

**DESENVOLVIMENTO DE MODELOS
MECANÍSTICO E NEURAL PARA O PROCESSO
DE LODOS ATIVADOS DE TRATAMENTO DE
ESGOTOS SANITÁRIOS**

WERNER SIEGFRIED HANISCH



Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos, da Universidade de São Paulo, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Hidráulica e Saneamento

ORIENTADOR: Prof. Dr. Eduardo Cleto Pires

CO-ORIENTADOR: Prof. Dr. André Carlos Ponce de Leon Ferreira de Carvalho

São Carlos

1999

Class.	TESE-EESC
Cutt.	2724
	e.1
Tombo	008/00

31100008564

51/5 1071769

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

H239d Hanisch, Werner Siegfried
Desenvolvimento de modelos mecanístico e neural
para o processo de lodos ativados de tratamento de
esgotos sanitários / Werner Siegfried Hanisch. -- São
Carlos, 1999.

Tese (Doutorado) -- Escola de Engenharia de São
Carlos-Universidade de São Paulo, 1999.
Área: Hidráulica e Saneamento.
Orientador: Prof. Dr. Eduardo Cleto Pires.
Co-orientador: Prof. Dr. André Carlos Ponce de Leon
Ferreira de Carvalho.

1. Processo de lodos ativados. 2. Redes neurais.
3. Modelo número 1 da IAWQ. I. Título.

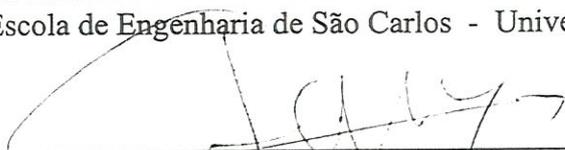
FOLHA DE APROVAÇÃO

Candidato: Engenheiro **WERNER SIEGFRIED HANISCH**

Tese defendida e aprovada em 01-12-1999
pela Comissão Julgadora:



Prof. Associado **EDUARDO CLETO PIRES (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Titular **JOSÉ ROBERTO CAMPOS**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Doutor **LUIZ ANTONIO DANIEL**
(Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo)



Prof. Doutora **TERESA BERNARDA LUDERMIR**
(Universidade Federal de Pernambuco - UFPE)

Prof. Doutor **ANTÔNIO DE PÁDUA BRAGA**
(Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG)



Prof. Associado **EDUARDO CLETO PIRES**
Coordenador da Área de Hidráulica e Saneamento



JOSÉ CARLOS A. CINTRA
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

“Para voar, temos que encontrar resistência.”

Maya Lin

*Ao meu irmão gêmeo Walter,
com todo o meu amor e admiração.*

AGRADECIMENTOS

Ao professor Eduardo Cleto Pires pela oportunidade de realização deste doutorado. Foi sempre o grande incentivador. Deu liberdade total para que eu desenvolvesse as minhas idéias, criando condições para que o trabalho fosse realizado da melhor forma possível.

Ao professor André C. P. L. F. de Carvalho do Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação (ICMC – USP), cuja receptividade e disposição em cooperar na realização desta tese quando o procurei pela primeira vez, para cursar sua disciplina de Redes Neurais, levou a estreitar nossos contatos e culminou na sua co-orientação neste trabalho.

Ao prof. Roberto Cleto Pires pelos inúmeros conselhos e ajuda na solução de muitos problemas computacionais.

Ao Hélio Diniz pela grande ajuda nos experimentos iniciais utilizando a técnica de Redes Neurais.

Ao Chico Vela por ceder o seu computador em alguns momentos para a realização de algumas simulações do modelo de Redes Neurais.

Aos meus pais, Siegfried e Carla, e irmãos, Willy, Walter, Marianne e Marlene, participantes de todos os momentos de minha vida.

Aos amigos D. Maria Helena e S. Plínio; Cláudio, Paulinho, Aninha e Yuri; Ângelo, Jane e Chico; Marco, Valéria e Mih; Patrícia, Renata, Margareth, Luciana e Christiani; Andréa e Erich; Giovanna, Silvana, Sérgio e Regiane; Valdith e Flávia; José Eduardo, Nelson, Eraldo e Simone; Marilu, Neyson, André e Luciana. Cada um de vocês é muito importante para mim. Vocês sabem como, de alguma forma, me deram força para realizar este sonho!

A todos do Laboratório de Processos Biológicos, cuja convivência levou-nos a ser grandes amigos!

A todos os amigos do Departamento de Hidráulica e Saneamento que, de alguma forma, ajudaram-me na realização deste trabalho.

Aos funcionários do Departamento de Hidráulica e Saneamento Sá, Pavi, Sérgio e Valdecir pela enorme atenção dispensada.

Ao CNPq pela concessão da bolsa de doutorado.

À FAPESP pelo financiamento deste projeto de pesquisa (Processo 97/9959-4).

SUMÁRIO

<i>Lista de figuras</i>	<i>i</i>
<i>Lista de tabelas</i>	<i>xv</i>
<i>Lista de símbolos</i>	<i>xvii</i>
<i>Resumo</i>	<i>xxiv</i>
<i>Abstract</i>	<i>xxv</i>
1. Introdução e Objetivos	1
1.1 <i>Justificativa</i>	1
1.2 <i>Objetivos</i>	5
2. Fundamentos Teóricos	6
2.1 <i>Considerações Iniciais</i>	6
2.2 <i>Modelo Mecanístico</i>	7
2.2.1 <i>Modelo Número 1 da IAWQ</i>	7
2.2.1.1 <i>Determinação dos parâmetros cinéticos do Modelo Número 1 da IAWQ</i>	14
2.2.1.1.1 <i>Determinação da velocidade de crescimento específico máxima μ_{max} e do coeficiente de respiração endógena b_H</i>	18
2.2.1.1.2 <i>Determinação do coeficiente de produção de biomassa heterotrófica Y_H</i>	19
2.2.1.1.3 <i>Determinação da concentração de biomassa heterotrófica X_{BHO}</i>	19
2.2.1.1.4 <i>Determinação da concentração de substrato rapidamente biodegradável S_{SO}</i>	19
2.2.1.1.5 <i>Determinação do coeficiente de meia saturação do substrato K_S</i>	20
2.2.1.1.6 <i>Determinação da constante de hidrólise k_n e da concentração de material orgânico lentamente biodegradável X_S</i>	20
2.2.1.1.7 <i>Determinação do coeficiente de meia saturação do oxigênio para a biomassa heterotrófica K_{O_2}</i>	20
2.2.1.1.8 <i>Determinação do substrato orgânico inerte solúvel S_{IO}</i>	21
2.2.1.1.9 <i>Determinação do material orgânico inerte particulado X_{IO}</i>	21

2.2.1.1.10	<i>Determinação dos parâmetros cinéticos das bactérias nitrificantes</i>	23
2.2.1.2	Considerações sobre a utilização do Modelo Número 1 da IAWQ	25
2.2.2	<i>Modelos para o Decantador Secundário</i>	33
2.2.3	<i>Transferência de Oxigênio em Processos de Tratamento de Esgotos Sanitários</i>	44
2.3	Modelo Empírico	49
2.3.1	<i>Redes Neurais</i>	49
2.3.1.1	O cérebro humano	49
2.3.1.2	Redes MLP (Perceptrons de Múltiplas Camadas – Multi-Layer Perceptrons)	51
2.3.1.3	Derivação do algoritmo Retropropagação (Backpropagation)	54
2.3.1.4	Critérios de parada	62
2.3.1.5	Generalização	63
2.3.2	<i>Sistemas Inteligentes e a Modelagem de Processos de Tratamento de Esgotos Sanitários</i>	66
3.	Métodos	76
3.1	<i>Modelo Mecanístico</i>	76
3.1.1	<i>Balanco de Massa no Tanque de Aeração</i>	77
3.1.1.1	Balanco de massa para o material solúvel	77
3.1.1.2	Balanco de massa para o material particulado	79
3.1.1.3	Balanco de massa para o oxigênio	80
3.1.2	<i>Balanco de Massa no Decantador Secundário</i>	82
3.1.3	<i>Definição dos Experimentos</i>	85
3.2	<i>Modelo Empírico (Modelo de Redes Neurais)</i>	91
3.2.1	<i>Definição das Arquiteturas</i>	94
3.2.2	<i>Normalização dos Dados</i>	97
3.2.3	<i>Divisão do Conjunto de Dados</i>	98
3.2.4	<i>Algoritmo de Treinamento</i>	98
3.2.5	<i>Verificação dos Erros</i>	99
3.2.6	<i>Crítério de parada</i>	100
4.	Discussão dos Resultados	100
4.1	<i>Modelo Mecanístico</i>	101
4.2	<i>Modelo Empírico (Modelo de Redes Neurais)</i>	111

4.3 Comparação entre os Modelos Mecânico e Empírico	133
5. Conclusões e Sugestões	135
5.1 Conclusões.....	135
5.2 Sugestões	136
Anexo A	138
Anexo B	153
Anexo C	190
Referências Bibliográficas	I
Apêndice I	IX
Apêndice II	XVI
Apêndice III	XX

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 2.1: Diagrama do Modelo Número 1 da IAWQ.....</i>	12
<i>Figura 2.2: Frações da matéria orgânica de um esgoto sanitário com DQO total de 400g/m³.....</i>	22
<i>Figura 2.3: Frações da matéria orgânica, expressas em DQO no efluente de uma estação de lodos ativados tratando o esgoto sanitário mostrado na Figura 2.2.....</i>	23
<i>Figura 2.4: Curva de coluna de sedimentação para partículas floculentas.....</i>	35
<i>Figura 2.5: Esquema do modelo de decantador secundário.....</i>	38
<i>Figura 2.6: Modelo de velocidade de sedimentação.....</i>	40
<i>Figura 2.7: Definição da teoria dos dois filmes.....</i>	44
<i>Figura 2.8: Esquema de um neurônio típico e a propagação de um impulso nervoso.....</i>	50
<i>Figura 2.9: Redes MLP completamente conectadas.....</i>	52
<i>Figura 2.10: Modelo não-linear de um neurônio.....</i>	52
<i>Figura 2.11: Funções de ativação.....</i>	54
<i>Figura 2.12: Diagrama simplificado da conexão entre o neurônio de saída k e o neurônio escondido j.....</i>	58
<i>Figura 3.1: Esquema do processo de lodos ativados e as variáveis envolvidas.....</i>	77
<i>Figura 3.2: Concentração de substâncias solúveis determinadas em simulação do processo de lodos ativados.....</i>	92
<i>Figura 3.3: Concentração de substâncias particuladas determinadas em simulação do processo de lodos ativados.....</i>	93
<i>Figura 3.4: Vazões manipuladas (Q_w, Q_R e Q_{ar}) e de entrada aleatória (Q) na simulação do processo de lodos ativados.....</i>	94
<i>Figura 3.5: DQO na entrada (DQO_o) e saída (DQO_s) da estação; sólidos suspensos na entrada (SSO_o) e saída (SS_s) da estação; sólidos suspensos (MLSS) e oxigênio dissolvido (S_o) no tanque de aeração utilizados no treinamento das redes neurais.....</i>	96
<i>Figura 3.6: Carga orgânica aplicada (CO), eficiência de remoção de matéria orgânica (E) e tempos de detenção hidráulico (\bullet) e celular (\bullet_c) utilizados no treinamento das redes neurais.....</i>	96
<i>Figura 3.7: Esquema da rede MLP proposta.....</i>	97

<i>Figura 4.1: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de 200 m³/d.....</i>	<i>104</i>
<i>Figura 4.2: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de 300 m³/d.....</i>	<i>105</i>
<i>Figura 4.3: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de 400 m³/d.....</i>	<i>105</i>
<i>Figura 4.4: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de 10.000 m³/d.</i>	<i>106</i>
<i>Figura 4.5: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de 15.000 m³/d.</i>	<i>106</i>
<i>Figura 4.6: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de 20.000 m³/d.</i>	<i>107</i>
<i>Figura 4.7: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de 100.000 m³/d.....</i>	<i>107</i>
<i>Figura 4.8: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de 120.000 m³/d.....</i>	<i>108</i>
<i>Figura 4.9: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de 140.000 m³/d.....</i>	<i>108</i>
<i>Figura 4.10: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).</i>	<i>119</i>
<i>Figura 4.11: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).</i>	<i>120</i>
<i>Figura 4.12: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).</i>	<i>120</i>
<i>Figura 4.13: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).</i>	<i>121</i>
<i>Figura 4.14: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).</i>	<i>121</i>

Figura 4.15: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão ar (Q_{ar}).....	122
Figura 4.16: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).....	122
Figura 4.17: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).	123
Figura 4.18: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).....	123
Figura 4.19: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).	126
Figura 4.20: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).....	127
Figura 4.21: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).....	127
Figura 4.22: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de validação da rede 9_33_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).	128
Figura 4.23: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de validação da rede 9_33_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).....	128
Figura 4.24: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de validação da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).....	129
Figura 4.25: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).....	129
Figura 4.26: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R). ..	130
Figura 4.27: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).	130
Figura A.1: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$	139
Figura A.2: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$	139

<i>Figura A.3: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	140
<i>Figura A.4: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	140
<i>Figura A.5: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	141
<i>Figura A.6: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	141
<i>Figura A.7: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	142
<i>Figura A.8: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	142
<i>Figura A.9: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	143
<i>Figura A.10: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	143
<i>Figura A.11: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	144
<i>Figura A.12: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	144
<i>Figura A.13: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	145
<i>Figura A.14: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	145
<i>Figura A.15: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	146
<i>Figura A.16: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	146
<i>Figura A.17: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	147
<i>Figura A.18: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	147
<i>Figura A.19: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	148

<i>Figura A.20: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	148
<i>Figura A.21: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	149
<i>Figura A.22: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	149
<i>Figura A.23: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	150
<i>Figura A.24: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	150
<i>Figura A.25: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	151
<i>Figura A.26: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	151
<i>Figura A.27: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.</i>	152
<i>Figura B.1: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 3 neurônios na camada escondida.</i>	154
<i>Figura B.2: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios na camada escondida.</i>	154
<i>Figura B.3: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios na camada escondida.</i>	155
<i>Figura B.4: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 9 neurônios na camada escondida.</i>	155
<i>Figura B.5: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 11 neurônios na camada escondida.</i>	156
<i>Figura B.6: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 13 neurônios na camada escondida.</i>	156
<i>Figura B.7: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	157
<i>Figura B.8: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	157

<i>Figura B.9: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 3 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>158</i>
<i>Figura B.10: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>158</i>
<i>Figura B.11: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>159</i>
<i>Figura B.12: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>159</i>
<i>Figura B.13: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>160</i>
<i>Figura B.14: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 13 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>160</i>
<i>Figura B.15: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>161</i>
<i>Figura B.16: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>161</i>
<i>Figura B.17: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 3 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>162</i>
<i>Figura B.18: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>162</i>
<i>Figura B.19: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>163</i>
<i>Figura B.20: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>163</i>
<i>Figura B.21: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>164</i>
<i>Figura B.22: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 13 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>164</i>
<i>Figura B.23: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>165</i>

<i>Figura B.24: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	<i>165</i>
<i>Figura B.25: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.</i>	<i>166</i>
<i>Figura B.26: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.</i>	<i>166</i>
<i>Figura B.27: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.</i>	<i>167</i>
<i>Figura B.28: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.</i>	<i>167</i>
<i>Figura B.29: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.</i>	<i>168</i>
<i>Figura B.30: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.</i>	<i>168</i>
<i>Figura B.31: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	<i>169</i>
<i>Figura B.32: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	<i>169</i>
<i>Figura B.33: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.</i>	<i>170</i>
<i>Figura B.34: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.</i>	<i>170</i>

<i>Figura B.35: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>171</i>
<i>Figura B.36: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>171</i>
<i>Figura B.37: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>172</i>
<i>Figura B.38: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>172</i>
<i>Figura B.39: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>173</i>
<i>Figura B.40: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>173</i>
<i>Figura B.41: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>174</i>
<i>Figura B.42: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>174</i>
<i>Figura B.43: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>175</i>
<i>Figura B.44: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>175</i>
<i>Figura B.45: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>176</i>

<i>Figura B.46: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.</i>	176
<i>Figura B.47: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	177
<i>Figura B.48: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	177
<i>Figura B.49: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.</i>	178
<i>Figura B.50: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.</i>	178
<i>Figura B.51: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios na camada escondida.</i>	179
<i>Figura B.52: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 9 neurônios na camada escondida.</i>	179
<i>Figura B.53: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 11 neurônios na camada escondida.</i>	180
<i>Figura B.54: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 13 neurônios na camada escondida.</i>	180
<i>Figura B.55: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	181
<i>Figura B.56: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.</i>	181

<i>Figura B.57: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>182</i>
<i>Figura B.58: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>182</i>
<i>Figura B.59: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>183</i>
<i>Figura B.60: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>183</i>
<i>Figura B.61: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>184</i>
<i>Figura B.62: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 13 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>184</i>
<i>Figura B.63: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>185</i>
<i>Figura B.64: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>185</i>
<i>Figura B.65: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>186</i>
<i>Figura B.66: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>186</i>
<i>Figura B.67: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>187</i>

<i>Figura B.68: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 9 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>187</i>
<i>Figura B.69: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 11 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>188</i>
<i>Figura B.70: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 13 neurônios na camada escondida.....</i>	<i>188</i>
<i>Figura B.71: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>189</i>
<i>Figura B.72: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.....</i>	<i>189</i>
<i>Figura C.1: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>191</i>
<i>Figura C.2: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>191</i>
<i>Figura C.3: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>192</i>
<i>Figura C.4: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>192</i>
<i>Figura C.5: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>193</i>
<i>Figura C.6: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>193</i>

<i>Figura C.7: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>194</i>
<i>Figura C.8: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>194</i>
<i>Figura C.9: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.....</i>	<i>195</i>
<i>Figura C.10: MRE médio de treinamento para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>195</i>
<i>Figura C.11: MRE médio de validação para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>196</i>
<i>Figura C.12: MRE médio de teste para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>196</i>
<i>Figura C.13: MRE médio de treinamento para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>197</i>
<i>Figura C.14: MRE médio de validação para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>197</i>
<i>Figura C.15: MRE médio de teste para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>198</i>
<i>Figura C.16: MRE médio de treinamento para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>198</i>
<i>Figura C.17: MRE médio de validação para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>199</i>
<i>Figura C.18: MRE médio de teste para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>199</i>
<i>Figura C.19: MRE médio de treinamento para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>200</i>
<i>Figura C.20: MRE médio de validação para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>200</i>
<i>Figura C.21: MRE médio de teste para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>201</i>
<i>Figura C.22: MRE médio de treinamento para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.</i>	<i>201</i>

<i>Figura C.23: MRE médio de validação para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.</i>	202
<i>Figura C.24: MRE médio de teste para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.</i>	202
<i>Figura C.25: MRE médio de treinamento para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.</i>	203
<i>Figura C.26: MRE médio de validação para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.</i>	203
<i>Figura C.27: MRE médio de teste para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.</i>	204
<i>Figura C.28: MRE médio de treinamento para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	204
<i>Figura C.29: MRE médio de validação para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	205
<i>Figura C.30: MRE médio de teste para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	205
<i>Figura C.31: MRE médio de treinamento para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	206
<i>Figura C.32: MRE médio de validação para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	206
<i>Figura C.33: MRE médio de teste para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.</i>	207
<i>Figura C.34: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (II).</i>	207
<i>Figura C.35: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (II).</i>	208
<i>Figura C.36: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (II).</i>	208
<i>Figura I.1: Diagrama do sistema de lodos ativados (reator aeróbio e decantador secundário).</i>	X
<i>Figura II.1: Volumes de controles para os balanços de massa no tanque de aeração e decantador secundário.</i>	XVII

Figura III.1: Descrição gráfica do método de Runge-Kutta de quarta ordem. XXII

LISTA DE TABELAS

<i>Tabela 2.1: Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al., 1987).</i>	11
<i>Tabela 2.2: Definição das constantes e parâmetros cinéticos.</i>	15
<i>Tabela 2.3: Exemplos de conjuntos de constantes usadas em modelos para processos de lodos ativados (20°C).</i>	16
<i>Tabela 2.4: Parâmetros típicos a pH neutro e 20°C para esgotos sanitários</i>	17
<i>Tabela 2.5: Composição da DQO de esgotos sanitários (em %).</i>	22
<i>Tabela 2.6: Frações da DQO de esgotos sanitários (%).</i>	26
<i>Tabela 2.7: Tipos de sedimentação envolvidos no processo de tratamento de esgotos sanitários.</i>	34
<i>Tabela 2.8: Parâmetros do modelo ajustado aos dados de escala real de Pflanz (1969) citado por Takács et al. (1991).</i>	41
<i>Tabela 2.9: Outros parâmetros da equação de velocidade de sedimentação.</i>	42
<i>Tabela 2.10: Arquiteturas de Redes Neurais utilizadas no trabalho de Pu e Hung (1995).</i>	69
<i>Tabela 2.11: Erros de treinamento para a previsão da DBO efluente.</i>	71
<i>Tabela 2.12: Erros de treinamento para a previsão do SST efluente.</i>	72
<i>Tabela 2.13: Características das Redes Neurais de Côté et al. (1994).</i>	74
<i>Tabela 3.1: Médias diárias dos resultados dos parâmetros de esgoto sanitário da região central da cidade de São Carlos analisados de 11 amostras coletadas de outubro de 1995 a fevereiro de 1996 em diferentes horários e dias da semana.</i>	87
<i>Tabela 3.2: Composição típica de esgoto sanitário sem tratamento.</i>	88
<i>Tabela 3.3: Parâmetros utilizados no Modelo Número 1 da IAWQ.</i>	89
<i>Tabela 3.4: Planejamento experimental para análise do modelo.</i>	90
<i>Tabela 3.5: Resumo dos parâmetros do modelo e indicação das equações pelos quais são determinados.</i>	90
<i>Tabela 4.1: Eficiência de remoção de DQO (%) nos experimentos 1 a 27.</i>	102
<i>Tabela 4.2: Análise da variância para o modelo de 3 fatores fixos.</i>	103
<i>Tabela 4.3: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	112

<i>Tabela 4.4: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.</i>	<i>113</i>
<i>Tabela 4.5: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.</i>	<i>113</i>
<i>Tabela 4.6: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	<i>114</i>
<i>Tabela 4.7: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.</i>	<i>114</i>
<i>Tabela 4.8: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.</i>	<i>115</i>
<i>Tabela 4.9: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	<i>115</i>
<i>Tabela 4.10: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.</i>	<i>116</i>
<i>Tabela 4.11: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.</i>	<i>116</i>
<i>Tabela 4.12: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	<i>125</i>
<i>Tabela 4.13: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	<i>125</i>
<i>Tabela 4.14: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.</i>	<i>126</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

α	constante empírica da equação de Vesilind	
α	fator de correção para estimativa do $K_L a$ de um sistema real de tratamento de esgotos	
α	termo de momentum	
β	fator de correção para estimativa da concentração de saturação de um sistema real de tratamento de esgotos	
$\delta_j(n)$	gradiente local para um neurônio j	
δ_{pj}	medida da distância entre o nível de ativação do neurônio j e o nível desejado	
$\varepsilon(n)$	erro quadrático para o padrão n apresentado de saída j	
ε_{av}	erro quadrático médio	(%)
ϕ	estimativa do coeficiente angular (função incremento)	
η	taxa de aprendizado	
η_{DQO}	eficiência de remoção de DQO no decantador primário	(%)
η_s	fator de correção para μ_H sob condições anóxicas	(adimensional)
η_h	fator de correção para a hidrólise sobre condições anóxicas	(adimensional)
η_x	eficiência de remoção das frações particuladas do Modelo Número 1	(%)
η^-	fator de decréscimo	
η^+	fator de acréscimo	
$\varphi_j(v_j(n))$	função de ativação para a soma ponderada $v_j(n)$	
μ	viscosidade do fluido	(N.s/m ²)
μ	velocidade de crescimento específico	(d ⁻¹)
μ_A	velocidade máxima de crescimento específico para a biomassa autotrófica	(d ⁻¹)
μ_H	velocidade máxima de crescimento específico para a biomassa heterotrófica	(d ⁻¹)
v_{ij}	coeficientes estequiométricos do Modelo Número 1 da IAWQ	
v_u	velocidade descendente devido ao movimento do fluido	(m/h)
θ	tempo de residência no tanque de aeração	(d)

θ_c	idade do lodo	(d)
ρ	densidade do fluido	(kg/m ³)
ρ_j	velocidades dos processos cinéticos do Modelo Número 1 da IAWQ	(mg/L.d)
ρ_s	densidade da partícula	(kg/m ³)
ρ_1	velocidade de crescimento aeróbio de heterotróficas	(mg/L.d)
ρ_2	velocidade de crescimento anóxico de heterotróficas	(mg/L.d)
ρ_3	velocidade de crescimento aeróbio de autotróficas	(mg/L.d)
ρ_4	velocidade de decaimento de heterotróficas	(mg/L.d)
ρ_5	velocidade de decaimento de autotróficas	(mg/L.d)
ρ_6	velocidade de amonificação do nitrogênio orgânico solúvel	(mg/L.d)
ρ_7	velocidade de hidrólise dos orgânicos aderidos	(mg/L.d)
ρ_8	velocidade de hidrólise do nitrogênio orgânico aderido	(mg/L.d)
τ	máximo erro quadrático médio (MSE) tolerado	
$v_j(n)$	entrada total recebida pelo neurônio j na apresentação do padrão n	
Δ_0	tamanho do primeiro passo de atualização	
Δ_{max}	máxima atualização dos pesos	
Δ_{min}	mínima atualização dos pesos	
A	área da superfície de difusão	(L ²)
A	área da seção transversal do decantador secundário	(m ²)
$AOTE$	eficiência real de transferência de oxigênio	(%)
b_A	coeficiente de decaimento para a biomassa autotrófica	(d ⁻¹)
b_H	coeficiente de decaimento para a biomassa heterotrófica	(d ⁻¹)
c	concentração de oxigênio dissolvido no tanque de aeração	(mg/L)
C	concentração do gás na solução	(mg/L)
C_D	coeficiente de arrasto	(adimensional)
c_i	vetor de concentrações do Modelo Número 1 da IAWQ	(mg/L)
c_{in}	concentração de oxigênio na entrada do tanque de aeração	(mg/L)
C_o	concentração constante de oxigênio	(mg/L)
CO	carga orgânica aplicada ao sistema	(mg/d)
$cond$	condutividade elétrica	(Ωcm^{-1})

c^s	concentração de saturação do oxigênio	(mg/L)
C_s	concentração de saturação do gás na solução	(mg/L)
d	diâmetro da partícula	(μm)
DBO	demanda bioquímica de oxigênio	(mg/L)
$d_j(n)$	saída desejada do neurônio de saída j	
DQO	demanda química de oxigênio	(mg/L)
E	eficiência de transferência de oxigênio	(%)
E	eficiência global de remoção de matéria orgânica	(%)
$e_j(n)$	erro na saída de um neurônio j	
f_{ns}	fração de sólidos não-sedimentáveis	
f_P	fração da biomassa levando a produtos particulados	
g	aceleração da gravidade	(m^2/s)
$g(w_{final})$	vetor gradiente do vetor peso	
$G_{o,i}$	fluxo de sólidos devido ao movimento ascensional	($\text{g}/\text{m}^2 \cdot \text{h}$)
G_s	fluxo de sólidos	($\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{h}$)
G_u	escoamento de sólidos por sedimentação	($\text{g}/\text{m}^2 \cdot \text{d}$)
H_∞	profundidade da manta de lodo após decorrido um longo período de tempo	(m)
H_2	altura da manta de lodo em um tempo t_2	(m)
H_S	altura do volume líquido do decantador	(m)
H_t	altura da manta de lodo em um tempo t	(m)
i_{XB}	massa de nitrogênio por massa de DQO na biomassa	(gN/gDQO)
i_{XP}	massa de nitrogênio por massa de DQO nos produtos da biomassa	(gN/gDQO)
j	neurônio escondido	
k	neurônio de saída	
K	constante empírica	d/m
$K_{O,A}$	coeficiente de saturação do oxigênio para a biomassa autotrófica	(gO_2/m^3)
k_a	coeficiente de amonificação	($\text{m}^3/\text{gDQO} \cdot \text{d}$)
K_d	coeficiente de decaimento endógeno	(d^{-1})
K_g	coeficiente de difusão gasosa	
k_h	velocidade máxima específica de hidrólise	($\text{gDQO}/\text{gDQO} \cdot \text{d}$)
K_{la}	coeficiente global de transferência de oxigênio	(s^{-1})
K_{NH}	coeficiente de saturação da amônia para a biomassa autotrófica	(gNH_3/m^3)

K_{NO}	coeficiente de saturação do nitrato para a biomassa heterotrófica desnitrificante	(gNO_3/m^3)
$K_{O,H}$	coeficiente de saturação do oxigênio para a biomassa heterotrófica	(gO_2/m^3)
K_S	coeficiente de saturação para a biomassa heterotrófica	(gDQO/m^3)
K_s	constante de meia-velocidade (concentração de substrato quando o crescimento é a metade do crescimento máximo)	(mg/L)
K_x	coeficiente de saturação para a hidrólise do substrato lentamente biodegradável	(gDQO/gDQO)
m	número de neurônios na camada de saída	
μ_{max}	velocidade máxima de crescimento específico	(d^{-1})
$MLSS$	sólidos suspensos no tanque de aeração	(mg/L)
$MLVSS$	sólidos suspensos voláteis no tanque de aeração	(mg/L)
$m_{O_2, fornecida}$	massa de oxigênio fornecida ao sistema	($\text{g}/\text{m}^3 \cdot \text{d}$)
MRE	erro relativo médio	(%)
MSE	erro quadrático médio	
N	total de padrões do conjunto de treinamento	
OD	concentração de oxigênio dissolvido	(mg/L)
OTR	taxa real de transferência de oxigênio em condições de campo	($\text{kg O}_2/\text{kW} \cdot \text{h}$)
OUR	taxa de utilização de oxigênio	($\text{mg}/\text{L} \cdot \text{d}$)
p	número de entradas	
Q	vazão de alimentação do reator	(m^3/d)
Q_{air}	vazão de ar	(m^3/d)
Q_{ar}	vazão de ar	(m^3/d)
$Q_{ar fornecida}$	vazão de ar fornecida ao sistema	(m^3/d)
Q_e	vazão do clarificado de saída	(m^3/d)
Q_f	vazão volumétrica para o sedimentador	(m^3/d)
Q_o	vazão do clarificado de saída do decantador secundário	(m^3/d)
Q_R	vazão de recirculação de lodo (lodo de retorno)	(m^3/d)
$Q_{\bar{t}}$	vazão média para o tempo de residência	(m^3/d)
Q_u	vazão de retirada do lodo do fundo do decantador secundário	(m^3/d)
Q_w	vazão de descarte de lodo	(m^3/d)
r	razão entre a vazão afluyente e de lodo de retorno;	
r	velocidade de nitrificação	($\text{mgN}/\text{L} \cdot \text{d}$)

