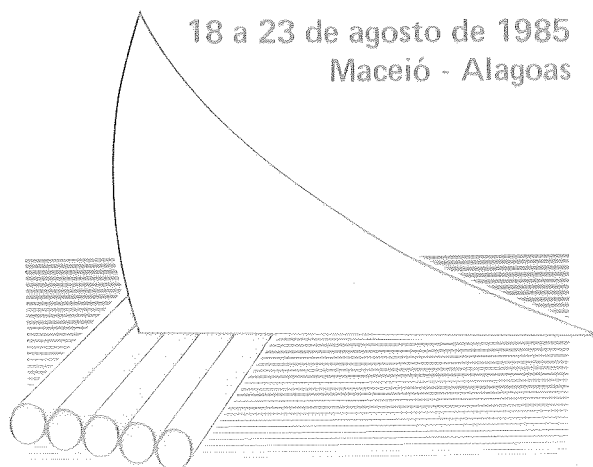


18 a 23 de agosto de 1985
Maceió - Alagoas



ABES - ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENGENHARIA SANITÁRIA

13^o Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária Ambiental

3

AJUSTE DE DADOS EXPERIMENTAIS DE MATERIAL PARTICULADO EM IMPACTADORES PELA FUNÇÃO SPLINE

ARQUIVO TÉCNICO

8210
T575a
014222

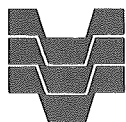


04482



014222

CETESB



CETESB

Diretor Presidente: Werner Eugênio Zulauf. **Diretor Financeiro:** Paulo Bezerril Junior. **Diretor Administrativo:** Antonio Alves de Almeida. **Diretor de Engenharia:** Nelson Mansour Nabhan. **Diretor de Controle:** Nelson Vieira de Vasconcelos. **Diretor de Planejamento Ambiental:** Fredmar Corrêa. **Diretor de Pesquisa:** Samuel Murgel Branco.

8210
T575a
014222

ESCRITÓRIO CENTRAL

Av. Prof. Frederico Hermann Jr., 345 - Alto de Pinheiros
São Paulo - CEP 05459 - Telefone: (DDD 011) 210-1100
Telex (011) 222-46 - CTS - BR

UNIDADES REGIONAIS E ESCRITÓRIOS

● Estado de São Paulo

Araçatuba: Rua Silva Jardim, 906
Fone: (0186) 23.6838 - CEP 16.100
Araraquara: Av. Espanha, 188
Fone (0162) 32.2211 - CEP 14.800
Bauru: Rua Gerson França, 11-60
Fone: (0142) 23.8466 - CEP 17.100
Campinas: Rua São Carlos, 287
Fone: (0192) 32.3366 - CEP 13.100
Cubatão: Rua Assembléia de Deus, 39 Salas 405 e 407
Fone: (0132) 61.1660 e 611301 - CEP 11.500
Franca: Av. Champagnat, 1808
Fone: (016) 723.9700 - CEP 14.400
Guarulhos: Rua Brás Cubas, 95
Fone: (011) 209.8413 - CEP 07.000
Ipiranga: Rua Caramuru, 573
Fone: (011) 275.7102 - CEP 04138
Marília: Av. Sampaio Vidal, 106
Fone: (0144) 33.8879, 33.8521, 33.8733 - CEP 17.500
Mogi das Cruzes: Rua Prof. Floriano de Melo, 330
Fone: (011) 469.3490 - CEP 08.700
Novo Horizonte: Av. da Saudade, s/n
Fone: (0175) 42.1950 - CEP 14.960
Osasco: Rua Nathanael Titto Salmon, 268
Fone: (011) 801.9736 - CEP 06.000
Piracicaba: Rua Moraes Barros, 264
Fone: (0194) 34.5132 - CEP 13.400
Presidente Prudente: Rua Siqueira Campos, 699
Fone: (0182) 22.1044 - CEP: 19.100
Ribeirão Preto: Rua Amador Bueno, 1294/1302
Fone: (016) 634.6044, 634.4536, 625.9500
- CEP 14.100
Santana: Av. Gal. Ataliba Leonel, 379
Fone: (011) 267.7562 - CEP 02.033
Santos: Rua Itapura de Miranda, 158
Fone: (0132) 33.7127, 32.9550 - CEP 11.100
Santo André: Rua Juquiá, 555
Fone: (011) 444.3519, 444.5767 - CEP.: 09.000
São Bernardo do Campo: Av. Brig. Faria Lima, 360
Fone: (011) 443.4188 - CEP 09700
Sorocaba: Av. Dr. Eugênio Salermo, 157
Fone: (0152) 31.4877, 312065 - CEP 12.100
Tatuapé: Rua Henrique Setório, 221
Fone: (011) 217.7505 - CEP 03.066
Taubaté: Rua Itambé, 38
Fone: (0122) 32.4829, 324900, 32.4867 - CEP 12.100

● Outros Estados

Florianópolis - SC

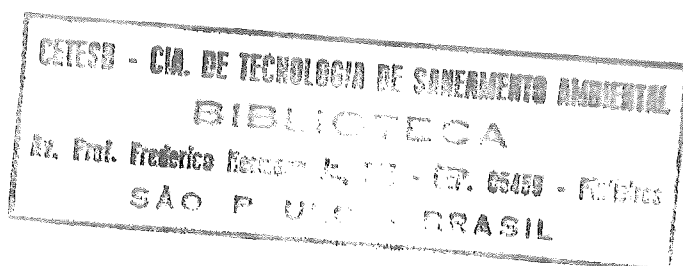
Rua João Pinto, 6 - 2º andar - s/203
Fone: (0482) 22.7690 - CEP 88.000

Recife - PE

Rua das Fronteiras, 160
Fone: (081) 222.1013 - CEP 50.000

AJUSTE DE DADOS EXPERIMENTAIS DE MATERIAL PARTICULADO EM IMPACTADORES PELA FUNÇÃO SPLINE

Manoel Paulo de Toledo
Eng.^o Mecânico e de Segurança
GERÊNCIA DE TECNOLOGIA DO AR



INTRODUÇÃO

Em poluição ambiental, com frequência se encontram experimentos que se repetidos diversas vezes apresentam variações de um para outro experimento.

Essas variações, além de normais, são até esperadas, uma vez que resultam de uma soma-tória de desvios devidos à calibração dos vários instrumentos; aos erros do operador; a diferenças entre instrumentos utilizados em diferentes amostragens e até a condições climáticas tais como temperatura, pressão, umidade, etc.

A amostragem de material particulado em chaminés é feita, quando se deseja conhecer a distribuição de tamanho de partículas, através de um equipamento conhecido como Impactador, Figura 1, que separa as partículas coletadas por tamanho.

Uma vez obtidos os diversos tamanhos de partícula associados às respectivas frequências, constrói-se sobre eles, uma curva, através do uso de uma curva francesa.

Para o traçado matemático dessa curva foram experimentadas diversas técnicas e a que se mostrou mais vantajosa foi a técnica da função "Spline", conforme citação contida em (1), cujo método, apresentado neste trabalho, é o correspondente matemático da curva francesa do desenhista, com a vantagem de poder ser utilizado por computador e traçador de gráficos e poder reproduzir a curva exatamente igual, quantas vezes forem necessárias.

OBJETIVO

Este trabalho se propõe a apresentar um método para o traçado de curvas suaves e exatas por pontos discretos obtidos experimentalmente.

DEFINIÇÃO DA FUNÇÃO "SPLINE"

A função "Spline" é um conjunto de polinômios, cada um dos quais representativo de um subconjunto do universo de dados experimentais.

