



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

MODELAGEM DO DESEMPENHO SEPARATIVO DE
ULTRACENTRÍFUGAS POR REGRESSÃO MULTIVARIADA
COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA

ELDER MIGLIAVACCA

Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Reatores

Orientador:
Dr. Delvonei Alves de Andrade

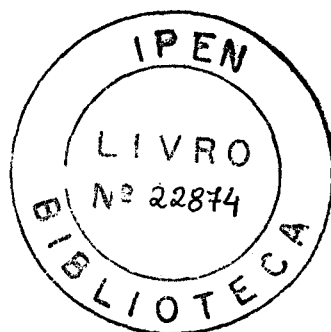
São Paulo
2004

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**MODELAGEM DO DESEMPENHO SEPARATIVO DE
ULTRACENTRÍFUGAS POR REGRESSÃO MULTIVARIADA
COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA**

ELDER MIGLIAVACCA



Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear-Reatores

Orientador: Dr. Delvonei Alves de Andrade

SÃO PAULO

2004

Em memória de
Ângelo, Assunta e Wilson

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador Dr. Delvonei Alves de Andrade, pela correção e orientação deste trabalho e pelo encorajamento durante esse período.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) e ao Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo (CTMSP), pela permissão para o desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus colegas do CTMSP-II que, direta ou indiretamente colaboraram para elaboração deste trabalho, de modo especial, a Mônica de Carvalho Vasconcelos Andrade e Maria Ursulina de Lima e Cruz, pelo companheirismo.

Finalmente agradeço à minha esposa Sylvana e principalmente meus filhos Paulinho, Gaby e Léo, pelo incentivo, paciência e carinho.

MODELAGEM DO PODER DE SEPARAÇÃO DE ULTRACENTRÍFUGAS POR REGRESSÃO MULTIVARIADA COM MATRIZ DE COVARIÂNCIA

Elder Migliavacca

RESUMO

Neste trabalho é aplicada a metodologia de matrizes de covariância e método de mínimos quadrados na determinação de uma curva de ajuste para obter uma função de desempenho do poder ou a capacidade de separação δU de uma ultracentrífuga em função de variáveis que são experimentalmente controladas. Os dados experimentais consistem em um conjunto de 460 experimentos, que são obtidos no processo de separação isotópica de urânio por ultracentrifugação. São consideradas as incertezas experimentais associadas às variáveis utilizadas para o cálculo do poder de separação, determinando assim uma matriz de covariância dos dados experimentais. As variáveis de controle que exercem uma influência significativa nos valores de δU são o fluxo de alimentação F , o corte θ e a pressão na linha de produto P_p . Após a validação da qualidade do ajuste do modelo obtido, é realizada a análise dos resíduos, avaliando-se as premissas assumidas em relação à sua aleatoriedade e independência e, principalmente, à verificação da existência de heteroscedasticidade dos resíduos com qualquer variável explicativa do modelo de regressão. São construídas as curvas de superfície do poder de separação δU em função das variáveis de controle F, P_p e θ , para a comparação do modelo ajustado em relação aos pontos experimentais e para, finalmente, a determinação de seus valores ótimos.

ULTRACENTRIFUGE SEPARATIVE POWER MODELING WITH MULTIVARIATE REGRESSION USING COVARIANCE MATRIX

Elder Migliavacca

ABSTRACT

In this work, the least-squares methodology with covariance matrix is applied to determine a data curve fitting to obtain a performance function for the separative power δU of a ultracentrifuge as a function of variables that are experimentally controlled. The experimental data refer to 460 experiments on the ultracentrifugation process for uranium isotope separation. The experimental uncertainties related with these independent variables are considered in the calculation of the experimental separative power values, determining an experimental data input covariance matrix. The process variables, which significantly influence the δU values are chosen in order to give information on the ultracentrifuge behaviour when submitted to several levels of feed flow rate F , cut θ and product line pressure P_p . After the model goodness-of-fit validation, a residual analysis is carried out to verify the assumed basis concerning its randomness and independence and mainly the existence of residual heteroscedasticity with any explained regression model variable. The surface curves are made relating the separative power with the control variables F , θ and P_p to compare the fitted model with the experimental data and finally to calculate their optimized values.

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO.....	1
2 OBJETIVOS.....	2
3 TEORIA DO PROCESSO DE ULTRACENTRIFUGAÇÃO.....	3
3.1 Definições, nomenclatura e gás de processo.....	3
3.2 Grandezas de fluxo e de composição da unidade de separação.....	4
3.3 Fatores de separação da unidade de separação de isótopos.....	5
3.4 Corte da unidade de separação.....	6
3.5 Poder de separação da unidade de separação.....	7
3.5.1 Poder de separação do elemento de separação simples.....	9
3.6 Descrição do processo de ultracentrifugação.....	11
3.6.1 Pressão interna da ultracentrífuga.....	13
4 METODOLOGIA.....	14
4.1 Matrizes de covariância e incertezas experimentais.....	16
4.1.1 Natureza das incertezas.....	16
4.1.2 Matrizes de covariância.....	17
4.2 Obtenção da matriz de covariância do poder de separação δU	18

4.3	Determinação das incertezas parciais de R_p , R_w , P , e W propagadas na fórmula empírica do poder de separação.....	20
4.3.1	Determinação das incertezas das razões isotópicas de produto R_p e rejeito R_w	21
4.3.2	Determinação das incertezas dos fluxos de produto P e rejeito W	22
4.4	Método dos mínimos quadrados.....	23
4.4.1	Método dos mínimos quadrados com matrizes de covariância.....	24
4.5	Uso do valor do χ^2 para avaliar a qualidade do ajuste.....	25
4.5.1	Qui-quadrado reduzido.....	26
4.6	Determinação do modelo de regressão.....	27
4.7	Descrição do procedimento de cálculo da curva de ajuste.....	27
4.8	Avaliação do modelo de regressão.....	28
4.8.1	Verificação – resultado versus significância.....	28
4.8.2	Teste nos coeficientes estimados do modelo.....	29
4.8.3	Avaliação da qualidade do ajuste de um modelo de regressão.....	30
4.8.3.1	Matriz de covariância e matriz de correlação dos parâmetros.....	30
4.8.3.2	Detecção de pontos extremos.....	30
4.8.3.3	Coefficiente de correlação.....	31

4.8.3.4	Coeficiente de determinação (R-quadrado).....	31
4.8.3.5	R-quadrado ajustado.....	31
4.8.4	Análise de resíduos.....	32
4.8.4.1	Desvio-padrão dos resíduos.....	32
4.8.4.2	Correlação serial.....	32
4.8.4.3	Verificação da normalidade dos resíduos.....	33
4.8.4.4	Testes para heteroscedasticidade dos resíduos.....	33
4.8.4.4.1	Teste de correlação de Spearman.....	33
4.8.4.4.2	Teste de Park.....	34
4.9	Correção da heteroscedasticidade dos resíduos.....	34
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	35
5.1	Explorando os dados experimentais.....	35
5.1.1	Verificação da distribuição dos dados experimentais.....	36
5.2	Obtenção das curvas de ajuste.....	37
5.2.1	Cálculo do Poder de Separação.....	38
5.2.2	Cálculo da matriz de covariância dos valores experimentais do poder de separação δU	38

5.2.3	Montagem da matriz projeto A	38
5.2.4	Obtenção das estimativas dos coeficientes do modelo de regressão.....	39
5.2.5	Primeiro modelo de regressão.....	39
5.2.6	Eliminação de pontos extremos.....	42
5.2.7	Geração de novos modelos de regressão.....	42
5.3	Verificação do MODELO 5.....	44
5.3.1	Verificação da normalidade dos resíduos.....	44
5.3.2	Verificação da heteroscedasticidade dos resíduos.....	45
5.4	Correção da heteroscedasticidade dos resíduos do MODELO 5	48
5.5	Análise da qualidade do ajuste do MODELO 5	50
5.5.1	Avaliação gráfica da heteroscedasticidade.....	51
5.5.2	Teste da hipótese de nulidade dos coeficientes da regressão.....	54
5.5.3	Verificação da correlação serial entre os resíduos	54
5.6	Verificação gráfica da curva ajustada aos pontos experimentais.....	55
5.6.1	Construção das curvas de resposta do poder de separação δU em função das variáveis de controle do processo.....	55
5.7	Determinação dos valores ótimos das variáveis de controle.....	58

5.7.1	Determinação da incerteza de interpolação.....	60
6	CONCLUSÕES.....	62
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	67
8	APÊNDICES.....	69
8.1	Apêndice A – Obtenção da forma da equação da função de valor $V(x)$	69
8.2	Apêndice B – Valores codificados das medidas das variáveis experimentais.....	73
8.3	Apêndice C – Demonstração da solução da equação matricial de ajuste por mínimos quadrados.....	93
8.4	Apêndice D – Listagem dos programas em Fortran.....	96

LISTA DE FIGURAS

		Página
Figura 3.1	Esquema de um elemento de separação simples.....	10
Figura 3.2	Esquema de uma centrífuga a contracorrente.....	11
Figura 4.1	Esquema de uma estação de ensaios instrumentada.....	14
Figura 5.1a	Histograma dos valores experimentais do poder de separação δU	37
Figura 5.1b	Curva de probabilidade normal do poder de separação δU	37
Figura 5.2	Distribuição dos resíduos do MODELO 5.....	45
Figura 5.3	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função do corte θ	47
Figura 5.4	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de θ^2	47
Figura 5.5	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $\theta^2 F^2$	48
Figura 5.6	Distribuição dos resíduos do MODELO 6.....	49
Figura 5.7	Curva do poder de separação experimental em função do poder de separação predito pelo MODELO 5.....	50
Figura 5.8	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de P_p	51
Figura 5.9	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de P_p^2	52

Figura 5.10	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $P_p^2 F$52
Figura 5.11	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $P_p^2 F^2$53
Figura 5.12	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $\delta\hat{U}$53
Figura 5.13	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de F54
Figura 5.14	Gráfico dos resíduos do MODELO 5 ao longo dos experimentos55
Figura 5.15	Curva de resposta do poder de separação δU em função do corte θ , mantidos constantes o fluxo de alimentação F e a pressão na linha de produto P_p , nos valores de referência selecionados.....56
Figura 5.16	Curva de resposta do poder de separação δU em função do fluxo de alimentação F , mantidos constantes o corte θ , e a pressão na linha de produto P_p , nos valores de referência selecionados.....57
Figura 5.17	Curva de resposta do poder de separação δU em função da pressão na linha de produto P_p , mantidos constantes o fluxo de alimentação F e o corte θ , nos valores de referência selecionados.....57
Figura 5.18	Poder de separação em função de θ e P_p , mantendo F constante.....58
Figura 5.19	Poder de separação em função de F e θ mantendo P_p constante.....59

Figura 5.20 Poder de separação em função de F e P_p , mantendo θ constante.....59

—

LISTA DE TABELAS

		Página
Tabela 3.1	Notação na unidade de separação.....	5
Tabela 4.1	Montagem das componentes do erro para cálculo da matriz de covariância.....	19
Tabela 5.1	Estimativas dos coeficientes do primeiro modelo proposto, MODELO 1, e os testes estatísticos associados	40
Tabela 5.2	Estimativas dos coeficientes do MODELO 2 e os testes estatísticos associados	40
Tabela 5.3	Matriz que contém os valores das variâncias e covariâncias, no triângulo superior, e os valores das correlações, no triângulo inferior, dos parâmetros da equação ajustada pelo MODELO 2	41
Tabela 5.4	Estimativas dos coeficientes das variáveis no polinômio de segunda ordem e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 3	43
Tabela 5.5	Estimativas dos coeficientes das variáveis no polinômio de segunda ordem e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 4	43
Tabela 5.6	Estimativas dos coeficientes das variáveis e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 5 ...	44
Tabela 5.7	Resultados do teste de Spearman para o MODELO 5.....	46

Tabela 5.8	Resultados do teste de Park para o MODELO 5.....	46
Tabela 5.9	Estimativas dos coeficientes das variáveis do MODELO 6 e os testes estatísticos associados, após transformação nos dados dependentes.....	49
Tabela 5.10	Valores ótimos do corte, pressão de produto e fluxo de alimentação, com o correspondente valor predito do poder de separação.....	60
Tabela 5.11	Matriz que contém os valores das variâncias e covariâncias, no triângulo superior, e os valores das correlações, no triângulo inferior, dos parâmetros da equação ajustada pelo MODELO 5	61
Tabela B.1	Valores codificados das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^4$).....	73
Tabela B.2	Valores codificados das medidas dos fluxos de produto e rejeito.....	77
Tabela B.3	Valores codificados do corte, do fluxo de alimentação e da pressão na linha de produto.....	80
Tabela B.4	Valores codificados das incertezas das medidas das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^6$).....	84
Tabela B.5	Valores codificados das incertezas das medidas dos fluxos de produto e rejeito.....	88
Tabela B.6	Valores codificados da variável de resposta, representada pelo poder de separação da ultracentrífuga.....	91

1 INTRODUÇÃO

O ciclo do combustível nuclear trata das etapas envolvidas na produção do combustível para reatores nucleares, desde a mineração do urânio até a montagem final dos elementos combustíveis que são utilizados no reator. O urânio é um minério encontrado na natureza na forma de uma mistura de isótopos ^{235}U e ^{238}U , na proporção de 0,71% e 99,28% em massa, mas somente o isótopo ^{235}U é físsil, nas condições utilizadas para geração de energia, daí a necessidade de elevar a concentração do isótopo físsil ^{235}U até os níveis desejáveis. O enriquecimento de urânio é a etapa mais crítica entre as que integram o ciclo do combustível nuclear e seu grau de desenvolvimento identifica os países possuidores de tecnologia nuclear. Os principais processos de enriquecimento¹ são: difusão gasosa, primeiro processo a produzir urânio enriquecido em escala industrial; ultracentrifugação gasosa, também utilizado em escala industrial, porém com menor consumo de energia; e os processos a LASER (AVLIS e MLIS), utilizados em escala piloto, mas considerados muito atrativos devido ao fator de separação muito alto com um consumo específico de energia muito baixo. O Brasil desenvolve, através do Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo (CTMSP), com apoio do Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), o processo de ultracentrifugação a gás para o enriquecimento de urânio. O trabalho proposto está inserido no desenvolvimento do processo de enriquecimento isotópico de hexafluoreto de urânio por ultracentrifugação gasosa, cuja finalidade principal é obter a capacitação na produção do combustível nuclear em condição de ser utilizado em reatores de potência, seja para produção de energia elétrica ou então para propulsão naval.

2 OBJETIVOS

O processo de separação de isótopos por ultracentrifugação é uma tarefa muito complexa, pois trata-se de uma atividade que envolve as áreas de engenharia eletrônica, mecânica e química, trabalhando passo a passo de forma dinâmica, buscando o desenvolvimento de uma ultracentrífuga. Trata-se de equipamento altamente sensível, que em sua operação normal, está sujeito a situações extremas, tanto relativas aos esforços mecânicos advindos de sua elevada rotação em vácuo, quanto às condições adversas proporcionadas pelo contato com um fluido altamente reativo e corrosivo. Deste modo, é de fundamental importância a obtenção de modelos numéricos que representem as características separativas das ultracentrífugas em desenvolvimento, permitindo orientar e agilizar o seu processo de otimização. Migliavacca² introduziu a técnica de modelagem de ultracentrífugas com diferentes características de montagem, por redes neurais. No entanto, essas análises não levaram em consideração as incertezas envolvidas nas variáveis de controle do processo. A propagação dessas incertezas no cálculo do poder de separação da ultracentrífuga permite avaliar a confiabilidade do processo.

O objetivo desse trabalho é obter modelos que relacionem o desempenho separativo de uma ultracentrífuga e as variáveis controladas no processo de separação, através da aplicação do método dos mínimos quadrados com matriz de covariância, em um conjunto de dados representando 460 experimentos, em condições variadas de fluxo de alimentação F , do corte θ e da pressão na linha de produto P_p e levando-se em conta a propagação das incertezas experimentais associadas. Desse modo, com uma relação matemática entre as variáveis controladas e as respostas analisadas, obtém-se um modelo numérico representativo da performance separativa da ultracentrífuga desenvolvida, próximo da resposta real do equipamento em operação.

3 TEORIA DO PROCESSO DE ULTRACENTRIFUGAÇÃO

A separação dos isótopos de qualquer espécie química baseia-se no fato de existirem pequenas diferenças nas propriedades físicas e físico-químicas dos isótopos, as quais provêm direta ou indiretamente de suas massas isotópicas³. Em virtude disso, a separação isotópica é muito pequena quando realizada de uma só vez, ou seja, numa etapa de separação conhecida por processo elementar de separação. Por essa razão, a realização prática da separação de isótopos estáveis requer a repetição desse processo elementar em um grande número de vezes para obter-se os enriquecimentos desejados. Essa repetição do processo elementar é feita numa instalação formada de um conjunto de dispositivos de separação ligados em série e em paralelo, que é conhecido por cascata de separação de isótopos⁴.

Os processos de separação isotópica apresentam princípios físicos e físico-químicos bastante diferentes. Todavia, com exceção dos processos a LASER, os demais apresentam aspectos comuns aos dispositivos e às cascatas por eles formadas, a saber, a pequena separação isotópica obtida e a necessidade da multiplicação do processo elementar. Foi então estabelecida^{3,4,5} uma teoria completamente geral da separação dos isótopos estáveis, que pode ser aplicada a qualquer mistura isotópica binária e a qualquer processo de separação, desde que sua extensão seja pequena.

3.1 Definições, nomenclatura e gás de processo

Dá-se o nome de unidade ou elemento de separação ao menor dispositivo de uma usina de enriquecimento isotópico que efetua apenas uma separação parcial da mistura isotópica. Exemplos são a centrífuga a gás, as barreiras tubulares da difusão gasosa e os pratos de uma coluna de destilação. Estágio de separação é um grupo de unidades de separação ligadas em paralelo e alimentadas com material de mesma composição isotópica, que produzem correntes parcialmente enriquecidas, de mesma composição isotópica, e correntes parcialmente empobrecidas, também de mesma composição isotópica,

porém diferente da composição isotópica das correntes enriquecidas. Uma cascata de separação de isótopos é um arranjo ordenado de unidades ou elementos de separação que estão interligados em série e também em paralelo, que tem por finalidade produzir material enriquecido com o fluxo e a composição desejados. A ligação em série tem por objetivo a realização múltipla da separação isotópica obtida em uma única unidade, a qual por si só não é capaz de fornecer o grau de separação desejado. Já a ligação em paralelo é feita no caso em que a capacidade volumétrica das unidades é pequena, face à quantidade de material que se deseja processar no estágio. Finalmente, em todos os processos de separação isotópica do urânio realizados em fase gasosa, o gás de processo é o hexafluoreto de urânio, (UF_6), que foi escolhido por ser o único composto volátil do urânio nas condições de pressão e temperatura, nas quais esses processos são realizados. Esse composto de urânio é muito corrosivo e reativo, apresentando, porém, a vantagem do flúor conter apenas um isótopo, a saber, o $^{19}_9F$, que não perturba a separação isotópica do urânio e, desse modo determina que a separação isotópica possa ser considerada como sendo a de uma mistura binária, a mistura $^{235}UF_6 / ^{238}UF_6$.

3.2 Grandezas de fluxo e de composição da unidade de separação

As grandezas de fluxo e de composição, que são medidas experimentalmente na separação isotópica do urânio, são as seguintes:

- (1) Fluxos de massa ou simplesmente fluxos da mistura isotópica, expressos em kg/s ou mol/s.
- (2) Composição ou teor da mistura isotópica expressa em (i) fração em peso (massa de cada componente), (ii) fração molar de cada componente e (iii) fração atômica de cada componente.

A Tabela 3.1 apresenta a notação adotada, considerando uma unidade de separação simples, na qual entra a corrente de alimentação e saem as correntes enriquecida e empobrecida no isótopo desejado (^{235}U), que são, respectivamente chamadas correntes de produto e corrente de rejeito.

TABELA 3.1

Notação na unidade de separação

Corrente	Fluxo (kg/s , mol/s)	Composição do Isótopo Desejado	
		Fração em peso ou molar	Razão de Abundância
Alimentação	F	$z=R_F/(1+R_F)$	$R_F=z/(1-z)$
Produto(enriquecido)	P	$y=R_P/(1+R_P)$	$R_P=y/(1-y)$
Rejeito(empobrecido)	W	$x=R_W/(1+R_W)$	$R_W=x/(1-x)$

O uso da razão de abundância como uma medida da composição isotópica se justifica por duas razões no estudo da separação de isótopos estáveis, a saber, (1) a simplificação de algumas relações matemáticas no estudo dos estágios e das cascatas de separação e (2) a medida experimental da composição isotópica, que é feita por espectrometria de massa, e fornece assim diretamente as razões de abundância.

3.3 Fatores de separação da unidade de separação de isótopos

A extensão da separação realizada, em condições estacionárias no elemento de separação é medida pelo fator de separação α , que relaciona as concentrações y e x do isótopo desejado nas correntes que saem do elemento e é definido pela relação da razão de abundância R_p do isótopo desejado na fração enriquecida pela razão de abundância R_w do isótopo desejado na fração empobrecida, segundo:

$$\alpha = \frac{R_p}{R_w} \quad (3.1)$$

Outras maneiras de indicar a separação realizada no elemento são (i) o fator de enriquecimento β definido por:

$$\beta = \frac{R_p}{R_F} \quad (3.2)$$

e (ii) o fator de empobrecimento γ definido por:

$$\gamma = \frac{R_F}{R_w} \quad (3.3)$$

O primeiro desses dois fatores é uma medida da concentração isotópica na fração enriquecida em relação à da alimentação e, portanto, se trata de uma medida do enriquecimento isotópico realizado pelo elemento. O segundo fator representa uma diminuição da concentração do isótopo desejado na fração empobrecida, constituindo assim uma medida do empobrecimento da mistura isotópica feito no elemento de separação.

3.4 Corte da unidade de separação

Outra propriedade fundamental da unidade de separação de isótopos, que está diretamente relacionada, não com as grandezas de separação, mas com o fluxo ou a quantidade de material em processamento, é o corte θ , definido pela relação entre o fluxo (ou a massa) da corrente enriquecida P e o fluxo (ou a massa) da alimentação F , a saber

$$\theta = \frac{P}{F} \quad (3.4)$$

Seja m_a a massa do isótopo desejado contida na massa total m da mistura isotópica correspondente ao fluxo de alimentação F . Então, a fração em peso é dada por $z = m_a/m$, dividindo pelo tempo t , temos $z = m_a/t/m/t = F_a/F$, logo $F_a = zF$ é o fluxo de massa do isótopo desejado na corrente de alimentação e F é o fluxo de massa da própria alimentação. Analogamente teremos $P_a = yP$ e $W_a = xW$. Então, os balanços de material, que devem ser satisfeitos na unidade de separação, admitindo-se que não haja perda ou acúmulo de material na unidade de separação, são expressos por:

$$F = P + W \quad (3.5)$$

para a mistura isotópica e

$$zF = yP + xW \quad (3.6)$$

para o isótopo desejado.

Se eliminarmos W das equações anteriores, obtém-se $(y-x)P = (z-x)F$. Dessa igualdade e da definição do corte dada pela Eq.(3.4), segue-se que:

$$\theta = \frac{z-x}{y-x} \quad (3.7)$$

Introduzindo-se agora na Eq.(3.7) as respectivas razões de abundância $z = R_F / (1 + R_F)$, $y = R_P / (1 + R_P)$ e $x = R_W / (1 + R_W)$, resulta a equação

$$\theta = \frac{R_F - R_W}{R_P - R_W} * \frac{R_P + 1}{R_F + 1} \quad (3.8)$$

Experimentalmente, o corte θ é obtido através dos fluxos F , P e W , medidos com os sensores de fluxo instalados nas respectivas linhas de alimentação, produto e rejeito, através das quais o gás de processo é introduzido e extraído da unidade de separação, com o auxílio da Eq.(3.4). O valor de θ assim medido pode agora ser comparado ao valor calculado com a Eq.(3.8), usando-se os valores de R_F , R_P e R_W determinados experimentalmente e com maior precisão, por espectrometria de massas.

3.5 Poder de separação da unidade de separação

A unidade de separação foi até aqui caracterizada por duas categorias diferentes de variáveis, a saber: (1) os parâmetros de separação, que são os fatores de separação α , de enriquecimento β e de empobrecimento γ e (2) os parâmetros de fluxos, representados pelos fluxos de alimentação F , de produto P e de rejeito W e pelo corte θ . Dessas duas categorias, a primeira mede apenas o efeito separador e a segunda se preocupa apenas com os fluxos relacionados com a capacidade física da unidade de separação. Nessas condições, nenhuma dessas duas variáveis permite por si só aferir simultaneamente, de um lado, o desempenho e a qualidade do elemento e, de outro lado, a tarefa e os custos da separação realizada. Resulta, então, desse fato, a necessidade de estabelecer quantidades experimentalmente acessíveis que contenham simultaneamente as grandezas de fluxo e as grandezas de separação. Os parâmetros que satisfazem essa exigência são o poder ou capacidade de separação δU e o trabalho separativo $\delta U'$. A formulação dessas duas quantidades provém, em última análise, da tarefa de separação do elemento de separação isotópica, que consiste em realizar uma variação na composição entre duas massas (expressas em kg) ou dois fluxos de massa (expressos em kg/a) que representam o produto e o rejeito da separação feita.

Nessas condições, a capacidade de uma unidade separar isótopos será tanto maior, quanto maiores forem as massas ou os fluxos materiais entre os

quais se dá a variação de concentração (efeito das massas ou fluxos) e quanto maior for a própria variação da concentração (efeito separador). A fim de exprimir quantitativamente a capacidade de separação do elemento ou do estágio, que leva em conta as duas condições acima mencionadas, Dirac e colaboradores⁴ atribuíram a cada massa da mistura isotópica um valor U' e a cada fluxo material, um valor U . Essas quantidades, são definidas pelo produto de uma função de valor $V(x)$, que depende apenas da composição isotópica x , e das respectivas massas ou fluxos da mistura isotópica. Portanto, desse modo foram definidos matematicamente o valor U' de uma massa M da mistura isotópica, por

$$U' = MV(x) \quad (3.9)$$

e o correspondente fluxo de valor U associado ao fluxo de massa L da mistura isotópica por

$$U = LV(x) \quad (3.10)$$

O termo “valor” é aqui entendido como valor de produção, isto é, do dispêndio envolvido na separação isotópica, ou em outras palavras, na obtenção de uma quantidade enriquecida e outra empobrecida no isótopo desejado, as quais de certo modo, provêm do trabalho realizado para fornecer as quantidades separadas. No entanto, sem especificar previamente as propriedades do valor e do fluxo de valor, não se pode atribuir qualquer significado físico às duas grandezas U e U' . A especificação física da função U se baseia no fato de que, quando a mistura isotópica atravessa a unidade de separação, que está realizando uma dada tarefa de separação (especificada, por exemplo, pelo fluxo do produto P e pelas composições do produto y , do rejeito x e da alimentação z) ocorre um aumento do fluxo de valor.

Finalmente, podemos fazer as seguintes afirmações:

- (1) O fluxo de valor U de um único fluxo material L e o valor U' de uma única massa M da mistura isotópica do urânio, de composição x , são, respectivamente definidos por $U = LV(x)$ e $U' = MV(x)$, mas não possuem nenhuma interpretação física.
- (2) As variações do fluxo de valor $\Delta U = U_2 - U_1$ e $\Delta U' = U'_2 - U'_1$, de um único fluxo e, respectivamente de uma única massa da mistura isotópica de urânio, que ocorrem quando a composição isotópica varia

de x_1 para x_2 , são respectivamente representados por $LV(x_2) - LV(x_1)$ e $MV(x_2) - MV(x_1)$, mas também não apresentam um significado físico particular e

- (3) As variações do fluxo de valor e do valor que ocorrem quando um único fluxo, respectivamente, e uma única massa da mistura isotópica do urânio, ambos de composição isotópica dada, são separados em dois fluxos e em duas massas de urânio, de duas composições isotópicas diferentes (também diferentes da composição da alimentação) apresentam significados físicos, a saber, a capacidade ou poder de separação δU e o respectivo trabalho separativo $\delta U'$ envolvidos na separação isotópica.

Resta a definição da função de valor $V(x)$, que é determinada com a atribuição, por Dirac, de que os aumentos $\delta U'$ e δU efetuados pela unidade ou estágio de separação serem independentes da composição isotópica dos isótopos em processamento, uma vez que o trabalho despendido na separação isotópica de um dado fluxo de alimentação não depende da composição isotópica da mistura isotópica em processamento. Com o auxílio desse critério de independência da concentração do fluxo de alimentação, pode-se agora especificar quantitativamente a função de valor $V(x)$ e estabelecer também a condição para que uma dada função da concentração isotópica x possa ser uma função de valor. A determinação dessa função está mostrada no Apêndice A.

3.5.1 Poder de separação do elemento de separação simples

Consideremos o elemento de separação simples representado na Figura 3.1, que recebe o fluxo de alimentação F , de composição z do isótopo desejado, e fornece os fluxos $P = \theta F$ da corrente enriquecida, de composição y , e $W = (1 - \theta)F$ da corrente empobrecida, de composição x .

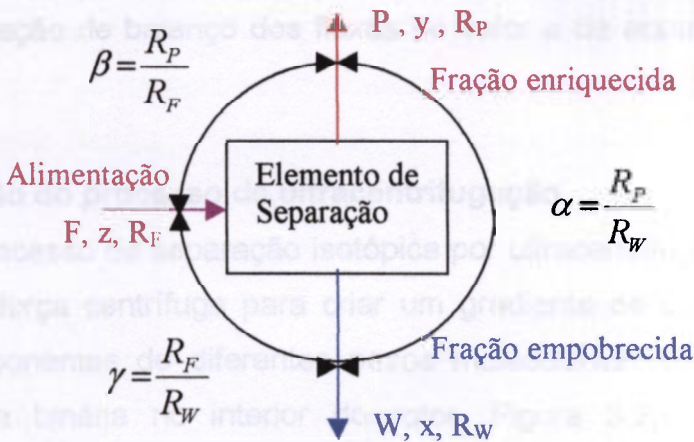


FIGURA 3.1 - Esquema de um elemento de separação simples

Nesse elemento são satisfeitos os seguintes balanços:

1. Balanço de material da mistura isotópica

$$F = P + W = \theta F + (1 - \theta)F \quad (3.11)$$

2. Balanço de material do isótopo desejado

$$Fz = Py + Wx = \theta Fy + (1 - \theta)Fx \quad (3.12)$$

3. Balanço dos fluxos de valor

$$\delta U = PV(y) + WV(x) - FV(z) \quad (3.13)$$

Com o auxílio da expressão obtida para a determinação quantitativa da função de valor $V(x)$ (Apêndice A), a saber

$$V(x) = (2x - 1) \ln \frac{x}{1 - x} \quad (3.14)$$

e fazendo a substituição na Eq.(3.13) temos

$$\delta U = P(2y - 1) \ln \frac{y}{1 - y} + W(2x - 1) \ln \frac{x}{1 - x} - F(2z - 1) \ln \frac{z}{1 - z} \quad (3.15)$$

Tendo em vista que $y = R_P / (1 + R_P)$, $x = R_W / (1 + R_W)$ e $z = R_F / (1 + R_F)$, vem, após substituição:

$$\delta U = P * \frac{R_P - 1}{R_P + 1} * \ln R_P + W * \frac{R_W - 1}{R_W + 1} * \ln R_W - F * \frac{R_F - 1}{R_F + 1} * \ln R_F \quad (3.16)$$

que expressa o poder de separação δU do elemento de separação ou do estágio através da equação de balanço dos fluxos de valor e da equação da função de valor.

3.6 Descrição do processo de ultracentrifugação

O processo de separação isotópica por ultracentrifugação gasosa³ usa o princípio da força centrífuga para criar um gradiente de densidade num gás contendo componentes de diferentes pesos moleculares. Introduzindo-se uma mistura gasosa binária no interior do rotor, Figura 3.2, são estabelecidas distribuições de pressões diferentes para os dois componentes, decorrentes da ação do campo centrífugo sobre a mistura, evidenciando-se um aumento radial de pressão no sentido do eixo para a parede do rotor, em função da dependência da ação do campo centrífugo com a massa atômica.

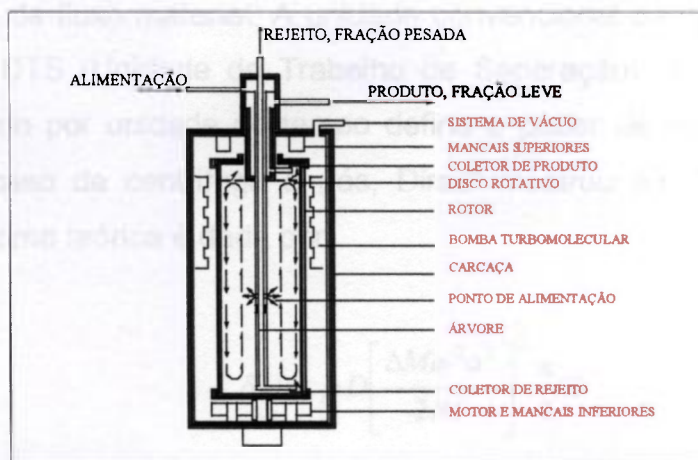


FIGURA 3.2 - Esquema de uma centrífuga a contracorrente⁵

Se a mistura binária for composta por $^{235}\text{UF}_6$ e $^{238}\text{UF}_6$, o aumento da pressão parcial do isótopo mais pesado é maior do que o do isótopo mais leve, no sentido eixo-parede do cilindro girante, ocorrendo um aumento da concentração do isótopo leve $^{235}\text{UF}_6$ nas proximidades do eixo do rotor e um aumento da concentração do outro isótopo mais distante do eixo, produzindo então uma separação parcial entre os dois isótopos. É o chamado efeito radial de separação elementar, que é multiplicado através da indução de fluxos axiais de gás em contracorrente dentro do rotor, que deslocam a massa gasosa em equilíbrio radial no sentido vertical do rotor. Esse deslocamento de gás no sentido vertical vai

continuamente perturbando as distribuições de equilíbrio das pressões e composições estabelecidas na direção radial por ação do campo centrífugo, o qual, prontamente atua no sentido de restabelecer o equilíbrio entre as correntes axiais, provocando então o transporte de massa entre as seções radiais, resultando o enriquecimento crescente da mistura isotópica no isótopo leve numa das extremidades do rotor e o empobrecimento crescente do mesmo isótopo na outra extremidade. Esta circulação de gás em contracorrente, tão importante para o processo separativo, pode ser induzida através da ação mecânica de um coletor estacionário ou através da diferença de temperatura estabelecida pelos perfis de temperatura no rotor.

Uma vez estabelecido o processo de separação isotópica no interior da centrífuga, associa-se a ela um trabalho separativo, que exprime o trabalho útil produzido. Trata-se de uma variável única que engloba as grandezas separativas e as grandezas de fluxo material. A unidade convencional para medir o trabalho separativo é o UTS (Unidade de Trabalho de Separação). A taxa de trabalho separativo gerado por unidade de tempo define o poder de separação, δU , do elemento. No caso da centrífuga a gás, Dirac⁴ mostrou em 1941, que a sua capacidade máxima teórica é dada por:

$$\delta U = \rho D \left[\frac{\Delta M \omega^2 a^2}{2RT} \right]^2 \frac{\pi}{2} Z \quad (3.17)$$

onde: ρ é a densidade dos gás de processo, D é o coeficiente de difusão, ΔM é a diferença entre as massas moleculares, ω é a velocidade angular, a é o raio do rotor, Z é o comprimento do rotor, R é a constante do gás, T é a temperatura absoluta e δU é o poder de separação em moles por unidade de tempo. Esta fórmula define dois importantes parâmetros que afetam a performance separativa de uma ultracentrífuga: a velocidade periférica ($v_a = \omega \cdot a$) e o comprimento do rotor.

