

UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO ESCOLA DE MINAS DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MINAS



LUIS FILLIPE NUNES MAGALHÃES

DESENVOLVIMENTO DE *SOFTWARE* PARA DIMENSIONAMENTO E SIMULAÇÃO DE ESPESSADORES

OURO PRETO 2025 Luis Fillipe Nunes Magalhães

DESENVOLVIMENTO DE *SOFTWARE* PARA DIMENSIONAMENTO E SIMULAÇÃO DE ESPESSADORES

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao curso de graduação em Engenharia de Minas da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto, como requisito parcial para obtenção do grau de Engenheiro de Minas.

Orientador: Prof. Dr. Vladmir Kronemberger Alves

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO



Bibliotecário(a) Responsável: Sione Galvão Rodrigues - CRB6 / 2526



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO REITORIA ESCOLA DE MINAS DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA DE MINAS



FOLHA DE APROVAÇÃO

Luis Fillipe Nunes Magalhães

Desenvolvimento de software para dimensionamento e simulação de espessadores

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Engenheiro de Minas

Aprovada em 09 de maio de 2025

Membros da banca

[Doutor] - Vladmir Kronemberger Alves - Orientador (UFOP) [Engenheiro de Minas] - Fernando Barros Puperi - (UFOP) [Engenheiro de Minas] - Lucas Monteiro Correia e Lopes - (Nexa Resources)

Vladmir Kronemberger Alves, orientador do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 12/05/2025



Documento assinado eletronicamente por **Vladmir Kronemberger Alves**, **PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 12/05/2025, às 14:26, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do <u>Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015</u>.



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <u>http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?</u> <u>acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0</u>, informando o código verificador **0908724** e o código CRC **8D5B9926**.

Referência: Caso responda este documento, indicar expressamente o Processo nº 23109.005903/2025-31

Aos meus pais, Juliana e Allescio, e a todos os meus familiares – em especial, à minha avó, Maria Célia – que me ensinaram a lutar por aquilo que amo.

Aos meus amigos e irmãos da vida, que estiveram e estarão comigo em cada um de meus atos.

AGRADECIMENTOS

À minha família, em especial, Juliana, Allescio, Maria Célia, Sérgio, Tatiana, Serginho, Maíla, Daniel, Cecília, Maria José (*in memorian*), Mário, Ana Luiza e Rosiane.

Aos amigos da graduação, Rafaela, Cleyson, Luisa, Kelly e Isabela. Estarei sempre com vocês.

Àqueles com quem dividi um lar e uma nova família: Daniel, Bruno, Phillipe, Raphael, Marcos, Lázaro e Caio.

Aos amigos de Lavras e Ouro Preto.

Ao professor Vladmir, por me orientar neste trabalho e me ensinar a essência da engenharia.

Aos amigos que conheci no estágio, em especial, Breno, Charliston, Lucas, Aroldo, Jorge, Lemyr, Ariane, Eduardo, Gabriela, Luis e Ana Célia.

À Beatriz, pela paciência e carinho infindos.

A todos que me ajudaram de formas diversas na conclusão deste trabalho e em todos os momentos fáceis e difíceis da vida.

Ao acaso, que, de forma ordenada ou não, resultou nas belezas do universo.

"Afirmar que se detém o conhecimento absoluto é se tornar monstruoso. O conhecimento é uma aventura interminável na borda da incerteza".

(Frank Herbert)

RESUMO

O contexto brasileiro da indústria mineral foi extremamente abalado por desastres de rompimentos de barragens de rejeitos em Mariana e Brumadinho, ocasionando uma normatização que busca ser mais eficaz na gestão de rejeitos da indústria mineira. Sendo assim, muitos empreendimentos se adaptaram no quesito de disposição de rejeitos, dando preferência a métodos de disposição à seco. Esse impulso faz com que cresça ainda mais a importância das operações de separação sólido-líquido de espessamento e filtragem, sendo aplicados mais amplamente no tratamento de rejeitos. Sendo assim, surge a necessidade da criação de ferramentas de engenharia que busquem contextualizar as teorias clássicas de sedimentação e aplicá-las com métodos modernos. O presente trabalho busca motivar a criação de ferramentas dessa espécie, trazendo uma nova roupagem para o método de dimensionamento de espessadores de Talmadge e Fitch, utilizando interpolação por *splines* cúbicas para construção de curvas de sedimentação, seguida pela construção de retas de compactação, sedimentação livre e a bissetriz e, por fim, a reta tangente à curva de sedimentação, finalizando a construção geométrica do método de Talmadge e Fitch. Todos esses conceitos foram agrupados em um *software* desenvolvido em linguagem Pascal, com a IDE Lazarus.

Palavras-chaves: espessamento; Pascal; separação sólido-líquido; *splines* cúbicas; Talmadge e Fitch.

ABSTRACT

The Brazilian mining industry has been profoundly impacted by dam failures in Mariana and Brumadinho, leading to the establishment of stricter regulations aimed at improving tailings management. Consequently, many enterprises have adapted their tailings disposal practices, favoring dry disposal methods. This shift has further highlighted the importance of solid-liquid separation operations, such as thickening and filtration, which are increasingly applied in tailings treatment. As a result, there is a growing need for engineering tools that contextualize classical sedimentation theories and adapt them to modern methods. This study aims to encourage the development of such tools by presenting a new approach to the Talmadge and Fitch thickener sizing method. The approach employs cubic spline interpolation to construct sedimentation curves, followed by the development of compaction lines, free-settling lines, the bisector, and the tangent line to the sedimentation curve, completing the geometric construction of the Talmadge and Fitch method. All these methods were integrated into a software developed in Pascal language using the Lazarus IDE.

Keywords: cubic splines; Pascal; solid-liquid separation; Talmadge and Fitch; thickening.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação de teste de sedimentação (a) e curva tempo X altura de in	terface (b).
Figura 2 – Zonas de sedimentação em um espessador.	
Figura 3 – Modelo de espessador de Dorr à esquerda. Modelo de espessador de alta	capacidade
da Westech à direita	
Figura 4 – Espessador de alta capacidade	
Figura 5 – Espessador de Lamelas	
Figura 6 – Dimensionamento de espessadores para diferentes materiais por diferente	es métodos.
	23
Figura 7 – Determinação do Ponto crítico e tempo para <i>underflow</i>	25
Figura 8 – Determinação das inflexões da curva de sedimentação	25
Figura 9 – Construção simplificada de Talmadge e Fitch	
Figura 10 – Distinção entre tipos de interpolação com a função original	
Figura 11 – Exemplo de fenômeno de Runge.	
Figura 12 – Comparação de diversos métodos de Spline	
Figura 13 – Sistema linear de uma <i>spline</i> cúbica interpolante genérica	
Figura 14 – Sistema genérico para derivadas primeiras dos pontos	
Figura 15 – Exemplo de sistema triangular inferior.	
Figura 16 – Exemplo de sistema triangular superior	
Figura 17 – Método de Gauss-Seidel	46
Figura 18 – Matrizes componentes do método de Gauss-Seidel	47
Figura 19 – Diagrama representando uma matriz de banda	
Figura 20 – Diagrama de dispersão.	
Figura 21 – Interpolação dos pontos exemplificados.	50
Figura 22 – Exemplo de interpolação linear para correlacionar dados experimentai	s 51
Figura 23 – Ajuste linear dos dados do Quadro 2 (em azul).	53
Figura 24 - Representação da distância dos elementos de uma variável à n	nédia (a) e
representação da distância dos valores de uma variável a uma reta de regressão (b).	54
Figura 25 – Construção geométrica da bissetriz	56
Figura 26 – Representação das retas e sua interseção	57

Figura 27 – Resolução pelo GeoGebra.	58
Figura 28 – Comparação entre a solução GeoGebra e a solução encontrada	59
Figura 29 – Interface inicial do aplicativo.	60
Figura 30 – Exemplo de planilha aplicável no software	61
Figura 31 – Sistema genérico para interpolação por splines cúbicas.	62
Figura 32 – Representação geométrica da técnica utilizada.	63
Figura 33 – Formulário "construção geométrica"	67
Figura 34 – Procedimento para construção geométrica para dimensionamento	68
Figura 35 – Esquema dos menus superiores do software.	69
Figura 36 – Formulário de dimensionamento do espessador	69
Figura 37 – Dados do ensaio de sedimentação do exercício proposto por Chaves (2004)	70
Figura 38 – Tempo crítico determinado pelo software	71
Figura 39 – Resultados do dimensionamento	71
Figura 40 – Resultados do dimensionamento, para o tempo crítico de 0,6 horas	72

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Erros do ajuste via interpolação linear	52
Quadro 2 – Erros do ajuste via interpolação e ajuste linear	53

SUMÁRIO

1	1. INTRODUÇÃO	
	2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	14
	2.1 A separação sólido-líquido e a sedimentação no tratamento de n	ninérios 14
2	2.1.1 Introdução à separação sólido-líquido, espessamento e sedimentação no b	eneficiamento
de minér	rios	14
2	2.1.2 Tipos de espessadores	19
2	2.1.3 Dimensionamento de espessadores	22
	2.2 As splines cúbicas na interpolação de fenômenos naturais	
	2.2.1 Definição algébrica das splines interpolantes cúbicas	32
2	2.2.2 Metodologia usual de resolução de <i>splines</i> cúbicas interpolantes	36
	2.3 Teoria matricial e soluções numéricas de sistemas lineares	41
	2.3.1 Matrizes de banda e soluções de sistemas lineares	48
	2.4 Ajuste linear por mínimos quadrados	49
	2.5 Construção de retas bissetrizes de duas retas quaisquer	55
	2.6 Abordagem de análise numérica, estatística e geométrica na co	onstrução de
curva	as de sedimentação e dimensionamento de espessadores por Talmadge	e Fitch 59
	3. CONSTRUÇÃO DO SOFTWARE	60
	3.1 A IDE Lazarus	60
	3.2 Desenvolvimento de s <i>oftware</i> de dimensionemento de esnessado	ros 61
	3.2 Desenvolvimento do sojiware de dimensionamento de espessado	10501
2	4. INTERFACE DO <i>SOFTWARE</i> E ESTUDO DE CASO	67
	4.1 Interface	67
	4.2 Estudo de caso	70
4	5. CONCLUSÃO	74
]	REFERÊNCIAS	75

1. INTRODUÇÃO

Os recursos minerais extraídos nas operações mineiras são denominados na literatura do tratamento de minérios como Run-of-mine (ROM). A função principal do beneficiamento de minérios é adequar os minerais para a metalurgia extrativa (metálicos) ou para produção de produto final, como minérios de potássio e carvão. As principais etapas do beneficiamento envolvem a liberação física das partículas valiosas através da redução de tamanho e a concentração dessas partículas valiosas, gerando um produto concentrado, de valor econômico, e um rejeito sem valor econômico, que é descartado (Wills, 2016). No entanto, em muitas operações atuais, buscam-se alternativas para reaproveitar e agregar valor aos rejeitos. Caso contrário, a disposição deles é um dos temas centrais no tratamento de minérios atualmente.

A grande maioria das operações unitárias de beneficiamento de minérios é feita à úmido e, consequentemente, antes do transporte dos concentrados, surge a necessidade de uma etapa de desaguamento (ou separação sólido-líquido) contempladas geralmente pelas etapas de espessamento e filtragem (Luz, 2010). Além disso, há cada vez mais atenção na destinação final dos rejeitos, tornando necessária a aplicação de métodos de separação sólido-líquido para sua adequação e posterior disposição, sendo a disposição a seco cada dia mais incentivada por motivos geotécnicos, além de possibilitar a recirculação de água no processo.

O espessamento é um método de desaguamento que usa da sedimentação das partículas sólidas em meios de baixa turbulência como princípio de separação entre a água de processo e os sólidos de interesse. No espessamento são gerados dois fluxos: o *underflow* de polpa espessada com menor taxa de diluição do que a alimentação do espessador, e o *overflow* clarificado com baixa presença de sólidos. Os espessadores podem ser utilizados em diversas situações, como: adequação de polpas para a próxima operação unitária, espessamento de rejeitos para disposição mais adequada, recuperação da água de processo para recirculação e recuperação de sólidos em etapas hidrometalúrgicas (França e Massarani, 2010).

Durante a história do desenvolvimento do espessamento, diversas teorias foram construídas, buscando modelar os complexos fenômenos que envolvem a sedimentação, de modo que esses métodos – hoje ditos clássicos – pudessem ser aplicados na engenharia e no dimensionamento dos espessadores industriais.

A indústria da mineração, assim como tantas outras, busca acompanhar as inovações tecnológicas hodiernas, adaptando-as às suas necessidades, visando aperfeiçoar os trabalhos de

engenharia com ferramentas modernas. Nesse sentido, o uso de *softwares*, de planilhas eletrônicas e da programação é extremamente rotineiro para engenheiros de processos em todo o mundo, universalizando o acesso a ferramentas confiáveis e de fácil utilização. Dessa forma, o trabalho desenvolvido busca demonstrar a importância e motivar a criação de ferramentas que tragam nova roupagem para antigos métodos de engenharia de minas, sob a luz da utilização de modelos matemáticos aplicados numericamente, visando construir uma ferramenta poderosa e de simples aplicação para dimensionamento e simulação de espessadores, tanto de concentrados, quanto de rejeitos.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 A separação sólido-líquido e a sedimentação no tratamento de minérios

2.1.1 Introdução à separação sólido-líquido, espessamento e sedimentação no beneficiamento de minérios

Com poucas exceções, as rotas de beneficiamento mineral requerem o uso de água em diversas operações unitárias componentes do processo. Algumas das principais são: flotação, lixiviação, moagem, classificação por hidrociclones, concentração magnética, concentração gravimétrica, dentre outras. A separação sólido-líquido surge como necessária para se adequar a fração de água em produtos finais (para transporte, venda ou disposição) ou intermediários (para otimização das próximas etapas do processo de beneficiamento) (Wills, 2016).

Em usinas de beneficiamento, a separação sólido-líquido pode representar uma parte relevante dos custos operacionais. Valadão e Araujo (2007) comentam que usinas de cobre têm os custos da fragmentação, flotação e separação sólido-líquido como principais e que, em plantas de minério de ferro do quadrilátero ferrífero, a fração dos custos com o desaguamento pode estar entre 15% e 40% do total. Além dos custos com energia, os equipamentos podem necessitar de grandes áreas de instalação (espessadores) ou de bases e prédios robustos para a boa operação (filtros).

Na separação sólido-líquido, geralmente, é gerado um produto de sólidos mais água, com concentração de sólidos mais alta que na alimentação, e um produto de água com a menor fração de sólidos possível (geralmente até desprezível). A alta concentração de sólidos de um produto e a predominância de água no outro indicam a eficiência de separação (Svarovsky, 2001).