CLASS	8210
AUTOR	7575a
TOMBO	14222

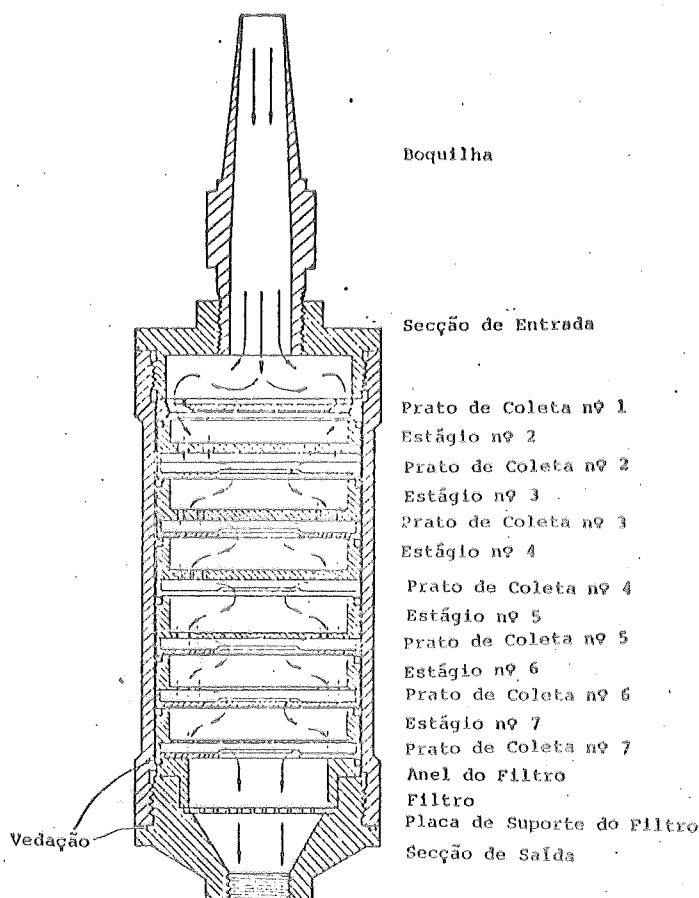


FIGURA 1 - Impactador tipo Cascata - Universidade de Washington - Mark 3

Essa função tem como característica a continuidade, tanto da própria função, quanto da sua primeira e segunda derivadas.

No caso particular da análise de dados obtidos por impactadores a função de interesse é a função "Spline" natural de terceira ordem (2), que é um conjunto de polinômios cúbico com propriedades de continuidade citadas acima e com a segunda derivada nula no primeiro e no último ponto experimental ou seja no maior e no menor diâmetro de partícula existente na amostra analisada. Essa função será chamada de agora em diante, neste trabalho, de "Spline".

Algumas propriedades da função de particular interesse são :

- 1) Se $F(x)$ é uma função contínua, com a primeira e segunda derivadas também contínuas então, a função "Spline" $S(x)$ que fornece os valores $F(x_i)$ para $a \leq x_i \leq b$, em cada ponto x_i obtido experimentalmente, minimiza a integral :

$$\int_a^b (F''(x) - S''(x))^2 dx \quad (2)$$

- 2) Dentre as funções $y(x)$ com primeira e segunda derivadas contínuas e que reproduze $F(x)$ nos pontos experimentais, a função "Spline" minimiza a integral :

$$\int_a^b y''(x)^2 dx \quad (2)$$

- 3) Se $Z(x)$ com primeira e segunda derivadas contínuas, mas que não fornece $F(x_i)$ para todos os x_i obtidos experimentalmente, pode ser reduzida, a uma função que forneça os valores $F(x_i)$, pela adição do "Spline" $w(x)$ tal que $Z + w = F(x_i)$ nos pontos experimentais (2).

- 4) Se o número de pontos no intervalo tender a um valor tal que $(x_i - x_{i-1})$ tenda zero, então a função "Spline" e sua primeira derivada, respectivamente $S(x)$ e $S'(x)$ convergem uniformemente para $F(x)$ e $F'(x)$. (2)

Com estas propriedades é possível estabelecer as equações que descreverão o comportamento dos dados obtidos, através da seguinte fórmula :

$$\frac{\ell_k}{6} M_{k-1} + \frac{\ell_k + \ell_{k+1}}{3} M_k + \frac{\ell_{k+1}}{6} M_{k+1} = \frac{F(x_{k+1}) - F(x_k)}{\ell_{k+1}} - \frac{F(x_k) - F(x_{k-1}))}{\ell_k} \quad (2)$$

onde :

$$\ell_k = x_k - x_{k-1} ;$$

$$M_k = S''(x_k) ;$$

$$M_1 = M_N = 0$$

$$K = 2, N \text{ e}$$

$$x_1 < x_2 < \dots < x_N$$

Um programa para resolver a equação acima, através de um processo iterativo, é apresentado neste trabalho juntamente com um exemplo.

O significado geométrico do cálculo da função "Spline", pode ser melhor visualizado através da Figura 2.

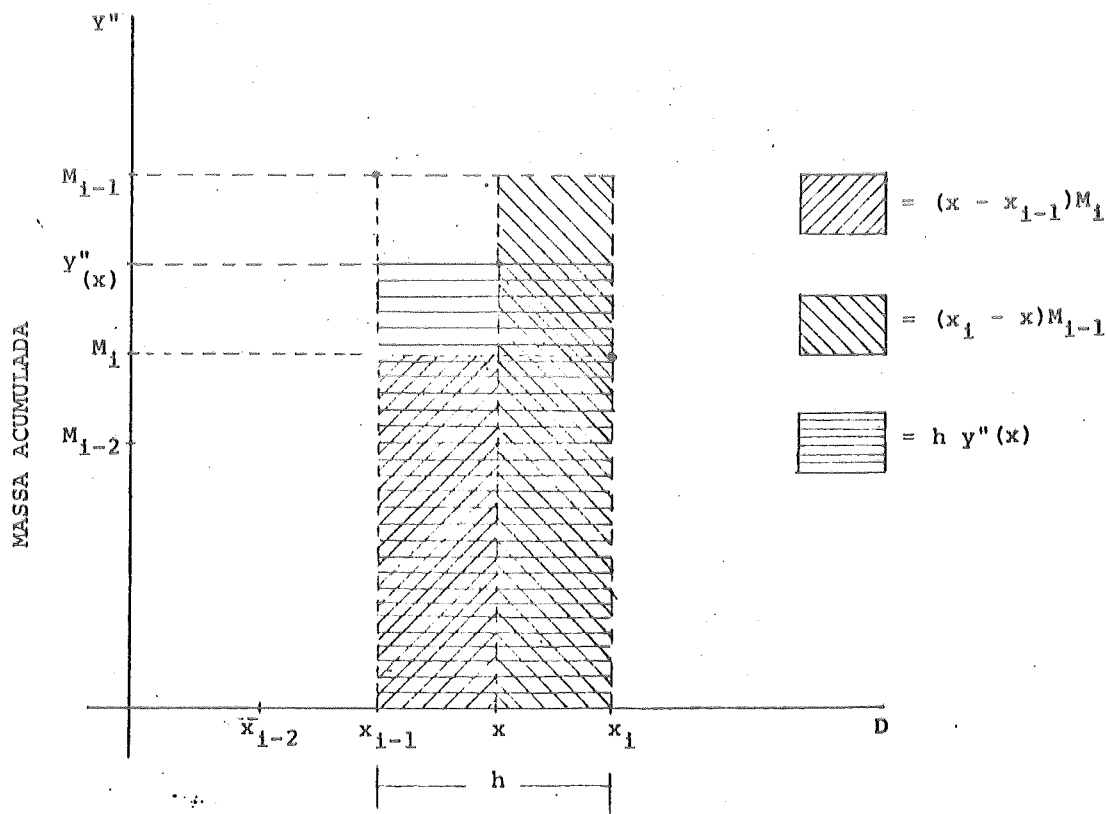


FIGURA 2 - Significado geométrico do ajuste da função "Spline"

A fórmula seguinte, para o cálculo da derivada da função "Spline" :

$$h y''(x) = (x - x_{i-1})M_i + (x_i - x)M_{i-1} \quad (3)$$

$$x \in (x_{i-1}, x_i)$$

onde:

$$h = x_i - x_{i-1}$$

$$M_i = \text{derivada segunda no ponto } x_i,$$

observada, em conjunto com a figura 2, mostra que a função y'' , será uma média ponderada entre os valores de y'' no ponto anterior e no ponto posterior ao ponto x escolhido, como mostra a área achurada horizontalmente na figura citada.