A máxima velocidade que o rotor pode suportar é atingida quando as tensões tangenciais determinadas pela força centrífuga são iguais à resistência a tração do material do rotor. O comprimento máximo do rotor, por outro lado, está condicionado à necessidade de evitar combinações do comprimento, do raio e da

velocidade periférica que conduzam ao aparecimento de freqüências de ressonância flexionais do rotor. Desse modo, resulta que essas condições restringem o desempenho mecânico da máquina e conseqüentemente determinam a escolha do material do rotor e de seu comprimento. Além dessa condição imposta pela resistência à tração, é necessário que o material seja resistente à ação do UF_6 , do flúor e do HF (fluoreto de hidrogênio), sendo também necessário considerar outras propriedades de materiais, tais como, envelhecimento e fadiga, quando se desejam máquinas de longa duração. Além disso, o poder de separação δU depende das condições de operação da centrífuga, definidas pelos fluxos F , P e W processados por ela, e pela intensidade e perfil da contracorrente axial interna.

Do ponto de vista do processo de separação, a forma mais geral de equacionar o poder de separação (δU), em função dos fluxos materiais e das razões de abundância da alimentação, produto e rejeito é dada pela Eq.(3.16).

3.6.1 Pressão interna da ultracentrífuga

A relação entre as pressões p_a na parede do rotor e $p(r)$ no raio r , situado entre o eixo e a parede, é dada por:³

$$\frac{p_a}{p(r)} = \exp \left[\frac{Mv_a^2(1-r^2/a^2)}{2RT} \right] \quad (3.18)$$

Em velocidades de rotação v_a mais elevadas, as moléculas do gás de processo são cada vez mais comprimidas para a parede, uma vez que a força centrífuga aumenta fortemente com o aumento da velocidade v_a . Nessas condições, resulta que nas proximidades do eixo do rotor, há um aumento progressivo de vácuo, e a fração enriquecida, que existia nessa região, vai se deslocar cada vez mais para a parede interna do rotor à medida que v_a aumenta. Desse modo o UF_6 desaparece no vazio existente nas proximidades do eixo, existindo, então, nessa região apenas algumas moléculas do gás de processo misturadas ao acaso com moléculas das impurezas de gases leves. Por esse motivo, deve-se extrair a fração enriquecida do gás de processo num raio r situado próximo da parede do rotor, definindo o raio do coletor do produto e conseqüentemente determinando a magnitude da pressão de produto p_p .

4 METODOLOGIA

Um ensaio de separação isotópica é executado através da operação de uma centrífuga em condições definidas e, geralmente, variáveis, segundo uma programação preestabelecida. É realizado em uma Estação de Ensaio Instrumentada (EEI), que pode ser esquematicamente representada pela Figura 4.1. Trata-se de um sistema de tubulações interligadas, com válvulas definindo o caminho a ser percorrido pelo gás de processo; instrumentos para medida de pressões e fluxos, e válvulas de controle para regular os fluxos de material. Além das tubulações de alimentação, produto e rejeito que se ligam diretamente à centrífuga, uma EEI ainda possui tubulações de vácuo, os sistemas de amostragem e as tubulações que interligam diversas EEI's entre si, formando um conjunto bastante complexo.

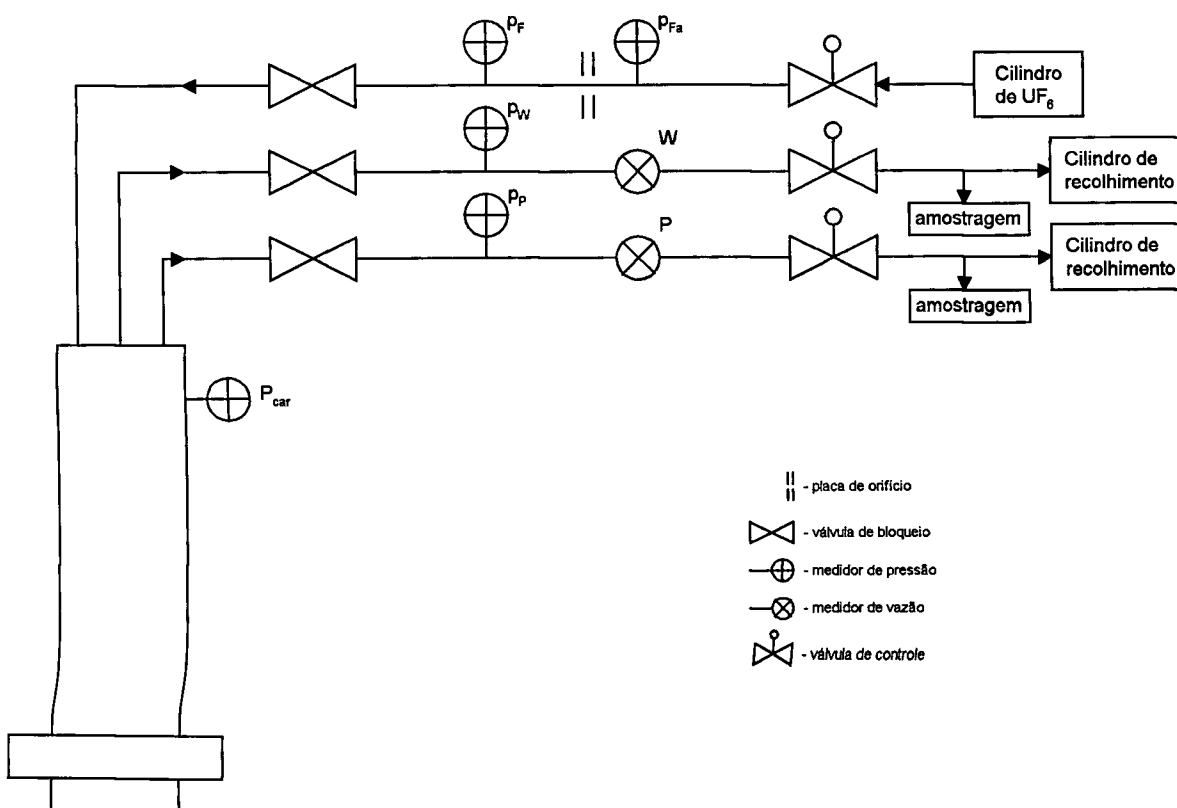


FIGURA 4.1 – Esquema de uma Estação de Ensaio Instrumentada

O sistema assim esquematizado permite a obtenção das seguintes variáveis:

- p_{FA} : pressão de alimentação antes da placa de orifício
- p_F : pressão de alimentação da máquina
- p_P : pressão de produto
- p_W : pressão de rejeito
- P : fluxo de produto
- W : fluxo de rejeito
- p_{car} : pressão na câmara superior da carcaça
- R_F : razão de abundância da alimentação
- R_P : razão de abundância do produto
- R_W : razão de abundância do rejeito

Além dessas variáveis, é possível instalar outros dispositivos para monitoração da máquina, como por exemplo, medidores de temperatura, monitores de consumo de potência, etc. As medidas de pressões e fluxos são obtidas diretamente das leituras dos respectivos instrumentos. As razões de abundância são obtidas mediante o procedimento de amostragem, através do direcionamento do gás de processo que passa pela centrífuga, para ampolas que coletam o UF_6 por criogenia. Essas ampolas são, então, analisadas em um espectrômetro de massa quadrupolo no LEM (Laboratório de Espectrometria de Massa), que fornece diretamente os valores das razões de abundância de produto e de rejeito. Essas amostragens realizadas numa mesma centrífuga para cada par de valores (F, θ) , possibilitam o cálculo do δU segundo a Eq.(3.16), fornecendo uma função de desempenho da centrífuga do tipo $\delta U (F, \theta, \text{variáveis internas})^6$.

Numa determinada condição de pressão de produto (variável interna), é realizado um ensaio, obtendo-se vários pontos experimentais com variação do corte e do fluxo de alimentação. Os valores das razões de abundância e dos fluxos de produto e rejeito são utilizados para o cálculo do poder de separação δU . As incertezas σ_{R_P} e σ_{R_W} , relacionadas com as razões de abundância de produto e rejeito, são fornecidas diretamente pela análise efetuada por espectrometria de massas; as incertezas dos fluxos de produto e rejeito, σ_P e σ_W , são obtidas através de uma curva de calibração dos sensores de fluxo mássico utilizados nos

ensaios. Essas incertezas são propagadas na fórmula empírica do δU , Eq.(3.16), para determinação da matriz de covariância dos dados experimentais.

4.1 Matrizes de covariância e incertezas experimentais

4.1.1 Natureza das incertezas ⁷

Em geral, uma medição tem imperfeições que dão origem a um erro no resultado da medição (erro seria o resultado de uma medição menos o valor verdadeiro do mensurando, no entanto, erro é um conceito idealizado e não pode ser conhecido exatamente). Tradicionalmente, um erro é visto como tendo dois componentes: um componente aleatório e um componente sistemático.

Um erro aleatório presumivelmente se origina de variações temporais ou espaciais, estocásticas ou imprevisíveis, de grandezas de influência. Os efeitos de tais variações são denominados de efeitos aleatórios e são a causa de variações em observações repetidas do mensurando. Embora não seja possível compensar o erro aleatório de um resultado de medição, ele pode geralmente ser reduzido, aumentando-se o número de observações; sua esperança ou valor esperado é zero. O desvio-padrão experimental da média aritmética ou média de uma série de observações, não é o erro aleatório da média, embora ele assim seja designado em algumas publicações. Ele é, em vez disso, uma medida da incerteza da média devida a efeitos aleatórios. O valor exato do erro na média, que se origina destes efeitos, não pode ser conhecido.

O erro sistemático, como o erro aleatório, não pode ser eliminado, porém ele também freqüentemente, pode ser reduzido. Se um erro sistemático se origina de um efeito reconhecido de uma grandeza de influência em um resultado de medição, denominado efeito sistemático, o efeito pode ser quantificado e, se for significativo com relação à exatidão requerida da medição, uma correção pode ser aplicada para compensar o efeito. Supõe-se que, após esta correção, a esperança ou valor esperado do erro provocado por um efeito sistemático seja zero. A incerteza de uma correção aplicada a um resultado de medição para compensar um efeito sistemático, não é o erro sistemático, freqüentemente denominado efeito de tendência. É, ao contrário, uma medida da incerteza do resultado devido ao conhecimento incompleto do valor requerido da correção. O erro originado da compensação imperfeita de um efeito sistemático não pode ser exatamente

conhecido. Os termos “erro” e “incerteza” devem ser usados apropriadamente e deve-se tomar cuidado em distinguir um do outro.

A incerteza de um resultado de uma medição reflete a falta de conhecimento exato do valor do mensurando. O resultado de uma medição, após correção dos efeitos sistemáticos reconhecidos, é ainda, tão somente uma estimativa do valor do mensurando por causa da incerteza proveniente dos efeitos aleatórios e da correção imperfeita do resultado para efeitos sistemáticos.

A tabulação de todas as componentes do erro e suas correlações para uma variável específica, é informação completa necessária para se construir a sua matriz de covariâncias^{8,9}. Como geralmente um experimento pode ser descrito através de um conjunto de variáveis randômicas que governam seu resultado, a avaliação dos erros certamente envolve a propagação das incertezas dessas variáveis no resultado final.

4.1.2 Matrizes de covariância

A covariância de duas variáveis aleatórias é uma medida de sua dependência mútua e pode ser definida pela expressão:

$$\text{cov}(x_i, x_j) = \rho_{ij} e_i e_j \quad (4.1)$$

onde e_i , e_j são as incertezas experimentais e ρ_{ij} são os parâmetros de correlação, relacionando as componentes das incertezas para x_i e x_j e que possuem as seguintes propriedades:

$$\rho_{ii} = 1 \quad (i = 1, n)$$

e (4.2)

$$-1 \leq \rho_{ij} \leq +1 \quad (i \neq j)$$

Quando as incertezas em x_i e x_j são totalmente não correlacionadas, então ρ_{ij} deve ser zero e quando as incertezas em x_i e x_j são totalmente correlacionadas no sentido positivo, ρ_{ij} é igual a +1. Total anti-correlação entre as

incertezas em x_i e x_j implica ρ_{ij} igual a -1, e finalmente valores parciais de correlação e anti-correlação, conduzem a valores intermediários de ρ_{ij} . Smith⁸ analisa bem claramente o conceito de correlação, onde o termo micro-correlação é usado para denotar a correlação que é assumida existir entre as incertezas parciais para x_i e x_j , ou seja, são as quantidades ρ_{ij} . Quando se assume uma estimativa da magnitude das micro-correlações, na verdade se tem pouca informação real e deste modo é justificável dizer que essa estimativa possui incerteza. Sob essas condições de dificuldade, é uma prática razoável designar aos parâmetros que representam as micro-correlações pobremente conhecidas, um dos valores $0; \pm 0,25; \pm 0,5; \pm 0,75; \pm 1$, baseado no julgamento subjetivo relacionado com a natureza da correlação. De um modo geral, assume-se que erros randômicos não apresentam correlação, enquanto que os erros sistemáticos oriundos da calibração de equipamentos são correlacionados.

Se tivermos n variáveis, então os elementos calculados segundo a Eq.(4.1) irão formar uma matriz ($n \times n$) chamada matriz variância-covariância ou simplesmente matriz covariância. Uma vez que $\text{cov}(x_i, x_j) = \text{cov}(x_j, x_i)$ para todo i e j , as matrizes de covariância são simétricas, apresentam suas variâncias na diagonal principal necessariamente positivas, enquanto os elementos fora da diagonal principal podem ser números reais (positivos, negativos ou nulos). Além do mais, uma matriz de covariância fisicamente consistente deve ser definida positiva¹⁰ (todos os autovalores da matriz devem ser positivos), o que assegura que todas as formas reais quadráticas derivadas da matriz também serão definidas positivas. É o exemplo da estatística qui-quadrado, referida nos procedimentos de ajuste no método dos mínimos quadrados com matrizes de covariância, ponto central dessa dissertação.

4.2 Obtenção da matriz de covariância do poder de separação δU

A melhor representação matemática do conjunto das incertezas experimentais é dada através de uma matriz denominada matriz de covariância⁸, que contém as incertezas totais e o nível de correlação entre as incertezas parciais. O primeiro passo para a determinação da matriz de covariância dos dados de entrada é catalogar todas as fontes de incertezas existentes nas

variáveis independentes utilizadas para o cálculo do δU e decidir que tipo de correlação existe entre elas. As magnitudes das várias componentes das incertezas devem ser determinadas e expressas nas mesmas unidades das variáveis correspondentes. Este procedimento resultaria numa tabela como a Tabela 4.1.

TABELA 4.1

Montagem das componentes do erro para cálculo da matriz de covariância

efeito dado exp.	1	2	...	l	...	L	Incerteza total
1	e_{11}	e_{12}	...	e_{1l}	...	e_{1L}	E_{x1}
2	e_{12}	e_{22}	...	e_{2l}	...	e_{2L}	E_{x2}
.
i	e_{i1}	e_{i2}	e_{il}	...	e_{iL}	E_{xi}
.
j	e_{j1}	e_{j2}	.	e_{jp}	.	e_{jL}	E_{xj}
.
n	e_{n1}	e_{n2}	...	e_{np}	...	e_{nL}	E_{xn}

A quantidade e_{ij} é a magnitude da incerteza em x_i devido ao efeito l , assumindo que são considerados um total de L diferentes efeitos. Claramente algum e_{ij} pode ser zero. Os elementos da matriz de covariância são calculados a partir da expressão:

$$V_{xij} = \sum_{l=1}^L \rho_{ijl} e_{il} e_{jl} \quad (i, j = 1, n) \quad (4.3)$$

onde ρ_{ijl} são os parâmetros de micro-correlação entre as incertezas e_{il} e e_{jl} .

Determina-se então as expressões das derivadas parciais do δU em relação às variáveis R_p , R_w , P , W , obtendo-se os valores das contribuições individuais das incertezas dessas variáveis na incerteza total da variável dependente δU . A micro-correlação entre as incertezas das medidas das razões isotópicas e dos fluxos de produto e rejeito foram assumidas iguais a 0,75.

O próximo passo é quantificar as incertezas experimentais das variáveis R_p , R_w , P , W , e propagá-las na fórmula geral (3.16) do δU , através da Eq.(4.4)¹¹:

$$(\sigma_{\delta U})^2 \approx \sum_{i=1}^{n=4} \left(\frac{\partial \delta U}{\partial x_i} \right)^2 \sigma_i^2 \quad (4.4)$$

onde x_i representa as variáveis independentes R_p , R_w , P , W . Os termos da Eq.(4.4) envolvendo as variâncias de x_i ponderadas pelos quadrados de suas derivadas parciais, representam as estimativas das parcelas propagadas das incertezas das medidas de R_p , R_w , P , W , para determinar a incerteza no δU .

4.3 Determinação das incertezas parciais de R_p , R_w , P e W propagadas na fórmula empírica do poder de separação δU

Para obtermos todas as incertezas parciais do poder de separação δU , calculadas pela Eq.(3.16), temos que obter os termos da Eq.(4.4), que relacionam as variâncias de R_p , R_w , P , W , ponderadas pelos quadrados de suas derivadas parciais. Essas serão dadas respectivamente por:

$$\left(\frac{\partial \delta U}{\partial R_p} \right)^2 = \left(P \left(\frac{2 \ln R_p}{(R_p + 1)^2} + \frac{R_p - 1}{R_p (R_p + 1)} \right) \right)^2 \quad (4.5)$$

$$\left(\frac{\partial \delta U}{\partial R_w} \right)^2 = \left(W \left(\frac{2 \ln R_w}{(R_w + 1)^2} + \frac{R_w - 1}{R_w (R_w + 1)} \right) \right)^2 \quad (4.6)$$

$$\left(\frac{\partial \delta U}{\partial P} \right)^2 = \left(\frac{R_p - 1}{R_p + 1} \ln R_p - \frac{R_F - 1}{R_F + 1} \ln R_F \right)^2 \quad (4.7)$$

$$\left(\frac{\partial \delta U}{\partial W} \right)^2 = \left(\frac{R_w - 1}{R_w + 1} \ln R_w - \frac{R_F - 1}{R_F + 1} \ln R_F \right)^2 \quad (4.8)$$

Os valores numéricos pertinentes são obtidos, substituindo-se os valores experimentais de R_p , R_w , P e W para cada determinação experimental. Resta, então a determinação das incertezas experimentais dessas variáveis, que

é feito de modo distinto para as razões de abundância R_P e R_W e para as fluxos de produto P e rejeito W

4.3.1 Determinação das incertezas das razões isotópicas de produto R_P e rejeito R_W

A determinação das razões isotópicas de produto, R_P e de rejeito, R_W passa por um processo onde a energia das partículas carregadas é medida pela deflexão dessas partículas pelo ímã de um espectrômetro magnético. Como descrito em Vanin¹²:

“A deflexão é proporcional ao momento das partículas e o erro na energia calculada provirá de duas fontes: i) a medida da deflexão do feixe de partículas e ii) a calibração do espectrômetro. Na comparação de dados obtidos com o mesmo espectrômetro, os erros de calibração afetam diferentes feixes da mesma maneira ou, pelo menos, de maneiras não independentes”.

Assim, duas energias medidas pelo mesmo espectrômetro serão correlacionadas e terão sempre uma covariância. É o caso da determinação das razões de abundância de produto e rejeito por comparação com a razão de abundância da alimentação. Como em qualquer processo de separação isotópica, os fatores de enriquecimento, empobrecimento e de separação independem da concentração isotópica do gás de alimentação. No entanto é interessante para a análise do processo, que a razão isotópica da alimentação tenha um valor padronizado, e este valor, por coerência, é adotado como sendo a razão isotópica do urânio natural ($R_F = 0,725\%$ molar). Portanto, dada uma alimentação com composição diferente daquela do urânio natural, a mesma necessita ser corrigida por um fator de correção que será utilizado na obtenção dos valores das razões de abundância de produto e rejeito. Equacionando o que foi exposto, temos:

$$f = \frac{(R_F)_{natural}}{R_F} \quad (4.9)$$

As razões de abundância de produto e rejeito são então corrigidas de acordo com:

$$(R_P)_{corrigido} = R_P \times f \quad (4.10)$$

e

$$(R_w)_{\text{corrigido}} = R_w \times f \quad (4.11)$$

O tratamento a seguir vale para as razões de abundância de produto e rejeito. Como exposto anteriormente, existe uma covariância entre R_p e R_F , que afeta o erro experimental total de R_p e que pode ser computada, aplicando-se a fórmula de propagação de incertezas, válida para variáveis correlacionadas, ou seja, partindo-se de:

$$(R_p)_{\text{corrigido}} = \frac{(R_p)_{\text{lido}} * (R_F)_{\text{natural}}}{(R_F)_{\text{lido}}} \quad (4.12)$$

a incerteza da razão isotópica corrigida do produto é dada por:

$$\left(\frac{\sigma_{R_p}}{R_p} \right)_{\text{corrigido}}^2 = \left(\frac{\sigma_{R_p}}{R_p} \right)_{\text{lido}}^2 + \left(\frac{\sigma_{R_F}}{R_F} \right)_{\text{lido}}^2 - 2 \left(\frac{\text{cov}(R_p, R_F)}{R_F * R_p} \right)_{\text{lido}} \quad (4.13)$$

onde,

$$\text{cov}(R_p, R_F) = \rho_{R_p R_F} * \sigma_{R_p} * \sigma_{R_F} \quad (4.14)$$

4.3.2 Determinação das incertezas dos fluxos de produto P e rejeito W

A determinação das incertezas das medidas de fluxo de produto e de rejeito são possíveis com a confecção das curvas de calibração dos medidores de fluxo, utilizando-se de padrões secundários, onde a equação de calibração obtida fornece coeficientes estimados, cujas incertezas permitem que se obtenha as incertezas de interpolação de qualquer valor real de fluxo de produto e rejeito. Os dados obtidos no processo de calibração permitem ajustá-los a uma equação linear de primeira ordem do tipo:

$$(P)_{\text{medidor}} = a + b(P)_{\text{padrão}} \quad (4.15)$$

onde a incerteza no valor calculado do fluxo do medidor, resulta das incertezas dos coeficientes a e b , e é dada pela Eq.(4.16):¹³

$$\sigma_P^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial a} \right)^2 \sigma_a^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial b} \right)^2 \sigma_b^2 + 2 \left(\frac{\partial P}{\partial a} \frac{\partial P}{\partial b} \right) \sigma_{ab}^2 \quad (4.16)$$

onde σ_{ab}^2 representa o termo covariante entre os coeficientes da equação da regressão, que podem ser facilmente obtidos por regressão linear.

Nessa altura dispomos de todos os termos da Eq.(4.4), possibilitando a obtenção das parcelas da incerteza total do poder de separação δU , representadas pela propagação das incertezas das medidas das razões isotópicas e dos fluxos de produto e rejeito. Essas incertezas de cada variável serão representadas por um vetor coluna com o número de elementos idêntico ao número de dados experimentais, conforme pode ser verificado no Apêndice B, Tabelas B.4 e B.5. As micro-correlações serão representadas por matrizes simétricas de ordem $(n \times n)$, onde as diagonais principais são compostas por elementos iguais a 1 e os demais iguais a 0,75, como discutido no tópico 4.1.2.

4.4 Método dos mínimos quadrados

O método de estimativa de parâmetros mais conhecido e mais largamente usado em Estatística é o Método dos Mínimos Quadrados,^{9,12,13,14} que foi inicialmente idealizado por K. Gauss¹⁵ e posteriormente desenvolvido por A. Markov¹⁶. Primeiramente, vamos supor que nosso objetivo é fornecer uma estimativa de um valor medido y através de um único parâmetro λ_0 , sendo disponíveis n medidas diretas desse parâmetro, denotadas por $(y_1, y_2 \dots y_n)$, que são realizadas independentemente e associadas cada uma com um erro diferente σ_i . A estimativa por mínimos quadrados para o parâmetro λ_0 é justamente aquele valor de λ que satisfaz a condição:

$$\chi^2(\beta) = \sum_{i=1}^n \left(\frac{(y_i - \lambda(x_i, \beta))^2}{\sigma_i^2} \right) = \text{mínimo} \quad (4.17)$$

que é a soma quadrática das diferenças entre os valores medidos e os valores hipotéticos (ou calculados), ponderados pelo inverso das variâncias. Esta é a base do método dos mínimos quadrados, e é usado mesmo em casos onde as medidas individuais y_i não são Gaussianas. Embora se possa proceder o ajuste por mínimos quadrados para qualquer função $\lambda(x, \beta)$, os valores resultantes para χ^2 e os estimadores β possuem propriedades desejáveis para o caso onde $\lambda(x, \beta)$ é uma função linear dos parâmetros β , ou seja:

$$\lambda(x, \beta) = \sum_{j=1}^m a_j(x) \beta_j \quad (4.18)$$

onde os $a_j(x)$ são funções que podem ou não ser linearmente independentes de x , no entanto têm que ser independentes uns dos outros, isto é, um não pode ser expressado como uma combinação linear dos outros. Neste caso, os estimadores e suas variâncias podem ser obtidos analiticamente; os mesmos são estimadores lineares não viesados¹⁶ e possuem variância mínima, não importando o número de experimentos N e a função de distribuição dos valores experimentais.

4.4.1 Método dos mínimos quadrados com matrizes de covariância

O método dos mínimos quadrados utilizando matrizes de covariância pode ser formulado em vários modos diferentes.^{8,9,12,13} Sem qualquer perda de generalidade, podemos considerar o que segue. Seja y_{exp} um vetor de n valores experimentais, correspondente a um conjunto de observações Y . Associada com y_{exp} existe uma matriz de covariância V_y que representa as incertezas dos dados. Uma vez que se determine exatamente a matriz V_y , o que se deseja é obter os melhores valores para um conjunto de m parâmetros S (os resultados avaliados). Para isso, deve ser postulada uma relação funcional entre as observações Y e os parâmetros S , isto é, os valores calculados são dados por $y_{\text{calc}} = \mathbf{y}(s)$, permitindo assim a aplicação do método dos mínimos quadrados. Muitos problemas físicos permitem assumir um modelo de regressão linear, ou seja, a existência de uma relação linear entre as observações Y e os parâmetros S . Então, especifica-se uma matriz A (geralmente chamada de matriz projeto) tal que $\mathbf{y} = A \cdot \mathbf{s}$.

Dentro da Estatística Clássica, a aplicação do método dos mínimos quadrados equivale a satisfazer a seguinte condição para a forma quadrática Q :

$$Q = (y_{\text{exp}} - y_{\text{calc}})^t * V_y^{-1} * (y_{\text{exp}} - y_{\text{calc}}) = \text{mínimo} \quad (4.19)$$

Se as quantidades y_{exp} e V_y são independentes de S e $y_{\text{calc}} = A \cdot \mathbf{s}$, então a Eq.(4.19) é satisfeita através da expressão, APÊNDICE C:

$$s = V_S A^t V_y^{-1} y_{\text{exp}} \quad (4.20)$$

Além do mais, a matriz de covariância da solução S é dada através da fórmula:

$$V_S = (A' V_y^{-1} A)^{-1} \quad (4.21)$$

Através dessas equações, obtêm-se os valores desejados, ou seja, as melhores estimativas dos parâmetros S e suas incertezas, como definido por V_S . Vale salientar, no entanto, que se Y não for linear com S , ou se V_Y depender de S , as equações (4.20) e (4.21) não fornecerão uma solução adequada para a condição expressa pela Eq.(4.19).

Se tomarmos S como dado pela Eq.(4.20) e substituí-lo na expressão de Q , ou seja:

$$Q = (y_{\text{exp}} - A * S)' * V^{-1} * (y_{\text{exp}} - A * S) \quad (4.22)$$

veremos que o valor mínimo de Q segue, sob certas circunstâncias, a distribuição qui-quadrado χ^2 .

4.5 Uso do valor do χ^2 para avaliar a qualidade do ajuste

Se os valores medidos são Gaussianos, os estimadores resultantes coincidem com os estimadores de máxima verossimilhança e além do mais, o valor do χ^2 pode ser usado^{9,11,12,13,14} como teste de quão provável a hipótese $\lambda(x_i; \beta)$, se verdadeira, representaria os dados observados. A quantidade

$$\left(\frac{y_i - \lambda(x_i; \beta)}{\sigma_i} \right) \quad (4.23)$$

é uma medida do desvio entre a i -ésima medida y_i e a função $\lambda(x_i; \beta)$, portanto o χ^2 é uma medida do "acordo total" entre os dados observados e a hipótese $\lambda(x_i; \beta)$, podendo ser mostrado que:

i) se $y_i, i=1 \dots N$, são variáveis randômicas gaussianas, independentes, com variâncias conhecidas σ_i^2 (ou se são distribuídas de acordo com uma distribuição gaussiana com matriz de covariância conhecida);

ii) se a hipótese $\lambda(x, \beta_1, \beta_2 \dots \beta_m)$ é linear nos parâmetros β_i ;

iii) se o modelo da regressão ou a função de desempenho é correto,

então o valor mínimo do χ^2 definido por:

$$\chi^2(\beta) = \sum_{i=1}^N \frac{(y_i - \lambda(x_i; \beta))^2}{\sigma_i^2} \quad (4.24)$$

é distribuído de acordo com uma distribuição qui-quadrado com $N - m$ graus de liberdade, onde N é o número de dados experimentais e m é o número de parâmetros da função de regressão.

4.5.1 Qui-quadrado reduzido^{8,9,12,13,14}

O valor esperado de uma variável randômica que segue uma distribuição qui-quadrado é igual ao número de graus de liberdade, permitindo comparar o $\chi_{red}^2 = \chi^2 / (N - m)$ com 1, que é o seu valor médio e obter uma medida da qualidade do ajuste, ou seja:

- i) Se χ_{red}^2 é próximo de 1, nenhuma ação adicional é necessária, ou seja, os dados avaliados são considerados consistentes.
- ii) Se χ_{red}^2 é muito menor que 1, então o ajuste é melhor do que esperado dada a magnitude dos erros experimentais. Não chega a ser contrário à hipótese assumida, no entanto, é geralmente indicado verificar se os erros experimentais não foram superestimados ou se eles não são correlacionados.
- iii) Se χ_{red}^2 é muito maior que 1, então certamente há razões de se duvidar da hipótese.

É interessante, porém, avaliar o quanto o qui-quadrado reduzido pode diferir de 1, através da obtenção do seu desvio padrão. Como geralmente, numa distribuição que se assemelha a uma normal, os valores mais prováveis se encontram numa faixa em torno do valor médio mais ou menos 2 desvios-padrão

e que o desvio-padrão de uma distribuição χ^2 é $\sqrt{2 * (N - m)}$, teríamos a faixa de qui-quadrado reduzido aceitável como sendo:

$$\left(1 - \sqrt{\frac{2}{(N - m)}} ; 1 + \sqrt{\frac{2}{(N - m)}} \right). \quad (4.25)$$

Assim, de acordo com a expressão (4.25), para um pequeno número de graus de liberdade, a faixa de qui-quadrado reduzido provável de se obter é larga enquanto para um número grande, é estreita.

4.6 Determinação do modelo de regressão

O próximo passo é ajustar os dados experimentais do poder de separação, utilizando-se de uma função de desempenho do tipo $\delta U (F, \theta, \text{variáveis internas})$, e isso é feito através da relação entre δU e (F, θ, P_p) , podendo, então, o poder de separação ser escrito como função das variáveis independentes através de um polinômio de segunda ordem,^{11,17} isto é:

$$Y = \beta_0 + \sum \beta_i x_i + \sum \beta_{ii} x_i^2 + \sum \beta_{ij} x_i x_j + \sum \beta_{iij} x_i^2 x_j + \sum \beta_{ijj} x_i x_j^2 \quad i \neq j \quad (4.26)$$

onde Y é a resposta, β_i são os coeficientes da equação e x_i e x_j são as variáveis controladas. Esta equação pode ser usada para avaliar os efeitos linear, quadrático e de interação entre essas variáveis, determinando a formação da matriz projeto A , que contém todas as variáveis explicativas do modelo ajustado.

4.7 Descrição do procedimento de cálculo da curva de ajuste

O procedimento de cálculo inicia-se com o cálculo da matriz de covariâncias dos dados experimentais através do programa MATCOVA160 em Fortran (Apêndice D), adaptado de Smith^{9,14}, que utiliza como dados de entrada: o número de dados experimentais, N , o número de atributos da incerteza total da variável dependente, L , o vetor dos valores da variável dependente, representado pelos dados da Tabela B.6 (Apêndice B), os vetores contendo as magnitudes das incertezas parciais das variáveis independentes, como mostrado nas Tabelas B.4 e B.5 (Apêndice B) e finalmente as matrizes simétricas contendo as micro-

correlações entre as incertezas das medidas das variáveis independentes. A saída do programa fornece a matriz de covariância da variável de resposta.

O programa MINQUAD¹⁴ (Apêndice D), é utilizado para obtenção dos coeficientes da curva de ajuste e tem como dados de entrada: o número de dados experimentais, N , o número de atributos da incerteza total da variável dependente, L , o vetor dos valores da variável dependente, a matriz de covariância dos dados experimentais, a matriz projeto definida em relação à forma da função de desempenho, gerada através da Eq.(4.26), e fornece como saída o vetor dos coeficientes da curva ajustada, a matriz de covariância da solução, os valores do qui-quadrado e qui-quadrado reduzido e o valor da relação entre a estimativa de cada coeficiente e seu respectivo desvio-padrão, para cálculo do nível de significância de cada coeficiente.

4.8 Avaliação do modelo de regressão

Os modelos devem ser testados depois de terem sido estimados e para isso diversos testes de especificação podem ser empregados. A partir dos resultados destes testes, pode-se rever a especificação inicial e, neste caso, toda a bateria de testes é repetida mais uma vez. Em algum momento, encontra-se uma especificação que resista bem a todos os testes e faça sentido do ponto de vista da teoria e da experiência prévia do pesquisador. Neste ponto, o processo de pesquisa empírica atingiu seu objetivo: uma boa representação empírica da relação matemática entre determinadas variáveis. A avaliação do modelo de regressão passa por duas etapas fundamentais, a saber, os testes nos parâmetros estimados e a análise dos resíduos.

4.8.1 Verificação – resultado versus significância

Os parâmetros obtidos em cada modelo ajustado são aceitos ou não, mediante a determinação de sua significância, no entanto, não há como evitar arbitrariedade na decisão final de qual nível de significância é tratado como significativo, ou seja, a escolha de algum nível de significância, acima do qual os resultados serão rejeitados como inválidos, é arbitrário¹⁸. Tipicamente, em muitas áreas, resultados que fornecem nível de significância $(p - \text{valor}) \leq 0,05$ são considerados como estatisticamente significativos na “fronteira” e

$(p - \text{valor}) \leq 0,01$ são geralmente considerados estatisticamente significativos. Mas, deve-se lembrar que estas classificações representam nada mais que convenções arbitrárias que são informalmente baseadas em experiência em pesquisa geral. Na obtenção das estimativas dos coeficientes a serem incluídos no modelo final do presente trabalho, somente aquelas com níveis de significância ($p - \text{valores}$) menores que 0,05 foram incluídas no modelo final¹⁷.