R	taxa de consumo de oxigênio	(mg/L.d)
r'_g	velocidade líquida de crescimento bacteriano	(mg/L.d)
RBCOD	substrato rapidamente biodegradável	(mgDQO/L)
r_c	mudança na concentração	(mg/L.s)
R_d	velocidade de nitrificação com limitação de substrato	(mgN/L.d)
Re	número de Reynolds	(adimensional)
R_g	velocidade de nitrificação	(mgN/L.d)
R_O	velocidade de nitrificação de referência	(mgN/L.d)
r_h	parâmetro de sedimentação do zona compactada	(m ³ /g)
r_m	velocidade de transferência de massa	(L.t ⁻¹)
r_M	taxa de consumo de oxigênio pelos microrganismos	(mg/L.d)
r_{O_2}	taxa de utilização de oxigênio	(mg/L.d)
r_p	parâmetro de sedimentação da zona floculenta	(m ³ /g)
r_{su}	velocidade de utilização do substrato	(mg/L.d)
S	concentração do substrato limitante	(mg/L)
S_O	concentração do substrato limitante na entrada do reator	(mg/L)
S_{ALK}	alcalinidade	(mol/L)
SBCOD	substrato lentamente degradável	(mgDQO/L)
SDF	sólidos dissolvidos fixos	(mg/L)
SDT	sólidos dissolvidos totais	(mg/L)
SDV	sólidos dissolvidos voláteis	(mg/L)
Sed	sólidos sedimentáveis	(mL/L)
S_I	material orgânico inerte solúvel	(mgDQO/L)
S_{ND}	nitrogênio orgânico biodegradável solúvel	(mgN/L)
S_{NH}	nitrogênio NH ₄ ⁺ + NH	(mgN/L)
S_{NO}	nitrogênio nitrato e nitrito	(mgDQO/L)
S_O	oxigênio	(mgDQO/L)
S_o	concentração do substrato limitante na saída do reator	(mg/L)
$SOTE$	eficiência padrão de transferência de oxigênio para a água limpa	(%)
$SOTR$	taxa padrão de transferência de oxigênio em condições de teste a 20°C e concentração de oxigênio dissolvido nula	(kg O ₂ /kW.h)
SRT	tempo de retenção celular	(dias)
S_S	substrato rapidamente biodegradável	(mgDQO/L)
SS	sólidos suspensos na entrada	(mg/L)
SSF	sólidos suspensos fixos	(mg/L)

SST	sólidos suspensos totais	(mg/L)
SSV	sólidos suspensos voláteis	(mg/L)
ST	sólidos totais	(mg/L)
STF	sólidos totais fixos	(mg/L)
STV	sólidos totais voláteis	(mg/L)
SVI	índice volumétrico do lodo	
t	tempo	(dias)
T	temperatura	(°C)
\bar{t}	tempo de residência hidráulico no decantador primário	(dias)
U	taxa específica de utilização de substrato	(d ⁻¹)
V	capacidade ativa do decantador primário	(m ³)
V	volume do tanque de aeração	(m ³)
V_c	velocidade terminal da partícula	(m/s)
v_o	máxima velocidade de sedimentação de Vesilind	(m/d)
v_o	velocidade ascensional devido ao movimento do fluido	(m/h)
v'_o	máxima velocidade de sedimentação	(m/d)
V_R	volume do reator (tanque de aeração)	(L)
V_r	volume do reator (tanque de aeração)	(L)
v_s	velocidade de sedimentação de Vesilind	(m/h)
w_{ji}	pesos sinápticos	
w_{j0}	thresholds	
x	valor da variável	
X	concentração de microrganismos no tanque de aeração	(mg/L)
x'	valor normalizado da variável x	
x'_{max}	valor máximo da variável x normalizada	
x'_{min}	valor mínimo da variável x normalizada	
X_0	concentração de microrganismos na entrada do sistema	(mg/L)
$X_{B,A}$	biomassa autotrófica ativa	(mgDQO/L)
$X_{B,H}$	biomassa heterotrófica ativa	(mgDQO/L)
X_e	concentração de microrganismos no efluente do sistema de decantação	(mg/L)
X_f	concentração de sólidos suspensos na alimentação do decantador secundário	(mg/L)
X_H	biomassa heterotrófica ativa	(mgDQO/L)
X_I	material orgânico inerte particulado	(mgDQO/L)

X_j	concentração de sólidos na camada j	(mg/L)
X_j	concentração de substâncias particuladas na entrada do decantador primário	(mg/L)
$X_{j,e}$	concentração de substâncias particuladas na saída do decantador primário	(mg/L)
$x_{max,exp}$	valor máximo da variável x	
X_{MIN}	concentração de sólidos não sedimentáveis	(g/m ³)
$x_{min,exp}$	valor mínimo da variável x	
X_{ND}	nitrogênio orgânico biodegradável particulado	(mgN/L)
X_{ND}	nitrogênio orgânico biodegradável particulado	(mgN/L)
X_P	produtos particulados liberados pelo decaimento do biomassa (mgDQO/L)	
X_R	concentração de microrganismos na linha de retorno de lodo	(mg/L)
X_S	substrato lentamente degradável	(mgDQO/L)
X_t	concentração <i>threshold</i> (limiar) no decantador secundário	(mg/L)
Y	coeficiente de produção máxima (razão de células formadas por massa de substrato consumido)	(mg/mg)
Y_A	coeficiente de produção de biomassa autotrófica	(gDQO/gN)
Y_H	coeficiente de produção de biomassa heterotrófica	(gDQO/gDQO)
y_i	entradas do neurônio	
$y_j(n)$	saída real do neurônio j	
z	altura da camada i	(m)
z_m	altura da camada m	(m)

subíndices:

O	entrada do reator ou estado inicial da variável
R	linha de recirculação do lodo
S	saída do reator

RESUMO

HANISCH, W. S. (1999). *Desenvolvimento de modelos mecanístico e neural para o processo de lodos ativados de tratamento de esgotos sanitários*. São Carlos, 1999. 208p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

Esta pesquisa confronta a modelagem mecanística de um sistema de tratamento de esgotos de lodos ativados, utilizando o equacionamento cinético do Modelo Número 1 da IAWQ e a modelagem empírica das Redes Neurais Artificiais. Este tipo de técnica de modelagem empírica se confronta com a modelagem mecanística tradicional, pois o conhecimento da microbiologia e cinética bacteriana e suas inter-relações não é necessário, embora desejável. Isto é de especial relevância na modelagem dos fenômenos naturais de tratamento de esgotos, em que os modelos mecanísticos encontrados são muito complexos e não descrevem com exatidão os fenômenos envolvidos. Os resultados da simulação do modelo mecanístico foram empregados como base de dados para o desenvolvimento do modelo de Redes Neurais. As saídas desse modelo foram as variáveis que podem ser manipuladas na operação do sistema. Foram elas as vazões de descarte e recirculação de lodo e vazão de ar. Os resultados obtidos comprovaram que esta abordagem é realmente efetiva para a modelagem de processos de tratamento de esgotos. A rede MLP (*multi-layer perceptron*) com nove entradas, treze neurônios na camada escondida e três na camada de saída apresentou os menores erros relativos médios de validação: $(9,33 \pm 1,60)\%$ para a vazão de descarte de lodo, $(6,87 \pm 0,77)\%$ para a vazão de recirculação de lodo e $(2,32 \pm 0,32)\%$ para a vazão de ar.

Palavras-chave: processo de lodos ativados; redes neurais, modelo número 1 da IAWQ.

ABSTRACT

HANISCH, W. S. (1999). *Development of mechanistic and neural models for the activated sludge process treating domestic sewage*. São Carlos, 1999. 208p. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.

In this thesis the author compares a mechanistic model of an activated sludge system for the treatment of sewage with an empirical model formulated using Artificial Neural Network techniques. The mechanistic model was derived using the kinetic equations from IAWQ number 1 model. Conceptually the approach used in these two models are totally different. While for the mechanistic one the knowledge of microbiology and the microorganisms kinetics and their interrelations with each other are necessary for the empirical model this knowledge is not needed, although helpful. This difference is of special applicability for modeling of natural phenomena that occurs in sewage treatment systems. In this case the mechanistic models tend to be too complex and cannot describe with accuracy the various phenomena that occurs concurrently. Results from the mechanistic model were used as a data base for the neural network development. The neural network outputs were chosen among the parameters that can be adjusted while operating an activated sludge plant: sludge recycle flow rate, sludge wasting and air flow rate. The neural network model results confirmed previous works which indicated the effectiveness of this approach to model sewage treatment processes. The MLP (multi-layer perceptron) network with nine inputs, thirteen neurons in the hidden layer and three neurons in the output layer presented the lowest average relative errors of validation: $(9.33 \pm 1.60)\%$ for sludge recycle flow rate; $(6.87 \pm 0.77)\%$ for sludge wasting and $(2.32 \pm 0.32)\%$ for the air flow rate.

Keywords: activated-sludge process, neural networks, IAWQ model number 1, wastewater treatment.

1 **INTRODUÇÃO E OBJETIVOS**

Motivação, justificativas e objetivos da pesquisa realizada.

1.1 JUSTIFICATIVA

O mau funcionamento de uma Estação de Tratamento de Esgotos (ETE) traz sérios problemas ambientais e sociais, visto que os efluentes destas estações podem causar ou alastrar diversas doenças aos seres humanos, assim como desestabilizar o meio natural no qual estes despejos são lançados (Belanche, et al., 1992).

Ainda que conscientes da grande importância do tratamento de esgotos, no Brasil ainda muito pouco se tem investido para melhorar as redes coletoras de esgotos e posterior tratamento. Silva Júnior (1996) descreve, fundamentado em levantamento da ABES (Associação Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental), que 30,89% da população total brasileira (39,94% da população urbana, 27,64% das sedes municipais e 4,73% dos distritos) têm seus esgotos coletados e, destes, apenas 10% têm tratamento adequado (Silva Júnior, 1996; Tinôco Filho, 1996). Esta situação só tem contribuído para que, no final deste milênio, doenças relacionadas à falta de saneamento básico, como a cólera e dengue ressurgam, ou ainda outras, como a malária e leptospirose continuem a contaminar milhares de brasileiros.

Devido à dificuldade de se modelar os fenômenos biológicos dos processos de tratamento de esgoto, caracterizados por serem altamente complexos e não lineares e com o intuito de melhorar a operação destas estações de tratamento, de forma a manter um nível adequado de tratamento e reduzir custos operacionais, pretende-se simular reatores biológicos, mais especificamente um processo de lodos ativados, utilizando duas

formulações diferentes: um primeiro modelo mecanístico e outro empírico, utilizando a técnica de Redes Neurais.

De acordo com Barros Neto et al. (1996) uma importante distinção quando se modela dados resultantes de experimentos ou observações é entre os modelos empíricos e mecanísticos. Modelos empíricos procuram apenas descrever, com base na evidência experimental, o comportamento do processo estudado. Isto opõe-se aos modelos mecanísticos, que tentam explicar, a partir de leis físicas consolidadas, o comportamento de determinados processos. Segundo estes autores, a modelagem empírica já se torna satisfatória quando é capaz de descrever o processo no domínio do fenômeno estudado, ou seja, na região experimental investigada. Modelos baseados em princípios ou leis fundamentais trazem ou produzem mais conhecimento sobre o comportamento do sistema e geralmente podem ser extrapolados quando dados não estão disponíveis. E mais, o uso dos fundamentos do processo permite que outros sistemas com características similares possam ser estudados, trazendo benefícios à ciência e engenharia. Quando os sistemas são muito complexos, e os processos biológicos de tratamento de esgotos se encaixam nesta categoria, muitos mecanismos não são totalmente entendidos e algumas relações empíricas podem se fazer necessárias. Na prática, a maioria dos modelos não é totalmente mecanístico ou empírico, sendo ao invés, uma mistura destes dois. (Andrews, 1992).

Uma outra importante classificação quanto aos modelos, sugerida por Andrews (1992), são os modelos determinísticos e estocásticos. Nos modelos determinísticos, valores únicos para as entradas, saídas e parâmetros do sistema podem ser avaliados. A solução do sistema tem um número definido de respostas. Por outro lado, nos modelos estocásticos, o princípio da incerteza é acrescentado, ou seja, a probabilidade de ocorrência de uma determinada solução é testada. Assim como modelos mecanísticos podem conter componentes empíricos, modelos determinísticos podem conter elementos estocásticos.

Tecnicamente, os modelos devem permitir o projeto, construção e operação de sistemas reais. Cientificamente devem fornecer informações sobre mecanismos específicos do sistema, compreendendo de uma forma global as interações de todas as variáveis envolvidas, expandindo o conhecimento da engenharia.

Nesta pesquisa confrontam-se as formas mecanística e empírica de modelagem de sistemas biológicos aeróbios de tratamento de esgotos. Pretende-se desenvolver um modelo para o processo de lodos ativados convencional, utilizando um modelo predominantemente mecanístico, mas com fortes componentes empíricos na formulação de suas equações

cinéticas, o Modelo Número 1 da IAWQ. Na outra abordagem, um modelo totalmente empírico, utilizando a técnica de Redes Neurais para a aproximação de funções não lineares é empregado. Os dados gerados pelas simulações do modelo mecanístico serão utilizados para o treinamento das Redes Neurais.

A forma como os problemas são abordados pela técnica de Redes Neurais e o paralelismo natural inerente à sua arquitetura, criam a possibilidade de um desempenho superior à dos modelos convencionais. Este tipo de técnica modela o sistema como se fosse uma caixa preta. Não é necessário conhecer os fenômenos internos, nem suas inter-relações, basta ter dados experimentais da entrada e saída do sistema para que se ajuste a eles um modelo matemático. Redes Neurais são técnicas de Inteligência Artificial que, baseadas em mecanismos simplificados do funcionamento do cérebro humano, extraem conhecimento de um determinado conjunto de dados e podem ajustar, segundo o teorema de Kolmogorov (Kolmogorov, 1963), qualquer tipo de função linear e não-linear. Entre suas atribuições mais comuns estão a aproximação de funções, previsão, classificação e reconhecimento de padrões. Geralmente, as variáveis que podem ser manipuladas em um processo de lodos ativados e, conseqüentemente controlar o processo, são a vazão de retorno de lodo, sólidos suspensos no tanque de aeração e oxigênio dissolvido.

Wilcox (1995) enfatiza a dificuldade de se estabelecer um modelo fenomenológico que descreva as interações dos microrganismos em processos biológicos. O controle efetivo de um processo de lodos ativados depende em parte da habilidade de se simular a dinâmica do reator biológico e decantador secundário (Côté et al., 1995).

von Sperling (1997) enfatiza que as cargas altamente variáveis de uma estação de esgotos incentivam a adoção de um controle operacional, mas simultaneamente introduzem uma grande dificuldade na sua implementação. O controle de uma estação difere do controle de um processo industrial, principalmente devido à grande variabilidade das características do afluente. Nos processos industriais, as características do afluente não exibem variações significativas em torno de um valor de referência (*set point*) e podem ser facilmente controladas por sensores em linha (*on-line*) tradicionais.

Ainda segundo von Sperling (1997), algumas características têm dificultado a aplicação de um controle efetivo em estações de tratamento de esgotos:

- ✓ as características do afluente são de natureza dinâmica e estocástica, com distúrbios desconhecidos e ruídos de medição superpostos a variações no processo;

- ✓ o efeito das ações de controle varia para as diferentes variáveis do processo, tanto em termos da defasagem de tempo, quanto da magnitude da resposta;
- ✓ há uma carência de sensores em linha para algumas variáveis do processo;
- ✓ nem todas as variáveis do processo podem ser medidas diretamente;
- ✓ as ações de controle são usualmente limitadas pelas restrições físicas do sistema;
- ✓ projeto pouco flexível;
- ✓ dificuldade em incorporar modelos complexos do processo nos algoritmos de controle e, de forma oposta, há limitações nas estratégias de controle baseadas em modelos do processo bastante simplificados.

O problema da obtenção de modelos que adequadamente representem o comportamento dinâmico de dados de campo não é uma tarefa fácil. A natureza do processo em si, a falta de entendimento e descrição dos fenômenos envolvidos, a disposição de dados confiáveis, relevantes e representativos do processo e a estimativa de numerosos parâmetros envolvidos são os principais fatores a serem considerados no desenvolvimento de modelo para o processo de lodos ativados (Côté et al, 1995).

Embora modelos determinísticos considerem importantes parâmetros operacionais do processo de tratamento biológico, incluindo a razão alimento/microrganismos (F/M), demandas química e bioquímica de oxigênio (DQO e DBO, respectivamente), carga orgânica, tempo médio de residência celular, a inter-relação entre estes parâmetros e a eficiência do tratamento não são ainda totalmente entendidas (Pu e Hung, 1995)

Nos próximos capítulos apresentam-se os Fundamentos Teóricos, Métodos, Discussão dos Resultados, Conclusões e Sugestões, Anexos, Referências Bibliográficas e Apêndices desta pesquisa. O capítulo Fundamentos Teóricos está dividido em duas seções, Modelo Mecanístico e Modelo Empírico. Cada uma delas apresenta a conceituação básica necessária para o entendimento dos modelos propostos. No capítulo Métodos é apresentado o desenvolvimento detalhado dos modelos mecanístico e neural. Na seção Discussão dos Resultados apresentam-se os resultados obtidos pelos modelos mecanístico e neural, assim como a discussão detalhada deles. Na seção Conclusões e Sugestões finaliza-se a pesquisa emitindo-se as considerações mais importantes levantadas sobre os modelos. Os Anexos apresentam a maioria dos resultados levantados nesta pesquisa. As Referências Bibliográficas indicam toda a literatura que foi efetivamente utilizada na realização da pesquisa. Finalmente, nos Apêndices estão expostas algumas complementações da fundamentação teórica, sugeridas ao longo do texto principal.

1.2 OBJETIVOS

- ✓ Formulação de um modelo mecanístico para o processo de lodos ativados, utilizando o equacionamento cinético do Modelo Número 1 da IAWQ.
- ✓ Investigar a adequabilidade da técnica de Redes Neurais Artificiais para a modelagem empírica do sistema de lodos ativados para o tratamento de esgotos sanitários;
- ✓ Comparar as técnicas de modelagem mecanística e empírica;
- ✓ Investigar a influência da vazão de ar, vazão de recirculação de lodo e vazão de descarte de lodo na eficiência do processo utilizando o modelo mecanístico.

2 **FUNDAMENTOS TEÓRICOS**

Revisão da literatura de trabalhos que subsidiaram o desenvolvimento dos modelos mecanístico e neural.

2.1 CONSIDERAÇÕES INICIAIS

Este capítulo foi estruturado para que se possa entender o desenvolvimento de ambos os modelos, o mecanístico e o empírico. Assim, agruparam-se os assuntos abordados em duas grandes seções: Modelo Mecanístico e Modelo Empírico. A seção Modelo Mecanístico está dividida em três partes, Modelo Número 1 da IAWQ, Modelos para o Decantador Secundário e Transferência de Oxigênio em Processos de Tratamento de Esgotos Sanitários. Para a subseção Modelo Número 1 da IAWQ é importante ter em mente que o modelo apresentado não é o único, mas decidiu-se aplicá-lo devido a sua grande utilização na literatura consultada. Por isso, toda a parte de cinética bacteriana em processos aeróbios será descrita utilizando o Modelo Número 1 da IAWQ. Outros modelos mais simples e até mais consolidados, mas não tão poderosos, existem, como, por exemplo, o equacionamento clássico de Eckenfelder (Eckenfelder e Grau, 1992). Este modelo é utilizado largamente no Brasil e exterior para o projeto de sistemas de lodos ativados para o tratamento de esgotos. O Apêndice I apresenta o seu equacionamento. Na subseção Modelos para o Decantador Secundário é apresentado um levantamento das formulações mais empregadas ultimamente para a modelagem desta importante parte do processo de lodos ativados. Na subseção Transferência de Oxigênio em Processos de Tratamento de Esgotos Sanitários, o enfoque é o procedimento de determinação do coeficiente global de transferência de oxigênio para esgotos sanitários pela conversão do coeficiente de água de abastecimento. A seção “Modelo

empírico” possui 2 subdivisões. A primeira delas, Redes Neurais, descreve, entre as técnicas da Inteligência Artificial (IA), a que foi escolhida para modelar o sistema de lodos ativados. Finalizando a parte conceitual, a seção Sistemas Inteligentes e a Modelagem de Processos de Tratamento de Esgotos Sanitários apresenta algumas aplicações de técnicas de Inteligência Artificial e Redes Neurais na modelagem, monitoramento e controle de águas superficiais e estações de tratamento de esgotos sanitários. Esta seção situa os principais trabalhos publicados recentemente, justificando a potencialidade do uso de ferramentas de IA para a modelagem de sistemas de tratamento de esgotos. Informações adicionais podem ser localizadas nas referências indicadas ao longo do texto.

2.2 MODELO MECANÍSTICO

2.2.1 MODELO NÚMERO 1 DA IAWQ

Em 1983 a IAWQ (International Association on Water Quality) (antiga IAWPRC - International Association on Water Pollution Research and Control) formou um grupo de pesquisa para promover e facilitar a aplicação de modelos matemáticos determinísticos no projeto e operação de tratamentos biológicos. Gujer e Henze (1991) descrevem que um modelo determinístico para um sistema de lodos ativados deve ser composto de, pelo menos, os seguintes elementos:

- ✓ Uma lista de componentes de interesse, expressos como um vetor de concentrações (C_i);
- ✓ Uma caracterização dos processos de transformação afetando estes componentes; o modelo biocinético, consistindo de uma matriz estequiométrica (v_{ij}) e um vetor das equações de velocidade dos processos (ρ_j);
- ✓ Uma caracterização do fluxograma do sistema, incluindo decantadores secundários, entradas, saídas e equipamentos de aeração;
- ✓ Uma caracterização do transporte interno (segundo os autores o transporte está relacionado às características de projeto de um sistema, como a configuração do reator, distribuição do afluente, mistura e remoção do excesso de lodo) e mistura, possivelmente separando componentes particulados e dissolvidos (sedimentação e clarificação).

O resultado deste trabalho de referência, depois de vários estudos e artigos publicados (van Haandel et al., 1981; Dold e Marais, 1986, entre eles) é o conhecido Modelo

Número 1 da IAWQ. Este modelo será descrito brevemente como forma de entendimento dos procedimentos adotados, não suprimindo a necessidade da leitura dos artigos originais. Este texto é baseado principalmente em Henze et al. (1987) e Leslie Grady Jr. (1989). É muito interessante a forma matricial em que este modelo é apresentado. Essa tabela (Tabela 2.1 da página 11) permite visualizar, dentro das simplificações estabelecidas, todos os processos, interações e inter-relações entre todos os componentes e processos biológicos. Todos os componentes considerados no modelo estão listados no topo da tabela, na primeira linha. Na parte inferior, última linha, há uma descrição destes componentes. Os processos fundamentais incluídos estão posicionados na coluna mais à esquerda da tabela, enquanto que suas equações descritivas estão na coluna à direita. O corpo da tabela contém todos os parâmetros estequiométricos para inclusão no balanço de massa do sistema.

A soma dos processos ρ_j apropriados multiplicados pelos coeficientes estequiométricos (v_{ij}) resulta na expressão de velocidade de reação (consumo ou produção) de um componente particular. Se um componente não tem impacto no processo ou vice-versa, então a interseção da linha do componente com a coluna do processo é uma célula vazia. Todos os componentes solúveis são indicados pela letra S e todos os componentes particulados pela letra X .

Os 4 primeiros componentes (S_I , S_S , X_I e X_S) caracterizam a parte orgânica do esgoto sanitário. O substrato rapidamente biodegradável S_S é qualquer material de moléculas simples que é degradado facilmente de tal forma que o uso do receptor de elétrons responde imediatamente, mudando sua concentração. São limitados à pequenas moléculas de ácidos graxos voláteis, carboidratos, álcoois, peptonas e aminoácidos (Henze, 1992). O substrato lentamente biodegradável X_S é todo material orgânico que precisa ser hidrolisado ou requer qualquer outro tipo de reação antes de ser degradado. Embora esteja especificado como material particulado, não necessariamente o é. O material orgânico inerte é qualquer componente com uma velocidade de reação tão baixa que seu decaimento é quase imperceptível dentro das condições normais de operação do sistema de tratamento. Os inertes são ainda divididos em solúveis S_I e particulados X_I . Os orgânicos solúveis inertes passam pelo sistema sem alteração alguma e sua concentração na saída do sistema é praticamente a mesma da entrada. O material orgânico inerte particulado X_I se acumula no sistema e somente uma parcela é descartada no lodo de descarte. Os componentes $X_{B,H}$ (biomassa heterotrófica ativa), $X_{B,A}$ (biomassa autotrófica ativa) e X_P (produtos particulados liberados pelo decaimento

da biomassa) constituem a parte restante dos sólidos suspensos voláteis no tanque de aeração (MLVSS).

A biomassa heterotrófica é responsável pela degradação da matéria orgânica sob condições aeróbias e anóxicas (ausência de oxigênio e presença de nitrito/nitrato). Porém, nenhuma distinção é feita entre bactérias nitrificantes e desnitrificantes. Um fator de correção η é adicionado ao processo de crescimento anóxico pois nem todas as bactérias heterotróficas podem desnitrificar. A biomassa autotrófica é responsável pela oxidação do nitrogênio amoniacal a nitrato com necessidade de oxigênio. A nitrificação, por simplificação, é considerada como um processo de uma só etapa, contudo o fenômeno não ocorre desta forma. O material particulado X_P representa "restos" do decaimento bacteriano tanto das heterotróficas quanto das autotróficas. O oxigênio dissolvido S_O está incluído porque é fundamental para o crescimento das bactérias heterotróficas e autotróficas. Não há entrada de oxigênio na matriz, mas um balanço de massa apropriado deve incluir esta fonte. Os componentes S_{NO} , S_{NH} , S_{ND} e X_{ND} são as formas de nitrogênio envolvidas no modelo. S_{NO} inclui o nitrato e nitrito, embora a estequiometria empregada considere como se tudo fosse nitrato. O nitrogênio nesta forma resulta do crescimento aeróbio de autotróficas e serve como receptor de elétrons para as bactérias desnitrificantes em condições anóxicas. S_{NH} combina as formas ionizada e não ionizada da amônia, servindo como substrato para a biomassa autotrófica e fonte de nitrogênio no processo de síntese de biomassa. S_{ND} e X_{ND} representam o nitrogênio orgânico rapidamente e lentamente biodegradáveis. O último componente S_{ALK} (alcalinidade) pode ou não ser admitido no modelo. Sua inclusão proporciona informações a respeito de mudanças no pH. Isto é importante porque tais mudanças podem causar efeitos na nitrificação e desnitrificação. Se a alcalinidade total cair a valores inferiores a 50mg $CaCO_3/L$ o pH se torna instável, podendo cair a valores inferiores a 6 e inibir a nitrificação.

Os processos incluídos neste modelo são o crescimento aeróbio e anóxico de bactérias heterotróficas, crescimento aeróbio de bactérias autotróficas, decaimento de bactérias heterotróficas e autotróficas, amonificação dos compostos orgânicos solúveis nitrogenados e hidrólise da matéria orgânica e nitrogenada particuladas. A Figura 2.1 representa esquematicamente o modelo proposto pela equipe de especialistas da IAWQ.

O crescimento heterotrófico é o processo fundamental na remoção da matéria orgânica e está ligado à remoção pelo coeficiente de produção de biomassa heterotrófica Y_H . A utilização de oxigênio e nitrato (receptores de elétrons) nos processos 1 e 2 (ver Tabela 2.1)

também está relacionada estequiometricamente ao crescimento celular através de um balanço de DQO. Os coeficientes estequiométricos foram assim definidos pois todos os elétrons removidos do meio devem ser transferidos para o material celular ou para o receptor de elétrons, oxigênio ou nitrato. Considera-se que as bactérias somente utilizam material orgânico rapidamente biodegradável, pois as moléculas são pequenas o suficiente para atravessar a membrana celular. A adoção de uma equação dupla de Monod para o crescimento aeróbio é consequência do substrato e do oxigênio poderem agir concomitantemente limitando o processo. Similarmente, o crescimento anóxico das bactérias heterotróficas é limitado pela concentração de nitrato no meio. Entretanto, o uso do nitrato é inibido pela presença de oxigênio e um terceiro termo é acrescentado à equação de Monod. É importante notar que quando $\left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O}\right)$ se aproxima de 1, $\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O}\right)$ se aproxima de 0 e vice-versa. Na verdade, estes termos são funções "liga/desliga" que favorecem ou o crescimento aeróbio ou anóxico de heterotróficas, visto que os dois processos não podem ocorrer plenamente ao mesmo tempo. Um fator de correção η_e é inserido no processo 2, uma vez que nem todas as bactérias heterotróficas podem usar o nitrato como receptor final de elétrons. O crescimento autotrófico de bactérias é tratado como no crescimento aeróbio de heterotróficas, substituindo-se a matéria orgânica por nitrogênio amoniacal. Nitrato é produzido neste processo. Os valores de $K_{O,A}$ e $K_{O,H}$ são diferentes, pois o oxigênio exerce papel diferente sobre cada uma destas bactérias.