Vê-se portanto que o valor dessa função será um valor médio entre valores vizinhos, esta característica faz com que a função seja resultado de uma inter-relação entre todos os pontos, mais do que simplesmente uma função ajustada ponto a ponto. Por essa razão erros em um ponto afetam seus vizinhos, mas seu efeito dilui-se a medida que se afasta do ponto considerado. Por outro lado a correção desse ponto não afetará tanto os pontos distantes, o que leva à conclusão de que a mudança de um valor não obriga à troca de toda a equação do ajuste, mas simplesmente da secção próxima ao ponto modificado, contrariamente a outras formas de ajuste que se modificam totalmente quando um valor da função se altera.

Outras características da função "Spline" ligadas às propriedades anteriormente citadas são a suavidade do ajuste, garantida pela propriedade número dois; o comportamento da curva com relação aos pontos mais distantes, comentado em outro parágrafo e justificado pela quarta propriedade e a boa aproximação, garantida pelas propriedades primeira e terceira.

Para a construção de gráficos do tipo frequência acumulada em função do tamanho de partícula, há necessidade da imposição de condições, tais como : 1ª a existência de tangentes horizontais para tamanhos de partícula maiores que o maior tamanho ou para tamanhos de partícula menores que o menor tamanho e 2ª a função deve ser monotônica crescente. Estas duas condições garantem a forma da curva.

APLICABILIDADE DA FUNÇÃO "SPLINE"

A função "Spline" é a curva mais suave e que melhor interpola os valores experimentais obtidos (2), fato que torna seu campo de aplicação bastante vasto. A característica de interpolação dos dados traduz-se pela exatidão da função. Logicamente quando se tem um ajuste com exatidão, é melhor aplicá-lo a dados com pequenos erros pois, um experimento com erros grosseiros produz resultados grosseiros com o mais perfeito dos ajustes e o inverso, um experimento, com erros muito pequenos, produz resultados grosseiros, pela aplicação de um ajuste grosseiro, ou seja, este método por sua característica de exatidão, é melhor aproveitado, quando aplicado a trabalhos onde os cuidados com o planejamento do experimento e com o controle das variáveis foi bem executado, como em trabalhos de laboratório.

Dadas as boas características de ajuste, a função "Spline" deve ser usada quando se desconhece a forma da função representativa dos dados.

Como as características da exatidão da função se aplicam a sua derivada, (2), se acon-

selha seu uso, quando se deseja conhecer taxas de variação ou seja, (dy/dx) .

Em resumo, a função "Spline" aplica-se à geração de curvas contínuas, através de pontos experimentais discretos, onde se deseje suavidade e exatidão de ajuste da função, bem como de sua derivada.

COMO ENCONTRAR A FUNÇÃO "SPLINE"

Dada uma série de pontos (x_i, y_i) Figura 3, com x_i , em escala linear ou não, ordenado de forma estritamente crescente, com i natural qualquer; (normalmente entre sete e dez para impactadores), procede-se, como a seguir, para a obtenção da curva "Spline", representativa dos (x_i, y_i) (1).

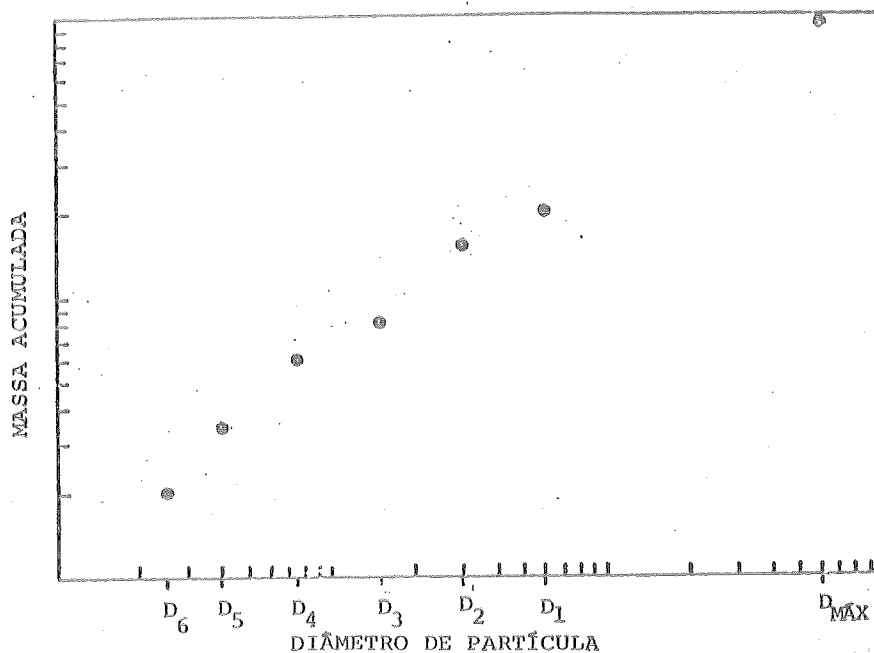


FIGURA 3 - Distribuição cumulativa - dados experimentais

Ajusta-se uma parábola por 3 pontos sucessivos, entre os dois primeiros interpolam-se 3 outros pontos equiespaçados, Figura 4. Repete-se este processo para 3 outros pontos sucessivos, começando-se pelo 2º ponto dos três anteriormente utilizados e repete-se o processo para todos os conjuntos de 3 pontos sucessivos, Figuras 5 e 6.

Deve ser feita uma verificação da existência de derivada primeira negativa, pois em se tratando de gráfico de frequência acumulada essa derivada deve ser positiva. Caso ocorra em qualquer intervalo exceto no primeiro, uma derivada negativa, deve-se substituir nesse intervalo a parábola por uma reta. Se a derivada negativa ocorrer no primeiro intervalo escolhe-se um diâmetro fictício dado por :

$$D_f = \frac{D_n^2}{D_{n-1}}$$

onde:

D_f = diâmetro fictício

D_n = diâmetro do primeiro ponto

D_{n-1} = diâmetro do segundo ponto

e atribui-se a D_f a frequência correspondente a D_n . A parábola correspondente deve passar por D_f , D_n e D_{n-1} .