No processamento de minérios, um dos métodos de separação sólido-líquido mais utilizados é baseado na sedimentação, que requer uma diferença entre a massa específica do sólido e do líquido, critério cumprido em todas as etapas de beneficiamento usuais (Wills, 2016).

O equipamento responsável por utilizar a sedimentação no tratamento de minérios é o espessador. Um espessador é um tanque cilíndrico com fundo cônico que é alimentado pelo centro com baixas turbulências (Chaves, 2004). Após um certo tempo de residência as

partículas sólidas sedimentam e são retiradas pela tubulação de *underflow* na base do equipamento, com concentração maior de sólidos em comparação com a alimentação. Pela dinâmica da sedimentação forma-se uma camada de água clarificada que transborda em uma calha que circunda o equipamento (*overflow*).

Os espessadores têm diâmetros que podem variar de 3 a 100 metros, enquanto as plantas de porte médio, geralmente, têm espessadores de 20 a 50 metros de diâmetro (Dahlstrom, 2011). Esses equipamentos podem receber polpa com 5-10% de sólidos e concentrá-las à 50-75%, sendo que essa limitação de adensamento se deve a capacidades de bombeamento das bombas de polpa (Chaves, 2013). Um espessador bem operado e dimensionado é capaz de produzir um *overflow* de água com uma quantidade desprezível de sólidos além de um *underflow* com fração de sólidos dentro do critério de projeto (Chaves, 2004). Cada vez mais a qualidade do *overflow* se torna importante, devido às possibilidades na recirculação de água de processo (Wills, 2016).

Os espessadores são equipados com um rastelo central – também chamado de *rake* – que gira lentamente em profundidade na zona de maior concentração de sólidos e tem, dentre outras funções, a de arrastar o material compactado para o *underflow*, na região central no fundo do tanque (Chaves, 2004). O torque do *rake* é uma variável de processo que está diretamente ligada à segurança operacional e do mantenimento do espessador, de modo que um alto torque indica um aumento na concentração de sólidos no *underflow* (França e Massarani, 2010).

A alimentação do espessador é feita por um componente de tubulação denominada *feedwell*, também localizado na parte central do espessador, que é responsável pela alimentação dividida em fluxos de direção oposta, de modo que a turbulência seja quebrada e a polpa entre com baixa energia no sedimentador (Chaves, 2004).

Algumas considerações importantes devem ser salientadas no projeto de um espessador, como se verá adiante. Dimensioná-lo, à priori, nada mais é do que definir as dimensões do tanque cilíndrico cônico. No entanto, pela escala da construção do espessador (podendo chegar a tanques de 100 metros) considerações estruturais devem ser sempre observadas, como o local da construção, o método de suporte das estruturas centrais (ponte, coluna, *caisson*) e o esquema de tubulações (diâmetro, subterrânea ou não, material dos tubos) (Chaves, 2013).

Espessadores, em certos casos, podem ser usados como vantagens de controle operacional e estratégico. Um exemplo é que taxa de *underflow* de espessadores de concentrado pode ser diminuída a depender de problemas na filtragem (aumentando também a concentração de sólidos) ou aumentada momentaneamente em situações de maior necessidade de produção

diária por estratégia operacional/comercial. Chaves (2004) salienta que a prática de usar o espessador como reserva de material é perigosa para sua estabilidade operacional, de modo que o risco de aterramento é relevante e pode causar prejuízos imensos.

Em plantas com espessadores de concentrado deve-se tomar cuidado especial com os fechamentos de produções diárias e dos turnos, devido ao tempo de residência relevante que uma polpa pode ficar no espessador. Um material amostrado na etapa de concentração anterior pode não representar o material que será produzido pelo *underflow* do espessador (e, consequentemente, na filtragem) a depender da estabilidade da planta.

Para dimensionar um espessador, deve-se estudar a sedimentação característica de sua alimentação através de um teste de sedimentação descontinuada em proveta. A literatura reconhece que nas polpas de minério a sedimentação está ligada a fenômenos de transporte em que a partícula sólida imersa em suspensão sofre ação da gravidade, forças de empuxo e de resistência ao movimento (França e Massarani, 2010).

A sedimentação enfrenta problemas, principalmente com partículas finas, devido à natureza dinâmica de sua dispersão em água. A partir desse fato, surgiram novas tecnologias que visam aglomerar essas partículas, facilitando a sua sedimentação (Svarovsky, 2001).

Como descrito por Wills (2016), com a diminuição do tamanho das partículas, algumas propriedades dos sólidos começam a predominar em detrimento de outras. Na sedimentação dos finos, o efeito das cargas livres na superfície das partículas gera forças relevantes de atração e repulsão eletrostática. Como para partículas mais finas temos maiores áreas superficiais totais e menores massas individuais, isso resulta em um fenômeno de movimento browniano. Geralmente tal fenômeno é reconhecido em misturas coloidais, sendo um colóide definido como partículas menores que 1 μ m (Svarovsky, 2001).

As substâncias denominadas coagulantes atuam nas menores partículas de uma polpa de minérios, formando coágulos. Para uma população um pouco mais grosseira, os floculantes são utilizados com o mesmo intuito de aglomerar e aumentar a velocidade de sedimentação. O pH é também importante no controle das cargas superficiais, já que a concentração dos íons $H^+e \ OH^-$ atuam na intensidade das repulsões eletroestáticas (Guimarães, 2010). A variedade de reagentes coagulantes e floculantes aplicados na indústria mineral é extensa e os mecanismos de atuação dos reagentes são diversos e podem depender de fenômenos de superfície que são característica do minério tratado, de modo que o uso dos reagentes pode associar-se até mesmo a etapas de anteriores de concentração.

Uma sedimentação típica pode ser descrita por uma sequência de acontecimentos. Toma-se uma polpa homogênea em um tempo inicial t_0 que está livre para sedimentar; ao passar um intervalo de tempo t_1 as partículas de maior densidade sedimentam promovendo também o deslocamento do fluido em sentido oposto (ascendente); em um intervalo de tempo t_2 as partículas menos densas se sedimentam, devido à superioridade da força gravitacional que age sobre elas em relação à força de ascensão da água deslocada; em um tempo t_3 forma-se uma zona de compactação correspondente ao adensamento da polpa em razão da ação da força gravitacional o que causa uma desaceleração na sedimentação dessa interface, devido ao aumento na probabilidade de interação entre os sólidos. Paralelamente às sedimentações, forma-se uma interface de água clarificada. Após a compactação e o fim da sedimentação, o fenômeno dominante em um tempo t_4 é o da acomodação do leito sedimentado (França e Massarani, 2010).

Para a execução do ensaio de sedimentação em proveta é necessária uma proveta de 2 litros preenchida com 2 litros de polpa em uma superfície plana e estável. É recomendável o uso de uma proveta milimetrada para que seja possível fazer o registo dos deslocamentos da interface água clarificada-polpa no tempo. É necessário que a polpa que alimenta o teste seja representativa em fração de sólidos da polpa que alimentará o espessador, já que a fração de sólidos está ligada com a velocidade de sedimentação, como mencionado acima (França e Massarani, 2010).

Com um agitador, deve-se homogeneizar a polpa e com o cronômetro o operador deve anotar a altura da interface entre certos intervalos de tempo. O intervalo de tempo entre marcações vai do bom senso do operador do teste. Como visto na descrição temporal, inicialmente, interface se desloca rapidamente na chamada zona de sedimentação livre, sendo necessários intervalos de tempo mais curtos para melhorar a curva final do teste. Após esse período inicial, pode-se aumentar o intervalo sem grandes problemas (França e Massarani, 2010).

Diversas variáveis atuam na possibilidade da boa execução do teste pelo técnico responsável, minérios de diversas granulometrias e composições são testados por um método baseado na capacidade de se visualizar a olho nu, pelo menos, 1 interface (água clarificada e polpa com sólidos em sedimentação). A depender do minério, pode ser que essa interface não fique tão clara ao operador do teste. Para contornar isso, o autor deste trabalho cita como exemplo um teste de sedimentação de minério sulfetado, o qual foi necessário que o operador

do teste colocasse uma lanterna entre a parede e a proveta para que a interface aparecesse claramente. Em todo caso o acúmulo de finos no que deveria ser o clarificado pode atrapalhar essa visualização. Caso não haja solução, o teste só poderá ser bem feito com reagentes coagulantes ou floculantes.



Figura 1 – Representação de teste de sedimentação (a) e curva tempo X altura de interface (b).

Fonte: França e Massarani (2010).

Em casos em que as partículas têm tendência a formar flocos (naturalmente ou com uso de reagentes), haverá uma diferença no comportamento da sedimentação. As partículas grossas e finas sedimentarão juntas, já que o movimento de sedimentação das mais densas também arrastará as menos densas, formando os flocos. Assim, as partículas terão a mesma velocidade, o que é chamado de sedimentação por fase (Chaves, 2004).

Figura 2 – Zonas de sedimentação em um espessador.



Fonte: Chaves (2004).

A zona de compressão é onde o *rake* atua direcionando o leito depositado para o *underflow*. A zona 1 é onde, geralmente, se alimenta o espessador que passa a sedimentar e passa por uma zona de transição (zona 3) e a água que ascende vai para a zona 4 de clarificação e transborda para o *overflow* (Chaves, 2004). É importante salientar que essa divisão nada mais é que uma maneira didática e pouco realista de entender o fenômeno complexo da sedimentação (King, 1955 apud Chaves, 2004).

Na zona de sedimentação livre, a depender da concentração de sólidos na proveta, geralmente, as partículas encontram poucos obstáculos para sua sedimentação e as leis físicas que governam esse movimento são as da mecânica clássica. No entanto, como ressaltado por Chaves (2004), apesar do nome de sedimentação livre e da ação da gravidade, as partículas não estão em queda livre. Na verdade, como ressaltado por Guimarães (2010), estão sobre o regime preconizado pelo teorema do empuxo de Arquimedes, que teoriza o aparecimento da força de empuxo no sólido no sentido ascendente, que é numericamente igual ao peso do líquido deslocado pela partícula, sendo que, se a densidade do sólido for maior que a densidade do líquido, a força peso e, portanto, a sedimentação, prevalecerá.

Nas zonas onde há maior concentração de sólidos as partículas começam a interferir umas com as outras, causando colisões e interferências eletroquímicas. Além disso, o líquido ascendente forma fluxos não paralelos entre os espaços diminutos dos sólidos causando interferências na sedimentação (Guimarães, 2010). Esse regime é chamado de sedimentação por canalização e se localiza temporalmente na transição entre a sedimentação livre e a compressão (Chaves, 2004).

2.1.2 Tipos de espessadores



Figura 3 – Modelo de espessador de Dorr à esquerda. Modelo de espessador de alta capacidade da Westech à direita.

Fonte: Dorr (1936) apud Guimarães (2010); Guimarães (2010).

Os espessadores geralmente podem ser de três tipos: convencionais, de alta capacidade ou de alta densidade. Os espessadores de alta capacidade conseguem espessar a mesma quantidade de minério que um espessador convencional com um menor tamanho de equipamento. Os espessadores de alta densidade geralmente tem tanques mais profundos e descarregam *underflows* com 70% ou mais de sólidos e devem possuir bombas especiais para realizar o bombeamento com essas densidades de polpa. Geralmente são usados quando uma alta recuperação de água é necessária ou na formação de pastas para *pastefill* (Dahlstrom, 2011).



Figura 4 – Espessador de alta capacidade.

Fonte: Adaptado de Dahlstrom (2011).

Nos espessadores de alta capacidade, geralmente, predomina-se o uso do regime de sedimentação por fases com polpa floculada e/ou coagulada. Isso resulta em menores tamanhos de equipamento para a mesma capacidade de espessamento em troca de custos com reagentes. Sendo assim, é necessário que o *feedwell* não promova turbulências (atrapalhando a ação dos polímeros floculantes) e promova a boa mistura entre polpa e reagente. Geralmente a altura de alimentação é mais próxima da zona de compactação do que nos espessadores convencionais (Chaves, 2004).

Há ainda a possibilidade de uma mudança no projeto dos espessadores que visa melhorar ainda mais a eficiência. São os chamados espessadores de alimentação submersa, cuja única modificação é novamente na altura de alimentação, que passa a ser no leito de compactação. O princípio é promover a não necessidade da sedimentação livre, aprisionar as partículas sólidas no leito e promover a ascensão da água pela canalização no leito de sólidos (França e Massarani, 2010).

Em espessadores de rejeitos ou concentrados de flotação pode ocorrer um surgimento excessivo de espumas mineralizadas, devido à hidrofobicidade desses materiais aliada às condições físico-químicas da polpa após a flotação. A depender do caso, as espumas podem escapar para o *overflow* dos espessadores, o que pode causar problemas de clarificação, além de acarretar perdas relevantes de recuperação metálica. Para enfrentar isso, são colocados *sprays* de água superficial nos espessadores que quebram a espuma permitindo a sedimentação do mineral nelas acumulado. Os *sprays* devem cobrir todo o setor circular do espessador, de modo a não criar caminhos preferenciais para as espumas mineralizadas.



Figura 5 – Espessador de Lamelas.

Fonte: França e Massarani (2010).

Um espessador de lamelas é um equipamento mais disruptivo que os outros modelos, que propõe reduzir a área necessária para o espessamento e, consequentemente, os custos de projeto e o tamanho dos equipamentos. Em todos os espessadores vistos até o momento, as partículas sólidas sedimentavam após percorrerem iguais distâncias. O espessador de lamelas tem uma proposta de otimização da área de sedimentação através da inserção de placas inclinadas, de modo que se crie um gradiente de distância percorrida em função da velocidade de sedimentação das partículas. As partículas ao colidirem com as placas inclinadas após uma distância qualquer são arrastadas pela superfície inclinada até a descarga. Os resultados do *overflow* também são muito satisfatórios quanto à clarificação da água (Chaves, 2004).

2.1.3 Dimensionamento de espessadores

Segundo Chaves (2004), a teoria da sedimentação foi desenvolvida por Coe e Clevenger, em 1916, que primeiro detectaram as zonas de sedimentação e teorizaram sobre o *scale-up* para um equipamento industrial. Kynch desenvolveu a teoria matemática da sedimentação que fomentou a pesquisa de outros teóricos, entre eles, Talmadge e Fitch, Wilhelm e Naide.

Ainda segundo Chaves (2004), os ensaios de sedimentação em escala piloto geralmente não são representativos e escalonáveis para um espessador industrial, sendo os métodos desenvolvidos através de testes de sedimentação em proveta os mais confiáveis.

A razão de espessamento é um dos parâmetros fundamentais para o dimensionamento dos espessadores. Esse valor representa a área necessária de espessamento por unidade de massa seca de alimentação por unidade de tempo Chaves (2004). No dimensionamento de filtros é definida uma grandeza similar, porém inversa, denominada de razão de filtragem, que expressa a massa por unidade de área de filtragem. O escalonamento é feito também de forma semelhante: sabendo a taxa de alimentação do espessador e a razão de sedimentação conseguimos a área necessária do espessador, assim como nos filtros conseguimos a área necessária de filtragem.

