dado um ponto de partida situado numa vizinhança restrita do mínimo (a restrição da vizinhança depende das características de "suavidade" e não-linearidade da função), onde a hessiana é definida positiva e $\|f\|$ seja largamente inferior ao maior valor próprio de $J^T J$, garante-se a existência de um processo iterativo [3.37] que converge para o mínimo a uma velocidade quadrática, apesar de apenas serem utilizadas primeiras derivadas no cálculo do vector direcção de Gauss-Newton.

Convergência global

Contudo, fora dessa vizinhança restrita a conversa muda de figura, já que, regra geral, não se pode garantir uma boa aderência da aproximação quadrática à nossa função não-linear. Precisamos, portanto, de encontrar um meio de lá chegar, partindo de um ponto genérico x_0 (o "guess" inicial). Podemos garantir a chegada a tal vizinhança desde que o método seja globalmente convergente mas, para que isso aconteça, é necessário garantir, além da dupla diferencialidade da função, que $F(x)$ decresça a cada iteração, ou seja, que

$$F(x_{k+1}) < F(x_k), \quad [3.38]$$

o que se consegue desde que p_{k+1} , em [3.37], seja sempre uma direcção de descida.

Provemos que a direcção de Gauss-Newton durante a minimização de uma função quadrática é, para todo o $x \in \mathbb{R}^n$, uma direcção de descida. Resolvamos [3.21] em ordem a p_k e projectemos o vector de descida sobre a direcção do gradiente

$$g(x_k) \quad p(x_{k+1}) = -g^T(x_k) H(x_k) g(x_k), \quad [3.39]$$

onde a hesseana é obtida através do produto $J^T J$. Como J é invertível (não-singular) a matriz $J^T J$ é definida positiva (Nash, J. 1979, pp. 17) e o segundo membro de [3.37] é negativo. Então

verifica-se que

$$g(x_k) \cdot p(x_{k+1}) < 0, \quad [3.40]$$

isto é, a projecção da direcção p_{k+1} sobre o gradiente local da função objectivo é negativa (independentemente da distância ao mínimo), logo p_{k+1} é uma direcção de descida local da função objectivo.

Infelizmente não há nunca a garantia de que durante uma iteração qualquer não venha $J^T J$ próxima da singularidade (com condição excessivamente alta), pela existência de instabilidades numéricas intrínsecas ao processo, o que leva, inevitavelmente, ao problema das perturbações na resolução do sistema [3.37], tornando-se a direcção p_{k+1} perfeitamente arbitrária.

Mesmo que este último problema seja ultrapassado e p_{k+1} seja efectivamente uma direcção de descida, isso não basta para assegurar que a sequência $\{x_k\}$ convirja para o mínimo. Primeiro, o passo de iteração pode ser, como no método de Cauchy, tal que o valor da função objectivo decresça cada vez menos a cada iteração, tornando-se o processo agonizantemente lento, ou então, se o passo for excessivamente longo, pode ser ultrapassado o "talvez", subindo-se no valor da função pela "encosta" fronteira acima. Segundo, a sucessão de direcções de descida pode ser de modo a que os valores que $F(x)$ toma descrevam uma linha quase paralela a uma sua "curva de nível" ($F(x)=\text{const}$), com $g(x_k)$ e p_k

quase ortogonais entre si.

Para evitar estas duas situações é necessário que o método que nos vai permitir chegar junto da vizinhança restrita do mínimo exerça um controle eficaz sobre: a condição da aproximação à hessiana, o passo de iteração e a direcção de descida, de modo a que:

- o sistema [3.37] tenha sempre solução bem definida;
- o valor da função objectivo seja "suficientemente diminuído" a cada iteração;
- a direcção de descida se mantenha "razoavelmente" afastada da ortogonalidade ao gradiente.

Para além destas condicionantes é também necessário que o contradomínio de $F(x)$ esteja limitado inferiormente e que a função não se mantenha estritamente decrescente quando $\|x\| \rightarrow \infty$. A primeira condição é sempre verificada por, no limite, o somatório dos mínimos quadrados ser nulo. Quanto à segunda, se o mínimo se encontrar no infinito, então o problema está numericamente mal formulado.

O parâmetro de Marquardt

Estes problemas foram resolvidos com uma elegância espantosa por Marquardt (1963), no seguimento de um anterior trabalho de Levenberg (1944), e aproveitando teoremas enunciados

por Morrison (1960). A essência do método consiste em substituir a matriz aproximadora da hessiana, $J^T J$, por uma outra $J^T J + \sigma I$, com $\sigma \in \mathbb{R}^+$, sendo I a matriz identidade de ordem n .

Deste modo, a equação [3.37] escreve-se-à agora

$$\boxed{p_{k+1} = x_{k+1} - x_k = - (J_k^T J_k + \sigma I)^{-1} J_k^T f_k} \quad [3.41]$$

A p_{k+1} dá-se agora a designação de directão de descida de Marquardt. Note-se que, quando $\sigma \rightarrow 0$, a equação anterior reduz-se à do método de Gauss-Newton,

$$p_{k+1} = (J_k^T J_k)^{-1} J_k^T f_k \quad [3.42]$$

enquanto que, quando $\sigma \rightarrow \infty$, obtemos a equação da descida segundo o gradiente local, ou seja,

$$x_{k+1} - x_k = -\sigma^{-1} g_k = -\sigma^{-1} J_k^T (x_k). \quad [3.43]$$

Dado que, pela sua própria definição, os valores próprios de uma matriz A são as raízes em θ da equação característica

$$A - \theta I = 0, \quad [3.44]$$

constata-se imediatamente que os valores próprios de $J^T J + \sigma I$ são os valores próprios de $J^T J$, adicionados de σ . Então, mesmo que J

seja singular, existe pelo menos um $\sigma \geq 0$ tal que todos os valores próprios de $J^T J + \sigma I$ são positivos, ou seja, é sempre possível obter uma matriz definida positiva. Por outro lado, segundo Fox (1964), uma medida da condição de uma matriz, se ela for simétrica (o que é o caso de $J^T J + \sigma I$) é o quociente entre os seus maior e menor valores próprios e, assim, o real $\underline{\sigma}$ controla a condição da matriz, que será tanto menor quanto maior for $\underline{\sigma}$. Fica assim assegurado o afastamento da direcção local de descida em relação à ortogonal ao gradiente local.

Mas não é pelo facto de a direcção definida por P_{k+1} ser uma direcção de descida que se pode garantir que a função, no novo ponto, tenha um valor inferior ao do ponto de partida. Na verdade, uma função que desce localmente pode, posteriormente, e ao longo da mesma direcção, voltar a subir; um passo tomado segundo uma direcção de descida não conduz obrigatoriamente a um decréscimo da função.

Para esclarecermos este ponto façamos $P_k = \alpha_k v_k$, com $\alpha_k \in \mathbb{R}$ e chamemos-lhe o passo escalar da iteração, sendo v_k o versor da direcção de pesquisa. Reparemos, em primeiro lugar, que α_k nem sequer figura na equação [3.41].

Na verdade, o método de Levenberg-Marquardt toma sempre α_k igual à unidade em cada iteração, como convém aos métodos de Newton para que a convergência junto do mínimo seja quadrática. Mas uma necessidade fundamental de qualquer método de pesquisa é

a de assegurar, através do comprimento do passo, que a função objectivo é suficientemente decrescida a cada iteração. Será que o nosso algoritmo cumpre essa condição?

Notemos, em primeiro lugar, que no caso multivariado não existe apenas um valor de α_k que produza a diminuição do valor da função objectivo, mas sim todo um feixe de valores. A um deles corresponderá o maior decréscimo de $F(x)$: é o passo escalar óptimo. Contudo, a maior diminuição do valor de $F(x)$ que se consegue com este α_k óptimo raramente pagará o esforço suplementar necessário à sua obtenção. Por isso, no cálculo do passo escalar tende-se habitualmente para a utilização de soluções de compromisso que dependem largamente do método de pesquisa utilizado.

Uma das técnicas com mais sucesso consiste em interpretar a pesquisa de α_k como se estivéssemos a tratar de um caso de minimização monovariada. Isto é, tenta-se que o passo escalar que é utilizado provoque a aproximação do ponto seguinte da iteração do mínimo de $F(x)$ tomado ao longo do vector de pesquisa p_{k+1} . Daqui se pode retirar um critério prático que consiste em exigir que o valor da derivada segundo a direcção de p_{k+1} , no novo ponto de iteração $x_k + \alpha_k v_k$, sofra uma redução "suficiente" em relação à mesma derivada direcciona! tomada em x_k :

$$|g(x_k + \alpha_k v_k)^T p_k| \leq \epsilon g_k^T p_k, \quad [3.45]$$

sendo α_k o passo do método segundo a direcção de pesquisa, com $0 \leq \epsilon \leq 1$ (O valor ϵ determina a precisão com que α_k permite obter um ponto estacionário de $F(x)$ ao longo da direcção definida por p_k). Ora o algoritmo de Levenberg-Marquardt funciona interpolando, através do real $\underline{\sigma}$, entre a descida de Cauchy e a descida de Gauss-Newton. Quando a direcção de descida tende para a de Cauchy, estamos num caso em que, na pior das hipóteses, se verifica a igualdade da derivada direcciona, enquanto que no caso do ajuste da quádriga, estamos a progredir para um ponto em que a curvatura da função é menor, o que significa, nada mais nada menos, a diminuição da derivada direcciona. Na verdade, o passo de descida é controlado pelo próprio $\underline{\sigma}$, variando inversamente com este (Marquardt, 1963, pp. 435).

Portanto, o algoritmo de optimização de Levenberg-Marquardt, é, no caso em análise, globalmente convergente, com velocidade de convergência quadrática na vizinhança imediata do mínimo.

4.2 Estratégias na determinação de σ

Põe-se agora o problema da determinação do parâmetro $\underline{\sigma}$. A estratégia de Marquardt consistiu em escolher em cada iteração, valores de $\underline{\sigma}$ que, sem negar as condições enunciadas atrás quanto

ao passo, à direcção de descida e à condição da hesseana, aproximem o vector p_k da descida segundo Gauss-Newton ($\underline{\sigma}$ deve tomar, tanto quanto possível, valores baixos). Os valores do parâmetro são determinados heurísticamente do modo seguinte:

1. o processo parte de um valor arbitrariamente escolhido para $\underline{\sigma}$ e resolve a primeira iteração,

$$x_1 - x_0 = (J_k^T J_k + \sigma I)^{-1} J_k^T f_k; \quad [3.46]$$

2. Se daí não resultar uma diminuição do valor da função objectivo, refaz-se o passo anterior, mas com $\underline{\sigma}$ multiplicado por uma constante g . O passo repete-se até que, através da aproximação do vector de pesquisa à descida de Cauchy, venha a função objectivo diminuída.

3. Quando a iteração é bem sucedida, $\underline{\sigma}$ é dividido por g .

Salta imediatamente aos olhos que, quaisquer tentativas de melhoria do método devem começar, antes de mais nada, pela optimização da determinação do real $\underline{\sigma}$.

Na verdade Fletcher (1971) criticou muito justamente a anterior estratégia de determinação do parâmetro, com base no facto de o seu intervalo de variação não ser limitado, o que significa que, quando $\underline{\sigma}$ se torna muito alto ou muito baixo, o seu regresso a valores mais sensatos só se verifica após uma série de divisões ou multiplicações sucessivas, com as correspondentes e

arrastadas iterações (este senão foi ultrapassado com extrema elegância por Espain, C. (1984) como se verá em (3.5.2)). O próprio Fletcher desenvolveu uma série de modificações de base heurística ao algoritmo original de Marquardt, no sentido de resolver esta dificuldade, das quais resultou um programa que, quer o próprio, quer Nash J. (1977, pág. 177) consideram eficaz. Contudo este último autor informa, embora baseado num conjunto limitado de corridas efectuadas, que o algoritmo de Fletcher tem custos computacionais mais elevados que a sua própria versão do algoritmo de Marquardt.

Marquardt afirma explicitamente que, apesar de $F(x_{k+1})$, tomado como função de $\underline{\sigma}$, possuir pelo menos um mínimo, a escolha desse valor corresponde a uma má estratégia global, dado que o valor de $\underline{\sigma}$ assim obtido é, regra geral, substancialmente mais alto do que o que seria necessário para que se verifique $F(x_{k+1}) < F(x_k)$. Corresponde, portanto, a uma aproximação da descida de Cauchy, o que, segundo os conceitos do autor, é de evitar sempre que possível. Contudo, Smith & Shanno (1971), baseados em extensa argumentação teórica (Shanno (1970)), utilizam precisamente este tipo de estratégia para produzir um valor optimizado do parâmetro. Note-se que nesta implementação permite-se que $\underline{\sigma}$ tome valores negativos, variando dentro do intervalo $[-\mu, \infty[$ (μ é o menor valor próprio de $J^T J$), obtendo-se o mínimo em $\underline{\sigma}$ por simples pesquisa binária combinada com o método da falsa posição. Não

possuimos quaisquer indicações sobre as capacidades deste algoritmo.

Jones (1970) propôs uma alternativa (algoritmo espiral) ao método de Levenberg-Marquardt, baseado no facto de, com início no ponto corrente, o extremo do vector P_k descrever uma espiral à medida que varia $\underline{g}$. O seu método, de concepção perfeitamente experimental, pesquisa diversos pontos situados ao longo de uma a quatro espirais que se desenvolvem entre a direcção de Cauchy e a direcção de Gauss-Newton. Segundo o seu autor, a vantagem principal deste método sobre o de Marquardt, reside no facto de o novo ponto tentativo ser gerado por adição vectorial, em vez de decomposição matricial, com a consequente robustez numérica e poupança de esforço de cálculo. Quer segundo o próprio Jones, quer na opinião de Nash J. (1977), o algoritmo possui excelentes rendimentos.

O caminho por nós seguido foi o de evitar aventuras. Por isso se utilizou um algoritmo suficientemente comprovado. Decidimo-nos pela implementação de Nash, J. na versão de Regueiras escrita em FORTRAN 77 (*in* Leite, M.(1984)), cujas diferenças em relação ao algoritmo original de Marquardt são:

- os factores de incremento e de decremento de $\underline{g}$ são constantes e iguais, respectivamente, a 10 e a 0.4;
- é incluída uma constante aditiva que impede a anulação de $\underline{g}$.

Este algoritmo foi por nós vertido para Pascal USCD
nele sendo introduzidas as seguintes modificações:

- as derivadas parciais que figuram no jacobiano são aproximadas através de diferenciação numérica (ver (3.6.1));
- faz-se um controlo do intervalo de variação do parâmetro σ (ver (5.3)).

5. A decomposição de Choleski

Em cada uma das iterações do método de Levenberg-Marquardt, dadas pela expressão [3.41], para obter p_{k+1} é necessário resolver um sistema de equações lineares do tipo

$$A x \approx p, \quad [3.47]$$

com

$$A = J^T J + \sigma I; \quad [3.48]$$

$$x = p; \quad [3.49]$$

$$b = -J^T f. \quad [3.50]$$

Por isso, precisamos de factorizar a matriz $A = J^T J + \sigma I$, que é simétrica e definida positiva. A rigor, o algoritmo não necessita de se preocupar com o mau condicionamento da matriz $J^T J$ dado que, em caso de dificuldade o sistema de equações não é resolvido e σ é aumentado tantas vezes quantas as necessárias para que a aproximação da hesseana se torne definida positiva. Consequentemente p_k , a direcção de descida local, aproxima-se da descida de Cauchy, a amplitude do passo é diminuída e, finalmente, a condição de $J^T J$ baixa. Contudo, se este modo de proceder garante uma segurança de marcha inexcedível, a sua utilização repetida leva a perdas de tempo perfeitamente escusadas, o que pode ser evitado com um método de decomposição matricial numericamente robusto.

5.1 Descrição do algoritmo

A decomposição de Choleski é, dentre as factorizações ortogonais, a que se nos afigurou mais praticável, isto é, a que, sem descurar um controle eficaz da condição de $J^T J$, requer menor espaço de memória e menor esforço computacional. Por isso, em problemas análogos, tem sido largamente preferida pela generalidade dos autores. Foi esta a factorização por nós utilizada e que passamos a expor.

Sendo A uma matriz simétrica e definida positiva, demonstra-se que (Dahlquist, Björck & Anderson, pág⁵. 162-164, 1974) existe sempre uma única matriz triangular superior, com os elementos da diagonal principal estritamente positivos, tal que

$$A = R^T R, \quad [3.51]$$

o que também pode ser escrito sob a forma

$$A = L L^T. \quad [3.52]$$

sendo L uma matriz triangular inferior, R uma matriz triangular superior.

O algoritmo de Choleski retira-se directamente da equação [3.52]

(Wilkinson, 1965), ou seja,

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} l_{jk} \quad [3.53]$$

com $i, j = 1, 2, \dots, n$. A coluna de ordem j da matriz L é calculada pela seguinte relação:

$$l_{ij} = 1/l_{jj} (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) \quad [3.54]$$

(com $i=1, \dots, n$; $j=i+1, \dots, n$) onde o elemento da diagonal principal foi calculado previamente através da expressão

$$l_{ii} = (a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2)^{1/2} \quad [3.55]$$

Prova-se que expressão [3.55] o segundo membro é sempre positivo (Nash, J. 1979, pág 71), não se formando nunca raízes quadradas de números negativos.

Uma propriedade notável da factorização de Choleski é o facto de o modo como é executada assegurar a estabilidade numérica dos seus resultados. Na realidade, dado que os elementos das matrizes A e L estão ligados pela seguinte relação

$$l_{1k}^2 + l_{2k}^2 + \dots + l_{kk}^2 = a_{kk} \quad (k = 1, \dots, n), \quad [3.56]$$

os elementos da matriz resultante da factorização são limitados *a priori* pelos elementos da diagonal principal da matriz A , o que impede o seu crescimento, ou seja, limita a condição da matriz.