Considera-se que o substrato lentamente biodegradável X_S é instantaneamente retirado da solução e aderido aos flocos de microrganismos. Entretanto, este substrato deve ser convertido à substrato rapidamente biodegradável antes de ser consumido pelas bactérias heterotróficas. A reação que envolve esta conversão é chamada de hidrólise no Modelo Número 1 da IAWQ (linha 7 da Tabela 2.1), embora, na realidade este processo seja muito mais complexo que o descrito. A energia associada à hidrólise é desprezível e pela estequiometria (ver Tabela 2.1), cada unidade de substrato lentamente biodegradável produz uma unidade de substrato rapidamente biodegradável. Salienta-se que não há utilização de oxigênio na hidrólise. De acordo com os autores do modelo (Henze et al., 1987), a cinética da hidrólise ainda necessita de muitos estudos para se chegar à modelos mais realísticos. Porém, esses autores afirmam que a cinética deve ser de primeira ordem em relação à biomassa heterotrófica.

Tabela 2.1: Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al., 1987).

componente i →		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Velocidades do processo, ρ_j (ML ⁻³ T ⁻¹)
processo j ↓		S_I	S_S	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
1	crescimento aeróbio de heterotróficas		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$				$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H} = \rho_1$
2	crescimento anóxico de heterotróficas		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2,86Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14,2,86Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}$	$\hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_8 X_{B,H}$
3	crescimento aeróbio de autotróficas						1		$\frac{4,57 - Y_A}{Y_A} *$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}$			$\frac{-i_{XB}}{14} - \frac{1}{7Y_A}$	$\hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A} = \rho_3$
4	decaimento de heterotróficas				$1-f_P$	-1		f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_H X_{B,H}$
5	decaimento de autotróficas				$1-f_P$		-1	f_P					$i_{XB} - f_P i_{XP}$		$b_A X_{B,A}$
6	amonificação do nitrogênio orgânico solúvel										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$
7	hidrólise dos orgânicos aderidos		1		-1										$k_h \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{ND}}{K_{ND} + S_{ND}} \right) \right] X_{B,H}$
8	hidrólise do nitrogênio orgânico aderido											1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$
Velocidade de conversão observada (ML ⁻³ T ⁻¹)						$\eta_i = \sum_j v_{ij} \rho_j$									
Parâmetros estequiométricos		Material orgânico inerte solúvel - M (DQO)L ⁻³	Substrato rapidamente biodegradável - M (DQO)L ⁻³	Material orgânico inerte particulado - M (DQO)L ⁻³	Substrato lentamente biodegradável - M (DQO)L ⁻³	Biomassa heterotrófica ativa - M (DQO)L ⁻³	Biomassa autotrófica ativa - M (DQO)L ⁻³	Produtos particulados liberados pelo decaimento da biomassa - M (DQO)L ⁻³	Oxigênio (DOQ negativa) - M (+DQO)L ⁻³	Nitrogênio nitrato e nítrico - M(N)L ⁻³	Nitrogênio NH ₄ ⁺ + NH ₃ - M(N)L ⁻³	Nitrogênio orgânico biodegradável solúvel - M(N)L ⁻³	Nitrogênio orgânico biodegradável particulado - M(N)L ⁻³	Alcalinidade - unidades molares	Parâmetros cinéticos: Crescimento e decaimento heterotrófico: $\hat{\mu}_H, K_S, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Crescimento e decaimento autotrófico: $\hat{\mu}_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Fator de correção para crescimento anóxico das heterotróficas: η_8 Amonificação: k_a Hidrólise: k_h, K_X Fator de correção para hidrólise anóxica: η_h

- 1) O sistema opera à temperatura constante e seus parâmetros são apropriados para a temperatura considerada;
- 2) O pH é constante e próximo ao neutro;
- 3) A natureza da matéria orgânica é constante embora sua concentração possa variar;
- 4) Nutrientes em quantidade suficiente são fornecidos ao sistema para permitir crescimento balanceado da biomassa;
- 5) Fatores de correção para a desnitrificação, η_g e η_h são fixos e constantes para um determinado resíduo. É possível que estes valores sejam influenciados pela configuração do sistema, contudo isto não é considerado;
- 6) Os coeficientes de nitrificação não se alteram quando outros constituintes são removidos;
- 7) A biomassa heterotrófica é homogênea e não sofre mudanças com o tempo;
- 8) A assimilação da matéria orgânica particulada no floco é instantânea;
- 9) A hidrólise da matéria orgânica e nitrogenada é inter-relacionada e ocorre simultaneamente com velocidades iguais;
- 10) O tipo de receptor de elétrons presente não afeta a perda de biomassa por decaimento.

Para se aplicar o modelo impõe-se que:

- 1) A velocidade de crescimento líquido ou *SRT* (tempo de retenção celular) da biomassa deve estar dentro da faixa em que se desenvolve um lodo com boas características de sedimentabilidade. Este intervalo situa-se entre 3 e 30 dias.
- 2) A configuração do reator deve ser tal que a concentração de lodo ativado entrando no decantador secundário esteja na faixa de 750g/m^3 a 7.500g/m^3 de modo a atingir boas condições de sedimentabilidade;
- 3) A fração não aerada do reator não deve exceder 50% do volume total, pois do contrário pode ocorrer deterioração das características de sedimentabilidade do lodo;
- 4) A intensidade de mistura associada à transferência de oxigênio não deve ultrapassar 240s^{-1} para prevenir a ruptura dos flocos formados. Isto deve ser considerado durante o dimensionamento do reator.

Um dos grandes problemas na utilização do Modelo Número 1 da IAWQ vem da sua elevada complexidade. Por um lado isto traz uma vantagem enorme sobre qualquer um dos modelos até hoje utilizados, que é o nível de conhecimento atingido e refletido na matriz. Uma primeira análise pode parecer complicada, mas uma maior insistência permite extrair as

principais inter-relações entre processos e componentes. É claro que este modelo é simplificado, mas não deixa de ser uma maneira excepcional de se entender o processo de lodos ativados e suas variações. Por outro lado, esta certa complexidade, que envolve a especificação de 13 componentes, 14 parâmetros cinéticos e 5 estequiométricos dificulta, parcialmente, sua aplicação. Segundo os autores do modelo, 8 destes parâmetros mostram pouca variação e podem ser considerados constantes, independentemente do esgoto sanitário a ser tratado. São eles Y_A , b_A , f_P , i_{XB} , i_{XP} , $K_{O,H}$, $K_{N,O}$ e $K_{O,A}$. Os outros parâmetros cinéticos devem ser determinados experimentalmente, tornando-se consistentes com as suposições do modelo. O grande paradoxo na aplicação deste modelo não se encontra na resolução numérica ou nas simplificações impostas, mas sim no problema da caracterização do esgoto sanitário e demais parâmetros cinéticos a serem definidos. Algumas destas constantes utilizadas na aplicação do Modelo Número 1 estão resumidas nas obras de Henze et al. (1987) e Henze et al. (1996), mostradas nas Tabelas 2.2 a 2.4. A IAWQ promoveu em 1992 um seminário internacional, publicado na revista *Water Science and Technology*, intitulado "Interactions of wastewater, biomass and reactor configurations in biological treatment plants" no qual apresentaram diversas pesquisas de caracterização de esgotos sanitários para uso no Modelo Número 1.

2.2.1.1 Determinação dos parâmetros cinéticos do Modelo Número 1 da IAWQ.

Kappeler e Gujer (1992) afirmam que, para a aplicação do Modelo Número 1, os parâmetros cinéticos e a composição do esgoto sanitário precisam ser conhecidos. Nesse trabalho os autores apresentam procedimentos para a determinação de parâmetros da biomassa heterotrófica sobre condições aeróbias e caracterização do esgoto sanitário. Alguns dos métodos são exatamente os mesmos sugeridos no trabalho inicial de Henze et al. (1987). Gujer foi também um dos idealizadores do Modelo Número 1. A estimativa da maioria desses parâmetros pode ser obtida pela determinação da taxa de utilização de oxigênio em experimentos de batelada. Aqui serão apenas citados estes métodos para que se possa compreender a complexidade de tais determinações. Sugere-se, a quem interessar, a consulta às referências citadas.

Tabela 2.2: Definição das constantes e parâmetros cinéticos.

μ_A	velocidade máxima de crescimento específico para a biomassa autotrófica (d^{-1})
η_g	fator de correção para μ_H sob condições anóxicas (adimensional)
μ_H	velocidade máxima de crescimento específico para a biomassa heterotrófica (d^{-1})
η_h	fator de correção para a hidrólise sobre condições anóxicas (adimensional)
b_A	coeficiente de decaimento para a biomassa autotrófica (d^{-1})
b_H	coeficiente de decaimento para a biomassa heterotrófica (d^{-1})
f_P	fração da biomassa levando a produtos particulados (adimensional)
i_{XB}	massa de nitrogênio por massa de DQO na biomassa ($gN/gDQO$)
i_{XP}	massa de nitrogênio por massa de DQO nos produtos da biomassa ($gN/gDQO$)
$K_{O,A}$	coeficiente de saturação do oxigênio para a biomassa autotrófica (gO_2/m^3)
k_a	coeficiente de amonificação ($m^3/gDQO.d$)
k_h	velocidade máxima específica de hidrólise ($gDQO/gDQO.d$)
K_{NH}	coeficiente de saturação da amônia para a biomassa autotrófica (gNH_3/m^3)
K_{NO}	coeficiente de saturação do nitrato para a biomassa heterotrófica desnitrificante (gNO_3/m^3)
$K_{O,H}$	coeficiente de saturação do oxigênio para a biomassa heterotrófica (gO_2/m^3)
K_S	coeficiente de saturação para a biomassa heterotrófica ($gDQO/m^3$)
K_x	coeficiente de saturação para a hidrólise do substrato lentamente biodegradável ($gDQO/gDQO$)
Y_A	coeficiente de produção de biomassa autotrófica ($gDQO/gN$)
Y_H	coeficiente de produção de biomassa heterotrófica ($gDQO/gDQO$)

Tabela 2.3: Exemplos de conjuntos de constantes usadas em modelos para processos de lodos ativados (20°C).

	Unidades	UCTASP ¹	P111 ²	EFOR ³	Número 1
Constantes estequiométricas					
Y_A	gDQO/gN	0,15	0,24	0,24	0,24
Y_H	gDQO/gDQO	0,67	0,57	0,67	0,67
f_I	-	0,08	0,10	0,08	0,08
$f_{B,N}$	gN/gDQO	0,068	0,07	0,086	0,086
$f_{X,N}$	gN/gDQO	0,068	0,06	0,02	0,06
Constantes cinéticas					
$\mu_{máx,H}$	d ⁻¹	3,2	4,0	6,0	6,0
$\mu_{máx,A}$	d ⁻¹	0,45	1,0	0,8	0,8
$K_{S,COD}$	gDQO/m ³	5	20	2,5	20
K_{S,O_2}	gO ₂ /m ³	0,002	0,25	0,2	0,2
K_{S,NO_3}	gNO ₃ -N/m ³	0,1	0,5	0,5	0,5
$K_{S,NH_4,A}$	gNH ₄ -N/m ³	0,002	0,5	0,4	0,4
$K_{S,O_2,A}$	gO ₂ /m ³	1,0	0,8	1,0	1,0
b_H	d ⁻¹	0,62	0,5	0,62	0,62
b_A	d ⁻¹	0,04	0,15	0,15	
η_g	-	0,33	0,8	0,8	0,8
η_h	-	0,35	0,35		0,4
k_h^4	gDQO/(gDQO.d)	1,35	1,5	5,0	3,0
k_X	gDQO/gDQO	0,027	0,02	0,03	0,03

Fonte: Henze et al. (1996).

em que UCTASP, P111 e EFOR são *softwares* que apresentam pequenas variações do Modelo Número 1 da IAWQ, principalmente no processo de hidrólise.

¹ UCTOLD (1991). Activated Sludge System Simulation Program. Ed: P. L. Dold et al. (1991): Water Research Commission, Pretoria, South Africa.

² P111 (1991). Computer program. Aquasystems. Winterthur. Suíça.

³ EFOR (1991). Computer Model for Treatment Plants. Manual, versão 2.0. Efor aps, Soborg, Dinamarca.

⁴ Esta constante está associada a diferentes expressões nos modelos.

Tabela 2.4: Parâmetros típicos a pH neutro e 20°C para esgotos sanitários.

Símbolo	Unidades	
	Parâmetros estequiométricos	Valor
Y_A	g células DQO formadas (g N oxidado) ⁻¹	0,07-0,28
Y_H	g células DQO formadas (g DQO oxidada) ⁻¹	0,46-0,69
f_P	adimensional	0,08
i_{XB}	g N (g DQO) ⁻¹ na biomassa	0,086
i_{XP}	g N (g DQO) ⁻¹ no produto da biomassa	0,06
	Parâmetros cinéticos	
μ_H	dia ⁻¹	3-13,2
K_S	g DQO m ⁻³	10-180
$K_{O,H}$	g O ₂ m ⁻³	0,01-0,15
K_{NO}	g NO ₃ - N m ⁻³	0,1-0,2
b_H	dia ⁻¹	0,09-4,38
η_g	adimensional	0,6-1,0
η_h	adimensional	0,4
k_a	m ³ (g células DQO.dia) ⁻¹	0,016
k_h	g vagorosamente degradável DQO (g células DQO.dia) ⁻¹	2,2
K_X	g vagorosamente degradável DQO (g células DQO) ⁻¹	0,15
μ_A	dia ⁻¹	0,34-0,65
K_{NH}	g NH ₃ - N m ⁻³	0,6-3,6
$K_{O,A}$	g O ₂ m ⁻³	0,5-2,0
b_a	dia ⁻¹	0,05-0,15
k_A	m ³ DQO (g.dia) ⁻¹	0,08

Fonte: Henze et al. (1987)

2.2.1.1.1 Determinação da velocidade de crescimento específico máxima μ_{max} e do coeficiente de respiração endógena b_H .

A velocidade de crescimento específico máxima μ_{max} e o coeficiente de respiração endógena b_H podem ser determinados em ensaio de batelada com esgoto sanitário centrifugado e baixa quantidade de biomassa ativa à razão de 20:1. Todos os ensaios em batelada realizados por Kappeler e Gujer (1992) utilizaram o inibidor de nitrificação alitiouréia. Durante o primeiro período do teste, a taxa de utilização de oxigênio aumenta devido ao crescimento aeróbio. Subitamente, a taxa de utilização de oxigênio diminui por causa da concentração limitada de matéria orgânica S_S . Neste estágio, a respiração (taxa de utilização de oxigênio) é dominada pelo crescimento utilizando substrato S_S liberado pela hidrólise. A taxa de utilização de oxigênio sem limitação de substrato e oxigênio é dada por:

$$r_{O_2}(t) = -\left(\frac{1-Y_H}{Y_H}\right)\mu_{max}\cdot X(t) - (1-f_P)b_H\cdot X_H(t) \quad (2.1)$$

Neste caso, a taxa de utilização de oxigênio depende exclusivamente da biomassa heterotrófica. Deduz-se o balanço de massa para estas condições:

$$\frac{dX_H}{dt} = (\mu_{max} - b_H)X_H(t) \quad (2.2)$$

Substituindo-se e rearranjando-se as Equações 2.1 e 2.2 e comparando o resultado com a taxa inicial de utilização de oxigênio, chega-se a:

$$\ln\left(\frac{r_{O_2}(t)}{r_{O_2}(t_0)}\right) = (\mu_{max} - b_H)t \quad (2.3)$$

Esta função representa uma equação de 1º grau com coeficiente angular igual a $(\mu_{max}-b_H)$. Este valor pode ser determinado por métodos matemáticos apropriados. Kapeler e Gujer (1992) consideram, baseados em trabalhos de Sollfrank (1988)⁵ e Wiesmann (1986)⁶, que o valor de b_H é muito menor que μ_{max} e a razão b_H/μ_{max} é aproximadamente igual a 5%. Daí, estima-se μ_{max} .

⁵ Sollfrank U. (1988). Bedeutung organischer Fraktionen in kommunalem Abwasser im Hinblick auf die mathematische Modellierung von Belebtschlammssystemen. *Dissertation n. 8765*, ETH Zurich.

⁶ Wiesman U. (1986). Kinetik der aeroben Abwasserreinigung durch den Abbau von organischen Verbindungen und Nitrifikation. *Chemical Engineering Technology*, v. 58, n. 6, p. 464-474.

2.2.1.1.2 Determinação do coeficiente de produção de biomassa heterotrófica Y_H

O coeficiente de produção de biomassa heterotrófica Y_H pode ser determinado realizando-se um ensaio batelada com o filtrado de uma alíquota de esgoto sanitário e biomassa aclimatada. A DQO total e a solúvel devem ser medidas periodicamente e o coeficiente Y_H pode ser calculado por:

$$Y_H = \frac{\Delta DQO_{\text{células}}}{\Delta DQO_{\text{solúvel}}} \quad (2.4)$$

A DQO das células é a diferença entre a DQO total e a DQO solúvel.

2.2.1.1.3 Determinação da concentração de biomassa heterotrófica ativa X_{BHO}

Obtidos os valores de μ_{\max} e Y_H e admitindo-se valores para b_H e f_P , a concentração de biomassa heterotrófica ativa X_{BHO} no esgoto sanitário pode ser calculada realizando um ensaio em batelada somente com esgoto sanitário:

$$X_{BHO} = \frac{r_{O_2}(t_0)}{\left(\frac{1-Y_H}{Y_H}\right) \cdot \mu_{\max} - (1-f_P)b_H} \quad (2.5)$$

2.2.1.1.4 Determinação da concentração de substrato rapidamente biodegradável S_{SO} .

Determina-se o substrato rapidamente biodegradável S_{SO} na entrada do sistema por ensaio batelada com biomassa ativa e esgoto sanitário na proporção de 1 para 2. No período inicial a taxa de utilização de oxigênio decresce rapidamente, pois o consumo de S_S leva a sua limitação. A partir deste momento, a respiração é dominada pelo crescimento do substrato liberado pela hidrólise. A quantidade de substrato rapidamente biodegradável S_S pode ser calculada pela diferença entre a respiração total e respiração devido ao substrato hidrolisado e respiração endógena.

$$S_{SO} = \frac{\int r_{O_2, total} - \int r_{O_2, respiração \text{ devido ao substrato hidrolisado}}}{1 - Y_H} \quad (2.6)$$

Henze et al. (1987) apresentam outro método para a determinação de S_{SO} . Realiza-se o ensaio em reator semi-contínuo. Alimenta-se o reator por 12 horas e suspende-se a alimentação nas próximas 12 horas. Logo após a interrupção há uma queda abrupta na taxa de utilização de oxigênio que está associada ao término do material rapidamente biodegradável. A Equação 2.7 é utilizada para determinar S_{SO} :

$$S_{s0} = \frac{\Delta OUR \cdot V}{Q(1 - Y_H)} \quad (2.7)$$

em que: OUR = taxa de utilização de oxigênio (mg/L.d);

ΔOUR = variação na taxa de utilização de oxigênio devido à interrupção na alimentação (mg/L.d);

Q = vazão de alimentação antes da interrupção;

V = volume do reator.

2.2.1.1.5 Determinação do coeficiente de meia saturação do substrato K_S .

Em ensaio batelada, o valor do coeficiente de meia saturação do substrato K_S domina a respiração, especialmente quando há limitação do substrato. O seu valor deve ser estimado por comparação gráfica das curvas de respiração medida e simulada.

2.2.1.1.6 Determinação da constante de hidrólise K_h e da concentração de material orgânico lentamente biodegradável X_S .

A constante de hidrólise K_h e a concentração de material orgânico lentamente biodegradável X_S afetam a respiração se o crescimento é limitado pelo substrato e, conseqüentemente, a respiração é dominada pelo substrato hidrolisado. Devem ser determinados por ajuste iterativo de curvas.

2.2.1.1.7 Determinação do coeficiente de meia saturação do oxigênio para o biomassa heterotrófica K_{O_2} .

O coeficiente de meia saturação do oxigênio para a biomassa heterotrófica K_{O_2} pode ser determinado com lodo ativado que já consumiu praticamente todo substrato rapidamente biodegradável. Este lodo não deve ser aerado, pois a respiração resulta somente da concentração do oxigênio dissolvido. Concluiu-se neste experimento que a equação de Monod é uma boa aproximação para a dependência do oxigênio dissolvido.

2.2.1.1.8 Determinação do substrato orgânico inerte solúvel S_{IO} .

Após um período extenso de aeração em experimento batelada, a concentração de DQO solúvel mantém-se constante. Este residual é o substrato orgânico inerte solúvel S_{IO} .

2.2.1.1.9 Determinação do material orgânico inerte particulado X_{IO} .

A concentração do material orgânico inerte particulado X_{IO} pode ser estimada através da DQO total:

$$X_{IO} = DQO_{total} - S_{SO} - S_{IO} - X_{SO} - X_{HO} \quad (2.8)$$

Henze et al. (1987) descartam no cálculo da DQO total a contribuição da biomassa no esgoto sanitário. A quantidade de biomassa produzida no sistema é imensamente maior que a quantidade na entrada. Pode-se, portanto, desprezar X_{HO} na Equação 2.8.

A Tabela 2.5 apresenta a composição do esgoto sanitário determinada por esta pesquisa, comparada à de outros trabalhos. Os autores afirmam que a maioria destes parâmetros para a biomassa heterotrófica pode ser estimada por três diferentes experimentos em batelada. Eles sugerem ainda que estes métodos podem ser usados similarmente para obtenção dos parâmetros cinéticos das bactérias nitrificantes.

Henze (1992) apresenta um levantamento de dados e informações para a caracterização de esgotos sanitários. O material orgânico inerte pode ser medido como a DQO efluente. O autor afirma que há ainda muitos problemas a serem resolvidos nesta caracterização e os modelos estão muito à frente da caracterização.

É interessante observar nas Figuras 2.2 e 2.3 as frações da matéria orgânica no esgoto sanitário e após o tratamento. No lado esquerdo destas figuras estão as frações de um

modelo anterior ao Modelo Número 1 e no direito as frações convencionadas no Modelo Número 1.

Tabela 2.5: Composição da DQO de esgotos sanitários (em %).

	Kappeler e Gujer (1992)	Grupo IAWQ	Sollfrank (1988)
S_{SO}	9	25	16
S_{IO}	11	10	10
X_{SO}	58	45	40
X_{HO}	12	--	25
X_{IO}	10	15	9

Fonte: Kappeler e Gujer (1992).

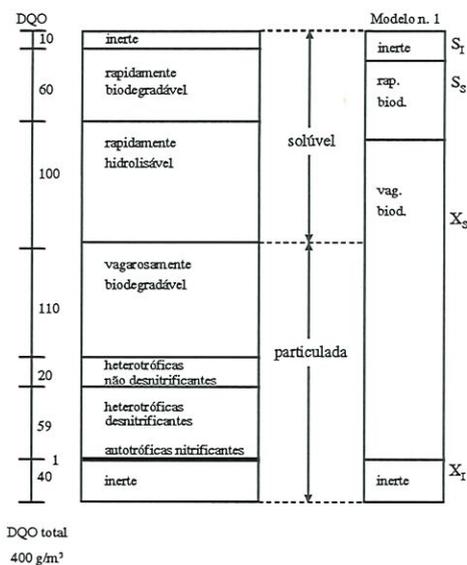


Figura 2.2: Frações da matéria orgânica de um esgoto sanitário com DQO total de 400g/m³.

Fonte: Henze (1992).

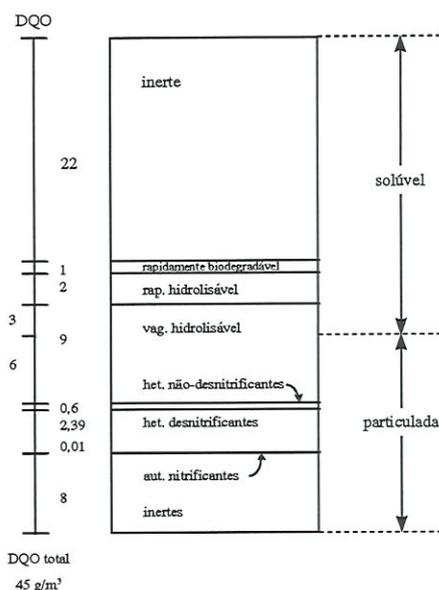


Figura 2.3: Frações da matéria orgânica, expressas em DQO no efluente de uma estação de lodos ativados tratando o esgoto sanitário mostrado na Figura 2.2.

Fonte: Henze (1992).

Pela análise das duas figuras vê-se que a quantidade de material inerte solúvel praticamente dobra na saída do tratamento. O autor propõe um fator de correção no cálculo deste componente. S_{IO} deve ser calculado subtraindo-se a DQO solúvel da DBO solúvel.

2.2.1.1.10 Determinação dos parâmetros cinéticos das bactérias nitrificantes.

Lesouef et al. (1992) descrevem um método para estimar parâmetros cinéticos das bactérias nitrificantes. Quando a amônia é degradada em condições não-limitantes de oxigênio e substrato, a velocidade de nitrificação (r) é somente função do coeficiente de produção, velocidade de crescimento e concentração da biomassa:

$$r = -\frac{1}{Y_a} \cdot \mu_a \cdot X_{B,A} \quad (2.9)$$

Qualquer lodo nitrificante pode ser utilizado nesses experimentos. Entre dois testes para medir as velocidades de nitrificação, a concentração de biomassa pode ser aumentada para proporcionar uma quantidade conhecida de substrato. A velocidade de crescimento pode

ser calculada como a diferença entre as duas velocidades de nitrificação e o substrato adicionado.

O esgoto sanitário a ser testado é aerado para remover a matéria carbonácea facilmente degradável e saturá-lo com oxigênio. Essa amostra é então misturada com lodo nitrificante centrifugado em uma proporção que a quantidade de nitrogênio amoniacal não seja limitante. Uma velocidade de nitrificação de referência (R_O) é obtida por:

$$R_O = -\frac{1}{Y_a} \cdot \mu_a \cdot X_{B,A_0} \quad (2.10)$$

Estabelecida a velocidade de nitrificação de referência R_O , parte do lodo nitrificante centrifugado é mantida com o resíduo até o seu esgotamento por entre 0,5 e 1 dia para provocar o decaimento. Outra velocidade de nitrificação (R_d) é medida por:

$$R_d = -\frac{1}{Y_a} \cdot \mu_a \cdot X_{B,A_d} \quad (2.11)$$

em que:

$$X_{B,A_d} = X_{B,A_0} \cdot e^{-b_a \cdot t_d} \quad (2.12)$$

A velocidade de decaimento é portanto calculada combinando-se as Equações 2.10, 2.11 e 2.12:

$$b_a = -\frac{\ln\left(\frac{R_d}{R_O}\right)}{t_d} \quad (2.13)$$

Paralelamente, em outra parte do lodo centrifugado, adiciona-se uma larga quantidade de substrato $(\text{NH}_4)_2\text{CO}_3$ para aumentar a biomassa. Após um tempo suficiente, t_g , que permite um crescimento significativo (0,5 a 1 dia), a concentração de substrato degradado é medida e outro teste de nitrificação é realizado, obtendo-se R_g (velocidade de nitrificação):

$$R_g = -\frac{1}{Y_a} \cdot \mu_a \cdot X_{B,A_g} \quad (2.14)$$

em que:

$$X_{B,A_g} = X_{B,A_0} \cdot e^{(\mu_a - b_a) \cdot t_g} \quad (2.15)$$

A velocidade de crescimento pode ser calculada combinando-se as equações de velocidade de nitrificação de referência (Equação 2.10) e a Equação 2.14:

$$\mu_a = \frac{\ln\left(\frac{R_g}{R_o}\right)}{t_g + b_a} \quad (2.16)$$

2.2.1.2 Considerações sobre a utilização do Modelo Número 1 da IAWQ.

A Tabela 2.6 apresenta alguns dos resultados compilados da caracterização de esgotos sanitários para utilização no Modelo Número 1 da IAWQ (Henze, 1992). O autor mostra que há variações nas diversas frações. Salienta-se aqui que há inúmeras pesquisas realizadas ou sendo realizadas nesta área de caracterização de esgotos sanitários. Não se aprofundará neste tema uma vez que o enfoque desta pesquisa não é a caracterização dos esgotos sanitários, mas sim a utilização do modelo. Entretanto, percebe-se que um tema está atrelado ao outro. Assim, não se pode confiar em uma boa simulação se a caracterização ou determinação dos parâmetros cinéticos não for adequada. Sugere-se em trabalhos futuros fazer um levantamento detalhado sobre caracterização e determinação de parâmetros para posterior aplicação no modelo de lodos ativados. Henze (1992) apresenta uma tabela com os principais métodos para esta caracterização.

Muitas pesquisas têm sido realizadas na área de modelagem de processos de tratamento de esgotos, mais especificamente sobre o processo de lodos ativados utilizando o Modelo Número 1 da IAWQ. Serão relacionados aqui alguns destes modelos com suas diferentes configurações e finalidades.

Griffiths (1994) discute a assimilação do substrato solúvel rapidamente biodegradável S_s , chamado em seu trabalho de RBCOD. O Modelo Número 1 considera que a maioria, pelo menos 70% das heterotróficas pode utilizar o substrato solúvel anoxicamente e ainda utilizar a DQO hidrolisada a substrato solúvel. O fator η_g na Tabela 2.1 simula esta condição.

Tabela 2.6: Frações da DQO de esgotos sanitários (%).

