

ESTUDO DE SISTEMAS LINEARES PARA ESTIMATIVA DA CONCENTRAÇÃO DE CONTAMINANTES EM AMOSTRAS DE MINÉRIOS



Rafael Küch¹, Liliane Basso Barichello¹

rafaelkuch@ufrgs.br

¹ Departamento de Matemática Pura e Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul



INTRODUÇÃO

- **Caolim**[1] é um minério composto de caulinita (e demais minérios), que por ser da cor branca, é utilizado na fabricação de papel, cerâmicas, tintas, etc. Em Rio Capim no Pará, o caolim é encontrado na natureza acompanhado de contaminantes com cores fortes e comportamentos distintos no que diz respeito à sua remoção da natureza, comprometendo a qualidade do produto final.
- Atualmente, a principal propriedade usada para o controle de qualidade do caolim é a **alvura**, que é um parâmetro simples para comparar diferentes minérios de coloração branca. Porém, o uso da alvura acaba sendo ineficiente nas jazidas de Rio Capim.
- Uma nova abordagem baseada na teoria de **Kubelka-Munk**[2] para transporte de radiação, visando **determinar a concentração de contaminantes via sistema lineares** $Ax=b$, foi proposta por pesquisadores do departamento de Engenharia de Minas da UFRGS.
- No sistema linear de estudo, o **número de linhas** está associado aos diferentes **comprimentos de onda** dos contaminantes considerados e as **soluções** são as **concentrações de contaminantes**.

OBJETIVO

Análise dos sistemas lineares, gerados pelo modelo criado para estimativa de concentração de minérios, quanto à sua consistência e aspectos computacionais.

METODOLOGIA

Foi utilizado o software **MATLAB 2012a**, para analisar questões como **existência**[3] e **unicidade de soluções**[3]. Particularmente baseadas na avaliação numérica do posto e **condicionamento** do sistema. Técnicas como a **fatoração LU**, **mínimos quadrados** e **decomposição em valores singulares**, também foram empregadas neste trabalho.

RESULTADOS

- Características dos sistemas lineares (amostras) do tipo **62x23: mal condicionados**, tendo um número de condicionamento acima de 10^6 . **posto=23** e **resultados inconsistentes**, pois como estamos procurando concentrações, não poderíamos ter resultados negativos, o que aconteceu na maioria das amostras.
- Para contornar este problema, foi usado o método de **mínimos quadráticos**, com a restrição que o vetor solução não poderia ter componentes negativas. Fisicamente obtivemos melhores resultados usando este método, mas ainda diferentes das soluções previamente estabelecidas por outros pesquisadores.
- Na figura 1 mostramos a comparação de soluções em uma amostra.

$$x = \begin{bmatrix} -0.000075173412197 \\ 0.000134143135141 \\ -0.000198666939241 \\ 0.000136031523612 \\ 0.000001338199018 \\ 0.621437011987586 \\ 0.000035198284202 \\ 0.000008867349795 \\ -0.000019753155848 \\ -0.000001389089268 \\ -0.000000820965214 \\ 0.378544472748469 \\ -0.000003505782425 \\ 0.000002433131663 \\ -0.000000538711192 \\ -0.000000054292854 \\ -0.000000327957828 \\ 0.000000601179121 \\ 0.000000283449526 \\ 0.000000177078803 \\ -0.000000586634144 \\ 0.000000171767748 \\ 0.000000087105517 \end{bmatrix} \quad x' = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.000110155299914 \\ 0 \\ 0 \\ 0.621375035980124 \\ 0.000012165973850 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.378502214932868 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0.000000211477311 \\ 0 \\ 0 \\ 0.00000075476003 \\ 0.00000087199636 \\ 0.000000053660035 \end{bmatrix} \quad x_2 = \begin{bmatrix} 0.001372250118372 \\ -0.002537123025084 \\ 0.001766136108748 \\ -0.000316639165303 \\ -0.000265113392683 \\ 0.621474496879801 \\ 0.000013705553784 \\ 0.000000883876269 \\ -0.000012981071740 \\ 0.000025660900468 \\ 0.000000030209106 \\ 0.378480299983857 \\ -0.000008601474137 \\ 0.000010164995630 \\ -0.000004799126593 \\ 0.000001963049336 \\ -0.000000780913704 \\ 0.000000654588547 \\ -0.000000795427516 \\ -0.000000453419786 \\ 0.000001386687827 \\ -0.000000802942676 \\ 0.000000457007478 \end{bmatrix}$$

Figura 1. Vetores soluções, onde x foi obtido resolvendo o sistema com o comando linsolve, x' via mínimos quadrados não negativos e x2 são dados previamente calculados, enviados para comparação

DISCUSSÃO E CONCLUSÃO

A confiabilidade das soluções deve ser melhor investigada, pois com um número de condicionamento tão elevado, qualquer pequeno erro de medida, pode alterar drasticamente a solução do mesmo. Neste sentido, a dificuldade numérica constatada, juntamente com a importância da aplicação, nos direciona a busca de novos métodos, como estimativa de parâmetros por problemas inversos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1- Gonçalves, Í. G., Petter, C. O., Machado, J. L. Quantification of Hematite and Goethite Concentrations in Kaolin Using Diffuse Reflectance Spectroscopy: A New Approach to Kubelka-Munk Theory, Clays and Clay Minerals, Vol. 60, No. 5, p. 473-483, 2012.
- 2- Kortüm, G. Reflectance Spectroscopy, Springer-Verlag, 1969.
- 3- Datta, K. B. Matrix and Linear Algebra, 7. ed., 2006.