Mal a factorização de Choleski seja executada, o nosso

sistema

$$A x = b, \text{ isto é, } LL^T x = b \quad [3.57]$$

pode ser resolvido através de uma combinação de substituições à esquerda e à direita, ou seja,

$$L v = b, \quad [3.58]$$

seguido por

$$L^T x = v \quad [3.59]$$

Desenvolvendo a notação matricial, obtemos como resolução para [3.58],

$$v_1 = b_1 / l_{11} \quad [3.60]$$

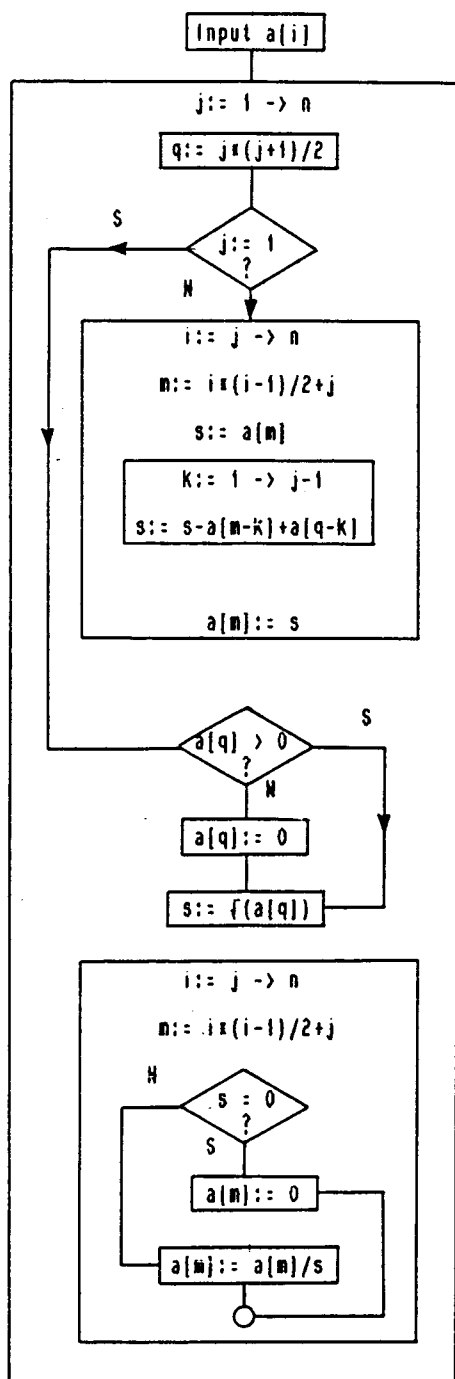
e

$$v_j = (b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} v_k) / l_{jj} \quad [3.61]$$

com $j = 2, 3, \dots, n$. De idêntico modo os elementos de x em [3.59] são obtidos por ordem inversa, ou seja

$$x_n = v_n / l_{nn} \quad [3.62]$$

$$x_j = (v_j - \sum_{k=j+1}^n l_{kj} x_k) / l_{jj} \quad [3.58]$$



Entram os elementos de A (matriz triangular inferior), de modo a que $a[i \times (i-1)/2 + j] = A_{ij}$.

Dá o índice ao elemento da diagonal na linha j.

Se $j=1$, não é necessária a subtração para a 1ª coluna da matriz.

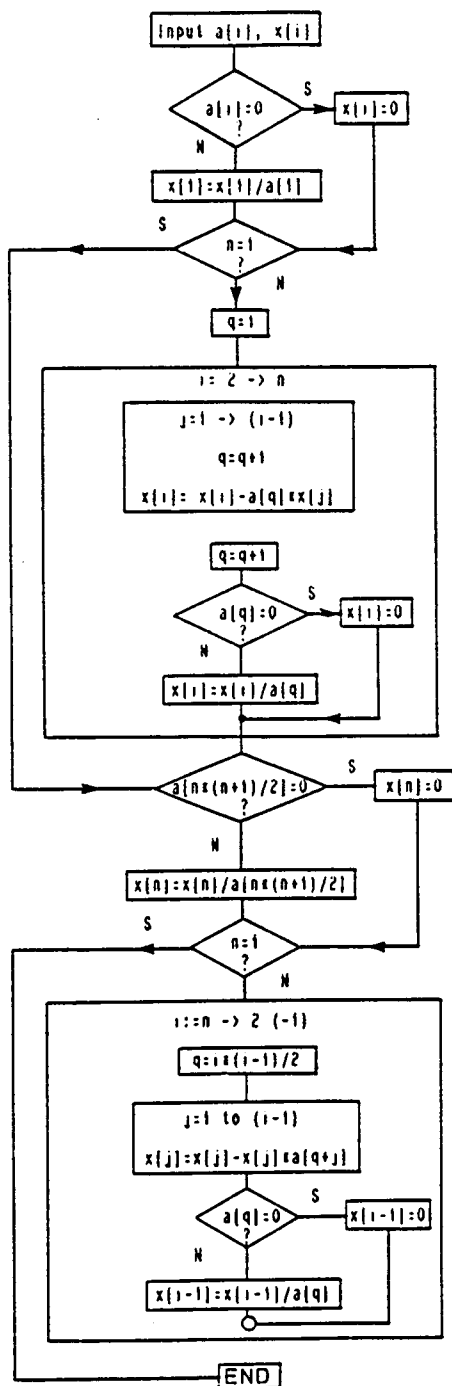
Este ciclo em K calcula o denominador do membro da direita da equação [3.50]

Em caso afirmativo, a matriz é definida positiva.

Supõe-se que a matriz é definida não-negativa.

Em caso afirmativo azeram-se os elementos das colunas: a matriz é singular.

Fig. 3.3: Fluxograma da decomposição de Choleski



Entram: os elementos de $[L]_{ij} = a[i]$, produzidos pela subrotina da Fig. 3.3A e os membros da direita das equações (3.39).

Em caso afirmativo, a matriz é singular.

Se $n=1$, a substituição à esquerda está completa (caso trivial).

Inicializa o índice dos elementos da matriz resultado.

Este ciclo executa a substituição à direita (expressão (3.53)).

Se é verdade, trata-se do caso singular.

Se é verdade, a solução está encontrada: caso trivial.

Inicia-se a substituição à esquerda (expressão (3.54)).
Forma o índice da linha i da matriz solução.

Se é verdadeiro, trata-se do caso singular.

Fig. 3.4: Substituição (à esquerda) de Choleski, para resolução de sistemas de equações lineares

Nas Figs. 3.3 e 3.4 apresentam-se os fluxogramas detalhados, respectivamente, da decomposição de Choleski e da substituição (à esquerda) de Choleski para a resolução de sistemas de equações lineares, com matrizes dos coeficientes simétricas.

5.2 Controlo do parâmetro de Marquardt

As vantagens de compacidade e rapidez do algoritmo de Choleski têm-se vindo a esbater nos últimos anos, com o progresso que se tem verificado nos meios de cálculo, nomeadamente devido ao aumento de velocidade e de memória de que os sistemas de pequeno porte têm beneficiado. Neste momento, embora a contragosto, consideramos que, apesar de a decomposição utilizada ser eficiente e de confiança, teríamos ficado muito mais bem servidos se a nossa escolha inicial tivesse recaído sobre um método que permitisse obter informações mais detalhadas sobre $F(x)$.

Como se sabe, é muito útil a informação adicional sobre o comportamento da função objectivo em volta do mínimo, que só é acessível pelo conhecimento da estrutura da hesseana nesse ponto. Esta última fica perfeitamente determinada através dos seus valores próprios e vectores próprios. Note-se que, no nosso caso, em que a matriz é simétrica, resultam os valores próprios todos

reais e os vectores próprios formam uma base ortonormada no espaço vectorial dos parâmetros.

Este conhecimento permite uma análise séria da sensibilidade da solução encontrada em relação à introdução de perturbações na matriz dos dados. É assim possível avaliar de que modo a estrutura dos dados influencia a configuração dos parâmetros, nomeadamente indicando quais são os mais laxos em relação às medidas experimentais e quais os que mais rigidamente são determinados por elas.

Sabe-se, por exemplo, que, quando a condição da hessiana é unitária, o contorno das "linhas de nível" da função objectivo, em volta do mínimo, é circular, ou seja, não há preponderância de nenhum dos parâmetros. Quando a condição aumenta, a função afasta-se do modelo quadrático puro, apresentando uma anisotropia de comportamento cada vez mais acentuada e as variações no valor da função objectivo passam a depender da direcção em que a perturbação é adicionada. As direcções segundo as quais se produzem as maior e menor modificações são as dos maior e menor vectores próprios da hessiana. Daí a utilidade do seu conhecimento.

Mas, para isso necessitávamos de proceder à decomposição espectral da hessiana, o que envolve um esforço computacional muito extenso ($16/3 \times n^3$ {adições+multiplicações} para uma matriz $n \times n$) que não estávamos, nem em condições, nem na disposição de

executar. Devemos lembrar-nos, contudo, que a maior parcela do esforço de cálculo reside na obtenção do valor da função objectivo (devido à necessidade da integração numérica das equações [2.14] e [2.15]) e, por isso, qualquer processo que leve a uma diminuição do número de iterações constitui sempre um progresso importante no que respeita à eficiência do algoritmo.

Espain C. (1984, pp. 109-119), utilizando uma rotina desenvolvida por Golub e Reinsch (1979), mostrou que, muito embora em cada iteração, a decomposição da hesseana em valores singulares corresponda a um trabalho de cálculo um pouco mais elaborado que aquele de que necessita o algoritmo de Choleski, na prática, corresponde a importantes economias de tempo de cálculo. Na verdade, pelo facto de a hesseana ser simétrica e definida positiva, é possível obter os seus valores próprios através dos valores singulares, sem que para isso seja necessário executar o moroso trabalho da decomposição espectral. Então, através dos valores próprios da hesseana, é possível exercer um controlo eficaz sobre o intervalo de variação do real $\underline{\sigma}$ impedindo, deste modo, iterações improdutivas. Acrescente-se a não menos importante vantagem de se poder partir (Lawson & Hanson, 1974, pp. 199) para a análise das componentes da matriz de dados e do vector de parâmetros, retirando conclusões sobre:

- a influência, na configuração final dos parâmetros, da

introdução de perturbações na matriz dos dados experimentais;

- a importância relativa dos parâmetros no andamento da função objectivo;
- a sensibilidade da solução à introdução de perturbações nos parâmetros.

As conclusões a que Espain chegou, quanto ao parâmetro de Marquardt, são as seguintes:

1. Não há interesse algum em diminuir $\underline{\sigma}$ muito abaixo do menor valor próprio da hessiana, dado que, abaixo desse valor a direcção de descida, que já era a de Gauss-Newton, praticamente não sofre alteração, o mesmo acontecendo quanto ao passo.

2. Quando $\underline{\sigma}$ sobe muito acima do maior dos valores próprios da hessiana, a direcção da solução, que já era a de Cauchy, permanece inalterada, diminuindo apenas o passo.

Deste modo, as críticas de Fletcher (1971) quanto à falta de controle sobre o parâmetro $\underline{\sigma}$, que se referiram em (3.4.2), ficam ultrapassadas.

Muito embora não tenhamos implementado o controlo de $\underline{\sigma}$ proposto por Espain consideramos extremamente útil que, tal como aquele autor se considere como seu domínio de variação do intervalo $[\underline{\mu}_1/10, 100*\underline{\mu}_n]$, em que $\underline{\mu}_1$ e $\underline{\mu}_n$ são, respectivamente, o menor e o maior dos valores próprios da hessiana.

Quanto ao modo de fazer variar o real $\underline{g}$ dentro do seu domínio, adoptou-se a estratégia seguida por Nash (1979, pp.175), que consiste em modificá-lo através do produto por dois factores constantes: 0.4 para o decremento e 10 para o incremento, o que, segundo este último autor, dá bons resultados. Acrescente-se que o valor de arranque de $\underline{g}$, na óptica de Espain (que perfilhamos) deve ser tal que previna os problemas inerentes à escolha de um ponto de partida de má qualidade, ou seja, cautelarmente, é conveniente que o primeiro valor de p_k coincida com o gradiente local. Por isso, ao invés de $\underline{g}$ ser dado como "input", só deve ser obtido após a estimativa dos valores próprios da matriz hesseana em x_0 .

Dado que a nossa preferência, pelas razões atrás indicadas, se dirigiu para a factorização de Choleski, a solução que nos restava era "escorropichar" as suas possibilidades. Embora marginalmente, este método permite obter, com esforço reduzido, uma aproximação de boa qualidade dos maior e menor valores próprios da hesseana e, através deles, da condição desta última (Gill, Murray & Wright, 1981, pp. 321-322).

Em primeiro lugar, em vez da factorização de Choleski dada pela expressão [3.52], utilizemos uma sua variante do tipo

$$A = L' D L'^T, \quad [3.64]$$

com L' matriz triangular inferior e D , matriz diagonal de elemen-

tos estritamente positivos. Sendo s e r os índices do maior e do menor dos valores da diagonal de D , um minorante da condição da hesseana pode ser obtido através da expressão

$$\min \{ \text{Cond } H \} = \frac{d_s}{d_r}, \quad [3.65]$$

e, o que é mais importante ainda, este valor constitui uma boa estimativa da condição de H , no sentido em que é da mesma ordem de grandeza que a condição da hesseana. Mas, com um pouco mais de trabalho computacional, é possível obter informação adicional. Sejam os vectores

$$\Omega_r = (L^T)^{-1} v_r \quad \text{e} \quad \Omega_s = L v_s \quad [3.66]$$

sendo v_r e v_s as colunas de ordem r e s (são vectores unitários) da matriz unitária de grau igual ao da hesseana. Pode-se demonstrar que (Gill, Murray & Wright (1984) e Cline *et al* (1979))

$$\mu_n \leq \frac{d_r}{\|\Omega_r\|_2} \quad \text{e} \quad \|\Omega_s\|_2 d_s \leq \mu_1 \quad [3.67]$$

em que μ_1 e μ_n são, respectivamente, o menor e o maior valores próprios da hesseana. Consequentemente,

$$\text{Cond } H \approx \frac{\mu_1}{\mu_n} \geq \frac{\|\Omega_r\|_2 \|\Omega_s\|_2 d_s}{d_r} \quad [3.68]$$

Note-se que embora estejamos a obter uma estima da

ordem de grandeza dos valores próprios, contudo ela é suficiente para proceder ao controlo de $\underline{g}$, mantendo-o dentro do intervalo $[\mu_1/10, 100 \times \mu_n]$. Ao mesmo tempo é possível exercer um controlo constante sobre a condição da hessiana que, como veremos, influencia decisivamente o comportamento de $F(x)$ em torno do mínimo e, consequentemente, a precisão do ponto de mínimo encontrado.

6. Cálculo das derivadas

O sistema de equações nos parâmetros [3.41], que produz o vector de descida segundo Levenberg-Marquardt, pressupõe a formação dos dois produtos matriciais $J^T J$ e $J^T f$. As características da função objectivo, nomeadamente o facto de ser não-linear nos parâmetros, impedem o seu cálculo através da determinação analítica do gradiente de $F(x)$. Por isso, seguiu-se a estratégia habitual em casos semelhantes, de o aproximar através da diferença finita de primeira ordem à direita

$$g_j(x_k) = 1/h_j \{F(x_k + h_j e_j) - F(x_k)\}, \quad [3.68]$$

sendo h_j , o intervalo das diferenças finitas associado à componente de ordem j de x e e_j , o versor da direcção relativa à mesma componente. O intervalo das diferenças finitas foi calculado pela expressão

$$h_j = |x_j| * \epsilon + \epsilon, \quad [3.69]$$

(com $\epsilon = 10^{-3}$), o que leva a que o incremento nunca se anule e seja sempre proporcional à dimensão de cada parâmetro. Esta prática, que se torna simpática pela sua simplicidade e por recorrer apenas a um cálculo adicional da função objectivo para cada componente do vector gradiente, produz, em geral, resultados de precisão satisfatória.

Contudo, por trás desta simplicidade enganosa fica por resolver o problema de garantir precisão suficiente a um método de pesquisa que vive fundamentalmente da informação produzida pelas derivadas. Lembremo-nos que, se o cálculo do gradiente fôr muito impreciso, não podemos garantir a obtusidade do ângulo que ele forma com o vector de Levenberg-Marquardt e então, adeus direcção de descida (ver 3.4.1.). Ainda, como o gradiente se desvanece junto do mínimo, se a curvatura da superfície de $F(x)$ fôr muito tênue ao longo da direcção de pesquisa o uso sem cuidados de precisão da fórmula das diferenças finitas pode levar à produção de um ponto de paragem errático.

Vejamos quais são os problemas que afectam a nossa derivação numérica e o tratamento que eles exigem.

6.1 Erro de cancelamento e erro de truncatura

O cálculo das derivadas é afectado por dois erros principais (isto menosprezando os erros de arredondamento causados pela imprecisão da máquina com que se trabalha): o erro de truncatura e o erro de cancelamento. O primeiro deve-se ao facto de, no cálculo das derivadas, ignorarmos os termos do desenvolvimento de Taylor de ordem superior à primeira, isto é,

$$\{F(x_k + h_j e_j) - F(x_k)\} / h_j - g(x_k)^T e_j = R(h_j) \quad [3.70]$$

em que $R(h_j)$ é o resíduo da truncatura, que depende de h_j e que cresce com a amplitude do intervalo. Pelo contrário, o erro de cancelamento, que é provocado pela precisão finita dos nossos cálculos numéricos, é inversamente proporcional à amplitude do intervalo das diferenças finitas, como iremos ver de seguida.

Na verdade, quando a diferença entre os dois valores sucessivos da função que são utilizados no cálculo de [3.68] se torna excessivamente pequena, o erro de cancelamento pode aumentar tanto que invalide completamente o resultado obtido. Consideremos duas avaliações sucessivas da função objectivo, $F(x_k)$ e $F(x_{k+1})$ cujas representações em vírgula flutuante tomam a forma

$$f_k = F(x_k)(1+\epsilon_k) \quad [3.71]$$

e

$$f_{k+1} = F(x_{k+1})(1+\epsilon_{k+1}), \quad [3.72]$$

sendo ϵ_k e ϵ_{k+1} valores majorados pela precisão relativa do computador. O cálculo da diferença exacta entre os dois valores da função, pode ser escrito sob a forma

$$\begin{aligned} \Delta f = f_1 - f_2 &= F(x_k)(1+\epsilon_k) - F(x_k + h_j e_j)(1+\epsilon_{k+1}) = \\ &= F(x_k) - F(x_k + h_j e_j)(1+\theta) \end{aligned} \quad [3.73]$$

de modo a que θ represente o erro relativo de Δf em relação ao seu valor exacto. O erro relativo da diferença, pode ser majorado do seguinte modo. Dado que

$$|\theta| = \frac{|\epsilon_k F(x_k) - \epsilon_{k+1} F(x_k + h_j e_j)|}{|F(x_k) - F(x_k + h_j e_j)|} \quad [3.74]$$

então,

$$|\theta| \leq \epsilon_M \left[1 + 2 \frac{|F(x_k)|}{|F(x_k + h_j e_j) - F(x_k)|} \right], \quad [3.75]$$

sendo ϵ_M a precisão relativa da máquina com que estamos a trabalhar.

Em [3.75] vê-se facilmente que o erro relativo que é introduzido no cálculo do gradiente através de uma diferença finita de primeira ordem, à esquerda ou à direita, quando os valores da função objectivo já diferem muito pouco entre si, não consegue ser da mesma ordem que a precisão relativa da máquina, crescendo muito rapidamente à medida que o pendor local da função se desvanece, ou que a imprecisão do cálculo aumenta: ou seja, aumenta com a diminuição do intervalo das diferenças finitas, enquanto que o erro de truncatura é directamente proporcional a este último.

Resumindo, dado que os dois erros variam em sentidos contrários, interessar-nos-ia, em princípio, saber qual é o intervalo das diferenças finitas, h , que minimiza a sua soma.