	S_I	S_S	X_S	X_H	X_I	
Esgoto Sanitário bruto						
África do Sul	5	20	62	-	13	Ekama et al. (1986) ⁷
Suíça	11	32	45	-	11	Henze et al. (1987)
Hungria	9	29	43	-	20	"
Dinamarca	8	24	49	-	19	"
Suíça, Flawil (22°C)	20	11	53	7	9	Kappeler e Gujer (1992)
Tuffenwies	10	7	60	15	8	"
(13°C)						
Dietikon (15°C)	12	8	55	15	10	"
Dinamarca, Lundtofte	2	20	40	20	18	Henze et al. (1992) ⁸
Esgoto san. primário						
Dinamarca, Lundtofte	3	29	43	14	11	Henze et al. (1992)
Suíça, Zürich	10	16	40	25	9	Sollfrank (1988)
França, Pilot	10	33	44	-	13	Lesouef et al. (1992)
França, Valenton	6	25	41	-	8	"
África do Sul	8	28	60	-	4	Ekama et al. (1986)
Esgoto san. precipitado						
Dinamarca, Lundtofte	5	56	26	8	5	Henze et al. (1992)

Fonte: Henze (1992).

Dold e Marais (1986) afirmam que 38% (fator η_n) das heterotróficas são capazes de hidrolisar anoxicamente e que o material hidrolisado somente está disponível para estes microrganismos. Henze et al. (1987) consideram que todo o material hidrolisado fica disponível para todas as heterotróficas. O autor considera a afirmação de Dold e Marais questionável, pois, caso os organismos capazes de hidrolisar anoxicamente tivessem essa vantagem competitiva por ter acesso a ambos substratos, o rapidamente e o lentamente biodegradável, estariam em maior quantidade. O autor sugere, portanto, que deve haver 2 grupos distintos de heterotróficas anóxicas:

⁷ Ekama et al. (1986). Procedures for determining COD fractions and the maximum specific growth rate of heterotrophs in activated sludge systems. *Water Science and Technology*, v. 18, n. 6, 91-114.

⁸ Henze et al. (1992). Determination of organic matter and nitrogen in wastewater. Artigo a ser submetido à Water Research.

- ✓ Um grupo com uma vantagem competitiva para utilizar RBCOD anoxicamente, mas incapaz de hidrolisar substrato lentamente biodegradável, SBCOD (X_S) anoxicamente;
- ✓ Um segundo grupo capaz de hidrolisar anoxicamente SBCOD, retendo e utilizando os produtos da hidrólise. Este grupo deve, por definição, estar apto a utilizar RBCOD. Entretanto, é postulado, sem provas, que sobre a superfície de saturação, estes organismos são incapazes ou não se encontram energeticamente favoráveis para utilizar o RBCOD.

Griffiths (1994) desenvolve ainda as equações de consumo dos dois substratos SBCOD e RBCOD e chega a valores de 0,59 para a fração de bactérias facultativas utilizadoras de RBCOD e 0,41 para as de SBCOD.

Artan et al. (1990) chamam atenção para o fato da teoria clássica^{9,10} afirmar que a concentração do substrato solúvel efluente somente depende da idade do lodo, embora trabalhos alguns trabalhos^{11,12,13}, utilizando culturas bacterianas puras e mistas, indiquem que a concentração de substâncias orgânicas solúveis na saída do sistema é significativamente afetada pela concentração do afluente. Artan e seus colaboradores propõem uma reflexão aos autores do Modelo Número 1 da IAWQ para que incorporem a geração de material orgânico solúvel decorrente do metabolismo microbiano. Eles sugerem a adição de 2 novos coeficientes estequiométricos α e β , que correspondem a geração de substâncias solúveis no crescimento aeróbio das heterotróficas e hidrólise, respectivamente. Um novo componente também é inserido, S_R , que corresponde às substâncias solúveis inertes geradas no sistema. Surgem aí mais alguns parâmetros para se caracterizar. O modelo proposto foi verificado experimentalmente (Artan et al., 1990) e concluiu-se que novos experimentos devem ser realizados para um melhor entendimento desse problema. Os autores (Baykal et al., 1990) reafirmaram em uma continuação da pesquisa de Artan et al. (1990) a importância da consideração do componente solúvel gerado pelo metabolismo bacteriano.

⁹ Jenkins, D. e Garrison, W. E. (1968). Control of activated sludge by mean cell residence time. *Journal Water Pollution Control Federation*, v. 40, p. 1905-1919.

¹⁰ Lawrence, A. W e McCarty, P. L. (1970). Unified basis for biological design and operation. *Journal of Sanitary Engineering Div. Am. Soc. civ. Engrs.* SA3, 757-778.

¹¹ Riesing, R. R. (1971). Relationship between influent substrate concentration, growth rate, and effluent quality in a chemostat. M. Sc. thesis, Purdue University.

¹² Harlow, L. J. (1971). Effects of growth rate and initial substrate concentration on natural microbial populations in continuous culture. M.Sc. thesis, Purdue University.

¹³ Grady et al. (1972). Effects of growth rate and influent substrate concentration on effluent quality from chemostats containing bacteria in pure and mixed culture. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 14, 391-410.

Lessard e Beck (1993) aplicaram o Modelo Número 1 para avaliação dinâmica da remoção de matéria carbonácea e nitrogenada de uma unidade de lodos ativados na Inglaterra. Os dados foram coletados em intervalos de 3h durante 10 dias. Esta ETE consiste de 4 decantadores primários, 6 compartimentos de aeração e 4 decantadores secundários. Durante a operação, apenas 3 dos 4 decantadores primários estavam em funcionamento e o quarto servia como tanque de adensamento para o lodo ativado de descarte. A vazão excedente deste tanque era misturada com o esgoto sedimentado e, em seguida, introduzida no tanque de aeração. A vazão média do esgoto afluente era de $833\text{m}^3/\text{dia}$. A vazão afluente de lodo ativado era de $869\text{m}^3/\text{dia}$. A do lodo ativado efluente era de $819\text{m}^3/\text{dia}$ e a vazão média de retorno do lodo era de $526\text{m}^3/\text{dia}$. A concentração média de MLSS no tanque de aeração era de $5834\text{g}/\text{m}^3$ e o oxigênio dissolvido $1,1\text{mg}/\text{L}$. O modelo compreendia 3 partes: uma função de mistura para a vazão excedente de lodo do tanque de consolidação e esgoto afluente, o modelo para o compartimento aerado e um modelo para o decantador secundário. O reator foi representado pelo modelo de tanques em série com 4 compartimentos, entrada de efluente em todos os tanques e vazão de retorno de lodo também nos 4 tanques. O Modelo Número 1 foi utilizado sem modificações na representação dos processos biológicos. Quanto ao modelo para o decantador secundário, este foi dividido em duas funções constituintes, uma região de clarificação e uma outra de espessamento do lodo. A primeira divisão, a zona de clarificação, subdividia-se em 2 regiões, uma de clarificação com volume fixo e uma outra morta, servindo como uma transição entre a área clarificada e a manta de lodo. A concentração de sólidos na saída foi calculada pela relação de Pflanz (1969)¹⁴. Mais detalhes sobre este e outros modelos de decantadores secundários são encontrados na seção sobre "Modelos para decantadores secundários". As principais limitações encontradas referem-se ao modelo de clarificação adotado e o autor cita o esforço de Takács et al.(1991) no desenvolvimento de um modelo conceitual simples para o decantador secundário.

Um trabalho do grupo de pesquisa COST 624 (1999) foi encontrado na Internet no endereço www.ensic.u-nancy.fr/COSTWWTP/Benchmark (download 20/01/99). Este grupo é dedicado à otimização, desempenho e eficácia da administração de esgotos sanitários, por meio do aumento de conhecimento de sistemas microbiológicos e implementação de controle integrado baseados na descrição detalhada de sistemas de tratamento. O subgrupo responsável

¹⁴ Pflanz, P. (1969). Performance of (activated sludge) secondary sedimentation basins. In: *Advances in Water Pollution Research* (Edited by Jenkins S. H.). p. 569-581, Pergamon Press, London.

pelo desenvolvimento de modelos integrados é denominado *Working Group 2*. Eles utilizaram o Modelo Número 1 para modelar um sistema de tratamento de esgotos. Tal processo consistia de um reator de 6.000m³, dividido em 5 compartimentos. Os 2 primeiros, não aerados, com volume de 1000m³ cada, e os 3 restantes, aerados, com volume de 1333m³ cada. Nos compartimentos 3 e 4 fixou-se um k_1a (coeficiente global de transferência de oxigênio) de 10h⁻¹, enquanto que no compartimento 5 o k_1a foi manipulado de modo a manter a concentração de oxigênio dissolvido em 2mg/L. A vazão afluyente era de 20.000m³/d, a DQO de entrada 3.000mg/L e o tempo de residência hidráulico (reator e decantador secundário) igual a 14,4h. A vazão de descarte de lodo foi fixada em 385m³/d, que corresponde a uma idade do lodo de aproximadamente 10 dias. O volume do decantador secundário era de 6000m³ (1500m² de área superficial e 4m de altura total). O modelo escolhido para o decantador secundário foi o de Takács et al. (1991). A alimentação no decantador era realizada na sexta camada (ver descrição do modelo de Takács et al., 1991 na próxima seção). Simulações dinâmicas foram realizadas com a vazão "seca", isto é, sem ocorrências de chuva, e duas outras com ocorrência de chuva. Na primeira delas, as chuvas corresponderam a 2 eventos curtos e na segunda, a chuva se arrastou por um longo período. O *site* na Internet desta pesquisa é muito interessante, apresentando todo o equacionamento dos modelos atribuídos e teve importância fundamental na condução do presente trabalho, pois os parâmetros utilizados em ambos foram muito semelhantes.

Um outro software foi desenvolvido no período entre 1991 e 1994 (www.hobbes.rug.ac.be/~peter/WEST.html, *download* em 05/01/1999), com apoio financeiro da IBM Bélgica e Agência Governamental Belga de Ciência e Tecnologia (Flemish governmental agency for Science and Technology - IWT), além da colaboração de outras empresas (HEMMIS e EPAS). Visava o projeto, operação e controle de plantas de lodos ativados. O modelo foi baseado no Número 1, consistindo de um reator de mistura completa. O balanço de massa aplicado ao sistema foi global, não incorporando as vazões de recirculação e descarte do lodo. Consideraram o decantador secundário ideal.

Argaman (1995) desenvolveu um novo modelo para o processo de lodos ativados. É um modelo somente para regime permanente, restrito à vazão e carga orgânica constantes. Usa, ao invés da DQO, a DBO como parâmetro de matéria orgânica carbonácea, pois considerou-se que em muitos países é ainda largamente usada pelas órgãos reguladores como parâmetro de controle de emissão de matéria orgânica. A matéria orgânica também é dividida

em solúvel e particulada, sendo que a particulada necessita ser solubilizada antes de ser degradada. O autor sugere que este modelo é mais efetivo para fases preliminares de projeto do sistema, quando várias alternativas estão sendo avaliadas. Esse uso se justifica uma vez que, para propósitos comparativos, uma análise em regime permanente pode ser adequada e a precisão dos parâmetros de projeto é menos crítica. Na cinética de remoção de substrato, a parte solúvel e insolúvel são tratadas separadamente. Considera-se que a DBO insolúvel será hidrolisada e produzirá uma carga extra de DBO solúvel. A remoção da DBO solúvel segue uma cinética de ordem 0 e é, portanto, independente do regime de escoamento imposto. Considerou-se que no sistema podem existir zonas aeróbias e anóxicas. Desta forma, a remoção de DBO nestas regiões seguirá a cinética de Monod, multiplicada por um fator extra dependente da temperatura do sistema. As equações para estas regiões são similares, trocando-se as concentrações dos receptores de elétrons e a constante de meia saturação. A DBO particulada é rapidamente removida da fase líquida e aderida aos flocos da biomassa. É mais difícil de se degradar e precisa que enzimas extra-celulares solubilizem-na para que possa ser difundida pelas membranas celulares. A cinética da hidrólise é de primeira ordem em relação ao material particulado biodegradável. O sistema de tratamento discutido por Argaman (1995) consiste de 2 reatores completamente misturados. O MLSS do reator aeróbio é recirculado para o reator anóxico para desnitrificação. Algumas simplificações foram definidas: todo o nitrogênio está na forma amoniacal, todo o nitrogênio oxidado está na forma de nitrato, a concentração de biomassa nitrificante é desprezível comparada à biomassa heterotrófica e o coeficiente de produção heterotrófica é o mesmo sob condições aeróbias e anóxicas.

Argaman e Papkov (1995) testaram a validade do modelo proposto por Argaman (1995) para sistemas com e sem nitrificação e selecionaram os coeficientes que melhor se ajustaram aos dados experimentais. O procedimento experimental foi realizado utilizando 4 reatores de bancada, contínuos, em paralelo. Cada unidade tinha um volume líquido total de 15L, incluindo a câmara de aeração e o clarificador interno. A alimentação do sistema era efetuada 3 vezes por semana. As unidades eram aeradas com aeradores difusos e misturadores mecânicos, mantendo-se a concentração de oxigênio dissolvido em torno de 5,0mg/L. A temperatura do sistema era mantida a aproximadamente 20°C. A análise de sensibilidade de parâmetros mostrou que o coeficiente de crescimento e de decaimento das bactérias nitrificantes têm grande influência no dimensionamento de sistemas de lodos ativados. Os

autores mais uma vez enfatizaram que o modelo deve ser utilizado somente para fins de projeto.

Zanabria Sotomayor et al. (1999) desenvolveram um modelo de referência (*Benchmark ASWWTP-USP*) para um sistema de lodos ativados, com pré-nitrificação, nitrificação e desnitrificação de esgoto sanitário. O Modelo Número 1 da IAWQ foi utilizado para a descrição das cinéticas de remoção de matéria orgânica, nitrificação e desnitrificação. O modelo desenvolvido por Takács (1991) foi utilizado para simular o decantador secundário. O bioreator consistia de 3 zonas de 15m³. A primeira sem aeração e duas seguintes aeradas. O decantador secundário tinha 20m³. A vazão afluyente utilizada foi de 4,17m³/h, com uma DQO de 224mg/L e tempo de residência de 15,6 h. A vazão interna do terceiro compartimento para o primeiro era de duas vezes a vazão de entrada do sistema. A vazão de recirculação do lodo era 80% da vazão de entrada e a de descarte de lodo era 0,00258m³/h. Estes pesquisadores utilizaram diversas estratégias de controle empregando controladores clássicos PI. No controle da concentração de oxigênio dissolvido, o objetivo era manter a concentração no terceiro compartimento em 2,0mg/L, usando um controlador PI, através da manipulação da vazão de ar (Q_{ar}). Na zona 2, a vazão de ar era mantida constante em 10,153m³/h. A estratégia de controle da respiração das bactérias heterotróficas (zona 3) consistia em manter a velocidade de consumo de oxigênio em 66,86 mgO₂/L.h, manipulando-se a vazão de recirculação do lodo. Outra estratégia de controle foi baseada na respiração, também mantendo a taxa de utilização de oxigênio em 66,86 mgO₂/L.h, mas desta vez manipulando a vazão de ar. Os autores ainda controlaram o processo através da manutenção da concentração de nitrato na câmara 1 em 1,0mg/L, variando a vazão de entrada da estação e manipulando a vazão interna de recirculação (da última câmara para a primeira), rica em nitrato.

Atualmente, o problema da remoção de fósforo, que não estava incluída no Modelo Número 1, tem sido o grande foco de atenção dos pesquisadores na área de tratamento de esgotos. Mais de sete anos após a introdução definitiva deste modelo, o grupo de pesquisa da IAWQ (Task Group for Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment) propôs uma nova versão que inclui os processos de remoção de fósforo. Esse modelo, denominado Modelo Número 2, não apresenta a mesma sedimentação de conhecimento sobre a remoção de fósforo que apresentava o Modelo Número 1 em relação aos processos envolvendo compostos nitrogenados. Entretanto, o grupo se mostra receptivo a discussões pela comunidade científica que contribuam para o aperfeiçoamento deste modelo

(Gujer et al., 1995; Henze et al., 1995; Mino et al., 1997; Henze et al., 1999). O grupo pretende deixar para o futuro versões confiáveis do modelo para o projeto e operação de sistemas de remoção biológica de nutrientes. O modelo Número 2 conserva, intencionalmente, as mesmas características matriciais inovadoras do Número 1. Segundo os autores, a forma matricial permite passar informações complexas de um modo fácil de se ler e entender.

Após anos de experiência com a aplicação do Modelo Número 1, o mesmo grupo de pesquisa da IAWQ lançou o Modelo Número 3 (Gujer et al., 1999), que suprime algumas falhas desse primeiro. O enfoque deste modelo, diferentemente do Modelo Número 2, que é a remoção de fósforo, é a remoção de compostos nitrogenados.

Gujer et al. (1999) expõem algumas das falhas do Modelo Número 1 que foram melhoradas no Modelo Número 3:

- ✓ O Modelo Número 1 não incluía expressões cinéticas que tratavam das limitações de nitrogênio e alcalinidade dos organismos heterotróficos;
- ✓ O nitrogênio orgânico biodegradável solúvel e particulado não podia ser medido facilmente no Modelo Número 1;
- ✓ A cinética de amonificação não podia ser efetivamente quantificada. O Modelo diferenciava o material orgânico inerte particulado através da sua origem, esgoto afluente ou decaimento bacteriano. Na prática, isto era impossível de ser identificado;
- ✓ O processo de hidrólise tinha um efeito dominante sobre a taxa de consumo de oxigênio e desnitrificação dos organismos heterotróficos. Ao mesmo tempo, a quantificação dos parâmetros cinéticos da hidrólise era difícil de ser avaliada;
- ✓ O modelo não incluía a previsão direta dos sólidos suspensos no tanque de aeração;
- ✓ O processo de armazenamento de poli-hidroxi-alcenoatos e glicogênio não era incluído no Modelo Número 1. É observado que, em condições aeróbias e anóxicas, há um aumento da disponibilidade de substrato orgânico rapidamente biodegradável.

O Modelo Número 3 ainda não foi testado com um grande número de experimentos. Os autores esperam futuros avanços na estrutura do modelo, embora inferiores aos que foram necessários quando da experiência inicial com o Modelo Número 1.

2.2.2 MODELOS PARA O DECANTADOR SECUNDÁRIO

O desempenho do decantador secundário é fundamental para garantir a eficiência do sistema de lodos ativados, visto que a conformidade com os critérios de emissão de despejos pode estar diretamente relacionada a este equipamento. Basicamente deve realizar três tarefas: clarificação, espessamento e armazenamento do lodo. O decantador é tratado, na maioria dos equacionamentos de projeto e operação de sistemas de lodos ativados (Metcalf & Eddy, 1991) como ideal, ou seja, a saída clarificada não apresenta sólidos suspensos em sua composição e todo lodo produzido é recirculado ou descartado. Para se entender um pouco melhor o funcionamento do decantador secundário é importante conhecer os tipos de sedimentação envolvidos no tratamento de esgotos sanitários. Metcalf & Eddy (1991) sintetizam muito bem todos esses mecanismos, reproduzidos na Tabela 2.7.

A sedimentação de partículas discretas (Tipo 1) pode ser analisada por meio das leis clássicas formuladas por Newton e Stokes. De acordo com estas leis, para partículas esféricas e Reynolds até 10^4 , a velocidade terminal de sedimentação da partícula pode ser calculada por:

$$V_c = \left[\frac{4}{3} \frac{g(\rho_s - \rho)d}{C_D \rho} \right]^{1/2} \quad (2.17)$$

e

$$C_D = \frac{24}{Re} + \frac{3}{\sqrt{Re}} + 0,34 \quad (2.18)$$

em que: V_c = velocidade terminal da partícula (m/s);

g = aceleração da gravidade (m^2/s);

ρ_s = densidade da partícula (kg/m^3);

ρ = densidade do fluido (kg/m^3);

d = diâmetro da partícula (μm);

C_D = coeficiente de arrasto (adimensional);

Re = número de Reynolds (adimensional).

Tabela 2.7: Tipos de sedimentação envolvidos no processo de tratamento de esgotos sanitários.

Tipo de sedimentação	Descrição	Aplicação/Ocorrência
Partículas discretas (Tipo 1)	Sedimentação de partículas em suspensão com baixa concentração de sólidos. Partículas sedimentam individualmente, sem interação significativa com outras partículas	Remoção de areia do esgoto sanitário
Floculenta (Tipo 2)	Sedimentação de partículas que floculam durante o processo de sedimentação, aumentando suas massas e sedimentando mais rápido	Remoção de parcela dos sólidos suspensos no decantador primário e na parte superior do decantador secundário. Também remove flocos químicos nos tanques de sedimentação
Impedida ou de zona (Tipo 3)	Sedimentação de suspensões de concentração intermediária, em que forças entre as partículas impedem a sedimentação de partículas próximas. Elas tendem a permanecer em posições fixas em relação a outras e a massa de partículas sedimenta como uma unidade. Uma interface sólida/líquida se desenvolve no topo da massa de sólidos	Ocorre em decantadores secundários usados em associação com tratamentos biológicos.
Compressão (Tipo 4)	Sedimentação em que a concentração de partículas é tão alta que somente a sedimentação por compressão desta camada pode ocorrer.	Ocorre em camadas mais profundas, tal como no fundo de decantadores secundários

Fonte: Metcalf & Eddy (1991).

Para Re menores que 0,3 o primeiro termo da equação de C_D predomina e a velocidade terminal poder ser escrita como:

$$V_C = \frac{g(\rho_s - \rho)d^2}{18\mu} \quad (2.19)$$

em que: μ = viscosidade do fluido ($N.s/m^2$).

Na sedimentação floclulenta (Tipo 2) a extensão com que a floclulação ocorre depende da oportunidade de contato entre as partículas, que varia com a vazão, profundidade, gradiente de velocidade no sistema, concentração de partículas e distribuição do tamanho de partículas. Para se determinar as características de sedimentação de uma suspensão de partículas floclulentas usualmente é usada uma coluna. A solução homogeneizada contendo a matéria em suspensão é introduzida na coluna e são retiradas amostras de diversas alturas em intervalos regulares. O percentual de remoção é então calculado para cada amostra analisada. A Figura 2.4 apresenta um esquema desta situação. A determinação da remoção pode ser expressa por:

$$\% \text{ remoção} = \frac{\Delta h_1}{h_5} \times \frac{R_1 + R_2}{2} + \frac{\Delta h_2}{h_5} \times \frac{R_2 + R_3}{2} + \frac{\Delta h_3}{h_5} \times \frac{R_3 + R_4}{2} + \frac{\Delta h_4}{h_5} \times \frac{R_4 + R_5}{2} \quad (2.20)$$

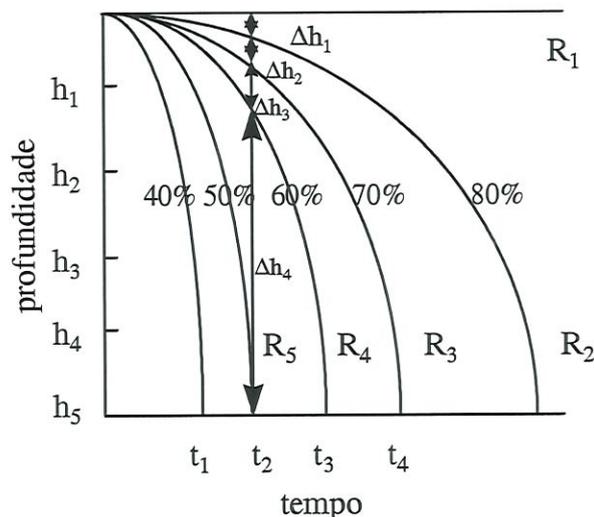


Figura 2.4: Curva de coluna de sedimentação para partículas floclulentas.

Fonte: Metcalf & Eddy (1991).

Em sistemas com alta concentração de sólidos suspensos, a sedimentação por camada impedida (Tipo 3) e por compressão (Tipo 4) ocorrem simultaneamente em adição à discreta e floculenta. Testes de sedimentabilidade devem ser realizados quando sedimentação do tipo 3 e 4 ocorrem para determinar a área necessária à clarificação e espessamento do lodo. Detalhes sobre o projeto destes dispositivos não serão abordados e podem ser encontrados nas referências básicas já citadas. O volume necessário para o lodo na camada de compressão também pode ser determinado por testes de sedimentação. A taxa de compactação nesta região é proporcional à diferença de profundidade em um tempo t e à profundidade que o lodo se compactará em um período longo de tempo:

$$H_t - H_\infty = (H_2 - H_\infty)e^{-i(t-t_2)} \quad (2.21)$$

em que: H_t = altura da manta de lodo em um tempo t ;

H_∞ = profundidade da manta de lodo após decorrido um longo período de tempo;

H_2 = altura da manta de lodo em um tempo t_2 ;

i = constante para uma determinada suspensão.

Vitasovic (1989) desenvolveu um modelo para o decantador secundário visando simular sua operação contínua. Embora os aspectos de clarificação e espessamento do lodo sejam processos interdependentes, não se tinha conhecimento necessário para analisar estes fenômenos de forma correlata. Assim, clarificação e espessamento do lodo foram tratados de forma separada. O autor citado apoiou-se em trabalhos anteriores na formulação de seu modelo (Bryant, 1972¹ e Stenstrom, 1975²). O modelo de espessamento calcula um perfil de sólidos ao longo do reator, incluindo o fenômeno de armazenamento de lodo no fundo do decantador.

O decantador foi então dividido em 10 camadas e um balanço de massa efetuado em cada uma delas considerando mistura completa. Stenstrom (1975) obteve a seguinte equação:

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{v_u(X_{i-1} - X_i)}{z_i} + \frac{[\min(G_{s,i}, G_{s,i-1}) - \min(G_{s,i}, G_{s,i+1})]}{z_i} \quad (2.22)$$

em que: v_u = velocidade descendente devido ao movimento do fluido (m/h);

¹ Bryant, J. O. (1972). *Continuous time simulation of the conventional activated sludge wastewater renovation system*. Ph.D. Dissertation, Clemson University, Clemson, S. Carolina, U.S.A.

² Stenstrom, R. K. (1975). *A dynamic model and computer compatible control strategies for wastewater treatment plants*. Ph.D. Dissertation, Clemson University, Clemson, South Carolina, U.S.A.

G_s = fluxo de sólidos ($\text{kg/m}^2 \cdot \text{h}$);

z = altura da camada i (m);

min = menor fluxo entre as camadas i e $i-1$ ou i e $i+1$.

O fluxo de sedimentação é relacionado à velocidade de sedimentação gravitacional (v_s) pela expressão:

$$G_s = v_s X \quad (2.23)$$

e v_s dado por:

$$v_s = v_o e^{-\alpha X} \quad (\text{equação de Vesilind}) \quad (2.24)$$

em que v_o e α são constantes empíricas.

Finalmente Stenstrom estabeleceu as condições de contorno para as camadas superior e inferior permitindo a solução simultânea das equações:

A equação de contorno para a camada superior é:

$$\frac{dX_1}{dt} = \frac{\left[\frac{Q_f X_f}{A} - v_u X_1 - \min(G_{s,1}, G_{s,2}) \right]}{z_1} \quad (2.25)$$

e para a camada inferior:

$$\frac{dX_n}{dt} = \frac{v_u (X_{n-1} - X_n) + \min(G_{s,n}, G_{s,n-1})}{z_n} \quad (2.26)$$

em que: Q_f = vazão volumétrica para o sedimentador;

X_f = concentração de sólidos suspensos na alimentação.

A grande limitação deste modelo é sua inabilidade para a previsão do comportamento na zona acima do ponto de alimentação. Por causa das condições de contorno impostas, estas equações só podem ser utilizadas para regiões abaixo da zona de alimentação. Assim, o novo modelo proposto por Vitasovic considera o fluxo gravitacional que ocorre na parte superior acima da manta de lodo (ver Figura 2.5). A alimentação é fixada na sétima camada (abaixo da camada superior), sendo instantaneamente e completamente distribuída nesta região. A região abaixo da alimentação é modelada pela equação desenvolvida por Stenstrom. Na região acima, admite-se que os sólidos têm uma velocidade de sedimentação

maior que a velocidade ascensional do líquido. Uma concentração *threshold* (limiar) X_r é definida nas camadas acima da alimentação do sedimentador. Quando a concentração de sólidos for superior a este valor, a velocidade de sedimentação nesta camada afetará a sedimentação nas camadas adjacentes. Considera-se a superfície da manta de lodo a camada mais elevada que apresenta concentração igual ou maior que X_r .

Os modelos para o cálculo da concentração de sólidos na saída do decantador, ou seja, no líquido clarificado, eram empíricos por natureza. Vitasovic (1989) cita no seu trabalho alguns destes modelos e ressalta que todos podem ser usados para determinar a concentração de sólidos suspensos no efluente do separador, embora nenhum deles possa explicar variações que possam ocorrer.

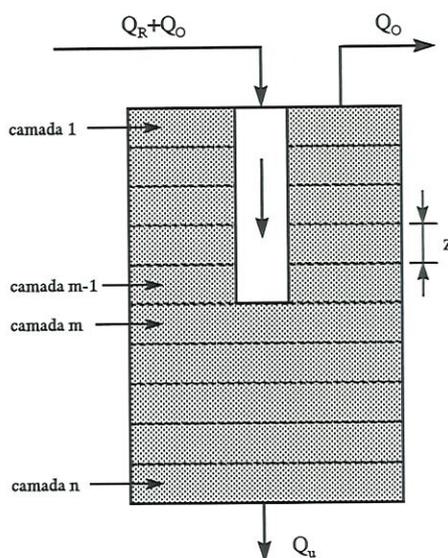


Figura 2.5: Esquema do modelo de decantador secundário.

Fonte: Vitasovic (1989).

Pflanz³ (1969) e Busby e Andrews (1975)⁴ citados por Vitasovic (1989) propuseram o seguinte modelo:

³ Pflanz, P. (1969). Performance of (activated sludge) secondary sedimentation basins. In: *Advances in Water Pollution Research* (Edited by Jenkins S. H.). p. 569-581, Pergamon Press, London.

⁴ Busby, J. B., Andrews, J. F. (1975). Dynamic modeling and control strategies for the activated sludge process. *Journal Water Pollution Control Federation*, v. 47, n. 5, p. 1055-1080.

$$X_e = \frac{KQ_f X_f}{A} \quad (2.27)$$

em que: X_e = concentração de sólidos suspensos no efluente;

X_f = concentração de sólidos suspensos na entrada do decantador;

Q_f = vazão afluyente do decantador;

K = constante empírica.