4.8.2 Teste nos coeficientes estimados do modelo

Este teste visa verificar restrições nos coeficientes e baseia-se na hipótese nula de que o valor teórico de determinado coeficiente é igual a zero. Após a determinação da curva de ajuste, o nível de significância dos coeficientes da equação é obtido através do cálculo do seguinte parâmetro:^{17,18}

$$t = \frac{\text{estimativa}}{\text{desvio padrão}} \quad (4.27)$$

A estimativa e o seu desvio-padrão são dados obtidos como saída do programa de cálculo, permitindo que se obtenha, através de uma tabela de distribuição t de Student, o valor do nível de significância, probabilidade tal, que se for muito grande, indica uma grande probabilidade de erro envolvida na aceitação dos respectivos valores dos coeficientes como válidos, daí, a sua eliminação. Como apresentado anteriormente, os coeficientes com $p - \text{valores}$ maiores que 0,05 serão descartados. Adicionalmente, pode-se calcular a estatística F ¹⁶, que é utilizada para o teste de que todos os coeficientes da regressão (excluindo a constante) são nulos. Pode ser calculada como:

$$F = \left[\frac{R^2 / (k - 1)}{(1 - R^2) / (N - k)} \right] \quad (4.28)$$

Na hipótese dos resíduos teóricos terem distribuição normal, essa estatística tem uma distribuição F com $(k - 1)$ graus de liberdade no numerador e $(N - k)$ graus de liberdade no denominador, onde k é o número de coeficientes e N é o número de dados. Calculando-se a probabilidade $\text{Prob}(F)$, que é o nível de significância associado à estatística F calculada e se for menor que 5%, a

4.8.3 Avaliação da qualidade do ajuste de um modelo de regressão

Vários parâmetros estatísticos podem ser usados como indicadores da qualidade de ajuste de uma curva¹⁹. São eles:

- *Matriz de variância-covariância dos coeficientes,*
- *Coefficiente de correlação,*
- *Coefficiente de determinação ou R-quadrado,*
- *R-quadrado ajustado,*

4.8.3.1 Matriz de covariância e matriz de correlação dos parâmetros

A análise da matriz de covariância dos parâmetros da equação ajustada aos pontos experimentais representa um cálculo auxiliar que ajuda a determinar se o modelo por mínimos quadrados é apropriado para os dados. Ela mede a variabilidade e interdependência dos parâmetros. O elemento da diagonal, $V_{s_{ii}}$, é a variância do *i*-ésimo parâmetro β_i , o elemento fora da diagonal, $V_{s_{ij}}$, é a covariância dos parâmetros β_i e β_j . Se os dois parâmetros são completamente independentes, sua covariância será zero. Se os dois parâmetros são correlacionados, ela será diferente de zero. Idealmente, os parâmetros serão independentes e os valores fora da diagonal serão pequenos.

A matriz de correlação dos parâmetros do modelo permite uma análise adicional.¹⁵ Se todos os parâmetros apresentarem valores absolutos altos (>0,95), isto significa que mesmo que se tenha estimado os parâmetros com sucesso, não se pode separar as contribuições individuais de cada parâmetro do modelo final.

4.8.3.2 Detecção de pontos extremos

Os pontos extremos²⁰ são pontos que afetam o valor da média de uma ou mais variáveis explicativas. São considerados influentes os pontos que afetam a linha de regressão de tal forma que a sua retirada altere significativamente as estimativas dos coeficientes. Assim os pontos extremos devem ser identificados para avaliar seu grau de influência sobre as estimativas, através de uma análise de sensibilidade, que consiste em repetir o procedimento de regressão sem os pontos extremos. Se não houver modificações significativas, aceita-se que os pontos extremos não são pontos influentes, ou seja, não afetam o modelo.

4.8.3.3 Coeficiente de correlação

Esse parâmetro pode ser interpretado como uma indicação de como mudanças em uma variável são correlacionadas com mudanças em outra. A fim de avaliar quão próximo os valores calculados e os valores experimentais do poder de separação se aproximam de uma relação linear entre si, esse parâmetro pode ser calculado através da expressão¹⁹:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} \quad (4.29)$$

4.8.3.4 Coeficiente de determinação (R-quadrado)

É uma medida da fração da variância total explicada satisfatoriamente pelo modelo de regressão, ou seja, mede o grau de proximidade entre os valores experimentais e calculados da variável dependente, segundo o modelo utilizado. Pode ser calculado através da expressão¹⁹:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N Y_{\text{exp}_i}^2 - \sum_{i=1}^N (Y_{\text{exp}_i} - Y_{\text{calc}_i})^2}{\sum_{i=1}^N Y_{\text{exp}_i}^2} \quad (4.30)$$

4.8.3.5 R-quadrado ajustado

Uma das tendências do R-quadrado é aumentar sempre que se adicionam novas variáveis independentes ao modelo, mesmo que essas variáveis pouco contribuam para a explicação da regressão. Daí a introdução do R-quadrado ajustado, que penaliza a inclusão de variáveis independentes que não aumentam o percentual explicado da variância da variável dependente. Pode ser calculado através da expressão¹⁶:

$$R_{AJUST}^2 = 1 - \left[(1 - R^2) * (N - 1) / (N - k) \right] \quad (4.31)$$

4.8.4 Análise de resíduos

A análise dos resíduos visa verificar se as premissas consideradas na estimação são atendidas, ou seja,

- correlação serial nula dos resíduos,
- normalidade dos resíduos
- ausência de heteroscedasticidade.

4.8.4.1 Desvio-padrão dos resíduos

O desvio-padrão dos resíduos é dado pela seguinte expressão:

$$s = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Y_{calc} - Y_{exp})^2}{N - m}} \quad (4.32)$$

sendo que 95% dos resíduos devem cair entre mais ou menos dois desvios-padrão. Se um valor cair fora dessa faixa, esse ponto em particular deverá ser examinado mais cuidadosamente, uma vez que ele pode indicar um erro nos dados ou uma inadequação do modelo. Pontos com grandes valores de resíduo podem exercer uma forte influência nos valores dos parâmetros e assim deverão ser tratados com cuidado.

4.8.4.2 Correlação serial

A correlação serial indica se os resíduos tendem a se distribuir em grupos de valores positivos e negativos, ou tendem a se espalhar randomicamente ao redor de zero. Um grande valor positivo da correlação serial é uma indicação de um desvio sistemático dos dados segundo o modelo proposto. Trata-se de uma verificação de independência entre resíduos sucessivos, usualmente feita através do teste de Durbin-Watson¹⁶, cuja a fórmula é dada por:

$$d = \frac{\sum_{i=1}^n (r_i - r_{i-1})^2}{2 \sum_{i=1}^n r_i^2} \quad (4.33)$$

O teste é útil sobretudo em dados dependentes do tempo. Como regra geral, admite-se um valor d menor que 1,5 como evidência de correlação serial positiva e um d maior que 2,5 como evidência de correlação serial negativa.

4.8.4.3 Verificação da normalidade dos resíduos

Se os resíduos têm distribuição normal, seu histograma deve ter a conhecida forma de “sino” e apresentar a propriedade característica de que 95% do total de suas observações estejam dentro da faixa da média correspondente mais ou menos dois desvios-padrão.

4.8.4.4 Testes para heteroscedasticidade dos resíduos

A heteroscedasticidade^{16,19,20} é uma medida da correlação entre a magnitude dos resíduos e a magnitude dos valores experimentais sendo ajustados. Trata-se de uma premissa do método dos mínimos quadrados de que as variâncias dos resíduos da função da regressão devem ser iguais, ou seja, não pode haver padrões visíveis no formato dos resíduos. A presença de heteroscedasticidade gera amplos intervalos de confiança e compromete os testes de hipóteses; os estimadores das variâncias dos parâmetros seriam tendenciosos. A sua existência pode ser verificada graficamente, no entanto, existem alguns testes para aceitação ou não da hipótese de heteroscedasticidade. Neste trabalho foram utilizados os testes estatísticos de Park^{16,20} e da correlação de Spearman^{16,18,20}.

4.8.4.4.1 Teste de correlação de Spearman^{16,20}

O teste de correlação de Spearman assume que as variáveis podem ser ranqueadas em duas séries ordenadas. Neste caso, calcula-se a correlação¹⁸ de Spearman, r_s , entre o valor absoluto dos resíduos e cada variável explicativa do modelo, testando-se a hipótese de que estas correlações são nulas, por intermédio do valor t . O valor de t observado, t_{obs} , é calculado através da expressão:

$$t_{obs} = r_s \sqrt{(N-2)} / \sqrt{1-r_s^2} \quad (4.34)$$

onde $t_{obs} \approx t_{(N-2)g.l.}$. Se existir correlação significativa, ou seja, se $t_{obs} > t_{(N-2)g.l.;5\%}$, ou $p\text{-valor} < 0,05$, não se rejeita a hipótese de heteroscedasticidade.

4.8.4.4.2 Teste de Park

Park testou uma regressão do logaritmo dos quadrados dos resíduos observados, com os logaritmos das variáveis explicativas do modelo e concluiu que, se algum coeficiente da regressão obtida for significativo ao nível de significância maior que 95% ($p - \text{valor} < 0,05$), então aceita-se a existência de relação entre os resíduos observados e a variável correspondente, e conseqüentemente a existência de heteroscedasticidade.

4.9 Correção da heteroscedasticidade dos resíduos

Uma vez que não é totalmente satisfeita a premissa da não existência de heteroscedasticidade dos resíduos do modelo proposto, algum tipo de correção deve ser utilizado para que os resíduos se tornem homoscedásticos, ou seja, passem a ter variância constante, dando credibilidade aos testes estatísticos utilizados. Gujarati¹⁶ apresenta diversos tipos de transformações que podem ser aplicadas aos dados experimentais para tornar os resíduos homoscedásticos. Box-Hunter²¹ mostra que a tendência a uma relação linear dos resíduos com alguma variável explicativa do modelo ou mesmo com os valores preditos pelo modelo, torna possível procurar uma transformação conveniente dos dados experimentais, $\varphi = f(\delta U_{EXP})$, de modo que a variância dos resíduos seja constante. Essa transformação dos dados do tipo $\varphi = (\delta U_{EXP})^\lambda$ é aplicável ao modelo estatístico proposto.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Explorando os dados experimentais

Os dados experimentais deste trabalho foram obtidos no processo de separação isotópica de UF_6 pelo processo de ultracentrifugação gasosa e se referem aos ensaios com uma única ultracentrífuga, durante aproximadamente 5 meses. O banco de dados obtido envolveu a realização de cerca de 700 experimentos em 5 níveis de pressão de produto P_p , 7 níveis de corte θ e 8 níveis de fluxo de alimentação F . As variáveis de resposta R_p e R_w , obtidas por análises por espectrometria gasosa, permitiram o cálculo do poder de separação δU da ultracentrífuga. Após uma verificação detalhada dos dados, os mesmos foram filtrados, inicialmente eliminando-se os experimentos com insuficiência de amostras e os incongruentes nos valores das incertezas nas razões isotópicas e, posteriormente, eliminando-se os experimentos com corte fora da faixa esperada e os que não fecharam o balanço material²², restando um total de 460 experimentos.

Devido ao caráter sigiloso imposto ao desenvolvimento do processo, os dados sensíveis dos experimentos foram descaracterizados através de uma codificação dos mesmos, de modo a não se alterar os procedimentos de cálculo. Portanto, todas as grandezas são apresentadas em unidades arbitrárias (u.a).

Basicamente, quando se tratam os dados através de uma modelagem, estão incluídas as seguintes questões¹⁵:

- 1) O modelo explica adequadamente os dados? Em outras palavras, deveriam ser adicionados outros termos ao modelo?
- 2) São alguns dos termos do modelo redundantes e assim poderiam ser ignorados?
- 3) Quão precisos são os parâmetros do modelo?
- 4) Quão precisas são as predições feitas pelo modelo?

Respostas a essas perguntas são baseadas em testes estatísticos¹⁵. Entretanto, eles se baseiam num importante tópico a cerca dos dados: que os erros no modelo sejam randomicamente distribuídos. Mais especificamente, que o

modelo dos erros sejam independentes e normalmente distribuídos. Se isto não for satisfeito, as conclusões retiradas a partir dos dados podem ser irreais. O tratamento dos dados é um projeto que consome muito tempo, requerendo razoável conhecimento estatístico, bem como um bom conhecimento do processo.

Na prática, os resultados das medidas da maioria dos processos podem ser considerados normalmente distribuídos. Entretanto, os dados devem apresentar requisitos adicionais antes de poderem ser analisados por técnicas estatísticas²³. Estes requisitos básicos são: estabilidade, independência e aleatoriedade. A geração dos dados pelo processo tem que ser estável, minimizando a variabilidade atribuída ao não estabelecimento de condições estacionárias; a independência dos dados permite estabelecer que a obtenção de um dado não exerce influência em nenhum outro do conjunto, e finalmente, os dados experimentais devem ser distribuídos randomicamente em torno da sua média. Este último requisito é muito importante e pode ser verificado basicamente através de um histograma ou de um gráfico de probabilidade normal.

5.1.1 Verificação da distribuição dos dados experimentais

O desvio-padrão dos dados é uma medida da variabilidade nas observações ou, nesse caso, os valores experimentais do δU . Quanto maior o valor do desvio-padrão, maior a dispersão nos valores do poder de separação experimental δU . Se as observações do δU forem normalmente distribuídas, então cerca de 95% das observações devem cair dentro da faixa de dois desvios-padrão do valor médio. O cálculo da porcentagem de observações experimentais que estão incluídas na faixa de mais ou menos dois desvios-padrão, forneceu 95,19%, indicando uma boa adequação com uma distribuição normal. Isto pode ser visualizado através do histograma da Figura 5.1a, e da curva de probabilidade normal, representada na Figura 5.1b.

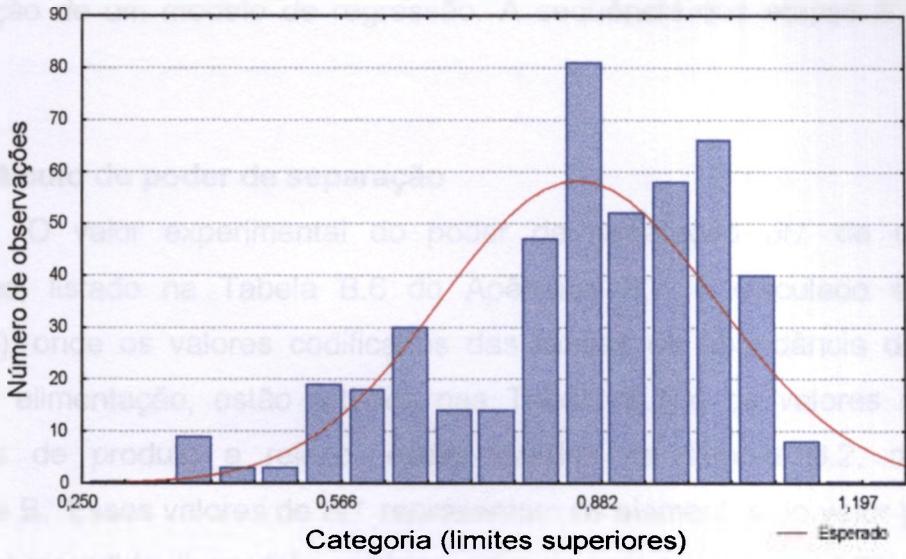


Figura 5.1a – Histograma dos valores experimentais do poder de separação δU

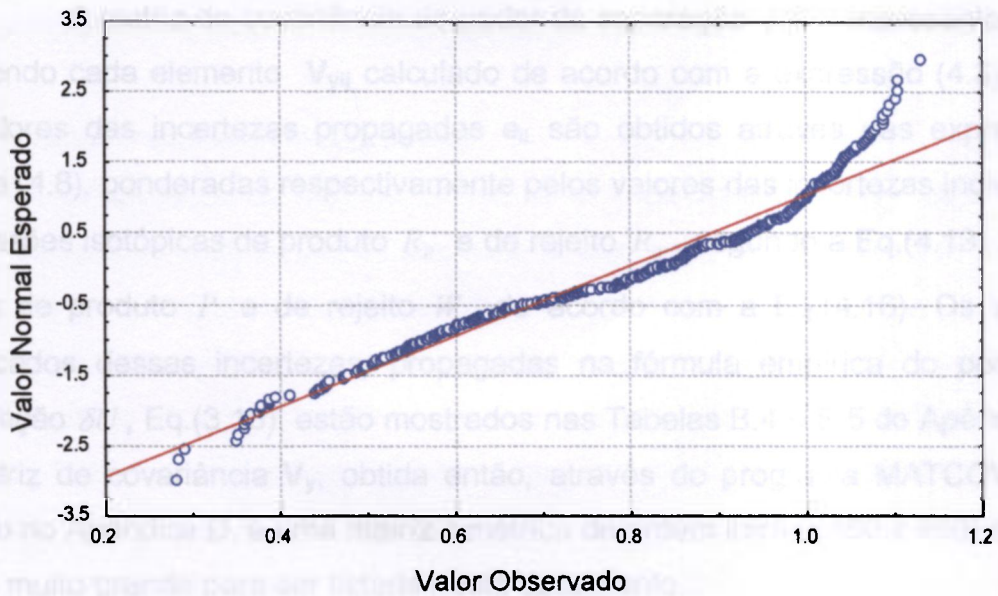


Figura 5.1b – Curva de Probabilidade Normal do poder de separação δU

5.2 Obtenção das curvas de ajuste

Verificado então, que a distribuição dos dados experimentais do poder de separação δU se assemelha com uma distribuição normal, partiu-se para a aplicação do método dos mínimos quadrados com matrizes de covariância, para

a obtenção de um modelo de regressão. A seqüência das etapas é descrita a seguir:

5.2.1 Cálculo do poder de separação

O valor experimental do poder de separação δU de uma ultracentrífuga, listado na Tabela B.6 do Apêndice B, é calculado através da Eq.(3.16), onde os valores codificados das razões de abundância de produto, rejeito e alimentação, estão listados nas Tabelas B.1 e os valores dos fluxos mássicos de produto e rejeito, estão listados na Tabela B.2, do mesmo Apêndice B. Esses valores de δU representam os elementos do vetor \mathbf{y}_{exp} , que é a variável regredida do modelo genérico indicado pela expressão (4.26).

5.2.2 Cálculo da matriz de covariância dos valores experimentais do poder de separação δU

A matriz de covariância do poder de separação δU é representada por \mathbf{V}_y , sendo cada elemento V_{yij} calculado de acordo com a expressão (4.3), onde os valores das incertezas propagadas e_{iL} são obtidos através das expressões (4.5) a (4.8), ponderadas respectivamente pelos valores das incertezas individuais das razões isotópicas de produto R_p e de rejeito R_w , segundo a Eq.(4.13), e dos fluxos de produto P e de rejeito W , de acordo com a Eq.(4.16). Os valores codificados dessas incertezas, propagadas na fórmula empírica do poder de separação δU , Eq.(3.16), estão mostrados nas Tabelas B.4 e B.5 do Apêndice B. A matriz de covariância \mathbf{V}_y , obtida então, através do programa MATCOVA160, listado no Apêndice D, é uma matriz simétrica de ordem inicial (460 x 460) e deste modo muito grande para ser listada neste documento.

5.2.3 Montagem da matriz projeto A

A matriz projeto \mathbf{A} , possui N linhas, onde N é o número de pontos experimentais (460) e tantas colunas quantos forem os termos incluídos na Eq.(4.26), os quais dependem da função de desempenho adotada para relacionar a variável de resposta δU , com as variáveis de controle, a saber, o fluxo de alimentação F , o corte θ e a pressão de produto P_p . Esses termos são

representativos dos efeitos lineares, quadráticos e de interação entre as variáveis de controle e irão compor as variáveis explicativas dos modelos de regressão.

5.2.4 Obtenção das estimativas dos coeficientes do modelo de regressão

As estimativas desses coeficientes são representadas pelo vetor s , obtido através das Eq.(4.20) e (4.21), solução da Eq.(4.19), que trata da minimização da forma quadrática Q , através do método dos mínimos quadrados com matriz de covariância, como descrito no ítem 4.4.1. Esse valor mínimo, relacionado com o valor da estatística qui-quadrado, é obtido com a utilização do programa MINQUAD, listado no Apêndice D, que fornece: o valor do qui-quadrado reduzido χ_{red}^2 , um dos parâmetros que avaliam a qualidade do ajuste do modelo de regressão, o vetor s , acima descrito, a matriz de covariância da solução V_s , que contém as incertezas dos coeficientes e suas covariâncias, permitindo o cálculo da estatística *t de Student*, através da Eq.(4.27) e conseqüente avaliação de sua significância através da obtenção da probabilidade *p-valor* correspondente.

5.2.5 Primeiro modelo de regressão

A aplicação do método, mediante a proposição de uma matriz projeto inicial, fornece os coeficientes de um modelo, cujo valor de qui-quadrado reduzido dentro da faixa aceitável, como descrito no tópico 4.5.1, Eq.(4.25) é o primeiro requisito para sua validação. A análise subsequente é dirigida para os níveis de significância de cada coeficiente do modelo e através da discussão explicitada no ítem 4.8.1, convencionando-se aceitar somente níveis de significância maiores que 95% (*p-valor* < 0,05). Os termos eliminados nos modelos iniciais determinam, cada um, uma nova matriz projeto, conseqüentemente uma nova análise e a obtenção de um novo modelo com outros coeficientes, até se ter o modelo final com valor de χ_{red}^2 aceitável e com todos os coeficientes do modelo (ou regressores) estatisticamente significativos.

É apresentado na Tabela 5.1 o primeiro modelo proposto, o qual apresentou um coeficiente com *p-valor* maior que o estatisticamente aceito (*p-valor* = 0,091). O primeiro modelo de regressão aceitável, MODELO 2, está mostrado na Tabela 5.2.

TABELA 5.1

Estimativas dos coeficientes do primeiro modelo proposto, MODELO 1, e os testes estatísticos associados

MODELO 1				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor-t	p-valor
β_0	constante	0,2472	4,8528	0,000
β_1	θ	2,3944	14,0410	0,000
β_2	P_p	0,2844	3,4541	0,000
β_{11}	θ^2	-2,8879	-11,4831	0,000
β_{22}	P_p^2	-0,4287	-11,0172	0,000
β_{23}	$P_p F$	7,33E-04	2,2116	0,027
β_{122}	θP_p^2	0,1420	2,4301	0,015
β_{223}	$P_p^2 F$	3,03E-03	16,4288	0,000
β_{112}	$\theta^2 P_p$	-0,2891	-1,6940	0,091
β_{1133}	$\theta^2 F^2$	3,08E-06	2,8299	0,004
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-9,21E-06	-23,2400	0,000

$$\chi_{red}^2 = 0,96$$

TABELA 5.2

Estimativas dos coeficientes do MODELO 2, e os testes estatísticos associados

MODELO 2				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor-t	p-valor
β_0	constante	0,2452	4,8162	0,000
β_1	θ	2,6032	22,0950	0,000
β_2	P_p	0,2285	3,0291	0,003
β_{11}	θ^2	-3,2914	-40,7340	0,000
β_{22}	P_p^2	-0,3916	-12,1740	0,000
β_{23}	$P_p F$	7,14E-04	2,1545	0,032
β_{122}	θP_p^2	4,57E-02	3,4083	0,000
β_{223}	$P_p^2 F$	3,05E-03	16,5582	0,000
β_{1133}	$\theta^2 F^2$	3,05E-06	2,8089	0,005
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-9,24E-06	-23,3200	0,000

$$\chi_{red}^2 = 0,97$$

Nas Tabelas 5.1 e 5.2 estão os valores dos coeficientes, os valores da distribuição t de Student associados e as respectivas probabilidades (p -valores) dos coeficientes de dois modelos propostos; e os valores da estatística qui-quadrado, representando a consistência dos dados. O MODELO 1 apresentou o termo β_{112} com nível de significância ($1-p$ -valor) menor que 95%, causando a sua eliminação e a proposta do MODELO 2, que foi bem satisfatória.

Desse modo é gerado um primeiro modelo reduzido que descreve a variável de resposta δU e as variáveis controladas (F, θ, P_p), cuja matriz de covariância dos regressores é mostrada na Tabela 5.3.

TABELA 5.3

Matriz que contém os valores das variâncias e covariâncias, no triângulo superior, e os valores das correlações, no triângulo inferior, dos parâmetros da equação ajustada pelo MODELO 2

	β_0	β_1	β_2	β_{11}	β_{22}	β_{23}	β_{122}	β_{223}	β_{1133}	β_{2233}
β_0	0.002593	-0.003853	-0.000001	0.000373	-0.001379	0.001679	0.000000	0.000000	0.000291	0.000000
β_1	-0.642	0.013881	-0.000010	-0.000559	0.002132	-0.004717	0.000000	0.000000	-0.000655	0.000002
β_2	-0.068	-0.245	1.10E-07	0.000009	-0.000020	-0.000005	0.000000	0.000000	0.000001	0.000000
β_{11}	0.228	-0.147	0.818	0.001035	-0.002311	-0.000346	0.000000	0.000000	0.000023	-0.000005
β_{22}	-0.359	0.240	-0.790	-0.953	0.005688	0.000722	0.000000	0.000000	-0.000200	0.000008
β_{23}	0.408	-0.496	-0.172	-0.133	0.118	0.006529	0.000000	0.000000	0.000127	0.000001
β_{122}	0.187	-0.431	-0.029	-0.064	0.012	-0.302	1.18E-12	0.000000	0.000000	0.000000
β_{223}	-0.028	0.231	-0.196	0.020	0.170	0.133	-0.352	1.57E-13	0.000000	0.000000
β_{1133}	-0.427	-0.415	0.167	0.054	-0.198	0.118	0.043	0.018	0.000179	0.000000
β_{2233}	0.036	0.094	-0.777	-0.766	0.609	0.061	0.217	-0.445	-0.182	3.4E-08

O valor do qui-quadrado obtido para o MODELO 2 foi $\chi^2 = 438,09$ e o qui-quadrado reduzido $\chi^2/(N-m) = 0,97$, com probabilidade de exceder este valor sendo igual a 64,74%. Da relação (4.25), a faixa de incerteza no qui-quadrado reduzido para $N-m = 450$ graus de liberdade, é dada por

$0,91 \leq \frac{\chi^2}{(N - m)} \leq 1,09$. Deste modo podemos considerar que houve um bom ajuste pelo modelo proposto.

5.2.6 Eliminação de pontos extremos

Como descrito no item 4.8.3.2, a verificação da existência de pontos extremos que podem ser eliminados do banco de dados, gera uma nova curva de regressão. Analisando inicialmente os resíduos do MODELO 2 em função da seqüência de experimentos, verificou-se que os mesmos não se apresentaram espalhados randomicamente ao redor de zero. Uma análise mais apurada indicou 3 valores do poder de separação, preditos pelo MODELO 2, fisicamente inconsistentes (valores negativos), os quais podem ser justificados por se tratarem de pontos experimentais obtidos em condições de processo com valores altos de corte θ , de pressão na linha de produto P_p e de fluxo de alimentação F . Esses três pontos experimentais, de números 593, 594 e 595, foram então eliminados do banco de dados, com o mesmo passando a conter 457 pontos válidos para análise.

5.2.7 Geração de novos modelos de regressão

A partir da eliminação dos pontos extremos, o procedimento de ajuste foi repetido com as mesmas variáveis explicativas do MODELO 2, gerando o MODELO 3 com as estimativas dos seus regressores indicadas na Tabela 5.4. Dentre esses, o termo β_{23} indicou nível de significância maior que o aceitável (p -valor = 0,1799), permitindo a sua eliminação e conseqüente obtenção do MODELO 4. Este último modelo, como indicado na Tabela 5.5, apresentou o termo β_{122} com p -valor na "fronteira". Uma nova análise foi efetuada, chegando-se ao MODELO 5, Tabela 5.6, aparentemente bem satisfatório.

TABELA 5.4

Estimativas dos coeficientes das variáveis no polinômio de segunda ordem e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 3

MODELO 3				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor-t	p-valor
β_0	constante	0,2148	4,1889	0,000
β_1	θ	2,6715	22,5245	0,000
β_2	P_p	0,2903	3,7987	0,000
β_{11}	θ^2	-3,3550	-41,0180	0,000
β_{22}	P_p^2	-0,4217	-12,8870	0,000
β_{23}	$P_p F$	4,5077E-04	1,3432	<u>0,179</u>
β_{122}	θP_p^2	3,0547E-02	2,2245	0,027
β_{223}	$P_p^2 F$	3,2888E-03	17,2871	0,000
β_{1133}	$\theta^2 F^2$	3,9449E-06	3,5805	0,000
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-9,5663E-06	-23,8250	0,000

$\chi_{red}^2 = 0,92$

TABELA 5.5

Estimativas dos coeficientes das variáveis no polinômio de segunda ordem e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 4

MODELO 4				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor-t	p-valor
B_0	constante	0,2181	4,2586	0,000
B_1	θ	2,7127	23,6789	0,000
B_2	P_p	0,3720	8,0353	0,000
B_{11}	θ^2	-3,3393	-41,2535	0,000
B_{22}	P_p^2	-0,4579	-24,6315	0,000
β_{122}	θP_p^2	2,6943E-02	2,0007	<u>0,052</u>
β_{223}	$P_p^2 F$	3,4887E-03	29,4527	0,000
β_{1133}	$\theta^2 F^2$	4,0236E-06	3,6571	0,000
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-9,4769E-06	-23,9338	0,000

$\chi_{red}^2 = 0,93$

A Tabela 5.6 representa os coeficientes estimados da equação de ajuste do poder de separação δU da ultracentrífuga, em função de 7 variáveis

explicativas que relacionam as variáveis de controle F , P_p e θ em termos lineares, quadráticos e de interação, com todos os p -valores altamente significativos (p -valor ≤ 0.01).

TABELA 5.6

Estimativas dos coeficientes das variáveis e os testes estatísticos associados, após retirada dos pontos extremos, MODELO 5

MODELO 5				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor t	p -valor
β_0	constante	0,1711	3,7598	0,000
β_1	θ	2,8038	26,6738	0,000
β_2	P_p	0,3830	8,3328	0,000
β_{11}	θ^2	-3,3685	-42,3127	0,000
β_{22}	P_p^2	-0,4533	-24,5722	0,000
β_{223}	$P_p^2 F$	3,5177E-03	29,9228	0,000
β_{1133}	$\theta^2 F^2$	3,9860E-06	3,6234	0,000
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-9,5467E-06	-24,2044	0,000
$\chi_{red}^2 = 0,94$				

O valor do qui-quadrado obtido para o MODELO 5 foi $\chi^2 = 418,76$ e o qui-quadrado reduzido $\chi_{red}^2 = 0,94$, com probabilidade de exceder este valor sendo igual a 84,38%.

5.3 Verificação do MODELO 5

5.3.1 Verificação da normalidade dos resíduos

O MODELO 5 representa a equação de regressão que não apresentou restrições nas estimativas dos coeficientes, uma vez que todos os p -valores foram estatisticamente significantes, e portanto trata-se do modelo que deve ser avaliado. Os valores preditos pelo modelo não apresentaram resultado absurdo. A Figura 5.2 apresenta a curva de distribuição dos resíduos com relativa semelhança a uma distribuição normal, com porcentagem de resíduos na faixa da média mais ou menos dois desvios-padrão, igual a 95,15%.

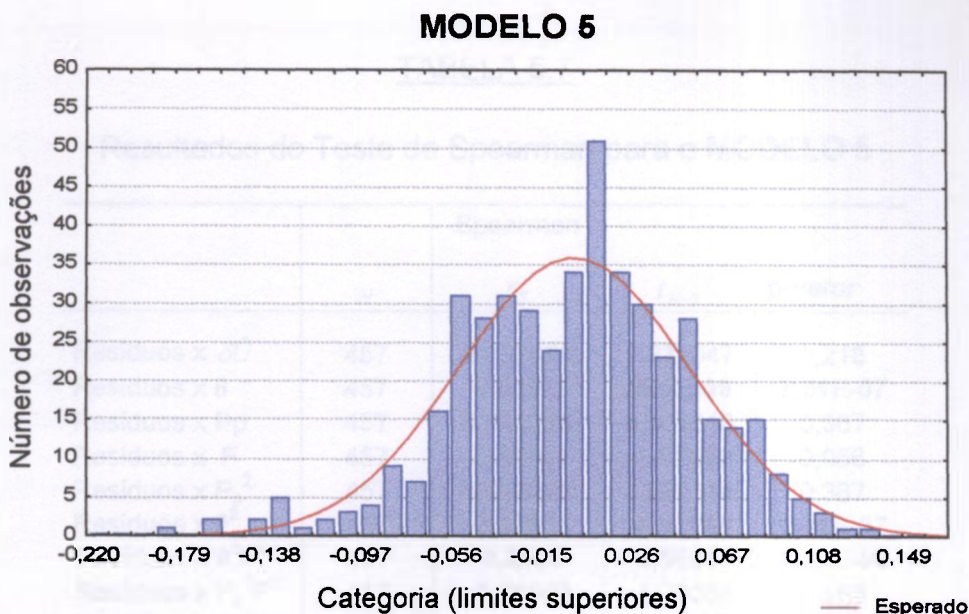


Figura 5.2 – Distribuição dos resíduos do MODELO 5

5.3.2 Verificação da heteroscedasticidade dos resíduos

O teste de verificação de heteroscedasticidade baseado nas correlações de Spearman, como descrito no tópico 4.8.4.4.1, conduziu à rejeição da hipótese nula de homoscedasticidade, devido à existência de correlação entre os resíduos da regressão com as variáveis explicativas θ , θ^2 e $\theta^2 F^2$ ($|t_{obs}| > t_{(N-2)g,1;5\%} = 1,9651$), como indicado na Tabela 5.7.

O teste de Park, para verificação da existência de heteroscedasticidade, apresentou uma regressão com $R^2 = 0,0454$ e nenhum parâmetro significativo, como mostra a Tabela 5.8. Este teste, ao contrário do teste de Spearman, rejeita a hipótese de heteroscedasticidade dos resíduos aleatórios do modelo de regressão, representado pelo MODELO 5.

TABELA 5.7

Resultados do Teste de Spearman para o MODELO 5

	<i>N</i>	Spearman <i>r_S</i>	<i>t_{N-2}</i>	<i>p</i> -valor
Resíduos x $\delta\hat{U}$	457	0,057658	1,231947	0,218
Resíduos x θ	457	-0,22923	-5,02339	7,31E-07
Resíduos x P_p	457	0,042226	0,901516	0,367
Resíduos x F	457	-0,08941	-1,91493	0,056
Resíduos x P_p^2	457	0,042226	0,901516	0,367
Resíduos x θ^2	457	-0,22923	-5,02339	7,31E-07
Resíduos x $\theta^2 F^2$	457	-0,2093	-4,56555	6,42E-06
Resíduos x $P_p^2 F^2$	457	-0,06506	-1,39068	0,165
Resíduos x $P_p^2 F$	457	-0,03339	-0,7127	0,476
$t(n-2); 0,05$			1,9651	

TABELA 5.8

Resultados do teste de Park para o MODELO 5

Log	Estimativa <i>B</i>	Desvio-padrão de <i>B</i>	<i>t₄₄₉</i>	<i>p</i> -valor
Intercepto	-1,904862195	0,421853	-4,51546	0,000
θ	-0,107112132	0,501608	-0,21354	0,831
P_p^2	-0,043741408	0,405341	-0,10791	0,914
P_p	-0,087482816	0,810683	-0,10791	0,914
θ^2	-0,053556066	0,250804	-0,21354	0,831
$\theta^2 F^2$	-0,099876637	0,162969	-0,61286	0,540
$F^2 P_p^2$	-0,125149201	0,194029	-0,645	0,519
$P_p^2 F$	-0,149423732	0,320332	-0,46646	0,641

A ausência de heteroscedasticidade implica que a magnitude dos resíduos não deve variar com qualquer grandeza. Por exemplo, na Tabela 5.5, podemos perceber que os resíduos do MODELO 5 apresentam valor significativo de correlação de Spearman, em relação às variáveis θ , θ^2 e $\theta^2 F^2$, sugerindo a existência de heteroscedasticidade nos resíduos. A mesma tendência pode ser visualizada nas Figuras 5.3, 5.4 e 5.5, sendo indicado então, a aplicação de algum tipo de correção ao MODELO 5.