Ora, se utilizarmos a fórmula das diferenças finitas à esquerda (ou à direita) o erro total é majorado pela expressão

$$\frac{1}{2} \|H(\xi)\| h + 2 \epsilon_A \frac{1}{h_j}, \quad [3.76]$$

onde, a primeira parcela corresponde o erro de truncatura, a segunda o erro de cancelamento, e em que H é a hessiana, h o intervalo das diferenças finitas, $\xi \in [x, x+he_j]$ e ϵ_A é um majorante do erro computacional no cálculo de $F(x)$.

Verifica-se que o valor que minimiza a expressão [[3.76] é dado por (Lyness, J. N. (1971)).

$$h_m = 2 \sqrt{\epsilon_A / \|H(\xi)\|}. \quad [3.77]$$

Contudo, como não conhecemos ξ , nem podemos saber *a priori* valor da Hesseana, é-nos impossível calcular h_m . Desde que $F(x)$ não se anule (o que quase sempre se cumpre), e que $\|F(x)\|$ e $\|H(x)\|$ sejam da mesma ordem, se exprimirmos ϵ_A sob a forma de erro relativo, $\epsilon_R = \epsilon_A |F(x)|$, podemos escrever

$$h_m = \sqrt{\epsilon_R}. \quad [3.78]$$

Através de raciocínio análogo verifica-se que, no caso das diferenças finitas centrais, o h ótimo, mantendo as condições enunciadas acima, é dado por

$$h_m = \sqrt[3]{\epsilon_R}, \quad [3.79]$$

sendo ϵ_R a precisão relativa no cálculo de $F(x)$.

Por aqui já se pode ver que no nosso caso temos que nos defrontar com um problema adicional devido ao facto de a função objectivo ser calculada pela integração numérica de um sistema de equações diferenciais: a exactidão da integração vai ditar a precisão do cálculo das derivadas.

Foi o que nos aconteceu quando, numa primeira fase, lançámos corridas em precisão simples num computador Stride 460. Verificou-se que, para vários ajustes sucessivos de uma mesma matriz de resultados experimentais, que diferiam entre si apenas no "guess" inicial, muito embora as sucessões $\{F(x)\}$ convergissem para o mesmo valor, o mesmo se não passava com as sucessões $\{x\}$. Poder-se-ia argumentar que, se o algoritmo conseguiu encontrar uma zona de insensibilidade à variação do valor da função, então encontrou um mínimo e, por isso, preocupações adicionais quanto à precisão do ponto de paragem são preciosismos. Trata-se de um erro. Na verdade, em tais condições a tarefa de recuperação dos parâmetros, de uma corrida para a seguinte, fica seriamente prejudicada e a possibilidade de comparação dos resultados de duas corridas torna-se impossível; é um caso nítido de abortamento do algoritmo de pesquisa, como aliás, se referirá em (3.9.2).

Na nossa interpretação, o problema devia-se ao facto de o mínimo se situar numa zona achatada de razoáveis dimensões, o que acarretava problemas de precisão no cálculo do gradiente o que, em consequência, levava o algoritmo a errar o ponto final da

corrida. Na altura, este problema foi expedita e facilmente eliminado pelo recurso à dupla precisão. Contudo, um tal modo de actuação não é defensável, se se tornar numa regra habitual, dado o enorme aumento de esforço computacional que envolve. No nosso caso verificou-se que o tempo de cálculo, para cada ajuste, aumentou de quatro a cinco vezes.

A simples utilização de intervalos de diferenças finitas reduzidos, para diminuir o erro de truncatura da derivação numérica, evitando, ao mesmo tempo, o aumento do erro de cancelamento, pelo recurso à dupla precisão, pode não ser um método eficaz de ataque do problema por a precisão no cálculo de $F(x)$ depender, antes de mais nada, dos erros de truncatura causados pelo método de integração numérica. Por isso não vale a pena definir com todo o desvelo o h ótimo quando o problema já vem de trás, isto é, da aplicação de um método desajustado de integração numérica e/ou sem controlo do erro (ver 3.10.2.).

6.2 Cálculo das derivadas junto do mínimo

Mesmo que utilizemos o intervalo das diferenças finitas mais bem ajustado que se possa conceber, quando nos encontramos na vizinhança do mínimo, ou de um qualquer outro ponto singular onde o gradiente se desvanece e as diferenças entre dois valores

consecutivos da função objectivo são tão pequenas que já estão dentro da gama da precisão da máquina com que estamos a trabalhar, os resultados deixam de merecer confiança, crescendo muito rapidamente o erro com a diminuição do pendor local da função.

Em tais circunstâncias é então preferível utilizar a fórmula das diferenças centrais de primeira ordem, ou seja,

$$g_j(x_k) = 1/(2h_j) \{F(x_k + h_j e_j) - F(x_k - h_j e_j)\} \quad [3.80]$$

que tem associado um erro de truncatura proporcional a h_j^2 , mantendo-se o erro de cancelamento proporcional a h_j^{-1} . Deste modo, para diminuir o erro de cancelamento, mantendo o erro de truncatura dentro de limites aceitáveis, basta, quando se passa para a aproximação do tipo central, aumentar a amplitude do intervalo das diferenças finitas, utilizando a expressão [3.79].

O método que propomos é precisamente esse: mudar das diferenças finitas no limite do intervalo para as diferenças finitas centrais, aumentando o valor de h , quando uma das componentes do gradiente se tornar excessivamente pequena. Dado que o erro relativo de cancelamento, $\underline{\theta}$, é majorado pela expressão [3.75], para que ele venha dentro da ordem de grandeza da precisão relativa da máquina, é suficiente que se verifique a seguinte condição

$$|F(x_k) - F(x_k + h_j e_j)| \geq 2 |F(x_k)|, \quad [3.81]$$

que passa a constituir o nosso critério de mudança para a fórmula [3.80].

Como se pode ver, a aproximação da derivada através da fórmula das diferenças centrais requer, para cada componente do vector gradiente, dois cálculos sucessivos da função objectivo. Por isso, sempre que a fórmula das diferenças finitas à direita forneça valores de confiança, deve ser mantida, só se mudando quando isso se justifique. Por isso, caso se verifique a condição

$$F(x_k + h_j e_j) - F(x_k) \approx 1/2 \{F(x_k + h_j e_j) - F(x_k - h_j e_j)\}, \quad [3.82]$$

retornaremos então às diferenças finitas à direita.

7. O escalamento em R^n

É frequente que os parâmetros tomem valores díspares que influenciam de modo diverso, por terem pesos diferentes, a estrutura dos resíduos. Para o bom funcionamento numérico do algoritmo de optimização é importante que os remetamos a comportamentos mais uniformes. Daí a necessidade do escalamento.

7.1 Escalamento nas derivadas

A deficiência de escalamento que mais problemas costuma causar é a que corresponde ao desequilíbrio entre as variações da função objectivo e as correspondentes mudanças em x_k . Isto acontece quando o gradiente toma valores extremos, ou muito baixos ou muito altos, ao longo da direcção de descida produzida pela equação [3.41]. Em ambos os casos podem ocorrer erros numéricos que levam o algoritmo a perder completamente o norte.

Madureira (comunicação pessoal) ao efectuar, em R^2 , uma corrida experimental de uma pesquisa de Marquardt, verificou que x_k descrevia espirais que cruzavam a anterior trajectória da pesquisa e que, para cúmulo, quando chegavam ao ponto de intersecção não retomavam o caminho anterior, mas antes seguiam uma trajectória completamente diferente. Esta anomalia de comporta-

mento, provavelmente devida a problemas de precisão no cálculo das derivadas, foi eliminada por um escalamento de R^2 em função do valor do gradiente local. Mais concretamente, este autor escalou R^2 de modo a que, em cada iteração, as componentes do gradiente no ponto corrente da iteração tivessem todos o valor unitário.

Este escalamento de base heurística, muito embora útil, não possui os fundamentos, nem cobre a gama de efeitos de um outro proposto pelo próprio Marquardt (1963). Dado que as propriedades relevantes do vector de descida de Marquardt na equação [3.41] são invariantes em relação às transformações lineares operadas sobre o espaço n -dimensional em que se move a pesquisa, este autor propôs que o espaço n -dimensional fosse escalado, utilizando como factor da escala, variável de iteração para iteração, os desvios-padrão das derivadas dos resíduos em ordem aos parâmetros, $\partial f_i / \partial x_i$. Este procedimento faz com que a matriz hessiana seja muito simplesmente transformada na matriz dos coeficientes de correlação entre os valores de $\partial f_i / \partial x_i$, o que uniformiza os valores da derivada e do gradiente de $F(x)$.

Esta estratégia corresponde a definir uma matriz H' e um vector g' que estão ligados à aproximação à hessiana produzida por $J^T J$ e à aproximação ao gradiente, $J^T f$, através de uma transformação linear efectuada sobre R^n , cujos coeficientes são constituídos pelos elementos (estritamente positivos) de uma

matriz diagonal D , ou seja:

$$H' = D(J^T J)D + \sigma I \quad [3.83]$$

e

$$g' = D J^T f, \quad [3.84]$$

sendo $D_{ii} = 1/(h_{ii})^{1/2}$ (h_{ii} - elemento da diagonal principal da hesseana), o que faz com que os elementos do vector de Marquardt venham também escalados:

$$p'_{ki} = p_{ki} / (h_{jj})^{1/2}. \quad [3.85]$$

Passaria então a ser a seguinte a equação de Levenberg-Marquardt:

$$H' \cdot p_k = -g', \quad [3.86]$$

com H' e g' dados, respectivamente, por [3.29] e [3.25]. Note-se também que uma condição muito alta da hesseana corresponde, na prática, a um defeito de escalamento, dado que a função objectivo varia muito mais rapidamente ao longo de certas direcções preferenciais. Em casos limite, quando um dos valores próprios da hesseana se aproxima de zero, a variação de $F(x)$ ao longo do correspondente vector próprio pode ser tão lenta que modificações que significativas se perderão no meio dos erros de arredondamento.

Através do escalamento proposto por Marquardt é possível melhorar este comportamento se a matriz D puder produzir uma

hesseana transformada H' com uma condição baixa, o que acontece se os coeficientes de correlação entre as derivadas dos resíduos em ordem aos parâmetros não se afastarem muito da unidade. Ora isto é o mesmo que dizer que não existe preponderância do efeito exercido por nenhum dos parâmetros sobre o vector dos resíduos. Dizendo de outro modo: esta transformação permite um excelente condicionamento da hesseana no caso de o modelo ter sido bem formulado (já estar, por si próprio, bem condicionado). Apesar da ironia, podemos dizer que o escalamento da matriz diagonal D permite uma homogeneização do comportamento dos parâmetros, mesmo quando se trate de um problema de tratamento numérico difícil.

7.2 Escalamento dos parâmetros

Com um bom condicionamento da hesseana, modificações de idêntico valor nos parâmetros produzirão, em geral, variações semelhantes na função objectivo. Contudo, se as variáveis diferirem entre si de várias ordens de grandeza, surgem problemas de definição no cálculo de p_k . Uma pequena, mas significativa, modificação num parâmetro de baixo valor médio, pode ficar completamente abafada no meio do ruído numérico, quando compete com um enorme aumento, em valor absoluto (eventualmente com pouco significado), de um outro parâmetro. Por isso, um dos propósitos

do escalamento deve ser o de manter as variáveis dentro da mesma gama de valores.

Não é isso que acontece com as transformações de variáveis que utilizamos para transformar o nosso problema original num caso de pesquisa de mínimo sem restrições. Atentemos em [3.121] que transforma o intervalo natural de variação das probabilidades, $[0, 1]$, em $]-\infty, +\infty[$ quando se passa para dentro da rotina de Levenberg-Marquardt. Se, por exemplo, o parâmetro Plso encostar à unidade, o que acontece no caso de partículas finas que se encontram sobre peneiros de malha larga, dentro do algoritmo de pesquisa, o seu valor transformado rondará o limite de "overflow" (10^{37} em Turbo Pascal a correr num 16 bits); ao mesmo tempo o parâmetro multiplicativo VCr, não tomará, em geral, valores superiores a 50.

Este é o principal vício que se deve apontar às transformações de variáveis por nós utilizadas para "simplificar" o problema. Acrescente-se ainda que, em princípio, podem ocorrer erros no cálculo das derivadas do Jacobiano por se ter permitido que os parâmetros variassem no intervalo $]-\infty, +\infty[$.

Assim, o conjunto de medidas que propomos para tratar este caso e outros que se lhe assemelhem é o seguinte:

1. Caso as diferenças nos intervalos de variação dos parâmetros sejam muito acentuadas utilizar, antes da entrada no

Levenberg-Marquardt, uma subrotina de escalamento que lhes uniformize os domínios, coadjuvada por uma outra que contém as funções inversas e que restitui os intervalos naturais de variação de x_i .

Uma hipótese seria a de utilizar uma transformação do tipo

$$x'_i = \frac{2 x_i}{l_{s_i} - l_{i_i}} - \frac{l_{i_i} + l_{s_i}}{l_{s_i} - l_{i_i}} \quad [3.87]$$

em que l_{i_i} e l_{s_i} são os limites de variação (supostos razoáveis e realistas) que impomos aos parâmetros naturais x_i . Notemos que, se tomarmos a transformação [3.87] sob a forma matricial

$$x' = D x + c \quad [3.88]$$

podemos escrever

$$g' = D g \quad [3.89]$$

e

$$H' = D H D, \quad [3.90]$$

o que corresponde a um escalamento do gradiente e da hessiana, que pode preparar excelentemente o caminho ao escalamento.

2. Escalar internamente as derivadas parciais de $F(x)$ segundo o esquema proposto por Marquardt.

3. Não transformar o problema num caso de optimização sem restrições.

8. As restrições nos parâmetros

No processo de construção de modelos descritores os parâmetros que surgem preconcebem-se com significados bastante precisos (mal seria se assim não acontecesse!). Posteriormente, para que o ajuste melhore, acrescenta-se um parâmetro aqui, reajusta-se um outro acolá, o que até pode tornar momentaneamente o seu sentido um pouco enigmático. Mas mantém-se inviolável o princípio de associar a cada um deles um certo significado bem definido, afinal o único meio de conferir legibilidade às experiências exploratórias feitas sobre o modelo.

No caso de descritores de fenômenos físicos, os parâmetros têm também forçosamente que ter significado físico e, por isso, é muito frequente que lhes estejam vedados certos valores reais, o que implica como domínio para x apenas uma restrição de R^n . Ora, como se retira da análise feita em (3.4.1), o método de Levenberg-Marquardt, aplicado directamente, pesquisa a solução em todo espaço n -dimensional o que o leva muitas vezes a encontrar o mínimo numa zona inaceitável de R^n . Por isso, temos que arranjar um processo qualquer de lidar com as restrições, sob pena de a solução encontrada não possuir senão significado matemático, mas não significado físico.

8.1 Subrotina Saturação

Vamos em primeiro lugar determinar quais são as restrições em jogo. Como se sabe, o modelo de tamisagem é construído à volta de quatro tipos de parâmetros, a saber:

- uma "velocidade" de tamisagem (V_{Cr});
- uma "área útil" de tamisagem (Sat);
- uma probabilidade de passagem do isocrivo (P_{Iso});
- uma fração de isocrivo ($F_{Iso}[l]$, $l=2, 3, \dots, n_l$).

Os três primeiros parâmetros são comuns a todos os peneiros e a todos os lotes presentes na operação, enquanto que os n_c ($n_c = n_l - 1$) parâmetros do último tipo podem tomar diferentes valores, consoante o lote granulométrico a que pertencem.

Em primeiro lugar, e decorrendo do seu próprio significado, os parâmetros estão sujeitos a limites, isto é:

$$0 \leq V_{Cr} \quad [3.91]$$

$$0 \leq P_{Iso} \leq 1 \quad [3.92]$$

$$0 \leq F_{Iso}(l) \leq 1 \quad (l=1, 2, \dots, n_l). \quad [3.93]$$

Numa primeira fase, o parâmetro Sat foi limitado superiormente, passando a cumprir a condição

$$0 \leq Sat \leq S_{max}, \quad [3.94]$$

em que S_{max} , a área máxima dos peneiros, era introduzida no

programa como "input" (veja-se 2.6.2).

Mas é também necessário assegurar que a probabilidade de passagem de uma qualquer partícula, numa qualquer malha de tamisagem, em cada intervalo de tempo dt da integração numérica (é a nossa menor unidade de tempo), seja sempre não negativa e inferior à unidade. Considerando um estágio inicial, quando ainda existe saturação da área útil de peneiração, (existe competição entre as partículas) a probabilidade instantânea de passagem ao infra-crivo é dada pela expressão [2.5], isto é: é a probabilidade de passagem da partícula sem que no seu trajecto se dê qualquer interacção com as suas semelhantes, condicionada à probabilidade de contacto com a malha de tamisagem.

De [2.5], [2.10], [2.11] retira-se que a probabilidade de passagem das partículas do lote $\underline{l}$ que se encontram sobre o peneiro $\underline{k}$ em cada intervalo de tempo da integração numérica será dado por

$$P_{\text{pass.}} \times dt = VCr \times \frac{Sat}{\sum_{l=k}^{nl} a_l n_{p_l}} \text{ prob}(k, l) \times dt, \quad [3.95]$$

sendo:

k - o nº de ordem do tamis considerado;

a_l - área da secção recta da partícula pertencente ao lote $\underline{l}$;

$n_{p_{kl}}$ - nº de partículas do lote $\underline{l}$ que estão sobre o tamis $\underline{k}$,

VCr - "velocidade de tamisagem";

Sat - área útil de tamisagem;

prob(K,l) - a probabilidade de passagem *a posteriori* da partícula do lote l no peneiro K.

Este resultado deve obedecer à condição

$$0 \leq P_{\text{pass.}} * dt \leq 1. \quad [3.96]$$

Esta desigualdade levou à introdução, no algoritmo de simulação de tamisagem, da subrotina Saturação que, permitindo uma variação livre dos parâmetros VCr e Sat, qualquer que seja dt, permite o cumprimento da condição [3.96]. Sob o ponto de vista físico, a subrotina corresponde à afirmação: Se o cálculo da probabilidade de passagem de um tipo determinado de partículas dá um valor superior à unidade, então isso significa que a passagem ao peneiro inferior de todo o lote a que essa partícula pertence precisa de menos tempo do que o que é representado pelo intervalo temporal de integração; tudo se passa, portanto, como se todo o lote passasse exactamente em dt.

Esta estratégia pragmática corresponde a uma heterodoxia: a introdução de uma restrição composta dos parâmetros no coração do próprio modelo. Daí advêm alguns problemas, nomeadamente, a perda de tempo causada pela obrigação de passar por um conjunto de instruções (com um IF) em cada passo de integração numérica. Para ultrapassar esta situação, procurou determinar-se

a constrição de modo a que o controlo sobre os parâmetros pudesse ser feito fora do modelo.