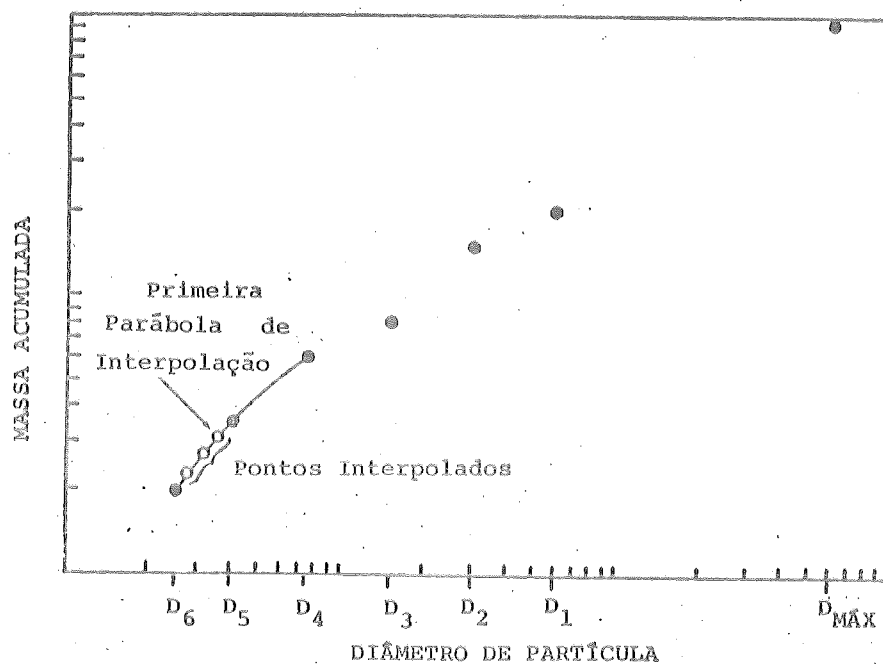


FIGURA 4 - Início do desenvolvimento de pontos interpolados
(Pontos cheios são experimentais - círculos são pontos gerados matematicamente)

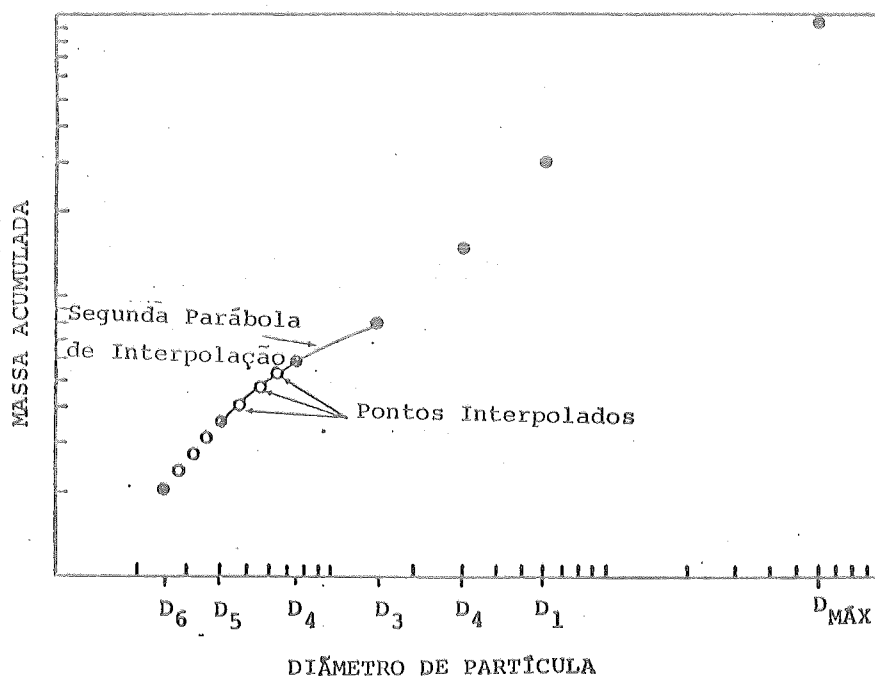


FIGURA 5 - Continuação da geração de pontos interpolados.

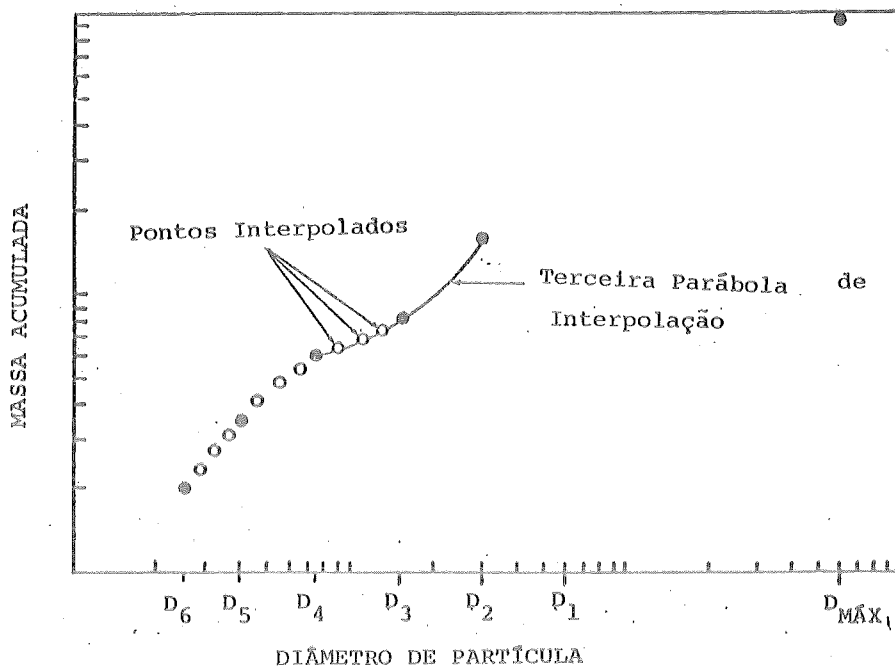


FIGURA 6 - Continuação da geração de pontos interpolados

Para os últimos 3 pontos o procedimento é ligeiramente alterado. Interpola-se uma parábola entre D_{max} , D_1 e D_2 e geram-se dois pontos acima de D_1 com o mesmo espaçamento existente entre D_1 e D_2 . Figura 7, esses pontos são usados para a obtenção da curva final até D_1 . Além desses pontos uma série de outros pontos, entre D_1 e D_{max} , são extrapolados, acima de D_1 , através de uma hipérbole, em lugar de parábola, Figura 8, para facilitar a concordância com a tangente horizontal em D_{max} . Esta extrapolação tem dado bons resultados práticos, no que diz respeito a avaliação de tamanho de partículas maiores que D_1 (1). O número de intervalos entre D_1 e D_{max} é estabelecido como o dobro do número de intervalos gerados entre dois tamanhos consecutivos.