Um estudo financiado pela Agência Americana de Proteção Ambiental (EPA) (Rex Chainbelt, 1972⁵) citado por Vitasovic (1989) selecionou dados de operação de um decantador em escala real. O modelo que melhor se ajustou aos dados foi:

$$X_e = B_1 + \frac{B_2 Q_f}{A} - B_3 X_f \quad (2.28)$$

em que: B_1 , B_2 , e B_3 são constantes empíricas.

Chapman (1984)⁶ citado por Vitasovic (1989) estudou a clarificação do processo de lodos ativados em escala piloto. O autor aponta uma forte correlação entre a vazão e a concentração de sólidos suspensos no decantador secundário.

$$X_e = k_1 + k_2 X_f + \frac{k_3 Q_f}{A} + H_s \left(k_4 - \frac{k_5 Q_f}{A} \right) \quad (2.29)$$

em que: k_1 , k_2 , k_3 , k_4 e k_5 são constantes empíricas e H_s é a altura do volume líquido do decantador.

Baseados no modelo descrito por Vitasovic (1989), Takács et al. (1991) desenvolveram um novo modelo para o decantador secundário corrigindo as limitações do anterior que não conseguia prever a concentração de sólidos suspensos no efluente clarificado. A grande mudança neste modelo encontra-se na substituição da equação da velocidade de sedimentação de Vesilind. Os autores apontam que esta equação somente se aplica a condições de sedimentação na camada impedida, de modo que, quando as concentrações de sólidos nas camadas superiores diminuem a valores inferiores ao da camada impedida, as

⁵ Rex Chainbelt, Inc. (1972). A mathematical model of a final clarifier. *USAPA report n. EPA-600/14-12-194*.

⁶ Chapman, D. (1984). The influence of dynamic loads and process variables on the removal of suspended solids from an activated sludge plant. *Ph.D. Dissertation*, University of Alberta, Edmonton, Alberta, Canada.

velocidades de sedimentação calculadas excederão as velocidades reais de sedimentação dos flocos.

Estes autores demonstraram em trabalho anterior não publicado que a velocidade de sedimentação média dos sólidos nas camadas superiores (acima da alimentação) pode estar relacionada à concentração destes sólidos. Considera-se, por exemplo, uma destas camadas com distribuição normal de tamanhos de partículas. Quando o escoamento ascensional aumenta, partículas com alta velocidade de sedimentação se fluidizam e podem até serem arrastadas.

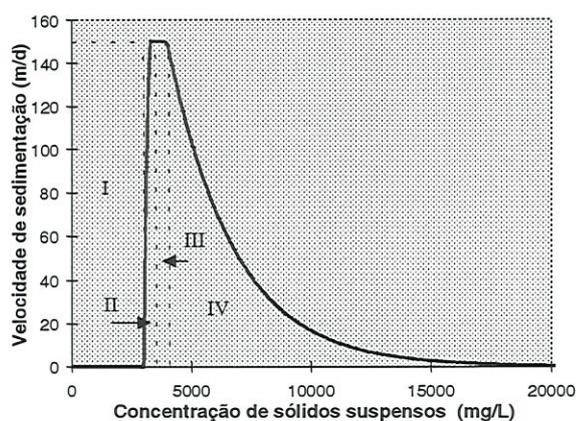


Figura 2.6: Modelo de velocidade de sedimentação.

Fonte: Adaptado de Takács et al. (1991).

Isto justifica a baixa velocidade de sedimentação nesta área (região I da Figura 2.6). O aumento do escoamento ascendente irá aumentar a concentração de sólidos nesta região, contudo este aumento na concentração de sólidos leva a um aumento na velocidade de sedimentação. Isto pode ser observado pela região II na Figura 2.6. De um ponto de vista prático, a correlação entre a velocidade de sedimentação média e a concentração de sólidos é válida para baixas concentrações. A concentração de sólidos aumenta até que um limite máximo de velocidade de sedimentação é atingido (região III da Figura 2.6). Este patamar corresponde à transição entre a zona de baixa concentração (II) e de alta concentração, onde ocorre a sedimentação por zona ou impedida (região IV). Nesta região volta a prevalecer a equação de Vesilind. A equação de sedimentação proposta que engloba os fenômenos descritos pode ser representada por:

$$v_{sj} = v_o e^{-r_h X_j^*} - v'_o e^{-r_p X_j^*} \quad (2.30)$$

com,

$$\begin{cases} 0 \leq v_{sj} \leq v'_o \\ X_j^* = X_j - X_{\min} \\ X_{\min} = f_{ns} X_f \end{cases} \quad (2.31)$$

em que: v_{sj} = velocidade de sedimentação na camada j (m/d);

v_o = máxima velocidade de sedimentação de Vesilind (m/d);

v'_o = máxima velocidade de sedimentação (m/d);

r_p = parâmetro de sedimentação da zona floculenta (m^3/g);

r_h = parâmetro de sedimentação do zona compactada (m^3/g);

f_{ns} = fração de sólidos não-sedimentáveis;

X_{\min} = concentração de sólidos não sedimentáveis (g/m^3);

X_f = concentração de sólidos na entrada do decantador (g/m^3);

X_j = concentração de sólidos na camada j .

As Tabelas 2.8 e 2.9 apresentam alguns dos valores encontrados na literatura para as constantes do modelo de velocidade de sedimentação de Takács et al. (1991).

Tabela 2.8: Parâmetros do modelo ajustado aos dados de escala real de Pflanz (1969)⁷ citado por Takács et al. (1991)

Descrição	Parâmetro	Carga orgânica baixa	Carga orgânica média	Carga orgânica alta
máxima velocidade de sedimentação de Vesilind	v_o (m/d)	214,2	370,0	172,8
máxima velocidade de sedimentação	v'_o (m/d)	150,2	142,9	112,1
Parâmetro de sedimentação da zona floculenta	r_p (m^3/g)	$5,71 \cdot 10^{-3}$	$2,86 \cdot 10^{-3}$	$2,70 \cdot 10^{-3}$
Parâmetro de sedimentação da zona compactada	r_h (m^3/g)	$3,64 \cdot 10^{-4}$	$3,78 \cdot 10^{-4}$	$2,93 \cdot 10^{-4}$
fração de não-sedimentáveis	f_{ns}	$1,23 \cdot 10^{-3}$	$2,28 \cdot 10^{-3}$	$2,59 \cdot 10^{-3}$

Fonte: Adaptado de Takács et al. (1991).

⁷ Pflanz, P. (1969). Performance of (activated sludge) secondary sedimentation basins. In: Advances in Water Pollution Research (Edited by Jenkins S. H.). p. 569-581, Pergamon Press, London.

Tabela 2.9: Outros parâmetros da equação de velocidade de sedimentação.

Descrição	Parâmetro	Working group	Patry and Takács (1990)
máxima velocidade de sedimentação de Vesilind	v_o (m/d)	474	712,0
máxima velocidade de sedimentação	v'_o (m/d)	250,0	340,0
parâmetro de sedimentação da zona floculenta	r_p (m ³ /g)	$2,86 \cdot 10^{-3}$	$5,0 \cdot 10^{-3}$
parâmetro de sedimentação da zona compactada	r_h (m ³ /g)	$5,76 \cdot 10^{-4}$	$4,26 \cdot 10^{-4}$
fração de não-sedimentáveis	f_{ns}	$2,28 \cdot 10^{-3}$	$1,0 \cdot 10^{-3}$

Fonte: Working group (www.ensic.u-nancy.fr/COSTWWTP/Benchmark, download 20/01/1999).

Otterpohl e Freund (1992) propuseram modelos para os decantadores primário e secundário. O modelo para o decantador primário depende do tempo de residência e é representado pela curva empírica:

$$\eta_{DQO} = 2,7 \left((\ln \bar{t}^2) + 9 \right) \quad (2.32)$$

e

$$\bar{t} = \frac{V}{Q_f} \quad (2.33)$$

Para o uso da Equação 2.32 no Modelo Número 1 a eficiência total tem que ser transformada para as eficiências das frações particuladas:

$$\eta_x = \eta_{DQO} \frac{DQO_{total}}{DQO_{particulada}} \quad (2.34)$$

em que: V = capacidade ativa do decantador primário (m³);

Q_f = vazão média para o tempo de residência (m³/d);

\bar{t} = tempo de residência hidráulico no decantador primário (dias).

A concentração de material particulado na saída do decantador primário será:

$$X_{j,e} = X_j (1 - \eta_x) \quad (2.35)$$

em que: $X_{j,e}$ = concentração de substâncias particuladas na saída do decantador primário (mg/L);

X_j = concentração de substâncias particuladas na entrada do decantador primário (mg/L);

Para a modelagem do decantador secundário os sólidos são divididos em dois componentes: micro e macroflocos. Segundo Otterpohl e Freund (1992), a distribuição de tamanhos de partículas foi estimada por Billmeier (1978)⁸. A velocidade de sedimentação dos macro flocos foi modelada pela equação de Härtel (1990)⁹ (citado por Otterpohl e Freund, 1992) e os microflocos têm velocidade constante de sedimentação:

$$v_{S,F} = (17,4 \cdot e^{-0,00581 \cdot SVI} + 3,931) \cdot (e^{-(-0,9834 \cdot e^{-0,00581 \cdot SVI} + 1,043)^X}) \quad (m/h) \quad (2.36)$$

$$v_{S,S} = 0,01(m/h) \quad (2.37)$$

em que: índice S,F refere-se aos macroflocos e S,S aos microflocos;

SVI = índice volumétrico do lodo.

Não se esquecendo de que é feita uma divisão de macro e microflocos, é necessário que esta alteração seja acrescentada ao balanço de massa do sistema. Todos os componentes particulados devem ser divididos em pequenos e grandes flocos. Isto praticamente dobra o número já alto de equações que normalmente se emprega na modelagem de decantadores secundários.

⁸ Billmeier, E. (1978). Verbesserte Bemessungsvorschläge für horizontal durchströmte Nachklärbecken von Belebungsanlagen. *Berichte aus Wassergütewirtschaft und Gesundheitsingenieurwesen, Universität München, Band 21.*

⁹ Härtel, L. (1990). Modellansätze zur dynamischen Simulation des Belebtschlammverfahrens. *Dissertation, TH-Darmstadt, WAR-Schriftenreihe, Band 47.*

2.2.3 TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO EM PROCESSOS DE TRATAMENTO DE ESGOTOS SANITÁRIOS

O fornecimento de oxigênio é vital para todas as formas de tratamento aeróbio de esgotos sanitários, sendo a operação mais cara no processo. Além de suprir a demanda de oxigênio dos processos biológicos aeróbios, a aeração proporciona turbulência e mistura. Pode ainda remover compostos orgânicos voláteis por *air stripping*.

Em sistemas aeróbios de tratamento de esgotos, a velocidade de transferência gasosa é geralmente proporcional à diferença entre a concentração existente e a concentração de saturação. Esta relação pode ser melhor visualizada pela teoria dos dois filmes para a transferência de gases (ver Figura 2.7).

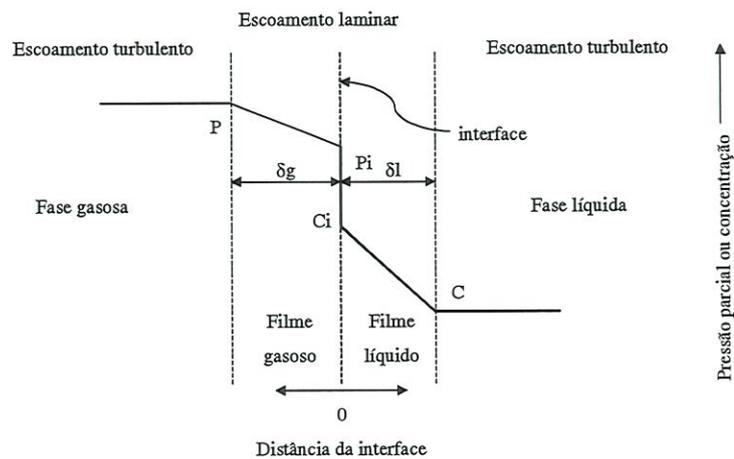


Figura 2.7: Definição da teoria dos dois filmes.

Fonte: Metcalf & Eddy (1991).

A equação que descreve esta teoria é:

$$r_m = K_g A(C_s - C) \quad (2.38)$$

em que: r_m = velocidade de transferência de massa ($\text{ML}^{-3}\text{t}^{-1}$);

K_g = coeficiente de difusão gasosa (L^2t^{-1});

A = área da superfície de difusão (L^2);

C_s = concentração de saturação do gás na solução (mg/L);

C = concentração do gás na solução (mg/L).

Em condições de operação de reatores, $r_m = V \frac{dC}{dt}$ e a velocidade de transferência de oxigênio pode ser escrita como:

$$r_c = \frac{dC}{dt} = K_g \frac{A}{V} (C_s - C) = K_l a (C_s - C) \quad (2.39)$$

em que: r_c = mudança na concentração (mg/L.s);

$K_l a$ = coeficiente global de transferência de oxigênio (s^{-1});

Em sistemas aeróbios de tratamento de esgotos, o valor de $K_l a$ pode ser determinado considerando a taxa de consumo de oxigênio pelos microrganismos. Em geral o nível de oxigênio dissolvido é mantido em níveis entre 1mg/L a 3mg/L.

$$\frac{dC}{dt} = K_l a (C_s - C) - r_M \quad (2.40)$$

em que r_M é a taxa de consumo de oxigênio pelos microrganismos.

O coeficiente global de transferência de oxigênio é também função da temperatura do sistema, intensidade de mistura e constituintes do esgoto sanitário. Daí a importância do tipo de aerador utilizado e da geometria do tanque de mistura.

Considera-se que o efeito da temperatura sobre o coeficiente global de transferência de massa possa ser aproximado pela equação de Arrhenius:

$$K_l a(T) = K_l a(20^\circ C) \theta^{T-20} \quad (2.41)$$

onde o valor típico para θ é 1.024 (Metcalf & Eddy, 1991, Droste, R. L., 1997) e T é a temperatura de operação do sistema ($^\circ C$).

Em geral a eficiência de aeração é determinada utilizando água de abastecimento em recipientes diferentes dos que realmente serão operados. Há, porém, alguns fatores de correção que devem ser considerados na determinação das velocidades de transferência de oxigênio quando o meio é o esgoto sanitário. A concentração de saturação do oxigênio no esgoto sanitário será diferente da água de abastecimento devido aos constituintes presentes como sais, materiais particulados e substâncias ativas. Um fator de correção β é proposto:

$$\beta = \frac{C_s(\text{esgoto sanitário})}{C_s(\text{água de abastecimento})} \quad (2.42)$$

O coeficiente global de transferência de oxigênio também será diferente para o esgoto sanitário e a água de abastecimento. A intensidade de mistura e geometria do reator implicam diretamente na eficiência do transporte de oxigênio. Um fator de correção α é usado para estimar o coeficiente global de transferência de oxigênio (K_1a) do sistema real:

$$\alpha = \frac{K_1a(\text{esgoto sanitário})}{K_1a(\text{água de abastecimento})} \quad (2.43)$$

Valores usuais de α para aeradores por ar difuso e mecânicos estão na faixa de 0,4 a 0,8 e 0,6 a 1,2, respectivamente.

A concentração de saturação do oxigênio na água limpa é calculada pela lei de Henry e pode ser avaliada para diferentes altitudes (valores disponíveis em tabelas de livros especializados). Além de corrigir C_s para uma determinada temperatura, deve-se corrigi-la para uma determinada altitude, pois a solubilidade dos gases varia com a pressão:

$$C_{s,alt} = C_{s,mar} \left[1 - \frac{\text{altitude (m)}}{9450} \right] \quad (2.44)$$

em que os índices *alt* e *mar* referem-se à altitude de operação do sistema de tratamento e à altitude ao nível do mar, respectivamente.

Substituindo-se as Equações 2.41 a 2.44 na Equação 2.40 e fazendo-se ainda nessa equação $\frac{dC}{dt} = 0$ (equilíbrio dinâmico – regime permanente), produz-se a taxa de transferência do oxigênio para esgotos sanitários:

$$OTR = SOTR \frac{(\beta C_s - C)\alpha(1.024)^{(T-20)}}{C_{s,20}} \quad (2.45)$$

em que: OTR = taxa real de transferência de oxigênio em condições de campo (kg O₂/kW.h);
 SOTR = taxa padrão de transferência de oxigênio em condições de teste a 20°C e concentração de oxigênio dissolvido nula (kg O₂/kW.h);
 C_{s,20} = 9,09 = concentração de saturação do oxigênio em água de abastecimento a 20°C e ao nível do mar (mg/L).

Para reatores de lodos ativados e processos de digestão aeróbia, a concentração de oxigênio dissolvido (OD) situa-se na faixa de 0,2 a 2,0mg/L para prevenir limitações na difusão do oxigênio. Segundo Droste (1997) um valor de operação de 1,0mg/L é seguro para a maioria dos processos, exceto quando há entumescimento do lodo.

A eficiência de aeração é também descrita (Eckenfelder e Grau, 1992) pela eficiência de transferência de oxigênio:

$$AOTE = \frac{\text{massa de oxigênio utilizada}}{\text{massa de oxigênio fornecida}} \times 100 \quad (2.46)$$

em que $AOTE$ = eficiência real de transferência de oxigênio (%).

A Equação 2.45 pode ser também descrita em termos de eficiência de aeração:

$$AOTE = SOTE \frac{(\beta C_s - C) \alpha (1.024)^{(t-20)}}{C_{s,20}} \quad (2.47)$$

em que: $SOTE$ = eficiência padrão de transferência de oxigênio para a água limpa.

Segundo Olsson (1989) a taxa de consumo de oxigênio (R) ou respiração é uma medida relevante da carga orgânica de um sistema de lodos ativados. Procedimento evidente para se determinar R é considerar o balanço de oxigênio dissolvido no sistema:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{Q}{V} [c_{in} - (1+r)c] + K_1 a (c^s - c) - R \quad (2.48)$$

em que: r = razão entre a vazão afluyente e de lodo de retorno;

c_{in} = concentração de oxigênio na entrada do tanque de aeração (mg/L);

c = concentração de oxigênio dissolvido no tanque de aeração (mg/L);

c^s = concentração de saturação do oxigênio (mg/L).

O problema fundamental deste balanço é a determinação do coeficiente global de transferência de oxigênio, $K_1 a$. De acordo com o autor, admite-se que o $K_1 a$ é linearmente proporcional à vazão de ar. Mantendo-se ainda a concentração de oxigênio constante, pode-se relacionar diretamente a taxa de consumo de oxigênio com a vazão de ar, resultando a Equação 2.49. O primeiro termo do lado direito da Equação 2.49 pode, ainda, ser desprezado, pois é muito menor que o segundo termo.

$$0 = \frac{dc_o}{dt} = \frac{Q}{V} [c_{in} - (1+r)c_o] + (a_1 Q_{air} + a_2)(c^s - c) - R \quad (2.49)$$

em que: Q_{air} = vazão de ar (m³/d);

C_o = concentração constante de oxigênio (mg/L).

Zanabria Sotomayor et al. (1999), no seu modelo de referência do sistema de lodos ativados com tratamento avançado, considerou a seguinte equação para o coeficiente de transferência de oxigênio:

$$K_L a(Q_{ar}) = 120 \arctan\left(\frac{4\pi \cdot Q_{ar}}{1000}\right) \quad (2.50)$$

em que: Q_{ar} = vazão de ar (m^3/d).

Esta seção finaliza os conceitos teóricos necessários ao entendimento do modelo mecanístico. A seguir, inicia-se a conceituação do modelo de Redes Neurais.

2.3 MODELO EMPÍRICO

2.3.1 REDES NEURAIS

2.3.1.1 O Cérebro Humano

O cérebro humano não é ainda totalmente entendido e, por isso, objeto crescente de estudos pelas mais diversas áreas. Da ciência cognitiva vem a técnica matemática que dará suporte à realização deste trabalho, as Redes Neurais. A ciência cognitiva estuda o funcionamento da mente humana através do uso de métodos computacionais que tentam representar a estrutura cerebral. Esta área reúne psicólogos, cientistas da computação, neurocientistas e filósofos, entre outros (Folha de São Paulo, 1996).

Todavia, o mecanismo básico de funcionamento do neurônio é bem conhecido (Figura 2.8) e serviu de base para o desenvolvimento da técnica de Redes Neurais. O cérebro humano contém aproximadamente 10 bilhões de unidades básicas denominadas neurônios. Os neurônios são células nervosas que transportam sinais unidirecionais de todas as partes do corpo para o cérebro e vice-versa. O corpo celular de um neurônio é geralmente localizado no sistema nervoso central, que inclui o cérebro e a espinha dorsal, relacionando a entrada e saída de sinais transmitidos entre partes do corpo de animais. Os sinais transportados pela fibra nervosa são chamados impulsos porque viajam como pequenos irrompimentos de atividade elétrica. A junção entre duas fibras nervosas é chamada sinapse e a transferência de impulsos é mediada pela liberação dos chamados neurotransmissores, através do fosso da sinapse. A ampliação ou modificação da informação pode ocorrer neste ponto. A maioria das fibras se subdivide nas suas extremidades em várias outras menores, habilitando cada neurônio a se comunicar com muitas outras fibras, em média, à aproximadamente dez mil outras. Se vários sinais são recebidos ao mesmo tempo, este neurônio é ativado, caso contrário o neurônio permanece inativo e o impulso não prossegue. Uma representação de uma célula nervosa é também mostrada na Figura 2.8 (Nova Enciclopédia Ilustrada Folha, 1996; Avancini e Favaretto, 1997).

O soma é o corpo do neurônio. Junto ao soma existem longos e irregulares filamentos, os dentritos. Eles atuam como conexões através das quais os sinais ou impulsos de

entrada chegam. Estas células são capazes de realizar mais do que um simples somatório de sinais, mas esta será uma boa aproximação no desenvolvimento de um modelo neural. Outro tipo de estrutura anexada ao soma são os axônios. Eletricamente ativos, servem de saída do sinal modificado pelo neurônio. Os axônios terminam com uma junção química, a sinapse, que os unem aos dendritos de outras células nervosas. Vale ressaltar que esta junção não é direta nem permanente. A sinapse libera substâncias químicas que formam uma ponte sobre os dendritos. É este escoamento de íons que altera o potencial do dendrito, provocando um pulso elétrico que é conduzido ao próximo neurônio. Cada dendrito pode ter muitas sinapses atuando sobre ele. Um único neurônio pode ter muitas entradas sinápticas sobre os seus dendritos assim como saídas sinápticas conectando-o a outras células (Nova Enciclopédia Ilustrada Folha, 1996; Avancini e Favaretto, 1997).

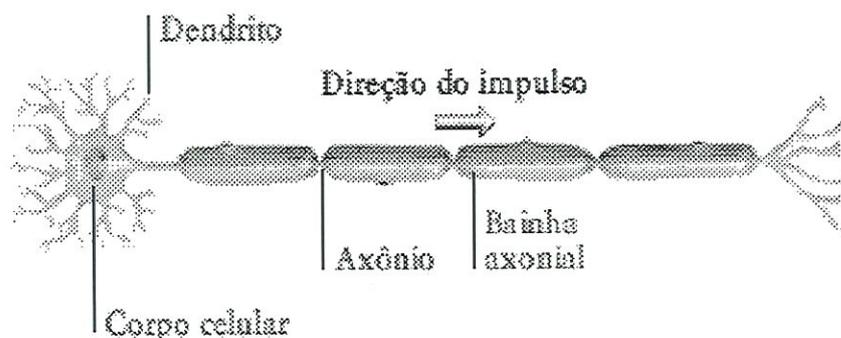


Figura 2.8: Esquema de um neurônio típico e a propagação de um impulso nervoso.

Fonte: Cérebro & Mente (1998).

O desenvolvimento e aplicação das Redes Neurais Artificiais, foi motivado pela analogia com o cérebro humano. Neurobiologistas buscam as Redes Neurais para interpretação dos fenômenos neurobiológicos. Por outro lado, engenheiros buscam na ciência cognitiva novas idéias para solucionar problemas mais complexos que aqueles baseados em teorias convencionais.

2.3.1.2 Redes MLP (Percéptrons¹ de Múltiplas Camadas - Multi-Layer Perceptrons)

Redes Neurais são sistemas paralelos distribuídos, compostos por unidades de processamento simples, os neurônios. Estas unidades computam certas funções matemáticas e estão dispostas em uma ou mais camadas, interligadas por um grande número de conexões, geralmente unidirecionais. Estas conexões estão associadas a pesos, os quais armazenam o conhecimento representado no modelo, e servem para ponderar a entrada recebida em cada neurônio da rede. O funcionamento destas redes é inspirado no cérebro humano e têm como atribuições mais comuns a aproximação de funções, previsão, classificação e reconhecimento de padrões. Suas semelhanças com o cérebro humano baseiam-se em dois aspectos fundamentais, segundo Haykin (1999):

- ✓ Conhecimento é adquirido pela rede através de um processo de aprendizado e;
- ✓ A intensidade ou força da conexão entre os neurônios, conhecida como pesos sinápticos, é usada para armazenar o conhecimento.

Existem diversas arquiteturas de redes, sendo que a rede do tipo MLP (percéptron de múltiplas camadas) tem sido extensivamente estudada no campo da Engenharia para simulação de processos químicos e biológicos, pois podem aproximar qualquer tipo de função, se possuírem mais de uma camada intermediária (Cruz e Giordano, 1995; Morris et al., 1994; Bhat et al., 1990). Assim, optou-se por trabalhar com este tipo de rede para modelar a ETE e toda a abordagem teórica que se segue somente dará ênfase a esta arquitetura. Esta rede é mostrada na Figura 2.9. Leitores interessados podem consultar os trabalhos de Haykin (1999) e Beale e Jackson (1990) que relatam outros tipos de arquiteturas de Redes Neurais.

¹ Fazendo-se analogia com palavras similares acentuadas no português, como elétron, nêutron e próton, optou-se também por acentuar a palavra *percéptron*.

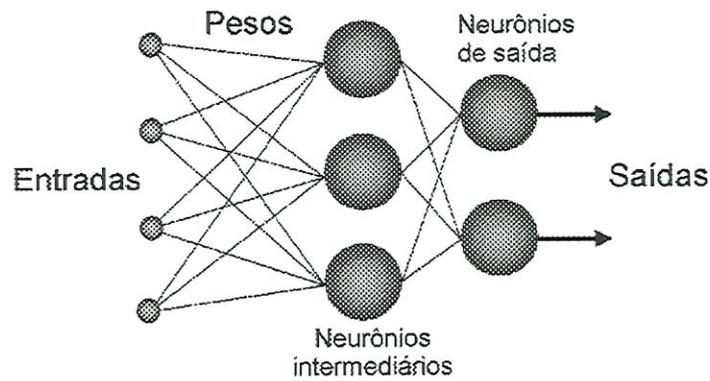


Figura 2.9: Redes MLP completamente conectadas.

Fonte: Cérebro & Mente (1998).

Neste tipo de rede dois tipos de sinais são identificados. Os sinais funcionais são os estímulos que se propagam deste a camada de entrada da rede, passando pelas camadas intermediárias, caso hajam, até que atinjam a saída da rede, após a camada de saída, como um sinal de saída. O outro tipo de sinal são os sinais de erro que se originam em um neurônio de saída e são propagados de volta, camada por camada através da rede.

As redes MLP são caracterizadas por possuírem uma ou mais camadas internas (escondidas) (Figura 2.9), cujos neurônios (Figura 2.10) realizam uma operação de confluência dos sinais (funcionais) de entrada recebidos:

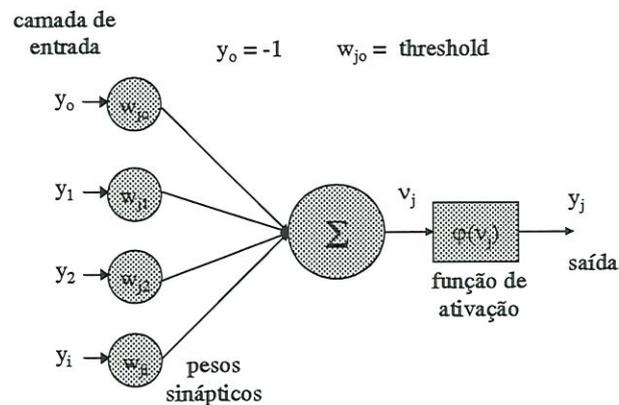


Figura 2.10: Modelo não-linear de um neurônio.

Fonte: Haykin (1999).

$$v_j(n) = \sum_{i=1}^P w_{ji}(n) y_i(n) \tag{2.50}$$

em que: $v_j(n)$ = entrada total recebida pelo neurônio j na apresentação do padrão n ;

p = número de entradas;

w_{ji} = pesos sinápticos;

y_i = entradas do neurônio.