8.2. Problema do intervalo temporal

Um majorante de $P_{\text{pass}} \times dt$ corresponde ao valor da probabilidade que é obtido para a partícula mais fina, quando está sobre o peneiro de menor luz e este está o mais descarregado possível, ou seja,

$$\text{Max}\{P_{\text{pass}} \times dt\} \leq VCr \times \frac{\text{Sat}}{a_k n p_k} \text{prob}(1, n1) \times dt \quad [3.97]$$

com:

$k=1$ - o nº de ordem do primeiro peneiro,

$n1$ - o nº de ordem do último infracrivo;

VCr - a constante de proporcionalidade relativa à probabilidade de contacto;

$\text{prob}(1, n1)$ - a probabilidade de passagem *a posteriori* no primeiro tamis, de uma partícula pertencente ao lote mais fino.

Se tomarmos

$$K = \frac{1}{a_1 n p_1} \text{prob}(1, n1), \quad [3.98]$$

que é constante para uma dada alimentação, para um dado conjunto de peneiros e para um dado incremento de tempo, a composição das expressões [3.96] e [3.97] reduz-se a:

$$0 \leq K V_{Cr} \text{ Sat } dt \leq 1 \quad [3.99]$$

O limite à esquerda é, como se verifica facilmente, sempre verdadeiro. Quanto ao limite à direita, vê-se que a tamisagem será tanto mais rápida quanto maior for V_{Cr} , o qual, pelo seu lado, pode crescer apenas na medida em que dt (o intervalo de integração) o permita. Chega-se assim à situação curiosa de uma variável só com carácter numérico, dt , condicionar a solução do problema de minimização. Se assim é, o intervalo de integração numérica deve ser considerado como um parâmetro.

Note-se que dt possui duas limitações:

- não deve ser excessivamente alto, sob pena de se perder a precisão na integração numérica, por aumento do erro de truncatura;
- não deve ser demasiado pequeno, senão a integração torna-se agonizantemente lenta e podem ser introduzidos, a partir de certa altura, elevados erros de cancelamento (ver 3.10.2).

Resumindo, a constrição composta que pode actuar sobre os parâmetros é a seguinte:

$$a) \quad 0 \leq K V_{Cr} \text{ Sat } dt \leq 1 \quad [3.100]$$

$$b) K = \frac{1}{a_1 n p_1} \text{ prob}(1, n1) \quad [3.101]$$

$$c) l_0 \leq dt \leq u_0, \quad [3.102]$$

em que l_0 e u_0 são determinados com base em considerações de eficiência e precisão do algoritmo de integração numérica.

Como não é muito plausível a presença de partículas tão finas quanto as do lote $n1$ quando o peneiro está descarregado, numa segunda fase poder-se-á diminuir ao valor de K , aumentando, em consequência, as possibilidades de variação conjunta de VCr , dt e Sat . Se assim se proceder, deve manter-se a subrotina Saturação, mas funcionando apenas como válvula de segurança, isto é, caso se não verifique [3.96], a corrida aborta.

O facto de uma variável numérica afectar os resultados do ajuste constitui uma anomalia preocupante porque, à primeira vista, parece que dela vai depender não só o valor da função objectivo, como a própria posição do mínimo. Mas, se pensarmos bem, vemos que a interferência de dt é inócua em dois sentidos diferentes: por um lado, qualquer que seja o seu valor, e mantendo constante a configuração dos restantes parâmetros, as quantidades que passam por unidade de tempo são sempre as mesmas; por outro lado, dt afecta sempre de igual modo todos os parâmetros. Então por que é que o dt aparece vestido com atributos que lhe não pertencem?

O problema reside no facto de a introdução de um Δt corresponder a discretizar muito grosseiramente (tão grosseiramente quanto maior o intervalo de tempo) eventos que, na realidade, se sucedem num fluxo contínuo no tempo: mais uma vez aparece a oposição dialéctica entre a realidade contínua e as dificuldades da sua descrição.

Desde o princípio o modelo foi concebido como previsor da peneiração para tempos muito longos, sem nos preocuparmos em obter resultados credíveis para tempos à escala do Δt . Não nos parece ser possível, no nosso estado actual de conhecimentos, obter um descriptor razoavelmente preciso para duas escalas de tempo que, apesar de complementares, são tão distintas: a da tamisagem exaustiva e a da passagem da partícula. Como ficou dito em (1.3.1), no nosso método de abordagem dos sistemas particulados temos que privilegiar larguíssimamente a descrição fenomenológica, em detrimento da descrição atomística. O que pretendemos obter é um modelo que consiga interpretar coerentemente os resultados da tamisagem; nunca foi nosso objectivo mergulhar na descrição, a pequena escala, dos fenómenos extremamente complexos que a compõem. Contudo, quanto mais não seja sob o ponto de vista formal, existe uma dificuldade que é necessário tentar resolver.

Pode agora o leitor aperceber-se do modo como uma exigência da rotina da integração numérica, isto é, a utilização de um incremento constante da variável independente (o tempo),

traz problemas de difícil solução quando se pretende simular eventos (a passagem das partículas) de ocorrência aleatória.

Se atacarmos o problema por uma via ligeiramente diferente verificamos que as nossas preocupações com o papel do $\underline{dt}$, embora legítimas, felizmente eram infundadas. Senão vejamos.

Lembrando-nos de [3.95], podemos escrever

$$P_{dt} = \int_0^{\underline{dt}} \frac{VCr}{Nc} dt = \frac{VCr}{Nc} \underline{dt}, \quad [3.103]$$

sendo P_{dt} a probabilidade de contacto de uma partícula durante o intervalo $\underline{dt}$. Para que a partícula passe é necessário que, pelo menos uma vez, entre em contacto com a malha do tamis. Aplicando à probabilidade de contacto, no intervalo temporal $\underline{dt}$, a lei binomial, retira-se que

$$\begin{aligned} P(\text{cont.} \geq 1) &= 1 - P(\text{cont.} \geq 0) = 1 - \binom{n}{0} p^0 q^{n-0} \\ &= 1 - (1-p)^n, \end{aligned} \quad [3.104]$$

A probabilidade de sucesso, evidentemente, é a probabilidade de um contacto da partícula com a malha do peneiro, ou seja,

$$p = \frac{VCr}{Nc} \quad [3.105]$$

Iguaiando o segundo membro de [3.104] ao 2º membro de

[3.105] multiplicado por $\underline{dt}$, obtém-se

$$\frac{V_{Cr}}{N_c} dt = 1 - (1-p)^n, \quad [3.106]$$

ou seja,

$$p dt = 1 - (1-p)^n, \quad [3.107]$$

em que p é dado por [3.105]. Por isso, o nº de vezes que a partícula tenta entrar em contacto com a malha de tamisagem em cada $\underline{dt}$ é dado por

$$n = \frac{\lg(1-pdt)}{\lg(1-p)} \quad [3.108]$$

que deve obedecer à condição

$$p dt \leq 1, \quad [3.109]$$

Pelo facto de p ser uma probabilidade e tomando o caso mais desfavorável ($p=1$), então, para que [3.108] se mantenha sempre possível, é necessário que se cumpra a condição

$$dt \in]0, 1]. \quad [3.110]$$

Substituindo agora o valor de n em [3.104], fica

$$P_{dt}(\text{cont} \geq 1) = 1 - (1-p)^{\frac{\lg(1-pdt)/\lg(1-p)}{p dt}} \quad [3.113]$$

que, por sua vez pode ocupar o seu lugar, obtendo-se finalmente

$$P_{dt} = \frac{\lg(1-pdt)/\lg(1-p)}{\{1-(1-p)\} \text{prob}(k,l)} \quad [3.117]$$

com: $p = VCr/Nc$ [3.118]

$$Nc = \frac{\sum_{l=k}^{n1} a_l np_l}{Sat} \quad [3.119]$$

e as condições iniciais [3.110] e [3.111], sendo:

- Sat e VCr dois dos parâmetros a ajustar;
- a_l a área da secção recta da partícula do lote l ;
- np_l o nº de partículas do lote l sobre o peneiro;
- k o nº de ordem do peneiro;
- $n1$ o nº de lotes presente na tamisagem;
- $\text{prob}(k,l)$ a probabilidade de passagem (se contacto) da partícula l no peneiro k ;

Verificou-se assim que, tal como se concluiu anteriormente, a dependência do nosso modelo, da amplitude do intervalo de integração numérica é apenas aparente. Na verdade, só precisamos de cuidar que o valor deste último não ultrapasse a unidade, isto é, que o nosso "período amostral" não seja superior à nossa unidade de tempo (o minuto, no nosso caso). Retomando a argumentação utilizada atrás, sob o ponto de vista da descrição da tamisagem para tempos médios e longos, temos à nossa disposição três alternativas equivalentes:

- utilizar a nova formulação dada por [3.117] que não exige um tratamento específico de dt ;
- utilizar [3.100], considerando dt como mais um parâmetro a ajustar;
- utilizar [2.10], limitando internamente a probabilidade de passagem à unidade.

Devido à mais fácil legibilidade desta última hipótese, foi por ela que optámos.

8.3 Transformações de variáveis

A colocação em obra da constrição respeitante ao intervalo temporal está resolvida. Trata-se agora de adaptar o Levenberg-Marquardt às constrições restantes, [3.91], [3.92], [3.93], que não passam de limitações dos domínios de variação dos parâmetros. Seguindo o exemplo do algoritmo escrito por Regueiras, P. (*in* Leite, M. 1984) efectuámos as apropriadas transformações de variáveis que permitiram que o intervalo natural de variação dos parâmetros, vigente fora da subrotina de optimização, fosse transformado no intervalo $]-\infty, +\infty[$, o único utilizável dentro do algoritmo de pesquisa. Como é evidente, no transporte dos valores dos parâmetros para fora da subrotina de optimização

são utilizadas as funções inversas das anteriores, o que permite recuperar os intervalos naturais de variação dos parâmetros.

São então as seguintes as funções directas utilizadas

$$x'_i = \frac{x_i^2 - 1}{2 x_i} \quad [3.117]$$

$$x'_i = \ln \frac{x_i}{1 - x_i} \quad [3.118]$$

que correspondem a uma aplicação em $] -\infty, +\infty[$, respectivamente, dos intervalos $]0, +\infty[$ e $]0, 1[$.

Também Espain, C. (1984, pp. 127-130) seguiu a mesma estratégia no tratamento de um problema semelhante, quadrando os seus parâmetros, para impedir que tomassem valores negativos.

Como se verifica por [3.117] e [3.118] as funções por nós utilizadas são monótonas e possuem derivadas contínuas e, por isso, se a função objectivo original já era "suave", a sua transformada continuará a sê-lo, muito embora a sua "superfície topográfica" possa resultar consideravelmente distorcida. Mas, mesmo com estes cuidados, a eliminação das constricções através de mudanças de variáveis, embora possa parecer à primeira vista um método expedito leva, regra geral, a adicionar dificuldades a uma questão que de si já não é simples.

Por outro lado, a estratégia da utilização das mudanças

de variáveis que permitem a transformação de um problema de minimização com restrições numa pesquisa sem restrições, poderia ser defensável há alguns anos atrás. Nessa altura, os algoritmos de minimização sem restrições eram mais numerosos e mais eficazes que os que lidam com os problemas em que elas existem. Contudo, do fim dos anos 60 para cá progrediu-se muito nestes últimos e, hoje em dia, pode dizer-se que são já tão eficazes como os algoritmos de pesquisa de mínimos não restringidos (embora existam ainda sérios problemas no tratamento das restrições não-lineares). Por isso, e regra geral, sob o ponto de vista da eficácia do algoritmo, já não vale a pena utilizar funções de transformação.

Mesmo nos raros casos em que não decorre do próprio modelo qualquer limitação dos parâmetros, é sempre benéfico introduzir restrições nos parâmetros. É que a presença de tais limites funciona como uma verificação quanto à boa ou má formulação do problema, porque a presença de uma variável sobre o seu limite pode revelar deficiências de formulação do modelo. Em segundo lugar, através das limitações ao domínio de variação, podemos impedir que a função objectivo seja avaliada numa zona que, à partida, se sabe possuir uma configuração de parâmetros desinteressante. Contudo, é sempre bom lembrar que uma estratégia deste tipo acarreta riscos: não sabemos nunca, à partida, o que será uma zona desinteressante (veja-se 3.11).

8.4 Explicitação das restrições

Vimos anteriormente a fundamentação teórica do método de Levenberg-Marquardt. Contudo, e como se disse, é necessário, no caso da existência de restrições, adicionar-lhe rotinas que, trabalhando por fora do algoritmo, permitam restringir o domínio de variação de $F(x)$, sem que com isso seja afectada a eficiência do método.

Se as restrições fossem apenas igualdades que ligassem os parâmetros entre si, o problema resolver-se-ia muito simplesmente diminuindo a dimensionalidade do problema e efectuando a pesquisa não restringida no espaço $n-k$ dimensional, sendo k o número de parâmetros não independentes definido pelas restrições. A sua presença corresponderia, ao fim e ao cabo, a uma simplificação no processo de pesquisa do mínimo.

O mesmo já não se passa quando, total ou parcialmente, elas são desigualdades lineares, o que corresponde a considerar como domínio de variação de $F(x)$ uma restrição de R^n , limitada por hiperplanos definidos pelas restrições. Tal é o caso presente, dado que todas as restrições são desigualdades que efectuam uma limitação sobre o intervalo de variação dos parâmetros.

Se o mínimo que pretendemos se encontra dentro da zona viável de R^n , a introdução de restrições não modifica acentuadamente o comportamento do algoritmo de pesquisa, mas

apenas impede que a função objectivo tome valores sem interesse. Neste caso, o nosso algoritmo de Levenberg-Marquardt continua a ter exactamente o mesmo comportamento que no caso de uma pesquisa sem limitações (note-se que o caminho tomado pelo algoritmo de optimização pode situar-se, mesmo que parcialmente, sobre o limite do domínio de $F(x)$). Contudo, acontece muitas vezes nestes problemas que o mínimo não constrangido se situa na zona proibida, o que é o mesmo que dizer que o mínimo com restrições se vai encontrar sobre um dos hiperplanos limitadores do domínio de $F(x)$. Daí os acrescidos problemas e as redobradas cautelas que uma pesquisa com restrições acarreta.

Existe um método, cujos fundamentos se devem a Rosen (1960) e que posteriormente foi desenvolvido por Gill e Murray (1974a), entre outros autores, que, com um pouco de trabalho, permite resolver elegantemente o problema.

Na sua essência baseia-se no facto de que uma restrição que não seja violada pode pertencer a duas categorias diferentes: o das restrições activas, quando o ponto corrente da iteração se situa sobre o hiperplano definido pela restrição, e o das restrições inactivas no caso contrário. A entrada de uma condição constritora no grupo das activas leva, obrigatoriamente, a que a dimensionalidade do problema seja diminuída de uma unidade, enquanto que, no caso inverso, a nossa configuração de parâmetros fica com mais um grau de liberdade.

A partir do momento em que se sabe quais são os $n-k$ parâmetros que podem variar livremente, podemos aplicar o algoritmo de Levenberg-Marquardt à minimização da função definida no espaço $(n-k)$ -dimensional. Todo o problema consiste agora em saber como é que se determina quando é que uma restrição entra ou sai do grupo das activas.

Dado que é de esperar que o mínimo com restrições se situe sobre um dos hiperplanos limitadores, vamos em primeiro lugar definir quais as condições necessárias e suficientes para que exista um mínimo em tais condições.

8.5. Caracterização em R^n do mínimo com restrições

O nosso problema é então o de minimizar $F(x)$, com $x \in R^n$ e sujeita a $l_i \leq x \leq l_s$, sendo l_s e l_i os vectores dos limites superiores e limites inferiores, respectivamente, a que os parâmetros estão sujeitos. Para simplificar o tratamento consideremos neste momento que as restrições obedecem à forma genérica

$$Ax \geq b, \quad [3.119]$$

em que A é a matriz cujas linhas são constituídas pelos coeficientes de cada uma das restrições, ou seja, a linha A_i da matriz $\{np \times nc\}$ (np - nº de parâmetros; nc - nº de restrições), contém os

coeficientes da constrição linear de ordem i ,

$$\Lambda_{i1}^T x_1 + \Lambda_{i2}^T x_2 + \dots + \Lambda_{in}^T x_n \geq b_i. \quad [3.120]$$

Mais tarde passaremos ao caso particular das limitações simples dos parâmetros.

Em relação ao ponto corrente, x_K , dividamos em primeiro lugar as constrições em activas, que são as que verificam a condição

$$\Lambda_i^T x_K = b_i \quad [3.121]$$

e as inactivas, para as quais

$$\Lambda_i^T x_K > b_i. \quad [3.122]$$

A partir de um ponto em que se verifique $\Lambda_i^T x = b_i$, o algoritmo pode mover-se de dois modos diferentes: ou sobre o hiperplano definido pela constrição, verificando-de, então

$$\Lambda_i^T p_K = b_i, \quad [3.123]$$

ou em direcção ao interior da zona exequível, ou seja,

$$\Lambda_i^T p_K > b_i, \quad [3.124]$$

sendo p_K o vector necessário para nos movermos do ponto corrente até à próxima paragem da iteração.

Enquanto que no primeiro caso a dimensionalidade da

pesquisa se mantém inalterada, o cumprimento da condição [3.124] aumenta de uma unidade o número de graus de liberdade do sistema.

Tomemos a matriz Γ cujas t linhas são constituídas pelos coeficientes das t restrições activas no ponto corrente x , tomando-se uma convenção semelhante para τ , vector que contém os termos independentes das restrições activas, ou seja

$$\Gamma x = \tau. \quad [3.125]$$

Γ é, portanto, uma restrição de Λ .

Como estas t restrições correspondem a um sistema de t equações lineares, e dado que, devido à linearidade das restrições, se pode escrever $\Gamma (x - x') = 0$, (já que $\Gamma x = b$ e $\Gamma x' = b$), então, um passo p (a que retirámos o índice para simplificar a notação) que una um ponto possível x a outro ponto possível x' deve satisfazer a igualdade

$$\Gamma p = 0. \quad [3.126]$$

A igualdade anterior significa, nada mais nada menos, que qualquer direcção exequível que se tome a partir do ponto corrente x deve ser ortogonal ao semi-espço definido pelas linhas de Γ . Ao mesmo tempo, podemos sempre garantir que a restrição sobre R^n efectuada pelas restrições lineares é sempre convexa, isto é, que qualquer ponto situado no segmento que une dois pontos exequíveis é exequível também (Gill & Murray, 1974b,

pp. 41) e que, portanto, o percurso entre os pontos x e x' se inscreve apenas na região permitida.

Ora sabe-se que (Nikolsky, 1977, pp. 170) dado um sub-espaco L de R^n é sempre possível definir o complemento ortogonal L' de L em R^n , definido de modo a que os seus vectores y sejam sempre ortogonais aos vectores x de L , ou seja,

$$x^T y = 0. \quad [3.127]$$

Os dois sub-espacos são completamente disjuntos e se a dimensão de um deles é k , a dimensão do outro será $n-k$. Prova-se ainda que qualquer vector do espaco n -dimensional pode ser escrito como uma combinação linear de vectores de L e de L' , de modo a que as bases combinadas dos dois semi-espacos disjuntos cubram todo o R^n .