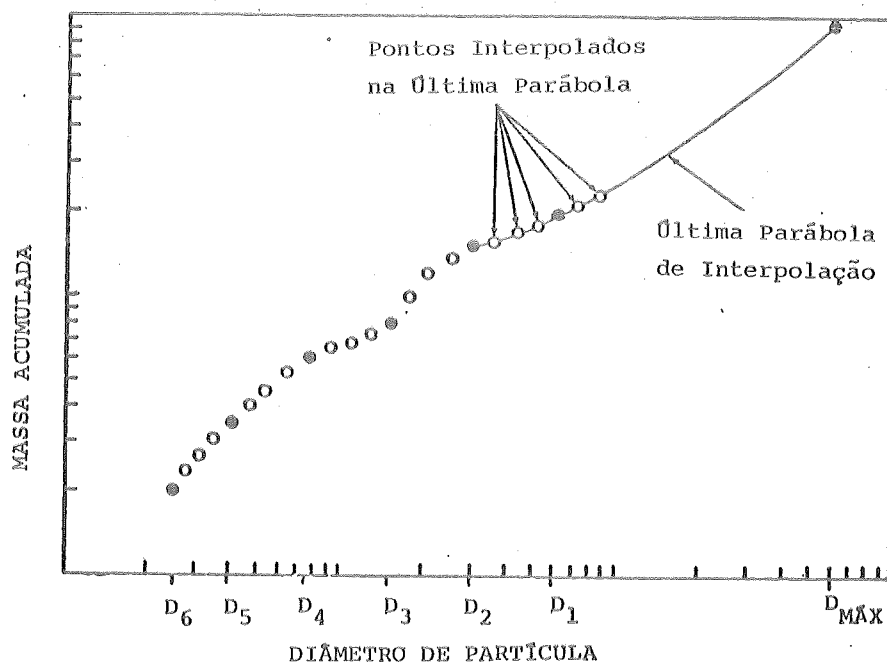


FIGURA 7 - Pontos interpolados na parábola que inclui D_{MAX}

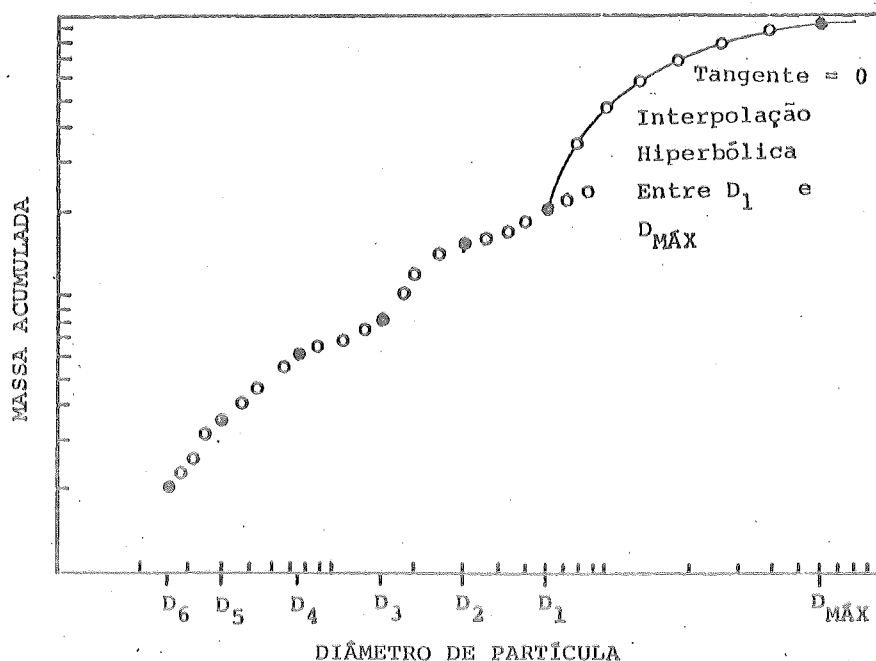


FIGURA 8 - Geração de pontos interpolados por hipérbole entre D_1 e D_{MAX}

Uma variante desta parte do processo foi proposta (4), para facilitar a concordância do trecho D_1, D_{max} , no ponto D_1 , através do uso de polinômio osculador da primeira ordem. Este procedimento é apresentado no item "Exemplo Prático".

Um vez obtidos todos os pontos, inicia-se a fase final do ajuste que consiste em passar pelos 3 primeiros pontos, uma parábola. A parábola utilizada é a mesma que se usou para interpolação na primeira fase. Essa parábola será parte da curva "Spline" entre o primeiro ponto experimental e o primeiro ponto interpolado, vide Figura 9.

Em seguida passa-se uma parábola pelo limite superior da primeira parábola e pelos 3 próximos pontos, com a mesma inclinação da primeira no ponto inicial. O processo se repete até que se atinja o valor de x correspondente ao tamanho de partícula do primeiro estágio, Figuras 10 e 11.

Para os pontos acima deste segue-se o mesmo procedimento mas se utilizam os pontos gerados anteriormente pela hipérbole.

Os valores dos coeficientes das parábolas juntamente com os limites de cada parábola são arquivados para uso futuro, em especial em se tratando de computador ou "plotter".

Há ainda que se impor a condição de tangente nula para $x_1 < D_{min}$ e para $x_1 > D_{max}$.

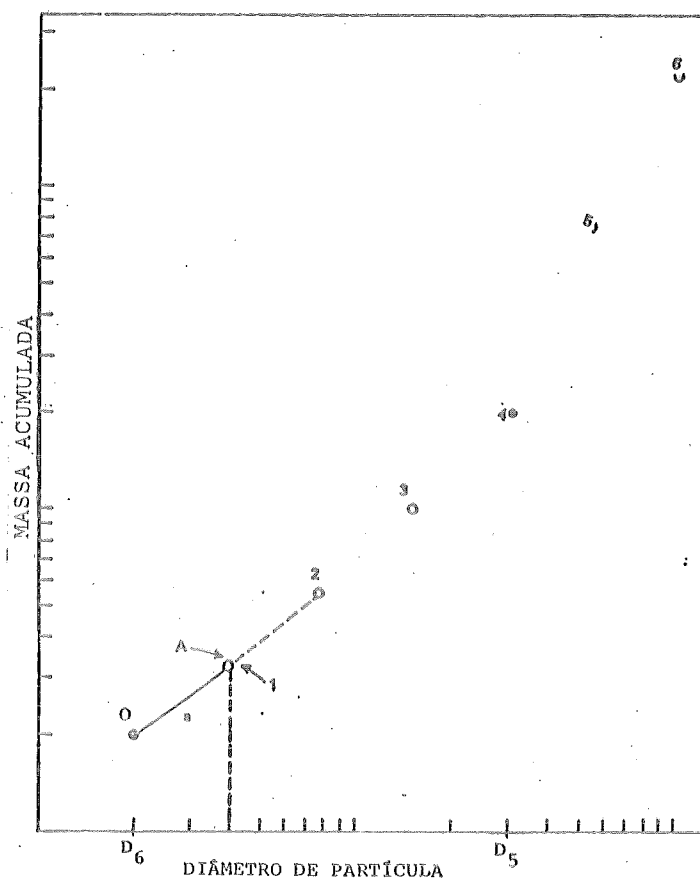


FIGURA 9 - Início do procedimento final de ajuste da função "Spline"

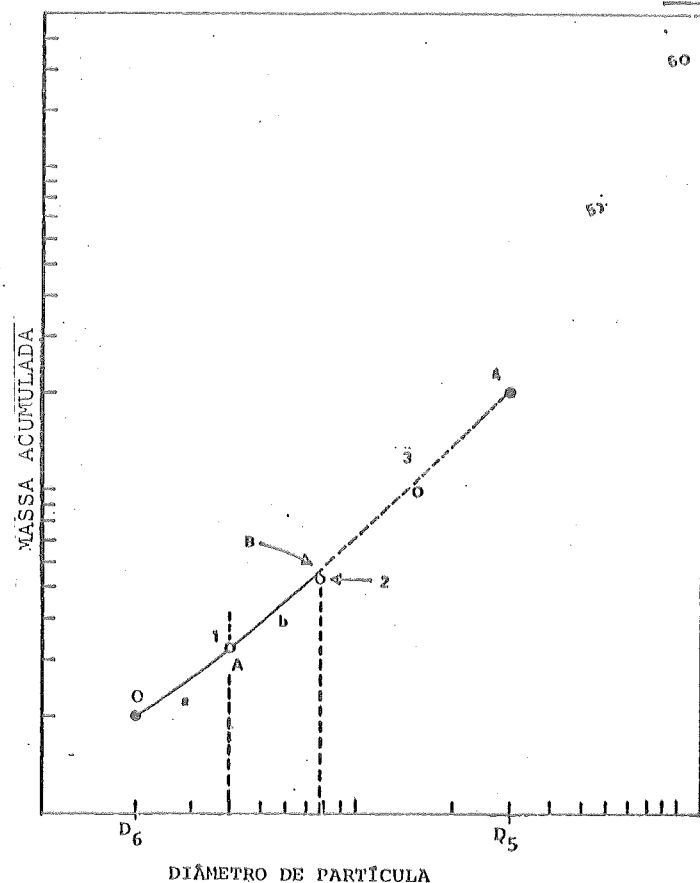


FIGURA 10 - Segundo passo no procedimento final de ajuste da função "Spline"