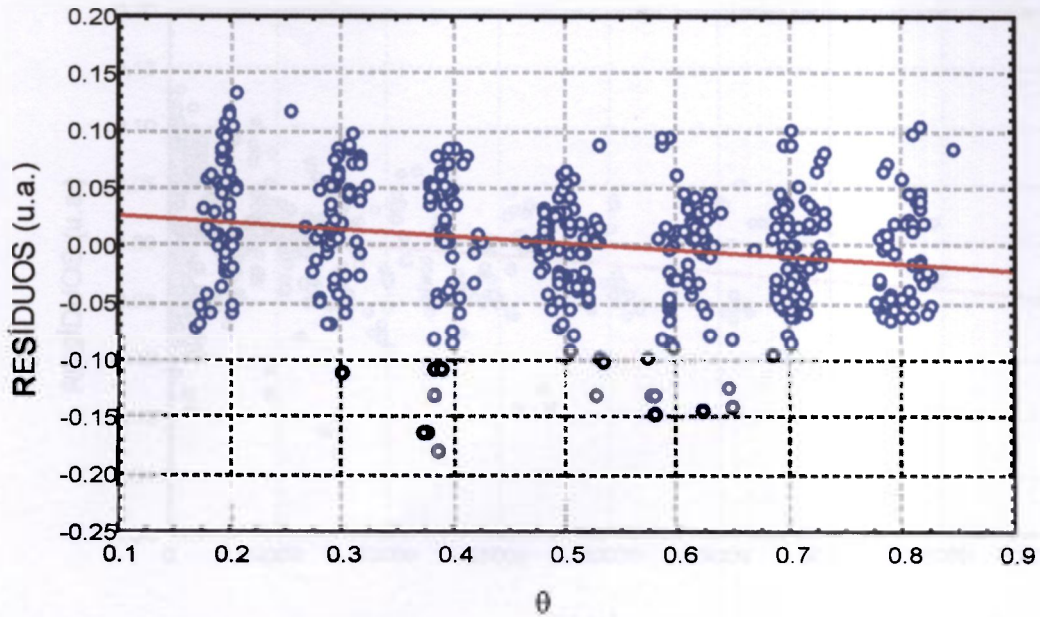


Figura 5.3 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função do corte θ

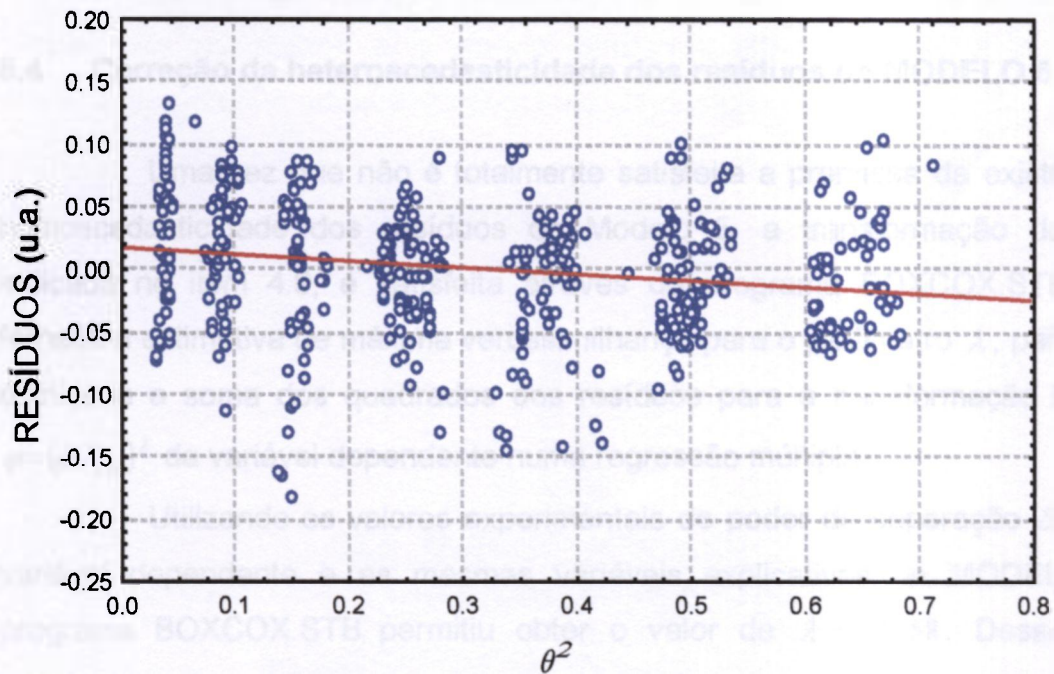


Figura 5.4 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de θ^2

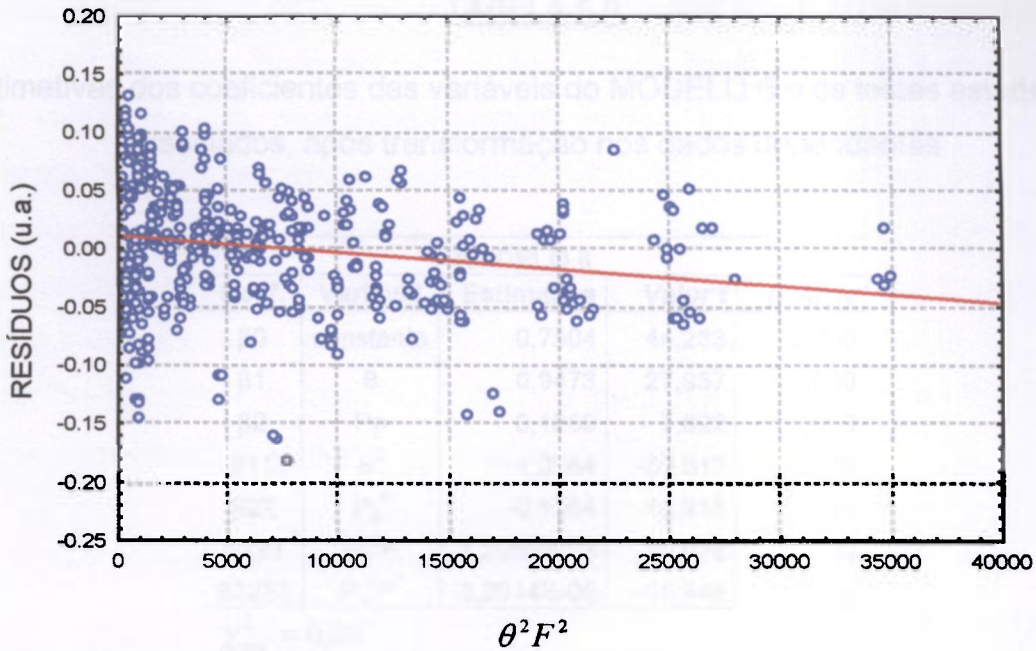


Figura 5.5 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $\theta^2 F^2$

5.4 Correção da heteroscedasticidade dos resíduos do MODELO 5

Uma vez que não é totalmente satisfeita a premissa da existência de homoscedasticidade dos resíduos do Modelo 5, a transformação de dados indicada no item 4.9, é satisfeita através do programa BOXCOX.STB¹⁸, que fornece a estimativa de máxima verossimilhança para o parâmetro λ , para o qual é mínima a soma dos quadrados dos resíduos para a transformação Box-Cox $\varphi = (\delta U_{EXP})^\lambda$ da variável dependente numa regressão múltipla.

Utilizando os valores experimentais do poder de separação δU como variável dependente e as mesmas variáveis explicativas do MODELO 5, o programa BOXCOX.STB permitiu obter o valor de $\lambda = 0,3158$. Desse modo, recalculando os valores dos dados experimentais do poder de separação, segundo a expressão $\delta U_{transf.} = (\delta U_{exp.})^{\lambda=0,3158}$, e a matriz de covariância do poder de separação, segundo a expressão $(\sigma_{\delta U})_{transf.} \approx \lambda * (\delta U)_{exp.}^{\lambda-1} * (\sigma_{\delta U})_{exp.}$, uma nova regressão foi realizada, obtendo-se as estimativas dos coeficientes do MODELO 6, contidas na Tabela 5.9.

TABELA 5.9

Estimativas dos coeficientes das variáveis do MODELO 6 e os testes estatísticos associados, após transformação nos dados dependentes

MODELO 6				
Coef.	Variável	Estimativa	Valor t	p-valor
β_0	constante	0,7504	44,283	0,000
β_1	θ	0,9473	27,957	0,000
β_2	P_p	0,1259	7,622	0,000
β_{11}	θ^2	-1,0684	-30,013	0,000
β_{22}	P_p^2	-0,1564	-18,916	0,000
β_{223}	$P_p^2 F$	1,2058E-03	20,078	0,000
β_{2233}	$P_p^2 F^2$	-3,2814E-06	-18,946	0,000

$\chi^2_{red} = 0,86$

O gráfico da distribuição dos resíduos do MODELO 6 está representado na Figura 5.6, apresentando porcentagem dos resíduos na faixa da média mais ou menos dois desvios-padrão igual a 96,28%, o que indica novamente uma boa adequação com uma distribuição normal.

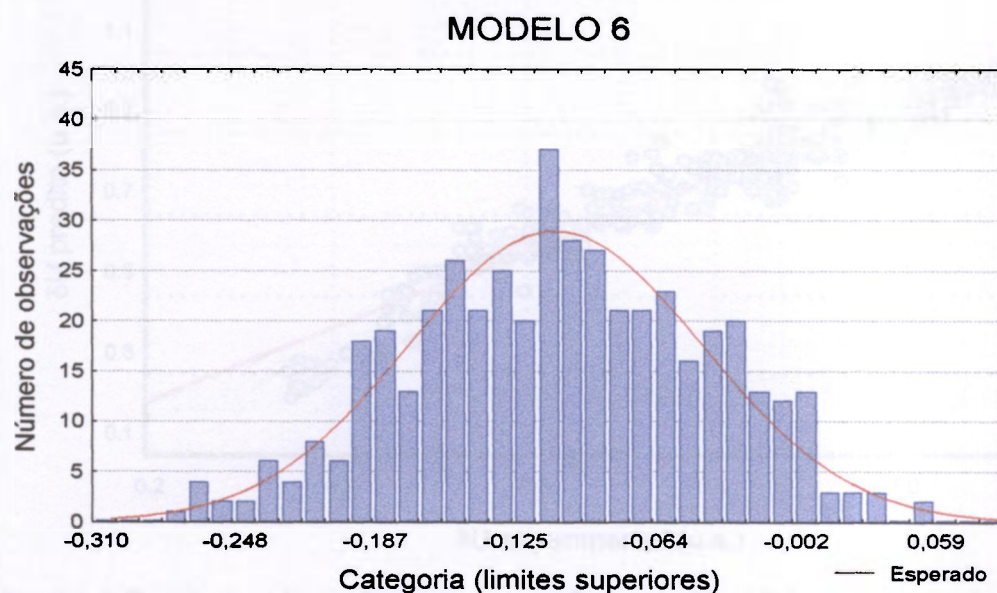


Figura 5.6 – Distribuição dos resíduos do MODELO 6

Entretanto, a repetição do teste de correlação de Spearman para os resíduos do MODELO 6 transformado, não permitiu a não rejeição da hipótese de

heteroscedasticidade entre os resíduos e as variáveis explicativas. Segundo Feijó²⁴, tal resultado pode ser interpretado como decorrência de que os testes para verificação da homoscedasticidade foram construídos para pequenas amostras. Quando aplicados a grande volume de dados, passam a ser muito rigorosos e qualquer pequena variação tem maior probabilidade de ser considerada. Paralelamente, estudos realizados²² sobre o mesmo banco de dados, indicaram uma degradação de parte dos dados, resultante de lentas alterações progressivas nas condições de realização dos ensaios. Em função destas considerações foi preferido optar pelo MODELO 5.

5.5 Análise da qualidade do ajuste do MODELO 5

O MODELO 5, sem a transformação dos dados para a correção da heteroscedasticidade, apresentou um coeficiente de correlação igual a 0,9627. O gráfico da Figura 5.7 mostra que os valores experimentais do poder de separação e os calculados pela equação da regressão apresentam uma relação linear efetiva.

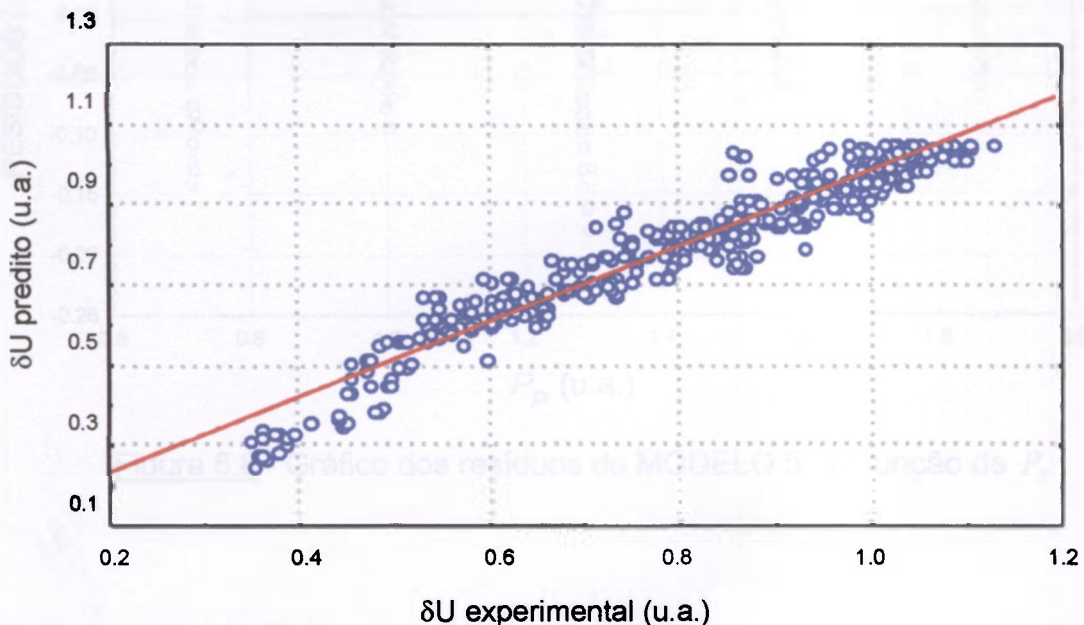


Figura 5.7 – Curva do poder de separação experimental em função do poder de separação predito pelo MODELO 5.

O coeficiente de determinação, Eq.(4.30), foi calculado e resultou em 0,9268, (R^2 ajustado=0,9266), significando que 92,68% da variância total dos

dados é explicada pelo modelo da regressão, sendo o restante atribuído à variabilidade da amostra.

5.5.1 Avaliação gráfica da heteroscedasticidade

Apesar da significância dos valores das correlações de Spearman entre os resíduos do MODELO 5 e as variáveis explicativas θ , θ^2 e $\theta^2 F^2$, já mostradas na Tabela 5.7, a heteroscedasticidade pode ser avaliada ainda, em função das demais variáveis explicativas do modelo, como indicado nas Figuras 5.8, 5.9, 5.10 e 5.11. Visualmente, estes gráficos atestam a não existência de heteroscedasticidade com as respectivas variáveis, como já indicado na Tabela 5.7.

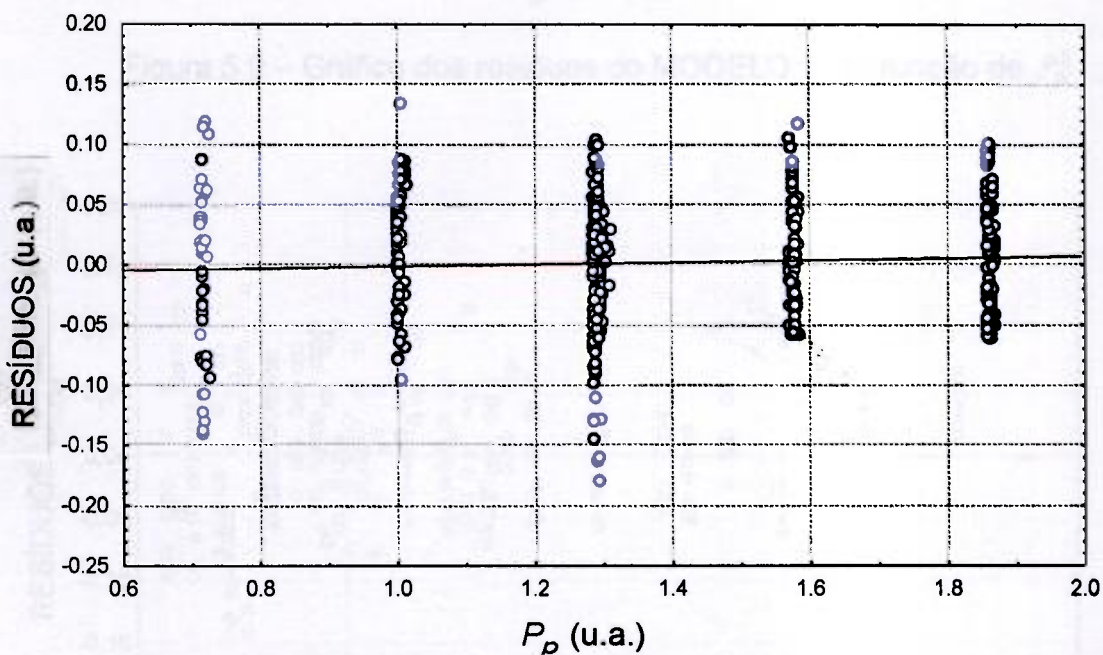


Figura 5.8– Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de P_p

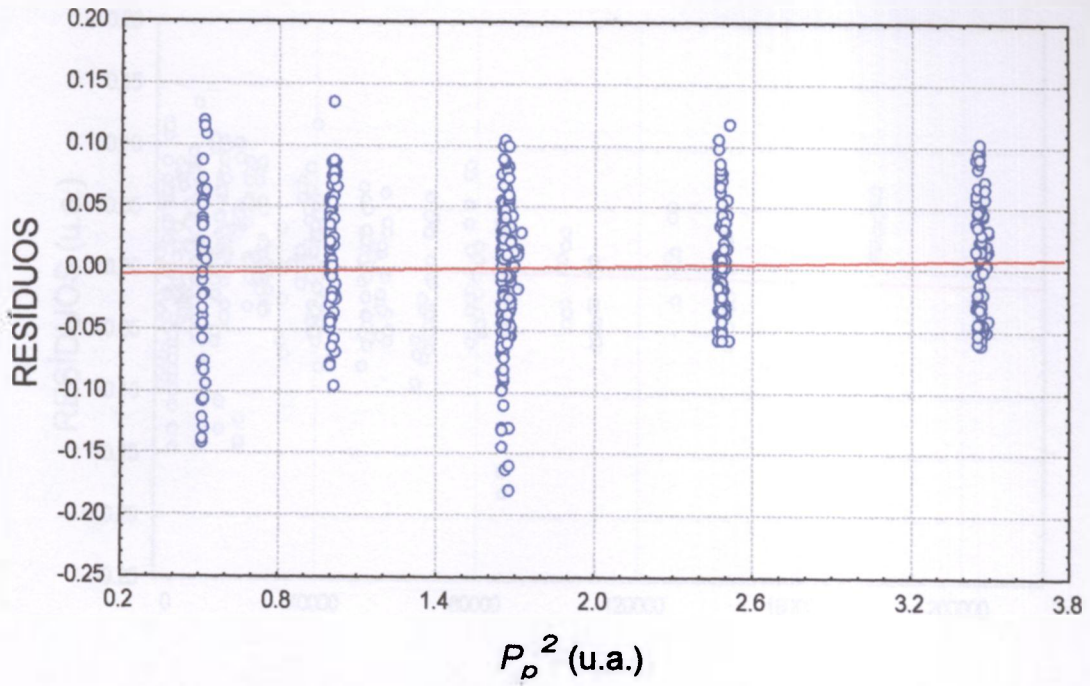


Figura 5.9 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de P_p^2

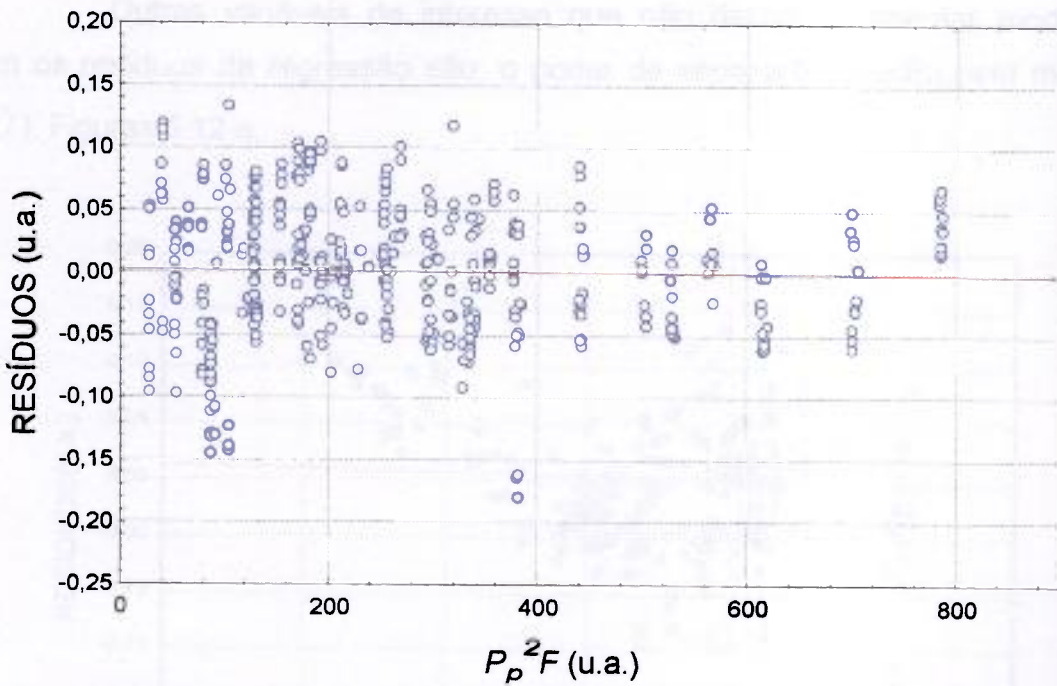


Figura 5.10 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $P_p^2 F$

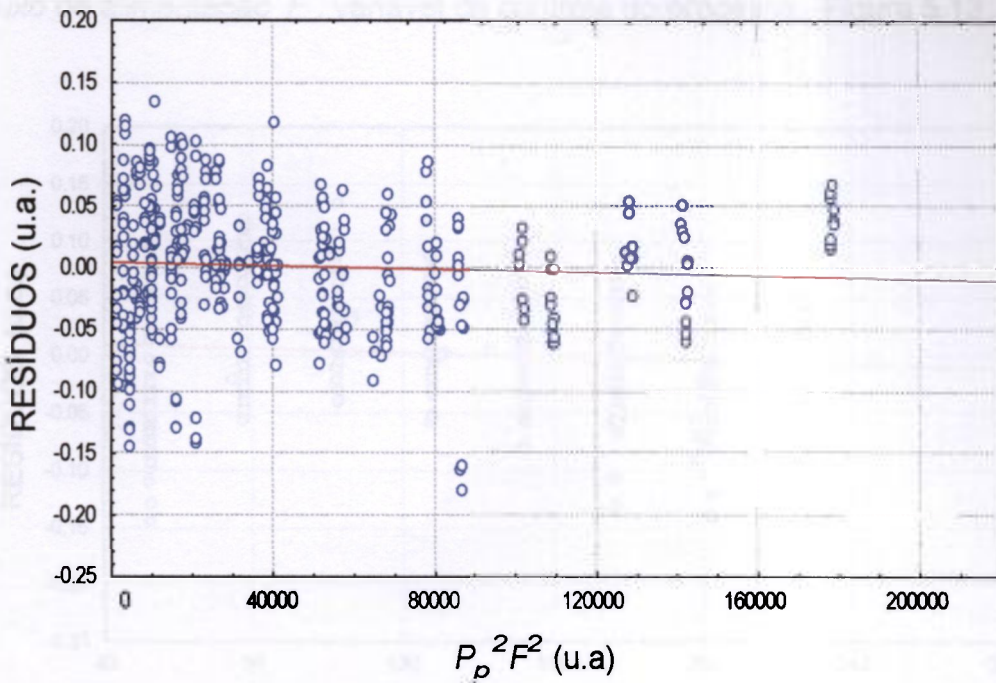


Figura 5.11 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $P_p^2 F^2$

Outras variáveis de interesse que não devem apresentar tendência com os resíduos da regressão são: o poder de separação predito pelo modelo ($\delta\hat{U}$), Figuras 5.12 e;

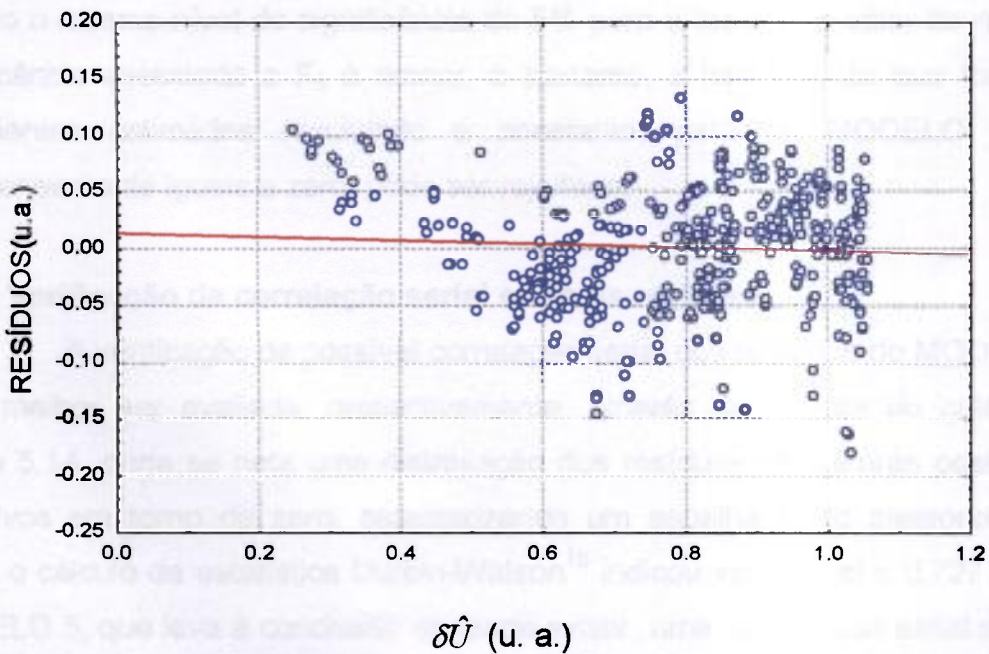


Figura 5.12 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de $\delta\hat{U}$

e o fluxo de alimentação F , variável de controle do processo, Figura 5.13.

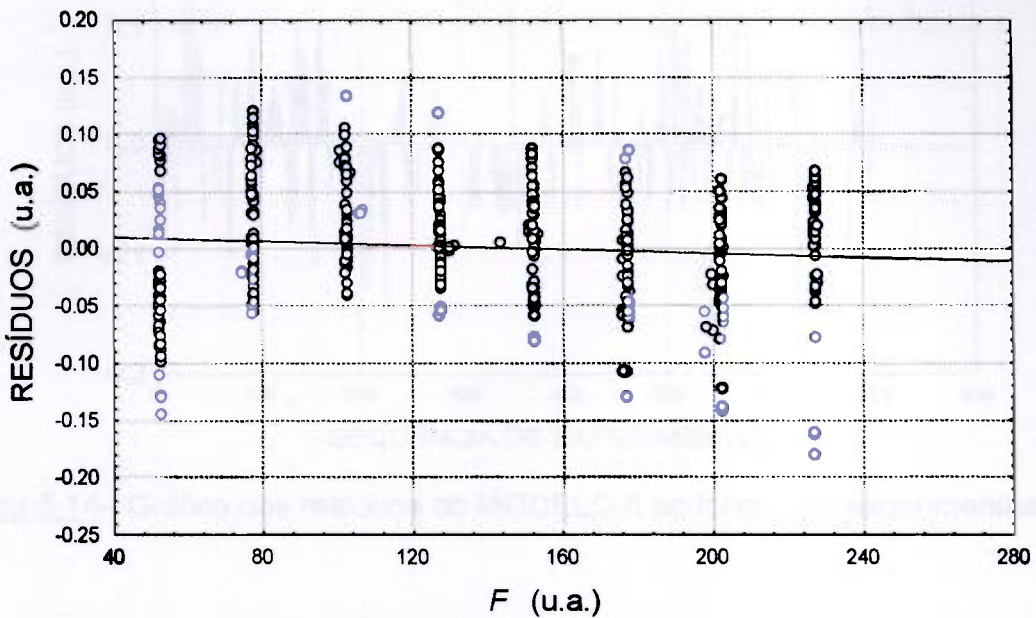


Figura 5.13 – Gráfico dos resíduos do MODELO 5 em função de F

5.5.2 Teste da hipótese de nulidade dos coeficientes da regressão

O cálculo da estatística F , Eq.(4.28), para o MODELO 5, resultou no valor $F_5 = 897,52$, com nível de significância resultando em zero. Desse modo, usando o mesmo nível de significância de 5% para o teste F , o valor do nível de significância associado a F_5 é menor, e portanto, a hipótese de que todos os coeficientes estimados (excluindo a constante) para os MODELO 5 são simultaneamente iguais a zero, pode ser rejeitada.

5.5.3 Verificação da correlação serial entre os resíduos

A verificação de possível correlação serial dos resíduos do MODELO 5, pode melhor ser avaliada, respectivamente, através da análise do gráfico da Figura 5.14, onde se nota uma distribuição dos resíduos em valores positivos e negativos em torno de zero, caracterizando um espalhamento aleatório. Além disso, o cálculo da estatística Durbin-Watson¹⁶ indicou valor igual a 0,727 para o MODELO 5, que leva à conclusão de ainda existir uma correlação serial positiva (valor d menor que 1,5).

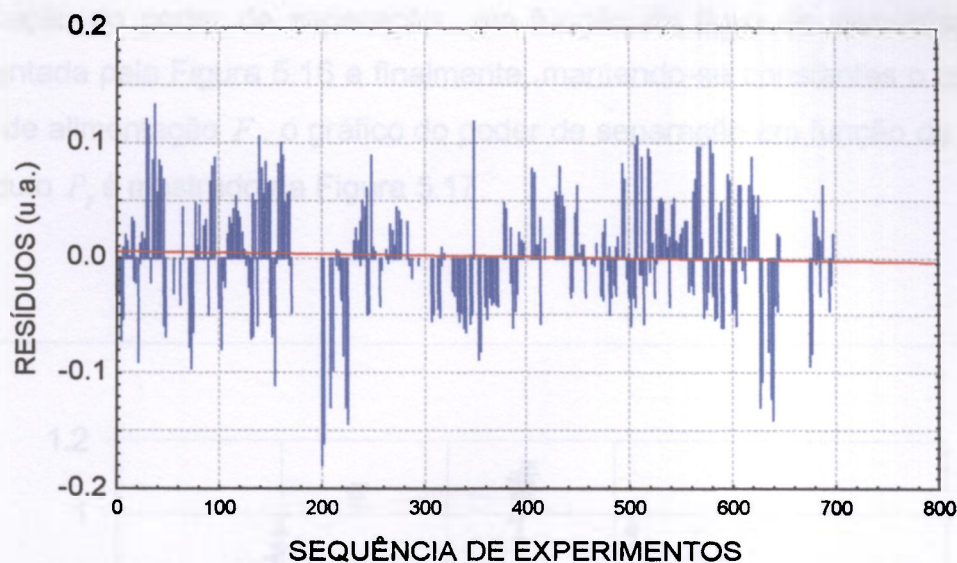


Figura 5.14– Gráfico dos resíduos do MODELO 5 ao longo dos experimentos

5.6 Verificação gráfica da curva ajustada aos pontos experimentais

Se o modelo de regressão representa uma relação matemática adequada entre o poder de separação da ultracentrífuga e as variáveis de controle do processo, então necessariamente, a curva teórica deve situar-se entre os pontos experimentais. Através do modelo teórico final, representado pela Tabela 5.6, podemos obter as curvas de variação do poder de separação δU com as variáveis de controle F , θ , P_p .

5.6.1 Construção das curvas de resposta do poder de separação δU em função das variáveis de controle do processo

Isso é feito, alternando-se valores constantes de cada duas dessas variáveis e obtendo-se uma equação da variável dependente em função da terceira variável. Na seqüência, os gráficos obtidos são então confrontados com os valores experimentais do poder de separação, obtidos com as variáveis de controle, cujos valores são próximos daqueles assumidos como constantes.

Mantendo-se a pressão na linha de produto P_p constante (1,28 u.a.) e o fluxo de alimentação F constante (171 u.a.), a curva de variação do poder de separação em função do corte θ resulta na Figura 5.15; mantendo-se o corte θ constante (0,5), e a pressão na linha de produto P_p constante (1,28 u.a.), a curva

de variação do poder de separação em função do fluxo de alimentação F é representada pela Figura 5.16 e finalmente, mantendo-se constantes o corte θ e o fluxo de alimentação F , o gráfico do poder de separação em função da pressão de produto P_p é mostrado na Figura 5.17.

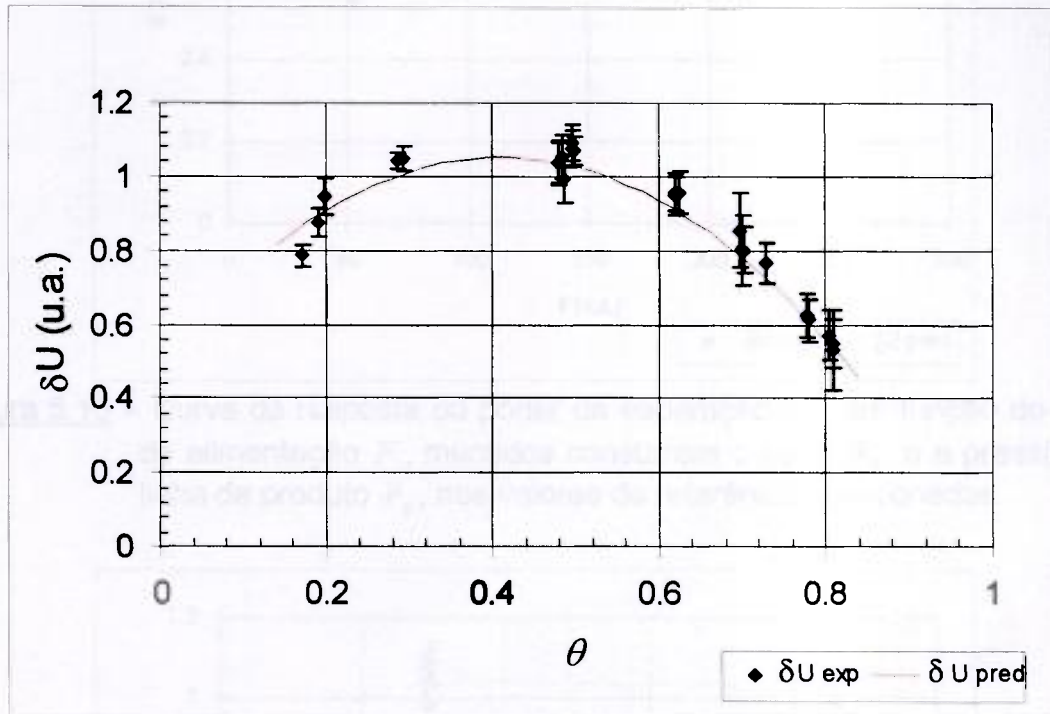


Figura 5.15 – Curva de resposta do poder de separação δU em função do corte θ , mantidos constantes o fluxo de alimentação F e a pressão na linha de produto P_p , nos valores de referência selecionados.