Seja Z a matriz cujas colunas constituem a base do semi-espaco ortogonal e disjunto de R^n em relação ao conjunto dos vectores definido pelas linhas de Γ , isto é $\Gamma Z = 0$. Qualquer passo p que possa ser descrito por uma combinação linear das colunas de Z satisfaz a condição $\Gamma p = 0$ e pode ser escrito sob a forma $Z^T p$, a que daremos o nome de passo de Levenberg-Marquardt projectado sobre Z .

Consideremos o mínimo com restrições x^* e expandamos em torno dele, segundo Taylor, a função objectivo, tomando apenas as direcções permitidas

$$F(x^* + \epsilon Zp) = F(x^*) + \epsilon p^T Z^T g(x^*) + 1/2 \epsilon^2 p^T Z^T H(x^* + \epsilon \eta p) Zp, \quad [3.128]$$

em que $0 \leq \eta \leq 1$ e $\epsilon > 0$.

Usando argumentos em tudo semelhantes aos que se utilizam no caso da existência de mínimo sem restrições, verifica-se que no ponto óptimo de minimização com restrições se deve observar

$$Z^T g(x^*) = 0. \quad [3.129]$$

Devido à partição de R^n em dois sub-espacos complementares e ortogonais, um definido a partir das linhas de Γ e o outro pelas colunas de Z , a condição anterior equivale a afirmar que $g(x)$ pode ser escrito como combinação linear das linhas de Γ (Bertsekas, D. P. 1982, pp. 248),

$$g(x^*) = \Gamma^T \lambda \quad [3.130]$$

em que λ é o vector dos multiplicadores de Lagrange, que é único se e só se as linhas de Γ são linearmente independentes (o que acontece sempre se tivermos cuidado na formulação das restrições). Ao vector $Z^T g(x^*)$, dá-se habitualmente o nome de projectção do gradiente de $F(x)$, tomado no ponto x , sobre os hiperplanos que definem a restrição.

A condição [3.129] significa que $F(x)$ é estacionária em x^* , qualquer que seja a direcção tomada sobre os hiperplanos

constritores. Contudo, ela é omissa quanto às restrições não actuantes e, portanto, nada nos garante que $F(x)$ não desça, se o algoritmo de minimização resolver dar um passo que, respeitando as restrições actuantes, modifique os parâmetros livres. Para que isso não aconteça é necessário garantir que para cada qualquer passo tal que, $\Gamma^T p \geq 0$, se verifique que

$$g(x^*)^T p \geq 0 \quad [3.131]$$

isto é, que qualquer que seja a direcção que se tome a partir de x^* , ela será sempre uma direcção de subida.

Dado que $g(x^*)$ pode ser descrito como uma combinação linear das linhas de Γ , a condição de descida generalizada em direcção a x^* pode ser escrita como

$$g(x^*)^T p = \Gamma^T \lambda \geq 0 \quad [3.132]$$

Esta condição só se verifica quando todos os multiplicadores de Lagrange são não-negativos (Gill, Murray & Wright, 1981, pp. 72).

Para que o ponto estacionário seja um mínimo, por analogia com a minimização sem restrições, é necessário ainda que a hesseana de $F(x)$ em x^* projectada sobre os hiperplanos definidos pelo conjunto das restrições seja definida positiva.

Resumindo, as condições necessárias e suficientes para que um ponto seja mínimo no caso de existirem restrições constituídas por desigualdades lineares são:

$$1. \mathbf{A} \mathbf{x}^* \geq \mathbf{b} \text{ com } \mathbf{r}^T \mathbf{x}^* = \tau \quad [3.133]$$

$$2. \mathbf{Z}^T \mathbf{g}(\mathbf{x}^*) = 0 \quad [3.134]$$

$$3. \lambda_i \geq 0 \quad (i=1, 2, \dots, t) \quad [3.135]$$

4. Que $\mathbf{Z}^T \mathbf{H}(\mathbf{x}^*) \mathbf{Z}$ seja definida positiva.

Regra geral, dado um ponto de partida do algoritmo (o nosso "guess") a primeira tarefa a empreender deve ser a de seleccionar a totalidade das restrições activas nesse ponto. Contudo é possível, e mesmo frequente, que as restrições sejam tão complexas e tão numerosas que se torne impossível, de um modo expedito, seleccionar, para um dado ponto todas as restrições activas e, mesmo, saber se uma dada restrição é aí actuante ou não. Por isso, é habitual que estes métodos de optimização arrastem consigo a necessidade de resolver o subproblema: dada uma matriz $\mathbf{A}'$ contida em $\mathbf{A}$ encontrar um primeiro ponto exequível que satisfaça plenamente o conjunto de restrições que ela contém, mas apenas esse conjunto, situação que muitas vezes se reveste de uma certa complexidade. Felizmente que no nosso caso, em que as restrições são simples limitações aos intervalos de variação dos parâmetros, é muito fácil decidir se um ponto satisfaz tal ou tal restrição e, por isso a questão não se põe.

8.6 Limites simples do domínio dos parâmetros

Vamos agora tratar da implementação da subrotina que, trabalhando por fora do algoritmo de Levenberg-Marquardt, permite, para o caso particular das limitações simples dos parâmetros, obter o mínimo constrito.

Repetindo-nos, o problema que temos entre mãos é o de

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } F(x) \text{ , com } x \in \mathbb{R}^n \\ &\text{sendo } l_i \leq x \leq u_i \end{aligned} \quad [3.136]$$

Dividamos, em cada iteração o vector x_k nas suas componentes livres x_L e nas suas componentes fixadas pelas restrições activas x_F , (as componentes da direcção de pesquisa que correspondem às variáveis fixas são nulas). Consideremos que t_k é o número de componentes fixas, Γ_k é a matriz cujas linhas agrupam os coeficientes das restrições activas em cada iteração e Z_k a base que lhe é ortogonal. No nosso caso particular, Γ_k é a matriz unitária de dimensões $\{t_k \times t_k\}$, tendo os elementos da diagonal principal afectados de sinal. Este será positivo, se o limite actuante para o parâmetro for o inferior, e negativo no caso simétrico. Quanto a Z_k , será a matriz identidade de dimensões $n-t_k$. O algoritmo de minimização apenas proporcionará modificação nas $n-k$ componentes que não são compulsivas e, tomando o índice $\underline{L}$ como indicando as componentes livres, a

equação de Levenberg- Marquardt passa a ter a redacção

$$(J_L^T J_L + \sigma I) p_L = - J_L^T f \quad [3.137]$$

Como é por demais evidente, a cada iteração é necessário actualizar a matriz Γ , fixando um parâmetro, quando um dos limites é atingido, ou libertando-o, quando a constrição deixa de ser mandatória.

Quando uma constrição é adicionada ao conjunto das activas, isso traduz-se no acrescento de uma nova linha a Γ , passando-se o inverso quando o número de graus de liberdade do problema aumenta de uma unidade. Claramente, seria ineficiente recalcular completamente todas as matrizes. Nesta análise, já de si densa, não teria cabimento a descrição das estratégias de actualização das matrizes da equação [3.137]. Caso o leitor nelas esteja interessado, sugerimos-lhe a leitura de Gill & Murray (1974b).

Analisemos em primeiro lugar as possíveis estratégias a seguir para libertar um dos parâmetros.

O processo mais simples é o da retenção de todas as constrições activas definidas para o "guess" inicial na matriz Γ , até que seja encontrado um mínimo em relação ao subespaço por elas definido. Durante este processo serão adicionadas as constrições que forem consideradas necessárias. A partir do momento

em que o ponto corrente, x_k , se torna um ponto estacionário de $F(x)$ para a restrição de R_n definida pelo conjunto das restrições activas, sabemos que os multiplicadores de Lagrange que daí decorrem são as soluções do sistema

$$g(x_k) = \Gamma_k^T \lambda \quad [3.138]$$

Se qualquer um dos valores do vector λ é negativo, isso significa que $F(x)$ pode decrescer por variação ao longo do parâmetro que lhe diz respeito (eliminando essa restrição da matriz Γ). Mudando-se de subespaço repetir-se-á o processo, até que já não seja necessário eliminar mais restrições, o que será sempre possível porque o número de pontos estacionários é, regra geral, finito, tal como os subespaços possíveis para a evolução da nossa função objectivo.

Esta abordagem do problema traz consigo a desvantagem da grande quantidade de trabalho necessária para chegar a cada um dos pontos estacionários que se irão encontrando pelo caminho e que, muito provavelmente, se encontrarão ainda a boa distância da solução pretendida.

A alternativa consiste em calcular os multiplicadores de Lagrange em cada uma das iterações do processo de minimização. Contudo eles só se definem para pontos estacionários e, dado que x_k não é, em geral um ponto estacionário, e, provavelmente nem sequer se encontrará "suficientemente próximo" da solução de

[3.137], nada nos garante que os valores dos multiplicadores que obteríamos possuissem sequer o sinal correcto. Utilizando este processo, seria frequente que uma constrição fosse erroneamente eliminada, tendo que ser adicionada de novo no passo seguinte. Isso levaria a um comportamento zigzagueante da pesquisa, com a correspondente ineficiência do algoritmo (note-se, a propósito que nestas circunstâncias não se poderia nunca garantir que o número de mudanças de base provocadas fosse sequer finito e, por isso, o algoritmo poderia, na prática, nem sequer convergir).

Este problema pode ser ultrapassado mediante uma estratégia proposta por Zoutendjik (1960), mediante a qual uma constrição que tenha sido eliminada e, na iteração seguinte, retomada de novo, deve ser mantida na matriz Γ até que seja obtido um primeiro ponto ótimo num subespaço qualquer.

Existem ainda alguns problemas relativos ao cálculo dos multiplicadores de Lagrange que é necessário resolver. O primeiro diz respeito à ineficiência que decorre da resolução do sistema [3.130] se for utilizado para obter os multiplicadores. Claramente, dado que estamos longe do mínimo, não faz sentido tentar calcular λ com uma precisão ilusória. Por outro lado, como desconfiamos que é necessário eliminar uma constrição, o problema de optimização que estamos a tentar resolver não é concerteza o que é definido por [3.137]. Será, por isso, mais sensato contentarmo-nos com uma simples avaliação dos multiplicadores de

Lagrange e não com o seu cálculo exacto.

A forma específica de Γ_k , no nosso caso, leva a que os estimadores de primeira ordem dos multiplicadores de Lagrange sejam particularmente fáceis de determinar já que são, nada mais nada menos, que as componentes do gradiente de $F(x)$, afectadas de sinal. Assim, se a variável se encontra sobre o hiperplano definido pelo seu limite inferior,

$$\lambda_i \approx -g_i(x_k) \equiv -J_k^T f_k^T \quad [3.139]$$

Se, pelo contrário, ela se situa no limite superior, então,

$$\lambda_i \approx g_i(x_k) \equiv J_k^T f_k^T \quad [3.140]$$

O que fazer com estas estimativas se elas são, na verdade, inexactas? Felizmente que se prova (Gill, Murray & Wright, (1981, pp. 171)) que, mesmo que o ponto corrente se situe a boa distância de um qualquer ponto estacionário (o que pode fazer com que a semelhança entre o multiplicador de Lagrange e a sua estima possa não passar de mera ilusão), a eliminação de uma constrição por a sua estima ser negativa, leva a que a função objectivo venha efectivamente diminuída. Como medida cautelar, deve-se sempre adoptar a estratégia de Zoutendijk descrita atrás.

8.7 As restrições e o algoritmo de L.-Marquardt

Precisamos de definir a estratégia relativa à adição de restrições à matriz Γ . Se o vector de Levenberg-Marquardt tem como extremo um ponto situado no sub-espço não admissível, isso significa que pelo menos uma das restrições foi violada. Seja i o nº de ordem da restrição violada que se encontra mais próxima do ponto corrente. Então, ao invés de tomarmos um passo unitário, como é definido pelo algoritmo de pesquisa original [3.137], utilizamos o passo α' tal que, mantendo a direcção e o sentido da pesquisa, o ponto x_{k+1} se situe exactamente sobre o hiperplano definido pela restrição. Caso o novo ponto, x_{k+1} , não corresponda a uma diminuição da função objectivo, recorreremos ao método drástico, ou seja, por aumento de σ , vamo-nos aproximando cada vez mais da descida segundo o gradiente local, até que o extremo do vector de pesquisa corresponda efectivamente a um valor de $F(x)$ mais baixo. Se o ponto obtido sobre a restrição é retido, como é óbvio, esta é adicionada à matriz Γ .

Muito embora deste modo de actuar se possa dizer que desperdiça uma avaliação da função objectivo por cada restrição violada, tal não é grave, dado que são relativamente poucas durante uma corrida as circunstâncias em que isso ocorre. O mesmo se pode dizer quanto ao facto de o passo unitário não ser assegurado, uma das grandes vantagens do processo de Levenberg-Marquardt.

dt, o que diminui, necessariamente, a velocidade de convergência. Em geral, a principal crítica que se pode aplicar a esta estratégia refere-se ao facto de o ponto tomado sobre a constrição ao longo de pk poder não corresponder a um descida de $F(x)$. Contudo esse problema fica imediatamente ultrapassado devido ao método particular de superar as tentativas falhadas que é característico do algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Um problema que muitas vezes é tratado nestes casos das minimizações com constrições é o facto de as estimativas dos multiplicadores de Lagrange poderem tomar valores muito próximos de zero. Dada a incerteza na avaliação dos multiplicadores e o facto de existirem erros numéricos no cálculo do gradiente pelas fórmulas das diferenças finitas, nunca poderemos ter a certeza, nessas condições, mesmo junto de um ponto ótimo, se a constrição a que dizem respeito deve ser activa ou não. Contudo, no caso vertente, e dado que as estimas dos multiplicadores são as respectivas componentes do vector gradiente afectadas de sinal, a existência de valores quase nulos não é para assustar desde que exista a precisão desejada na diferenciação numérica, porque isso significa que a função objectivo é quase indiferente às variações segundo aquele parâmetro e, portanto, tanto faz deixar ficar a constrição como eliminá-la. Optamos pelo caminho mais cómodo e mais seguro de a considerar activa. De qualquer modo é mais um teste a incluir no algoritmo.

Dada toda a discussão que até aqui se arrastou, apresentamos na Fig 3.5, em linguagem natural, o fluxograma sumário do método que propomos para lidar com as restrições simples que actuam sobre os parâmetros. Note-se que aí não se pretende descrever o método em toda a sua minúcia (p. exp. nele não figura o critério de Zoutendjik (1970)), mas apenas pretende dar uma visão integrada dos passos lógicos envolvidos.

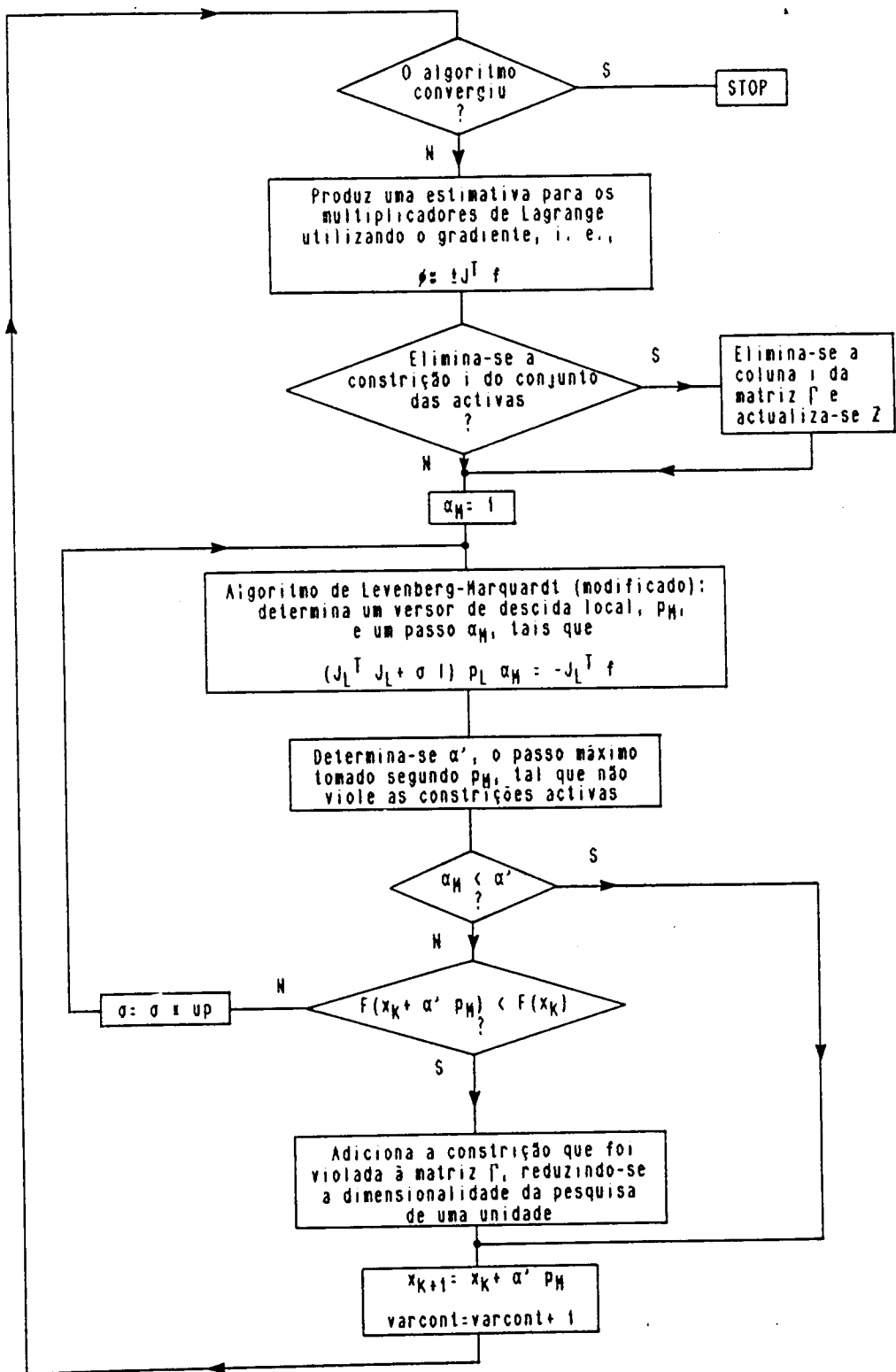


Fig 3.5: Fluxograma (em linguagem natural) do algoritmo de Levenberg-Marquardt, com limites simples nos parâmetros.

9. Critério de paragem

Sabemos que o critério de paragem de qualquer algoritmo, para além da sua estrita obrigação de fazer parar a corrida quando uma solução adequadamente precisa é, melhor ou pior, encontrada, deve ainda perseguir os dois seguintes desideratos:

- impedir convergências extemporâneas, isto é, não permitir que o algoritmo dê a corrida por terminada quando o mínimo ainda está a uma distância do ponto corrente superior à nossa tolerância;

- opôr-se a que o algoritmo continue insensatamente a tentar otimizar o resultado, quando é atingido o limite de precisão que impusemos.