No dimensionamento de espessadores, os métodos clássicos mais utilizados na indústria (para espessadores convencionais) são os métodos de Talmadge e Fitch, Wilhelm e Naide, Coe e Clevenger e Oltmann. Cada método possui suas próprias limitações, vantagens e desvantagens. Guimarães (2010) demonstrou, realizando o dimensionamento de espessadores para diferentes concentrações iniciais e materiais, que os métodos de Talmadge-Fitch, Coe e Clevenger e Oltmann, se bem aplicados, dimensionam um espessador muito semelhante em diâmetro, e o método de Wilhelm e Naide tende a dimensionar um espessador de maior diâmetro.



Figura 6 – Dimensionamento de espessadores para diferentes materiais por diferentes métodos.

Fonte: adaptado de Guimarães (2010).

Os fluxos testados por Guimarães em 2010 correspondem à mina do pico, sendo os de índice ITM o correspondente à amostras de lamas espessadas em diferentes circuitos de tratamento de minérios e o Rejeito corresponde ao rejeito final.

Os fornecedores de espessadores também desenvolveram métodos de dimensionamento que fogem das abordagens clássicas (até mesmo utilizando ensaios de ciclo fechado de espessamento e equipamentos piloto). Segundo Chaves (2004), o bom senso e a experiência do dimensionador são predominantemente essenciais para conciliar os métodos e chegar a um equipamento satisfatório.

Os métodos clássicos dimensionam os espessadores de operação contínua partindo de ensaios de bancada em provetas como descrito anteriormente. Um problema que surge é a determinação do chamado tempo crítico. O tempo crítico é definido como aquele onde se inicia a zona de compressão, momento de sedimentação interferida pela alta presença de sólidos e de menores velocidades (Chaves, 2004).

Existem diversas formas de determinar o ponto crítico, muitas delas graficamente. Uma delas é feita através da construção de uma reta que represente a tendência aproximadamente linear do período de sedimentação livre e outra que represente a tendência aproximadamente constante da compactação. Traçadas essas retas, deve ser construída a bissetriz entre elas que por definição passará pela interceptação das duas. Tal reta deve interceptar a curva de sedimentação em algum trecho da zona de transição. Por esse ponto, se traça uma reta tangente à curva de sedimentação que interceptará a reta horizontal de maior concentração de polpa. Esse ponto de interseção terá como abscissa o tempo crítico (Chaves, 2004).

Na Figura 7 há um exemplo de determinação de ponto crítico. Primeiro se traça a curva de sedimentação e logo após as retas de sedimentação livre e compressão (retas tracejadas em preto) e, assim, a bissetriz entre as duas retas (em preto). No ponto onde a reta bissetriz interceptar a curva de sedimentação deve-se traçar uma reta tangente, representada em vermelho. Por fim, o ponto de abscissa, que corresponde à interseção entre a reta tangente e a reta de maior compressão (reta de menor altura de interface, representada em laranja) será o tempo crítico (fundamental para o método de dimensionamento de Talmadge e Fitch).



Figura 7 – Determinação do Ponto crítico e tempo para underflow (pesquisa direta).



Outra forma de determinar o ponto crítico é plotar a curva de sedimentação em escala log-log, o que fará com que os pontos de inflexão da curva fiquem ressaltados graficamente, como, por exemplo, na Figura 8, em que o ponto B é o início da zona de transição e o ponto C é o crítico e início da zona de compressão (Chaves).

Figura 8 – Determinação das inflexões da curva de sedimentação.



Fonte: adaptado de Chaves (2004).

Existem diversas variações desse método, baseadas em mudanças nas variáveis plotadas no gráfico log-log. No entanto, nem em todos os ensaios de sedimentação esses métodos deixarão tão claros os pontos de inflexão, a depender do tipo de material, qualidade e condições do ensaio, diferentemente do método descrito anteriormente, que sempre nos dará um tempo crítico. Uma ressalva relevante, novamente, é que o bom senso do dimensionador é importante na avaliação da representatividade do tempo crítico e de qualquer outro resultado advindo dos testes de sedimentação.

Nem todos os métodos de dimensionamento clássico utilizam o ponto crítico, mas ele, sem dúvidas, é importante em diversos aspectos de determinação do tempo de compactação total e tempo final da sedimentação livre. Pelo seu significado, o tempo crítico pode ajudar a guiar o engenheiro como sendo um tempo de residência, o qual se pode ter as melhores velocidades de sedimentação em qualquer teste ou projeto.

Em ensaios feitos pelo autor deste trabalho com cones desaguadores em escala piloto para se determinar vazões de alimentação utilizou-se como tempo de residência mínimo o tempo crítico determinado pelo teste em proveta e os resultados foram positivos e satisfatórios. Com um material de concentrado de chumbo e prata sulfetado foi possível atingir um *underflow* de 40% partindo de uma alimentação de 12%, com uma produção de um *overflow* clarificado. Foi possível aplicar essa sedimentação em teste industrial com resultados satisfatórios.

2.1.3.1 Método de Coe e Clevenger

No método de Coe e Clevenger é necessária a execução de diversos testes de sedimentação em bancada, cada um deles com diferentes concentrações de alimentação (Wills, 2016). A partir dos diversos testes os espessadores são dimensionados para cada um deles, resultando, obviamente, em diferentes áreas necessárias. Da miscelânea de testes feitos, escolhe-se aquele que retornou a maior área necessária do sedimentador (ou menor razão de sedimentação).

Para Coe e Clevenger a razão de sedimentação depende unicamente da velocidade de sedimentação livre e que essa velocidade em bancada é a mesma para um teste em bancada e uma operação industrial. Esse aumento da área necessária devido à variação de concentração inicial passa por um ponto máximo, justamente o maior espessador dimensionado pelos vários

testes de proveta (Chaves, 2004). O método de Coe e Clevenger não leva em conta diretamente os fenômenos de transição e compactação no dimensionamento da área do espessador.

Para calcular as áreas unitárias para cada teste de bancada é utilizada a fórmula de Coe e Clevenger conforme Equação 1:

$$\mu = fator * \frac{Rel \frac{\dot{s}gua}{solido} da Alim - Rel \frac{\dot{s}gua}{solido} da underflow}{\nu * d_p}$$
(1)

Sendo que v é velocidade de sedimentação e d_p a densidade de polpada alimentação. A relação água/sólido da alimentação será variável em cada teste. A velocidade de sólidos pode ser feita dividindo a altura pelo tempo das duas medidas iniciais dos testes.

Deve-se então plotar um gráfico com as razões de espessamento μ para as diversas concentrações iniciais testadas. A partir disso, deve-se pegar o valor mínimo e, ao multiplicálo pela taxa de alimentação de sólidos do espessador, tem-se a área necessária para o equipamento.

2.1.3.2 Método de Talmadge e Fitch

O método de Talmadge e Fitch tem em sua dedução elementos geométricos pertinentes à curva de sedimentação. Talmadge e Fitch utilizam a equação de Coe e Clevenger e a partir de deduções geométricas e diferenciais encontram uma nova forma de cálculo de área unitária, descrita na equação 2 (Talmadge e Fitch, 1955):

$$\mu = \frac{fator * t_c}{c_0 H_0} \tag{2}$$

O fator de escala depende das unidades utilizadas para o método. No sistema internacional é igual a 1,47, t_c é o tempo crítico, dado em horas, C_0H_0 é o produto entre a concentração inicial de sólidos dada em toneladas por metro cúbico, e a altura inicial dada em metros.

É válida a equação de balanço de massa ressaltada na equação 3:

$$C_0 H_0 = C_u H_u \tag{3}$$

Figura 9 – Construção simplificada de Talmadge e Fitch.



Fonte: adaptado de Wills (2016).

2.1.3.3 Método de Oltmann

O método de Oltmann é semelhante ao de Talmadge e Fitch utiliza uma construção geométrica diferente para determinar o tempo para atingimento do *underflow*. Localiza-se o ponto C por algum dos métodos de construção e traça-se uma reta ligando a altura inicial ao ponto C. Deve-se também localizar o H_u e construir uma reta paralela ao eixo dos tempos que interceptará a reta construída do ponto inicial ao ponto C no ponto de abscissa t_u (Guimarães, 2010).

Para encontrar a razão de espessamento e H_u pode-se utilizar as mesmas equações de Talmadge e Fitch. A diferença fundamental entre os métodos é a construção geométrica feita na curva de sedimentação.

2.1.3.4 Método de Wilhelm e Naide e a sensibilidade da zona de compressão

Os métodos anteriores, pela sua própria construção teórica, podem levar a erros de dimensionamentos em função de fenômenos na zona de compressão. Como demonstrado por Guimarães (2010) e pela Figura 6, o método de Wilhelm e Naide se distanciou dos métodos clássicos.

Diversos ensaios foram feitos por Wilhem e Naide e o modelo se baseia em uma relação de potência entre a velocidade de sedimentação e concentração em um certo tempo t. Devido a isso, o método está relacionado a construção de diversas retas e a determinação de diversas inclinações ponto a ponto do ensaio. Alves *et al.* (2007) comenta que essas estimativas podem levar a erros grosseiros e propõe um método alternativo para o dimensionamento por Wilhem-Naide.

2.1.3.5 Cálculo da altura do sedimentador e regra dos 3 pés.

Chaves (2004) demonstra um método simples para o cálculo da altura do espessador e a divide em 4 parcelas:

- Altura de clarificação: 2ft
- Altura de alimentação: 2ft
- Altura de transição:2ft
- Altura de compressão: 0,5-3 ft

Sendo assim a altura de um espessador varia entre 6,5 e 9 pés. Para o cálculo da altura de compressão, utiliza-se a equação

$$h_{comp} = \frac{V_{méd}}{\acute{a}rea} \tag{4}$$

sendo $V_{m\acute{e}d}$ a vazão volumétrica média de polpa na zona de compressão. Ao aplicar a equação 4, se a zona de compressão obtiver altura maior que 3 pés, adota-se esse valor limite e recalculase a área com a mesma equação, dimensionando um espessador de maior diâmetro.

2.2 As splines cúbicas na interpolação de fenômenos naturais

A interpolação tem como finalidade estimar valores intermediários de um conjunto de n pontos (x_k , $y_k comk = 0,1 ... (n - 1)$ (Campos Filho, 2007). Dentre as diversas técnicas de interpolação são notáveis a interpolação por polinômios e a interpolação por *splines*.

Em interpolação polinomial, dado um conjunto de *n* pontos, há um único polinômio *P* de grau s = 1, ... (n - 1), tal que $P(x_k) = y_k$, para k = 0, ... (n - 1). Sendo assim, em posse do polinômio interpolador, pode-se estimar numericamente o par (x, y) para qualquer $x \in [x_0, x_n]$ (Ruggiero e Lopes, 2000). A representatividade de uma interpolação polinomial é intrínseca à qualidade e quantidade dos pontos dados e da capacidade que um polinômio interpolador tem de reproduzir fielmente às características topológicas de uma função original (caso ela exista) que pode ou não ser bem retratada por um polinômio.

Alguns problemas podem surgir na interpolação polinomial, como será exemplificado mais adiante, de tal forma que, independentemente do grau do polinômio de interpolação, não é possível construir uma equação satisfatória para um conjunto de pontos quaisquer. Sendo assim, uma solução possível é a construção de funções de grau menor entre um menor conjunto de pontos, em interpolação por *splines* e é interpolado, sobre um par de pontos, um polinômio com imposições matemáticas que garantem a interpolação e continuidade, como apresentado na Figura 10 (Ruggiero e Lopes, 2000).



Figura 10 – Distinção entre tipos de interpolação com a função original.

Fonte: adaptado de Maindl (2018).



Figura 11 – Exemplo de fenômeno de Runge

Fonte: adaptado de Ruggiero e Lopes (2010).

Na Figura 10 pode-se comparar a interpolação polinomial com uma *spline* interpolante com o mesmo número de pontos. Na interpolação por *splines*, em cada trecho temos um polinômio diferente. No exemplo são 4 polinômios: entre A e B, B e C, C e D e D e E. É notável que as grandes variações entre os pontos A e B e D e E da interpolação polinomial são vistas com menor intensidade na *spline* interpolante.

Entre os pontos B e D nota-se uma distorção nos dois métodos, o que pode ser atribuído à variação abrupta da função original. Em geral, uma maior quantidade de pontos intermediários ajudaria a *spline* interpolante cúbica a convergir ainda mais para esse tipo de função (Ruggiero e Lopes, 2000; Maindl, 2018). Na Figura 11 verifica-se que a elevação do grau do polinômio de interpolação pode introduzir variações nos extremos dos intervalos que não condizem com a função original. Esse tipo de problema é chamado de fenômeno de Runge (Burden, 2016).

A origem do termo *spline* está ligada ao termo homônimo em inglês que se refere a uma régua flexível de metal que era utilizada para desenhos de curvas contínuas e lisas entre pontos fixados (Burden, 2016). O conceito puro de *spline* é divergente entre algumas bibliografias alguns definem *splines* como sendo cada subfunção de grau p definida entre dois pontos (Chapra, 2011; Quarteroni *et al.*, 2007; Campos Filho, 2007), enquanto outros defendem que uma *spline* é todo o conjunto das subfunções definidas entre dois pontos (nós) (Ruggiero e Lopes, 2000; Maindl, 2018).

Neste trabalho considera-se que a função $S_p(x)$ é a função *spline* interpolante e ela é composta por *splines* entre cada par de nós. Sendo assim, um polinômio $S_p(x), x \in [x_0, x_n], x_0 < x_1 < x_2 ... < x_n$ será uma *spline* interpolante de grau p se e somente se (Ruggiero e Lopes, 2000):

1) Em cada subintervalo $[x_k, x_{k+1}], k = 0, ..., (n-2)$ define-se uma subfunção de $S_p(x)$ de grau p denominada $s_i(x) \operatorname{com} x \in [x_k, x_{k+1}], i = 0, ... (n-2);$

2) $S_p(x)$ é contínua e tem (p-1) derivadas contínuas em todo o intervalo $[x_0, x_n]$;

3) $S_p(x_k) = y_k k = 0, ..., (n-1)$ (condição de interpolação, garantia de que todos os pontos dados estão contidos na função *spline* interpolante)

As *splines* interpolantes podem ser classificadas, quanto ao grau do polinômio definido, enquanto:

 a) Lineares: as quais o polinômio definido é de grau 1 e graficamente representa uma reta entre cada par de pontos do conjunto de dados interpolado. Geralmente não é de uso comum devido à descontinuidade da primeira derivada (Maindl, 2018);

b) Quadráticas: têm o grau do polinômio definido como 2 e graficamente representa uma parábola a cada par de pontos. Pouco utilizada devido à impossibilidade de garantir a continuidade da concavidade da curva (segunda derivada), apesar de garantir a continuidade da primeira derivada. Em particular, as *splines* quadráticas têm dificuldades em representar qualquer fenômeno físico que dependa, em algum ponto, da continuidade da segunda derivada (Maindl, 2018) – como é o caso de curvas de sedimentação, fenômeno que sofre aceleração variável – e a não continuidade da segunda derivada acarretaria uma não representatividade da variação da aceleração nesse sistema físico.

c) Cúbicas: têm o grau de polinômio definido como 3 e graficamente representa uma curva de grau 3. É a mais utilizada devido às garantias de continuidade da primeira e segunda derivada, o que ocasiona uma continuidade em suavidade e concavidade, além de representar bem fenômenos físicos de cinemática, justamente devido à continuidade da segunda derivada (Maindl, 2018).