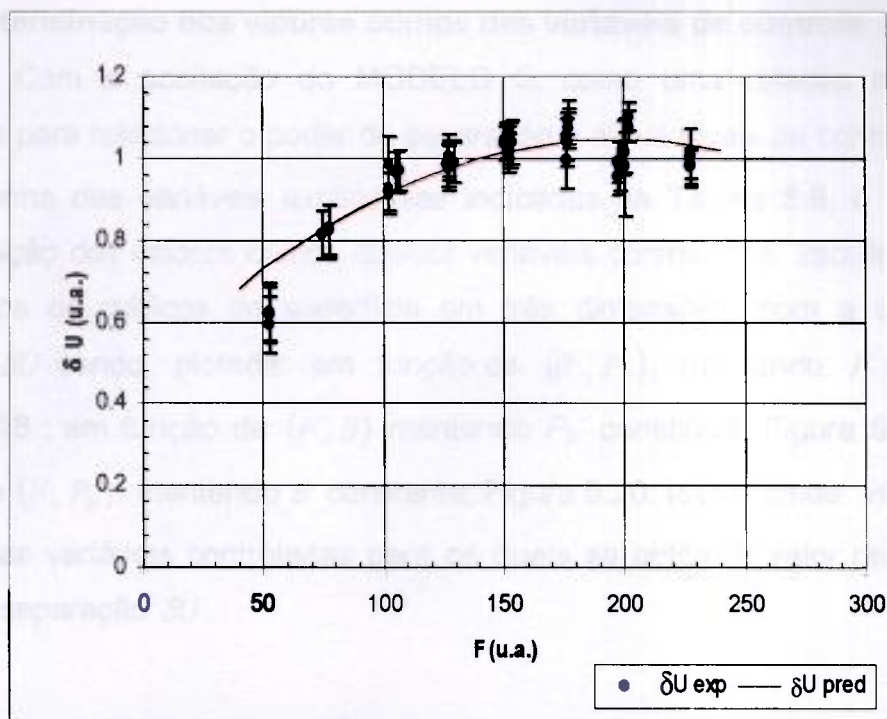


Figura 5.16 – Curva de resposta do poder de separação δU em função do fluxo de alimentação F , mantidos constantes o corte θ , e a pressão na linha de produto P_p , nos valores de referência selecionados.

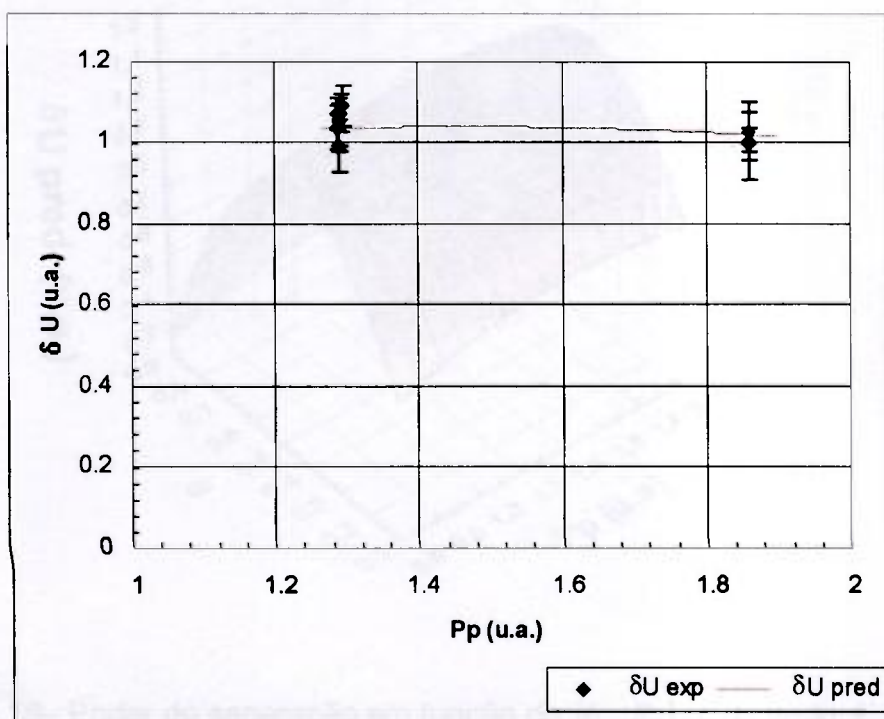


Figura 5.17 – Curva de resposta do poder de separação δU em função da pressão na linha de produto P_p , mantidos constantes o fluxo de alimentação F e o corte θ , nos valores de referência selecionados.

5.7 Determinação dos valores ótimos das variáveis de controle

Com a aceitação do MODELO 5, como uma relação matemática adequada para relacionar o poder de separação e as variáveis de controle θ, P_p e F , na forma das variáveis explicativas indicadas na Tabela 5.6, é possível a determinação dos valores ótimos dessas variáveis controladas. Inicialmente, são construídos os gráficos de superfície em três dimensões, com a variável de resposta δU sendo plotada: em função de (θ, P_p) , mantendo F constante, Figura 5.18 ; em função de (F, θ) mantendo P_p constante, Figura 5.19, e, em função de (F, P_p) , mantendo θ constante, Figura 5.20. Isso permite visualizar os valores das variáveis controladas para os quais se obtém o valor otimizado do poder de separação δU .

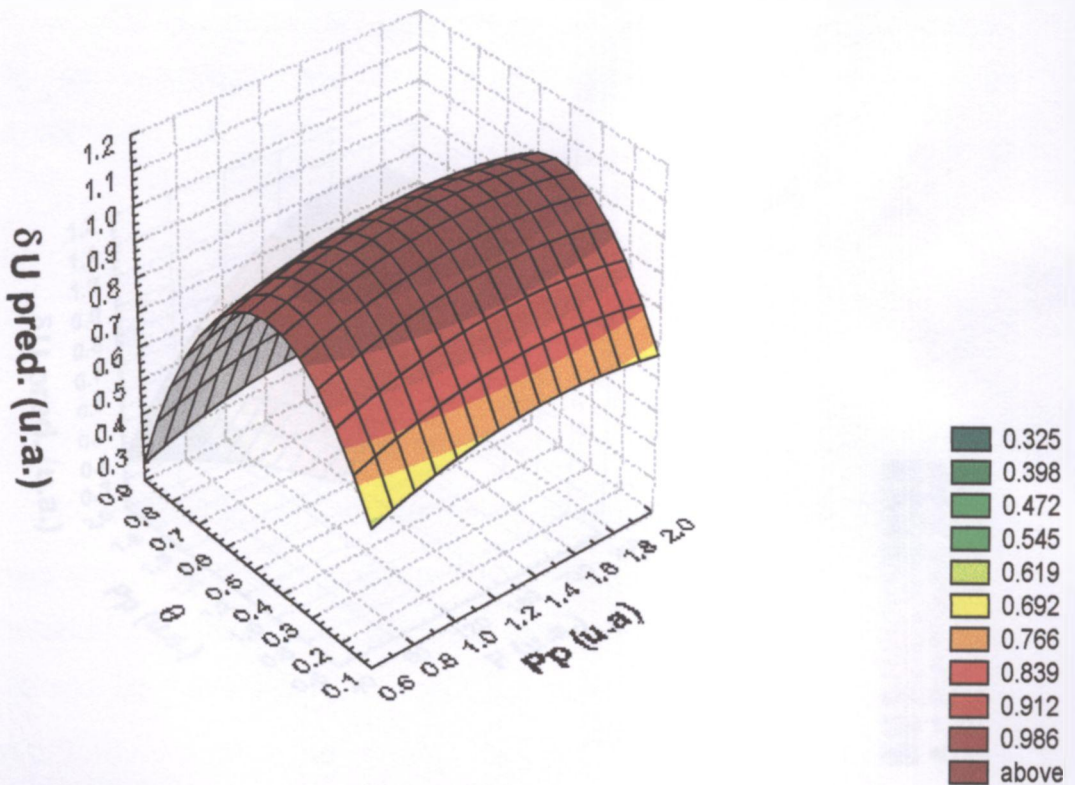


Figura 5.18– Poder de separação em função de (θ, P_p) , mantendo F constante

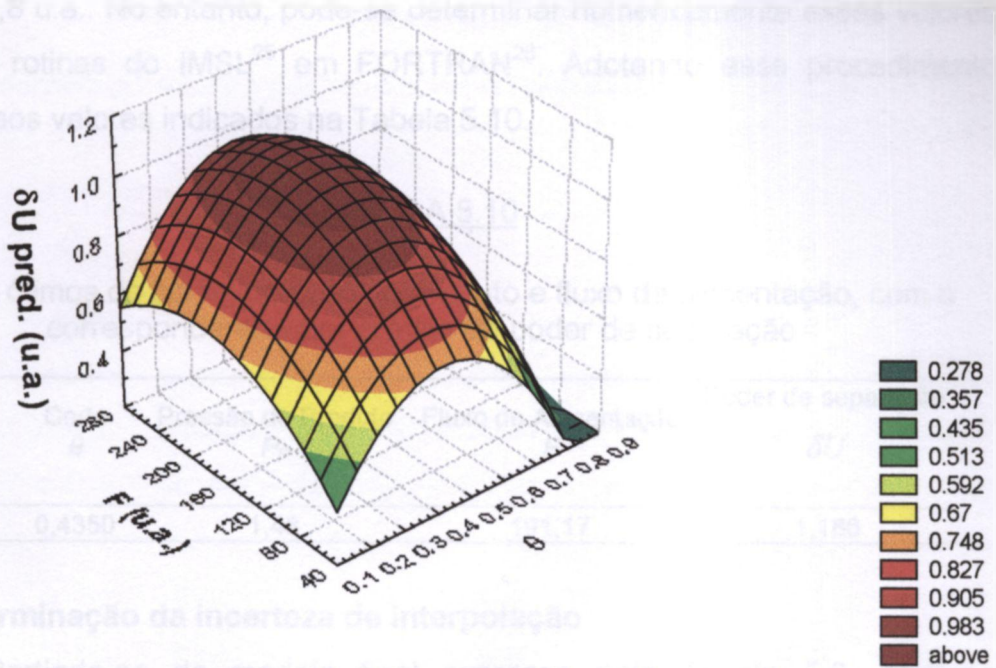


Figura 5.19 – Poder de separação em função de (F, θ) mantendo P_p constante

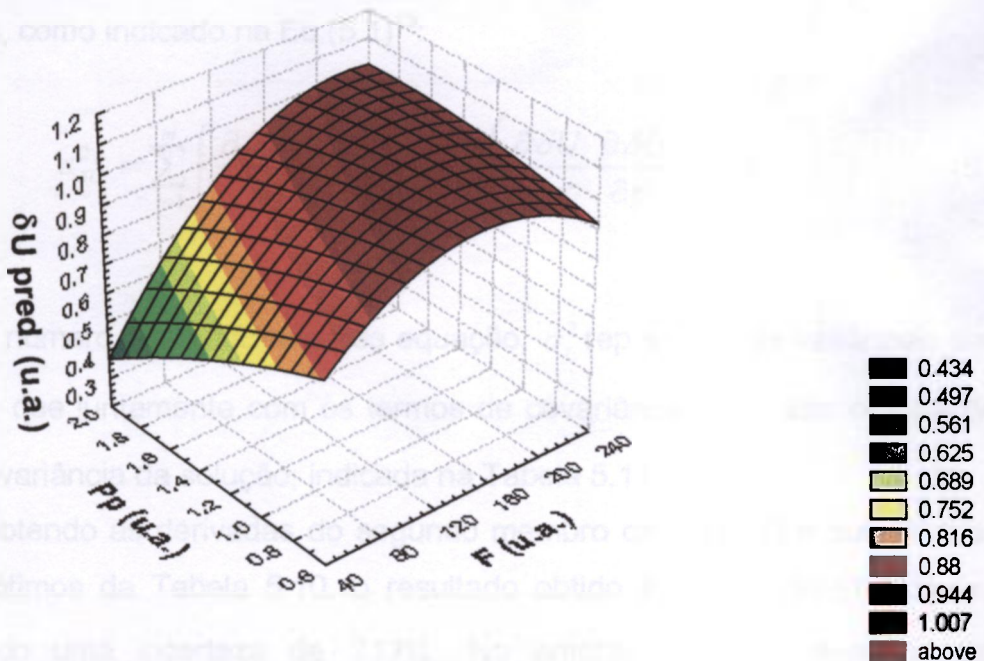


Figura 5.20 – Poder de separação em função de (F, P_p) , mantendo θ constante

Analisando as Figuras 5.18 e 5.19, podemos estimar a faixa do corte ótimo entre 0,4 e 0,5. Do mesmo modo, através da Figuras 5.19 e 5.20, o fluxo de alimentação ótimo está entre 150 u.a. e 200 u.a. e a pressão de produto entre

1,2 u.a. e 1,8 u.a.. No entanto, pode-se determinar numericamente esses valores, através de rotinas do IMSL²⁵ em FORTRAN²⁶. Adotando esse procedimento, chegamos aos valores indicados na Tabela 5.10.

TABELA 5.10

Valores ótimos do corte, pressão de produto e fluxo de alimentação, com o correspondente valor predito do poder de separação

Variável (u.a)	Corte θ	Pressão de Produto P_p	Fluxo de Alimentação F	Poder de separação δU
	0,4350	1,48	191,17	1,186

5.7.1 Determinação da incerteza de interpolação

Partindo-se do modelo final expresso pela Tabela 5.6, podemos calcular o desvio padrão do valor ótimo do poder de separação indicado na Tabela 5.10, através da aplicação da fórmula de propagação de incertezas, considerando as incertezas dos coeficientes do MODELO 5 e as suas covariâncias, como indicado na Eq.(5.1)¹³:

$$s_{\delta U}^2 = \sum_{i=1}^m \left(\frac{\partial \delta U}{\partial p_i} \right)^2 \sigma_i^2 + 2 \sum_{i>j} \left(\frac{\partial \delta U}{\partial p_i} \frac{\partial \delta U}{\partial p_j} \right) \sigma_{ij}^2 \quad (5.1)$$

onde m é o número de coeficientes da equação, σ_i^2 representa as variâncias dos coeficientes, que juntamente com os termos de covariâncias σ_{ij}^2 , são obtidos da matriz de covariância da solução, indicada na Tabela 5.11.

Obtendo as derivadas do segundo membro da Eq.(5.1) e substituindo os valores ótimos da Tabela 5.10, o resultado obtido é $\delta U = (1,186 \pm 0,085)u.a.$, representando uma incerteza de 7,17%. No entanto, se não levarmos em consideração as correlações entre as incertezas dos coeficientes, o que significa considerar apenas os termos diagonais da matriz de covariância da solução, nosso resultado será $\delta U = (1,186 \pm 0,119)u.a.$, com incerteza de 10,03%, ou seja, um aumento da incerteza através de um fator de quase 1,5.

TABELA 5.11

Matriz que contém os valores das variâncias e covariâncias, no triângulo superior, e os valores das correlações, no triângulo inferior, dos parâmetros da equação ajustada pelo MODELO 5

	β_0	β_1	β_2	β_{11}	β_{22}	β_{223}	β_{1133}	β_{2233}
β_0	0.002072	-0.002942	0.000530	-0.001475	0.001383	8.680E-09	-1.162E-09	1.781E-08
β_1	-0.6148	0.011049	0.000081	0.000183	-0.004584	-5.373E-08	9.455E-09	-2.532E-06
β_2	0.6309	0.0420	0.000340	-0.000761	0.000080	-1.678E-09	2.519E-09	-8.462E-07
β_{11}	-0.7048	0.0378	-0.8971	0.002113	-0.000068	-3.181E-10	4.054E-10	-9.014E-08
β_{22}	0.3817	-0.5478	0.0544	-0.0187	0.006338	-2.972E-08	3.788E-09	-1.244E-06
β_{223}	0.1733	-0.4647	-0.0827	-0.0063	-0.3393	1.210E-12	-1.676E-13	4.353E-11
β_{1133}	-0.0647	0.2281	0.3462	0.0224	0.1206	-0.3864	1.556E-13	-4.499E-11
β_{2233}	0.0033	-0.2049	-0.3901	-0.0167	-0.1329	0.3366	-0,9703	1.382E-08

Se tivéssemos ignorado as correlações entre as incertezas de R_p , R_w , P e W para o cálculo da matriz de covariância dos dados de entrada e realizado o ajuste com o mesmo formalismo, teríamos obtido um modelo, cuja interpolação dos mesmos valores de θ , P_p e F , da Tabela 5.10, forneceria o resultado para o poder de separação predito $\delta U = (1,067 \pm 0,147)u.a.$, representando uma incerteza de 13,78%. Comparando-se com o valor da incerteza de interpolação de 7,17%, obtida com o ajuste considerando as correlações entre as incertezas de R_p , R_w , P e W , fica evidente a importância da inclusão, nesse caso, da informação completa⁹ da matriz de covariância, para redução das incertezas na predição do modelo.

6 CONCLUSÕES

- A análise de dados experimentais por técnicas estatísticas necessita que os mesmos apresentem alguns requisitos básicos, que são estabilidade, independência e aleatoriedade. Os dados experimentais desse trabalho foram obtidos na separação isotópica de UF_6 pelo processo de ultracentrifugação e dentro desse processo as amostras obtidas apresentam estabilidade, pois o procedimento de amostragem das correntes de produto e rejeito ocorre em condições estacionárias nos fluxos e pressões; a obtenção de cada amostra de produto e rejeito é feita em tubulações distintas, assegurando a independência das medidas. Embora os ensaios não tenham sido realizados de acordo com um planejamento de experimentos, o terceiro requisito é satisfeito. A análise de resíduos efetuada mostrou que os mesmos se distribuíram de modo semelhante a uma normal, como é indicado pela Figura 5.2, além de terem apresentado correlação serial adequada, através da Figura 5.14.
- Como descrito no item 4.4, o ajuste de curvas pelo Método dos Mínimos Quadrados pode ser usado mesmo em caso da variável de resposta não apresentar uma distribuição normal, no entanto, os testes estatísticos para análise do modelo, ou são distribuídos normalmente, ou então seguem uma distribuição que é derivada de uma normal. Daí a importância de assegurar que os valores do poder de separação δU apresentem uma distribuição próxima da distribuição normal. Isto é garantido, neste trabalho, através da análise dos gráficos das Figuras 5.1a e 5.1b e do cálculo da porcentagem de dados que caem entre mais ou menos dois desvios-padrão, igual a 95,19%, respaldando desta forma, o cálculo do nível de significância estatística e os testes estatísticos t-Student, F e principalmente o χ^2 .
- A equação de regressão do modelo final, representada pela Tabela 5.6, exprime os efeitos linear, quadrático e de interação entre o poder de separação δU e as variáveis de controle, corte θ , pressão na linha de

produto P_p e fluxo de alimentação F da centrífuga, apresentando 8 coeficientes, cujas variâncias e covariâncias estão contidas na Tabela 5.11. Nesta tabela, as variâncias dos coeficientes, que são os elementos da diagonal principal, são valores pequenos, que significam pequenos desvios-padrão e conseqüentemente pequena variabilidade do modelo que representa os dados experimentais. Os elementos do triângulo superior da matriz, representam as covariâncias entre os parâmetros e quanto menores esses valores, maior a independência entre os coeficientes, que é a situação ideal. Novamente, os valores observados foram bem pequenos. O triângulo inferior da matriz representa os valores das correlações entre os coeficientes, confirmando a independência entre as estimativas dos parâmetros.

- O modelo final apresentou valor de qui-quadrado igual a 418,76 e qui-quadrado reduzido igual a 0,94, com 84,38% de probabilidade de exceder este valor.
- Os demais parâmetros estatísticos que avaliam a qualidade de ajuste do modelo, conforme o tópico 4.8.3, auxiliaram na validação do MODELO 5, ou seja:
 - O coeficiente de correlação entre os valores experimentais e os valores calculados pelo modelo, do poder de separação δU , deve representar uma boa correspondência linear, ou seja, um valor próximo de 1. O valor obtido igual a 0,9627 exprime essa tendência, como é mostrado pela Figura 5.7.
 - O coeficiente de determinação ou R-quadrado, que é uma medida da fração da variância total explicada satisfatoriamente pelo modelo, resultou um valor igual a 0,9268 (R-quadrado ajustado igual a 0,9266), ou seja, 92,68% da variância total dos dados experimentais é explicada pelo modelo, sendo o restante atribuído à variabilidade dos dados.

- Um tópico muito importante a cerca dos dados é que os erros no modelo proposto sejam randomicamente distribuídos, ou melhor, que sejam independentes e normalmente distribuídos, caso contrário, as conclusões retiradas a partir dos dados podem ser irreais. Desse modo, foi inicialmente feito um histograma dos resíduos, através da Figura 5.2, que mostra uma boa aproximação com uma distribuição normal. Obtido o desvio-padrão da distribuição dos resíduos, calculou-se em 95,15%, a porcentagem de valores compreendidos entre a sua média e mais ou menos dois desvios-padrão, contribuindo favoravelmente, para assumi-los como normalmente distribuídos.
- Dentro da análise dos resíduos, um dos parâmetros mais úteis é a correlação serial, que indica se os resíduos tendem a se distribuir em grupos de valores positivos e negativos, ou tendem a se espalhar randomicamente ao redor de zero. Visualmente, através da análise da Figura 5.14, verifica-se a segunda hipótese, onde se têm os resíduos distribuídos aleatoriamente em torno do zero.
- O outro parâmetro muito importante dentro da análise de resíduos é a heteroscedasticidade, que é uma medida da correlação entre a magnitude dos resíduos e a magnitude dos valores experimentais sendo ajustados. Apesar da equação de regressão representada pelo MODELO 5 ter apresentado uma boa qualidade de ajuste ($\chi^2_{red} = 0,94$), a análise de resíduos, através do teste de Spearman, tópico 5.3.2, mostrou que a variância desses resíduos apresentou uma leve tendência em relação a três variáveis explicativas do modelo. Daí, a decisão de se ter realizado uma transformação nos dados dependentes da regressão, conforme tópico 5.4, resultando no MODELO 6.
- A verificação da correção da heteroscedasticidade através do teste de Spearman aplicado nos resíduos do MODELO 6, não permitiu, ao contrário do teste de Park, a rejeição da hipótese de heteroscedasticidade. Entretanto, é possível que, devido ao teste de Spearman ter sido

construído para pequenas amostras; quando aplicado a grandes amostras, seu resultado seja muito rigoroso. Foi então adotado o MODELO 5, como o modelo a ter os resíduos analisados.

- A questão importante formulada no item 5.1, a respeito do modelo representar adequadamente os dados experimentais, pode ser respondida através do procedimento efetuado para a visualização gráfica da curva teórica do δU confrontando-a com os valores experimentais do poder de separação, em função dos valores experimentais de θ , P_p e F , individualmente. Com isso, partindo da equação do MODELO 5 e substituindo-se a pressão P_p e o fluxo F com valores de processo, a expressão resultante do δU em função do corte θ , permitiu construir a Figura 5.15, que mostra claramente que o poder de separação da centrífuga passa por um máximo quando o corte θ apresenta valores próximos de 0,5, condição próxima do corte ideal para operação de centrífuga em cascata. Portanto, podemos considerar que os dados experimentais do δU são bem representados pelo MODELO 5, uma vez que as Figuras 5.16 e 5.17 também mostram que a curva teórica é "atraída" pelos pontos experimentais, situando-se sempre entre os pontos experimentais selecionados.
- Através da Figura 5.16, podemos verificar que o δU passa por um máximo, apesar da relação de proporcionalidade com F . Esse máximo é explicado pela variação decrescente do fator de enriquecimento com o fluxo de alimentação e contribui para a definição do poder de separação δU , que faz um balanço justamente entre a quantidade e qualidade da separação isotópica efetuada pela ultracentrífuga.
- A pressão P_p não influencia o poder de separação da ultracentrífuga, quando se trabalha com os valores ótimos do corte θ e do fluxo de alimentação F . Tal conclusão pode ser verificada pela Figura 5.17. No entanto, para valores baixos de F , através da Figura 5.20, nota-se um aumento do δU com a diminuição da pressão P_p .

- O MODELO 5 permitiu a determinação de estimativas de valores ótimos das variáveis de controle, através das superfícies de resposta, explicitadas graficamente nas Figuras 5.18, 5.19 e 5.20 e, numericamente na Tabela 5.10. Esses valores ótimos permitiram a predição, através do MODELO 5, do máximo valor do poder de separação δU , como indicado na Tabela 5.10.
- Uma das respostas que se deve ter é quão precisas são as predições feitas pelo modelo. Portanto, através do desenvolvimento da Eq.(5.1), obtém-se uma expressão que fornece a incerteza de um valor interpolado, levando em consideração as variâncias e covariâncias dos coeficientes da equação de ajuste e as variáveis de controle. Desse modo, ao substituirmos os valores de θ , P_p e F , provenientes da Tabela 5.10, obtivemos uma incerteza para o poder de separação δU máximo igual a $\delta U = (1,186 \pm 0,085)u.a.$, representando uma incerteza relativa de 7,17%. Refazendo o ajuste com o mesmo formalismo e **não** levando em consideração os termos de correlação entre as incertezas experimentais de R_p , R_w , P e W , o modelo resultante forneceu, para os mesmos valores de θ , P_p e F , o resultado $\delta U = (1,067 \pm 0,147)u.a.$, com uma incerteza de 13,78%, demonstrando a importância de se dispor da informação completa da matriz de covariância dos dados de entrada, para redução das incertezas na predição do modelo.
- O prosseguimento deste trabalho abre a possibilidade de análises mais aprofundadas na consideração de outras variáveis independentes e respectivas incertezas, importantes no desenvolvimento de novos protótipos de centrífugas.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1- UNITED STATES. Department of Energy. National Security Program Office. **Safeguards Training Course for Inspectors**. Buenos Aires, Argentina, Jun.-Jul., 1993.
- 2- MIGLIAVACCA, S.C.P. **Modelagem do comportamento separativo de ultracentrifugas via rede neural**. São Paulo, SP, 1999. Tese (Doutorado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
- 3- JORDAN, I. **Separação dos isótopos de urânio pelo processo da centrifugação em fase gasosa**. Informação IPEN 3 - IPEN-Inf-3, 1980.
- 4- COHEN, K. **The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large Scale Production of U^{235}** . New York, NY: McGraw-Hill, 1951.
- 5- BENEDICT, M.; PIGFORD, T.H.; LEVI, H.W. **Nuclear chemical engineering**. 2.ed. New York, McGraw-Hill, 1981.
- 6- OLANDER, D.R. **The theory of Uranium Enrichment by the Gas Centrifuge**. Nucl.En., Vol.8, pp 1-33, 1981.
- 7- ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **Guia Para a Expressão da Incerteza da Medição**. Rio de Janeiro: ABNT, INMETRO, SBM, 1998.
- 8- SMITH, D.L. **Probability, Statistics, and Data Uncertainties in Nuclear Science and Technology**. American Nuclear Society, Inc. Illinois, 1991.
- 9- SMITH, D.L. **Covariance Matrices and Applications to the Field of Nuclear Data**. Data and Measurements Series. Argonne National Laboratory. Nov. 1981. (ANL/NDM-62).
- 10- SMITH, D.L.; GERALDO, L.P. **Some thoughts on positive definiteness in the consideration of nuclear data covariance matrices**. Data and Measurements Series. Argonne National Laboratory. Jan. 1988. (ANL/NDM-104).
- 11- COWAN, G. **Statistical data analysis**. New York, N.Y.: Oxford University Press, 1998.
- 12- VANIN, V.R.; GOUFFON, P. **Tópicos avançados em tratamento estatístico de dados em física experimental**. Laboratório do Acelerador Linear - Instituto de Física da Universidade de São Paulo, 1996.
- 13- BEVINGTON, P.R.; ROBINSON, D.K. **Data reduction and error analysis for the physical sciences**. 2.ed. [S.l.]: McGraw-Hill, 1992.

- 14- SMITH, D.L. ***A least-squares computational "tool kit"*** .Nuclear Data and Measurements Series. Argonne National Laboratory. Apr. 1993. (ANL/NDM-128).
- 15- KAHANER,D.;MOLER,C.;NASH,S. ***Numerical Methods and Software*** New Jersey, NJ. Prentice-Hall, 1989.
- 16- GUJARATI, D. N. ***Econometria Básica***. São Paulo: Pearson Education do Brasil, 2000.
- 17- WEN,Z.; CHEN,F. Application of Statistically-Based Experimental Designs for the Optimization of Eicosapentanoic Acid Production by the Diatom *Nitzschia laevis*. ***Biotech. and Bioeng.***, v. 75,n. 2,p. 159-169, 2001.
- 18- STATSOFT Statistica for WINDOWS [Computer program manual]. Tulsa, OK: StatSoft, Inc., 1998.
- 19- MICROMATH Scientist for experimental data fitting, version 2.0, Salt Lake City, UT: Micromath Scientific Software, 1995.
- 20- VASCONCELLOS,M.T..L.;PORTELA,M.C. Índice de Massa Corporal e sua relação com variáveis nutricionais e sócio-econômicas: um exemplo de uso de regressão linear para um grupo de adultos brasileiros. ***Cad. Saúde Pública***, Rio de Janeiro, nov.-dez. 2001, vol. 17, n.6, p.1425-1436.
- 21- BOX, G.E.P.; HUNTER, W.G.; HUNTER, J.S. ***Statistics for Experimenters***. [S.I.]: John wiley & Sons, 1978.
- 22- ANDRADE, M.C.V. ***Aplicação de redes neurais para a detecção de erros grosseiros em dados de processo em separação de isótopos de urânio por ultracentrifugação***. São Paulo, SP, 2004. Dissertação(Mestrado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
- 23- TAYLOR, J.K. ***Statistical technique for data analysis***. [S.I.]: Lewis Publishers, 1990.
- 24- FEIJÓ,M.C.C.;PORTELA,M.C. Variação no custo de internações hospitalares por lesões: os casos dos traumatismos cranianos e acidentes por armas de fogo . ***Cad. Saúde Pública***, Rio de Janeiro, mai.-jun. 2001, vol. 17, n.3, p.627-637.
- 25- IMSL, Inc. – IMSL MATH/LIBRARY – User's Manual, Version 1.1, IMSL, Houston, 1989.
- 26- COMPAQ Visual Fortran Professional Edition 6.6.0 [S.I.]: Compaq, 2000.

8 APÊNDICES

8.1 APÊNDICE A – Obtenção da forma de equação da função de valor $V(x)$

As equações (3.11), (3.12) e (3.13) determinam os balanços, de material da mistura isotópica, do isótopo desejado e dos fluxos de valor, especificando assim, o tipo do elemento de separação. Agora, a obtenção da expressão do δU em termos dos fluxos F , P e W e das composições z , y e x , exige o conhecimento do tipo de operação do elemento considerado. Nesse sentido será considerado o caso infinitesimal, caracterizado por pequenos valores do coeficiente de separação $\varepsilon = \alpha - 1 \ll 1$. Neste caso, as composições isotópicas y e z não diferem muito de x , e podemos expandir em série de Taylor as funções $V(y)$ e $V(z)$ em torno de x e reter apenas os primeiros termos, sem cometer erros apreciáveis, ou seja

$$V(y) = V(x) + (y - x)V'(x) + (1/2)(y - x)^2 V''(x) + \dots \quad (\text{A.1})$$

$$V(z) = V(x) + (z - x)V'(x) + (1/2)(z - x)^2 V''(x) + \dots \quad (\text{A.2})$$

Como $\theta = (z - x)/(y - x)$, então $(z - x) = \theta(y - x)$, que substituído em (A.2) dá

$$V(z) = V(x) + \theta(y - x)V'(x) + (1/2)(y - x)^2 \theta^2 V''(x) + \dots \quad (\text{A.3})$$

Substituindo $V(y)$ e $V(z)$ na expressão do balanço dos fluxos de valor, Eq.(3.13), vem :

$$\begin{aligned} \delta U = & \theta F \left[V(x) + (y - x)V'(x) + \frac{1}{2}(y - x)^2 V''(x) \right] + (1 - \theta)FV(x) - \\ & - F \left[V(x) + \theta(y - x)V'(x) + \frac{1}{2}(y - x)^2 \theta^2 V''(x) \right] \end{aligned}$$

que fornece

$$\delta U = \frac{F}{2} \theta (1 - \theta) (y - x)^2 V''(x) \quad (\text{A.5})$$

Mas no caso infinitesimal, a diferença de concentração $(y - x)$ pode ser substituída pela equação de equilíbrio aproximada, ou seja,

$$(y - x) = \varepsilon x(1 - x) \quad (\text{A.6})$$

resultando

$$\delta U = \frac{F}{2} \theta (1 - \theta) [\varepsilon^2 x^2 (1 - x)^2] V''(x) \quad (\text{A.7})$$

Considerando agora a propriedade da função de valor, segundo a qual o aumento do fluxo de valor δU é independente da concentração isotópica, segue-se que, para essa propriedade ser obedecida, é necessário que o produto dos termos em x do segundo membro da Eq.(A.7) seja constante. Então, fazendo por acordo e conveniência essa constante igual a 1, estaremos especificando completamente a função de valor $V(x)$ em termos de sua 2ª derivada como segue:

$$x^2 (1 - x)^2 \frac{d^2 V(x)}{dx^2} = 1 \quad (\text{A.8})$$

ou

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = \frac{1}{[x(1 - x)]^2} \quad (\text{A.9})$$

Para obtermos a primeira derivada da função de valor, basta efetuar a primeira integração da Eq.(A.9), antes porém, é conveniente decompor o denominador do termo à direita:

$$\begin{aligned} \frac{1}{x^2 (1 - x)^2} &= \left(\frac{1}{x(1 - x)} \right)^2 = \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{1 - x} \right)^2 = \\ &= \left(\frac{1}{x} \right)^2 + 2 \left(\frac{1}{x} \right) \left(\frac{1}{1 - x} \right) + \left(\frac{1}{1 - x} \right)^2 = \frac{2}{x} + \frac{2}{(1 - x)} + \frac{1}{x^2} + \frac{1}{(1 - x)^2} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

daí, podemos escrever na forma

$$\int \frac{d^2 V(x)}{dx^2} dx = \int \left(\frac{2}{x} + \frac{2}{(1 - x)} + \frac{1}{x^2} + \frac{1}{(1 - x)^2} \right) dx \quad (\text{A.11})$$

$$V'(x) = 2 \ln \frac{x}{1-x} - \frac{(1-x) - x}{x(1-x)} + c_1 \quad (\text{A.12})$$

Se integrarmos (A.12) novamente, teremos a função de valor $V(x)$:

$$V(x) = \int \left(2 \ln \frac{x}{1-x} \right) dx - \int \left(\frac{(1-x) - x}{x(1-x)} + c_1 \right) dx \quad (\text{A.13})$$

que conduz a:

$$V(x) = (2x - 1) \ln \frac{x}{1-x} - 2 + c_1 x + c_2 \quad (\text{A.14})$$

onde c_1 e c_2 são duas constantes de integração a serem determinadas. As constantes de integração podem ser obtidas mediante a escolha de duas condições de contorno, a qual pode ser feita de diversas maneiras, uma vez que a função de valor é uma função de potencial, só tendo sentido físico diferenças de $V(x)$ e não seus valores absolutos. Uma das constantes de integração advém do fato de que a produção de valor de um só isótopo, tanto o desejado como o outro, é muito mais difícil que a produção de dois isótopos ou mais do mesmo elemento, porque o trabalho de separação envolvido é muito grande. Desse modo, é de se esperar que para uma mistura isotópica binária, o trabalho requerido para a produção de valor dos dois isótopos é pequeno e portanto a função de valor será pequena, digamos, também quando a mistura for equimolar, a saber $x = 0,5$. Daí, é de se aceitar que quando a mistura isotópica se apresenta praticamente pura em um ou outro elemento, a função de valor assume valores muito grandes. Assim sendo, para uma mistura binária, na qual ambos os isótopos possuem a mesma fração molar ou a mesma fração em peso ($x = 0,5$), a função de valor e a sua derivada são nulas, isto é:

$$V(0,5) = 0 \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{dV(0,5)}{dx} = 0 \quad (\text{A.16})$$

que, após substituição nas equações (A.12) e (A.14), resulta $c_1 = 0$ e $c_2 = 2$. A expressão para a função de valor fica então:

$$V(x) = (2x - 1) \ln \frac{x}{1-x} \quad (\text{A.17})$$

A expressão da função de valor deduzida acima, depende apenas das condições de contorno usadas, portanto, se aplica tanto no caso infinitesimal como para qualquer valor de α . Por esse motivo, em qualquer caso, o poder de separação δU do elemento de separação ou do estágio, pode ser expresso pela equação de balanço dos fluxos de valor e pela equação da função de valor segundo a Eq.(3.16).