Mas, no caso específico do ajuste de um modelo fenomenológico a um conjunto de dados experimentais, é imprescindível que o critério de paragem tenha ainda outra função: a de avisar o operador quando não se conseguiu obter nenhum ponto com as características requeridas, isto é, informar que a corrida abortou.

9.1. Papel do critério de paragem

Um mau comportamento numérico pode, como é evidente,

ser devido a implementações menos correctas do algoritmo de optimização, como a baixa precisão no cálculo das derivadas, o mau condicionamento da hesseana e mais uma longa procissão de outros factores. Mas nunca devemos perder de vista que, muito embora se possam corrigir os defeitos agindo sobre o algoritmo de optimização, eles são sempre um reflexo das características do modelo. É papel do operador estar sempre atento aos desvios comportamentais e por isso deve pôr de pé mecanismos auxiliares que lhe permitam efectuar essas verificações. É esta, mais do que qualquer outra, a função primordial do critério de paragem.

Esta necessidade não é satisfeita pelo critério do tipo "força bruta" sugerido por Nash (1979, pp. 177) na sua implementação do algoritmo de Marquardt. O teste, também por nós utilizado, faz com que a corrida seja dada como concluída quando todas as n componentes do vector p_k calculado pelo algoritmo se encontram abaixo da precisão que está a ser utilizada. Por outro lado, não toma em consideração as propriedades de $F(x)$ na vizinhança próxima do ponto de mínimo. Muito embora não possamos esquecer que as qualidades que definem a solução analítica de um problema não se mantêm necessariamente na solução numérica, o critério de paragem deve sempre verificar se o gradiente se desvanece e se a hesseana se mantém definida positiva junto do ponto de paragem.

A proposta de Nash também esquece completamente as características próprias do método de optimização. O Levenberg-

-Marquardt converge globalmente e com velocidade quadrática junto do mínimo, o que não se traduz só em vantagens. Na verdade, mesmo que não haja nenhum ponto de mínimo a jeito, considera ser sempre sua obrigação ir convergindo. E que tenta convergir, lá isso tenta, mas para onde é que nós não sabemos. Foi o que aconteceu em alguns dos primeiros ajustes de um algoritmo de interpretação de sondagens eléctricas verticais, como irá ser descrito em (3.11.), em que a tentativa de convergência se arrastava desesperadamente; a corrida só parava quando se atingia o limite máximo de iterações imposto à partida. Idêntico comportamento foi constatado por Machado Leite (comunicação pessoal) durante a utilização do Levenberg-Marquardt na interpretação de sísmica de refacção.

Das idiossincrasias do método também se pode tirar uma boa regra prática: a de verificar se a velocidade de convergência nos passos anteriores ao ponto de paragem é, pelo menos, superlinear. Se tal não acontecer, é francamente provável que o ponto final da corrida seja tudo, menos um ponto de mínimo.

Poder-se-ia à primeira vista dizer que o critério de paragem adoptado tem uma virtude em relação a métodos mais elaborados e que se baseiam no ritmo de diminuição da função objectivo: a de ser indiferente à semelhança dos valores que $F(x)$ toma nos pontos da vizinhança do mínimo quando este se encontra numa "zona de planalto". Alegadamente seria possível, mesmo

nessas circunstâncias, obter uma determinação precisa de x^* e, com ela, garantir a capacidade de recuperar a configuração final de parâmetros. Contudo a imprecisão na determinação de x^* que se dá em tais casos deve-se, antes de mais nada, ao mau condicionamento da hesseana e/ou à falta de escalamento e a possível vantagem do critério de paragem é, afinal de contas, uma camuflagem que nos impede de constatar um problema do algoritmo. Note-se que, mesmo no caso do mau condicionamento, é sempre possível utilizar em paralelo um critério de convergência para a sucessão $\{x_k\}$ e outro para $\{F(x_k)\}$.

Ainda em relação ao critério de paragem que adoptámos, é fácil de ver que, regra geral, levará longe de mais a tentativa de ajuste, com o correspondente desperdício de esforço computacional. Contudo, a utilização de um critério exigente deste tipo não constitui obrigatoriamente uma desvantagem. Em primeiro lugar, torna muito mais difícil a convergência extemporânea do algoritmo e, por outro lado, dá ao operador maior confiança na precisão da solução encontrada (o que é muito importante). Em segundo lugar, o número de tentativas extra não é nunca desmesurado, dada a convergência quadrática junto do mínimo.

Apesar das justas críticas expostas não é forçoso que da utilização deste critério de paragem resulte asneira. Na verdade, mesmo em condições alegadamente adversas, como no caso da minimização da função "banana-valley" de Rosenbrock

$$F(x) = 100 (x_2 - x_1^2) + (1-x_1)^2, \quad [3.141]$$

cujo único mínimo se encontra no fundo de uma depressão alongada e empenada (daí a designação da função), o algoritmo encontrou sempre o mínimo exacto, fosse qual fosse o ponto de partida, após uma rápida convergência do tipo quadrático. O mesmo comportamento foi descrito por Leite, M (1984, pp. IV-13) durante as corridas de ajuste de um modelo de moagem batch não-linear.

Nós próprios também não nos podemos queixar no que concerne ao ajuste do modelo de tamisagem não-linear. O algoritmo sempre mostrou convergir honestamente para um mínimo. Se em seguida fosse largada nova corrida com um "guess" um pouco diferente, o mínimo obtido era sensivelmente igual. O mesmo se passou quando, após a convergência, se iniciava nova corrida após a introdução de uma perturbação no vector final dos parâmetros.

Parece-nos poder dizer que, quando a função $F(x)$ é razoavelmente bem comportada, a utilização do critério da precisão máxima do computador não constitui inconveniente de maior, mas o mesmo não se passa quando o problema matemático se revela difícil. Nessa altura, o critério utilizado não fornece quaisquer indicações sobre a excelência do ponto final da corrida.

Por isso consideramos preferível a utilização do critério fundamentado e coeso que foi desenvolvido por Gill Murray & Wright (1981, pp. 306) que faz depender os diferentes critérios de paragem apenas da precisão dos dados.

9.2. Critério de paragem proposto

Seja τ_F o número de algarismos significativos correctos que pretendemos que figurem em $F(x^*)$ e ϵ_A um majorante do erro absoluto de $F(x)$. Convertendo τ_F numa medida da precisão absoluta, definida sob a forma

$$\Theta_K = \tau_F (1 + |F(x_K)|) \quad [3.142]$$

pode-se afirmar que o algoritmo deve parar, por convergência, quando são cumpridas simultaneamente na mesma iteração as condições

$$1. F(x_{K-1}) - F(x_K) < \Theta_K \quad [3.143]$$

$$2. \|x_{K-1} - x_K\| < (\tau_F)^{1/2} (1 + \|x_K\|) \quad [3.144]$$

$$3. \|g(x_K)\| \leq (\tau_F)^{1/3} (1 + |F(x_K)|) \quad [3.145]$$

ou, se se verificar a condição

$$4. \|g(x_K)\| < \epsilon_A \quad [3.146]$$

Caso não utilizemos mudanças de variáveis para eliminar as restrições nos parâmetros será necessário, nos testes 3 e 4, substituir o gradiente pela sua projecção sobre os hiperplanos definidos pelas restrições activas e, ainda, acrescentar a condição

$$5. \lambda \geq \min_F (\tau_F)^{\frac{1}{2}} (1 + |F(x_k)|), \quad [3.147]$$

em que $\lambda_{\min}$ é o menor valor obtido para as estimativas dos multiplicadores de Lagrange.

Precisamos de saber como determinar ϵ_A e τ_F .

Espain, C. (1984, pp. 131) utilizou a regra de bom senso que consiste em não tentar ir buscar a precisão onde ela não existe e, por isso, considerou que o limite a exigir do algoritmo de pesquisa é dado pela própria precisão com que os resultados experimentais são obtidos. Como é evidente, esse valor é, por direito próprio, o erro experimental, que só correrá o risco de ser suplantado pelas imprecisões de cálculo se os algoritmos utilizados forem numericamente débeis. Então, se a precisão relativa obtida na determinação experimental for τ_R , uma regra de bom senso é a de considerar, para que o ajuste tenha sido bem sucedido, que o algoritmo de pesquisa nos coloque os valores calculados numa vizinhança dos valores experimentais, com raio não superior a $\tau_R/10$, ou, pondo-nos do lado da segurança, a menos de $\tau_R/100$.

A ser assim, τ_F vem dado pela expressão [3.142], fazendo

$$\theta_k = \frac{\tau_R^2}{10^3} \sum_{t=1}^{nt} \sum_{k=1}^{nc+1} r_k^2(t) \quad [3.148]$$

e, pelo seu lado,

$$\epsilon_A = \alpha \frac{r_R^2}{10^3} \sum_{t=1}^{nt} \sum_{k=1}^{nc+1} m_k^2(t) \quad [3.149]$$

sendo $r_k(t)$ e $m_k(t)$, respectivamente, os valores determinados experimentalmente e calculados pelo modelo, nc e nt o número de peneiros e o número de pesagens, enquanto que $\alpha \in [0, 1]$.

Mas o nosso modelo é uma representação tentativa do evento físico, provávelmente até bastante grosseira. Então parece que o critério adoptado é demasiado estrito. Não é verdade. O que realmente nos deve interessar, para lá de um baixo valor de $\|f\|_2$, é que o seu valor seja maioritariamente atribuível às deficiências do modelo e à imprecisão experimental e não aos métodos numéricos envolvidos.

O conjunto de critérios acima descrito baseia-se num conhecimento minucioso da precisão com que $F(x)$ é calculado o que é útil por duas ordens de razão:

- é muito mais simples para o utilizador determinar qual a precisão que pode pedir ao algoritmo se souber qual é a precisão que pode esperar;
- a comparação da precisão final com a que foi predita através de uma análise prévia dá uma indicação valiosa sobre o comportamento quer do algoritmo de minimização, quer do próprio modelo.

Pelo que foi dito, consideramos que o critério mais

justo e que pode fornecer mais informações é o que acabou de ser descrito. Pode ainda, como foi proposto anteriormente, ser completado com um teste relativo à velocidade de convergência do algoritmo.

Note-se, contudo, que o valor ϵ_A , é por definição, um majorante do erro com que é calculada a função objectivo que Espain considerou, no seu caso particular, que não era afectada pelo erro introduzido no cálculo das derivadas. Contudo, no nosso caso não será necessariamente assim, dado que $F(x)$ é obtida por integração numérica de um sistema de equações diferenciais simultâneas. A obtenção de um majorante do erro produzido durante a integração numérica é, portanto, da maior importância.

10. A integração numérica

Como se viu em (2.4.2), para obter a função objectivo é necessário integrar um sistema de $(nc+1) \times nc/2$ equações diferenciais simultâneas da forma [2.3], no intervalo $[0, t_{final}]$. Vamos de seguida discutir os méritos relativos dos processos de integração numérica que se podem utilizar.

Aqui se poderá ver, com toda a nitidez, como a aplicação ingénua dos métodos numéricos, utilizados como simples receitas, levou a opções de qualidade inferior que diminuíram seriamente as possibilidades dos algoritmos utilizados.

10.1 Os métodos utilizados

O primeiro método utilizado, "apenas para ganhar sensibilidade " quanto à resposta das equações à variação da amplitude do intervalo de integração, foi uma simples integração de Euler. Trata-se de um método explícito de primeira ordem que só requer o conhecimento do valor que a função toma na origem $m(t_0)$ e que se baseia na utilização da expansão de Taylor à direita do ponto inicial, truncando-a a partir do termo de 2ª ordem e substituindo y' pelo valor dado pela própria equação diferencial, ou seja,

$$m(t_0+dt) = m(t_0) - c m(t_0) dt \quad [3.150]$$

onde, para simplificar, omitimos os índices respeitantes ao peneiro e ao lote granulométrico.

Como seria de esperar, esta simplicidade toda paga-se em termos de eficiência e de precisão. Assim, verificou-se que o máximo intervalo de integração dt ($\cong h$) que se podia utilizar sem que houvesse distorção acentuada da precisão dos resultados finais era de 0.05 minutos (tempo físico). Com quinze equações diferenciais simultâneas, tempos finais de tamisagem de 135 minutos e configurações do modelo com cinco parâmetros, os tempos de corrida resultantes eram perfeitamente in comportáveis (entre 36 e 72 horas, utilizando um ajuste com o polítopo, a correr num minimicro computador Sage IV).

Sem sacrificar a precisão, tornava-se necessário obter tempos de cálculo mais sensatos. A nossa escolha recaiu no Runge-Kutta de 4ª ordem.

A filosofia que lhe está subjacente é a de produzir quatro estimativas do valor da derivada da função, tomadas para três abcissas diferentes contidas no intervalo $[t, t+dt]$. Em seguida, o método calcula uma média pesada do pendor da função e usa-o para progredir para $t+dt$, sem duvidar um instante da precisão do seu cálculo. Na prática, cada uma das iterações do método é constituída pelos seguintes passos:

1. À custa do valor do gradiente em t , no centro do intervalo de integração gera-se uma primeira extrapolação $m_1(t+dt/2)$;

2. A partir do valor da função diferencial neste novo ponto $(t/2, m_1(t+dt/2))$ faz-se uma nova estimativa $m_2(t+dt/2)$, conservando o valor da abcissa;

3. Utilizando o valor do gradiente no novo ponto $(t/2, m_2(t+dt/2))$, extrapola-se, obtendo o ponto $(t, m_3(t+dt))$ e calcula-se aí pela quarta vez o gradiente.

4. Finalmente, utilizando uma média pesada das quatro determinações executadas, determina-se a variação de massa que o lote granulométrico sofreu de t a $t+dt$.

O erro de truncatura local deste método em relação ao desenvolvimento de Taylor é de 4ª ordem, desde que o valor que a aproximação toma no ponto de partida tenda para o valor exacto da função quando $dt \rightarrow 0$, ou, como é habitual dizer-se, desde que o método seja consistente com os valores iniciais da integração.

Clássicamente, a escolha do intervalo de integração apropriado é feita através de várias corridas experimentais para ajuizar da variação, em função de dt , do número de algarismos significativos presentes no cálculo dos m_{K1} . Fixámo-nos em $dt = 1$ minuto, valor para o qual, com dupla precisão, em Pascal USDC, se obtinham habitualmente num SAGE IV sete algarismos significativos correctos. Intervalos de tempo menores não levavam a aumentos de

precisão significativos, principalmente se tomarmos em linha de conta o incremento do tempo de cálculo. Contudo, como os valores tomados pelos coeficientes da equação diferencial [2.3] durante o ajuste mudam com a alteração do ponto $x \in \mathbb{R}^n$, nada nos garante que não ocorram pontos para os quais o valor de dt escolhido se não revele inapropriado.

10.2 Controlo do erro de truncatura

Infelizmente o Runge-Kutta não possui nenhum método intrínseco de estima do erro de truncatura local. Por isso, se formos cautelosos, inevitavelmente iremos utilizar um dt excessivamente pequeno para ter a certeza de que os resultados a que chegamos são correctos, pagando um preço elevado em termos de tempo de cálculo; se formos incautos (ou apressados) aplicaremos alegremente o dt que julgarmos apropriado e obteremos, em contrapartida, a precisão que merecermos.

Embora exista uma rotina de cálculo que se deve a Rosser (*in* Atkinson & Harley, (1983)) com que se pode proceder a uma estimativa do erro de truncatura, não se pode dizer que ela seja muito simpática porque, de cada vez que é utilizada necessita de uma iteração completa a mais. De facto, é necessário calcular dois valores de $m(t)$: um, para um passo de $2 \times dt$ e

outro, para dois passos sucessivos de amplitude Δt . A diferença entre estes dois valores, dividida por $2^5 - 1$, constitui uma estimativa do erro.

A inexistência de um processo simples e seguro de avaliação do erro de truncatura que nos permitisse controlar a amplitude do intervalo das diferenças finitas e, através dele, a precisão do cálculo da hessiana e do gradiente, chamou-nos a atenção, mais que qualquer outro facto, para a inadequação do Runge-Kutta ao nosso problema.

Num processo experimental clássico uma das chaves da reprodutibilidade experimental, ela mesma condição essencial do bom êxito da tarefa, é a capacidade de determinar com precisão quais os momentos, ao longo do processo, em que eventualmente são introduzidos erros experimentais e, ao mesmo tempo, a capacidade de os controlar com eficácia, normalmente através de um seu majorante. É por isso que não passa pela cabeça de um químico, por exemplo, adicionar um reagente às colheres de sopa, quando não se pode saber, à partida, se o seu doseamento é ou não relevante para a experiência que temos em vista. Do mesmo modo se deve proceder nas experimentações numéricas e, assim, não faz sentido nenhum ter um subrotina que produz resultados de erro desconhecido.

Essa é a nossa situação, por caricata que possa parecer, no que respeita ao método de integração numérica. E ainda

com uma agravante: é que no caso da experiência física a detecção dos maus resultados causados por uma falta de cuidado é muito mais simples que no caso da modelagem. Esta última quase sempre produz um resultado; o bico de obra é saber se é válido ou não.

Como se retira de toda a discussão havida até agora, são três os momentos em que o conhecimento da precisão disponível no cálculo de $F(x)$ é decisivo:

1. Na diferenciação numérica, devido à sua influência sobre os erros de cancelamento e, conseqüentemente, na determinação do intervalo das diferenças finitas;
2. No critério de paragem, impedindo convergências extemporâneas e permitindo formular um critério decisório sobre o abortamento das corridas;
3. No escalamento correcto do espaço n -dimensional, através da sua influência no cálculo das derivadas e da hesseana.

10.3 Controlo do intervalo de integração

Para além do conhecimento de um majorante do erro numérico de $F(x)$ põe-se também o problema de se determinar um limite superior aceitável. Como é evidente, esse valor é, por direito próprio, o erro experimental, que só correrá o risco de ser suplantado pelas imprecisões de cálculo, se os algoritmos

utilizados forem numericamente débéis. Nesse caso, se o erro experimental absoluto for ϵ_A , uma regra de bom senso é a de considerar que o erro absoluto introduzido pela integração numérica não deve ultrapassar, para nos mantermos do lado da segurança, $\epsilon_A/10$. Se, desde o ponto inicial até ao outro extremo do intervalo de integração, forem necessárias n_{it} iterações sucessivas da subrotina de integração e sendo ϵ_T o erro local de truncatura associado a cada iteração, então, um seu majorante é dado por

$$\text{Max}\{\epsilon_T\} = \epsilon_A / (10 \times n_{it}) \quad [3.151]$$

Notará o leitor que que o único erro que consideramos relevante é o que é causado pela truncatura local. Com efeito, segundo Dahlquist, Björk & Anderson (1974, pp. 335), a fracção do erro total que é causada pela propagação do erro de truncatura, tem ordem de grandeza inferior à do somatório dos erros locais de truncatura, desde que o sistema de equações diferenciais seja de 1ª ordem, o que é o caso.