2.2.1 Definição algébrica das splines interpolantes cúbicas

Alguns autores definem uma *spline* cúbica qualquer como sendo: $s_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i)^1 + d_i$ e, a partir daí, utilizam as mesmas definições de interpolação e continuidade das derivadas para chegar a um sistema genérico para *splines* cúbicas e construir,

assim, a *spline* cúbica interpolante (Maindl, 2018; Ruggiero e Lopes, 2000; McKinley e Levine, 2013). No entanto, neste trabalho será utilizada uma outra definição bem similar à utilizada por Chapra e Canale (2011) e, a partir dela, será definida uma matriz genérica para *splines* interpolantes cúbicas. Sendo assim, uma subfunção $s_i(x), x \in [x_k, x_{k+1}], s_i(x) \in [y_k, y_{k+1}]comk = 0, ... (n - 1) de uma função$ *spline* $interpolante <math>S_3(x)$ de grau 3 tem a fórmula:

$$s_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i$$
(7)

Para um conjunto de n+1 pontos, teremos (n-1) polinômios *splines*. Em cada um deles temos 4 incógnitas (a_i , b_i , c_i , d_i), portanto, são necessárias 4n – 4 equações. Essas equações são obtidas pelas definições de *splines*:

1) Condição de interpolação: $S_3(x_k) = y_k$, k = 0, ..., (n-1) (n-1) equações

2) Condição de continuidade: $s_i(x_{k+1}) = s_{i+1}(x_{k+1}), i = k = 0, ..., (n-1)$ (n-2) equações;

3) Continuidade da primeira derivada: $s'_i(x_{k+1}) = s'_{i+1}(x_{k+1}), i = k = 0, ... (n-1)$ (n-2) equações;

4) Continuidade da segunda derivada: s''_i(x_{k+1}) = s''_{i+1}(x_{k+1}), i = k = 0, ... (n − 1) (n-2) equações.

Enquanto a primeira condição garante que o polinômio seja interpolador, as condições 2, 3 e 4 garantem que será uma *spline* de grau 3. Somando a quantidade de equações, temos 4n-6 equações e 4n-4 incógnitas. Sendo assim, ainda resta determinar 2 equações. Essas duas restantes são as condições de contorno da *spline*. Basicamente é a definição do valor da segunda ou primeira derivada nos dois extremos da curva. Existem diversas maneiras de realizar essa definição e as *splines* podem ser classificadas de acordo com o método escolhido. Três exemplos dessa classificação são (Mckinley e Levine 2013):

a) Spline natural: define-se a segunda derivada no ponto inicial x_0 e no ponto final x_k como zero. Essa aproximação tende a minimizar a curvatura total da *spline*. Em algumas referências existe também a *spline* natural geral, na qual se define o valor das derivadas arbitrariamente (Maindl, 2018);

b) *Spline* parabólica (nó a nó): define-se a segunda derivada do ponto inicial x_0 e no ponto final x_k como a derivada segunda do segundo nó e a derivada segunda do penúltimo nó, respectivamente. Geometricamente as pontas da *spline* são aproximadamente uma parábola (Mckinley e Levine 2013);

c) *Spline* cúbica: define-se a primeira derivada do ponto inicial x_0 e no ponto final x_k como valores arbitrários, garantindo, assim, polinômios cúbicos nas pontas da *spline* (Maindl,2018).

Na Figura 12 observa-se à esquerda a função $f(x) = x^2$, interpolada com diferentes condições de contorno. Virtualmente é bem difícil notar a diferença da condição nó a nó e natural, já que conhecendo a função original sabemos que a segunda derivada nos extremos é realmente zero (natural) e é realmente parabólica (nó a nó).

Para exemplificar uma má escolha, temos a definição da primeira derivada nula na forma cúbica, na qual vemos que há um distanciamento nos extremos da curva. De maneira geral a depender das variações das ordenadas e abscissas dos pontos, uma escolha de condição de contorno afetará, principalmente, os pontos mais extremos da *spline*.

Vemos um exemplo disso na função à direita, repentinamente temos uma variação abrupta em x = 1 e é possível ver o comportamento das diferentes condições de contorno. É notável o comportamento da *spline* natural, que visualmente parece minimizar a curvatura total nesses casos (Maindl, 2018).



Figura 12 – Comparação de diversos métodos de Spline.

Fonte: adaptado de Maindl (2018).

A depender do problema pode-se definir esses valores de forma arbitrária ou com qualquer outro critério de formação. Para o problema da curva de sedimentação será utilizada a *spline* natural para definição das condições de contorno, devido ao comportamento aproximadamente linear da sedimentação livre.

Tendo as 4n-4 equações definidas para as 4n-4 incógnitas, é possível definir para cada subintervalo as equações que formarão nosso sistema.
1) Equações de interpolação:

$$s_i(x_k) = (y_k) \tag{8}$$

$$s_i(x_{k+1}) = (y_{k+1}) \tag{9}$$

Substituindo (7) em (8) e (9) temos:

$$s_i(x) = a_i x_k^3 + b_i x_k^2 + c_i x_k + d_i = y_k$$
(10)

$$s_i(x) = a_i x_{k+1}^3 + b_i x_{k+1}^2 + c_i x_{k+1} + d_i = y_{k+1}$$
(11)

Sendo assim, para cada subfunção temos 2 equações de interpolação (para o seu ponto inicial e seu ponto final).

2) Equações de continuidade da primeira derivada

$$\frac{ds_i}{dx}(x = x_{(k+1)}) = \frac{ds_{i+1}}{dx}(x = x_{(k+1)})$$
(12)

Da equação (7) definimos a derivada primeira:

$$\frac{ds_i}{dx} = 3a_i x^2 + 2b_i x + c_i \tag{13}$$

Substituindo (13) em (12) e arranjando as incógnitas temos:

$$3a_{i}x_{k+1}^{2} + 2b_{i}x_{k+1} + c_{i} - 3a_{i+1}x_{k+1}^{2} - 2b_{i+1}x_{k+1} - c_{i+1} = 0$$
(14)

Sendo assim temos a relação que exprime a continuidade da primeira derivada entre uma subfunção e sua subfunção vizinha.

3) Equações de continuidade da segunda derivada

$$\frac{d^2 s_i}{dx^2} \left(x = x_{(k+1)} \right) = \frac{d^2 s_{i+1}}{dx^2} \left(x = x_{(k+1)} \right) \tag{15}$$

Da equação (13) definimos a derivada segunda:

$$\frac{d^2s_i}{dx^2} = 6a_i x + 2b_i \tag{16}$$

Substituindo (16) em (15) e arranjando as incógnitas temos:

$$6a_i x_{k+1} + b_i - 6a_{i+1} x_{k+1} - b_{i+1} = 0 (17)$$

4) Critérios da *spline* natural

$$\frac{d^2 s_i}{dx^2} (x = x_{(0)}) = \frac{d^2 s_i}{dx^2} (x = x_{(k)}) = 0$$
(18)

Em álgebra linear é possível representar qualquer sistema de equações em forma matricial do tipo Ax = B, sendo A a matriz de coeficientes (n x n), x a matriz de incógnitas (n x 1) e B a matriz de termos independentes das equações do sistema (n x 1). Além disso, dado

um sistema linear ele pode ter uma solução única, ser impossível ou ter infinitas soluções. Sendo que, se a matriz A for invertível, o sistema possuirá apenas uma solução (Anton e Rorres, 2012).

Para os problemas de interpolação por *spline* os sistemas tratados serão não homogêneos. Sendo assim, segundo Anton e Rorres (2012), um sistema linear terá soluções se a matriz A for invertível, ou seja, tiver determinantes não nulo. Assim, a solução do sistema das *splines* está ligado à invertibilidade da matriz A.

Definidas algebricamente as condições do polinômio *spline* interpolador, pode-se montar uma matriz do sistema, na qual cada linha representará os coeficientes das 4n-4 incógnitas, sendo a primeira e a última linha referentes à equação 18. As demais equações estarão ordenadas para cada polinômio: primeiramente, duas linhas para as equações 10 e 11 do primeiro polinômio s_1 , a quarta e a quinta linha para as equações 14 e 17, relacionada à continuidade das derivadas. Esse ciclo se repete para cada um dos trechos, sempre variando o fator i das equações. Ao final, no último trecho, só serão aplicáveis as equações 10 e 11, já que as outras só valem para os pontos onde há um ponto sucessor (são dependentes de i + 1). Por fim, temos a outra condição da *spline* natural que se refere à nulidade da segunda derivada do último ponto. Essa matriz de coeficientes multiplicará uma matriz-coluna de incógnitas e esse produto deve resultar nas constantes independentes das equações, também representados por uma matriz-coluna. Seguindo esses critérios, temos o sistema apresentado:

$\begin{bmatrix} 6x_0 \end{bmatrix}$	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0]	a_0		0
x_{0}^{3}	x_{0}^{2}	x_0	1	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0	00		y_0
x_{1}^{3}	x_{1}^{2}	x_1	1	0	0	0	0	0	0	0	0		0	0			y_1
$3x_{1}^{2}$	$2x_{1}$	1	0	-3^{1}_{x}	$-2\frac{1}{x}$	$^{-1}$	0	0	0	0	0		0	0	a_0	İ	
$6x_1$	1	0	0	-6^{1}_{x}	$^{-1}$	0	0	0	0	0	0		0	0			
0	0	0	0	x_{1}^{3}	x_{1}^{2}	x_1	1	0	0	0	0		0	0	01		y_1
0	0	0	0	x_{2}^{3}	x_2^2	x_2	1	0	0	0	0		0	0		=	
0	0	0	0	$3x_{2}^{2}$	$2x_2$	1	0	$-3x^{2}$	$-2x^{2}_{x}$	1	0		0	0			
0	0	0	0	$6x_{2}^{2}$	1	0	0	$-6\frac{2}{x}$	$^{-1}$	0	0		0	0	a_2		0
:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	:	÷.	6	2	:		
L·	•	•	•	•		•	•	•		•	•	•	$0x_k$	4 J	c_k		y_k
															d_k		0

Figura 13 – Sistema linear de uma spline cúbica interpolante genérica (pesquisa direta).

Fonte: Autor

2.2.2 Metodologia usual de resolução de splines cúbicas interpolantes

É possível diminuir a complexidade do cálculo dos coeficientes das *splines* através do desenvolvimento algébrico a partir de uma mudança de variável. Vamos tomar o seguinte sistema (Doescher, 2021):

$$\begin{cases} \alpha x_k + \beta = 0\\ \alpha x_{k+1} + \beta = 1 \end{cases}$$
(19)

$$\Delta_k = x_{k+1} - x_k \tag{20}$$

Subtraindo a segunda equação do sistema com a primeira e isolando α temos:

$$\alpha = \frac{1}{\Delta \nu} \tag{21}$$

Retornando à primeira linha do sistema definido:

$$\beta = \frac{-x_k}{\Delta_k} \tag{22}$$

Dessa forma, denotamos uma equação da reta que, através dos parâmetros $\alpha \in \beta$, transforma o intervalo de $[x_k, x_{k+1}]$ em um intervalo [0,1] e, assim, define-se uma nova variável t, que é função de $\alpha \in \beta$, que, por sua vez, são funções do intervalo $[x_k, x_{k+1}]$:

$$t = \alpha x + \beta \tag{23}$$

Assim sendo, para cada intervalo entre nós da *spline* interpolante pode-se definir essa variável t que terá valor 0 no nó inferior e 1 no nó superior, já que os parâmetros α e β estão em função do tamanho do intervalo Δ_k e do valor do nó inferior x_k . Ou seja, os parâmetros da mudança de variável mudarão para cada intervalo avaliado, no entanto, o intervalo de variação de t é constante (de 0 à 1).

Agora podemos definir novamente a Equação 7 em função de t. Para isso, consideraremos novos coeficientes das *splines* para que sejam, à priori, função somente de t:

$$s_i(t) = e_i t^3 + f_i t^2 + g_i t + h_i, com t \in [0,1]e \ i = 0, \dots (n-1)$$
(24)

Na equação (24) aplicaremos as mesmas definições para *splines* cúbicas, a fim de encontrar as equações para os coeficientes.

1) Critério de interpolação

 $s_i(t_k) = y_k$, no entanto temos que $t_k = 0$ (25)

$$s_i(t_{k+1}) = y_{k+1}$$
, no entanto temos que $t_{k+1} = 1$ (26)

$$s_i(0) = h_i = y_k \tag{27}$$

$$s_i(1) = e_i + f_i + g_i + h_i = y_{k+1}$$
(28)

Utilizando (27) em (28) temos:

$$e_i + f_i + g_i = y_{k+1} - y_k \tag{29}$$

2) Regra da cadeia na diferenciação

Como fizemos uma mudança de variáveis para aplicarmos uma diferenciação, precisamos aplicar a regra da cadeia:

$$\frac{ds_i}{dx} = \frac{ds_i}{dt}\frac{dt}{dx} \tag{30}$$

Da equação (23) temos que a derivada de t em relação a x é o parâmetro α , ou seja, o inverso de Δ_k .