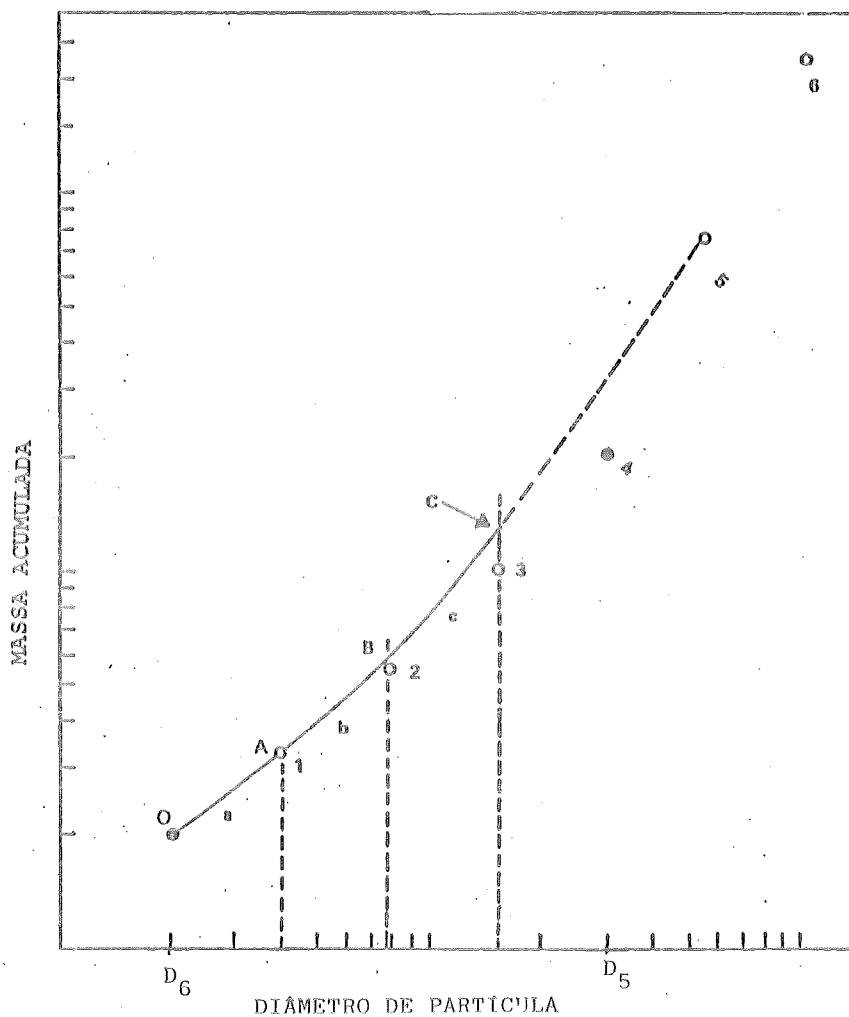


FIGURA 11 - Terceiro passo no procedimento final de ajuste da função "Spline"

QUANDO USAR A FUNÇÃO "SPLINE"

O uso da função "Spline" é recomendado para trabalhos experimentais com pequenos erros, como são os de laboratório, os de calibração de instrumentos, onde o controle das variáveis é bom e os erros pequenos. Não é desaconselhado o uso em outros casos, mas é utilizar-se de um método muito mais preciso que o próprio experimento.

O ajuste por este método é também recomendado quando se desconhece a forma da curva que representa os dados, todavia para este caso é necessário que os erros experimentais sejam pequenos, pois caso contrário influirão na forma da curva produzindo alterações enganosas.

A construção de curvas de calibração ajusta-se às restrições citadas e portanto podem ser obtidas pela função "Spline".

Dadas as características de exatidão da função e de sua derivada, curvas do tipo frequência acumulada versus tamanho de partícula e sua derivada, a distribuição de frequência, versus classes de tamanho, são bem representadas por curva obtidas por este método.

Em resumo, dado um conjunto de dados discretos pelo qual se deseja ajustar uma curva contínua, com primeira e segunda derivadas também contínuas, recomenda-se a utilização da função "Spline", quando o erro experimental é pequeno, ou não se conhece a forma da curva. Observe-se que, se o erro experimental não for pequeno, esta técnica não fica invalidada, torna-se apenas mais sofisticada que o necessário.

EXEMPLO PRÁTICO

Apresentam-se a seguir, um conjunto de dados reais ajustados pela técnica apresentada neste trabalho; o programa de cálculo que os ajustou e as equações a serem usadas para o caso de se desejar desenvolver um programa completo.

Dados : $\begin{cases} x = \text{tamanho de partícula} \\ y = \text{frequência acumulada correspondente} \end{cases}$

Obter os valores de y para os valores x constantes da Tabela 2, através do ajuste de uma curva, pelos dados da Tabela 1

TABELA 1 - VALORES DE X E Y OBTIDOS EXPERIMENTALMENTE

x =	0.249	0.426	0.756	1.415	2.380	4.430	11.930
y =	0.11131	0.25055	0.48160	0.77827	0.90377	0.96985	0.99157

TABELA 2 - VALORES DE X PARA OS QUAIS SE DESEJA CALCULAR O VALOR DE Y

x =	0.100; 0.150; 0.200; 0.210; 0.230; 0.250; 0.426; 0.450; 0.750; 0.756;
	1.415; 1.500; 2.000; 2.380; 3.000; 4.000; 4.430; 4.500; 5.000; 6.000;
	7.000; 8.000; 9.000; 10.000; 11.000; 11.930; 12.000; 12.500; 13.000;
	15.000.

Um programa, em FORTRAN, apresentado a seguir, calcula o valor da ordenada y. Este programa é ligeiramente mais simplificado que o descrito no trabalho.

As simplificações residem no seguinte :

1. Ausência de verificação da derivada primeira negativa;
2. Não utilização de interpolação linear onde a derivada primeira for negativa;
3. Não utilização do cálculo do diâmetro fictício no primeiro intervalo, se a derivada primeira for negativa;
4. Não interpolação dos pontos intermediários;
5. Como consequência de 4, não é calculada a função final, admitindo portanto, a função inicial calculada, como sendo a curva "Spline" e
6. Não verificação da frequência acumulada máxima ser $F_{ac} \leq 100\%$.

Segue-se o programa e a folha de resultados, na qual se podem notar tangentes, (SSI(J)), negativas, assim como frequências acumuladas (SS(J)) maiores que 1.00, como consequências das simplificações acima.