Quanto aos erros de arredondamento, que por vezes podem levar a graves instabilidades numéricas, podem ser ignorados, dado que recorreremos sistematicamente à dupla precisão.

Portanto, se o método de integração utilizado possuir um mecanismo intrínseco de controlo do erro local de truncatura, este resultado permite-nos obter um controlo eficaz da amplitude

do intervalo temporal de integração o que, se nos dá algumas garantias quanto ao erro total introduzido pela integração numérica, por outro lado pode levar a economias substanciais no tempo de cálculo.

Tal é o caso dos métodos do tipo Predictor-Corrector. Como sabemos, as rotinas deste tipo dividem-se em duas partes complementares:

1. Uma extrapolação do valor tomado pela função no ponto de partida da iteração, obtida através do ajuste de um polinómio (regra geral uma parábola) aos últimos pontos calculados; com base no resultado obtido anteriormente segue-se uma integração, que produz uma ordenada-tentativa no ponto extrapolado.

2. Em seguida ajustamos de novo um polinómio às derivadas neste novo ponto e aos dois imediatamente anteriores para, sem extrapolação, gerar uma ordenada corrigida.

É então possível, através do processo de Milne (Atkinson, L. V. & Hartey, P. J. (1983), pp. 269), produzir um controlo do erro local de truncatura pela expressão

$$\epsilon_T \leq \frac{|y_c - y_p|}{\psi}, \quad [3.152]$$

sendo y_c a ordenada corrigida, y_p a ordenada tentativa e onde podemos tomar 20 como valor conservativo para ψ .

Se o erro obtido na iteração for excessivo, divide-se o

intervalo de iteração a meio o que, pelo facto de o termo corrector ser proporcional a h^5 , deve diminuir o erro cerca de trinta e duas vezes. Se, por outro lado, o erro fôr desnecessariamente baixo, pode-se duplicar a amplitude do intervalo, produzindo o efeito diametralmente oposto.

Para além da falta de mecanismos de controlo do erro, uma medida concreta do preço pago pela utilização do Runge-Kutta em relação aos Predictor-Corrector com a mesma precisão, é o facto de estes últimos necessitarem de duas avaliações da equação diferencial por cada iteração, enquanto que o Runge-Kutta de 4ª ordem precisa de quatro. Dado que, em ambos os métodos, a maior fatia do tempo dispendido se concentra no cálculo das equações diferenciais [2.3], podemos resumidamente dizer que um Runge-Kutta precisa do dobro do tempo de cálculo de um Predictor-Corrector para produzir um resultado com a mesma precisão.

O facto dos métodos do tipo Runge-Kutta não necessitarem de informação prévia para o arranque é sem dúvida uma vantagem no que respeita ao início da integração, o que se traduz em algoritmos mais simples. Contudo não faz sentido deixar de lado toda a informação existente sobre a evolução da função, quando ela está disponível. É a sua utilização que faz com que os métodos Predictor-Corrector se revelem numericamente mais estáveis. Resumindo, os Runge-Kutta só devem ter um papel a desempenhar: o da inicialização dos Predictor-Corrector.

11. A existência de mínimos múltiplos

Apesar das críticas expostas, a implementação do algoritmo de Levenberg-Marquardt que por nós foi utilizada, desde que se trabalhasse com precisão suficiente, sempre mostrou um comportamento aceitável. Na verdade, os grandes problemas de indefinição do mínimo só surgiram quando se tentou a precisão simples. Apesar do critério de paragem não ser muito feliz se, após um ajuste, fosse lançada nova corrida na vizinhança próxima do mínimo obtido, o ponto era recuperado, comportamento este que nos transmitiu uma certa confiança no modelo.

Uma "doença" que aflige todos os métodos de optimização e para a qual não existe terapêutica de confiança é o facto de o ponto de paragem da pesquisa poder ser sempre um mínimo local. O modelo de tamisagem não foge à regra.

Para lá do mínimo absoluto que pretendemos atingir existem sempre, pelo menos, os mínimos locais cujos vectores de parâmetros figuram na Tabela 3.1 e que correspondem, como é evidente, à cinética sem isocribo, já que só os valores de V_{Cr} e de Sat são significativos.

Devido à existência destes pontos, foi sempre necessário escolher criteriosamente o "guess" dos parâmetros, senão a pesquisa acabava inevitavelmente num deles, porque funcionam como verdadeiros atractores do ponto corrente da itera-

Tabela 3.1

Mínimos locais: vectores dos parâmetros

VCr	ajustado	ajustado	ajustado
Sat	ajustado	ajustado	ajustado
Fiso[2]	0	1	indiferente
Fiso[3]	0	1	"
Fiso[4]	0	1	"
Fiso[5]	0	1	"
Fiso[6]	0	1	"
Piso	indiferente	1	0

ção de Levenberg-Marquardt.

Embora fôsse possível eliminar este inconveniente restringindo o domínio de variação dos parâmetros Fiso[1] e Piso, isso não seria de modo nenhum recomendável. Ao eliminarmos um mínimo local isolando-o através da introdução de uma constrição, estamos, neste caso particular, a substituir um ponto de paragem facilmente identificável (basta olhar para a Tabela 3.1) por um ou mais mínimos locais contidos num hiperplano, que já não reconheceremos tão facilmente e que poderemos sempre tomar pelo desejado mínimo absoluto.

Por isso nunca nos preocupámos muito com a existência destes pontos, tanto mais que, para lá deles, nunca encontrámos mais do que um ponto de mínimo, onde, aliás, a função objectivo toma um valor muito mais baixo que nos mínimos locais.

Para nos assegurarmos deste facto efectuámos várias corridas em alguns dos ajustes, mantendo a matriz dos dados

experimentais e variando cuidadosamente (por causa dos "atractores") o ponto inicial da pesquisa: foi sempre recuperado, com variações desprezáveis, o mesmo ponto de mínimo.

Por isso, pensamos poder dizer que os vectores dos parâmetros que figuram na Tabela 2.5 correspondem, verosimilmente, aos pontos de mínimo absoluto.

Já o mesmo aconteceu na utilização da mesmíssima implementação para proceder ao ajuste de toda uma campanha de sondagens eléctricas verticais (Rocha, Cavalheiro, Leite, 1987). Para podermos dar conta das dificuldades detectadas descrevamos, ainda que resumidamente, o encadeamento dos algoritmos utilizados, que corriam em TurboPascal num IBM-PC compatível

- criação de um ficheiro com os valores de campo, a partir de uma base de dados;
- visualização do gráfico log-log que os dados proporcionam, o que permite fazer uma ideia prévia do ponto de partida do algoritmo de ajuste;
- lançamento de uma corrida de ajuste, com acompanhamento do modo como vai decorrendo, através de "outputs" periódicos de $F(x)$ e de x , que termina, quando se cumprir o critério de paragem (precisão da máquina);
- visualização da qualidade do ajuste por sobreposição, num gráfico log-log da curva calculada sobre os pontos experimentais;

- aceitação dos resultados, se o ajuste fôr considerado satisfatório ou, em caso negativo, lançamento de nova corrida, diferindo da anterior no ponto inicial.

Devido aos métodos de controle interactivo que foram utilizados pôde verificar-se que o algoritmo convergia frequentemente para mínimos espúrios que correspondiam a um ajuste de baixa qualidade, quer sob o ponto de vista numérico, quer sob o ponto de vista geofísico e geológico. Curiosamente, estes mínimos funcionavam como autênticos atractores do ponto corrente x_k , dado que, por mais que lançássemos a corrida de pontos diferentes, lá íamos de novo parar. Só, quando, por um bambúrrio, conseguíamos um "guess" mais jeitosinho, é que lhe conseguíamos escapar e atingir um resíduo final de melhor qualidade. Note-se ainda que a distância entre o "bom" ponto inicial e os outros era muitas vezes diminuta. A este caso estavam quase sempre associados problemas de convergência.

Situações houve em que detectámos a presença de vários mínimos locais, que correspondiam grosso modo aos mesmos resíduos finais (regra geral baixos), mas em que apenas uma das soluções tinha credibilidade geológica.

O segundo caso descrito acima revela, tal como já foi detectado por Espain, (1984) que o problema da interpretação de sondagens eléctricas verticais tem realmente, para terrenos "difíceis", várias soluções possíveis (portanto, vários mínimos).

Isto significa que o método já está nos limites do seu campo de aplicabilidade.

O primeiro dos casos revela um desenvolvimento tormentoso da superfície de $F(x)$ que se pode dever, quer à presença de diversos mínimos reais, quer a problemas de índole numérica. Na verdade o "enrugamento" de $F(x)$ pode ser exacerbado pela ausência de escalamento, pelo mau condicionamento da hesseana, pela utilização das transformações de variáveis ou ainda pela introdução de descontinuidades numéricas provocadas por insuficiente precisão de cálculo.

No caso das sondagens eléctricas verticais podemos obter, através de sondagens mecânicas, informação fidedigna sobre a estrutura do terreno. Por isso será sempre possível, embora arriscado, introduzir restrições "sensatas" sobre os parâmetros que impeçam o algoritmo de procurar o mínimo numa zona geológica e geofisicamente inverosímil. Esta estratégia corresponde, em traços gerais, à separação de zeros que é habitual fazer-se para as funções monovariadas.

Por analogia com estas, podemos dizer que uma optimização em que se detectam vários mínimos locais é, sob o ponto de vista pragmático, um problema mal posto e, em tais casos, será sempre aconselhável a reformulação do modelo de modo a que o número de mínimos detectáveis venha diminuído. E evidente que casos há, como o das sondagens eléctricas em terrenos de inter-

pretação difícil, em que isso não é possível. Mas sob o ponto de vista da modelação e do cálculo numérico este caso não se distingue em nada do de um problema mal posto. De novo se deve referir que, se a implementação numérica de um modelo tiver sido executada com cuidado e, mesmo assim, o modelo apresentar um comportamento deficiente durante a optimização, isso significa, inevitavelmente, que o modelo precisa de ser revisto.

De tudo o que ficou exposto se pode retirar a seguinte ilacção: o método de minimização segundo Levenberg-Marquardt é extraordinariamente robusto, mesmo quando trabalha sob condições que não são as mais favoráveis. As faltas de cuidado na sua implementação numérica só se revelam decisivas quando o modelo a ajustar é, ele próprio, fonte de problemas o que, segundo toda a probabilidade não é o caso do modelo de tamisagem.

FIM

No meio do caminho tinha uma pedra
tinha uma pedra no meio do caminho
tinha uma pedra
no meio do caminho tinha uma pedra.

Nunca me esquecerei desse acontecimento
na vida das minhas retinas tão fatigadas.
Nunca me esquecerei que no meio do caminho
tinha uma pedra
tinha uma pedra no meio do caminho
no meio do caminho tinha uma pedra.

Carlos Drummond de Andrade (1962): Tentativa de exploração e de
interpretação do estar-no-mun-
do (No meio do caminho)

Saiba vocemecê que leva o pensamento deles muita
lonjura para que a minha ideia o possa alcançar.

Sr. José, pastor alentejano, poeta e, por acaso, doente mental.
(citado por Jaime Cortesão em 1987)

BIBLIOGRAFIA

Acton, Forman S. (1970). *Numerical methods that work*,
Harper & Row, N. York.

Anderson, D. H. & Osborne, M. R. (1977). Discrete, nonlinear
approximation problems in polyhedral norms, *Numer.
Math.* 28, pp. 157-170.

Angot, A. (1965). *Compléments de Mathématiques*, Ed.
Révue d'Optique, Paris.

Aravamudhan, N. et al (1984). Separation based on shape,
Powder Technology, 39, pp. 93-98.

Arbiter, N. & Harris, L. (1965). Particle size distribution-
-time relationships in comminution, *British Chemical
Engineering*, 10, pp. 240-247.

Arroyo, A. S. & Zuloaga, J. L. (1968). Garantía de precision
en los clasificadores de minerales, *Boletín Geológico
Y Minero*, T. LXXIX-III, pp. 280-285.

ASTM E11 (1970): *Standard specifications for wire-cloth-
sieves for testing purposes.*

ASTM E 20 (1970): *Recommended practice for analysis by microscopical methods for particle size distribution of particulate substances of subsieve sizes.*

ASTM E 276 (1970): *Standard method of test for particle size or screen analysis at nº 4 (4.75 mm) sieve and finer for metal bearing ores and related materials.*

Atkinson, L. V. & Harley, P. J. (1983). *An introduction to numerical methods with Pascal*, Addison Wesley, Reading.

Axelsson, O. (1987). A generalized conjugated gradient, least square method, *Numer. Math.* 51, pp. 209-227.

Badiou, A. (1972). *Le concept de modèle*, Librairie François Maspero, Paris, tradução portuguesa da Editorial Estampa, Lisboa.

Bard, Y. (1974). *Nonlinear parameter estimation*, Academic Press, London and New York.

Basteraie, F. (1965). Etude théorique du mode de génération des distributions granulométriques, *Révue de L'Industrie Minérale*, Janvier 1965, pp. 39-50.

- Baudet, G. (1971). Emploi de la méthode de Coulter por les granulométries très fines, *Révue de L'Industrie Minière-Mines*, Avril 1971, pp. 319-322.
- Bazin, C. & Houdouin, D. (1988), Residence time distributions modeling for mineral processes evaluation, *CIM Bulletin*, March 1988, pp. 115-125.
- Bennett, C. H. (1987). Demons, engines and the second law, *Scientific American*, Vol. 257, nº 5, pp. 88-96.
- Bertsekas, D. P. (1982). *Constrained optimization and Lagrange multiplier methods*, Academic Press, London and New York.
- Bickley, W. G. & Thompson, R. G. (1964). *Matrices: their meaning and manipulation*, The English Univ. Press, London.
- Boltzmann, L. (1986). *Escritos de mecánica y termodinámica*, Alianza Editorial, S.A., Madrid.

Boudon, R. (1970). *Tendances principales de la recherche dans les sciences sociales et humaines; partie 1: sciences sociales - modèles et méthodes mathématiques*, Mouton-Unesco, Paris.

Box, Hunter & Hunter (1978). *An introduction to design, data analysis and model building*, John Wiley & Sons Inc., New York.

Bowen, B. & Weisberg, H. (1980). *An introduction to data analysis*, W. H. Freeman & Co., San Francisco.

Bremermann, H. (1970). A method of unconstrained global optimization, *Mathematical Biosciences* 9, pp. 1-15.

Bromley, A. V. & Holl, J. (1986). "Tin mineralization in southwest England" in *Mineral Processing at a cross-roads* (Wills, B. A. & Barley, R. W., eds.), pp. 195-262, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht.

Cavalheiro, A. T. (1984). *Libertação de minérios por cominuição: modelo matemático* (dissertação de doutoramento), F.E.U.P., Porto.

Cawe, P. & de Cuyper, J. (1972). "Modèle et equation de distribution granulométrique d'une comminution par application de la morphologie mathématique" in *Symposium Zerkleinern* (Rumpf, H. & Shönert, K., eds.), pp. 601-630, Verlag Chemie, Düsseldorf.

Charalambous, C, & Conn, A. R. (1978). An efficient method to solve the minimax problem directly, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 15, n° 1, pp. 162-187.

Claerbout, J. F. & Muir, F. (1973). Robust modeling with erratic data, *Geophysics*, Vol. 38, n°5, pp. 826-844.

Clark, M. W. (1981). Quantitative shape analysis: a review, *Mathematical Geology*, Vol. 13, n°4, 1981.

Cline, A. K. et al (1979). An estimate for the condition number of a matrix, *SIAM J. Num. Anal.* 16, pp. 368-375.

Cramer, H. (1974). *Mathematical methods of statistics*, Princeton University Press, Princeton.

Crutchfield, J. P. et al (1986). Chaos, *Scientific American*, Vol. 255, nº6, pp. 38-49.

Dahlquist, G, Björk, A. & Anderson, N. (1974). *Numerical methods*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

De Groot, S. R. (1968). *Termodinâmica de los procesos irreversibles*, Editorial Alhambra, S.A., Madrid.

Dewdney, A. K. (1985a). Computer recreations, *Scientific American*, Vol. 253, nº2, pp. 8-14.

Dewdney, A. K. (1985b). Computer recreations, *Scientific American*, Vol. 258, nº3, pp. 96-99.

Dewdney, A. K. (1985c). Computer recreations, *Scientific American*, Vol. 257, nº5, pp. 118-122.

Espain, C. O. (1984). *Parâmetros aparentes em prospecção geoelétrica: uma nova técnica de interpretação*, Tese de doutoramento, F.E.U.P., Porto.

Faddeev, D. K. et al (1970). Natural norms in algebraic processes, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 7, nº 4, pp. 520-531.

Fisher, R. A. (1937). *The design of experiments*, Oliver & Boyd, Edinburg.

Fletcher, R. (1971). A general quadratic programming algorithm, *J. Inst. Maths. Appl.*, Vol. 7, pp. 76-91.

Formanek, V. & Laloy, N. (1971). Description des méthodes d'analyses granulométriques couramment utilisées au Centre d'Etudes et d'Analyses des Minerais et des Métaux, *Révue de L'Industrie Minérale-Mines*, Avril 1971, pp. 319-322.

Forshythe, G. E. (1967). Today's computational methods of linear algebra, *SIAM Review*, Vol. 9, n° 3, pp. 489-515.

Forsythe, G. E, Malcolm, M. A. & Moler, C. B. (1977). *Computer methods for mathematical computations*, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N. J..

Fox, L. (1984). *An introduction to numerical linear algebra*, Clarendon Press, Oxford.

Gardner, J. & Austin K. (1962). "A chemical engineering treatment of batch grinding" in *Proceedings of The 1th European Symposium in Size Reduction* (H. Rumpf, ed.), Verlag Chemie, Weinheim.

Gerald, C. F. (1978). *Applied numerical analysis*, Addison-Wesley Publishing Co., Reading.

Gero, J. S. (1985). *Design optimization*, Academic Press, Inc., London

Gill, P. E. & Murray, W. (1972). Quasi-Newton methods for unconstrained optimization, *J. Inst. Maths. Appl.* n° 9, pp. 91-108.

Gill, P. E. & Murray, W. (1974-a). Newton-type methods for unconstrained and linearly constrained optimization, *Mathematical Programming* 7, pp. 311-350.

Gill, P. E. & Murray, W. (1974-b). "Newton-type methods for linearly constrained optimization" in *Numerical Methods for Constrained Optimization* (P. E. Gill and W. Murray, eds.), pp. 29-66, Academic Press, London and New York.

Gill, P. E. & Murray, W. (1976). Algorithms for the solution of the non linear least-squares problem, *Report NAC 71*, National Physical Laboratory, England

Gill, P. E. & Murray, W. (1978). Algorithms for the solution of the nonlinear least-squares problem, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 15, n^o 5, pp. 977-992

Gill, Murray & Wright (1981). *Practical optimization*, Academic Press, London.