Os neurônios precisam ter uma função na saída que mapeie suas entradas em um valor de saída. Usualmente uma função *threshold* é utilizada de modo que nenhuma resposta é produzida a menos que a ativação exceda um valor particular do *threshold*. Esta característica forma a base das funções discriminantes ou de decisão, que dividem o espaço de características em diferentes classes, também chamadas de regiões de decisão. Uma função *threshold*² (limiar) pode ser aplicada à soma ponderada, fornecendo uma maior variabilidade do grau de ativação deste neurônio. Desta forma, uma entrada constante igual a -1 é acrescentada ao neurônio e pode ser incorporada à Equação 2.50, adicionando-se $w_{j0}y_0$, que resulta em um somatório de $i = 0$ a p , não mais de 1 a p :

$$v_j(n) = \sum_{i=0}^p w_{ji}(n) y_i(n) \quad (2.51)$$

Aplicando-se uma função de ativação à Equação 2.51, produz-se a saída do neurônio j :

$$y_j = \varphi_j(v_j(n)) \quad (2.52)$$

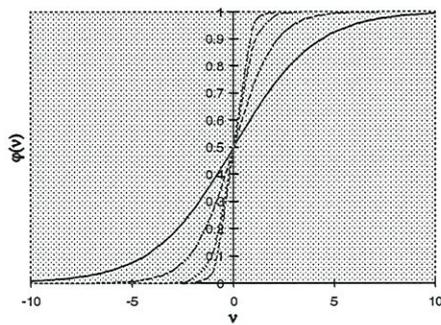
Geralmente a função de ativação é uma função sigmóide (Equação 2.53), cuja característica de diferenciabilidade é de importância primordial na fase de aprendizagem, embora apareçam na literatura outros tipos de funções de ativação.

$$\varphi(v_j(n)) = \frac{1}{1 + e^{-v_j(n)}} \quad (2.53)$$

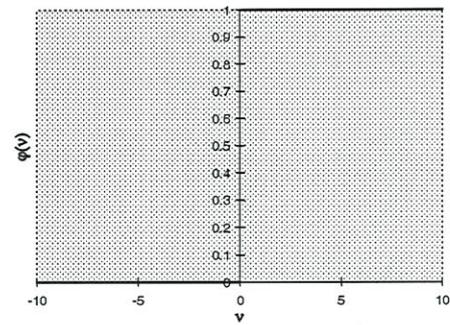
As mais comuns estão apresentadas na Figura 2.11. As funções (c) e (d) são descontínuas e não diferenciáveis, características que dificultam a etapa de aprendizagem da

² É também comum encontrar a terminologia *bias* em substituição a *threshold*, mas este não é nada mais senão o *threshold* com sinal negativo.

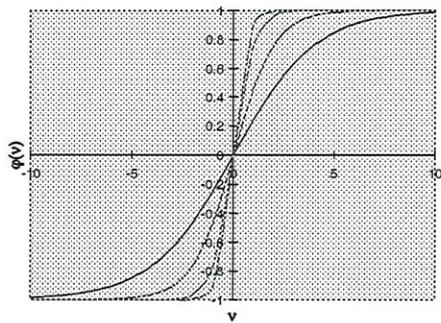
rede. As funções (a) e (b) são as mais difundidas, pois são diferenciáveis. Enquanto que na Figura 2.11 (a) os neurônios podem estar ativados ou inativos, os da Figura 2.11 (b) podem estar positivamente ou negativamente ativados. Esta característica influencia diretamente na força das conexões, tanto no sentido de fortalecê-las quanto de enfraquecê-las.



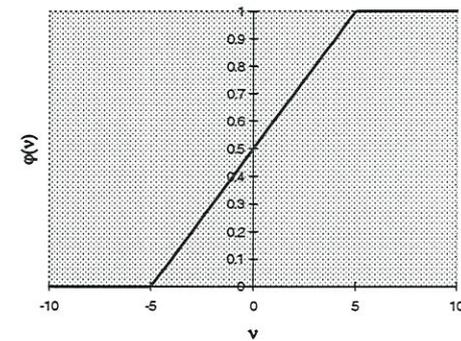
(a) função sigmóide



(c) função degrau



(b) função tangente hiperbólica



(d) função linear

Figura 2.11: Funções de ativação.

2.3.1.3 Derivação do Algoritmo Retropropagação (Backpropagation)

O aprendizado da rede MLP através do algoritmo retropropagação³ (*backpropagation*) consiste de um processo iterativo em que, dado um sinal de entrada, obtém-se uma resposta, ou estímulo, que é comparado à saída desejada (aprendizado supervisionado). Os pesos, que

³ O termo retropropagação, tradução bastante adequada da palavra *backpropagation*, não é difundido e não será mais utilizado ao longo do texto.

armazenam o conhecimento da rede, são reajustados, retropropagados para cada ciclo de treinamento, até um dado instante em que a função custo, ou erro atinja um mínimo aceitável. Este algoritmo de aprendizagem é também conhecido como Regra Delta Generalizada e foi sugerido por Rumelhart et al. (1989).

O sinal do erro na saída de um neurônio j em uma apresentação n do padrão de treinamento é definido por:

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (2.54)$$

em que: $d_j(n)$ = saída desejada do neurônio de saída j ;

$y_j(n)$ = saída real do neurônio de saída j .

Deste modo, uma função instantânea dos erros quadráticos é definida para os neurônios na camada de saída. O termo $\frac{1}{2}$ é colocado somente para facilitar posterior derivação desta equação.

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^m e_j^2(n) \quad (2.55)$$

em que: m = número de neurônios na camada de saída;

ε = erro quadrático para o padrão n apresentado.

Se N for quantificado como o total de padrões do conjunto de treinamento, pode-se calcular o erro quadrático médio somando-se $\varepsilon(n)$ para cada padrão apresentado:

$$\varepsilon_{av} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \varepsilon(n) \quad (2.56)$$

A soma dos erros quadráticos $\varepsilon(n)$ e, conseqüentemente, o erro quadrático médio ε_{av} , é função de todos os parâmetros livres, ou ajustáveis, que são os pesos e *thresholds*. Desta maneira, o processo de aprendizagem consiste em minimizar ε_{av} , também chamado de função custo.

De acordo com a Regra Delta Generalizada, aplica-se uma correção $\Delta w_{ji}(n)$ ao peso sináptico $w_{ji}(n)$, proporcional ao gradiente instantâneo $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)}$. Por meio da regra da cadeia, este gradiente pode ser expresso como se segue:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (2.57)$$

O gradiente $\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)}$ representa um fator de sensibilidade, determinando a direção de busca de $w_{ji}(n)$ no espaço de peso. Diferenciando-se os dois lados da Equação 2.55 em relação a $e_j(n)$, tem-se:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \quad (2.58)$$

Em seguida, diferenciando-se os dois lados da Equação 2.54 em relação a $y_j(n)$ tem-se:

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \quad (2.59)$$

Ainda, diferenciando-se os dois lados da Equação 2.52 em relação a $v_j(n)$ tem-se:

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi'_j(v_j(n)) \quad (2.60)$$

Finalmente, diferenciando-se $v_j(n)$ em relação a $w_{ji}(n)$ na Equação 2.51:

$$\frac{\partial v_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = y_i(n) \quad (2.61)$$

Aplicando-se as Equações 2.58, 2.59, 2.60 e 2.61 em 2.57 obtêm-se:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} = -e_j(n) \varphi'_j(v_j(n)) y_i(n) \quad (2.62)$$

O fator de correção $\Delta w_{ji}(n)$ definido pela Regra Delta Generalizada para o peso $w_{ji}(n)$ é:

$$\Delta w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (2.63)$$

em que η é uma constante que determina a taxa de aprendizagem da rede. O sinal negativo considera o gradiente descendente na busca do mínimo global.

Substituindo-se a Equação 2.62 em 2.63 resulta:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \delta_j(n) y_i(n) \quad (2.64)$$

em que $\delta_j(n)$ é o gradiente local e é definido por:

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \quad (2.65)$$

$$\delta_j(n) = e_j(n) \varphi'_j(v_j(n)) \quad (2.66)$$

De acordo com a Equação 2.66, o gradiente local $\delta_j(n)$ para um neurônio de saída é igual ao produto do erro $e_j(n)$ e da derivada da função de ativação $\varphi'_j(v_j(n))$ associada a este neurônio. Observando-se esta equação, vê-se um fator crucial no ajuste dos pesos: o posicionamento do neurônio na rede. Se ele pertence à camada de saída, $e_j(n)$ é facilmente calculado pela Equação 2.54, caso contrário tem-se outro problema a resolver. Os erros para as camadas intermediárias devem ser calculados em função dos erros dos neurônios posteriores aos quais estes estão conectados. Na verdade, o que é feito é uma ponderação, uma distribuição dos erros. Um erro elevado em um neurônio de saída será ponderado entre todos os neurônios anteriores que contribuíram de alguma forma para a obtenção desse erro. Sendo assim, deve-se redefinir o gradiente local $\delta_j(n)$ para um neurônio j escondido. Nota-se, a partir de agora, que j se refere a um neurônio escondido e k a um neurônio da camada de saída (Figura 2.12).

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \quad (2.67)$$

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} \varphi'_j(v_j(n)) \quad (2.68)$$

em que: j é um neurônio escondido.

Diferenciando-se a Equação 2.55 em função de $y_j(n)$ tem-se:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k e_k \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)} \quad (2.69)$$

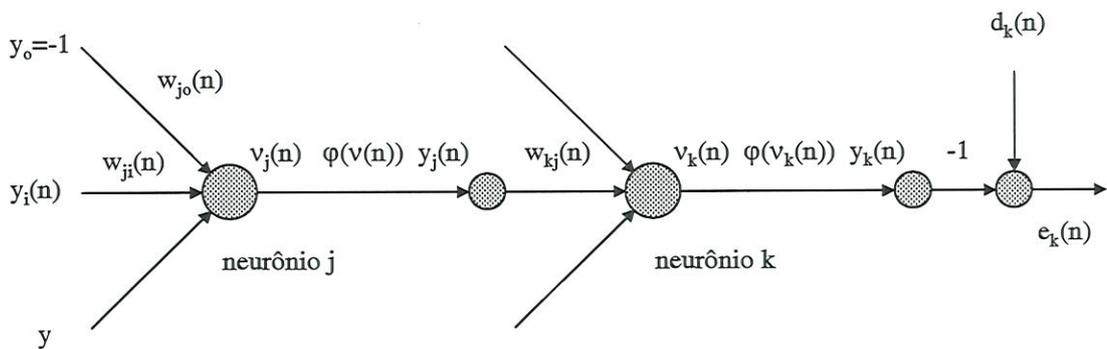


Figura 2.12: Diagrama simplificado da conexão entre o neurônio de saída k e o neurônio escondido j .

Fonte: Haykin (1999).

Aplicando-se novamente a regra da cadeia para a derivada parcial $\frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}$:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} \frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)} \quad (2.70)$$

Da Figura 2.12 pode-se notar que:

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) \quad (2.71)$$

$$e_k(n) = d_k(n) - \varphi_k(v_k(n)) \quad (2.72)$$

em que k é um neurônio de saída.

Portanto:

$$\frac{\partial e_k(n)}{\partial v_k(n)} = -\varphi'_k(v_k(n)) \quad (2.73)$$

Pela Equação 2.51 verifica-se que:

$$\frac{\partial v_k(n)}{\partial y_j(n)} = w_{kj}(n) \quad (2.74)$$

Utilizando-se as Equações 2.73 e 2.74 em 2.70 obtém-se a derivada parcial desejada:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_k e_k(n) \varphi'_k(v_k(n)) w_{kj}(n) \quad (2.75)$$

Substituindo $\delta_k(n)$ definido na equação 2.66 em 2.75:

$$\frac{\partial \varepsilon(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n) \quad (2.76)$$

Finalmente, substituindo-se a Equação 2.76 em 2.68:

$$\delta_j(n) = \varphi'_j(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n) \quad (2.77)$$

Nota-se que o somatório da Equação 2.77 incide sobre todos os neurônios k ao qual o neurônio j transmite sua saída.

Assim, efetuando-se a diferenciação dos dois lados da função de saída (Equação 2.53) em relação a $v_j(n)$:

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \frac{e^{(-v_j(n))}}{\left(1 + e^{(-v_j(n))}\right)^2} \quad (2.78)$$

Utilizando as Equações 2.52 e 2.53 para eliminar o termo exponencial da Equação 2.78 e substituindo em 2.66 para o neurônio de saída e em 2.77 para o neurônio escondido, produz-se os gradientes locais para os neurônios j :

$$\delta_j(n) = y_j(n)(1 - y_j(n))(d_j(n) - y_j(n)) \text{ para a camada de saída} \quad (2.79)$$

$$\delta_j(n) = y_j(n)(1 - y_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n) \text{ para as camadas intermediárias} \quad (2.80)$$

Percebe-se que o aprendizado envolve duas fases. Na primeira as entradas são propagadas, produzindo-se vetores de saída que são comparados aos vetores desejados. Os erros são calculados na camada de saída e, somente após, estes $\delta_k(n)$ são usados para calcular os $\delta_j(n)$ nas camadas adjacentes.

Todos os pesos sinápticos (conexões) e *thresholds* são inicializados com valores pequenos entre 0,5 e -0,5, aleatoriamente selecionados. Um padrão de treinamento (vetor de entrada) é apresentado na camada de entrada e o sinal é propagado, produzindo uma saída y_p . Se o erro for menor que o tolerado, nenhuma mudança é efetuada, caso contrário os pesos são ajustados de acordo com a Equação 2.81:

$$w_{ji}(t+1) = w_{ji}(t) + \eta \delta_{pj} y_{pi} + \alpha (w_{ji}(t) - w_{ji}(t-1)) \quad (2.81)$$

em que: η = taxa de aprendizado;

α = termo de momentum;

δ_{pj} = medida da distância entre o nível de ativação do neurônio j e o nível desejado.

Se α é igual a zero, tem-se o algoritmo conhecido como *backpropagation* padrão. Por outro lado, se α for diferente de zero o algoritmo é conhecido como *backpropagation* com *momentum*. O termo de *momentum* acelera a convergência e previne a estabilização da solução em um mínimo local, um fato indesejável, uma vez que interessa a procura do mínimo global.

Outras variações deste algoritmo foram desenvolvidas, entre elas o Rprop (Riedmiller e Braun, 1993; Riedmiller, 1994). Abreviação de *Resilient propagation* (propagação resistente), é um algoritmo adaptativo local, realizando treinamento supervisionado e em batelada. Isto significa que a atualização dos pesos é realizada somente depois que todas as informações sobre os gradientes para todos os padrões tiverem sido calculadas. O princípio básico é eliminar a influência prejudicial da extensão da derivada parcial do erro em relação ao peso. Como consequência, somente o sinal da derivada é

considerado para indicar a direção de atualização dos pesos. A extensão da mudança dos pesos é exclusivamente determinada por um valor de atualização definido por:

$$\Delta w_{ij}^{(t)} = \begin{cases} -\Delta_{ij}^{(r)}, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} > 0 \\ +\Delta_{ij}^{(r)}, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} < 0 \\ 0, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} = 0 \end{cases} \quad (2.82)$$

em que $\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial w_{ij}}$ corresponde à soma de todos os gradientes para todo o conjunto de padrões (treinamento em batelada).

O próximo passo é determinar novos valores para os valores de atualização $\Delta w_{ij}(t)$:

$$\Delta_{ij}^{(t)} = \begin{cases} \eta^+ * \Delta_{ij}^{(r-1)}, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r-1)}}{\partial w_{ij}} \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} > 0 \\ \eta^- * \Delta_{ij}^{(r-1)}, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r-1)}}{\partial w_{ij}} \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} < 0 \\ \Delta_{ij}^{(r-1)}, & \text{se } \frac{\partial \mathcal{E}^{(r-1)}}{\partial w_{ij}} \frac{\partial \mathcal{E}^{(r)}}{\partial w_{ij}} = 0 \end{cases} \quad (2.83)$$

Todo instante em que a derivada parcial do peso muda seu sinal indica que a última atualização foi além da desejada e, conseqüentemente, $\Delta w_{ij}(t)$ é diminuído pelo fator η^- . Se a derivada mantém o seu sinal, a atualização é suavemente aumentada de modo a acelerar o processo de convergência. Para reduzir o número de parâmetros ajustáveis, os fatores de decréscimo (η^-) e acréscimo (η^+) são fixados em 0,5 e 1,2, respectivamente. Pequenas variações em torno destes valores mostraram não interferir no tempo de convergência da solução. O algoritmo Rprop tem, ainda, três outros parâmetros ajustáveis: Δ_0 , Δ_{max} e Δ_{min} . Δ_0 determina o tamanho do primeiro passo de atualização e geralmente o valor adotado é 0,1. Δ_{max} limita o valor máximo das atualizações. Geralmente a convergência é insensível a este parâmetro. Por precaução, um último parâmetro Δ_{min} , com valor usual de 1.10^{-6} , é fixado para prevenir que a solução estacione em um mínimo local.

Para um maior detalhamento e compreensão das redes MLP e outras topologias em geral, sugere-se ao leitor a obra de Haykin (1999).

2.3.1.4 Critérios de parada

O algoritmo backpropagation não pode, em geral, convergir sem um critério pré-definido para a parada do aprendizado. Existem alguns critérios, cada qual com o seu mérito particular, que cessa a fase de treinamento.

A condição necessária para que um vetor peso aponte para um mínimo, global ou local, é que o seu gradiente (derivada parcial de primeira ordem) na superfície de erro em função dos pesos seja zero.

Kramer e Sangiovanni-Vincentelli (1989)⁴, citados por Haykin (1999), formularam alguns critérios de convergência para o aprendizado com o algoritmo backpropagation:

- ✓ O algoritmo converge quando a norma Euclideana do vetor gradiente atinge um valor (*threshold*) suficientemente pequeno. O problema deste critério é que o aprendizado pode se tornar uma tarefa excessivamente longa:

$$\|g(w_{final})\| \leq \varepsilon \quad (2.84)$$

em que: $g(w_{final})$ = vetor gradiente do vetor peso;

ε = valor máximo tolerado para o vetor gradiente.

- ✓ O algoritmo converge quando a taxa absoluta de mudança do erro quadrático médio (ε_{av} ou MSE) por ciclo de treinamento é suficientemente pequena. Usualmente a taxa de mudança no erro quadrático médio varia entre 0,1% e 1% por ciclo:

$$\varepsilon_{av}(w_{final}) \leq \tau \quad (2.85)$$

⁴ Kramer, A. H. e Sangiovanni-vincentelli, A. (1989). Efficient parallel learning algorithms for neural networks. In: *Advances in Neural Information Processing Systems 1*, p. 40-48. San Mateo, CA: Morgan Kaufmann.

em que: τ = máximo erro quadrático médio (MSE) tolerado.

- ✓ O algoritmo converge quando qualquer um dos critérios anteriores for atingido.

Outro critério de parada largamente utilizado é o *early-stopping* ou *stopped training*. O treinamento é interrompido quando o erro de validação começa a subir. Para a utilização deste método são necessários alguns procedimentos antes do início do treinamento:

- ✓ Dividir o total de dados disponível em conjuntos de treinamento e validação;
- ✓ Usar uma baixa taxa de aprendizado;
- ✓ Computar o erro de validação periodicamente durante o treinamento;
- ✓ Parar o treinamento quando o erro começar a subir.

É importante notar que o erro de validação não é uma boa medida do erro de generalização. Um meio de conseguir uma boa estimativa da capacidade de generalização da rede neural é utilizar um terceiro conjunto de dados, um conjunto de teste. Este conjunto não é utilizado durante todo o treinamento, somente no final.

A grande vantagem do critério *early-stopping* é a sua rapidez, além do reduzido esforço na escolha do tamanho do conjunto de validação. Os dados para a divisão dos conjuntos de treinamento e validação podem ser retirados aleatoriamente do total de dados ou ainda seguir algum outro critério sistemático.

Um problema do critério *early-stopping* é a subjetividade na decisão da subida do erro. Uma aproximação segura é treinar a rede até a convergência e, ao final, escolher a iteração (ciclo) que teve o menor erro de validação.

2.3.1.5 Generalização

A generalização de uma Rede Neural artificial indica sua capacidade de produzir respostas adequadas para entradas diferentes daquelas empregadas durante o seu treinamento. Entretanto, quando a Rede Neural extrai conhecimento de dados com relações de entrada e saída muito específicas, a rede pode memorizar esses dados de treinamento e estará menos apta a generalizar.

Existem três condições necessárias, embora não suficientes, para uma boa generalização:

A primeira condição exige que as entradas da rede possuam informações suficientes, relacionadas às saídas desejadas, de modo que exista uma função matemática correlacionando as saídas e entradas com um desejado grau de precisão. Não se pode esperar que uma Rede Neural aprenda funções que não existam. A obtenção de dados, suficientes e significativos, para a utilização no modelo neural pode requisitar mais tempo e esforço do que o próprio treinamento.

A segunda condição para uma boa generalização determina que a função que a rede está tentando aprender deve ser suave. Pequenas alterações nas suas entradas não devem provocar mudanças bruscas em suas saídas. Geralmente, uma transformação não-linear nos dados de entrada pode suavizá-los e melhorar a generalização.

Finalmente, a terceira condição determina que os padrões ou exemplos, selecionados para o treinamento, formem um subconjunto suficientemente grande e representativo do conjunto de dados. A importância desta condição é a existência de dois tipos de generalização. A interpolação e a extrapolação. A interpolação se aplica a casos de exemplos de teste dentro do intervalo de dados apresentado no treinamento, enquanto que a extrapolação se aplica aos dados que estão fora deste intervalo. A interpolação é bastante confiável, o que não se pode dizer da extrapolação. A extrapolação é mais confiável em modelos lineares, embora não tão segura quanto a interpolação. Assim, o procedimento mais adequado para uma melhor generalização, é definir um conjunto de treinamento suficientemente grande e abrangente para se evitar a necessidade de extrapolação.

A generalização é influenciada ainda por três fatores. Tamanho e eficiência do conjunto de treinamento, arquitetura da rede e a complexidade do problema em si. Não há controle sobre este último fator.

Existem muitos métodos para a estimativa do erro de generalização. O método mais comum para se obter uma estimativa imparcial do erro de generalização em Redes Neurais é conhecido como *Split-sample* ou *Hold-out validation*. Os dados disponíveis são divididos em três subconjuntos distintos. O primeiro é o conjunto de treinamento, utilizado para calcular o gradiente e a atualização dos pesos e *thresholds* (ou *biases*). O segundo subconjunto é o de

validação, utilizado para avaliar o desempenho do modelo durante o treinamento. O subconjunto de teste não é utilizado durante o treinamento, somente depois. O erro de teste fornece uma estimativa não tendenciosa do erro de generalização, desde que o conjunto de teste tenha sido escolhido aleatoriamente no conjunto total de dados. A desvantagem deste método é que ele reduz a quantidade de dados disponíveis para os conjuntos de treinamento e validação.

Uma variação do método *Hold-out validation* é conhecida como *Cross-validation*. Neste método, o conjunto total de dados é dividido em k subconjuntos de aproximadamente igual tamanho. Treina-se a rede k vezes, deixando-se de fora sempre um dos subconjuntos. Calcula-se, no final, a média dos erros dos k conjuntos que ficaram de fora.

2.3.2 SISTEMAS INTELIGENTES E A MODELAGEM DE PROCESSOS DE TRATAMENTO DE ESGOTOS SANITÁRIOS

Um dos principais objetivos da Inteligência Artificial é o desenvolvimento de paradigmas ou algoritmos que permitam às máquinas desenvolverem tarefas que aparentemente necessitem de cognição quando realizadas por humanos. Portanto, um sistema inteligente deve estar apto a armazenar conhecimento, aplicar o conhecimento armazenado na solução de problemas e adquirir conhecimento através da experiência. Sistemas inteligentes podem ser simbólicos (por exemplo, Sistemas Especialistas) ou conexionistas (por exemplo, Redes Neurais). Sistemas inteligentes simbólicos podem ser comparados às Redes Neurais sob três aspectos: nível de explicação, estilo de processamento e estrutura representacional. Enquanto que em Redes Neurais o processamento das informações se dá através de um grande número de neurônios paralelamente distribuídos, sistemas simbólicos consideram a existência de representações mentais que processam estas informações. Além disso, sistemas simbólicos processam informações geralmente de modo seqüencial, como as linguagens típicas de programação. Já as Redes Neurais têm como característica peculiar o processamento paralelo, que é fonte de sua grande flexibilidade. Finalmente, a estrutura dos sistemas simbólicos é constituída de representações simbólicas complexas que, como na linguagem natural, podem ser combinadas, gerando semântica e sintaxe. Redes Neurais, ao contrário, possuem representação distribuída, em que conhecimento é armazenado nos pesos sinápticos. Isto implica que a solução de um problema não pode ser estendida facilmente a outro.

Resultados estimulantes foram obtidos em pesquisas na área de Engenharia Química (Ramesh et al., 1988; Huang e Fan, 1988; Lakshmanan e Stephanopoulos, 1988a; Lakshmanan e Stephanopoulos, 1988b; Hoskins e Himmelblau, 1988, Watanabe et al., 1989, Venkatasubramanian et al., 1990, Bhat et al. 1990; Venkatasubramanian e Chan, 1989; Nott et al., 1996) utilizando Redes Neurais ou técnicas simbólicas de Inteligência Artificial, com ênfase no diagnóstico de falhas operacionais e controle de processos químicos, motivando pesquisadores da área de Saneamento Ambiental a aplicar estes métodos à modelagem dos processos biológicos e monitoramento da qualidade dos esgotos sanitários e águas naturais. Os processos biológicos são difíceis de serem modelados por equações determinísticas, pois são altamente complexos, exibindo diferentes fases, culturas ou estágios biológicos (Wilcox, 1995). Além disso, nem sempre a cinética de crescimento é completamente entendida e as

simplificações necessárias para a resolução numérica podem inviabilizar sua aplicação prática.

Carvalho et al. (1997) modelaram reator UASB piloto para o tratamento de esgoto sanitário. Os autores utilizaram como parâmetro de entrada da rede MLP a turbidez de entrada em um instante de tempo t e $t-1$, turbidez de saída em $t-1$ e pH de saída em $t-1$. A saída da rede possuía 2 neurônios, turbidez em t e pH em t . Foi utilizado algoritmo de treinamento backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa. Os gráficos nesse trabalho apresentam, aparentemente, boa correlação, embora nenhum valor numérico tenha sido explicitado.

Maier e Dandy (1996) estudaram o desempenho de Redes Neurais para a previsão da salinidade no Rio Murray, na Ponte Murray, no sul da Austrália, com 14 dias de antecedência. A água deste rio é vital para a irrigação e abastecimento da maioria da população do sul da Austrália, incluindo Adelaide. Entretanto, a água bombeada deste rio apresenta alta salinidade, estimando-se que perto de 22 milhões de dólares são perdidos a cada ano por usuários domésticos e industriais devido à elevada salinidade. Sendo assim, a previsão antecipada pode ajudar a desenvolver uma política de bombeamento, visto que em épocas de alta salinidade, diminui-se a retirada de água e aumenta-se a retirada se a situação inversa é observada. Os resultados demonstraram que as Redes Neurais foram uma ferramenta útil na solução desta tarefa. A grande dificuldade encontrada foi especificar as entradas apropriadas ao modelo.

Wilcox et al. (1995) controlaram um processo de digestão anaeróbia com base apenas no monitoramento da alcalinidade a bicarbonato utilizando dados provenientes de sensores *on-line*. Simulações com Redes Neurais informavam o operador sobre determinadas situações que poderiam potencialmente causar problemas ao processo de digestão. Os autores concluíram que este esquema é capaz de operar e controlar o processo em tempo real somente através da dosagem de bicarbonato. Assim, a rede indicava se era ou não apropriado dosar o bicarbonato, caso houvesse uma tendência de decaimento da alcalinidade. Caso contrário, se notado que a alcalinidade tendia a subir, nenhum procedimento era adotado.

Pu e Hung (1995) desenvolveram um modelo neural para prever a eficiência de uma Estação de Tratamento de Esgotos utilizando filtros aeróbios. Os autores também desejavam determinar o efeito dos parâmetros operacionais que afetavam a eficiência dessa estação na

cidade de Solon, Ohio. O esgoto bruto continha uma alta DBO e sólidos suspensos totais. O processo de tratamento incluía gradeamento, tanque de remoção de areia, decantadores primários, filtros aeróbios, tanques de aeração, decantadores secundários, filtros de areia terciário e tanques de desinfecção com cloração. Cloreto férrico era usado para a remoção de fósforo. A fim de examinar a relação entre as variáveis de entrada (independentes) e as variáveis de saída (dependentes), 2 conjuntos de redes foram definidos, um para previsão da DBO₅ efluente do filtro aeróbio e outro para a previsão dos sólidos suspensos. Cada um desses conjuntos foi subdividido em 9 redes, com diferentes números de variáveis de entrada, que também totalizavam 9. A Tabela 2.10 apresenta estas redes. Foi utilizada somente uma camada intermediária e o número de neurônios nessa camada é mostrado nas Tabelas 2.11 e 2.12. Os dados foram divididos em dois conjuntos. Os primeiros 2 anos (287 padrões ou conjunto de dados) foram reservados para a etapa de treinamento e o terceiro ano (151 padrões) foram reservados para a etapa de teste. O erro relativo médio (*MRE*) - *Relative Average Error* - utilizado para determinar a eficiência das redes, é definido pela expressão:

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{y_j - d_j}{d_j} \right| \quad (2.86)$$

em que: n = número de padrões de treinamento (287) ou teste (151);

y_j = saída real do neurônio de saída;

d_j = saída desejada do neurônio de saída.

As Tabelas 2.11 e 2.12 apresentam os erros relativos médios para todas as arquiteturas estudadas.

Os autores concluíram que não há nenhuma relação direta entre o número de variáveis de entrada e os erros de treinamento. O melhor resultado para a previsão da DBO foi obtido pelo modelo D_2 com um erro de 34,81%. Entretanto, na fase de teste o melhor resultado foi com a rede D_6 , apresentando um erro de 31,45%.

Tabela 2.10: Arquiteturas de Redes Neurais utilizadas no trabalho de Pu e Hung (1995).

<i>Conjunto de Redes D (previsão da DBO₅)</i>	<i>Conjunto de Redes Z (previsão dos SS)</i>
$D_1=ANN(A, C, L)$	$Z_1=ANN(A, L, Y)$
$D_2=ANN(A, C, L, M)$	$Z_2=ANN(A, L, M, Y)$
$D_3=ANN(A, C, L, Y)$	$Z_3=ANN(A, C, L, Y)$
$D_4=ANN(A, C, L, M, Y)$	$Z_4=ANN(A, C, L, M, Y)$
$D_5=ANN(A, B, C, L)$	$Z_5=ANN(A, B, L, Y)$
$D_6=ANN(A, B, C, L, M)$	$Z_6=ANN(A, B, C, L, M)$
$D_7=ANN(A, B, C, L, X, Y)$	$Z_7=ANN(A, B, C, L, X, Y)$
$D_8=ANN(A, B, C, L, M, X, Y)$	$Z_8=ANN(A, B, C, L, M, X, Y)$
$D_9=ANN(A, B, C, L, M, X, Y, Z)$	$Z_9=ANN(A, B, C, L, M, X, Y, Z)$

em que: $ANN()$ são as Redes Neurais com entradas A, B, C, L, M, X, Y ou Z e saídas D ou Z .