8.2 APÊNDICE B – Valores codificados das medidas das variáveis experimentais

TABELA B.1 – Valores codificados das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^4$)

exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw
1	9.81	11.98	8.96	41	9.81	13.51	9.05	109	10.12	11.12	8.29
2	9.81	11.62	9.10	42	9.81	13.51	9.03	110	10.06	11.10	8.59
3	9.81	11.64	9.10	43	9.81	13.51	9.03	111	10.06	11.07	8.52
4	9.81	11.62	9.14	44	9.83	12.88	9.30	112	10.06	11.04	8.55
5	9.80	11.78	9.05	45	9.83	12.92	9.29	113	10.04	11.27	8.37
6	9.80	11.78	9.03	46	9.83	12.88	9.29	114	10.04	11.25	8.33
7	9.80	11.73	9.06	47	9.96	12.38	9.49	115	10.04	11.22	8.35
8	9.81	11.88	8.93	48	9.96	12.40	9.46	116	10.06	10.99	8.72
9	9.81	11.88	8.93	49	9.96	12.40	9.52	117	10.06	11.04	8.71
10	9.81	11.87	8.93	57	10.09	12.06	9.13	118	10.06	11.01	8.73
11	9.80	11.99	8.88	63	9.97	12.27	8.56	119	10.06	11.02	7.58
12	9.80	11.99	8.88	65	9.97	11.96	8.79	120	10.06	11.01	7.53
13	9.80	11.98	8.87	71	10.07	11.48	9.20	121	10.06	10.99	7.55
14	9.82	12.13	8.73	72	10.07	11.50	9.17	122	10.05	10.96	8.05
15	9.82	12.11	8.73	73	10.07	11.52	9.18	123	10.05	10.94	8.03
16	9.82	12.12	8.73	74	10.05	12.04	8.10	124	10.05	10.91	8.02
17	9.81	12.30	8.58	75	10.05	11.97	8.00	125	10.04	10.92	8.35
18	9.81	12.30	8.58	77	10.14	11.58	8.35	126	10.04	10.91	8.32
19	9.81	12.30	8.58	78	10.14	11.57	8.31	127	10.04	10.89	8.34
20	9.84	11.61	9.12	80	10.03	11.49	8.71	128	10.05	10.86	8.52
21	9.84	11.58	9.12	81	10.03	11.46	8.65	130	10.05	10.76	8.48
22	9.84	11.60	9.09	82	10.03	11.48	8.66	132	10.04	14.49	9.51
23	9.84	11.88	8.95	84	10.11	11.26	8.84	133	10.04	14.48	9.50
24	9.84	11.86	8.95	85	10.11	11.27	8.81	134	10.04	14.25	9.45
25	9.84	11.87	8.95	86	10.11	11.61	8.37	135	10.04	14.22	9.48
26	9.83	12.00	8.84	87	10.11	11.61	8.38	136	10.04	14.22	9.45
27	9.83	12.00	8.85	88	10.11	11.64	8.37	137	10.08	14.49	9.48
28	9.83	11.98	8.85	89	10.10	13.21	8.58	138	10.08	14.54	9.45
29	9.83	14.46	9.36	90	10.10	13.19	8.59	139	10.08	14.54	9.48
30	9.83	14.47	9.35	91	10.10	13.16	8.56	140	10.09	13.97	9.50
31	9.83	14.46	9.35	92	10.07	12.61	8.92	141	10.09	13.88	9.47
32	9.83	14.82	9.26	94	10.07	12.57	8.93	142	10.09	13.90	9.51
33	9.83	14.80	9.29	95	10.07	12.19	9.08	143	10.00	13.59	9.59
34	9.83	14.79	9.29	96	10.07	12.19	9.09	144	10.00	13.59	9.60
35	9.83	13.97	9.49	97	10.07	12.23	9.10	145	10.00	13.56	9.58
36	9.83	13.95	9.49	101	10.07	11.89	9.32	146	10.03	13.43	9.64
37	9.83	13.96	9.44	103	10.07	11.93	9.38	147	10.03	13.36	9.68
38	9.79	13.25	9.63	104	10.08	11.30	8.02	148	10.03	13.34	9.63
39	9.79	13.25	9.62	105	10.08	11.33	8.04	149	10.02	13.09	9.71
40	9.79	13.22	9.62	106	10.08	11.30	8.04	150	10.02	13.12	9.78

TABELA B.1 – Valores codificados das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^4$)(cont.)

exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw
151	10.02	13.13	9.67	235	10.07	11.81	8.72	308	10.00	11.72	8.37
152	10.06	13.55	8.98	237	9.98	11.80	8.89	310	10.00	11.73	8.37
153	10.06	13.60	9.05	238	9.98	11.79	8.91	314	10.02	11.06	8.71
154	10.06	13.41	9.05	239	9.98	11.74	8.98	315	10.02	11.06	8.70
155	10.05	13.12	9.08	240	9.98	11.76	8.98	316	10.02	11.05	8.71
156	10.05	13.18	9.06	241	9.98	11.75	8.98	317	9.99	11.08	8.79
157	10.05	13.15	9.06	242	9.98	11.64	9.04	318	9.99	11.06	8.78
158	10.05	13.01	9.13	243	9.98	11.63	9.04	319	9.99	11.06	8.78
159	10.05	13.04	9.15	244	9.98	11.64	9.03	329	10.01	10.94	8.28
160	10.05	13.08	9.14	245	9.97	11.55	9.20	330	10.01	10.95	8.28
161	10.05	12.86	9.25	246	9.97	11.48	9.15	331	10.01	10.95	8.28
162	10.05	12.86	9.25	247	9.97	11.53	9.17	332	10.00	10.92	8.36
164	10.04	12.57	9.30	248	9.96	11.99	8.53	333	10.00	10.91	8.39
165	10.04	12.59	9.32	249	9.96	11.99	8.63	334	10.00	10.91	8.40
166	10.04	12.59	9.33	250	9.96	11.96	8.63	335	10.00	10.89	8.49
168	10.05	12.56	9.44	251	9.96	12.08	8.45	336	10.00	10.90	8.48
169	10.05	12.60	9.46	252	9.96	12.06	8.44	338	10.00	10.86	8.58
170	10.04	12.39	9.55	253	9.96	12.07	8.45	339	10.00	10.85	8.58
171	10.04	12.37	9.58	258	9.98	11.66	8.31	340	10.00	10.84	8.57
172	10.04	12.36	9.58	260	9.98	11.52	8.40	344	10.00	13.69	9.53
200	10.05	11.80	9.49	263	9.97	11.47	8.52	345	10.00	13.56	9.55
201	10.05	11.76	9.48	264	9.97	11.46	8.52	346	10.00	13.58	9.54
202	10.05	11.81	9.50	265	9.97	11.46	8.53	347	9.99	13.36	9.59
209	9.96	12.13	8.39	266	9.90	11.49	8.69	349	9.99	13.20	9.39
210	9.96	12.16	8.34	267	9.90	11.49	8.68	353	10.02	11.86	8.18
211	9.96	12.14	8.33	268	10.00	11.37	8.58	354	10.02	11.84	8.18
215	10.01	12.58	8.75	269	9.98	11.35	8.71	355	10.02	11.89	8.19
216	10.01	12.58	8.73	270	9.98	11.36	8.73	359	10.02	11.43	7.98
217	10.01	12.56	8.73	271	9.98	11.35	8.73	360	10.02	11.44	7.97
218	9.97	11.95	9.30	272	9.97	11.28	8.82	361	10.02	11.40	8.00
219	9.97	11.93	9.31	273	9.97	11.32	8.82	363	9.91	11.36	8.17
220	9.97	11.94	9.32	274	9.97	11.33	8.81	364	9.91	11.36	8.16
221	9.98	12.88	8.68	275	9.99	11.24	8.88	365	9.91	11.32	8.13
222	9.98	12.90	8.63	276	9.99	11.24	8.89	366	9.90	11.22	8.30
223	9.98	12.91	8.67	277	9.99	11.24	8.89	367	9.90	11.22	8.29
224	9.97	11.88	8.30	285	10.00	11.18	8.15	368	9.90	11.22	8.28
225	9.97	11.84	8.31	287	10.00	11.12	8.33	369	9.90	11.13	8.51
226	9.97	11.86	8.29	288	10.00	11.12	8.34	371	9.90	11.11	8.50
233	10.07	11.83	8.74	289	10.00	11.13	8.33	378	9.92	10.91	7.92
234	10.07	11.83	8.73	294	10.01	11.04	8.52	379	9.92	10.95	7.91

TABELA B.1 – Valores codificados das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^4$)(cont.)

exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw
380	9.92	10.91	7.93	456	9.91	12.47	8.84	510	9.89	10.85	8.26
384	9.90	11.11	8.60	457	9.91	12.10	8.47	511	9.89	10.83	8.25
385	9.90	11.14	8.55	463	9.91	11.77	8.90	512	9.93	10.77	8.12
386	9.90	11.11	8.59	464	9.91	11.74	8.88	513	9.93	10.77	8.40
387	9.90	10.81	8.45	465	9.91	11.75	8.89	514	9.93	10.78	8.42
388	9.90	10.83	8.42	469	9.88	11.63	8.36	517	9.92	10.75	8.56
389	9.90	10.81	8.42	471	9.88	11.59	8.37	518	9.88	13.61	9.59
390	9.91	10.77	8.56	472	9.89	12.13	8.47	519	9.88	13.63	9.56
391	9.91	10.76	8.56	473	9.89	12.10	8.47	520	9.88	13.62	9.59
393	9.91	10.90	8.06	474	9.89	12.10	8.48	521	9.89	13.36	9.62
394	9.91	10.90	8.09	475	9.89	11.64	9.07	522	9.89	13.36	9.59
396	9.90	12.70	9.81	476	9.89	11.66	9.06	523	9.89	13.37	9.59
397	9.90	12.73	9.81	477	9.89	11.63	9.06	524	9.90	13.11	9.66
398	9.90	12.74	9.81	478	9.90	11.54	8.34	525	9.90	13.15	9.70
405	9.88	12.93	9.17	479	9.90	11.54	8.36	526	9.90	13.18	9.68
406	9.88	12.94	9.16	480	9.90	11.59	8.34	527	9.90	12.87	9.74
407	9.88	12.93	9.16	481	9.90	11.43	8.61	528	9.90	12.84	9.71
410	9.90	10.99	8.11	482	9.90	11.47	8.61	529	9.90	12.85	9.74
411	9.90	10.99	8.12	483	9.90	11.47	8.61	530	9.89	12.91	9.24
412	9.90	10.97	8.11	484	9.90	11.37	8.77	531	9.89	12.91	9.22
413	9.92	13.39	9.68	485	9.90	11.37	8.78	532	9.89	12.91	9.24
414	9.92	13.65	9.65	486	9.90	11.36	8.79	533	9.89	12.73	9.36
417	9.91	13.19	9.73	487	9.90	11.26	8.94	534	9.89	12.73	9.36
429	9.89	12.44	9.09	488	9.90	11.25	8.94	535	9.89	12.73	9.35
430	9.89	12.41	9.08	489	9.90	11.26	8.93	536	9.90	12.47	9.46
431	9.89	12.18	9.23	493	9.90	11.25	8.01	538	9.90	12.42	9.48
432	9.89	12.18	9.25	494	9.90	11.24	7.99	539	9.89	12.21	9.60
433	9.89	12.19	9.21	496	9.90	11.26	8.03	540	9.89	12.21	9.60
434	9.89	11.95	9.38	497	9.88	11.19	8.32	541	9.89	12.20	9.59
435	9.89	11.94	9.38	498	9.88	11.16	8.32	542	9.90	12.53	8.94
436	9.89	11.95	9.39	499	9.88	11.24	8.32	543	9.90	12.53	8.93
444	9.89	13.29	9.14	500	9.89	11.12	8.50	544	9.90	12.53	8.93
445	9.89	13.30	9.13	501	9.89	11.10	8.52	545	9.90	12.39	9.08
447	9.89	12.70	9.40	502	9.89	11.11	8.52	546	9.90	12.39	9.07
448	9.89	12.72	9.40	503	9.89	11.06	8.69	547	9.90	12.38	9.06
449	9.89	12.71	9.37	504	9.89	11.05	8.69	548	9.89	12.18	9.17
451	9.87	12.39	9.54	505	9.89	11.03	8.69	549	9.89	12.18	9.17
452	9.87	12.38	9.53	506	9.89	10.92	8.01	550	9.89	12.20	9.17
453	9.87	12.38	9.53	508	9.89	10.89	8.00	551	9.89	11.98	9.31
455	9.91	12.49	8.82	509	9.89	10.83	8.25	552	9.89	11.96	9.31

TABELA B.1 – Valores codificados das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^4$)(cont.)

exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw	exp	Rf	Rp	Rw
553	9.89	11.96	9.32	593	9.89	11.02	8.03	645	10.24	11.18	8.38
554	9.89	12.03	8.76	594	9.89	11.00	8.01	646	10.24	11.21	8.40
555	9.89	12.02	8.75	595	9.89	11.00	8.02	674	10.08	11.49	7.77
556	9.89	12.02	8.75	596	9.88	10.94	8.26	675	10.08	11.53	7.83
557	9.90	11.85	8.90	597	9.88	10.88	8.29	676	10.08	11.47	7.79
558	9.90	11.84	8.89	598	9.88	10.94	8.27	678	10.06	11.12	8.47
559	9.90	11.84	8.89	599	9.89	10.87	8.43	679	10.06	11.10	8.47
560	9.89	11.73	9.03	600	9.89	10.88	8.42	680	10.06	11.10	8.47
561	9.89	11.71	9.04	601	9.89	10.85	8.41	681	10.06	11.31	8.21
562	9.89	11.71	9.04	602	9.88	10.84	8.57	682	10.06	11.27	8.26
563	9.89	11.56	9.15	603	9.88	10.80	8.58	683	10.06	11.32	8.24
564	9.89	11.57	9.16	604	9.88	10.82	8.58	684	10.08	11.25	8.98
565	9.89	11.57	9.15	605	9.95	14.53	9.45	685	10.08	11.21	8.95
566	9.90	11.68	8.44	606	9.95	14.50	9.43	686	10.08	11.21	8.99
567	9.90	11.71	8.46	607	9.95	14.51	9.44	687	10.02	11.42	8.87
568	9.90	11.71	8.44	608	9.93	14.29	8.93	688	10.02	11.41	8.79
569	9.90	11.57	8.59	611	9.92	13.11	9.30	693	10.08	12.51	8.13
570	9.90	11.59	8.60	612	9.92	13.12	9.32	694	10.08	12.44	8.11
571	9.90	11.56	8.61	613	9.92	13.15	9.29	695	10.08	12.49	8.09
572	9.89	11.45	8.77	617	9.93	12.90	8.73	697	9.94	10.76	8.56
573	9.89	11.45	8.77	618	9.93	12.89	8.71				
574	9.89	11.45	8.77	619	9.93	12.91	8.70				
575	9.89	11.35	8.92	620	9.93	12.37	9.07				
576	9.89	11.34	8.92	621	9.93	12.33	9.06				
577	9.89	11.33	8.92	622	9.93	12.31	9.05				
578	9.90	11.24	8.30	623	9.91	14.16	8.87				
579	9.90	11.26	8.32	624	9.91	14.18	8.81				
580	9.90	11.23	8.32	625	9.91	14.25	8.84				
581	9.90	11.16	8.50	626	9.89	11.95	9.37				
582	9.90	11.17	8.49	627	9.89	11.97	9.36				
583	9.90	11.15	8.53	628	9.89	11.95	9.34				
584	9.88	11.21	8.66	635	10.24	11.30	8.76				
585	9.88	11.12	8.67	636	10.24	11.25	8.73				
586	9.88	11.13	8.66	637	10.24	11.33	8.75				
587	9.89	11.05	8.78	638	10.24	11.14	8.95				
588	9.89	11.05	8.78	639	10.24	11.18	9.00				
589	9.89	11.06	8.78	640	10.24	11.12	8.96				
590	9.90	11.08	8.65	642	10.24	11.36	8.07				
591	9.90	11.09	8.65	643	10.24	11.35	8.08				
592	9.90	11.09	8.65	644	10.24	11.15	8.36				

TABELA B.2 – Valores codificados das medidas dos fluxos de produto e rejeito

exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W
1	67,4780	75,8531	41	23,3764	54,9615	109	123,106	54,4641	151	15,3579	37,0545
2	98,0485	102,216	42	22,8752	54,4641	110	123,106	54,4641	152	15,3579	37,0545
3	97,5473	102,216	43	37,9099	89,2834	111	123,106	54,4641	153	15,3579	37,0545
4	98,0485	102,216	44	37,9099	89,2834	112	88,0254	39,5416	154	22,8752	54,4641
5	86,0208	90,2782	45	37,9099	89,2834	113	88,0254	39,5416	155	22,8752	54,4641
6	85,0184	91,2731	46	52,4434	123,605	114	88,0254	39,5416	156	22,8752	54,4641
7	86,0208	90,2782	47	52,4434	123,605	115	158,187	69,3867	157	30,3925	71,8738
8	72,9907	78,3402	48	53,4457	124,102	116	158,187	69,3867	158	30,3925	71,8738
9	72,9907	78,0915	49	60,4618	91,7705	117	158,187	69,3867	159	30,3925	71,8738
10	72,9907	78,0915	57	37,9099	39,5416	118	40,4156	12,1835	160	37,9099	89,2834
11	62,9676	68,1431	63	62,4665	64,9099	119	40,4156	12,1835	161	37,9099	89,2834
12	62,9676	66,8996	65	113,083	114,154	120	40,4156	12,1835	162	45,4272	106,693
13	62,9676	66,8996	71	113,083	114,154	121	80,5081	22,1319	164	45,4272	106,693
14	49,9376	55,7077	72	113,083	114,154	122	80,5081	22,1319	165	45,4272	106,693
15	50,9399	55,7077	73	30,3925	22,1319	123	80,5081	22,1319	166	52,9445	124,102
16	50,4387	55,7077	74	30,3925	22,1319	124	120,600	32,0803	168	52,9445	124,102
17	34,9029	39,5416	75	60,4618	42,0287	125	120,600	32,0803	169	60,4618	141,512
18	34,9029	39,5416	77	60,4618	42,0287	126	120,600	32,0803	170	60,4618	141,512
19	34,9029	39,5416	78	90,5312	61,9254	127	160,692	42,0287	171	60,4618	141,512
20	96,5450	101,718	80	90,5312	61,9254	128	160,692	42,0287	172	90,5312	136,538
21	96,0439	101,718	81	90,5312	61,9254	130	10,3463	42,0287	200	90,5312	136,538
22	96,0439	101,718	82	120,600	81,8221	132	10,3463	42,0287	201	90,5312	136,538
23	73,9930	79,3350	84	120,600	81,8221	133	15,3579	61,9254	202	25,3810	27,1061
24	73,4919	78,8376	85	60,4618	42,0287	134	15,3579	61,9254	209	25,3810	27,1061
25	73,4919	79,3350	86	60,4618	42,0287	135	15,3579	61,9254	210	25,3810	27,1061
26	60,4618	66,8996	87	60,4618	42,0287	136	10,3463	42,0287	211	30,3925	47,0028
27	60,4618	66,8996	88	20,3694	32,0803	137	10,3463	42,0287	215	30,3925	47,0028
28	59,9607	66,8996	89	20,3694	32,0803	138	10,3463	42,0287	216	30,3925	47,0028
29	15,8591	61,9254	90	20,3694	32,0803	139	20,3694	81,8221	217	80,5081	121,615
30	15,8591	61,9254	91	40,4156	62,9202	140	20,3694	81,8221	218	80,5081	121,615
31	15,8591	61,9254	92	40,4156	61,9254	141	20,3694	81,8221	219	80,5081	121,615
32	10,3463	42,0287	94	60,4618	91,7705	142	25,3810	101,718	220	20,3694	32,0803
33	10,3463	42,0287	95	60,4618	91,7705	143	25,3810	101,718	221	20,3694	32,0803
34	10,3463	42,0287	96	60,4618	91,7705	144	25,3810	101,718	222	20,3694	32,0803
35	21,3718	79,3350	97	80,5081	121,615	145	30,3925	121,615	223	25,3810	27,1061
36	20,8706	79,8325	101	80,5081	121,615	146	30,3925	121,615	224	25,3810	27,1061
37	21,3718	81,3247	103	52,9445	24,6190	147	30,3925	121,615	225	25,3810	27,1061
38	30,8937	121,615	104	52,9445	24,6190	148	35,4041	141,512	226	62,9676	64,4125
39	30,8937	121,615	105	52,9445	24,6190	149	35,4041	141,512	233	62,9676	64,4125
40	30,8937	121,615	106	88,0254	39,5416	150	35,4041	141,512	234	62,9676	64,4125

TABELA B.2 – Valores codificados das medidas dos fluxos de produto e rejeito
(cont.)

exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W
235	75,4965	76,8479	308	45,4272	32,0803	380	123,106	54,4641	456	25,3810	27,1061
237	75,4965	76,8479	310	140,646	61,9254	384	123,106	54,4641	457	75,4965	76,8479
238	88,0254	89,2834	314	140,646	61,9254	385	123,106	54,4641	463	75,4965	76,8479
239	88,0254	89,2834	315	140,646	61,9254	386	140,646	37,0545	464	75,4965	76,8479
240	88,0254	89,2834	316	158,187	69,3867	387	140,646	37,0545	465	45,4272	32,0803
241	100,554	101,718	317	158,187	69,3867	388	140,646	37,0545	469	45,4272	32,0803
242	100,554	101,718	318	158,187	69,3867	389	180,739	47,0028	471	25,3810	27,1061
243	100,554	101,718	319	100,554	27,1061	390	180,739	47,0028	472	25,3810	27,1061
244	113,083	114,154	329	100,554	27,1061	391	80,5081	22,1319	473	25,3810	27,1061
245	113,083	114,154	330	100,554	27,1061	393	80,5081	22,1319	474	100,554	101,718
246	113,083	114,154	331	120,600	32,0803	394	45,4272	181,305	475	100,554	101,718
247	50,4387	51,9770	332	120,600	32,0803	396	45,4272	181,305	476	100,554	101,718
248	50,4387	51,9770	333	120,600	32,0803	397	45,4272	181,305	477	45,4272	32,0803
249	50,4387	51,9770	334	140,646	37,0545	398	30,3925	71,8738	478	45,4272	32,0803
250	37,9099	39,5416	335	140,646	37,0545	405	30,3925	71,8738	479	45,4272	32,0803
251	37,9099	39,5416	336	160,692	42,0287	406	30,3925	71,8738	480	75,4965	51,9770
252	37,9099	39,5416	338	160,692	42,0287	407	80,5081	22,1319	481	75,4965	51,9770
253	45,4272	32,0803	339	160,692	42,0287	410	80,5081	22,1319	482	75,4965	51,9770
258	60,4618	42,0287	340	15,3579	61,9254	411	80,5081	22,1319	483	105,565	71,8738
260	75,4965	51,9770	344	15,3579	61,9254	412	25,3810	101,718	484	105,565	71,8738
263	75,4965	51,9770	345	15,3579	61,9254	413	25,3810	101,718	485	105,565	71,8738
264	75,4965	51,9770	346	25,3810	101,718	414	35,4041	141,512	486	135,635	91,7705
265	90,5312	61,9254	347	25,3810	101,718	417	50,4387	76,8479	487	135,635	91,7705
266	90,5312	61,9254	349	30,3925	22,1319	429	50,4387	76,8479	488	135,635	91,7705
267	90,5312	61,9254	353	30,3925	22,1319	430	70,4849	106,693	489	35,4041	17,1577
268	105,565	71,8738	354	30,3925	22,1319	431	70,4849	106,693	493	35,4041	17,1577
269	105,565	71,8738	355	35,4041	17,1577	432	70,4849	106,693	494	35,4041	17,1577
270	105,565	71,8738	359	35,4041	17,1577	433	90,5312	136,538	496	70,4849	32,0803
271	120,600	81,8221	360	35,4041	17,1577	434	90,5312	136,538	497	70,4849	32,0803
272	120,600	81,8221	361	52,9445	24,6190	435	90,5312	136,538	498	70,4849	32,0803
273	120,600	81,8221	363	52,9445	24,6190	436	15,3579	37,0545	499	105,565	47,0028
274	135,635	91,7705	364	52,9445	24,6190	444	15,3579	37,0545	500	105,565	47,0028
275	135,635	91,7705	365	70,4849	32,0803	445	45,4272	106,693	501	105,565	47,0028
276	135,635	91,7705	366	70,4849	32,0803	447	45,4272	106,693	502	140,646	61,9254
277	70,4849	32,0803	367	70,4849	32,0803	448	45,4272	106,693	503	140,646	61,9254
285	88,0254	39,5416	368	105,565	47,0028	449	60,4618	141,512	504	140,646	61,9254
287	88,0254	39,5416	369	105,565	47,0028	451	60,4618	141,512	505	60,4618	17,1577
288	88,0254	39,5416	371	60,4618	17,1577	452	60,4618	141,512	506	60,4618	17,1577
289	123,106	54,4641	378	60,4618	17,1577	453	30,3925	47,0028	508	100,554	27,1061
294	45,4272	32,0803	379	60,4618	17,1577	455	30,3925	47,0028	509	100,554	27,1061

TABELA B.2 – Valores codificados das medidas dos fluxos de produto e rejeito
(cont.)

exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W	exp	P	W
510	100,554	27,1061	553	37,9099	39,5416	593	80,5081	22,1319	645	35,4041	17,1577
511	140,646	37,0545	554	37,9099	39,5416	594	80,5081	22,1319	646	105,565	47,0028
512	140,646	37,0545	555	37,9099	39,5416	595	120,600	32,0803	674	105,565	47,0028
513	140,646	37,0545	556	62,9676	64,4125	596	120,600	32,0803	675	105,565	47,0028
514	180,739	47,0028	557	62,9676	64,4125	597	120,600	32,0803	676	70,4849	32,0803
517	10,3463	42,0287	558	62,9676	64,4125	598	160,692	42,0287	678	70,4849	32,0803
518	10,3463	42,0287	559	88,0254	89,2834	599	160,692	42,0287	679	70,4849	32,0803
519	10,3463	42,0287	560	88,0254	89,2834	600	160,692	42,0287	680	135,635	91,7705
520	20,3694	81,8221	561	88,0254	89,2834	601	15,3579	61,9254	681	135,635	91,7705
521	20,3694	81,8221	562	113,083	114,154	602	15,3579	61,9254	682	135,635	91,7705
522	20,3694	81,8221	563	113,083	114,154	603	15,3579	61,9254	683	105,565	71,8738
523	30,3925	121,615	564	113,083	114,154	604	15,3579	37,0545	684	105,565	71,8738
524	30,3925	121,615	565	30,3925	22,1319	605	30,3925	71,8738	685	25,3810	27,1061
525	30,3925	121,615	566	30,3925	22,1319	606	30,3925	71,8738	686	25,3810	27,1061
526	40,4156	161,409	567	30,3925	22,1319	607	30,3925	71,8738	687	25,3810	27,1061
527	40,4156	161,409	568	60,4618	42,0287	608	30,3925	47,0028	688	180,739	47,0028
528	40,4156	161,409	569	60,4618	42,0287	611	30,3925	47,0028	693	35,4041	17,1577
529	22,8752	54,4641	570	60,4618	42,0287	612	30,3925	47,0028	694	105,565	47,0028
530	22,8752	54,4641	571	90,5312	61,9254	613	50,4387	76,8479	695	105,565	47,0028
531	22,8752	54,4641	572	90,5312	61,9254	617	50,4387	76,8479	697	105,565	47,0028
532	37,9099	89,2834	573	90,5312	61,9254	618	50,4387	76,8479			
533	37,9099	89,2834	574	120,600	81,8221	619	15,3579	37,0545			
534	37,9099	89,2834	575	120,600	81,8221	620	15,3579	37,0545			
535	52,9445	124,102	576	120,600	81,8221	621	15,3579	37,0545			
536	52,9445	124,102	577	52,9445	24,6190	622	70,4849	106,693			
538	67,9792	158,922	578	52,9445	24,6190	623	70,4849	106,693			
539	67,9792	158,922	579	52,9445	24,6190	624	70,4849	105,449			
540	67,9792	158,922	580	88,0254	39,5416	625	75,4965	76,8479			
541	20,3694	32,0803	581	88,0254	39,5416	626	75,4965	76,8479			
542	20,3694	32,0803	582	88,0254	39,5416	627	75,4965	76,8479			
543	20,3694	32,0803	583	123,106	54,4641	628	100,554	101,718			
544	40,4156	61,9254	584	123,106	54,4641	635	100,554	101,718			
545	40,4156	61,9254	585	123,106	54,4641	636	100,554	101,718			
546	40,4156	61,9254	586	158,187	69,3867	637	45,4272	32,0803			
547	60,4618	91,7705	587	158,187	69,3867	638	45,4272	32,0803			
548	60,4618	91,7705	588	158,187	69,3867	639	75,4965	51,9770			
549	60,4618	91,7705	589	123,106	54,4641	640	75,4965	51,9770			
550	80,5081	121,615	590	123,106	54,4641	642	75,4965	51,9770			
551	80,5081	121,615	591	123,106	54,4641	643	35,4041	17,1577			
552	80,5081	121,615	592	80,5081	22,1319	644	35,4041	17,1577			

TABELA B.3 – Valores codificados do corte, do fluxo de alimentação e da pressão de produto

exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp
1	0.4626	143.33	1.29	41	0.2929	78.34	1.01	109	0.7297	127.57	1.00
2	0.4992	200.26	1.29	42	0.2959	78.34	1.01	110	0.7032	177.57	1.00
3	0.4941	199.76	1.29	43	0.2962	77.34	1.01	111	0.7212	177.57	1.00
4	0.4919	200.26	1.29	44	0.2962	127.19	1.01	112	0.7247	177.57	1.00
5	0.4785	176.30	1.29	45	0.2938	127.19	1.00	113	0.6853	127.57	1.00
6	0.4833	176.29	1.29	46	0.2977	127.19	1.00	114	0.6940	127.57	1.00
7	0.4859	176.30	1.29	47	0.3017	176.05	1.01	115	0.7002	127.57	1.00
8	0.4824	151.33	1.29	48	0.3048	176.05	1.01	116	0.7208	227.57	1.00
9	0.4842	151.08	1.29	49	0.2911	177.55	1.01	117	0.7072	227.57	1.00
10	0.4847	151.08	1.29	57	0.4193	152.23	1.00	118	0.7139	227.57	1.01
11	0.4741	131.11	1.29	63	0.4843	77.45	1.00	119	0.8063	52.60	1.01
12	0.4760	129.87	1.29	65	0.4933	127.38	1.00	120	0.8129	52.60	1.01
13	0.4775	129.87	1.29	71	0.5081	227.24	1.00	121	0.8154	52.60	1.00
14	0.4788	105.65	1.29	72	0.5083	227.24	1.01	122	0.7926	102.64	1.00
15	0.4816	106.65	1.29	73	0.5035	227.24	1.01	123	0.8009	102.64	1.00
16	0.4797	106.15	1.29	74	0.5729	52.52	1.01	124	0.8090	102.64	1.00
17	0.4788	74.44	1.29	75	0.5932	52.52	1.00	125	0.7810	152.68	1.00
18	0.4774	74.44	1.29	77	0.6221	102.49	1.00	126	0.7862	152.68	1.00
19	0.4780	74.44	1.29	78	0.6291	102.49	1.00	127	0.7905	152.68	1.00
20	0.4964	198.26	1.29	80	0.5940	152.46	1.00	128	0.7861	202.72	1.00
21	0.5025	197.76	1.29	81	0.6084	152.46	1.00	130	0.8233	202.72	1.00
22	0.5034	197.76	1.29	82	0.6033	152.46	1.00	132	0.1698	52.37	1.29
23	0.4806	153.33	1.29	84	0.6270	202.42	1.00	133	0.1725	52.37	1.29
24	0.4835	152.33	1.29	85	0.6286	202.42	1.00	134	0.1884	77.28	1.29
25	0.4813	152.83	1.29	86	0.6130	102.49	1.00	135	0.1847	77.28	1.29
26	0.4810	127.36	1.29	87	0.6119	102.49	1.00	136	0.1903	77.28	1.29
27	0.4795	127.36	1.29	88	0.6080	102.49	1.00	137	0.1758	52.37	1.29
28	0.4808	126.86	1.29	89	0.3837	52.45	1.00	138	0.1779	52.37	1.29
29	0.1957	77.78	0.73	90	0.3851	52.45	1.00	139	0.1736	52.37	1.29
30	0.1971	77.78	0.72	91	0.3907	52.45	1.00	140	0.1913	102.19	1.29
31	0.1973	77.78	0.72	92	0.3894	103.34	1.01	141	0.2016	102.19	1.29
32	0.1968	52.37	1.00	94	0.3925	102.34	1.00	142	0.1933	102.19	1.29
33	0.1935	52.37	1.01	95	0.4100	152.23	1.01	143	0.1913	127.10	1.29
34	0.1938	52.37	1.01	96	0.4081	152.23	1.01	144	0.1904	127.10	1.30
35	0.1944	100.71	1.00	97	0.4032	152.23	1.01	145	0.1958	127.10	1.29
36	0.1942	100.70	1.00	101	0.4036	202.12	1.00	146	0.1904	152.01	1.29
37	0.2037	102.70	1.01	103	0.3821	202.12	1.00	147	0.1830	152.01	1.29
38	0.2021	152.51	1.00	104	0.7120	77.56	1.01	148	0.1970	152.01	1.29
39	0.2028	152.51	1.00	105	0.7054	77.56	1.00	149	0.1909	176.92	1.29
40	0.2055	152.51	1.00	106	0.7113	77.56	1.01	150	0.1731	176.92	1.29

TABELA B.3 – Valores codificados do corte, do fluxo de alimentação e da pressão de produto (cont.)

exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp
151	0.1979	176.92	1.29	235	0.5291	127.38	1.29	308	0.5926	77.51	1.30
152	0.3020	52.41	1.29	237	0.5034	152.34	1.29	310	0.5917	77.51	1.30
153	0.2881	52.41	1.29	238	0.5032	152.34	1.29	314	0.7004	202.57	1.29
154	0.2997	52.41	1.29	239	0.4990	177.31	1.29	315	0.7034	202.57	1.29
155	0.3153	77.34	1.30	240	0.4955	177.31	1.29	316	0.7027	202.57	1.29
156	0.3146	77.34	1.30	241	0.4971	177.31	1.29	317	0.6837	227.57	1.29
157	0.3174	77.34	1.29	242	0.5049	202.27	1.30	318	0.6924	227.57	1.29
158	0.3164	102.27	1.29	243	0.5075	202.27	1.30	319	0.6925	227.57	1.29
159	0.3099	102.27	1.29	244	0.5080	202.27	1.29	329	0.7799	127.66	1.29
160	0.3088	102.27	1.29	245	0.4925	227.24	1.30	330	0.7786	127.66	1.29
161	0.3072	127.19	1.29	246	0.5186	227.24	1.30	331	0.7789	127.66	1.30
162	0.3072	127.19	1.29	247	0.5051	227.24	1.30	332	0.7792	152.68	1.30
164	0.3226	152.12	1.29	248	0.5280	102.42	1.29	333	0.7817	152.68	1.30
165	0.3164	152.12	1.29	249	0.5140	102.42	1.29	334	0.7808	152.68	1.29
166	0.3149	152.12	1.29	250	0.5175	102.42	1.29	335	0.7792	177.70	1.30
168	0.2942	177.05	1.29	251	0.5263	77.45	1.29	336	0.7764	177.70	1.30
169	0.2858	177.05	1.29	252	0.5298	77.45	1.29	338	0.7809	202.72	1.29
170	0.2855	201.97	1.30	253	0.5267	77.45	1.29	339	0.7832	202.72	1.29
171	0.2788	201.97	1.29	258	0.6106	77.51	1.29	340	0.7875	202.72	1.29
172	0.2803	201.97	1.29	260	0.6267	102.49	1.29	344	0.1999	77.28	1.57
200	0.3743	227.07	1.29	263	0.6228	127.47	1.30	345	0.2010	77.28	1.58
201	0.3848	227.07	1.29	264	0.6258	127.47	1.30	346	0.2031	77.28	1.57
202	0.3705	227.07	1.29	265	0.6223	127.47	1.30	347	0.2028	127.10	1.58
209	0.5267	52.49	1.29	266	0.5950	152.46	1.30	349	0.2534	127.10	1.58
210	0.5293	52.49	1.29	267	0.5976	152.46	1.31	353	0.5922	52.52	1.29
211	0.5315	52.49	1.29	268	0.6362	152.46	1.31	354	0.5937	52.52	1.29
215	0.4195	77.40	1.29	269	0.6247	177.44	1.30	355	0.5857	52.52	1.29
216	0.4225	77.40	1.29	270	0.6195	177.44	1.31	359	0.6887	52.56	1.29
217	0.4251	77.40	1.29	271	0.6208	177.44	1.31	360	0.6870	52.56	1.29
218	0.3976	202.12	1.30	272	0.6246	202.42	1.29	361	0.6931	52.56	1.29
219	0.3995	202.12	1.29	273	0.6164	202.42	1.29	363	0.6864	77.56	1.29
220	0.3963	202.12	1.30	274	0.6135	202.42	1.29	364	0.6866	77.56	1.29
221	0.3986	52.45	1.29	275	0.6247	227.41	1.29	365	0.6984	77.56	1.29
222	0.4043	52.45	1.29	276	0.6251	227.41	1.29	366	0.7048	102.57	1.29
223	0.3979	52.45	1.29	277	0.6235	227.41	1.29	367	0.7052	102.57	1.29
224	0.5757	52.49	1.30	285	0.7298	102.57	1.29	368	0.7077	102.57	1.29
225	0.5788	52.49	1.29	287	0.7264	127.57	1.30	369	0.7036	152.57	1.29
226	0.5793	52.49	1.29	288	0.7265	127.57	1.31	371	0.7129	152.57	1.29
233	0.5244	127.38	1.29	289	0.7230	127.57	1.29	378	0.8159	77.62	1.29
234	0.5254	127.38	1.29	294	0.7285	177.57	1.29	379	0.8039	77.62	1.29

TABELA B.3 – Valores codificados do corte, do fluxo de alimentação e da pressão de produto (cont.)

exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp
380	0.8154	77.62	1.29	456	0.4185	77.40	1.57	510	0.8087	127.66	1.57
384	0.6996	177.57	1.29	457	0.5198	52.49	1.57	511	0.8157	127.66	1.57
385	0.6968	177.57	1.29	463	0.5086	152.34	1.57	512	0.8431	177.70	1.57
386	0.7010	177.57	1.29	464	0.5173	152.34	1.57	513	0.8253	177.70	1.58
387	0.8093	177.70	1.29	465	0.5134	152.34	1.57	514	0.8226	177.70	1.58
388	0.8036	177.70	1.29	469	0.6115	77.51	1.58	517	0.8205	227.74	1.58
389	0.8087	177.70	1.29	471	0.6173	77.51	1.58	518	0.1904	52.37	1.86
390	0.8138	227.74	1.30	472	0.5159	52.49	1.58	519	0.1961	52.37	1.86
391	0.8176	227.74	1.29	473	0.5195	52.49	1.58	520	0.1911	52.37	1.86
393	0.8096	102.64	1.30	474	0.5181	52.49	1.58	521	0.1965	102.19	1.86
394	0.8082	102.64	1.30	475	0.5012	202.27	1.58	522	0.2042	102.19	1.86
396	0.1894	226.73	1.58	476	0.4989	202.27	1.58	523	0.2030	102.19	1.86
397	0.1872	226.73	1.57	477	0.5047	202.27	1.58	524	0.2014	152.01	1.86
398	0.1865	226.73	1.57	478	0.6300	77.51	1.58	525	0.1910	152.01	1.86
405	0.3163	102.27	1.57	479	0.6291	77.51	1.57	526	0.1943	152.01	1.86
406	0.3165	102.27	1.58	480	0.6211	77.51	1.57	527	0.1987	201.82	1.86
407	0.3176	102.27	1.58	481	0.6205	127.47	1.57	528	0.2054	201.82	1.86
410	0.7812	102.64	1.29	482	0.6122	127.47	1.58	529	0.1999	201.82	1.86
411	0.7790	102.64	1.29	483	0.6112	127.47	1.57	530	0.3050	77.34	1.86
412	0.7861	102.64	1.29	484	0.6093	177.44	1.58	531	0.3076	77.34	1.86
413	0.1817	127.10	1.57	485	0.6079	177.44	1.58	532	0.3050	77.34	1.86
414	0.1761	127.10	1.57	486	0.6093	177.44	1.58	533	0.2957	127.19	1.87
417	0.1803	176.92	1.58	487	0.6101	227.41	1.58	534	0.2964	127.19	1.87
429	0.3783	127.29	1.58	488	0.6144	227.41	1.58	535	0.2986	127.19	1.87
430	0.3833	127.29	1.58	489	0.6136	227.41	1.58	536	0.2977	177.05	1.86
431	0.3822	177.18	1.58	493	0.7257	52.56	1.57	538	0.2979	177.05	1.87
432	0.3778	177.18	1.58	494	0.7280	52.56	1.57	539	0.2895	226.90	1.86
433	0.3849	177.18	1.58	496	0.7217	52.56	1.57	540	0.2890	226.90	1.86
434	0.3801	227.07	1.58	497	0.7097	102.57	1.58	541	0.2944	226.90	1.86
435	0.3807	227.07	1.58	498	0.7171	102.57	1.58	542	0.3954	52.45	1.86
436	0.3777	227.07	1.58	499	0.6989	102.57	1.58	543	0.3970	52.45	1.86
444	0.2940	52.41	1.58	500	0.7082	152.57	1.57	544	0.3964	52.45	1.86
445	0.2939	52.41	1.58	501	0.7124	152.57	1.57	545	0.3872	102.34	1.86
447	0.2908	152.12	1.58	502	0.7088	152.57	1.58	546	0.3877	102.34	1.86
448	0.2887	152.12	1.58	503	0.7030	202.57	1.57	547	0.3906	102.34	1.86
449	0.2962	152.12	1.57	504	0.7057	202.57	1.58	548	0.3947	152.23	1.86
451	0.2873	201.97	1.57	505	0.7126	202.57	1.58	549	0.3935	152.23	1.86
452	0.2902	201.97	1.57	506	0.8080	77.62	1.57	550	0.3908	152.23	1.86
453	0.2902	201.97	1.57	508	0.8160	77.62	1.57	551	0.3925	202.12	1.86
455	0.4197	77.40	1.57	509	0.8154	127.66	1.57	552	0.3952	202.12	1.87

TABELA B.3 – Valores codificados do corte, do fluxo de alimentação e da pressão de produto (cont.)

exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp	exp	θ	F	Pp
553	0.3933	202.12	1.87	593	0.7792	52.60	1.86	645	0.7073	127.47	0.72
554	0.4893	77.45	1.87	594	0.7851	52.60	1.87	646	0.6970	127.47	0.72
555	0.4918	77.45	1.87	595	0.7850	52.60	1.87	674	0.6956	52.56	0.72
556	0.4914	77.45	1.86	596	0.7837	102.64	1.87	675	0.6843	52.56	0.73
557	0.4935	127.38	1.86	597	0.7978	102.64	1.87	676	0.6985	52.56	0.72
558	0.4988	127.38	1.86	598	0.7818	102.64	1.87	678	0.7124	152.57	0.71
559	0.4968	127.38	1.86	599	0.7906	152.68	1.86	679	0.7168	152.57	0.71
560	0.4920	177.31	1.86	600	0.7881	152.68	1.86	680	0.7174	152.57	0.71
561	0.4931	177.31	1.86	601	0.7971	152.68	1.86	681	0.6925	102.57	0.71
562	0.4942	177.31	1.86	602	0.7884	202.72	1.86	682	0.6960	102.57	0.72
563	0.5001	227.24	1.86	603	0.7991	202.72	1.86	683	0.6865	102.57	0.71
564	0.4973	227.24	1.86	604	0.7926	202.72	1.86	684	0.6064	227.41	0.72
565	0.4985	227.24	1.86	605	0.1786	77.28	0.72	685	0.6222	227.41	0.72
566	0.5921	52.52	1.86	606	0.1827	77.28	0.72	686	0.6168	227.41	0.72
567	0.5849	52.52	1.86	607	0.1814	77.28	0.72	687	0.5827	177.44	0.72
568	0.5854	52.52	1.86	608	0.2670	52.41	0.72	688	0.5971	177.44	0.72
569	0.5922	102.49	1.86	611	0.2777	102.27	0.72	693	0.5083	52.49	0.72
570	0.5871	102.49	1.86	612	0.2733	102.27	0.72	694	0.5194	52.49	0.72
571	0.5926	102.49	1.86	613	0.2756	102.27	0.72	695	0.5160	52.49	0.72
572	0.5928	152.46	1.87	617	0.3895	77.40	0.71	697	0.8170	227.74	0.72
573	0.5932	152.46	1.86	618	0.3948	77.40	0.72				
574	0.5933	152.46	1.86	619	0.3936	77.40	0.72				
575	0.5919	202.42	1.86	620	0.3915	127.29	0.72				
576	0.5951	202.42	1.86	621	0.3977	127.29	0.72				
577	0.5968	202.42	1.86	622	0.4008	127.29	0.72				
578	0.7008	77.56	1.86	623	0.2808	52.41	0.72				
579	0.6929	77.56	1.86	624	0.2887	52.41	0.72				
580	0.6990	77.56	1.86	625	0.2806	52.41	0.72				
581	0.6986	127.57	1.86	626	0.3824	177.18	0.72				
582	0.6963	127.57	1.86	627	0.3827	177.18	0.72				
583	0.6970	127.57	1.86	628	0.3894	175.93	0.72				
584	0.6663	177.57	1.86	635	0.6289	152.34	0.71				
585	0.6887	177.57	1.86	636	0.6463	152.34	0.72				
586	0.6869	177.57	1.86	637	0.6237	152.34	0.71				
587	0.6953	227.57	1.86	638	0.6438	202.27	0.72				
588	0.6956	227.57	1.86	639	0.6214	202.27	0.72				
589	0.6912	227.57	1.86	640	0.6486	202.27	0.72				
590	0.7032	177.57	1.86	642	0.6946	77.51	0.72				
591	0.6999	177.57	1.86	643	0.6958	77.51	0.72				
592	0.7012	177.57	1.86	644	0.7157	127.47	0.72				

TABELA B.4 – Valores codificados das incertezas das medidas das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^6$)

exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}
1	1.19	0.42	0.41	41	0.70	0.47	0.03	109	0.74	0.13	0.12
2	2.31	1.22	0.08	42	0.70	0.31	0.16	110	1.59	1.32	0.79
3	2.31	1.59	0.87	43	0.70	0.65	0.04	111	1.59	0.69	0.39
4	2.31	0.67	2.85	44	1.46	0.48	0.43	112	1.59	0.85	0.98
5	2.04	1.85	0.14	45	1.46	0.40	0.69	113	0.78	0.16	0.84
6	2.04	0.67	1.24	46	1.46	0.69	0.07	114	0.78	0.40	1.82
7	2.04	1.93	0.59	47	5.29	1.09	2.49	115	0.78	0.06	0.06
8	1.33	0.13	0.39	48	5.29	1.46	1.47	116	0.44	0.74	0.64
9	1.33	1.06	0.29	49	5.29	3.00	2.70	117	0.44	0.26	0.75
10	1.33	0.12	0.45	57	9.64	0.31	3.67	118	0.44	0.67	0.37
11	2.11	0.53	1.29	63	8.36	2.41	7.09	119	1.30	0.89	2.36
12	2.11	0.83	0.75	65	8.36	2.33	4.48	120	1.30	0.58	0.53
13	2.11	0.82	0.93	71	1.94	0.58	1.37	121	1.30	0.53	0.30
14	0.60	0.36	0.12	72	1.94	1.44	0.45	122	0.57	2.41	0.91
15	0.60	0.01	0.32	73	1.94	0.98	1.48	123	0.57	1.10	0.95
16	0.60	0.10	0.08	74	1.11	8.58	1.86	124	0.57	0.35	0.73
17	1.15	0.74	0.73	75	1.11	1.61	2.92	125	0.92	0.13	0.03
18	1.15	0.28	0.50	77	4.59	0.34	2.32	126	0.92	0.06	0.18
19	1.15	1.12	0.79	78	4.59	2.82	0.87	127	0.92	0.18	0.19
20	0.56	0.22	1.24	80	1.04	0.22	2.05	128	0.32	0.26	1.72
21	0.56	0.59	0.59	81	1.04	1.05	0.61	130	0.32	0.09	0.18
22	0.56	0.15	0.89	82	1.04	1.32	0.26	132	5.00	4.36	3.73
23	0.63	1.26	0.84	84	1.27	0.94	1.50	133	5.00	6.35	3.81
24	0.63	0.05	0.70	85	1.27	0.09	0.72	134	5.00	2.88	2.51
25	0.63	1.82	0.37	86	1.27	0.48	0.27	135	5.00	3.79	1.38
26	1.76	1.37	1.00	87	1.27	0.10	0.35	136	5.00	4.59	2.46
27	1.76	0.32	0.32	88	1.27	0.15	0.30	137	5.24	1.84	3.49
28	1.76	0.17	0.98	89	1.23	0.90	0.13	138	5.24	6.35	3.33
29	1.76	0.11	1.12	90	1.23	0.85	0.65	139	5.24	6.86	4.56
30	1.76	1.89	0.71	91	1.23	0.43	0.58	140	1.01	0.94	0.23
31	1.76	0.86	0.57	92	1.12	0.01	0.93	141	1.01	0.79	0.15
32	2.47	3.54	0.67	94	1.12	10.84	0.28	142	1.01	0.52	0.39
33	2.47	0.03	1.35	95	1.99	1.82	0.01	143	0.74	0.28	0.43
34	2.47	0.18	0.49	96	1.99	1.48	0.91	144	0.74	0.07	1.16
35	2.47	0.21	1.45	97	1.99	0.10	0.12	145	0.74	0.43	0.33
36	2.47	2.10	1.80	101	1.59	1.33	1.25	146	0.98	3.00	1.17
37	2.47	2.91	0.07	103	1.59	3.98	0.23	147	0.98	0.33	0.29
38	1.01	0.61	1.11	104	0.43	0.44	0.75	148	0.98	0.11	0.64
39	1.01	0.77	0.98	105	0.43	0.40	0.33	149	3.37	2.96	0.27
40	1.01	0.15	0.40	106	0.43	0.25	0.17	150	3.37	2.04	0.30

TABELA B.4 – Valores codificados das incertezas das medidas das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^6$)(cont.)

exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}
151	3.37	1.47	0.85	235	1.57	1.14	0.86	308	1.15	5.78	0.41
152	0.96	1.45	1.35	237	1.13	0.60	0.62	310	1.15	0.87	0.61
153	0.96	4.69	1.73	238	1.13	0.22	0.80	314	0.42	0.15	0.92
154	0.96	2.65	3.58	239	1.13	0.46	0.22	315	0.42	0.57	0.35
155	2.50	1.81	1.14	240	1.13	0.84	0.65	316	0.42	0.25	0.98
156	2.50	0.97	0.84	241	1.13	0.54	0.81	317	0.30	1.49	1.01
157	2.50	1.55	1.55	242	0.68	0.77	0.14	318	0.30	1.11	0.21
158	2.50	1.62	1.79	243	0.68	0.04	0.57	319	0.30	0.40	0.56
159	2.50	0.27	1.33	244	0.68	0.06	0.31	329	0.77	0.11	0.12
160	2.50	0.12	1.41	245	0.93	0.59	0.08	330	0.77	0.05	0.93
161	1.02	0.11	0.63	246	0.93	0.09	0.81	331	0.77	0.25	0.76
162	1.02	0.23	0.15	247	0.93	1.69	0.47	332	1.24	0.49	1.52
164	0.52	0.64	0.07	248	0.56	0.70	1.46	333	1.24	0.59	0.23
165	0.52	0.96	0.07	249	0.56	0.21	0.09	334	1.24	0.20	0.30
166	0.52	0.23	0.17	250	0.56	0.36	0.07	335	0.95	0.00	0.05
168	0.77	0.48	0.50	251	0.83	0.02	0.15	336	0.95	0.36	0.10
169	0.77	0.33	0.08	252	0.83	0.12	1.54	338	0.48	1.11	0.51
170	0.44	0.27	0.15	253	0.83	1.21	0.22	339	0.48	0.24	0.94
171	0.44	0.47	0.08	258	1.47	0.30	0.11	340	0.48	0.48	0.38
172	0.44	0.11	0.42	260	1.47	1.07	0.11	344	1.07	0.09	0.33
200	3.46	3.44	1.09	263	0.60	0.23	0.13	345	1.07	0.62	0.64
201	3.46	1.48	0.72	264	0.60	0.17	0.08	346	1.07	0.73	1.49
202	3.46	0.01	1.82	265	0.60	0.82	0.76	347	1.08	1.04	0.38
209	0.44	1.28	0.96	266	0.89	0.10	0.31	349	1.08	1.61	0.00
210	0.44	1.23	2.75	267	0.89	0.06	0.10	353	0.95	1.45	0.31
211	0.44	0.86	0.38	268	0.89	0.61	1.93	354	0.95	1.52	0.11
215	1.04	0.80	0.23	269	0.63	0.72	0.75	355	0.95	0.62	0.32
216	1.04	0.49	0.28	270	0.63	0.23	0.25	359	0.86	0.39	0.84
217	1.04	0.08	0.19	271	0.63	0.44	1.13	360	0.86	2.52	0.48
218	0.41	0.27	0.06	272	0.86	0.37	0.31	361	0.86	2.82	0.90
219	0.41	0.16	0.39	273	0.86	0.10	0.02	363	0.74	1.88	0.35
220	0.41	1.04	0.37	274	0.86	0.09	0.01	364	0.74	0.52	0.11
221	1.06	0.11	0.37	275	0.72	0.89	0.10	365	0.74	4.10	0.02
222	1.06	0.22	0.32	276	0.72	0.21	0.58	366	0.91	0.89	0.12
223	1.06	0.38	0.28	277	0.72	0.20	0.44	367	0.91	0.07	0.03
224	0.45	0.58	1.90	285	0.89	0.19	0.22	368	0.91	0.64	0.12
225	0.45	0.55	0.01	287	0.75	0.14	0.00	369	1.01	1.75	1.33
226	0.45	0.63	0.31	288	0.75	0.28	0.67	371	1.01	0.85	1.39
233	1.57	1.00	0.76	289	0.75	0.08	0.10	378	1.06	0.43	0.54
234	1.57	0.89	0.82	294	1.22	0.13	0.19	379	1.06	0.34	0.75

TABELA B.4 – Valores codificados das incertezas das medidas das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^6$)(cont.)

exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}
380	1.06	0.31	0.38	456	0.83	0.36	0.67	510	0.75	0.39	0.22
384	2.00	1.87	1.15	457	0.48	0.14	0.43	511	0.75	1.13	0.24
385	2.00	0.25	3.79	463	0.43	0.41	0.34	512	1.90	1.93	1.15
386	2.00	0.85	0.28	464	0.43	0.87	0.16	513	1.90	1.92	1.36
387	1.36	1.92	0.68	465	0.43	0.56	0.61	514	1.90	1.24	0.48
388	1.36	0.52	0.48	469	0.54	3.84	0.24	517	4.41	1.43	2.23
389	1.36	0.36	0.64	471	0.54	0.06	0.15	518	0.71	0.35	1.01
390	1.22	0.10	0.17	472	0.22	0.45	1.13	519	0.71	0.18	0.57
391	1.22	0.24	0.87	473	0.22	0.09	1.00	520	0.71	0.08	0.45
393	0.96	0.19	0.05	474	0.22	0.00	0.03	521	0.46	1.01	0.07
394	0.96	0.18	0.07	475	0.22	0.97	0.83	522	0.46	0.22	0.83
396	0.90	0.24	0.56	476	0.22	2.43	0.64	523	0.46	0.93	0.57
397	0.90	0.25	0.13	477	0.22	0.23	0.22	524	0.41	3.07	0.27
398	0.90	0.70	0.25	478	0.59	4.18	0.14	525	0.41	0.02	0.67
405	0.33	0.04	1.39	479	0.59	1.34	2.35	526	0.41	0.40	0.33
406	0.33	0.35	0.36	480	0.59	2.13	0.05	527	0.55	0.34	0.06
407	0.33	0.10	0.83	481	0.59	3.32	0.43	528	0.55	0.07	0.69
410	0.53	0.18	2.23	482	0.59	0.22	0.30	529	0.55	0.14	0.28
411	0.53	0.58	1.53	483	0.59	0.47	0.12	530	0.75	0.48	0.19
412	0.53	0.15	0.51	484	0.59	0.34	0.31	531	0.75	0.40	0.04
413	0.79	7.91	0.72	485	0.59	0.13	0.09	532	0.75	0.77	0.24
414	0.79	0.35	0.20	486	0.59	0.20	0.11	533	0.65	0.53	0.03
417	0.85	0.73	0.19	487	1.36	0.96	0.50	534	0.65	0.14	0.16
429	1.28	0.13	0.76	488	1.36	0.86	1.48	535	0.65	0.32	0.50
430	1.28	1.07	0.32	489	1.36	1.26	0.77	536	0.31	0.13	0.26
431	1.28	1.12	0.51	493	0.38	0.12	0.20	538	0.31	0.24	0.27
432	1.28	1.11	0.14	494	0.38	0.79	0.32	539	0.46	0.10	0.19
433	1.28	0.78	0.33	496	0.38	0.87	0.61	540	0.46	1.47	0.66
434	1.28	0.23	0.86	497	0.68	0.42	0.56	541	0.46	2.73	0.03
435	1.28	0.95	1.01	498	0.68	0.46	0.44	542	7.61	9.20	6.41
436	1.28	0.94	0.29	499	0.68	1.59	0.15	543	7.61	8.88	6.21
444	0.60	0.04	0.26	500	1.84	1.24	1.07	544	7.61	9.23	5.98
445	0.60	0.54	2.48	501	1.84	1.76	1.18	545	2.67	3.14	1.68
447	0.53	0.01	0.49	502	1.84	1.44	1.16	546	2.67	3.20	2.17
448	0.53	0.23	0.59	503	1.84	0.83	0.76	547	2.67	3.08	2.14
449	0.53	0.87	0.72	504	1.84	1.35	1.11	548	0.86	0.35	0.26
451	2.69	2.34	2.42	505	1.84	1.07	0.64	549	0.86	0.48	0.05
452	2.69	2.82	1.68	506	1.17	5.09	0.74	550	0.86	0.70	0.42
453	2.69	2.98	2.26	508	1.17	0.09	0.24	551	2.14	2.15	0.28
455	0.83	0.02	1.64	509	0.75	2.08	0.06	552	2.14	1.66	0.28

TABELA B.4 – Valores codificados das incertezas das medidas das razões isotópicas de produto, rejeito e alimentação ($\times 10^6$)(cont.)

exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}	exp	σ_{Rf}	σ_{Rp}	σ_{Rw}
553	2.14	1.41	1.35	593	0.13	0.08	0.47	645	1.76	2.08	0.04
554	0.30	4.77	0.25	594	0.13	0.49	1.93	646	1.76	0.74	5.52
555	0.30	0.89	0.21	595	0.13	0.34	0.26	674	2.80	2.16	0.54
556	0.30	0.06	0.59	596	0.22	0.87	1.77	675	2.80	1.77	0.63
557	1.26	0.63	0.27	597	0.22	0.15	0.62	676	2.80	2.09	1.74
558	1.26	0.99	0.44	598	0.22	0.00	0.65	678	1.21	0.74	0.40
559	1.26	0.40	0.58	599	0.36	0.31	0.77	679	1.21	0.24	0.39
560	0.66	0.09	1.02	600	0.36	0.67	1.74	680	1.21	0.72	0.08
561	0.66	1.92	2.15	601	0.36	0.21	0.31	681	1.84	0.19	0.20
562	0.66	0.30	0.54	602	1.18	0.88	0.26	682	1.84	0.35	0.81
563	0.99	0.40	0.51	603	1.18	0.04	0.11	683	1.84	1.12	0.47
564	0.99	0.71	0.22	604	1.18	0.53	0.58	684	1.74	1.25	0.31
565	0.99	0.53	0.27	605	2.56	3.20	1.51	685	1.74	0.42	0.64
566	0.90	0.07	0.41	606	2.56	1.76	1.77	686	1.74	0.35	0.00
567	0.90	0.56	0.38	607	2.56	3.23	1.87	687	0.98	0.61	0.68
568	0.90	0.38	0.23	608	0.72	1.36	1.26	688	0.98	0.53	0.42
569	0.34	0.02	0.17	611	0.42	1.07	0.01	693	1.89	5.82	0.23
570	0.34	1.07	0.97	612	0.42	1.38	0.06	694	1.89	0.58	2.40
571	0.34	0.14	0.53	613	0.42	0.78	0.05	695	1.89	2.10	5.21
572	0.72	0.02	0.28	617	0.36	1.56	0.60	697	2.49	0.66	0.62
573	0.72	0.99	0.26	618	0.36	0.97	2.24				
574	0.72	0.09	0.16	619	0.36	0.32	0.21				
575	1.35	0.32	0.56	620	1.69	2.21	0.11				
576	1.35	0.72	0.66	621	1.69	0.20	0.79				
577	1.35	0.91	0.76	622	1.69	0.48	0.95				
578	0.23	1.48	0.18	623	2.04	2.14	7.38				
579	0.23	1.33	2.20	624	2.04	0.09	0.14				
580	0.23	0.23	0.25	625	2.04	3.78	0.61				
581	0.58	0.49	0.06	626	1.15	4.17	0.22				
582	0.58	1.66	0.02	627	1.15	0.88	0.30				
583	0.58	0.22	0.85	628	1.15	0.75	0.44				
584	1.99	0.83	0.54	635	1.76	0.39	0.70				
585	1.99	1.60	1.43	636	1.76	0.70	0.82				
586	1.99	0.90	0.54	637	1.76	0.91	0.61				
587	1.39	1.40	0.52	638	1.76	1.43	0.54				
588	1.39	1.28	0.76	639	1.76	0.49	1.01				
589	1.39	0.33	0.97	640	1.76	1.25	0.08				
590	2.51	1.34	1.99	642	1.76	1.52	0.59				
591	2.51	2.08	1.50	643	1.76	1.29	0.06				
592	2.51	2.31	1.94	644	1.76	0.22	2.63				

TABELA B.5 – Valores codificados das incertezas das medidas dos fluxos de produto e rejeito

exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w
1	0.1237	0.7340	41	0.1440	0.7882	109	0.1157	0.8315	151	0.1381	0.6107
2	0.1122	0.6747	42	0.1440	0.7882	110	0.1050	0.7896	152	0.1481	0.8387
3	0.1124	0.6747	43	0.1443	0.7896	111	0.1050	0.7896	153	0.1481	0.8387
4	0.1122	0.6747	44	0.1369	0.7024	112	0.1050	0.7896	154	0.1481	0.8387
5	0.1164	0.7002	45	0.1369	0.7024	113	0.1157	0.8315	155	0.1443	0.7896
6	0.1168	0.6980	46	0.1369	0.7024	114	0.1157	0.8315	156	0.1443	0.7896
7	0.1164	0.7002	47	0.1302	0.6357	115	0.1157	0.8315	157	0.1443	0.7896
8	0.1214	0.7280	48	0.1302	0.6357	116	0.0992	0.7502	158	0.1405	0.7439
9	0.1214	0.7286	49	0.1297	0.6349	117	0.0992	0.7502	159	0.1405	0.7439
10	0.1214	0.7286	57	0.1266	0.6969	118	0.0992	0.7502	160	0.1405	0.7439
11	0.1256	0.7534	63	0.1369	0.8315	119	0.1357	0.9137	161	0.1369	0.7024
12	0.1256	0.7566	65	0.1258	0.7617	120	0.1357	0.9137	162	0.1369	0.7024
13	0.1256	0.7566	71	0.1076	0.6518	121	0.1357	0.9137	164	0.1334	0.6658
14	0.1313	0.7862	72	0.1076	0.6518	122	0.1185	0.8831	165	0.1334	0.6658
15	0.1308	0.7862	73	0.1076	0.6518	123	0.1185	0.8831	166	0.1334	0.6658
16	0.1311	0.7862	74	0.1405	0.8831	124	0.1185	0.8831	168	0.1299	0.6349
17	0.1383	0.8315	75	0.1405	0.8831	125	0.1056	0.8533	169	0.1299	0.6349
18	0.1383	0.8315	77	0.1266	0.8243	126	0.1056	0.8533	170	0.1266	0.6107
19	0.1383	0.8315	78	0.1266	0.8243	127	0.1056	0.8533	171	0.1266	0.6107
20	0.1127	0.6757	80	0.1148	0.7696	128	0.0990	0.8243	172	0.1266	0.6107
21	0.1129	0.6757	81	0.1148	0.7696	130	0.0990	0.8243	200	0.1148	0.6169
22	0.1129	0.6757	82	0.1148	0.7696	132	0.1507	0.8243	201	0.1148	0.6169
23	0.1210	0.7256	84	0.1056	0.7196	133	0.1507	0.8243	202	0.1148	0.6169
24	0.1212	0.7268	85	0.1056	0.7196	134	0.1481	0.7696	209	0.1430	0.8681
25	0.1212	0.7256	86	0.1266	0.8243	135	0.1481	0.7696	210	0.1430	0.8681
26	0.1266	0.7566	87	0.1266	0.8243	136	0.1481	0.7696	211	0.1430	0.8681
27	0.1266	0.7566	88	0.1266	0.8243	137	0.1507	0.8243	215	0.1405	0.8102
28	0.1268	0.7566	89	0.1455	0.8533	138	0.1507	0.8243	216	0.1405	0.8102
29	0.1478	0.7696	90	0.1455	0.8533	139	0.1507	0.8243	217	0.1405	0.8102
30	0.1478	0.7696	91	0.1455	0.8533	140	0.1455	0.7196	218	0.1185	0.6390
31	0.1478	0.7696	92	0.1357	0.7669	141	0.1455	0.7196	219	0.1185	0.6390
32	0.1507	0.8243	94	0.1357	0.7696	142	0.1455	0.7196	220	0.1185	0.6390
33	0.1507	0.8243	95	0.1266	0.6969	143	0.1430	0.6757	221	0.1455	0.8533
34	0.1507	0.8243	96	0.1266	0.6969	144	0.1430	0.6757	222	0.1455	0.8533
35	0.1450	0.7256	97	0.1266	0.6969	145	0.1430	0.6757	223	0.1455	0.8533
36	0.1453	0.7244	101	0.1185	0.6390	146	0.1405	0.6390	224	0.1430	0.8681
37	0.1450	0.7208	103	0.1185	0.6390	147	0.1405	0.6390	225	0.1430	0.8681
38	0.1403	0.6390	104	0.1299	0.8756	148	0.1405	0.6390	226	0.1430	0.8681
39	0.1403	0.6390	105	0.1299	0.8756	149	0.1381	0.6107	233	0.1256	0.7630
40	0.1403	0.6390	106	0.1299	0.8756	150	0.1381	0.6107	234	0.1256	0.7630

TABELA B.5 – Valores codificados das incertezas das medidas dos fluxos de produto e rejeito (cont.)

exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w
235	0.1256	0.7630	308	0.1334	0.8533	380	0.1266	0.8983	456	0.1405	0.8102
237	0.1204	0.7316	310	0.1334	0.8533	384	0.1050	0.7896	457	0.1430	0.8681
238	0.1204	0.7316	314	0.1014	0.7696	385	0.1050	0.7896	463	0.1204	0.7316
239	0.1157	0.7024	315	0.1014	0.7696	386	0.1050	0.7896	464	0.1204	0.7316
240	0.1157	0.7024	316	0.1014	0.7696	387	0.1014	0.8387	465	0.1204	0.7316
241	0.1157	0.7024	317	0.0992	0.7502	388	0.1014	0.8387	469	0.1334	0.8533
242	0.1114	0.6757	318	0.0992	0.7502	389	0.1014	0.8387	471	0.1334	0.8533
243	0.1114	0.6757	319	0.0992	0.7502	390	0.0984	0.8102	472	0.1430	0.8681
244	0.1114	0.6757	329	0.1114	0.8681	391	0.0984	0.8102	473	0.1430	0.8681
245	0.1076	0.6518	330	0.1114	0.8681	393	0.1185	0.8831	474	0.1430	0.8681
246	0.1076	0.6518	331	0.1114	0.8681	394	0.1185	0.8831	475	0.1114	0.6757
247	0.1076	0.6518	332	0.1056	0.8533	396	0.1334	0.5843	476	0.1114	0.6757
248	0.1311	0.7964	333	0.1056	0.8533	397	0.1334	0.5843	477	0.1114	0.6757
249	0.1311	0.7964	334	0.1056	0.8533	398	0.1334	0.5843	478	0.1334	0.8533
250	0.1311	0.7964	335	0.1014	0.8387	405	0.1405	0.7439	479	0.1334	0.8533
251	0.1369	0.8315	336	0.1014	0.8387	406	0.1405	0.7439	480	0.1334	0.8533
252	0.1369	0.8315	338	0.0990	0.8243	407	0.1405	0.7439	481	0.1204	0.7964
253	0.1369	0.8315	339	0.0990	0.8243	410	0.1185	0.8831	482	0.1204	0.7964
258	0.1334	0.8533	340	0.0990	0.8243	411	0.1185	0.8831	483	0.1204	0.7964
260	0.1266	0.8243	344	0.1481	0.7696	412	0.1185	0.8831	484	0.1098	0.7439
263	0.1204	0.7964	345	0.1481	0.7696	413	0.1430	0.6757	485	0.1098	0.7439
264	0.1204	0.7964	346	0.1481	0.7696	414	0.1430	0.6757	486	0.1098	0.7439
265	0.1204	0.7964	347	0.1430	0.6757	417	0.1381	0.6107	487	0.1023	0.6969
266	0.1148	0.7696	349	0.1430	0.6757	429	0.1311	0.7316	488	0.1023	0.6969
267	0.1148	0.7696	353	0.1405	0.8831	430	0.1311	0.7316	489	0.1023	0.6969
268	0.1148	0.7696	354	0.1405	0.8831	431	0.1224	0.6658	493	0.1381	0.8983
269	0.1098	0.7439	355	0.1405	0.8831	432	0.1224	0.6658	494	0.1381	0.8983
270	0.1098	0.7439	359	0.1381	0.8983	433	0.1224	0.6658	496	0.1381	0.8983
271	0.1098	0.7439	360	0.1381	0.8983	434	0.1148	0.6169	497	0.1224	0.8533
272	0.1056	0.7196	361	0.1381	0.8983	435	0.1148	0.6169	498	0.1224	0.8533
273	0.1056	0.7196	363	0.1299	0.8756	436	0.1148	0.6169	499	0.1224	0.8533
274	0.1056	0.7196	364	0.1299	0.8756	444	0.1481	0.8387	500	0.1098	0.8102
275	0.1023	0.6969	365	0.1299	0.8756	445	0.1481	0.8387	501	0.1098	0.8102
276	0.1023	0.6969	366	0.1224	0.8533	447	0.1334	0.6658	502	0.1098	0.8102
277	0.1023	0.6969	367	0.1224	0.8533	448	0.1334	0.6658	503	0.1014	0.7696
285	0.1224	0.8533	368	0.1224	0.8533	449	0.1334	0.6658	504	0.1014	0.7696
287	0.1157	0.8315	369	0.1098	0.8102	451	0.1266	0.6107	505	0.1014	0.7696
288	0.1157	0.8315	371	0.1098	0.8102	452	0.1266	0.6107	506	0.1266	0.8983
289	0.1157	0.8315	378	0.1266	0.8983	453	0.1266	0.6107	508	0.1266	0.8983
294	0.1050	0.7896	379	0.1266	0.8983	455	0.1405	0.8102	509	0.1114	0.8681