Golub, G. H. & Reinsche, C. (1971). "Singular value decomposition and least squares solution" in *Handbook for Automatic Computation Vol II - Linear Algebra* (Wilkinson, J. H. & Reinsch, C., eds.), Springer Verlag, Berlin.

Golub, G. H. & Varah, J. M. (1974). On a characterization of the best 12-scaling of a matrix, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 11, n^o 3, pp. 472-479.

Goodman, S. E. & Hedetniemi, S. T. (1977). *Introduction to the design and analysis of algorithms*, McGraw-Hill Inc., New York.

- Greenwood, J. & Hiorns, F. J. (1967). "A comparison of two conditions of particle breakage" in *Proceedings of The 2th European Symposium in Size Reduction* (H. Rumpf, ed.), Verlag Chemie, Weinheim.
- Hazewinkel, M. (1985). Experimental mathematics, *Math. Modelling*, Vol.6, pp. 175-211.
- Häußler, W. M. (1986). A Kantorovich-type convergence analysis for the Gauss-Newton method, *Num. Math.* 48, pp. 119-125.
- Heisenberg, Werner (1955). *A imagem da natureza na física moderna*, Livros do Brasil, Lda, Lisboa.
- Henrici, P. (1964). *Elements of numerical analysis*, John Wiley & Sons Inc., New York.
- Herbst, J. A. & Sepulveda, J. L. (1985). "Particle size analysis" in *SME Mineral Processing Handbook*, (Weiss, N. L., ed.), pp. 30/20-30/43, Society of Mining Engineers, AIMMPE, Inc., New York.

- Hildebrandt, S. & Tromba, A. (1985). *Mathematics and optimal form*, Scientific American Library, New York.
- Hoerl, A. E. & Kennard, R. W. (1970). Ridge regression: biased estimation for nonorthogonal problems, *Technometrics*, Vol. 12, n°1, pp. 55-67.
- Hoerl, A. E. & Kennard, R. W. (1970). Ridge regression: Applications to nonorthogonal problems, *Technometrics*, Vol. 12, n°1, pp. 69-82.
- Holland-Batt, A. B. (1985). Analysis of mineral separation by means of recovery functions, *Trans. Inst. Min. Metall (Sect. C)*, 94, March 1985, pp. c17-c29.
- Hukki, R. T. & Venho, J. E. (1972). "Evaluation of sub-sieve size distribution of ground products by computer" in *Symposium Zerkleinern* (Rumpf, H, & Schönert, K., eds.), pp. 557-574, Verlag Chemie, Düsseldorf.
- Hut, P. & Sussman, G. J. (1987). Advanced computing for science, *Scientific American*, Vol. 257, n°4, pp. 137-144.

Irani, R. R. & Callis, C. F. (1963). *Particle size: measurement, interpretation and application*, John Wiley and Sons, New York and London.

Jaeger, J. C. & Starfield, A. M. (1974). *An introduction to applied mathematics*, Oxford University Press, London.

Jones, A. (1970). Spiral - a new algorithm for non-linear parameter estimation using least-squares, *The Computer Journal*, Vol. 13, n° 3, pp. 301-308.

Kapur, P. C., Ball, B. & Furstenau, D. W. (1977). A stochastic approach to sieving kinetics, *International Journal of Mineral Processing*, 4 pp. 131-147.

Kay, A. (1984). Computer Software, *Scientific American*, Vol. 251, n° 3, pp. 41-47.

Kaye, B. H. (1962). Investigation into the possibility of developing a rate method of sieve analysis, *Powder Metallurgy*, n°10, 1962, pp. 199-217.

Kaye, B. H. (1966). Determining the characteristics of fine powders, *Chemical Engineering*, November 7, 1966, pp. 239-246.

Kaye, B. H. (1984). Multifractal description of a rugged fine-particle profile, *Part. Charact.* 1, pp. 14-21.

Kenitiro Suguio (1973). *Introdução à sedimentologia*, Edgard Blücher, São Paulo.

Kihlstedt, P. G. (1962). "The relationship between particle size distribution and specific surface in comminution" in *Symposium Zerkleinern* (Rumpf, H, & Behrens, D., eds.), pp. 205-216, Verlag Chemie, Düsseldorf.

Klein, J. C. (1971). Mesures granulométriques au moyen de l'analyseur de textures, *Revue de L'Industrie Minière - Mines*, Avril 1971, pp. 319-322.

Klima, M. S. & Luckie, P. T. (1985). "Fundamentals of solid-solid separations" in *Design and Installation of Concentration and Dewatering Circuits* (Mular, A. L. & Anderson, M. A., eds.), pp. 183-193, Society of Mining Engineers, Inc. Littleton, Colorado.

- Lambert, J. D. (1973). *Computational methods in ordinary differential equations*, John Wiley & Sons, New York.
- Lapple, C. E. (1968). Particle-size analysis and analysers, *Chemical Engineering*, May 20, 1968, pp. 149-156.
- Lavergne, J.-P. (1971). Granulométrie des ciments par analyse morphologique, *Révue de L'Industrie Minérale-Mines*, Avril 1971, pp. 319-322.
- Lawson, C. L. & Hanson, R. J. (1974). *Solving least squares problems*, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, N. J..
- Lederman, L. M. (1984). The value of fundamental science, *Scientific American*, Vol. 251, nº5, pp. 34-41.
- Leite, M. R. (1984). *Moagem não-linear em moinho de barras: validação de um método global de determinação dos parâmetros globais*, Tese de doutoramento, F.E.U.P., Porto.
- Leite, M. R. L. (1985). Cinética da fragmentação: método global de determinação de parâmetros, *Estudos, Notas e Trabalhos D. G. G. M.*, Vol. 27, pp. 105-111.

Leite, M. R. M. (1987a): *Fragmentação e classificação de rochas e minérios*, Dep. Minas, F.E.U.P., Porto.

Leite, M. R. M (1987b). Modelos cinéticos para a simulação de circuitos de fragmentação graúda, *Linha de investigação do INIC-CEN/85/11*, Lisboa.

Levenberg, K. (1944). A method for the solution of certain non-linear problems in least squares, *Quart. Appl. Math.* 2, pp. 164-168.

Lieberman, A. (1967a). Fine-particle technology in the chemical process industries- Part I\, *Chemical Engineering*, March 27, 1967, pp. 209-218.

Lieberman, A. (1967b). Fine-particle technology in the chemical process industries - Part II, *Chemical Engineering*, April 10, 1967, pp. 209-218.

Lieberman, A. (1967c). Fine-particle technology in the chemical process industries- Part III, *Chemical Engineering*, April 24, 1967, pp. 163-166.

Lootsma, F. A. (1972). *Numerical methods for non-linear optimization*, Academic Press, London.

Lynch, A. J. (1977). *Mineral crushing and grinding circuits: their simulation, optimization, design and control*, Elsevier, Amsterdam.

Lynch, A. J. & Narayanan (1986). "Simulation - the design tool for the future" in *Mineral Processing at a crossroads: problems and prospects* (Wills, B. A., Barley, R. W., eds.), pp. 89-116, Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht.

Lyness, J. N. (1977). "Has numerical differentiation a future?" in *Proceedings of the 7th Manitoba Conference on Numerical Mathematics*, pp. 107-129.

Madureira, C. & Regueiras, P. (1972a). "Conceitos fundamentais para um estudo fenomenológico dos processos de fragmentação" in *II Simposium sobre as teorias da informação e dos sistemas*, Com. nº 29, FEUP, Porto.

Madureira, C. & Regueiras, P. (1972b). "Simulação numérica de circuitos de moagem" in *II Simposium sobre as teorias da informação e dos sistemas*, Com. nº 31, FEUP, Porto.

Madureira, C. M. & Leite, M. R. (1985). *Teoria da simulação dos processos mineralúrgicos*, manuscrito.

Madureira, C. M. et al (1986). *Teoria genérica dos processos separativos em mineralurgia*, não publicado.

Madureira, C. M. & Soares, A. (1988). *Heurística e epistemologia da produção científica: um contributo para a fundamentação metodológica de uma prática da investigação científica*, manuscrito, Porto.

Madureira, C. M., Leite, M. R. M., Cavalheiro, A. A. T. & Rocha e Silva (1988). "Size, grade and liberation: a stochastic approach to the fundamental problem of mineral processing" in *XVI International Mineral Processing Congress* (E. Forssberg, ed.) Elsevier Science Publishers, Amsterdam.

- Mandelbrot, B. B. (1983). *The fractal geometry of nature*,
W. H. Freeman and Co, San Francisco.
- Marquardt, D. W. (1963). An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, *J. Soc. Ind. Appl. Math.*, Vol. 11, n^o 2, pp. 431, 441.
- Marquardt, D. W. (1969). Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation and non-linear estimation, *Technometrics*, Vol. 12, n^o 3, pp. 591-612.
- McCarthy, C. & Strang, G. (1973). Optimal conditioning of matrices, *SIAM J. Num. Anal.*, Vol. 10, pp. 370-388.
- Medalia, A. I. (1971). Dynamic shape factors of particles, *Powder Technology*, Vol. 4, n^o3, pp. 117-138.
- Meloy, T. P. (1977). A hypothesis for morphological characterization of particle shape and physiochemical properties, *Powder Technology*, n^o16, pp. 233-253.
- Meloy T. P. et al (1985). Measuring the particle shape mix in a powder with the cascadowgraph, *Chemical Engineering Science*, Vol. 40, n^o7, pp. 1077-1084.

Meloy , T. P. & Clark, N. N. (1987). "Modern particle shape analysis: its meaning, relevance and problems" in *Advances in Mineral Processing* (Somasundaran, ed.), pp. 67-80, Society of Mining Engineers, Littleton, Co.

Meyer, S. L. (1975). *Data analysis for scientists and engineers*, McGraw-Hill, New York

Moroney, M. J. (1969). *Facts from figures*, Penguin Books, Harmondsworth (U. K.).

Morrison, D. D. (1960). "Methods for non-linear least-squares problems and convergence proofs". Tracking programs and orbit determinations in *Proc. Jet Propulsion Laboratory Seminar*.

Mular, A. L. & G. V. Jergensen, eds. (1982). *Design and installation of comminution circuits*, Society of Mining Engineers of AIME, New York.

Mular, A. L., & Anderson, M. A., eds. (1986). *Design and installation of concentration and dewatering circuits*, Society of Mining Engineers, Littleton, Colorado.

Myers, J. F. & Lewis, F. M. (1946). Fine crushing with a rod mill at the Tennessee Copper Company, *Trans. A.I.M.E.*, 187, pp. 707-711.

Myskis, A. D. (1975). *Introductory mathematics for engineers*, Mir Publishers, Moscow.

Nash, J. C. (1979). *Compact numerical methods for computers: linear algebra and function minimization*, Adam Hilger, Bristol.

Nelder, J. A & Mead, R. (1965). A simplex method for function minimization, *Comput. J.*, Vol. 7, pp. 308-313.

Nichols, J. P. (1982). "Selection and sizing of screens" in *Design and Installation of Comminution Circuits* (Mullar, A. L. & Anderson, M. A., eds.), pp. 509-522, Society of Mining Engineers of AIMMPE, Inc., New York.

Nikolsky, S. M. (1977). *A course of mathematical analysis*, Mir Publishers, Moscow.

O'Leary, D. P. (1980). Estimating matrix condition numbers,
SIAM J., Vol. 1, n° 2, pp. 205-209.

Ortega, J. M. & Rheinboldt, W. C. (1970). *Iterative solutions of nonlinear equations in several variables*, Academic Press, London and New York.

Panou, G., Tillic, R., Doyen, L. (19??). "Quelques considérations sur le classement granulométrique obtenu par tamisage" in *Proceedings of a Symposium on Mineral Dressing*, Budapest, pp. 83-88.

Peltier, R. (1971). Le granulomètre à laser, *Revue de L'Industrie Minérale - Mines*, Avril 1971, pp 319-322.

Petruk, W. (ed.) (1984). *Process mineralogy III: applications in metallurgy, coal, concrete, smelting and exploration*, Society of Mining Engineers of AIMMPE, New York.

Phillips, John L. (1973). *Statistical thinking*, W. H. Freeman & Co., San Francisco.

- Powell, M. J. D. (1970). A survey of numerical methods for unconstrained optimization, *SIAM Review*, Vol. 12, nº1, pp. 79-97.
- Powell, M. J. D. (1974). "Introduction to constrained optimization" in *Numerical Methods for Constrained Optimization* (P. E. Gill and W. Murray, eds.), pp. 29-66, Academic Press, London and New York.
- Prevosteau, J. M. & Ragot, J. P. (1971). Possibilités d'utilisation du microscope téléviseur quantitatif pour l'étude de la texture et de la granulométrie des minerais, *Revue de L'Industrie Minérale - Mines*, Avril 1971, pp. 319-322.
- Prigogine, I. (1982). *Physique, temps et devenir*, Masson, Paris.
- Pryor, E. J. (1965). *Mineral processing*, Applied Science Publishers, Ltd, Barking, England.
- Rasteiro, M. G. (1983). *Técnicas de peneiração*, Engenharia Química, Universidade de Coimbra.

Robinson, E. R. (1975). *Time dependent chemical processes, with special reference to their simulation and optimization*, Applied Science Publishers Ltd, London.

Rocha, J. Cavaleiro A. & Leite, A. (1987). "Interpretação numérica de sondagens eléctricas verticais" in *VIII Encontro de Eng. de Minas*, Espinho.

Rose, H. E. (1953). *The measurement of particle size in very fine powders*, Constable & Co., London.

Rosen, J. J. (1960). The gradient projection method for non-linear programming, *SIAM J. Appl. Math.* 9, pp 514-532.

Rosen, J. B. & Kreuser, J. (1972). A gradient projection algorithm for non-linear constraints in *Numerical methods for non-linear optimization* (Lootsma, F. A., ed.), Academic Press.

Sachs, Lothar (1978). *Estatística aplicada*, Editorial Labor S. A., Barcelona

Sander, L. M. (1987). Fractal growth, *Scientific American*,
Vol. 256, n° 1, pp. 82-88.

Schaback, R. (1985). Convergence analysis of the general
Gauss-Newton algorithm, *Numer. Math.*, 46, pp.
281-309.

Schildt, Herbert (1986). *Advanced Turbo Pascal: program-
ming & techniques*, Osborne McGraw-Hill, Berkley,
California.

Serra, J. (1971). Le concept de granulométrie, *Revue de
L'Industrie Minérale - Mines*, Avril 1971, pp. 319-
-322.

Siegel, Sidney (1956). *Non-parametric statistics for the
behavioural sciences*, McGraw-Hill Kogakusha, Tokyo.

Shanno, D. F. (1970). Conditioning of quasi-Newton methods
for function minimization, *Mathematics of Computation*,
Vol. 24, n° 111, pp. 647-656.

Shanno, D. F. (1970). Parameter selection for modified Newton methods for function minimization, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 7, nº 3, pp. 366-372.

Shannon, R. E. (1975). *Systems simulation: the art and science*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs N. J..

Shulman, W. (1962). Better control of particle sizes, *Chemical Engineering*, September 3, 1962, pp. 129-130.

Shultz, c. W. & Tippin, R. B. (1970). Fundamentals of statistical screening, *Transactions of AIME*, Vol. 247, pp. 314-316.

Smith, F. B. & Shanno, D. F. (1971). An improved Marquardt procedure for nonlinear regressions, *Technometrics*, Vol. 13, nº 1, pp. 63-74.

Somasundaran, P., ed. (1986). *Advances in mineral processing*, Society of Mining Engineers, Inc., Littleton, Colorado.

Spendley, W., Hext, G. R. & Himsworth, F. R. (1962). Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation, *Technometrics*, Vol. 4, nº4, pp. 441-461.

Swann, W. H. (1972). "Direct search methods" in *Numerical Methods for Unconstrained Optimization* (W. Murray, ed.) pp. 13-28, Academic Press, London and New York.

Swann, W. H. (1972). "Constrained optimization by direct search" in *Numerical methods for Constrained Optimization* (P. E. Gill and W. Murray, eds.), pp. 191-217, Academic Press, London and New York.

Taggart, A. F. (1948). *Handbook of mineral dressing*, John Wiley & Sons, Inc., London.

Tarján, G. (1981). *Mineral processing Vol 1: Fundamentals, comminution, sizing and classification*, Akadémiai Kiadó, Budapest.

Tavares, L. V. & Correia, F. C. (1985). *Optimização linear e não-linear*, Fundação Calouste Gulbenkian, Lisboa.

Testut, R. J. (1955). *La préparation des minerais*, Document S.I.M., Société de L'Industrie Minérale. Paris.

Treasure, C. R. G. (1965). Fine particle-size classification, *Trans. Instn. Chem. Engrs.*, Vol. 43, 1965.

Viswanathan, K., Aravamudhan, S. & Mani, B. P. (1984). Separation based on shape; Part I: Recovery Efficiency of Spherical particles, *Powder Technology*, n°39, pp. 83-91.

Vygodski, M. (1975). *Aide-mémoire de mathématiques supérieures*, Editions Mir, Moscou.

Waldie, B. (1973). Separation of particles according to shape, *Powder Technology*, Vol. 7, n°4, pp. 244-246.

Weiss, N. L. (1985). *Mineral processing handbook*, Society of Mining Engineers of AIME, New York.

Weizsäcker, C. F. von (1980). *The unity of nature*, Farrar, Straus and Giroux, Inc., New York.

- Welsh, Jim & Elder, John (1979). *Introduction to Pascal*,
Prentice Hall, Englewood Cliffs N.J..
- Whitby, K. T (1954). *The mechanics of fine sieving*, Thesis,
University of Minnesota, Minneapolis, Minn
- Wilkinson, J. H. (1965). *The algebraic eigenvalue
problem*, Oxford, Clarendon Press.
- Wilkinson, J. H. & Reinsche, C. (1971). *Linear algebra,
Handbook for automatic computation*, Springer Verlag,
Berlin.
- Wilkinson, J. H. (1971a). Modern error analysis, *SIAM
Review*, Vol. 13, nº 4, pp. 548-568.
- Wills, B. A. (1985). *Mineral processing technology*, Per-
gamon Press, Oxford and London.
- Wirth, Niklaus (1982). *Programação sistemática em Pascal*,
Editora Campus, Rio de Janeiro.
- Wolfram, S. (1984). Computer software in science and mathe-
matics, *Scie. American*, vol. 251, nº 3, pp. 140-151.

Yamamoto, T. (1987). A convergence theorem for Newton-like methods in Banach spaces, *Numer. Math.*, 51, pp. 545-557.

Zoutendjik, G. (1970). "Nonlinear programming: computational methods" in *Integer and Nonlinear Programming* (J. Abadie, ed.), pp. 37-86, North-Holland, Amsterdam.



FACULDADE DE ENGENHARIA
UNIVERSIDADE DO PORTO

BIBLIOTECA



0000008540