Se aplicarmos a derivada em s_i em relação a x, temos:

$$\frac{ds_i}{dx} = \frac{(3e_it^2 + 2f_it + g_i)}{\Delta_k} \tag{31}$$

Surge uma oportunidade de fazemos t = 0 para calcularmos a derivada no ponto x_k , temos então:

$$\frac{ds_i}{dx}\Delta_k = g_i \tag{32}$$

Tomando $\frac{ds_i}{dx}$ como D_k (derivada primeira no ponto x_k) temos que:

$$D_k \Delta_k = g_i \tag{33}$$

3) Continuidade da derivada primeira

Precisamos ainda garantir que a derivada primeira de todos os pontos t = 1 seja igual à derivada primeira de D_{k+1} para a *spline* s_i , ou seja:

$$D_{k+1} = \frac{ds_i}{dt}\frac{dt}{dx}$$
(34)

Substituindo t por 1 e utilizando a equação (31) temos:

$$D_{k+1} = \frac{(3e_i + 2f_i + g_i)}{\Delta_k}$$
(35)

Substituindo (33) em (35) e isolando as constantes temos:

$$3e_i + 2f_i = \Delta_k (D_{k+1} - D_k) \tag{36}$$

Podemos, ainda, substituir (33) em (29), resultando em:

$$e_i + f_i = y_{k+1} - y_k - D_k \Delta_k$$
(37)

Por fim, temos duas equações expressas em termo de e_i , f_i e podemos montar um sistema entre as equações (36) e (37):

$$\begin{cases} 3e_i + 2f_i = \Delta_k (D_{k+1} - D_k) \\ e_i + f_i = y_{k+1} - y_k - D_k \Delta_k \end{cases}$$
(38)

Substituindo a expressão $e_i + f_i$ na equação (36) e isolando e_i :

$$e_i = \Delta_k (D_{k+1} + D_k) - 2(y_{k+1} - y_k)$$
(39)

Por fim, substituindo (39) na primeira equação de (38) e isolando f_i temos:

$$f_i = 3(y_{k+1} - y_k) - \Delta_k (D_{k+1} + 2D_k)$$
(40)

Note que temos agora as Equações 27, 32, 39, 40 para todos os coeficientes das *splines* em função de valores de y dados e das derivadas primeiras em cada ponto. Sendo assim, basta que se tenha uma expressão que relacione os valores de y dados em cada ponto com as derivadas primeiras. O problema que antes se resumia em 4n-4 equações, com as incógnitas sendo os coeficientes das *splines*, agora se reduz a encontrar para os n pontos os valores das n derivadas primeiras.

Para obtermos essa relação entre as derivadas primeiras, será utilizado o último critério de definição da *spline* cúbica:

4) Critério da continuidade da derivada segunda

$$\frac{d^2 s_i}{dt^2} \left(\frac{dt}{dx}\right)^2 (t=1) = \frac{d^2 s_{i+1}}{dt^2} \left(\frac{dt}{dx}\right)^2 (t=0)$$
(41)

Pela regra da cadeia, obtemos a expressão da derivada segunda:

$$\frac{d^2 s_i}{dx^2} = \frac{d^2 s_i}{dt^2} \left(\frac{dt}{dx}\right)^2 = \frac{(6e_i t + 2f_i)}{\Delta_k^2}$$
(42)

Aplicando (42) em (41) temos que:

$$\frac{(6e_i + 2f_i)}{{\Delta_k}^2} = \frac{(2f_{i+1})}{{\Delta_{k+1}}^2}$$
(43)

Por fim, podemos aplicar as equações (39) e (40) e, isolando os fatores da derivada primeira, temos que:

$$\Delta_{k+1}D_k + 2(\Delta_k + \Delta_{k+1})D_{k+1} + \Delta_k D_{k+2} = +3\frac{\Delta_k}{\Delta_{k+1}}(y_{k+2} - y_{k+1}) + 3(\frac{\Delta_{k+1}}{\Delta_k})(y_{k+1} - y_k)$$
(44)

Definindo
$$\delta_k = \frac{\Delta_{k+1}}{\Delta_k}$$
 e dividindo (44) por Δ_k resulta em:

$$\delta_k D_k + 2(1 + \delta_k D_{k+1} + D_{k+2}) = 3 \frac{(y_{k+2} - y_{k+1})}{\Delta_{k+1}} + 3 \frac{\delta_k (y_{k+1} - y_k)}{\Delta_k}$$
(45)

A equação (45) nos fornece n-2 equações, já que há termos dependentes dos próximos 2 pontos (elementos de índice k+2). Sendo assim, para o último e penúltimo ponto essa equação não é válida. Para definição das últimas 2 equações será utilizado finalmente o critério da *spline* interpolante natural.

$$\frac{d^2 s_i}{dt^2} \frac{(dt)^2}{(dx)^2} (t=0) = 2f_0 \tag{46}$$

Aplicando (40) em (46) com k = 0 (ponto inicial) e isolando os termos de derivada primeira temos:

$$2D_0 + D_1 = \frac{3(y_1 - y_0)}{\Delta_0} \tag{47}$$

De maneira análoga aplicamos a segunda derivada com t = 1 e i = k, temos então:

$$\frac{d^2 s_i}{dt^2} \frac{(dt)^2}{(dx)^2} (t=1) = 6e_k + 2f_k$$
(48)

Aplicando (32) e (33) e arranjando temos:

$$D_{k-1} + 2D_k = \frac{3(y_k - y_{k-1})}{\Delta_{k-1}}$$
(49)

Em posse das equações do sistema para k pontos (45,48,49) podemos montar a matriz geral das *splines* cúbicas naturais de forma simplificada:

2	$(2\delta + 2)$	0	0	0		0	0	0	$\begin{bmatrix} D_0\\ D_1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{3(y_1-y_0)}{\triangle_0} \\ 3(y_3-y_2) \\ \pm & 3\delta_1(y_2-y_1) \end{bmatrix}$
0	$(2b_0 + 2) = \delta_1$	$(2\delta_1 + 2)$	1	0	· · · · · · ·	0	0	0	$\begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D \end{bmatrix} =$	$\frac{\frac{\Delta_2}{3(y_4-y_3)}}{\frac{\Delta_3}{\Delta_3}} + \frac{\frac{\Delta_1}{3\delta_2(y_3-y_2)}}{\frac{\Delta_2}{\Delta_2}}$
0	0	δ_2	$(2\delta_2 + 2)$	1	۰.	0	0	0	D_3	$\frac{3(y_5-y_4)}{\triangle_4} + \frac{3\delta_3(y_4-y_3)}{\triangle_3}$
	0	0	0	0	• • •	∂_{k-2}	$(2\delta_{k-2} + 2)$:	
Lo	0	U	U	0		0	1	2	$\begin{bmatrix} D_k \end{bmatrix}$	$\frac{3(y_k-y_{k-1})}{\triangle_{k-1}}$

Figura 14 – Sistema genérico para derivadas primeiras dos pontos

Fonte: Autor

Ao resolver esse sistema, é simples encontrar todos os coeficientes das *splines* em função de t através das Equações 27, 32, 39, 40. E, por fim, podemos utilizar a seguinte equação em cada uma das *splines* para retornarmos para x:

$$t = \frac{x - x_k}{\Delta_k} \tag{50}$$

2.3 Teoria matricial e soluções numéricas de sistemas lineares

Um sistema linear nada mais é que um conjunto finito de equações lineares, onde cada uma tem a forma:

$$a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 + \dots + a_n x_n = b \tag{51}$$

Para as equações lineares os coeficientes $a_k \text{ com } k = 1$, ...n e b são constantes e x_k com k = 1, ...n são as incógnitas. Nas equações lineares todas as variáveis têm grau 1 e não há ocorrência de argumentos de trigonometria, logaritmos e potenciação (Anton e Rorres, 2012).

Assim, um sistema linear de duas equações pode ser representado como:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \end{cases}$$
(52)

onde, por exemplo, a_{11} é o coeficiente da primeira equação da variável x_1 e a_{21} é o coeficiente da segunda equação da variável x_1 .

Sendo assim, como visto anteriormente, é possível representar sistemas lineares como um produto entre uma matriz de coeficientes (os a_k de cada equação) e uma matriz de incógnitas (x_k todas as incógnitas do sistema). Esse produto resultará em uma matriz de constantes independentes. Sendo assim, o sistema expresso pela Equação 51 pode ser representado como matriz:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$
(53)

Essa representação só é possível devido à definição de produto de matrizes. Dada uma matriz A (m x n) e outra matriz B (p x k), a multiplicação AB só estará definida se n = p e resultará em uma matriz C (m x k).

No exemplo da Equação 52 temos uma matriz 2x2 e uma 2x1, logo o resultado será, como mostra o exemplo, uma matriz 2x1. O algoritmo da multiplicação de matrizes do exemplo seria (Anton e Rorres, 2012):

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1 \tag{54}$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2 \tag{55}$$

Notamos que a Equação 53 trata da multiplicação entre fatores da primeira linha da matriz A com os fatores da primeira coluna da matriz B (nesse caso a única) do exemplo da Equação 52. Em resumo, a soma entre o produto do primeiro elemento da primeira linha da matriz A, com o primeiro elemento da primeira coluna de B, e o segundo elemento da primeira linha de A, com o segundo elemento da primeira coluna de B, resultará no primeiro elemento da primeira da primeira linha e primeira coluna da matriz resultante (b_1). Essa lógica se estende para o restante da multiplicação. Quando aplicada a definição do produto entre matrizes, vemos que o resultado algébrico de b_1 , b_2 (Equações 54 e 55) coincide com a definição das equações do sistema da Equação 52.

É intuitivo que se pode classificar a matriz em linhas e colunas. Em uma matriz de coeficientes do sistema linear, cada linha corresponde a uma equação (primeiro índice) e cada coluna corresponde a uma variável (segundo índice). As técnicas numéricas utilizadas para a resolução de sistemas advêm das operações básicas que se pode fazer com a matriz de coeficientes, além das propriedades de uma matriz em si.

As operações básicas que se pode executar em uma matriz de coeficientes de um sistema linear são (Campos Filho, 2007):

 Troca de ordem das equações: é admissível trocar de ordem uma equação com outra. Matricialmente, isso equivale a trocar uma linha com a outra na matriz do sistema da das constantes do sistema. Como exemplificado pelas Equações 56 e 57

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ -3 \end{bmatrix}$$
(56)

Trocando as linhas:

$$\begin{bmatrix} -2 & 1\\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_2\\ x_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3\\ 5 \end{bmatrix}$$
(57)

2) Multiplicar uma equação por uma constante não nula: quando se multiplica toda a equação por uma constante não nula, o vetor solução do sistema também não mudará. Em matrizes, o equivalente é multiplicar a linha por uma constante e a linha da matriz de constantes independentes correspondente, pela mesma constante. Como, por exemplo, multiplicaremos a segunda linha da Equação 56 por 2:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1\\ -4 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1\\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5\\ -6 \end{bmatrix}$$
(58)

3) Somar equações: também é possível somar equações sem alterar a solução do sistema (matricialmente equivale a somar as linhas da matriz do sistema e também as linhas correspondentes na matriz de constantes). No exemplo, somaremos a linha um com a linha dois do exemplo da Equação 56 e a soma será a nova linha 2:

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \end{bmatrix}$$
(59)

Franco (2006) classifica os métodos de resolução de sistemas lineares em exatos e iterativos. Os métodos exatos utilizam da notação matricial, suas técnicas e as 3 operações básicas do sistema linear para encontrar as soluções de sistemas com tantas incógnitas quanto se queira, desde que o sistema tenha solução única.

No exemplo da Equação 58, após aplicar operações unitárias ao sistema original da Equação 55, obtém-se uma matriz de sistema equivalente. No entanto, para o modelo algébrico, na segunda equação desse sistema encontraríamos diretamente:

$$2x_2 = 2 \to x_2 = 1 \tag{60}$$

Assim se obtém diretamente o valor de x_2 apenas com operações unitárias. Após esse passo, bastaria substituir o valor de x_2 na equação algébrica da primeira linha para obter-se x_1 . Isso só é possível pois a matriz do sistema 58 é uma matriz triangular, o que possibilita obtermos a solução de uma incógnita. A base, para alguns dos métodos exatos, como a decomposição LU, eliminação de Gauss, métodos com pivoteamento total ou parcial, método de Cholesky e outros, é a transformação de um sistema em um sistema triangular da forma (Franco, 2006):

Figura 15 – Exemplo de sistema triangular inferior.

```
\begin{cases} a_{11} x_1 & = b_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 & = b_2 \\ a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + a_{33} x_3 & = b_3 \\ \dots & \vdots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + \dots + a_{nn} x_n & = b_n \end{cases}
```

Fonte: Franco (2006).

Figura 16 – Exemplo de sistema triangular superior.

$$\begin{cases} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + a_{13} x_3 \dots + a_{1n} x_n = b_1 \\ a_{22} x_2 + a_{23} x_3 \dots + a_{2n} x_n = b_2 \\ a_{33} x_3 \dots + a_{3n} x_n = b_n \\ \vdots \\ a_{nn} x_n = b_n \end{cases}$$

Fonte: Franco (2006).

Após aplicar métodos para transformar qualquer sistema em um sistema triangular, basta encontrar a primeira (triangular inferior) ou última incógnita (triangular superior) e utilizar da substituição das linhas posteriores (triangular inferior) ou anteriores (triangular superior) para encontrar todas as incógnitas.

Os métodos iterativos, em geral, são métodos de solução que fornecem a cada ciclo uma nova solução para o problema proposto. A cada aplicação, os métodos iterativos se aproximam cada vez mais da solução verdadeira do problema. Essa tendência de aproximação é chamada de convergência e, geralmente, está ligada a fatores característicos dos problemas de iteração. Formalmente, para sistemas lineares, podemos definir um método iterativo qualquer como (Franco, 2006):

$$\varphi(x_{k-1}) = x_k = Bx_{k-1} + c \tag{61}$$
Onde:

 x_k é a aproximação de ordem k (atual) do vetor solução do sistema;

 x_{k-1} é a aproximação anterior do vetor solução do sistema;

B é uma matriz;

c é um vetor;

Pois:

 $\varphi(x_{k-1})$ é uma função de iteração que leva x_{k-1} a uma nova aproximação x_k .

Os métodos iterativos são ditos estacionários se a matriz B e o vetor c são constantes. A origem da função φ vem diretamente da transformação de um sistema Ax = c através das operações unitárias (basta tomar B = I - A). Temos então que, se x_n é a solução algébrica exata do sistema e foi obtida após n iterações (Franco, 2006),

$$\varphi(x_{n+1}) = x_n \tag{62}$$

$$\varphi(x_{n+1}) = (I - A)x_n + c \tag{63}$$

$$\varphi(x_{n+1}) = x_n - Ax_n + c \tag{64}$$

E sabemos que:

$$c - Ax_n = 0$$

Assim, por indução:
 $\varphi(x_{n+s}) = x_n, s \in N_+$
(65)

Logo, fica demonstrado que, se após n iterações obtivermos a solução exata do sistema para qualquer valor maior ou igual a n, a aproximação do método iterativo será a mesma (a própria solução do sistema).

Dessa forma, se definirmos x como a solução do sistema, podemos definir o vetor erro de cada uma das iterações (Franco, 2006):

$$e_k = x - x_k \tag{66}$$

O método será convergente se, aumentado o número de iterações k infinitamente, o vetor e_k tem módulo igual a 0.