A = vazão afluente na estação;

B = DBO₅ bruta;

C = DBO₅ após decantador primário;

D = DBO₅ efluente do filtro aeróbio;

L = vazão no filtro aeróbio;

M = vazão de recirculação;

X = sólidos suspensos bruto;

Y = sólidos suspensos no decantador primário;

Z = sólidos suspensos na saída do filtro aeróbio.

Esta estrutura (D_2) tinha 5 neurônios na camada intermediária e 4 variáveis de entrada, vazão diária afluente, DBO na saída do decantador primário, vazão no filtro aeróbio e vazão de recirculação. Para a previsão dos sólidos suspensos totais na saída da estação, o melhor modelo foi o D_9 , que apresentou um erro de 22,97% na fase de treinamento. Na fase de teste o erro mínimo de 32,54% foi também obtido pelo modelo D_9 . Os autores ainda compararam

estes resultados com aqueles obtidos por regressão múltipla e observaram sempre maiores erros por esta última técnica.

Côté et al. (1995) utilizaram um modelo mecanístico, versão simplificada do modelo IAWPRC (Henze et al., 1987), para modelagem do tanque de aeração de um processo de lodos ativados. Esta versão foi desenvolvida por Lessard e Beck (1993). O decantador secundário foi descrito utilizando dois modelos, um empírico baseado em Pflanz (1969)¹ e um modelo de filtro aeróbio usando a teoria de fluxo de Dick e Young (1972)². Por isso, um modelo híbrido, mecanístico e neural, foi desenvolvido para prever os erros entre os valores experimentais e calculados pelo modelo para 5 variáveis definidas: OD na tanque de aeração, SS, DQO total, NH₄⁺ efluente e SSV no lodo de recirculação. A Tabela 2.13 resume as redes utilizadas nesse trabalho. O índice *i* indica o número de nós na entrada da rede, *j* o número de neurônios na camada intermediária e *k* o número de neurônios na saída da rede. As entradas eram normalizadas pela seguinte expressão:

$$x^* = \frac{x_{\max, \text{exp}} - x}{x_{\max, \text{exp}} - x_{\min, \text{exp}}} \quad (2.87)$$

Os dados foram divididos em 2 conjuntos. Os conjuntos de 1 a 140 foram selecionados para o treinamento e os de 141 a 193 para a fase de teste. Os resultados obtidos apontam que o modelo híbrido, obviamente, apresentou os menores erros de previsão. Os autores explicam que os desvios podem ter sido causados por ruído nos dados. Eles concluem, ainda, que a melhora significativa de previsão do modelo híbrido é clara indicação de que os dados experimentais contém alguma correlação não representada pelo modelo mecanístico.

1 Pflanz, P. (1969) Performance of secondary sedimentation basins. *Advances in Water Pollution Research*, Pergamon Press, Oxford, p. 569-581.

2 Dick, R. I., Young K. W. (1972) Analysis of Thickening performance of final settling tanks. *Proc. 27th Industrial Waste Conference*, Purdue University, N.C.

Tabela 2.11: Erros de treinamento para a previsão da DBO efluente.

neurônios na camada escondida	D ₁ (%)	D ₂ (%)	D ₃ (%)	D ₄ (%)	D ₅ (%)	D ₆ (%)	D ₇ (%)	D ₈ (%)	D ₉ (%)
1	96,89	111,81	87,79	112,28	97,92	112,02	69,82	106,27	87,62
2	97,61	102,58	87,84	103,94	97,93	50,99	44,40	110,15	97,33
3	105,71	35,56	80,13	49,03	97,26	104,71	94,27	61,00	84,29
4	66,62	34,81	55,83	119,02	97,97	103,33	92,12	57,24	83,55
5	-	35,96	55,28	100,00	70,80	100,00	110,04	100,00	99,62
6	-	-	-	71,04	-	111,79	47,66	36,03	95,02
7	-	-	-	-	-	-	56,96	42,94	100,00
8	-	-	-	-	-	-	-	100,00	100,00
9	-	-	-	-	-	-	-	-	36,31

Fonte: Pu e Hung (1995).

O modelo podia prever as concentrações na saída da estação dos sólidos suspensos totais (SST), sólidos suspensos voláteis (SSV), DQO total e solúvel e nitrogênio amoniacal (NH_4^+). O comportamento do OD e SSV no tanque de aeração e lodo de retorno também era simulado pelo modelo. Segundo os autores, a simulação foi adequada somente para o SSV no lodo de retorno e NH_4^+ efluente. Ajuste ruim foi observado para as outras variáveis.

Tabela 2.12: Erros de treinamento para a previsão do SST efluente.

neurônios na camada escondida	Z ₁ (%)	Z ₂ (%)	Z ₃ (%)	Z ₄ (%)	Z ₅ (%)	Z ₆ (%)	Z ₇ (%)	Z ₈ (%)	Z ₉ (%)
1	48,74	51,97	47,65	55,27	44,12	55,26	52,80	57,01	29,49
2	45,31	51,95	47,65	51,88	44,13	46,59	50,33	57,56	27,71
3	51,27	44,13	50,11	50,67	47,72	55,48	53,38	40,89	24,33
4	48,65	46,89	47,31	50,38	49,18	45,10	49,62	42,74	23,98
5	-	46,31	53,40	50,38	52,15	100,00	45,82	49,34	23,68
6	-	-	-	49,25	-	45,49	49,05	46,83	23,44
7	-	-	-	-	-	-	52,28	42,55	24,14
8	-	-	-	-	-	-	-	51,30	100,00
9	-	-	-	-	-	-	-	-	22,97

Fonte: Pu e Hung (1995).

Krovvidy e Wee (1993) desenvolveram um sistema inteligente híbrido WATTS (WAsTewater Treatment System) usando Aprendizado Indutivo, Raciocínio Baseado em Casos e Redes Neurais. O sistema foi desenvolvido para auxiliar o projeto de Estações de Tratamento de Esgoto. Especificadas as características da água a ser tratada e o nível de tratamento desejado, o sistema propunha uma disposição de operações unitárias e processos biológicos necessários. O sistema WATTS foi dividido em duas fases. A primeira, chamada de *fase de análise*, visava extrair regras do banco de dados e integrar o conhecimento proveniente de diferentes fontes de informação. As regras eram extraídas utilizando um conjunto de exemplos. A segunda fase, chamada de *fase de síntese*, gerava a disposição dos equipamentos de tratamento usando o conhecimento extraído da primeira fase. Duas aproximações distintas, Busca Heurística e Redes Neurais foram utilizadas nesta fase.

Raciocínio Baseado em Casos também foi usado para recuperar situações anteriores similares ao caso corrente.

Tyagi e Du (1992) desenvolveram um modelo matemático para o processo de lodos ativados e decantador secundário com o auxílio de Redes Neurais. Os autores projetaram uma rede capaz de representar a relação, no estado estacionário, entre os valores desejados da razão de recirculação de lodo (α) e vazão de descarte de lodo (F_w) com a concentração afluenta e efluente de substrato. A determinação de α e F_w via Redes Neurais permitiu usar diretamente valores de F (vazão de entrada) e S_i (concentração afluenta de substrato) para ajustar as variáveis manipuladas α e F_w .

Belanche et al. (1992), Béjar et al. (1993), Roure e Béjar (1993) e Serra et al. (1993) desenvolveram um Sistema Especialista (DEPUR) para diagnosticar as causas de um problema detectado em uma Estação de Tratamento de Esgotos do tipo convencional. Segundo os autores, tais problemas estão geralmente associados ao desbalanceamento entre produção de biomassa e consumo de substrato. Este sistema é composto de uma base de dados, uma base de conhecimento e outros módulos gerais independentes do domínio de aplicação. O sistema foi testado, confrontando seu desempenho com o de especialistas humanos. Os resultados obtidos foram muito bons, provando ser de grande ajuda no diagnóstico e monitoramento do processo de tratamento de esgotos.

O banco de dados levantado por Belanche et al. (1992), Béjar et al. (1993), Roure e Béjar (1993) e Serra et al. (1993) está disponível na *UCI Repository for Machine Learning Databasis and Domain Theory*. Hanisch et al. (1996), Hanisch et al. (1997) e Hanisch et al. (1998) utilizaram esse banco de dados, proveniente da operação de uma estação de lodos ativados, para iniciar os estudos de modelagem desse processo por Redes Neurais. A estação consistia de 6 bioreatores aeróbios de 1800m³, divididos em duas linhas paralelas de três reatores, dois decantadores primários de 37m de diâmetro e volume de 3332m³ e dois decantadores secundários de 42m de diâmetro e volume de 4850m³. A temperatura do esgoto oscilava entre 12°C no inverno e 20°C no verão. A taxa de recirculação de lodo variava em torno de 100% da vazão de entrada. A idade do lodo variava entre 4 e 7 dias. Os dados referem-se à operação diária, com exceção dos sábados e domingos, dessa estação entre os dias 01/03/90 a 29/10/91.

Tabela 2.13: Características das Redes Neurais de Côté et al. (1995)

Variáveis de saída	Variáveis de entrada	i	j	k
SS efluente (t)	Q(t) de entrada	6	6	1
	Q(t) de retorno do lodo			
	Q(t) de excesso do tanque de consolidação			
	SS(t) de entrada			
	SS(t-1) de entrada			
DQO total efluente(t)	Q(t) de entrada	6	6	1
	Q(t) de retorno do lodo			
	Q(t) de excesso do tanque de consolidação			
	DQO(t) de entrada			
	SS(t) de entrada			
NH ₄ ⁺ efluente (t)	Q(t) de entrada	6	6	1
	Q(t) de retorno do lodo			
	Q(t) de excesso do tanque de consolidação			
	NH ₄ ⁺ (t-3) de entrada			
	DQO(t-3) de entrada			
OD no tanque de aeração	Q(t) de entrada	6	6	1
	Q(t) de retorno do lodo			
	Q(t) de excesso do tanque de consolidação			
	DQO(t) de entrada			
	DQO(t-1) de entrada			
SSV no tanque de aeração	Q(t) de entrada	6	6	1
	Q(t) de retorno do lodo			
	Q(t) de excesso do tanque de consolidação			
	DQO(t-3) de entrada			
	NH ₄ ⁺ (t-3) de entrada			

Fonte: Adaptado de Côté et al. (1995)

O banco de dados não apresentava algumas informações importantes da operação do sistema, como a concentração de oxigênio dissolvido no tanque de aeração, sólidos suspensos no tanque de aeração, idade do lodo, taxa de recirculação de lodo e vazão de descarte de lodo. Por isso, o modelo desenvolvido pelos autores limitava-se somente à previsão de parâmetros futuros em todas as etapas do processo. Os autores utilizaram 1, 2, 3, 4 e 5 dias para a previsão de todos os 29 parâmetros que caracterizavam a estação. As Redes Neurais obtidas

se mostraram excessivamente grandes, e os elevados erros quadráticos médios determinados, na faixa de 30%, são ainda muito altos para modelos de previsão.

Lapolli et al. (1992) discutiram sobre a utilização de técnicas de Inteligência Artificial no controle operacional de estações de tratamento de esgotos, mais especificamente um sistema de lodos ativados. Os autores discorreram sobre alguns conceitos de Inteligência Artificial, Teoria dos Conjuntos Difusos (Lógica Fuzzy) e o uso de Sistemas Especialistas para gerenciar o controle operacional de estações, embora nenhum resultado tenha sido mostrado para validação do uso destas ferramentas.

Capodaglio et al. (1991) desenvolveram modelos para a previsão da ocorrência de entumescimento do lodo (*sludge bulking*) através de modelos estocásticos e Redes Neurais. Como regra geral, os autores afirmam que o *bulking* ocorre quando o índice volumétrico do lodo (SVI) é maior que 150mg/L. Na estação de tratamento de Milwaukee (EUA), cujos dados foram utilizados para essa modelagem, o *bulking* era observado com concentrações de SVI excedendo 300mg/L. Dois diferentes tipos de modelos estocásticos foram utilizados. Um auto-regressivo e média móvel (ARMA) e outro auto-regressivo de função de transferência (ARTF). O modelo ARMA utilizou 6 medidas de SVI (índice volumétrico de lodo) anteriores para a previsão da próxima. As medidas de SVI eram diárias. Para o modelo ARTF, o índice volumétrico do lodo (SVI) e a razão alimento/microrganismo (F/M) de 7 dias anteriores foram utilizadas para a previsão do SVI no próximo dia. O modelo neural utilizou uma rede MLP com algoritmo de treinamento backpropagation. As entradas da rede foram a razão DBO/N, a razão N/P, oxigênio dissolvido (OD), temperatura e a razão F/M de 5 dias, totalizando 25 entradas. A saída do modelo foi o SVI do próximo dia. O desempenho dos modelos foi medido pela soma dos quadrados dos resíduos de 20 dias de dados. O modelo que apresentou a menor soma dos quadrados dos resíduos foi o modelo neural. Entretanto, os pesquisadores afirmam que os seus mecanismos internos do processamento de sinais não possibilitam uma inferência sobre as características do processo.

3

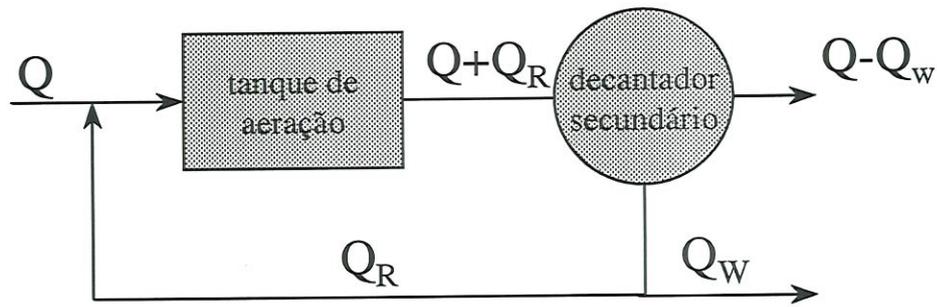
MÉTODOS

Descrição detalhada do desenvolvimento dos modelos mecanístico e neural para o processo de lodos ativados.

3.1 MODELO MECANÍSTICO

O capítulo anterior forneceu os subsídios necessários ao entendimento dos modelos propostos. O modelo para o processo de lodos ativados foi obtido realizando-se balanços de massa para cada componente solúvel e particulado definido pelo Modelo Número 1 (Henze et al, 1987). O tanque de aeração foi considerado um reator de mistura completa ideal. O decantador secundário foi modelado pela formulação desenvolvida por Takács et al. (1991). Uma nova formulação foi proposta para o balanço de oxigênio no tanque de aeração. Foi muito difícil localizar na literatura dados do coeficiente de transferência de oxigênio para esgotos sanitários. Contudo, para água limpa, este dado é disponível com facilidade, pois fabricantes de aeradores os fornecem em função da potência consumida pelo soprador ou da eficiência de transferência gasosa para o meio líquido.

Um fluxograma simplificado de um processo convencional de lodos ativados é mostrado na Figura 3.1. Nesta figura também são mostradas todas as variáveis que constituem o modelo proposto. A definição de cada um destes componentes se encontra na Tabela 2.1. A obtenção de cada um destes componentes se dá pela formulação do balanço de massa no tanque de aeração e decantador secundário, a seguir descritos.



Entrada	Reator	Reciclo	Saída
S_{I_o}	S_I	S_{I_R}	S_{I_s}
S_{S_o}	S_S	S_{S_R}	S_{S_s}
X_{I_o}	X_I	X_{I_R}	X_{I_s}
X_{S_o}	X_S	X_{S_R}	X_{S_s}
X_{B,H_o}	$X_{B,H}$	X_{B,H_R}	X_{B,H_s}
X_{B,A_o}	$X_{B,A}$	X_{B,A_R}	X_{B,A_s}
X_{P_o}	X_P	X_{P_R}	X_{P_s}
S_{O_o}	S_O	S_{O_R}	S_{O_s}
S_{NO_o}	S_{NO}	S_{NO_R}	S_{NO_s}
S_{NH_o}	S_{NH}	S_{NH_R}	S_{NH_s}
S_{ND_o}	S_{ND}	S_{ND_R}	S_{ND_s}
X_{ND_o}	X_{ND}	X_{ND_R}	X_{ND_s}
S_{ALK_o}	S_{ALK}	S_{ALK_R}	S_{ALK_s}

Figura 3.1: Esquema do processo de lodos ativados e as variáveis envolvidas.

3.1.1 BALANÇO DE MASSA NO TANQUE DE AERAÇÃO

3.1.1.1 Balanço de massa para o material solúvel

Foi realizado o balanço de massa no tanque de aeração para cada componente solúvel definido no Modelo Número 1 da IAWQ. É importante lembrar que as substâncias solúveis não são separadas no decantador secundário. Portanto, a concentração delas na corrente de recirculação de lodo será a mesma da saída do reator. Assim, os termos que apresentavam a vazão de recirculação são cancelados e não aparecem no balanço de massa.

As Equações 3.1 a 3.6 apresentam estes balanços. As velocidades de conversão dos componentes, ρ_i , estão listadas na Tabela 2.1 do Capítulo 2. Detalhes da formulação dos balanços de massa encontram-se no Apêndice II.

$$\frac{dS_I}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{I_o} - S_I) \quad (3.1)$$

$$\frac{dS_S}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{S_o} - S_S) + \left[-\frac{1}{Y_H}\rho_1 - \frac{1}{Y_H}\rho_2 + \rho_7 \right] \quad (3.2)$$

$$\frac{dS_{NO}}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{NO_o} - S_{NO}) + \left[-\left(\frac{1-Y_H}{2,86Y_H}\right)\rho_2 + \frac{1}{Y_A}\rho_3 \right] \quad (3.3)$$

$$\frac{dS_{NH}}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{NH_o} - S_{NH}) + \left[-i_{XB}\rho_1 - i_{XB}\rho_2 + \left(-i_{XB} - \frac{1}{Y_A}\right)\rho_3 + \rho_6 \right] \quad (3.4)$$

$$\frac{dS_{ND}}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{ND_o} - S_{ND}) + [-\rho_6 + \rho_8] \quad (3.5)$$

$$\frac{dS_{ALK}}{dt} = \frac{Q}{V}(S_{ALK_o} - S_{ALK}) + \left[-\frac{i_{XB}}{14}\rho_1 + \left(\frac{1-Y_H}{14,2,86Y_H} - \frac{i_{XB}}{14}\right)\rho_2 + \left(-\frac{i_{XB}}{14} - \frac{1}{7Y_A}\right)\rho_3 + \frac{1}{14}\rho_6 \right] \quad (3.6)$$

em que:

$$\rho_1 = \hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H} \quad (3.7)$$

$$\rho_2 = \hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H} \quad (3.8)$$

$$\rho_3 = \hat{\mu}_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A} \quad (3.9)$$

$$\rho_4 = b_H X_{B,H} \quad (3.10)$$

$$\rho_5 = b_A X_{B,A} \quad (3.11)$$

$$\rho_6 = k_a S_{ND} X_{B,H} \quad (3.12)$$

$$\rho_7 = k_H \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H} \quad (3.13)$$

$$\rho_8 = \rho_7 (X_{ND}/X_S) \quad (3.14)$$

3.1.1.2 Balanço de massa para o material particulado

Realizou-se para cada componente particulado um balanço de massa no tanque de aeração. Alguns componentes, $X_{B,H}$, $X_{B,A}$ e X_P , não aparecem na corrente de entrada do reator. No caso das bactérias $X_{B,H}$, $X_{B,A}$, a concentração delas na entrada do reator foi considerada muito pequena em comparação à contribuição dos outros termos do balanço e, por consequência, podem ser desprezadas. X_P é produto do decaimento celular (ver Tabela 2.1) e portanto não está contido no esgoto afluyente e somente é produzido e acumulado no sistema. As Equações 3.15 a 3.20 apresentam os balanços de massa no tanque de aeração para os componentes particulados. As velocidades de conversão dos componentes i (ρ_i) estão na Tabela 2.1 ou nas Equações 3.7 a 3.14 desta seção. O Apêndice II apresenta alguns detalhes da formulação destes balanços de massa.

$$\frac{dX_I}{dt} = \frac{Q}{V} X_{I_o} + \frac{Q_R}{V} X_{I_r} - \frac{(Q + Q_R)}{V} S_I \quad (3.15)$$

$$\frac{dX_S}{dt} = \frac{Q}{V} X_{S_o} + \frac{Q_R}{V} X_{S_r} - \frac{(Q + Q_R)}{V} X_S + [(1 - f_P)\rho_4 + (1 - f_P)\rho_5 - \rho_7] \quad (3.16)$$

$$\frac{dX_{B,H}}{dt} = \frac{Q_R}{V} X_{B,H_r} - \frac{(Q + Q_R)}{V} X_{B,H} + [\rho_1 + \rho_2 - \rho_4] \quad (3.17)$$

$$\frac{dX_{B,A}}{dt} = \frac{Q_R}{V} X_{B,A_r} - \frac{(Q + Q_R)}{V} X_{B,A} + [\rho_3 - \rho_5] \quad (3.18)$$

$$\frac{dX_P}{dt} = \frac{Q_R}{V} X_{P_r} - \frac{(Q + Q_R)}{V} X_P + [f_P\rho_4 + f_P\rho_5] \quad (3.19)$$

$$\frac{dX_{ND}}{dt} = \frac{Q}{V} X_{ND_0} - \frac{(Q + Q_R)}{V} X_{ND} + [(i_{XB} - f_P i_{XP})\rho_4 + (i_{XB} - f_P i_{XP})\rho_5 - \rho_8] \quad (3.20)$$

3.1.1.3 Balanço de massa para o oxigênio

O balanço de massa para o oxigênio dissolvido em um sistema aeróbio de tratamento de esgotos seria uma tarefa simples se dados do coeficiente global de transferência de massa, K_1a , para o oxigênio em esgotos sanitários fossem facilmente encontrados na literatura. A dificuldade toda é percebida no Capítulo 2, na seção sobre “Transferência de massa em processos aeróbios”. O K_1a é função da temperatura do sistema, intensidade de mistura e também dos constituintes do esgoto sanitário, causas da dificuldade de se encontrar dados consistentes na literatura para o valor desse coeficiente. Optou-se então por utilizar o K_1a da água limpa e convertê-lo, utilizando a Equação 2.47, para o coeficiente de um esgoto sanitário qualquer, conforme descrito a seguir. O balanço de massa para o oxigênio pode ser escrito assim:

$$\left[\begin{array}{c} \text{acúmulo de oxigênio dissolvido} \\ \text{no tanque de aeração} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{oxigênio transferido} \\ \text{ao meio líquido} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{oxigênio consumido} \\ \text{pelos microrganismos} \end{array} \right] \quad (3.21)$$

O oxigênio efetivamente transferido do meio gasoso ao meio líquido será igual ao oxigênio fornecido, multiplicado pela eficiência de aeração. A Equação 3.22 mostra esta relação.

$$\text{Oxigênio}_{\text{transferido}} = \text{Oxigênio}_{\text{fornecido}} \cdot E \quad (3.22)$$

em que: E = eficiência de transferência de oxigênio (%).

Normalmente, o coeficiente de transferência de oxigênio é dado em kgO_2/MJ (ou $\text{lbO}_2/\text{hp-h}$), ou ainda, a eficiência de aeração (em %) é fornecida pelos fabricantes de equipamentos de aeração para a água limpa (de torneira). Para esgotos sanitários quaisquer são necessárias correções, como mostra a Equação 2.47:

$$AOTE = SOTE \frac{(\beta C_s - C) \alpha (1.024)^{(T-20)}}{C_{s,20}} \quad (2.47)$$

A massa de oxigênio fornecida ao tanque de aeração pode ser calculada a partir da vazão de ar, empregando-se a Equação 3.23:

$$m_{O_2 \text{ fornecida}} = \frac{Q_{ar \text{ fornecida}}}{V} \left(\frac{m_{ar \text{ fornecida}}^3}{d} \frac{1}{m^3} \right) \left(\frac{0,21 m_{oxigênio \text{ fornecida}}^3}{m_{ar \text{ fornecida}}^3} \right) \left(\frac{32 \text{ g}}{1 \text{ mol de } O_2} \right) \left(\frac{1 \text{ mol de } O_2}{22,4 \text{ L}} \right) \left(\frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \right) \quad (3.23)$$

em que: $m_{O_2 \text{ fornecida}}$ = massa de oxigênio fornecida ao sistema ($\text{g}/\text{m}^3 \cdot \text{d}$);

$Q_{ar \text{ fornecida}}$ = vazão de ar fornecida ao sistema (m^3/d);

V = volume do tanque de aeração (m^3);

$\left(\frac{0,21 m_{oxigênio \text{ fornecida}}^3}{m_{ar \text{ fornecida}}^3} \right)$ é a fração volumétrica do oxigênio no ar;

$\left(\frac{32 \text{ g}}{1 \text{ mol de } O_2} \right)$ é a massa molar do oxigênio gasoso;

$\left(\frac{1 \text{ mol de } O_2}{22,4 \text{ L}} \right)$ é o volume ocupado por 1 mol de oxigênio gasoso na CNTP;

$\left(\frac{1000 \text{ L}}{1 \text{ m}^3} \right)$ é a conversão de L para m^3 .

Simplificando, a Equação 3.23 reduz-se a:

$$m_{O_2 \text{ fornecida}} = 300 \frac{Q_{ar \text{ fornecida}}}{V} \left(\frac{\text{g}}{\text{m}^3 \cdot \text{d}} \right) \quad (3.24)$$

que fornece a quantidade de oxigênio introduzida no tanque de aeração.

Substituindo as Equações 3.24 e 2.47 na Equação 3.22, a massa de oxigênio transferida para o meio líquido pode ser expressa por:

$$Oxigênio_{transferido} = \frac{300 Q_{ar}}{V} \frac{SOTE(\beta C_s - S_o) \alpha (1,024)^{T-20}}{9,09} \quad (3.25)$$

A taxa de consumo de oxigênio pelas bactérias heterotróficas e autotróficas (ver Equação 3.21) pode ser obtida multiplicando-se os coeficientes estequiométricos da coluna 8 (v_{81} e v_{83}) da Tabela 2.1 pelos processos de crescimento aeróbio das heterotróficas (ρ_I) e autotróficas (ρ_3) nas linhas 1 e 3 da Tabela 2.1. Acrescentando estas velocidades e a Equação 3.25 no balanço de massa da Equação 3.21, resulta a forma final do balanço de oxigênio:

$$\frac{dS_o}{dt} = \frac{300Q_{ar}}{V} \frac{SOTE(\beta C_s - S_o)\alpha(1,024)^{T-20}}{9,09} + \left[-\left(\frac{1-Y_H}{Y_H}\right)\rho_1 - \left(\frac{4,57-Y_A}{Y_A}\right)\rho_3 \right] \quad (3.26)$$

Os valores adotados para α e β foram 0,8 e 0,95, respectivamente. O número 9,09 no denominador da Equação 3.17 é o valor da concentração de saturação do oxigênio na água a 20°C. Para a estação simulada neste trabalho a temperatura T foi fixada em 25°C.

3.1.2 BALANÇO DE MASSA NO DECANTADOR SECUNDÁRIO

As informações apresentadas no Capítulo 2, na seção sobre modelos para decantador secundário, levaram à adoção do modelo de Takács et al. (1991) para descrever o comportamento do decantador secundário nesta proposta.

As equações do balanço de massa no decantador secundário são reproduções do trabalho de Takács et al. (1991). O trabalho do *Working group* (www.ensic.unancy.fr/COSTWWTP/Benchmark, *download 20/01/99*) também apresenta a mesma formulação desenvolvida por Takács e seus colaboradores.

O balanço de massa para os sólidos na camada de alimentação ($m=5$) é igual a:

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{\frac{Q_f X_f}{A} + G_{u,m-1} - (v_o + v_u)X_m - G_{u,m}}{z_m} \quad (3.27)$$

em que: X_f = concentração de sólidos suspensos na entrada do decantador (g/m^3);

Q_f = vazão afluyente do decantador (m^3/d);

z_m = altura da camada m (m);

G_u = escoamento de sólidos por sedimentação ($g/m^2.d$)

E G_u é definido como:

$$G_u = \begin{cases} G_{s,i} & \text{se } X_i < X_r \\ \min(G_{s,i}, G_{s,i+1}) & \text{se } X_i > X_r \end{cases} \quad (3.28)$$

e ainda:

$$G_{s,i} = v_{s,i} X_i \quad (3.29)$$

em que: v_s = velocidade de sedimentação de Vesilind (m/h);

E v_s pode ser expressa por:

$$v_s = \max \left[0, \min \left\{ v'_o, v_o \left(e^{-r_h(X-X_{\min})} - e^{-r_p(X-X_{\min})} \right) \right\} \right] \quad (3.30)$$

$$X_{\min} = f_{ns} X_f \quad (3.31)$$

Os parâmetros utilizados nas Equações 3.30 e 3.31 são aqueles da Tabela 2.9 determinados pela equipe intitulada de *Working group*.

O balanço de massa para os sólidos nas camadas intermediárias acima da camada de alimentação ($i = 2$ a $m-1$) é dado por:

$$\frac{dX_m}{dt} = \frac{G_{o,i+1} + G_{u,i-1} - G_{o,i} - G_{u,i}}{z_m} \quad (3.32)$$

em que:

$$G_{o,i} = v_o X_i \quad (3.33)$$

$G_{o,i}$ = fluxo de sólidos devido ao movimento ascensional ($\text{g/m}^2 \cdot \text{h}$);

v_o = velocidade ascensional devido ao movimento do fluido (m/h);

v_u = velocidade descendente devido ao movimento do fluido (m/h);

G_s = fluxo de sedimentação ($\text{g/m}^2 \cdot \text{h}$);

z = altura da camada i (m);

$$v_o = \frac{Q_o}{A} \quad (3.34)$$

Q_o = vazão do clarificado de saída do decantador secundário (m^3/d);

A = área da seção transversal do decantador secundário (m^2);

$$v_u = \frac{Q_u}{A} \quad (3.35)$$

Q_u = vazão de retirada do lodo do fundo do decantador secundário (m^3/d).

com:

$$Q_o = Q - Q_w \quad (3.36)$$

$$Q_u = Q_R + Q_w \quad (3.37)$$

em que: Q = vazão efluente do decantador secundário (m^3/d);

Q_w = vazão de descarte de lodo (m^3/d);

Q_R = vazão de recirculação de lodo (m^3/d).