LISTAGEM DO PROGRAMA "SPLINE" SIMPLIFICADO

```

0001      REAL * 2  X(10),Y(10),T(30),S2(30),SS1(30),SS2(30),H(10),DELY(10),
      *F(10),S(10),DEL SQY(10),S2(10),C(10),S3(10),W,ETIA,SSIONE,SSIN,ETI.
      *F(2,PROD,DELSQS
      DATA CHLCA/1.071756E/
      N=7
      READ(1,20)(X(I),I=1,7)
      READ(1,20)(Y(I),I=1,7)
      READ(1,30)(T(I),I=1,30)
20  FORMAT(4X,7F6.5)
30  FORMAT(4X,10F7.3,/,10F7.3)
      N1=N-1
      DO 51 I=1,N1
      H(I)=X(I+1)-X(I)
51  DELY(I)=(Y(I+1)-Y(I))/H(I)
      DO 52 I=2,N1
      F2(I)=H(I-1)*H(I)
      E(I)=0.5*(F(I)-F(I-1))/H2(I)
      DEL SQY(I)=(DELY(I)-DELY(I-1))/H2(I)
      S2(I)=2.0*DEL SQY(I)
52  E(I)=3.0*DEL SQY(I)
      S2(1)=0.0
      S2(N)=0.0
      S(1)=0.0
      DO 10 I=2,N1
      K=(C(I)-B(I)*S2(I-1)-(0.5-B(I))*S2(I+1)-S2(I))*OMEGA
      IF(IAES(K).GT.ETIA) ETIA=DABS(K)
10  S2(I)=S2(I)+K
      IF(ETIA.GE.1.0E-06) GO TO 5
      DO 53 I=1,N1
      S2(I)=(S2(I+1)+S2(I))/H(I)
      DO 61 J=1,30
      I=1
      IF(T(J)-X(1)) 58,17,55
55  IF(T(J)-X(N)) 57,59,62
56  IF(T(J)-X(1)) 60,17,57
57  I=I+1
      GO TO 56
58  SSIONE=DELY(I)-H(I)/(H(I)+H(I+1))*2.0*(DELY(I)-DELY(I+1))
      SS(I)=Y(I)+T(I)-X(I)*SSIONE
      SS(I)=SSIONE
      GO TO 61
62  SSIN=DELY(N1)*H(N1)*S2(N1)
      SS(I)=Y(N1)+T(I)-X(I)*SSIN
      SS(I)=SSIN
      GO TO 61
59  I=H
      DO 1 I=1-1
17  F1=T(I)-X(I)
      F2=T(I)-X(I+1)
      PROD=F1*F2
      S2(I)=S2(I)+F1*S3(I)
      DEL SQS=(S2(I)+S2(I+1)+SS2(I))/6.
      SS(I)=Y(I)+H1*DELY(I)+PROD*DELSQS
      SS(I)=DELY(I)+H1*F2*DEL SQS+PROD*S3(I)/6.
61  CONTINUE
      WRITE(3,30)
80  FORMAT(10X,'X(I)',11X,'S2(I)',15X,'SS(I)',15X,'SSIONE',14X,'SSIN',
      *,'S(X)',SS2(I)')
      DO 90 K=1,30
90  WRITE(3,100) I(K),SS(K),SS1(K),SSIONE,SSIN,SS2(K)
100 FORMAT(9X,F6.3,2X,E15.6,4(10X,E15.6))
      CALL EXIT
      END

```

X(I)	SS(I)	SS1(I)	SSIONE	SSIN	SS2(I)
0.100	-0.149043D-01	0.847074D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
0.150	0.274497D-01	0.847074D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
0.200	0.658034D-01	0.847074D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
0.250	0.762741D-01	0.847074D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
0.300	0.552156D-01	0.847074D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
0.350	0.112107D 00	0.796945D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.189202D-02
0.400	0.250550D 00	0.766908D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.334887D 00
0.450	0.268856D 00	0.756669D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.350054D 00
0.500	0.477859D 00	0.625147D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.540184D 00
0.550	0.431630D 00	0.621654D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.543986D 00
0.600	0.778270D 00	0.266001D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.475416D 00
0.650	0.600911D 00	0.247300D 00	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.435156D 00
0.700	0.660020D 00	0.868491D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.458603D 00
0.750	0.903770D 00	0.475412D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.188015D-01
0.800	0.529857D 00	0.369722D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.152522D-01
0.850	0.560125D 00	0.245100D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.963207D-02
0.900	0.969856D 00	0.206915D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.719821D-02
0.950	0.571255D 00	0.203700D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.713102D-02
1.000	0.560616D 00	0.169445D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.665114D-02
1.050	0.594357D 00	0.107732D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.569138D-02
1.100	0.100245D 01	0.556169D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.473162D-02
1.150	0.100534D 01	0.136995D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.377186D-02
1.200	0.100542D 01	-0.158203D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.281210D-02
1.250	0.100220D 01	-0.431425D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.185234D-02
1.300	0.597116D 00	-0.568371D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.862578D-03
1.350	0.591576D 00	-0.610176D-02	0.847074D 00	-0.510906D-01	-0.877362D-03
1.400	0.567954D 00	-0.510906D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
1.450	0.562448D 00	-0.510906D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
1.500	0.566903D 00	-0.510906D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0
1.550	0.834722D 00	-0.510906D-01	0.847074D 00	-0.510906D-01	0.0

Entre as linhas 9 a 20 são calculadas as aproximações por diferenças finitas, das derivadas primeira, para cada ponto e fixadas como nulas as derivadas para os valores extremos dos dados;

Da linha 21 à linha 26 resolve por relaxação, num processo iterativo, a segunda derivada nos pontos internos;

Nas linhas 27 e 28 é calculada a terceira derivada;

Da linha 29 à linha 35 é calculado o valor da derivada e da função, para os pontos da matriz T;

Da linha 36 à linha 39 é feita a extrapolação para os T(J), abaixo de $D_{\min}$;

Da linha 40 à linha 43 é feita a extrapolação acima de D_1 e finalmente :

Da linha 44 à linha 53 é feito o cálculo para os pontos interiores ao intervalo $D_{\min}$, D_1 .

Apresentam-se a seguir as equações(5) e condições a serem obedecidas para a determinação da função "Spline"

$$S''(x_1) = 0$$

$$- S''(x_2) - b_2 S''(x_1) - (1/2 - b_2) S''(x_3) + g_2 \leq \epsilon$$

$$- S''(x_3) - b_3 S''(x_2) - (1/2 - b_3) S''(x_4) + g_3 \leq \epsilon$$

$$- S''(x_4) - b_4 S''(x_3) - (1/2 - b_4) S''(x_5) + g_4 \leq \epsilon$$

$$- S''(x_5) - b_5 S''(x_4) - (1/2 - b_5) S''(x_6) + g_5 \leq \epsilon$$

$$S''(x_6) = 0$$

onde :

$$S''(x_i) = \frac{2}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left[\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right]$$

$$b_i = \frac{1}{2} \left(\frac{x_i - x_{i-1}}{x_{i+1} - x_{i-1}} \right)$$

$$g_i = \frac{3}{x_{i+1} - x_{i-1}} \left[\frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} \right]$$

para $2 \leq i \leq 5$

ϵ = tolerância pré estabelecida (1×10^{-5} é adequada)

Calcula-se :

$$S'_i = \frac{S''(x_{i+1}) - S''(x_i)}{x_{i+1} - x_i} \quad i = 1, 5$$

escolhe-se $x_i \leq t_j \leq x_{i+1}$

e resolve-se o sistema :

A derivada $P'(D_1) = M'(D_1)$, com $P'(D) \geq 0$, para $D_0 \leq D \leq D_1$

A fórmula de Hermite :

$$P(D) = \sum_{i=0}^n U_i(D) M(D) + \sum_{i=0}^n V_i(D) M'(D_i)$$

onde :

$M(D_1)$ e $M'(D_1)$ são os valores das concentrações em massa e suas derivadas nos pontos D_0 e D_1