Da função φ temos que:

$$\begin{cases} x_k = Bx_{k-1} + c \\ x = Bx + c \end{cases}$$
(67)

Subtraindo as equações temos que:

$$e_k = B(e_{k-1}) \tag{68}$$

Por aplicações sucessivas podemos escrever como:

$$e_k = B^k(e_0) \tag{69}$$

Da desigualdade de Cauchy-Schwarz temos:

$$\|e_k\| \le \|B\|^k \|(e_0)\| \tag{70}$$

Assim, se ||B|| < 1 o vetor erro tenderá para norma 0

Desse modo, de acordo com as normas das matrizes, temos que encontrar, pelo menos, uma norma qualquer menor que um e, assim, está garantida a convergência (Franco, 2006).

Um dos métodos iterativos é o método de Gauss-Seidel ou método dos deslocamentos sucessivos. Dado um sistema qualquer de p equações e p incógnitas, o método de Gauss-Seidel tem como objetivo encontrar um vetor que se aproxima o tanto quanto se queira da solução após k iterações, dado por (Franco, 2006):

$$x_k = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix}$$
(71)

A partir de um vetor de valores iniciais:

$$x_0 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_p \end{bmatrix}$$
(72)

Utilizando a seguinte rotina de iteração:

Figura 17 – Método de Gauss-Seidel.

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} x_2^{(k)} - a_{13} x_3^{(k)} - \dots - a_{1n} x_n^{(k)} \right) \\ x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - a_{23} x_3^{(k)} - \dots - a_{2n} x_n^{(k)} \right) \\ x_3^{(k+1)} = \frac{1}{a_{33}} \left(b_3 - a_{31} x_1^{(k+1)} - a_{32} x_2^{(k+1)} - a_{34} x_4^{(k)} - \dots - a_{3n} x_n^{(k)} \right) \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} = \frac{1}{a_{nn}} \left(b_n - a_{n1} x_1^{(k+1)} - a_{n2} x_2^{(k+1)} - \dots - a_{n,n-1} x_{n-1}^{(k+1)} \right) \end{cases}$$

Fonte: Adaptado de Ruggiero e Lopes (2000).

ou da definição de métodos iterativos (61), temos que para o método de Gauss-Seidel:



Figura 18 – Matrizes componentes do método de Gauss-Seidel.

Fonte: adaptado de Ruggiero e Lopes (2000).

Franco (2006) define 3 critérios para a convergência do método de Gauss-Seidel, dos quais 2 são os mais relevantes para o caso de *splines* cúbicas. São eles:

 Critério das linhas: garante o critério da Equação 69 através da norma calculada pelas linhas:

$$\max_{1 < j < n} (\sum_{\substack{i=1 \\ j \neq i}}^{n} |a^*_{ij}|) < 1$$
(73)

Onde:

 a_{ii}^* é o valor do elemento a_{ij} dividido pelo elemento da diagonal principal a_{ii}

2) Critério da matriz estritamente diagonalmente dominante:

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} |a_{ij}| < |a_{ii}|, i = 0, ... n$$
(74)

Na realidade, o critério 1 pode ser provado pelo critério 2, já que a matriz é estritamente diagonalmente dominante:

$$\sum_{\substack{j=1\\j\neq i}}^{n} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1, i = 1, \dots, n \to \left(\sum_{\substack{i=1\\j\neq i}}^{n} \left| a^*_{ij} \right| \right) <, i = 1, \dots, n \to \max_{1 < j < n} \left(\sum_{\substack{i=1\\j\neq i}}^{n} \left| a^*_{ij} \right| \right) < 1$$
(75)

Sendo assim, retomando o sistema genérico de *splines* cúbicas, definido pela Figura 14, é simples provar que ela é estritamente diagonalmente dominante. Podemos exprimir a soma de todas as linhas da matriz definida para *spline* simplesmente avaliando a forma como são construídas. Na primeira e última linha da matriz de solução, o elemento da diagonal principal é o 2, o outro elemento não nulo é 1. Assim, para essas duas linhas, temos os critérios da equação 74. Para as outras linhas, temos que:

$$\sum_{\substack{j=2\\i\neq j}}^{n-1} |a_{ij}| = 1 + \delta_i, \delta_i = \frac{\Delta_{i+1}}{\Delta_i}$$
(76)

Sabemos que δ_i é sempre positivo, já que nas *splines* as variações entre dois nós consecutivos sempre são positivas, uma vez que os pontos são crescentes. E os outros elementos, além do 1 e do δ_i , são nulos em todas as linhas. Sendo assim, basta provar que essa soma é menor que o valor da diagonal principal:

$$1 + \delta_i < |a_{ii}| = 2(1 + \delta_i) \tag{77}$$

Resolvendo a inequação podemos provar que o método de Gauss-Seidel converge para qualquer *spline* cúbica que for resolvida de acordo com o sistema descrito na Figura 14.

2.3.1 Matrizes de banda e soluções de sistemas lineares

Define-se matriz de banda como sendo uma matriz na qual todos os elementos são nulos, exceto uma faixa em centrada na diagonal principal (Chapra e Canale, 2011).



Figura 19 – Diagrama representando uma matriz de banda.

Fonte: Adaptado de Chapra e Canale (2011).

Na Figura 19, vemos que uma matriz de banda é definida por algumas grandezas: LB é a largura de banda e MLB é metade da largura de banda. Um sistema de banda é um sistema tal que (Chapra e Canale, 2011):

$$a_{ij} = 0 \ se \ |i-j| > MLB \tag{78}$$

A matriz genérica de *splines* cúbicas, definida na Figura 14, é uma matriz de banda de largura 2.

Quando uma matriz do sistema é uma matriz de banda, podemos utilizar tanto métodos iterativos, quanto métodos exatos para sua resolução. No entanto, os métodos que envolvem a decomposição da matriz (exatos) tendem a ser mais ineficientes por dois motivos: o erro associado é de arredondamento – que pode ser mais relevante em sistemas com muitas linhas (equações) – e a matriz de banda possui inúmeros valores nulos que em métodos de decomposição não seriam manipulados e o armazenamento desses valores acarretaria um gasto de memória computacional maior que o dos métodos iterativos (Chapra e Canale, 2011). Para os métodos iterativos, o erro é controlado pelo número de iterações e pela possibilidade de convergência (já verificada como positiva para o caso de *splines*). Por esses motivos o método de solução que será empregado nas *splines* cúbicas será o método iterativo de Gauss-Seidel.

2.4 Ajuste linear por mínimos quadrados

As relações entre 2 ou mais variáveis podem ser classificadas em três: determinísticas, semideterminísticas e empíricas. Nas relações determinísticas, as variáveis estão relacionadas por fórmulas teóricas que se relacionam às leis da natureza. Nas relações semideterminísticas, temos leis e modelos que descrevem a relação entre duas variáveis através de parâmetros, no entanto, a única forma de determinar os parâmetros é experimentalmente. Nas relações empíricas, o que se busca é a fórmula matemática que pode explicar os fenômenos vistos em experimento (Campos Filho, 2007).

No campo experimental, há exposição a diversos erros que advêm dos instrumentos de medida devido as limitações tecnológicas e perturbações imprevisíveis e incontroláveis do experimento em si. Esses erros causam ruídos nos resultados experimentais, dificultando a construção de modelos que explicam a variação de uma variável dita dependente de uma outra dita independente (Campos Filho, *op. cit*).

Existem diversas maneiras de buscar esses modelos semideterminísticos ou empíricos. Algumas delas são a já citada interpolação polinomial e os ajustes lineares pelo método dos mínimos quadrados. De um experimento, podemos ter um número de dados quaisquer de duas variáveis x e y medidas. Ao plotar um gráfico cartesiano com os pontos de x e y, é possível notar visualmente a tendência de variação das duas quantidades (Campos Filho, 2007). Esse gráfico é chamado de gráfico de dispersão.



Figura 20 – Diagrama de dispersão.



Na Figura 20 pode-se notar visualmente uma tendência linear entre as variáveis x e y. No entanto, se aplicarmos técnicas de interpolação quaisquer, poderíamos encontrar modelos que são afetados pelos ruídos do experimento e nada representam da realidade teórica do problema.

Figura 21 – Interpolação dos pontos exemplificados.



Fonte: Chapra e Canale (2011).

Uma alternativa inicial é traçar manualmente retas que ligam dois pontos dos dados experimentais e encontrar por interpolação linear a equação da reta.



Figura 22 – Exemplo de interpolação linear para correlacionar dados experimentais.

Fonte: adaptado de Campos Filho (2007).

Para um conjunto de dados quaisquer, representaremos a relação e tendência linear de duas variáveis através da interpolação linear de duas retas: a reta \overline{BD} e a reta \overline{AE} . Visualmente, é difícil identificar qual das retas representa melhor o conjunto de dados. Assim sendo, podemos quantificar o erro através da diferença simples entre um valor experimental e um calculado pela interpolação ao quadrado (existem diversas expressões que se pode utilizar para o erro, mas, para o problema do ajuste, o mais adequado é o da diferença ao quadrado) (Campos Filho, 2007).

$$e = (y_{exp} - y_{int})^2 = (y_{exp} - ax_{exp} - b)^2$$
Onde:
(79)

 y_{exp} e y_{int} são os valores de y experimental e interpolado, respectivamente; *a* e *b* são os coeficientes da reta interpolada; x_{exp} é o valor de x relacionado à y_{exp} pelo experimento e à y_{int} pela interpolação. Nos exemplos dados na Figura 22, os erros de ajuste são mostrados no Quadro 1:

Х	y exp	Yae	e _{ae}	Ybd	ebd
0,3	1,8	1,8	0	0,4	1,96
2,7	1,9	2,28	0,144	1,9	0
4,5	3,1	2,64	0,2116	3,025	0,005
5,9	3,0	2,92	0,9604	3,9	0
7,8	3,3	3,3	0	5,0875	3,195
		Total	1,316	Total	5,160

Quadro 1 – Erros do ajuste via interpolação linear.

Fonte: adaptado de Campos Filho, 2007.

Na tabela podemos ver os erros normalizados e a soma total dos erros em cada modelo. É imediato que o melhor ajuste é o da reta \overline{AE} (erro total de 1,316), mas, ainda assim, o erro é significativo, tanto visualmente, quanto matematicamente. Partindo do cálculo do erro da Equação 78, podemos afirmar que o melhor ajuste é o ajuste que minimiza a soma das diferenças ao quadrado entre os valores de y experimentais e ajustados (Chapra e Canale, 2011). O método dos mínimos quadrados é o mais utilizado pela sua confiabilidade e unicidade em representações de um conjunto de dados que, no caso estudado, apresentam tendência linear.

Da Equação 78, podemos calcular o erro de medida em um ponto da base de dados do ajuste linear. Podemos adaptá-la para que a soma dos erros de todos os pontos do ajuste sejam descritos em função dos coeficientes da reta a e b:

$$e_{total}(a,b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)^2$$
(80)

É possível diferenciar a equação 80 em função de a e b, obtendo:

$$\frac{\partial e}{\partial a} = -2(\sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)x_i) = 2(\sum x_i y_i + a \sum x_i^2 + b \sum x_i)$$
(81)

$$\frac{\partial e}{\partial b} = -2(\sum_{i=1}^{n} (y_i - ax_i - b)) = 2(\sum y_i + a \sum x_i + nb)$$
(82)

Burden (2016) retoma a abordagem de cálculo diferencial de que, para funções de 2 variáveis, para encontrar os pontos críticos, basta que se derive parcialmente em função das duas variáveis e iguale cada uma das derivadas a zero. Resolvendo o sistema resultante, teremos os valores de a e b, que minimizam a função erro total:

$$\begin{cases} a \sum x_i^2 + b \sum x_i = \sum x_i y_i \\ nb + a \sum x_i = \sum y_i \end{cases}$$
(83)

Resolvendo o sistema, podemos isolar a e b:

$$a = \frac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{n (\sum x_i^2) - (\sum x_i)^2}$$
(84)

$$b = \overline{y} - a\overline{x} \tag{85}$$

Sendo $\overline{x}, \overline{y}$ os valores médios de x e y

Para o conjunto de dados do Quadro 1, temos a = 0,225 e b = 1,665. Podemos enquadrar os erros dos pontos e comparar com os erros das retas \overline{AE} e \overline{BD} , ressaltados no Quadro 2:

X	y exp	y _{ae}	e _{ae}	Ybd	ebd	Yal	e _{al}
0,3	1,8	1,8	0	0,4	1,96	1,73	0,00
2,7	1,9	2,28	0,144	1,9	0	2,27	0,14
4,5	3,1	2,64	0,2116	3,025	0,005	2,68	0,18
5,9	3	2,92	0,9604	3,9	0	2,99	0,00
7,8	3,3	3,3	0	5,0875	3,195	3,42	0,01
		Total	1,316	Total	5,16	Total	0,34

Quadro 2 – Erros do ajuste via interpolação e ajuste linear.

Fonte: adaptado de Campos Filho, 2007.

Assim sendo, o método de ajuste linear por mínimos quadrados nos garante que a soma dos erros para um dado conjunto de pontos será a menor possível. Graficamente, para os dados da Tabela 2, temos:

Figura 23 – Ajuste linear dos dados do Quadro 2 (em azul).



Fonte: adaptado de Filho (2007).

Pelos métodos construtivos da equação do ajuste linear, a equação da reta resultante sempre minimizará o erro definido pela diferença ao quadrado. No entanto, urge a necessidade de medir a qualidade prática do ajuste linear, já que nem sempre os dados ajustados terão tendências lineares. Em outras palavras, é necessário definir uma grandeza que quantifique a linearidade e a aplicabilidade do ajuste linear.

Na maioria das aplicações de ajuste linear ainda haverá uma diferença entre os dados experimentais e os dados calculados pela reta. Essas diferenças podem ser elevadas ao quadrado e somadas para obtermos a soma das diferenças ao quadrado entre os valores experimentais e calculados (Chapra e Canale, 2011).

$$E = \sum_{i=1}^{n} \left(y_{exp_i} - b - ax_i \right)^2 \tag{86}$$

Onde,

 y_{exp_i} é o valor da variável dependente experimental de índice i;

b e *a* são os coeficientes da reta ajustada;

 x_i é o valor da variável independente.

A Figura 24 representa às distâncias relacionadas aos erros de regressão:

Figura 24 – Representação da distância dos elementos de uma variável à média (a) e representação da distância dos valores de uma variável a uma reta de regressão (b).



Fonte: Chapra e Canale (2011).

A soma dos quadrados das distâncias representadas na Figura 24 (b) é o valor resultante da Equação 79. De maneira análoga, na Figura 24 (a) está a representação da distância dos

pontos em relação à média dos valores dos dados. Se realizado o procedimento de somar os quadrados das distâncias representadas, temos a soma dos resíduos ao quadrado, grandeza primordial para o cálculo do desvio padrão de um conjunto de dados. O valor calculado pela Equação (79) é chamado de "soma dos quadrados inexplicáveis" e, em um ajuste perfeito, deve ser 0. Um conjunto de dados que será ajustado tem como propriedade o seu desvio padrão e, após ajustado, é introduzida também a soma dos quadrados inexplicáveis. Uma forma de quantificar a qualidade do ajuste e a linearidade dos dados é normalizar a diferença entre as duas grandezas, definido pela equação (Chapra e Canale, 2011):

$$r^2 = \frac{D_p - E}{D_p} \tag{87}$$

Onde:

 r^2 - é chamado de coeficiente de determinação e r ($\sqrt{r^2}$ o coeficiente de correlação;

 D_p - é o desvio padrão dos dados da variável dependente;

E- é a soma dos quadrados inexplicável.