TABELA B.5 – Valores codificados das incertezas das medidas dos fluxos de produto e rejeito (cont.)

exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w	exp	σ_p	σ_w
510	0.1114	0.8681	553	0.1185	0.6390	593	0.1357	0.9137	645	0.1204	0.7964
511	0.1114	0.8681	554	0.1369	0.8315	594	0.1357	0.9137	646	0.1204	0.7964
512	0.1014	0.8387	555	0.1369	0.8315	595	0.1357	0.9137	674	0.1381	0.8983
513	0.1014	0.8387	556	0.1369	0.8315	596	0.1185	0.8831	675	0.1381	0.8983
514	0.1014	0.8387	557	0.1256	0.7630	597	0.1185	0.8831	676	0.1381	0.8983
517	0.0984	0.8102	558	0.1256	0.7630	598	0.1185	0.8831	678	0.1098	0.8102
518	0.1507	0.8243	559	0.1256	0.7630	599	0.1056	0.8533	679	0.1098	0.8102
519	0.1507	0.8243	560	0.1157	0.7024	600	0.1056	0.8533	680	0.1098	0.8102
520	0.1507	0.8243	561	0.1157	0.7024	601	0.1056	0.8533	681	0.1224	0.8533
521	0.1455	0.7196	562	0.1157	0.7024	602	0.0990	0.8243	682	0.1224	0.8533
522	0.1455	0.7196	563	0.1076	0.6518	603	0.0990	0.8243	683	0.1224	0.8533
523	0.1455	0.7196	564	0.1076	0.6518	604	0.0990	0.8243	684	0.1023	0.6969
524	0.1405	0.6390	565	0.1076	0.6518	605	0.1481	0.7696	685	0.1023	0.6969
525	0.1405	0.6390	566	0.1405	0.8831	606	0.1481	0.7696	686	0.1023	0.6969
526	0.1405	0.6390	567	0.1405	0.8831	607	0.1481	0.7696	687	0.1098	0.7439
527	0.1357	0.5922	568	0.1405	0.8831	608	0.1481	0.8387	688	0.1098	0.7439
528	0.1357	0.5922	569	0.1266	0.8243	611	0.1405	0.7439	693	0.1430	0.8681
529	0.1357	0.5922	570	0.1266	0.8243	612	0.1405	0.7439	694	0.1430	0.8681
530	0.1443	0.7896	571	0.1266	0.8243	613	0.1405	0.7439	695	0.1430	0.8681
531	0.1443	0.7896	572	0.1148	0.7696	617	0.1405	0.8102	697	0.0984	0.8102
532	0.1443	0.7896	573	0.1148	0.7696	618	0.1405	0.8102			
533	0.1369	0.7024	574	0.1148	0.7696	619	0.1405	0.8102			
534	0.1369	0.7024	575	0.1056	0.7196	620	0.1311	0.7316			
535	0.1369	0.7024	576	0.1056	0.7196	621	0.1311	0.7316			
536	0.1299	0.6349	577	0.1056	0.7196	622	0.1311	0.7316			
538	0.1299	0.6349	578	0.1299	0.8756	623	0.1481	0.8387			
539	0.1234	0.5939	579	0.1299	0.8756	624	0.1481	0.8387			
540	0.1234	0.5939	580	0.1299	0.8756	625	0.1481	0.8387			
541	0.1234	0.5939	581	0.1157	0.8315	626	0.1224	0.6658			
542	0.1455	0.8533	582	0.1157	0.8315	627	0.1224	0.6658			
543	0.1455	0.8533	583	0.1157	0.8315	628	0.1224	0.6682			
544	0.1455	0.8533	584	0.1050	0.7896	635	0.1204	0.7316			
545	0.1357	0.7696	585	0.1050	0.7896	636	0.1204	0.7316			
546	0.1357	0.7696	586	0.1050	0.7896	637	0.1204	0.7316			
547	0.1357	0.7696	587	0.0992	0.7502	638	0.1114	0.6757			
548	0.1266	0.6969	588	0.0992	0.7502	639	0.1114	0.6757			
549	0.1266	0.6969	589	0.0992	0.7502	640	0.1114	0.6757			
550	0.1266	0.6969	590	0.1050	0.7896	642	0.1334	0.8533			
551	0.1185	0.6390	591	0.1050	0.7896	643	0.1334	0.8533			
552	0.1185	0.6390	592	0.1050	0.7896	644	0.1204	0.7964			

TABELA B.6 – Valores codificados da variável de resposta, representada pelo poder de separação da ultracentrífuga

exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU
1	1.02	41	0.93	109	0.70	151	0.94	235	0.97	308	0.70
2	1.01	42	0.94	110	0.80	152	0.67	237	1.03	310	0.71
3	1.03	43	0.93	111	0.79	153	0.64	238	1.01	314	0.79
4	0.98	44	0.99	112	0.75	154	0.60	239	1.07	315	0.79
5	1.04	45	1.01	113	0.79	155	0.79	240	1.09	316	0.78
6	1.05	46	1.00	114	0.79	156	0.82	241	1.07	317	0.87
7	0.99	47	0.92	115	0.75	157	0.82	242	1.09	318	0.84
8	1.04	48	0.95	116	0.80	158	0.98	243	1.08	319	0.85
9	1.04	49	0.90	117	0.86	159	0.97	244	1.10	329	0.55
10	1.04	57	0.98	118	0.82	160	0.99	245	0.99	330	0.55
11	1.00	63	0.85	119	0.36	161	1.03	246	0.98	331	0.55
12	0.99	65	1.02	120	0.36	162	1.04	247	1.01	332	0.60
13	0.99	71	0.94	121	0.35	164	1.05	248	0.99	333	0.58
14	0.96	72	0.98	122	0.51	165	1.04	249	0.93	334	0.57
15	0.97	73	0.98	123	0.50	166	1.03	250	0.91	335	0.61
16	0.96	74	0.67	124	0.47	168	1.05	251	0.83	336	0.62
17	0.81	75	0.68	125	0.60	169	1.04	252	0.82	338	0.62
18	0.81	77	0.84	126	0.60	170	0.98	253	0.82	339	0.61
19	0.81	78	0.86	127	0.58	171	0.93	258	0.69	340	0.60
20	0.98	80	0.93	128	0.65	172	0.93	260	0.79	344	0.59
21	0.95	81	0.95	130	0.53	200	0.86	263	0.87	345	0.55
22	0.99	82	0.96	132	0.48	201	0.85	264	0.86	346	0.57
23	1.04	84	0.92	133	0.49	202	0.87	265	0.86	347	0.81
24	1.02	85	0.94	134	0.73	209	0.59	266	0.94	349	0.99
25	1.03	86	0.85	135	0.70	210	0.62	267	0.96	353	0.58
26	1.00	87	0.85	136	0.73	211	0.62	268	0.92	354	0.57
27	1.00	88	0.87	137	0.51	215	0.85	269	0.96	355	0.58
28	0.98	89	0.80	138	0.53	216	0.86	270	0.96	359	0.47
29	0.85	90	0.79	139	0.51	217	0.86	271	0.95	360	0.48
30	0.87	91	0.80	140	0.86	218	1.04	272	0.95	361	0.45
31	0.86	92	1.02	141	0.88	219	1.02	273	0.99	363	0.59
32	0.68	94	0.99	142	0.84	220	1.02	274	1.00	364	0.59
33	0.65	95	1.09	143	0.87	221	0.68	275	0.98	365	0.58
34	0.65	96	1.09	144	0.86	222	0.70	276	0.97	366	0.63
35	0.86	97	1.10	145	0.88	223	0.69	277	0.97	367	0.63
36	0.85	101	0.99	146	0.93	224	0.54	285	0.65	368	0.63
37	0.93	103	0.95	147	0.85	225	0.53	287	0.69	369	0.75
38	0.90	104	0.60	148	0.92	226	0.54	288	0.68	371	0.73
39	0.91	105	0.61	149	0.88	233	0.97	289	0.69	378	0.38
40	0.91	106	0.59	150	0.79	234	0.98	294	0.77	379	0.41

TABELA B.6 – Valores codificados da variável de resposta, representada pelo poder de separação da ultracentrífuga (cont.)

exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU	exp	δU
380	0.37	456	0.77	510	0.47	553	1.04	593	0.29	645	0.71
384	0.80	457	0.56	511	0.45	554	0.66	594	0.28	646	0.73
385	0.85	463	1.00	512	0.60	555	0.66	595	0.28	674	0.54
386	0.80	464	1.00	513	0.51	556	0.66	596	0.44	675	0.55
387	0.53	465	1.00	514	0.51	557	0.88	597	0.39	676	0.53
388	0.57	469	0.66	517	0.56	558	0.88	598	0.44	678	0.75
389	0.55	471	0.64	518	0.36	559	0.88	599	0.53	679	0.74
390	0.58	472	0.57	519	0.38	560	1.03	600	0.54	680	0.74
391	0.57	473	0.56	520	0.36	561	1.00	601	0.51	681	0.73
393	0.45	474	0.55	521	0.62	562	1.00	602	0.60	682	0.68
394	0.45	475	1.07	522	0.66	563	1.04	603	0.56	683	0.72
396	0.83	476	1.08	523	0.66	564	1.05	604	0.58	684	0.92
397	0.84	477	1.07	524	0.82	565	1.06	605	0.78	685	0.90
398	0.84	478	0.62	525	0.78	566	0.44	606	0.79	686	0.86
405	0.92	479	0.62	526	0.82	567	0.45	607	0.78	687	0.92
406	0.93	480	0.64	527	0.89	568	0.45	608	0.82	688	0.96
407	0.92	481	0.80	528	0.92	569	0.72	611	0.86	693	0.82
410	0.52	482	0.82	529	0.89	570	0.73	612	0.84	694	0.80
411	0.52	483	0.82	530	0.65	571	0.71	613	0.88	695	0.82
412	0.50	484	0.94	531	0.65	572	0.86	617	0.97	697	0.57
413	0.72	485	0.94	532	0.65	573	0.86	618	0.98		
414	0.80	486	0.92	533	0.88	574	0.87	619	1.00		
417	0.87	487	0.95	534	0.88	575	0.94	620	1.01		
429	1.02	488	0.95	535	0.89	576	0.93	621	1.00		
430	1.01	489	0.96	536	0.99	577	0.93	622	0.99		
431	1.10	493	0.39	538	0.94	578	0.48	623	0.83		
432	1.09	494	0.39	539	0.94	579	0.49	624	0.88		
433	1.13	496	0.39	540	0.94	580	0.48	625	0.87		
434	1.07	497	0.60	541	0.95	581	0.64	626	0.85		
435	1.07	498	0.58	542	0.49	582	0.66	627	0.87		
436	1.06	499	0.63	543	0.50	583	0.63	628	0.87		
444	0.54	500	0.74	544	0.50	584	0.86	635	0.76		
445	0.54	501	0.71	545	0.81	585	0.78	636	0.74		
447	1.00	502	0.72	546	0.82	586	0.78	637	0.79		
448	1.00	503	0.81	547	0.81	587	0.83	638	0.73		
449	1.04	504	0.79	548	1.01	588	0.83	639	0.74		
451	0.99	505	0.77	549	1.01	589	0.85	640	0.71		
452	0.99	506	0.37	550	1.02	590	0.74	642	0.62		
453	1.00	508	0.35	551	1.06	591	0.75	643	0.61		
455	0.78	509	0.46	552	1.04	592	0.75	644	0.70		

8.3 APÊNDICE C – Demonstração da solução da equação matricial de ajuste por mínimos quadrados

A Eq.(4.19) está inserida no problema matemático que consiste em achar a solução $\vec{X} = (X_1, \dots, X_I)$, por mínimos quadrados, para o seguinte conjunto de equações aproximadas que relacionam os resultados \vec{X} para uma série de quantidades disponíveis $\vec{Y} = (Y_1, \dots, Y_N)$, assumindo que exista a matriz de covariância que fornece as incertezas e suas correlações para \vec{Y} :

$$Y_1 = A_{11}X_1 + A_{12}X_2 + \dots + A_{1I}X_I$$

$$Y_K = A_{K1}X_1 + A_{K2}X_2 + \dots + A_{KI}X_I \quad (C.1)$$

$$Y_N = A_{N1}X_1 + A_{N2}X_2 + \dots + A_{NI}X_I$$

ou, em notação vetorial: $\vec{Y} \approx \vec{A} \cdot \vec{X}$, onde o método dos mínimos quadrados diz que um modo de encontrar a melhor solução possível para este problema é obter o vetor \vec{X} que minimiza o qui-quadrado, representado pela Eq.(C.2):

$$\chi^2 = (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X})^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X}) \geq 0 \quad (C.2)$$

As quantidades \vec{A} , \vec{Y} e \vec{V}^{-1} que aparecem na equação acima são de natureza fixa do problema. Somente \vec{X} é uma variável. Reescrevendo a Eq.(C.1) na forma:

$$(\chi^2)_{\vec{X}} = F(\vec{X}) = (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X})^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X}) \quad (C.3)$$

Se aumentarmos \vec{X} através de um incremento $d\vec{X}$ teremos:

$$(\chi^2)_{\vec{X}+d\vec{X}} = F(\vec{X} + d\vec{X}) = (\vec{Y} - \vec{A}(\vec{X} + d\vec{X}))^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Y} - \vec{A}(\vec{X} + d\vec{X})) \quad (C.4)$$

que por álgebra matricial permite chegar a:

$$F(\vec{X} + d\vec{X}) = (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X} - \vec{A} \cdot d\vec{X})^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X} - \vec{A} \cdot d\vec{X}) \quad (C.5)$$

Definindo por conveniência $\vec{Z} = \vec{Y} - \vec{A} \cdot \vec{X}$, temos:

$$F(\vec{X} + d\vec{X}) = (\vec{Z} - \vec{A} \cdot d\vec{X})^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Z} - \vec{A} \cdot d\vec{X}) \quad (C.6)$$

$$F(\vec{X} + d\vec{X}) = (\vec{Z}^T - (\vec{A} \cdot d\vec{X})^T) \cdot \vec{V}^{-1} \cdot (\vec{Z} - \vec{A} \cdot d\vec{X})$$

Lembrando que a multiplicação de matrizes não é comutativa:

$$F(\vec{X} + d\vec{X}) = (\vec{Z}^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot \vec{Z}) - (\vec{Z}^T \cdot \vec{V}^{-1} (\vec{A} \cdot d\vec{X})) + (\vec{A} \cdot d\vec{X})^T \cdot \vec{V}^{-1} \cdot \vec{Z} +$$

$$+ (\bar{A} \bullet d\bar{X})^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet (\bar{A} \bullet d\bar{X}). \quad (\text{C.7})$$

O terceiro termo do lado direito apresenta termo de 2ª ordem em $d\bar{X}$ e desse modo terá uma magnitude desprezível, quando $d\bar{X}$ se aproxima de zero, se comparado com os outros termos. O primeiro termo do lado direito já foi visto como sendo o $(\chi^2)_{\bar{X}}$ Eq.(C.3). Então a Eq.(C.7), se torna:

$$\begin{aligned} F(\bar{X} + d\bar{X}) - F(\bar{X}) &= -\left(\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1} (\bar{A} \bullet d\bar{X}) + (\bar{A} \bullet d\bar{X})^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet \bar{Z}\right) \\ &= -\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet (\bar{A} \bullet d\bar{X}) - (\bar{A} \bullet d\bar{X})^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet \bar{Z} \\ &= -\left(\left(\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1}\right) \bullet (\bar{A} \bullet d\bar{X})\right) - \left(\left(\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1}\right)^T \bullet (\bar{A} \bullet d\bar{X})\right)^T \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

Para se chegar a esse resultado, foram usadas duas leis da álgebra matricial:

- i) para quaisquer duas matrizes \bar{c}_1 e \bar{c}_2 :

$$(\bar{c}_1 \bullet \bar{c}_2)^T = \bar{c}_2^T \bullet \bar{c}_1^T$$

- ii) para nossa matriz covariância simétrica e não singular:

$$(\bar{V}^{-1})^T = (\bar{V}^T)^{-1} = \bar{V}^{-1}$$

Além do mais , a transposta de uma quantidade escalar é justamente a própria quantidade escalar e a Eq.(C.8) é uma equação escalar, de modo que:

$$F(\bar{X} + d\bar{X}) - F(\bar{X}) = -2\left(\left(\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1}\right) \bullet (\bar{A} \bullet d\bar{X})\right). \quad (\text{C.9})$$

Aplicando a definição de derivada de uma função:

$$d(\chi^2)_{\bar{X}} = d(F(\bar{X})) = -2\left(\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet \bar{A}\right) \bullet d\bar{X}. \quad (\text{C.10})$$

A quantidade χ^2 tem um mínimo quando seu diferencial é zero para pequenas variações $d\bar{X}$ em torno do mínimo. Portanto:

$$\frac{d(\chi^2)_{\bar{X}}}{d\bar{X}} = 0 \quad \rightarrow \quad \bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet \bar{A} = 0. \quad (\text{C.11})$$

Aplicando as regras de álgebra matricial dadas anteriormente, obtemos:

$$\bar{Z}^T \bullet \bar{V}^{-1} \bullet \bar{A} = \bar{Z}^T \bullet (\bar{V}^{-1} \bullet \bar{A}) = (\bar{V}^{-1} \bullet \bar{A}) \bullet \bar{Z}^T = \left((\bar{V}^{-1} \bullet \bar{A})^T\right)^T \bullet \bar{Z}^T = \left((\bar{V}^{-1} \bullet \bar{A})^T \bullet \bar{Z}\right)^T$$

Como a transposta de uma matriz simétrica é a própria matriz simétrica, vem que:

$$\vec{Z}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A} = (\bar{V}^{-1} \cdot \bar{A})^T \cdot \vec{Z} = (\bar{A} \cdot \bar{V}^{-1})^T \cdot \vec{Z} = \bar{A}^T \cdot (\bar{V}^{-1})^T \cdot \vec{Z} = \bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Z} = 0$$

pois $(\bar{V}^{-1})^T = (\bar{V}^T)^{-1} = \bar{V}^{-1}$.

Desse modo, $\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Z} = 0$, substituindo $\vec{Z} = \vec{Y} - \bar{A} \cdot \vec{X}$,

$$\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot (\vec{Y} - \bar{A} \cdot \vec{X}) = 0,$$

$$\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Y} - \bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A} \cdot \vec{X} = 0,$$

$$\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Y} = (\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A}) \cdot \vec{X}.$$

A matriz $(\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A})$ é uma matriz não singular, com dimensão $I \times I$; portanto a sua inversa existe e iremos denominá-la de

$$\bar{C} = (\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A})^{-1},$$

de modo que a solução desejada por mínimos quadrados para \vec{X} será:

$$(\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A})^{-1} \cdot (\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Y}) = (\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A})^{-1} \cdot (\bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \bar{A}) \cdot \vec{X}.$$

O termo que multiplica \vec{X} é a matriz identidade, portanto:

$$\vec{X} = \bar{C} \cdot \bar{A}^T \cdot \bar{V}^{-1} \cdot \vec{Y}$$

que é a solução procurada.

8.4 APÊNDICE D – Listagem dos Programas em FORTRAN

```

PROGRAM MATCOVA160
C
C  CONSTRUÇÃO DE UMA MATRIZ DE COVARIÂNCIA MEDIANTE
C  A ENTRADA DE TODAS AS FONTES DE ERROS DA VARIÁVEIS
C  INDEPENDENTES
C
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION V(480,480),Q(480,480),E(480,480),ER(480),Y(480)
      DIMENSION A(480,30), X1(480,480),X2(480,480)
      COMMON V,Q,E,ER,Y,A,X1,X2
      WRITE(*,9998)
9998 FORMAT(1X,'MATCOV160 PROGRAM')
      PAUSE
C
C  ARQUIVO DE ENTRADA,"MATCOV160.F90", QUE CONTÉM: O NUMERO
C  DE PONTOS
C  ANALISADOS, O NÚMERO DE ATRIBUTOS, OS VETORES DE CADA
C  ATRIBUTO
C  DOS ERROS DAS VARIÁVEIS INDEPENDENTES E AS RESPECTIVAS
C  MATRIZES DE CORRELAÇÃO DE CADA ATRIBUTO. CONTÉM AINDA A
C  MATRIZ PROJETO E
C  O VETOR DA VARIÁVEL DEPENDENTE.
C
      OPEN(6,FILE='COC2.F90 ',STATUS='UNKNOWN')
      WRITE(*,9997)
9997 FORMAT(1X, 'DATA INPUT: ')
      OPEN(UNIT=3,FILE='MATCOVA160.F90 ',STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=1,FILE='MATPROJ160.F90 ',STATUS='OLD')
      OPEN(UNIT=2,FILE='MATCORR160.F90 ',STATUS='OLD')
1      READ(3,*) N,LL
      WRITE(*,*) N,LL
      WRITE(6,*)
2      FORMAT(16I5)
      DO 3 I=1,N
3          READ(3,*) (E(I,L),L=1,LL)
      DO 7 I=1,N
7              READ(1,*) Y(I)
                WRITE(*,*) Y(1),Y(460)
4      FORMAT(7E10.4)
      WRITE(6,9996)
9996 FORMAT(' VETORES DE CADA COMPONENTE DO ERRO')
      WRITE(6,*)
      WRITE(6,9994)
9994 FORMAT('      II=1','      II=2','      II=3',
3          '      II=4','      II=5')
      WRITE(6,*)
      DO 9995 I=1,N

```

```

9995      WRITE(6,*) (E(I,L),L=1,LL)
C
C  INICIALIZAÇÃO DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA
C
      DO 10 I=1,N
          DO 10 J=1,I
10         V(I,J)=0.0
C
C  INTRODUÇÃO DE CADA COMPONENTE DO ERRO COM A
C  RESPECTIVA MATRIZ DE CORRELAÇÃO
C
C  ENTRADA DAS MATRIZES DE CORRELAÇÃO DE CADA ATRIBUTO
C
      DO 1000 L=1,LL
          DO 202 I=1,N
202         READ(2,*) (Q(I,J),J=1,I)
C
C  CÁLCULO DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA
C
      DO 54 I=1,N
          DO 54 J=1,I
54         V(I,J)=V(I,J)+Q(I,J)*E(I,L)*E(J,L)
1000      CONTINUE
          READ(1,*)M
          WRITE(*,*)M
          DO 203 I=1,N
203         READ(1,*) (A(I,J),J=1,M)
C
C  ARMAZENAGEM DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA NUM ARQUIVO QUE
CONTÉM
C  AINDA O VETOR DA VARIÁVEL DEPENDENTE, A MATRIZ PROJETO E
O NÚMERO DE
C  PONTOS ANALISADOS. ESTE ARQUIVO, "COC4.F90", SERÁ ENTRADA
PARA O PROGRAMA
C  "LSMOD" QUE AJUSTA OS PONTOS A UMA CURVA PELO MMQ
COM MATRIZES DE COVARIÂNCIA.
C
      OPEN(5,FILE='RESCOVA.F90',STATUS='UNKNOWN')
      WRITE(*,98)
98      FORMAT(1X,'NUMERO DE PONTOS ANALISADOS: ')
      WRITE(*,2) N
      WRITE(*,97)
97      FORMAT(1X,'A MATRIZ DE COVARIANCIA ESTÁ ARMAZENADA NO
3      ARQUIVO RESCOVA.F90 ')
C
C  MONTAGEM FINAL DA MATRIZ DE COVARIÂNCIA E ORDENAÇÃO DO
ARQUIVO DE SAÍDA
C
C  MAUX=10
C  WRITE(*,*) MAUX

```

```

        WRITE(5,*)N,M
        WRITE(5,*)(Y(I),I=1,N)
            DO 101 I=1,N
101    WRITE(5,*) (V(I,J),J=1,I)
115    FORMAT(1X,50E14.6)
            DO 102 I=1,N
102    WRITE(5,*)(A(I,J), J=1,M)
        STOP
    END

```

PROGRAM MINQUAD

```

! ESTE PROGRAMA É UTILIZADO PARA AJUSTAR N PONTOS
! EXPERIMENTAIS A UMA CURVA
! ATRAVÉS DO MÉTODO DOS MÍNIMOS QUADRADOS COM MATRIZES
! DE COVARIÂNCIA. TEM COMO
! ENTRADA UM ARQUIVO TIPO TEXTO, COM N PONTOS, M PARÂMETROS,
! A MATRIZ DE COVARIÂNCIA
! IN X N, O VETOR CONTENDO OS VALORES DA VARIÁVEL DEPENDENTE Y
! E A MATRIZ PROJETO N X M
!
    IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
    DIMENSION Y(480),EY(480),CY(480,480),VY(480,480),VYI(480,480),
+P(30),EP(30),VP(30,30),CP(30,30),VPI(30,30),A(480,30),QN(480),
+ WN(480,481),QM(30),WM(30,31),TVALOR(30)
!
! INICIALIZAÇÃO E CONTROLE
!
    WRITE(*,1)
1    FORMAT('MMQCOV'/)
!    WRITE(*,2)
2    FORMAT('ENTER INPUT FILE NAME (UNIT 4)'/)
    OPEN(4,FILE='RESCOVA.F90',STATUS='OLD')
!    WRITE(*,3)
3    FORMAT('ENTER OUTPUT FILE NAME (UNIT 5)'/)
    OPEN(5,FILE='EQUOBT.F90',STATUS='OLD')
4    FORMAT('ENTER OUTPUT FILE NAME (UNIT 6)'/)
!    OPEN(6,FILE='COC45CORR.F90',STATUS='OLD')
!
!          LEITURA DOS DADOS A PARTIR DO ARQUIVO (UNIT 4)
!
    READ(4,*) N,M
10   FORMAT(16I5)
    WRITE(*,*) N,M
    WRITE(6,11)
11   FORMAT('NÚMERO DE DADOS EXPERIEMENTAIS')

```

```

WRITE(6,10) N
WRITE(6,*)
WRITE(6,12)
12 FORMAT('NÚMERO DE PARÂMETROS')
WRITE(6,10) M
READ(4,*) (Y(I),I=1,N)
WRITE(*,*)
WRITE(6,13)
13 FORMAT('VETOR DOS VALORES DA VARIÁVEL DEPENDENTE VY')
WRITE(6,*) (Y(I),I=1,N)
DO 17 I=1,N
17 READ(4,*) (VY(I,J),J=1,I)
WRITE(6,*)
WRITE(6,14)
14 FORMAT('MATRIZ DE COVARIANCIA DOS DADOS EXPERIMENTAIS VY')
DO 21 I=1,N
21 WRITE(6,*)(VY(I,J),J=1,I)
DO 18 I=1,N
DO 18 J=1,I
18 VY(J,I)=VY(I,J)
DO 19 I=1,N
19 READ(4,*) (A(I,J),J=1,M)
WRITE(6,*)
WRITE(6,15)
15 FORMAT('MATRIZ PROJETO A')
DO 22 I=1,N
22 WRITE(6,*) (A(I,J),J=1,M)
!
!           ANÁLISE POR MÍNIMOS QUADRADOS
!
DO 1004 I=1,N
1004 EY(I)=DSQRT(VY(I,I))
DO 1005 I=1,N
DO 1005 J=1,N
1005 CY(I,J)=VY(I,J)/EY(I)/EY(J)
CALL MATINV(QN,VY,VYI,WN,NTEST,N,480,481)
IF(NTEST.EQ.1) GO TO 1009
1007 WRITE(*,1008)
1008 FORMAT(' NO INV/')
STOP
1009 DO 1010 I=1,M
DO 1010 J=1,M
VPI(I,J)=0.0DO
DO 1010 K2=1,N
DO 1010 K1=1,N
1010 VPI(I,J)=VPI(I,J)+A(K2,I)*VYI(K2,K1)*A(K1,J)
WRITE(6,*) ' MATRIZECA'
DO 1020 I=1,M
1020 WRITE(6,*) (VPI(I,J), J=1,M)
CALL MATINV(QM,VPI,VP,WM,NTEST,M,30,31)

```

```

IF(NTEST.EQ.0) GOTO 1007
DO 1011 I=1,M
  P(I)=0.0D0
  DO 1011 K3=1,M
    DO 1011 K2=1,N
      DO 1011 K1=1,N
1011 P(I)=P(I)+VP(I,K3)*A(K2,K3)*VYI(K2,K1)*Y(K1)
WRITE(6,*)
WRITE(6,16)
16  FORMAT('VETOR DOS PARAMETROS AJUSTADOS P')
WRITE(6,*)(p(i),i=1,m)
DO 1012 I=1,M
  WRITE(*,*) I,VP(I,I)
  EP(I)=DSQRT(VP(I,I))
1012 WRITE(*,*) I,EP(I)
DO 1055 i=1,m
1055 TVALOR(I)=P(I)/EP(I)
DO 1013 I=1,M
  DO 1013 J=1,M
1013 CP(I,J)=VP(I,J)/EP(I)/EP(J)
DO 1014 I=1,N
  QN(I)=Y(I)
  DO 1014 K1=1,M
1014 QN(I)=QN(I)-A(I,K1)*P(K1)
CHI2=0.0D0
DO 1015 K2=1,N
  DO 1015 K1=1,N
1015 CHI2=CHI2+QN(K2)*VYI(K2,K1)*QN(K1)
CHI2NM=CHI2/FLOAT(N-M)
!
!       PRINT OUTPUT TO FILE (UNIT 5)
!
WRITE(5,40)
40  FORMAT(' Y')
WRITE(5,*) (Y(I),I=1,N)
WRITE(5,410)
410  FORMAT('EY')
WRITE(5,*) (EY(I),I=1,N)
WRITE(5,411)
411  FORMAT(' VY')
DO 412 I=1,N
412  WRITE(5,*) (VY(I,J),J=1,I)
WRITE(5,43)
43  FORMAT(' CY')
DO 44 I=1,N
44  WRITE(5,*) (CY(I,J),J=1,I)
WRITE(5,441)
441  FORMAT(' A')
DO 442 I=1,N
442  WRITE(5,*) (A(I,J),J=1,M)

```

```

WRITE(5,45)
45  FORMAT(' P')
WRITE(5,*) (P(I),I=1,M)
WRITE(5,451)
451  FORMAT(' EP')
WRITE(5,*) (EP(I),I=1,M)
WRITE(5,452)
452  FORMAT(' VP')
DO 453 I=1,M
453  WRITE(5,*) (VP(I,J),J=1,I)
WRITE(5,47)
47  FORMAT(' CP')
DO 48 I=1,M
48  WRITE(5,*) (CP(I,J),J=1,I)
WRITE(5,49)
49  FORMAT(' CHI2,CHI2NM')
WRITE(5,*) CHI2,CHI2NM
WRITE(*,*) 'CHI2=',CHI2, 'CHI2NM=',CHI2NM
WRITE(5,46)
46  FORMAT(' P')
WRITE(5,*) (P(I),I=1,M)
WRITE(5,454)
454  FORMAT(' EP')
WRITE(5,*) (EP(I),I=1,M)
WRITE(*,*) 'TVALOR'
write(*,*) (TVALOR(I),I=1,M)
WRITE(5,*)
WRITE(5,*) 'TVALUE'
write(5,*)(TVALOR(I),I=1,M)
WRITE(*,*) ' O AJUSTE OBTIDO ESTÁ NO ARQUIVO EQUOBT.F90'
STOP
END
SUBROUTINE MATINV(B,D,Q,E,NTEST,NS,NARA,NMAX)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
DIMENSION B(NARA),D(NARA,NARA),Q(NARA,NARA),E(NARA,NMAX)
IP=NS+1
BIG=0.0D0
DO 555 I=1,NS
DO 555 J=1,NS
ABD=DABS(D(I,J))
IF(ABD.GT.BIG) THEN
554  BIG=ABD
ENDIF
555  CONTINUE
FACT=DSQRT(BIG)
I=1
1  IF(I.LE.NS) THEN
2    J=1
3    IF(J.LE.NS) THEN
4      K=1

```

```

5     IF(K.LE.NS) THEN
6       E(J,K)=D(K,J)/FACT
        K=K+1
        GO TO 5
      ENDIF
7     J=J+1
      GO TO 3
    ENDIF
8     L=1
9     IF(L.LE.NS) THEN
10      IF(L.EQ.I) GOTO 13
11      E(L,IP)=0.0D0
12      L=L+1
        GOTO 9
13      E(L,IP)=1.0D0
        GOTO 12
    ENDIF
14     CALL JORDAN(B,E,NTEST,NS,NARA,NMAX)
    IF(NTEST.LE.0) THEN
15       RETURN
    ENDIF
16     M=1
17     IF(M.LE.NS) THEN
18       Q(I,M)=E(M,IP)/FACT
        M=M+1
        GOTO 17
    ENDIF
19     I=I+1
      GOTO 1
    ENDIF
20    RETURN
      END
      SUBROUTINE JORDAN(B,C,INDEX,N,NARA,NMAX)

```

```

!           SUBROUTINE JORDAN SOLVES A SYSTEM OF LINEAR
NONHOMOGENEOUS
!           EQUATIONS BY THE METHOD OF GAUSS-JORDAN
REDUCTION, IF THE SYSTEM
!           FAILS TO HAVE A SOLUTION, A FLAG IS SET WHICH SIGNALS
THE MAIN

```

```

!           PROGRAM
      IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
      DIMENSION B(NARA),C(NARA,NMAX)
      K=1
1     IF(K.LE.N) THEN
2       IF(C(K,K).EQ.0) THEN
3         L=K+1
4         IF(L.GT.N) GOTO 21
5         IF(C(L,K).EQ.0) THEN
6           L=L+1

```

```
      GO TO 4
7     ENDIF
      M=1
8     IF(M-N-1.GT.0) GOTO 2
9     B(M)=C(K,M)
      C(K,M)=C(L,M)
      C(L,M)=B(M)
      M=M+1
      GO TO 8
    ENDIF
10    J=N+1
11    IF(J.GE.K) THEN
12    C(K,J)=C(K,J)/C(K,K)
      J=J-1
      GOTO 11
    ENDIF
13    I=1
14    IF(I.GT.N) THEN
15    K=K+1
      GOTO 1
    ENDIF
16    IF(I.NE.K) GOTO 18
17    I=I+1
      GOTO 14
18    II=N+1
19    IF(II.LT.K) GOTO 17
20    C(I,II)=C(I,II)-C(I,K)*C(K,II)
      II=II-1
      GOTO 19
21    INDEX=0
    ELSE
22    INDEX=1
    ENDIF
23    RETURN
      END
```