$U_i(D)$ e $V_i(D)$ podem ser expressos através dos multiplicadores de Lagrange como segue :

$$U_i(D) = 1 - 2L_i(D_1)(D - D_1) \left[L_i(D) \right]^2$$

$$V_i(D) = (D - D_1) \left[L_i(D) \right]^2$$

$$L_i(D) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(D - D_j)}{(D_i - D_j)} \quad i = 0, 1, 2, \dots, n$$

$$L_0(D) = \frac{D - D_1}{D_0 - D_1} \quad e \quad L_0'(D) = \frac{1}{D_0 - D_1} ;$$

$$L_1(D) = \frac{D - D_0}{D_1 - D_0} \quad e \quad L_1'(D) = \frac{1}{D_1 - D_0}$$

$$\therefore P(D) = U_0(D) M(D_0) + U_1(D) M(D_1) + V_0(D) M'(D_0) + V_1(D) M'(D_1)$$

$$P(D) = \left[1 - \frac{2(D - D_0)}{(D_0 - D_1)} \right] \left[\frac{D - D_1}{D_0 - D_1} \right]^2 M(D_0) + \left[1 - \frac{2(D - D_1)}{(D_1 - D_0)} \right] \left[\frac{D - D_0}{D_1 - D_0} \right]^2 M(D_1) +$$

$$+ \frac{(D - D_0)(D - D_1)^2 M'(D_0)}{D_0 - D_1} + \frac{(D - D_1)(D - D_0)^2 M'(D_1)}{(D_1 - D_0)^2}$$

Definem-se então as seguintes constantes :

$$K_1 = \frac{M(D_0)}{(D_0 - D_1)^2}$$

$$K_4 = -\frac{2M(D_1)}{(D_1 - D_0)^3}$$

$$K_2 = -\frac{2M(D_0)}{(D_0 - D_1)^3}$$

$$K_5 = \frac{M'(D_0)}{(D_0 - D_1)^2}$$

$$K_3 = \frac{M(D_1)}{(D_1 - D_0)^2}$$

$$K_6 = \frac{M'(D_1)}{(D_1 - D_0)^2}$$

$$a_1 = K_2 + K_4 + K_5 + K_6$$

$$a_2 = K_1 + K_3 - (2D_1 + D_0)(K_2 + K_5) - (2D_0 + D_1)(K_4 + K_6)$$

$$a_3 = (K_2 + K_5)(D_1^2 + 2D_0D_1) + (K_4 + K_6)(D_0^2 + 2D_0D_1) - 2K_1D_1 - 2K_3D_0$$

$$a_4 = K_1 D_1^2 + K_3 D_0^2 - D_0 D_1^2 (K_2 + K_5) - D_0 D_1^2 (K_4 + K_6)$$

$$P(D) = a_1 D^3 + a_2 D^2 + a_3 D + a_4$$

$$P'(D) = 3a_1 D^2 + 2a_2 D + a_3$$

$$P'(D) > 0, D_0 \leq D \leq D_1$$

Quando a condição $P'(D) > 0$ não é obedecida, deve-se redefinir $D_1 = D_{\max}$ para um valor menor e testar novamente, repete-se o processo de redefinição até o caso limite onde $P'(D)=0$, definindo-se assim $D_{\max}$ para declividade nula, vide Figura 13, que passa a ser chamado de Diâmetro de Declividade Nula, (DDN), correspondendo ao máximo de frequência acumulada.

Os pontos de interpolação são definidos pelo polinômio osculador para $D_1 \leq D \leq DDN$ e para $DDN < D \leq D_{\max}$ é estabelecido como o valor máximo de frequência acumulada.

A vantagem deste ajuste é a maior facilidade da obtenção da tangente comum em D_1 , resultando em continuidade da primeira derivada e maior exatidão, como se pode depreender da observação conjunta das Figuras 13 e 8.

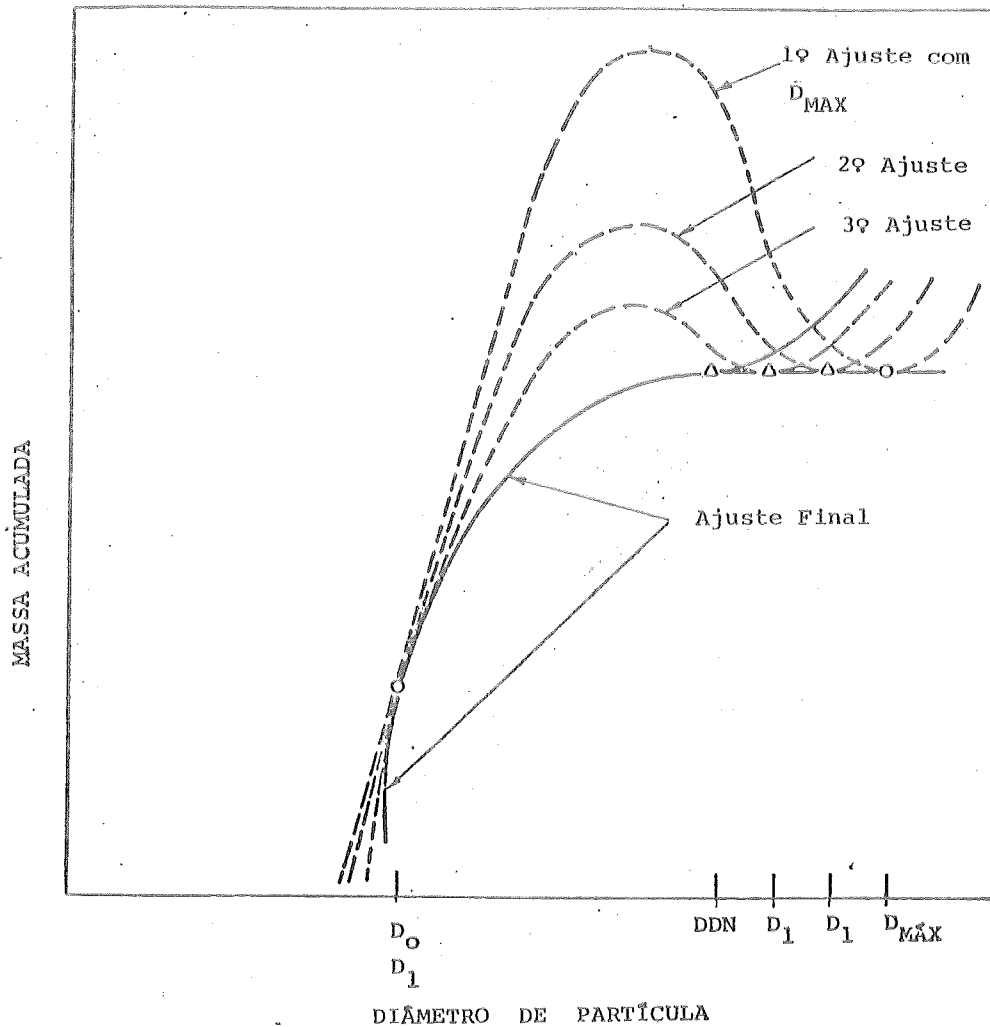


FIGURA 13 - Ajuste da curva entre D_1 e $D_{\max}$.

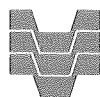
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. JOHNSON, J.W., Clinard, G.I., Felix, L.G. e McCain, J.D. A Computer Based Cascade Impactor Data Reduction Systems. EPA-600/7-78-042, March 1978.
2. LAWLESS, Ph. A. Analisis of Cascade Impactor Data for Calculating Particle Penetration. EPA-600/7-78-189.
3. SNEDDON, I.N. Encyclopedia Dictionary of Mathematics for Engineering and Applied Scientists.
4. SMITH, W.B., Cushing, K.M., Johnson, J.W., Parsons, C.T., Williamson, A.D., Wilson Jr, R.R. Sampling and Data Handling, Methods for Inhalable Particulate Sampling.
5. SPARKS, L.E. Cascade Impactor Data Reduction with SR-52 and TI-59 Programmable Calculators. EPA-600/7-78-226, November 1978.

30/7/85

1.00

30/7/85



CETESB

Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental
Av. Professor Frederico Hermann Jr., 345 - São Paulo - SP: - CEP 05459
Telefone: (011) 210-1100 (Telex (011) 222-46-CTS - BR