Um ajuste linear perfeito é aquele no qual E é 0 e $r^2 = 1$ ou 100%. Isso significaria que a reta de regressão é capaz de explicar e representar 100% da variação total dos dados originais (Chapra e Canale, 2011). Geralmente, na indústria aceita-se coeficientes r^2 acima de 90% como bons ajustes e, em alguns casos, até acima de 80%. Uma alternativa mais implementável de cálculo de r é:

$$r = \frac{n \sum x_i y_i - (\sum x_i) (\sum y_i)}{\sqrt{n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \sqrt{n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2}}$$
(88)

2.5 Construção de retas bissetrizes de duas retas quaisquer

Em geometria analítica é possível encontrar a equação da reta através de uma construção puramente geométrica.

Figura 25 – Construção geométrica da bissetriz.



Fonte: Crissaf (2018).

É possível provar com semelhança de triângulos a congruência dos triângulos PQO e PQ'O e, ainda, que, a partir do ponto P (escolhido arbitrariamente), a reta s – que contém o seguimento OP – é uma das bissetrizes, já que, por congruência de triângulo, o ângulo $Q\hat{O}P$ e $Q\hat{O}'P$ são iguais e os seguimentos PQ e PQ' também (Crissaf, 2018). Dadas as retas s e s' cujas relações são respectivamente representadas pelas Equações 89 e 90. Pode-se utilizar essas conclusões, as fórmulas de s e s' e a fórmula de distância do ponto à reta (representada pela Equação 91) para encontrar as equações de r e r' (Crissaf, 2018):

$$ax + by = c - reta s \tag{89}$$

$$dx + ey = f - reta s' \tag{90}$$

$$d(P,r) = d(P,r') \tag{91}$$

$$|ax + by - c| = k|dx + ey - f|$$
(93)

Rearranjando, temos que:

$$|ax + by - c| = k|dx + ey - f|$$
(93)

Sendo que:

$$k = \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2 + e^2}}$$
(94)

Nos deparamos com uma equação modular, sendo que, para a igualdade ser verdadeira, duas possibilidades de solução podem ser encontradas: uma com os dois lados da equação sendo numericamente iguais e a outra com os dois lados da equação sendo numericamente opostos:

$$ax + by - c = k(dx + ey - f)$$
(95)

$$ax + by - c = -1k(dx + ey - f)$$
 (96)

Podemos deduzir a equação da reta bissetriz a partir da Equação 95 da seguinte maneira:

$$x(a - dk) + y(b - ek) + fk - c = 0$$
(97)

$$y = \frac{c - fk}{b - ek} + \frac{dk - a}{b - ek}x\tag{98}$$

A partir da Equação 96, podemos deduzir a segunda equação da bissetriz:

$$x(a + dk) + y * (b + ek) - fk - c = 0$$
(99)

$$y = \frac{f^{k+c}}{b+ek} - \frac{a+ak}{b+ek}x\tag{100}$$

Como exemplo prático, utilizaremos o cálculo da bissetriz entre as duas seguintes retas:

$$2x + 3y + 4 = 0 \tag{101}$$

$$5x + 2y - 6 = 0 \tag{102}$$





Fonte:Autor

Em verde, a reta da Equação (101) e em azul, a reta da Equação (102). Inicialmente, calcula-se o valor de k:

$$k = \sqrt{\frac{a^2 + b^2}{d^2 + e^2}} = \sqrt{\frac{2^2 + 3^2}{5^2 + 2^2}} = 0,67$$
(103)

A reta bissetriz calculada pela equação (98):

$$y = \frac{-4 - 6 * 0.67}{3 - 2 * 0.67} + \frac{5 * 0.67 - 2}{3 - 2 * 0.67} x = -4,82 + 0,81x$$
(104)

A segunda reta bissetriz calculada pela equação (100):

$$y = \frac{6*0,67-4}{3+2*0,67} - \frac{2+5*0,67}{3+2*0,67}x = 0,004 - 1,23x$$
(105)

Ao plotar as retas no GeoGebra e resolver pelo site o problema, encontramos as duas retas em preto, conforme a Figura 27:





Ao plotar as retas encontradas na equação (104) e (105), temos:



Figura 28 – Comparação entre a solução GeoGebra e a solução encontrada.



Nota-se que as retas encontradas estão sobrepostas às encontradas pelo GeoGebra, indicando a exatidão da solução pelo método proposto.

2.6 Abordagem de análise numérica, estatística e geométrica na construção de curvas de sedimentação e dimensionamento de espessadores por Talmadge e Fitch

O *software* desenvolvido busca abordar de uma forma nova a construção, tanto de uma curva de sedimentação, quanto dos elementos geométricos de tempo crítico. No programa implementado em linguagem Pascal na IDE Lazarus, seguiu-se o seguinte raciocínio de uso de todos os conceitos revisados acima:

• Exportação de dados de ensaios de sedimentação de planilha eletrônica para *software* desenvolvido;

• Análise dos dados e construção da *spline* cúbica interpolante pelo método prático e resolução do sistema de banda via método de Gauss-Seidel;

• Construção gráfica da curva de sedimentação;

• Construção das retas de sedimentação livre e compressão pelo método do ajuste linear;

• Construção da reta bissetriz que intercepta a curva de sedimentação;

- Construção da reta tangente que intercepta o ponto de altura H_u e tempo t_c ;
- Dimensionamento do espessador e estimativa de balanço de massa.

3. CONSTRUÇÃO DO SOFTWARE

3.1 A IDE Lazarus

Lazarus é uma IDE compatível com o Delphi e utiliza a linguagem de programação Pascal. A principal vantagem de uma IDE é a possibilidade de auxiliar o programador no desenvolvimento de *softwares* e na programação voltada para objetos (botões, gráficos, listas de exportação e tabelas, por exemplo). O Lazarus foi desenvolvido em 1999 e possui integrada uma biblioteca semelhante ao VCL do Delphi (Lazarus, 2024).



Figura 29 – Interface inicial do aplicativo.

Fonte: Lazarus (2024).

A Figura 29 mostra a interface do aplicativo, nas seguintes legendas: em vermelho, a barra de ferramentas, elementos e opções, onde estão agrupadas as principais funções da IDE, além de todos os objetos que podem ser utilizados no formulário; em verde, a janela de inspeção de objetos, onde é possível alterar propriedades dos objetos programáveis e criar eventos

relacionados a eles; em amarelo, há a janela de código; em azul, o formulário personalizável para criação da interface dos *softwares*. O processo de criação de um *software* em Lazarus se baseia em programar os objetos utilizados na medida em que o usuário interage com a interface através de eventos.

3.2 Desenvolvimento do software de dimensionamento de espessadores

Inicialmente, foi elaborado o mecanismo de exportar arquivos em formato ".csv" para o *software* desenvolvido.Isso foi feito através da aplicação de três objetos nativos da plataforma Lazarus: o OpenDialog, o StringGrid e o Tbutton. O arquivo ".csv" pode ser construído em excel, de modo que se coloque em uma planilha os dados somente nas colunas A e B, sendo a coluna A o tempo de cada dado em minutos e a coluna B a altura de interface de polpa, em cm. Um exemplo é demonstrado a baixo:





Fonte:Autor

Segundo a documentação oficial, o OpenDialog é um objeto que permite exportar arquivos, a StringGrid é um componente de planilha tabular de dados e o Tbutton é um botão simples, onde o evento programado é o clique com o botão direito do mouse.

A partir do banco de dados importado, cada modelo matemático utilizado foi programado para que um único botão execute a operação. Para a construção do sistema de interpolação das *splines* cúbicas, a estrutura de laço de repetição foi utilizada para construir o sistema de *spline*.

Γ	2	1	0	0	0		0	0	0]	$\begin{bmatrix} D_0 \end{bmatrix}$	$\frac{3(y_1-y_0)}{\Delta_0}$
	δ_0	$(2\delta_0 + 2)$	1	0	0		0	0	0	D_1	$\frac{3(y_3-y_2)}{4} + \frac{3\delta_1(y_2-y_1)}{4}$
İ	0	δ_1	$(2\delta_1 + 2)$	1	0		0	0	0	D_2 _	$\frac{3(y_4-y_3)}{2} + \frac{3\delta_2(y_3-y_2)}{2}$
	0	0	δ_2	$(2\delta_2 + 2)$	1	۰.	0	0	0		$\frac{3(y_5-y_4)}{4} + \frac{3\delta_3(y_4-y_3)}{4}$
ł	0	0	0	0	0		δ_{k-2}	$(2\delta_{k-2} + 2)$	k		:
l	0	0	0	0	0		0	1	2	D_k	$3(y_k-y_{k-1})$
									_	2 2	$\Delta k = 1$

Figura 31 – Sistema genérico para interpolação por splines cúbicas.

Fonte:Autor

Basicamente, o problema se resume em calcular δ_k para todo o intervalo, através dos Δ_k . O sistema construído será resolvido pelo método de Gauss-Seidel. A estrutura utilizada é um laço triplo aninhado, de modo que os laços interiores estimam os resultados das incógnitas e o laço externo é o laço das iterações do método (definido por padrão como 900 iterações). Após as iterações, os coeficientes são finalmente calculados e uma matriz com os coeficientes das *splines* foi registrada.

Para a construção do gráfico da curva de sedimentação, foram utilizados dois componentes do Lazarus: o ListChartSource e o Tchart. O ListChartSource é um componente que armazena os pontos para registrar em um Tchart, que é o gráfico em si.

Para o cálculo das regressões lineares da reta de sedimentação livre e de compressão foi utilizada uma estrutura de laços para aumentar o número de pontos utilizados até um coeficiente de determinação de 90%. A única diferença relevante entre as duas construções é que a reta de sedimentação livre inicia sua regressão no primeiro ponto da curva de sedimentação, enquanto a reta de compressão inicia sua regressão no ponto de mínima altura de interface.

A reta bissetriz é calculada analiticamente pelo método deduzido através da distância de ponto à reta. Seguindo a construção geométrica de Talmadge e Fitch, após a construção da curva de sedimentação e da bissetriz das retas de compressão e sedimentação livre, deve-se conjugar as duas estruturas, buscar sua interseção específica e traçar a reta tangente.

A curva de sedimentação é composta ponto a ponto por um polinômio de grau 3 diferente para cada trecho. Sendo assim, optou-se por encontrar, primeiramente, em qual trecho está a interseção entre a bissetriz e a curva de sedimentação e, por fim, encontrar a interseção propriamente dita, por motivos de eficiência computacional.

Sabe-se que as condições de interseção entre uma reta e uma curva, definidos em dado intervalo em coordenadas cartesianas (x, y), são:

• Devem estar definidos no mesmo intervalo (x_i, x_{i+1}) ;

• Se os pontos (y_i, y_{i+1}) da curva forem os pontos de mínimo ou de máximo global da função, pode-se dizer que o produto $(ax_i + b - y_i)$ será negativo se existir um ponto da reta que pertença também a curva).

O segundo critério tem uma explicação semelhante à dada pelo teorema de Bolzano, que afirma que uma função terá, pelo menos, uma raiz em um intervalo [a, b] se, e somente se, $f(a) * f(b) \le 0$. O motivo do teorema garantir, pelo menos, uma raiz no intervalo vem do fato de que f(x) pode ser muito instável próxima de y=0, podendo cortar o eixo x em vários pontos (mais de uma raiz).

Tomando h(x) como a *spline* de um trecho qualquer e g(x) como a equação da reta bissetriz, pode-se tomar f(x) como a diferença entre as duas funções ou, geometricamente, a distância vertical entre a reta e a curva para um mesmo x. Se em um trecho [a, b], onde a *spline* está definida, houver, pelo menos, uma raiz, então $f(a) * f(b) \le 0$.

Para o caso das curvas de sedimentação, podemos garantir que haverá somente uma solução (interseção entre reta e curva) se, e somente se, o produto descrito no segundo critério será negativo. Caso contrário (a reta não interceptar a curva naquele trecho), o produto será positivo. Ao se encontrar o trecho onde há interseção, pode-se encontrar o ponto de interseção propriamente dito, seja de forma analítica ou numérica.





Fonte:Autor

Na representação acima, utilizou-se um teste de sedimentação em proveta para dimensionamento de espessador via Talmadge e Fitch. Ao se construir a reta bissetriz e a curva de sedimentação, buscou-se o trecho de interseção e a equação da *spline*, correspondente (representada em verde). Em vermelho, está a equação da reta bissetriz e, em roxo, a equação que corresponde à diferença entre a reta e a *spline*, sendo essa uma função contínua no intervalo 0,1 que possui uma raiz no intervalo, que pode ser salientado pelo teorema de Bolzano.

Um outro ponto importante é de que o intervalo utilizado no exemplo foi uma abscissa entre 0 e 1 do mesmo modo como o sistema de resolução das *splines* foi resolvido. Ou seja, há embutido na equação da *spline* a transformação de x em t, vista na construção do método prático de *splines* cúbicas. Dessa forma, a equação da bissetriz real também foi ajustada, transformando x em t.

Após encontrar o trecho onde há interseção e, por consequência, a equação cúbica correspondente na curva de sedimentação, pode-se, por fim, realizar uma varredura no trecho (segmentando o intervalo em pequenos valores de x) até que seja encontrado o ponto que seja a interseção propriamente dita entre a bissetriz e a curva de sedimentação. Uma outra solução seria simplesmente resolver analiticamente ou numericamente a equação de terceiro grau. A abordagem da varredura no trecho foi considerada de mais simples implementação, portanto foi utilizada. O coeficiente angular da reta tangente ao ponto de interseção entre a curva de sedimentação e a reta bissetriz foi encontrado através da transformação de x em t e do cálculo da derivada no ponto de intercessão, e o coeficiente linear da reta foi encontrado impondo que a reta passa pelo ponto.

Por fim, o tempo crítico é calculado encontrando o ponto em que a reta tangente atinge o valor de ordenada igual à menor altura de interface (ponto onde a reta intercepta a horizontal da curva de sedimentação).

Determinado o tempo crítico, é possível, então, calcular o tamanho do espessador e simular seu balanço de massa. Para isso, são necessários os seguintes dados do teste de sedimentação e do projeto de espessamento:

- Volume da proveta (ml);
- Altura inicial (m);
- Taxa de sólidos na alimentação do espessador (t/h);
- Massa de sólidos no teste de sedimentação (g);

Densidade dos sólidos (g/ml = t/m^3).

Calcula-se, então, a concentração inicial de sólidos e a razão de espessamento:

$$C_o = \frac{m_s}{v_p} \tag{106}$$

$$R_{esp} = \frac{t_{crit}}{C_0 h_0} \tag{107}$$

A razão de espessamento é dada em $\frac{m^2}{\frac{t}{h}}$ e significa a área necessária para espessar 1 t/h de polpa alimentada no espessador. Logo, para se calcular a área do espessador, temos:

$$A = R_{esp} * taxa \tag{108}$$

E o diâmetro:

$$D = 2 * \sqrt{A/\pi} \tag{109}$$

Para se calcular a altura de espessamento, o usuário do *software* escolherá em uma lista suspensa a fração de sólidos desejada no *underflow*. As opções advêm de cada ponto do teste de proveta.

O volume do espessador pode ser dado por:

$$V_{esp} = t_{final} * V_{polpa} \tag{110}$$

Sendo que V_{polpa} é a vazão de polpa esperada na alimentação do espessador, que pode ser calculada com equações simples de balanço de massa, sabendo a taxa de sólidos e o teor de sólidos na alimentação do espessador. E t_{final} é o tempo correspondente para a porcentagem de sólidos selecionada.

Além disso, calcula-se a altura da zona de compressão para aplicação da regra dos três pés:

$$H_{comp} = V_{m\acute{e}dia}/\acute{a}rea \tag{111}$$

Sendo que a vazão média da zona de compressão é calculada através dos dados do teste de proveta, utilizando a densidade de polpa média e porcentagem de sólidos média dos pontos próximos ao ponto escolhido como porcentagem de sólidos para o *underflow*.

Se a altura da zona de compressão for maior que 3 pés, recalcula-se a área adotando esse valor máximo e se considera a altura total do espessador como 9 pés (2 de clarificação, 2 de alimentação, 2 de transição e 3 de compressão). Por outro lado, se a altura da zona de compressão for menor que 0,5 pés, adota-se esse valor mínimo, também recalculando a área final. Os recálculos de área são feitos pela Equação 111.

Pode-se adotar o teste de proveta como uma simulação da sedimentação no espessador contínuo, de acordo com as teorias clássicas de Cloe e Clevenger. Para isso, considera-se que o volume de água clarificado em um dado tempo de sedimentação t é *overflow* no espessador industrial e o volume de polpa restante é a polpa do espessador naquele tempo t. Para se calcular a porcentagem de sólidos no *underflow* do espessador dimensionado, basta tomar o tempo t como o tempo máximo de sedimentação t_{final} . As equações utilizadas são:

$$V_{polpa} = \frac{H_t * V_0}{H_0} \tag{112}$$

$$m_{polpa} = \left(V_{polpa} - \frac{m_s}{d_s}\right) + m_s \tag{113}$$

$$P.S. = \frac{m_{polpa}}{v_{polpa}} \tag{114}$$

Dessa forma, pode-se simular o balanço de massa esperado para o espessador industrial, sabendo o teor de sólidos na alimentação e no *underflow*, e impondo que a vazão de sólidos na alimentação e no *underflow*, e impondo que a vazão de sólidos na alimentação e no *underflow* é a mesma (supondo que não há perda de finos para o *overflow*).

4. INTERFACE DO SOFTWARE E ESTUDO DE CASO

4.1 Interface

Uma das grandes vantagens do Lazarus é o desenvolvimento de um *software* que pode ser executado em qualquer computador, independentemente de haver ou não o Lazarus ou alguma interface de programação em Pascal.

Para um exemplo de funcionamento, tomou-se um arquivo ".csv" de um teste de sedimentação de um exemplo do livro Teoria e prática do tratamento de minérios V2 de Arthur Pinto Chaves (2004).

O *software* foi desenvolvido com quatro formulários do Lazarus, sendo que formulários nada mais são do que abas ou janelas do *software*, onde se colocam as componentes. No *software* desenvolvido, há o formulário de construção geométrica – responsável pelo traçado da curva de sedimentação e pela construção da determinação do tempo crítico – há um formulário que compila dados dos modelos utilizados para construção geométrica, há o formulário dimensionador – que pede um *input* de dados do teste de proveta e características do material e do projeto para dimensionar um espessador e simular seu balanço de massa de forma simples – e há um formulário de simulação de espessador instalado.



Figura 33 - Formulário "construção geométrica"

Fonte:Autor

Na região à esquerda do formulário está a planilha que recebe os dados do arquivo ".csv" após o usuário clicar no menu superior Exportar > Exportar dados.

Pode-se prosseguir para a execução da construção geométrica de forma direta onde no gráfico estará o resultado da construção geométrica e o valor do tempo crítico estará descrito na tela. Outra opção é a execução manual da construção geométrica, onde o usuário comandará ao *software* a construção de cada estrutura analítica do gráfico, através dos menus superiores.

Figura 34 – Procedimento para construção geométrica para dimensionamento.



Fonte:Autor

A Figura 33 mostra o procedimento para realizar a construção geométrica. Primeiro se exportar o arquivo .csv com os tempos em minutos e altura de interface em centímetros e decide-se entre a execução direta – feita pelo *software*, na qual todas as estruturas são plotadas automaticamente e determina-se o tempo crítico – e a execução manual – onde o usuário plota a curva de sedimentação, as retas de compressão e sedimentação livre, a reta bissetriz e a reta tangente, para, finalmente, determinar o tempo crítico e prosseguir para o dimensionamento –.

Para a simulação, o procedimento será o mesmo: ao fim da determinação do tempo crítico, o usuário deverá prosseguir para o formulário de simulação.

O fluxograma da Figura 33 é traduzido pelo esquema de menus superiores do formulário, que controla todas essas funções:

Exportar Executar Dimensionar Detalhamento	Exportar Executar Dimensionar Detalh	amento	Exportar Executar	imensionar Detalhamento
Exportar CSV	Execução direta			Dimensionar espessador
	Execução manual 🔸	Plotar curva		Simular espessador
	Limpar	Reta 1		
		Reta 2		
		Reta bissetriz		
		Reta tangente		

Figura 30 – Esquema dos menus superiores do software.

Fonte:Autor

Após a construção geométrica, o usuário pode escolher dimensionar um espessador e ser direcionado para o formulário correspondente:

Dimensionador		- 0 X
		Inputs
Conc. inicial (t/m3) Tx Sólido Razão de espessamento (ft2/t/d) % de sól	es (t/h) Vz Polpa (m3/h) idos Vz Água (m3/h)	Volume da proveta(ml) massa (g) Altura inicial (m) densidade de sólidos (g/ml) Tempo crítico (h) Sólidos na alimentação (t/h) Teor de sólidos no Underflow: v Dimensionar espessador v Área do espessador (m2) j Diâmetro (m) j Diâmetro (m) j Altura do espessador (m) j

Figura 36 – Formulário de dimensionamento do espessador.

Fonte:Autor

4.2 Estudo de caso

O exemplo estudado traz dados do livro "Teoria e Prática do Tratamento de Minérios", de Arhur Pinto Chaves (2004). O exercício propõe o dimensionamento de um espessador com o método de Talmadge e Fitch, através de um ensaio de sedimentação.



Figura 37 – Dados do ensaio de sedimentação do exercício proposto por Chaves (2004).

Fonte:Autor

Ao aplicar a execução direta pelo método do *software* se atinge o resultado de tempo crítico da Figura 38:


Figura 38 – Tempo crítico determinado pelo software.



Chaves (2004), ao resolver o exercício, encontra um tempo crítico semelhante, 0,57 h. Para o prosseguimento, será adotado o mesmo tempo crítico do livro, para avaliar a assertividade da solução proposta pelo *software*.



Figura 39 – Resultados do dimensionamento.

No livro didático, Chaves chega a um resultado de um espessador com 793,8 metros quadrados e uma altura na zona de compressão de 0,42 pés, sendo necessário adotar 0,5 pés como altura de compressão, semelhante ao resultado da Figura 39.

No entanto, pode-se considerar também o tempo encontrado originalmente pelo software, até mesmo para comparação e sensibilização desse fator. Dessa forma encontra-se o seguinte espessador:

Figura 40 – Resultados do dimensionamento, para o tempo crítico de 0,6 horas.

Dimensionador			-	×
40 t/h 383,3 m3/h 9,80 % 368,2 m3/h		Inputs		
4		281,7 m3/h 200 massa (g) 200,74 281,7 m3/h Altura inicial (m) 0.405 densidade de sólidos (g/ml) 2.65 281,7 m3/h Tempo crítico (h) 0.60 Sólidos na alimentação (t/h) 40 Teor de sólidos no Underflow: 31.6 Volume da proveta(ml) 200,74		
40 t/h 31,6 %	101,5 m3/h 6 86,4 m3/h	Dimensionar espessador		
Conc. inicial (t/m3)		Geometria do espessador		
Razão de espessamento (ft2/t/d) 3666,92		área do espessador (m2) 834.64		
		Volume do espesador (m2) 1653 50		
Tx Sólidos (t/h)	Vz Polpa (m3/h)	Diâmetro (m) 32.60		
% de sólidos	Vz Água (m3/h)	Altura do espessador (m) 1,98		
<				>



Algumas considerações devem ser feitas:

• É importante o analista dos dados avaliar se, de fato, a curva da *spline* cúbica faz sentido. Nos trechos compreendidos entre os pontos coletados, podem surgir *splines* com pontos de inflexão dentro do intervalo, o que é prejudicial para a análise e não representa o fenômeno corretamente. O recomendável é alterar ou expurgar dados para avaliação, ou repetir o ensaio.

• No exemplo de Chaves (2004), a vazão média de polpa foi calculada a partir da densidade de polpa média e teor de sólidos médio do trecho propriamente de compressão. Para o *software*, adotou-se a princípio mesmo critério. Caso o usuário escolha uma porcentagem de sólidos que corresponda à um tempo de residência total abaixo do tempo de maior concentração o critério adotado foi o cálculo da vazão média da compressão será feito com os 4 pontos anteriores ao ponto do ensaio escolhido como concentração de *underflow*.

• O balanço de massa simulado considera que, de fato, o comportamento em proveta representará a sedimentação contínua industrial, de acordo com as teorias clássicas. Estudos de casos de espessadores instalados aliados com amostragens e testes de proveta podem indicar que é necessário algum fator de *scale-up* do comportamento da proveta para o contínuo.

5. CONCLUSÃO

Pode-se concluir que a importância da sustentabilidade ambiental e econômica das operações de tratamento de minérios é crescente, de modo que devem se tornar mais eficientes no quesito de impactos ambientais. Atualmente, a gestão de água para os processos é vista com grande importância na mitigação dos impactos ambientais, sendo que os engenheiros tratamentistas devem se atentar ao reuso e tratamento dos efluentes da mineração.

Os métodos computacionais de programação são ferramentas poderosas no contexto da engenharia de minas atualmente, com o uso difundido de diversos *softwares* para atividades específicas dessa área. Para a construção dessas ferramentas, o conhecimento de métodos numéricos, analíticos e geométricos é de suma importância, além da capacidade de associar e adaptar esses conhecimentos a métodos clássicos (sejam eles determinísticos, fenomenológicos, empíricos, entre outros) para aplicações em projetos de engenharia, como o uso dos diversos modelos deste trabalho (*splines* cúbicas, cálculo diferencial, geometria analítica e álgebra linear, análise e métodos numéricos) e para aplicação do clássico método de Talmadge e Fitch.

Para o exemplo estudado, foi possível demonstrar efetividade na aplicação do método de Talmadge e Fitch através do *software* desenvolvido, de maneira rápida, simples, criteriosa e eficiente. O trabalho ressalta a importância de propor novas roupagens para métodos clássicos do tratamento de minérios, de forma a garantir a representatividade dos dimensionamentos.

REFERÊNCIAS

ALVES, V. et al. Implementação de um Sistema para o Escalonamento de Espessadores de Polpa. Metalurgia Abm, 2007.

ANTON, H.; RORRES, C. Álgebra Linear com Aplicações. Porto Alegre : Bookman, 2012.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D.; BURDEN, A. M. Análise Numérica. São Paulo : Cengage Learning, 2016.

CAMPOS FILHO, F. F. Algoritmos Numéricos.LTC, 2007.

CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. **Métodos Numéricos para Engenharia** - 7^a Edição. McGraw Hill Brasil, 2016.

CHAVES, A. P. **Teoria e Prática do Tratamento de Minérios**. Volume 2: Desaguamento, espessamento e filtragem. Oficina de Textos, 2013.

CHAVES, A. P. **Teoria e Prática do Tratamento de Minérios**. Volume 2. Signus editora, 2004.

CRISSAF, L.; DELGADO, J.; FRENSEL, K. Apostila de Geometria Analítica e Cálculo Vetorial. Universidade Federal Fluminense, 2018.

DA LUZ, A. B.; LINS, F. A. F. Introdução ao Tratamento de Minérios. CETEM/MCT, 2010.

DAHLSTROM, D. A. Dewatering Methods. In: DARLING, P. (Ed.). **SME MINING ENGINEERING HANDBOOK**. Society for Mining, Metallurgy, and Exploration, Inc., 2011. DOESCHER, E. **Esquema Prático para Splines Cúbicas**. 2021 Disponível em: https://www.youtube.com/watch?v=RT6G_K_NiQA&t=901s&ab_channel=Prof.ErwinDoesc her. Acesso em: 20 fev. 2025.

FRANÇA, S. C. A.; MASSARANI, G. Separação Sólido-Líquido. In: **Tratamento de Minérios**. 5 Ed. CETEM/MCT, 2010.

FRANCO, N. M. B. Cálculo Numérico. Universidade de São Paulo, 2006.

GUIMARÃES, F. A. V. **Revisão nos Métodos de Dimensionamento de Espessadores e Comparação dos Modelos Industriais**. Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.

MAINDL, T. I. Introduction to Cubic Spline Interpolation with Examples in Python. 2018

MCKINLEY, S.; LEVINE, M. Cubic Spline Interpolation. 2013.

QUARTERONI, A. et al. Numerical Mathematics. New York, Ny: Springer New York, 2007.

RUGGIERO, M. G.; DA ROCHA LOPES, V. L. Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais. Pearson Universidades, 2000.

SVAROVSKY, L. Solid-Liquid Separation. Butterworth-Heinemann, 2001.

TALMAGE, W. P.; FITCH, E. B. Determining Thickener Unit Areas. Ind. Eng. Chem, 1955.

VALADÃO, G. E. S.; DE ARAUJO, A. C. Introdução ao Tratamento de Minérios. Editora UFMG, 2007.

WILLS, B. A.; FINCH, J. A. Wills' mineral processing technology: an introduction to the practical aspects of ore treatment and mineral recovery. 8. ed. Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 2016.