Balanco de massa nas camadas intermediárias abaixo da camada de alimentação ($i = m+1$ a $n-1$):

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{v_u X_{i-1} + G_{u,i-1} - v_u X_i - G_{u,i}}{z_i} \quad (3.38)$$

Balanco de massa para os sólidos na camada superior do decantador ($i=1$):

$$\frac{dX_1}{dt} = \frac{G_{o,2} - G_{o,1} - G_{u,1}}{z_1} \quad (3.39)$$

Balanco de massa para os sólidos na camada inferior do decantador secundário ($i=n$):

$$\frac{dX_n}{dt} = \frac{v_u X_{n-1} + G_{u,n-1} - v_u X_n}{z_n} \quad (3.40)$$

O tempo de retenção celular ou idade do lodo é definido como o tempo médio de permanência dos microrganismos no sistema de tratamento. Portanto, faz-se necessário incluir as bactérias heterotróficas e autotróficas dentro do tanque de aeração (primeiro termo do numerador da Equação 3.41) e a massa de microrganismos no decantador secundário (segundo termo do numerador). Os dois termos no denominador indicam o material celular perdido no efluente clarificado e no lodo de descarte.

$$\theta_c = \frac{(X_{B,H} + X_{B,A})V + \sum_{j=1}^n (X_{B,H_j} + X_{B,A_j})z_j \cdot A}{(X_{B,H_e} + X_{B,A_e})Q_o + (X_{B,H_R} + X_{B,A_R})Q_w} \quad (3.41)$$

em que θ_c = idade do lodo (dias).

O sistema de equações diferenciais constituído pelas Equações 3.1 a 3.6, 3.15 a 3.20, 3.26, 3.27, 3.32, 3.38, 3.39 e 3.40 foi resolvido por um método Runge-Kutta implícito (método *ode23tb* do Matlab), com um primeiro estágio que é um passo da regra trapezoidal e um segundo estágio que é a diferenciação de ordem dois. Esse método é eficiente para problemas *stiff*. A possibilidade deste tipo de problema aumenta quando se lida com equações diferenciais de ordem superior a 1. Ocorre quando as variáveis dependentes respondem de forma muito diferente em determinado intervalo da escala da variável independente. De acordo com o manual de implementação da linguagem Matlab, nem todos os problemas são *stiff*, mas todos os problemas *stiff* são difíceis de serem resolvidos por métodos não especialmente projetados para sua solução. O Apêndice III apresenta uma descrição simplificada do Método Runge-Kutta de quarta ordem.

3.1.3 DEFINIÇÃO DOS EXPERIMENTOS

As características do esgoto afluyente no modelo foram escolhidas baseando-se em dados publicados por Oliva (1997), que caracterizou esgotos sanitários coletados em uma área de São Carlos, próxima ao Campus da Universidade de São Paulo. Os resultados estão listados na Tabela 3.1. Metcalf & Eddy (1991) publicaram valores (Tabela 3.2) representativos das composições típicas de esgotos sanitários. A caracterização realizada por Oliva (1997) situa-se na faixa de concentração média.

Os parâmetros cinéticos e estequiométricos utilizados foram fixados dentro da faixa estabelecida em literatura (Tabelas 2.3 e 2.4) e indicados na Tabela 3.3.

Os volumes do tanque de aeração e decantador secundário foram calculados baseando-se em equações de projeto de Metcalf & Eddy (1991). Estes volumes foram decrescidos em torno de 20%, para que se pudesse simular a operação deste sistema no limite de sua capacidade e se pudesse verificar o comportamento deste sistema em diferentes condições de operação. O volume do reator foi de 4000 m³, a área superficial do decantador secundário e sua profundidade foram de 1250 m² e 4m, respectivamente.

Com o intuito de verificar a influência de vazão de ar, vazão de recirculação de lodo e vazão de descarte de lodo na eficiência do processo, experimentos simulados foram realizados alterando-se estes três parâmetros. À vazão afluyente de esgoto foi imposta uma variação randômica de média 20.000m³/d, com máxima de 25.000 m³/d e mínima de 15.000

m³/d. A Tabela 3.4 apresenta o planejamento experimental efetuado com 27 experimentos necessários a essa avaliação, de acordo com Montgomery (1984).

A Tabela 3.5 apresenta um resumo de todos os parâmetros definidos para o processo de lodos ativados e a indicação das equações que os determinam. As características do esgoto afluente definidas também estão inseridas.

Tabela 3.1: Médias diárias dos resultados dos parâmetros de esgoto sanitário da região central da cidade de São Carlos analisados de 11 amostras coletadas de outubro de 1995 a fevereiro de 1996 em diferentes horários e dias da semana.

Parâmetros analisados	Médias	Desvio padrão
ST (mg/L)	676	200
STF (mg/L)	187	41
STV (mg/L)	490	187
SST (mg/L)	216	54
SSF (mg/L)	35	12
SSV (mg/L)	181	53
SDT (mg/L)	460	184
SDF (mg/L)	152	46
SDV (mg/L)	309	173
Sólidos sedimentáveis (mL/L)	3,5	1,2
pH	6,8	0,3
DQO (mg/L)	639	158
DBO (mg/L)	377	111
DQO/DBO	1,8	0,4
N-Total (mg/L)	57	10
N-Orgânico (mg/L)	31	6
N-Amoniacal (mg/L)	26	6
Alcalinidade total (mg/L)	121	27
Alcalinidade à bicarbonato (mg/L)	62	22
Alcalinidade à ácidos voláteis (mg/L)	57	12
Fosfato (mg/L)	18	5
Sulfato (mg/L)	11	8
Lipídios (mg/L)	8	2
Carboidratos (mg/L)	61	18
Proteínas (mg/L)	385	78

Fonte: Oliva (1997).

Tabela 3.2: Composição típica de esgoto sanitário sem tratamento.

Contaminantes	Unidade	Concentração		
		fraca	média	Forte
Sólidos totais	(mg/L)	350	720	1200
dissolvidos totais	(mg/L)	250	500	850
fixos	(mg/L)	145	300	525
voláteis	(mg/L)	105	200	325
Sólidos suspenso	(mg/L)	100	220	350
fixos	(mg/L)	20	55	75
voláteis	(mg/L)	80	165	275
Sólidos sedimentáveis	(mL/L)	5	10	20
DBO	(mg/L)	110	220	400
Carbono orgânico total	(mg/L)	80	160	290
DQO	(mg/L)	250	500	1000
Nitrogênio (total como N)	(mg/L)	20	40	85
orgânico	(mg/L)	8	15	35
amoniacal	(mg/L)	12	25	50
Nitrito	(mg/L)	0	0	0
Nitrato	(mg/L)	0	0	0
Fósforo (total como P)	(mg/L)	4	8	15
orgânico	(mg/L)	1	3	5
inorgânico	(mg/L)	3	5	10
Cloretos	(mg/L)	30	50	100
Sulfato	(mg/L)	20	30	50
Alcalinidade (como CaCO ₃)	(mg/L)	50	100	200
Graxas	(mg/L)	50	100	150
Coliformes totais	n°/100mL	10 ⁶ -10 ⁷	10 ⁷ -10 ⁸	10 ⁷ -10 ⁹
Compostos orgânicos voláteis	µg/L	<100	100-400	>400

Fonte: Metcalf & Eddy (1991).

Tabela 3.3*: Parâmetros utilizados no Modelo Número 1 da IAWQ.

Unidades		
Símbolo	Parâmetros estequiométricos	Valor
Y_A	g células DQO formadas (g N oxidado) ⁻¹	0,24
Y_H	g células DQO formadas (g DQO oxidada) ⁻¹	0,67
f_P	adimensional	0,08
i_{XB}	g N (g DQO) ⁻¹ na biomassa	0,086
i_{XP}	g N (g DQO) ⁻¹ no produto da biomassa	0,06
Parâmetros cinéticos		
μ_H	dia ⁻¹	6,0
K_S	g DQO m ⁻³	20,0
$K_{O,H}$	g O ₂ m ⁻³	0,2
K_{NO}	g NO ₃ - N m ⁻³	0,20
b_H	dia ⁻¹	0,62
η_g	adimensional	0,8
η_h	adimensional	0,4
k_a	m ³ (g células DQO.dia) ⁻¹	0,08
k_h	g vagorosamente degradável DQO (g células DQO.dia) ⁻¹	2,2
K_X	g vagorosamente degradável DQO (g células DQO) ⁻¹	0,15
μ_A	dia ⁻¹	0,5
K_{NH}	g NH ₃ - N m ⁻³	0,5
$K_{O,A}$	g O ₂ m ⁻³	1,0
b_a	dia ⁻¹	0,1
k_A	m ³ DQO (g.dia) ⁻¹	0,08

* Formato da tabela baseado em Henze et al. (1987).

Tabela 3.4: Planejamento experimental para análise do modelo.

vazão de recirculação de lodo (m ³ /d)	vazão de descarte de lodo (m ³ /d)								
	200			300			400		
	vazão de ar (m ³ /d)			vazão de ar (m ³ /d)			vazão de ar (m ³ /d)		
	100.000	120.000	140.000	100.000	120.000	140.000	100.000	120.000	140.000
10.000	exp.1	exp.2	exp. 3	exp. 4	exp. 5	exp. 6	exp. 7	exp. 8	exp. 9
15.000	exp. 10	exp. 11	exp. 12	exp. 13	exp. 14	exp. 15	exp. 16	exp. 17	exp. 18
20.000	exp. 19	exp. 20	exp. 21	exp. 22	exp. 23	exp. 24	exp. 25	exp. 26	exp. 27

Tabela 3.5: Resumo dos parâmetros do modelo e indicação das equações pelos quais são determinados.

Entrada	Reator	Reciclo	Saída
$S_{I_o} = 64$	S_I (Eq. 3.1)	$S_{I_R} = S_I$	$S_{I_s} = S_I$
$S_{S_o} = 160$	S_S (Eq. 3.2)	$S_{S_R} = S_S$	$S_{S_s} = S_S$
$X_{I_o} = 70$	X_I (Eq. 3.15)	X_{I_R} (Eq. 3.40)	X_{I_s} (Eq. 3.39)
$X_{S_o} = 288$	X_S (Eq. 3.16)	X_{S_R} (Eq. 3.40)	X_{S_s} (Eq. 3.39)
$X_{B,H_o} = 0$	$X_{B,H}$ (Eq. 3.17)	X_{B,H_R} (Eq. 3.40)	X_{B,H_s} (Eq. 3.39)
$X_{B,A_o} = 0$	$X_{B,A}$ (Eq. 3.18)	X_{B,A_R} (Eq. 3.40)	X_{B,A_s} (Eq. 3.39)
$X_{P_o} = 0$	X_P (Eq. 3.19)	X_{P_R} (Eq. 3.40)	X_{P_s} (Eq. 3.39)
$S_{O_o} = 0$	S_O (Eq. 3.26)	$S_{O_R} = S_O$	$S_{O_s} = S_O$
$S_{NO_o} = 0$	S_{NO} (Eq. 3.3)	$S_{NO_R} = S_{NO}$	$S_{NO_s} = S_{NO}$
$S_{NH_o} = 31$	S_{NH} (Eq. 3.4)	$S_{NH_R} = S_{NH}$	$S_{NH_s} = S_{NH}$
$S_{ND_o} = 9$	S_{ND} (Eq. 3.5)	$S_{ND_R} = S_{ND}$	$S_{ND_s} = S_{ND}$
$X_{ND_o} = 17$	X_{ND} (Eq. 3.20)	X_{ND_R} (Eq. 3.40)	X_{ND_s} (Eq. 3.39)
$S_{ALK_o} = 62$	S_{ALK} (Eq. 3.6)	$S_{ALK_R} = S_{ALK}$	$S_{ALK_s} = S_{ALK}$

3.2 MODELO EMPÍRICO (MODELO DE REDES NEURAIS)

Os dados utilizados para simular o processo de lodos ativados para o tratamento de esgotos sanitários pela técnica empírica de Redes Neurais foram obtidos através da realização de balanços de massa dos componentes descritos no Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al. 1987). O decantador secundário foi representado pelo modelo desenvolvido por Takács et al. (1991). Detalhes deste modelo podem ser vistos na seção 1 (Modelo Mecanístico).

As Figuras 3.2 e 3.3 apresentam os parâmetros gerados pela simulação do sistema de lodos ativados por 1025 dias. Variou-se, durante a simulação, as vazões de descarte de lodo (Q_w), de recirculação de lodo (Q_R) e de ar (Q_{ar}). Um dos grandes problemas do controle de estações de tratamento de esgoto sanitário é a alta variação da carga orgânica durante o dia. Por isso, neste modelo, foi atribuída à vazão de entrada da estação uma função aleatória, com média de 20.000 m³/d e mínima e máxima de 15.000 m³/d e 25.000 m³/d, respectivamente. A Figura 3.4 apresenta os gráficos destas variáveis.

Trabalhos realizados por Hanisch et al. (1996), Hanisch et al. (1997) e Hanisch et al. (1998) subsidiaram a definição das arquiteturas das redes MLP, a normalização dos dados, a divisão do conjunto de dados, os algoritmos de treinamento, a verificação dos erros e a determinação do critério de parada.

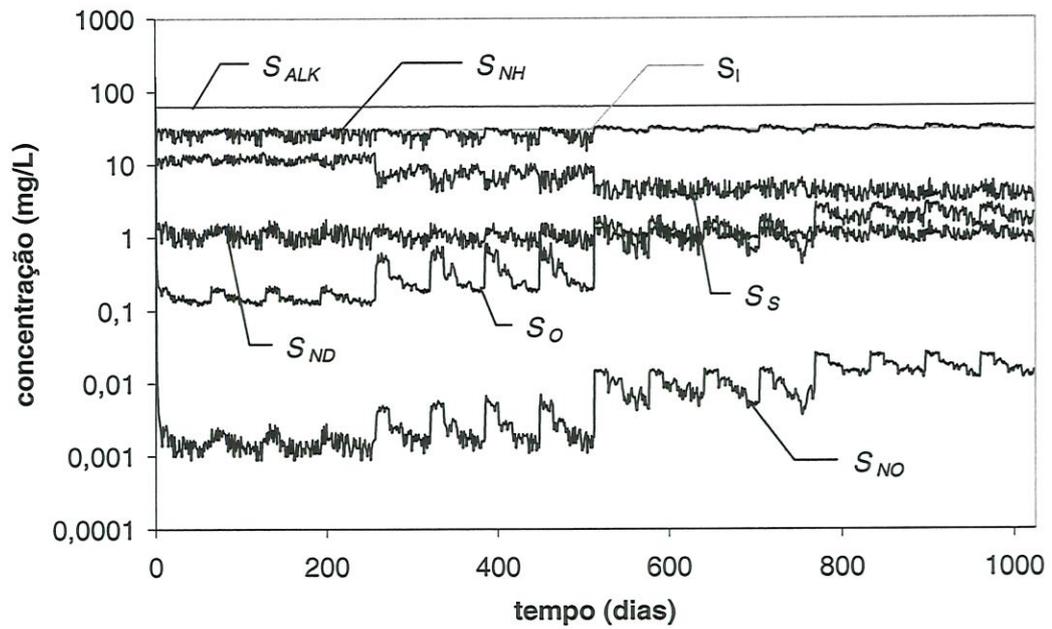


Figura 3.2: Concentração de substâncias solúveis determinadas em simulação do processo de lodos ativados.

em que: S_{ALK} = alcalinidade (mol/L);

S_{NH} = nitrogênio amoniacal (mg/L);

S_I = material orgânico inerte solúvel (mg/L);

S_{ND} = nitrogênio orgânico biodegradável solúvel (mg/L);

S_O = oxigênio dissolvido (mg/L);

S_S = substrato rapidamente biodegradável (mg/L);

S_{NO} = nitrogênio nitrato e nitrito (mg/L).

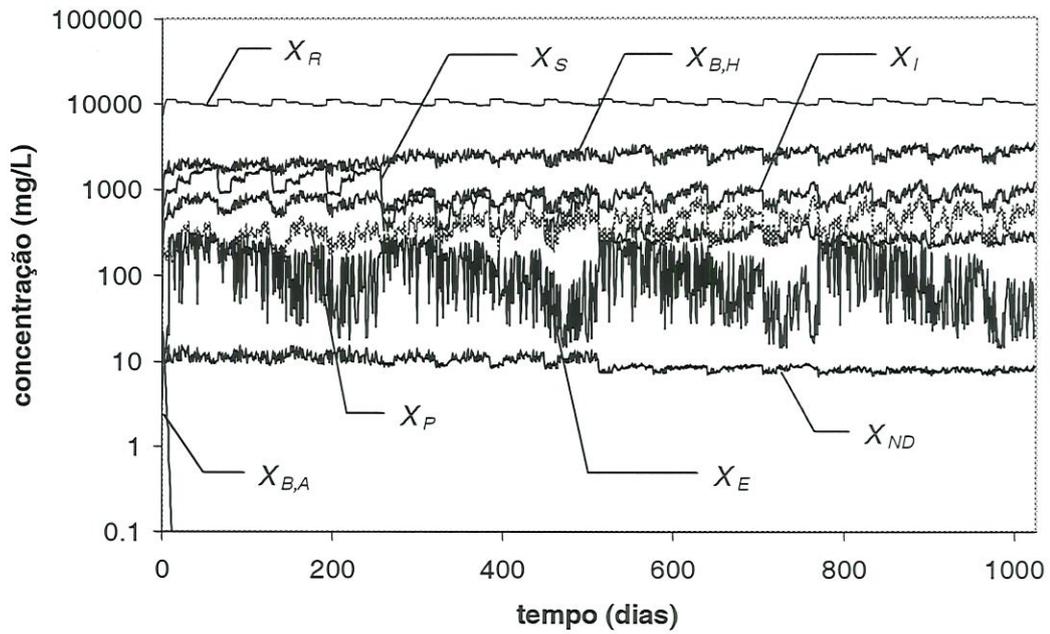


Figura 3.3: Concentração de substâncias particuladas determinadas em simulação do processo de lodos ativados.

em que: X_R = concentração de sólidos na linha de retorno de lodo (mg/L);

X_S = substrato lentamente biodegradável (mg/L);

$X_{B,H}$ = biomassa heterotrófica ativa (mg/L);

$X_{B,A}$ = biomassa autotrófica ativa (mg/L);

X_I = material orgânico inerte particulado (mg/L);

X_P = produtos particulados liberados pelo decaimento da biomassa (mg/L);

X_E = sólidos da saída clarificada do decantador secundário (mg/L);

X_{ND} = nitrogênio orgânico biodegradável particulado (mg/L).

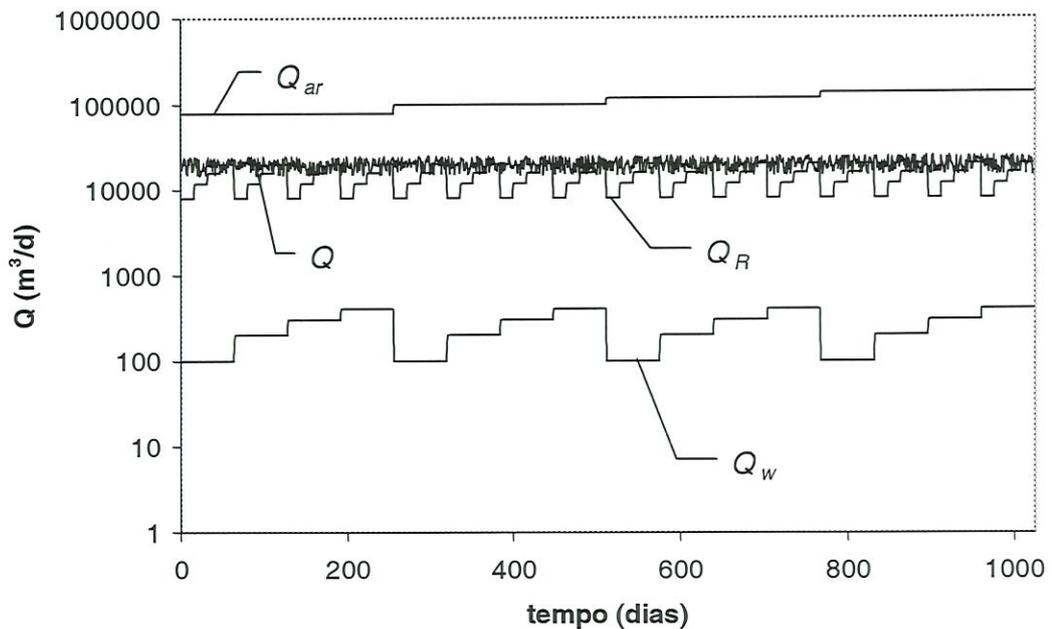


Figura 3.4: Vazões manipuladas (Q_w , Q_R e Q_{ar}) e de entrada aleatória (Q) na simulação do processo de lodos ativados.

em que: Q = vazão afluyente no sistema de lodos ativados (m^3/d);

Q_{ar} = vazão de ar para o tanque de aeração (m^3/d);

Q_R = vazão de recirculação de lodo (m^3/d);

Q_w = vazão de descarte de lodo (m^3/d).

3.2.1 DEFINIÇÃO DAS ARQUITETURAS

Escolheu-se, entre as configurações de Redes Neurais, a rede MLP (multi-layer perceptron), pois pesquisas recentes (ver seção 3 do capítulo de Fundamentos Teóricos) têm demonstrado que elas são viáveis para a modelagem de processos biológicos de tratamento de esgotos. (Tyagi and Du, 1992, Pu and Hung, 1995, Côté et al., 1995, Carvalho et al., 1997). Como a maioria das estações de tratamento de esgotos sanitários somente faz a caracterização dos parâmetros de monitoramento da operação uma vez ao dia, e os sistemas de lodos ativados, com tempos de residência (θ) de apenas horas (geralmente em torno de 8h), respondem prontamente a variações na qualidade e carga orgânica afluentes,

praticamente anulando seus efeitos em não mais do que 24h (3 vezes o tempo de residência no tanque de aeração), optou-se por desenvolver um modelo estático que apenas incorporasse os parâmetros diários da estação. Assim, ao contrário de Carvalho et al. (1997), que utilizou redes recorrentes para a identificação de um sistema anaeróbio (alto tempos de residência), preferiu-se trabalhar com redes MLP estáticas para a modelagem do sistema de lodos ativados, da mesma forma que nos trabalhos de Tyagi e Du (1992) e Pu e Hung (1995).

Objetivou-se, portanto, desenvolver um modelo neural que utilizasse parâmetros convencionais diários de caracterização de uma estação de tratamento de esgotos. Por isso, calculou-se através dos parâmetros do Modelo Número 1 da IAWQ, a DQO na entrada (DQO_o) e saída (DQO_s) da estação, sólidos suspensos na entrada (SS_o) e saída (SS_s) da estação, a carga orgânica aplicada ao sistema (CO), a eficiência de remoção de matéria orgânica (E), o oxigênio dissolvido (OD) e sólidos suspensos ($MLSS$) no tanque de aeração, o tempo de retenção celular (θ_c) e o tempo de residência no tanque de aeração (θ). As equações a seguir mostram o cálculo desses parâmetros e as Figuras 3.5 e 3.6 mostram seus gráficos. A DQO de entrada (DQO_o) foi avaliada conforme caracterização descrita por Henze et al. (1987) e Henze (1992).

$$DQO_o = S_{S_o} + S_{I_o} + X_{S_o} + X_{I_o} \quad (3.42)$$

$$DQO_s = S_S + S_I + X_S + X_I + X_{B,H_s} + X_{B,A_s} + X_{P_s} \quad (3.43)$$

$$SS_o = X_{S_o} + X_{I_o} \quad (3.44)$$

$$SS_s = X_S + X_I + X_P + X_{B,H_s} + X_{B,A_s} \quad (3.45)$$

$$MLSS = X_S + X_I + X_P + X_{B,H} + X_{B,A} \quad (3.46)$$

$$OD = S_O \quad (3.47)$$

$$CO = Q \cdot DQO_o \quad (3.48)$$

$$\theta = \frac{V}{Q} \quad (3.49)$$

$$\theta_c = \frac{(X_{B,H} + X_{B,A})V + \sum_{j=1}^n (X_{B,H_j} + X_{B,A_j})Z_j \cdot A}{(X_{B,H_e} + X_{B,A_e})Q_o + (X_{B,H_R} + X_{B,A_R})Q_w} \quad (3.41)$$

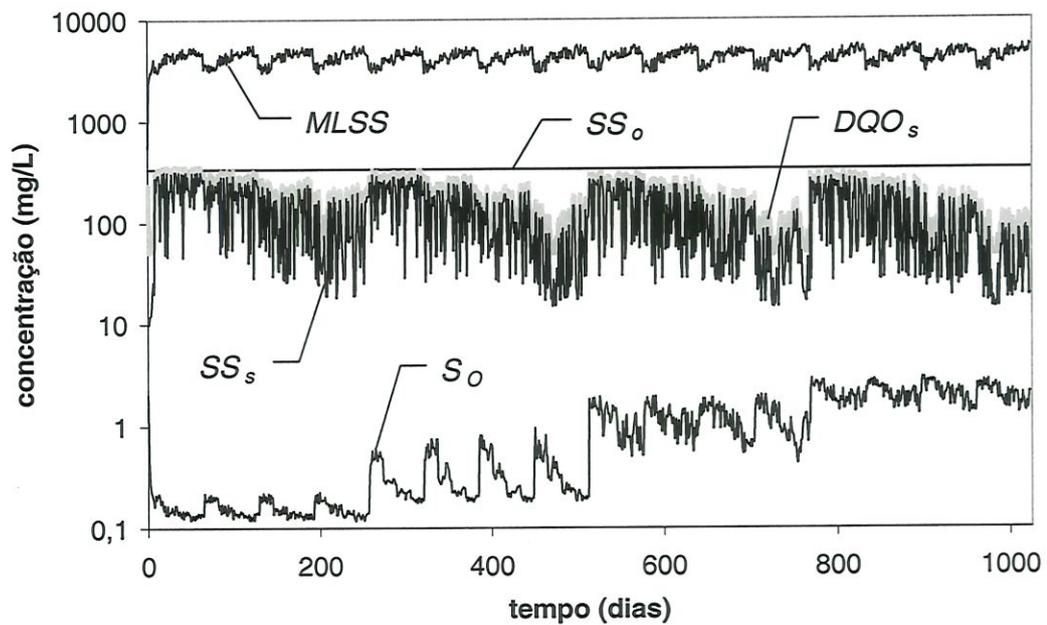


Figura 3.5: DQO na saída da estação (DQO_s); sólidos suspensos na entrada (SS₀) e saída (SS_s) da estação; sólidos suspensos (MLSS) e oxigênio dissolvido (S₀) no tanque de aeração utilizados no treinamento das redes neurais.

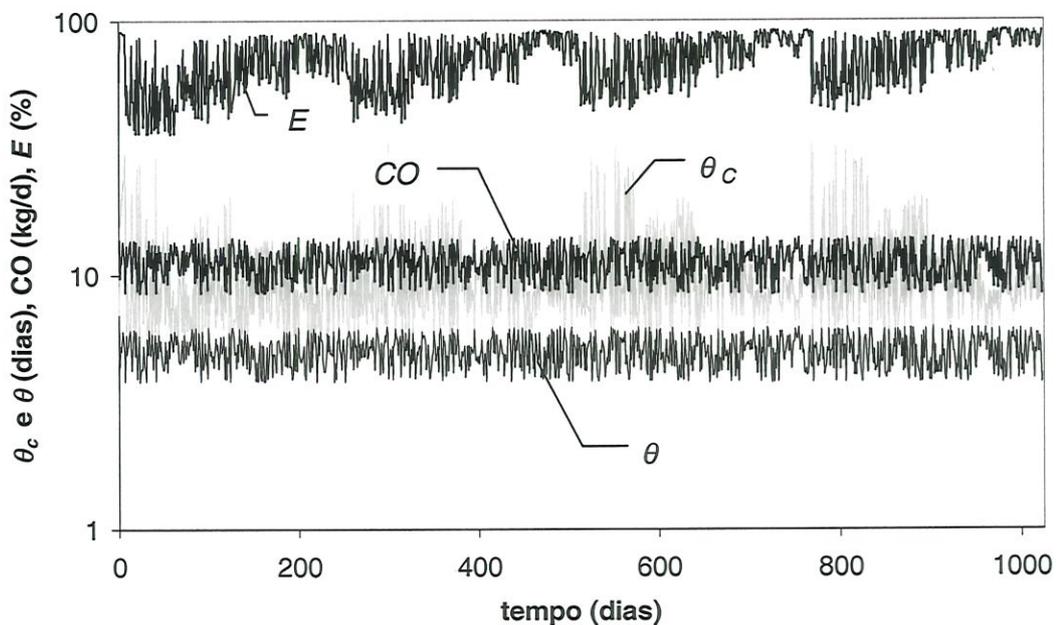


Figura 3.6: Carga orgânica aplicada (CO), eficiência de remoção de matéria orgânica (E) e tempos de retenção hidráulico (θ) e celular (θ_c) utilizados no treinamento das redes neurais.

Os parâmetros de caracterização do sistema de lodos ativados serviram como entrada para o modelo neural. As vazões de descarte de lodo (Q_w), de recirculação de lodo (Q_R) e de ar (Q_{air}), que são variáveis que podem ser manipuladas facilmente no processo, foram definidas como as saídas da rede neural. A Figura 3.7 mostra um esquema da rede neural especificada, com suas entradas e saídas.

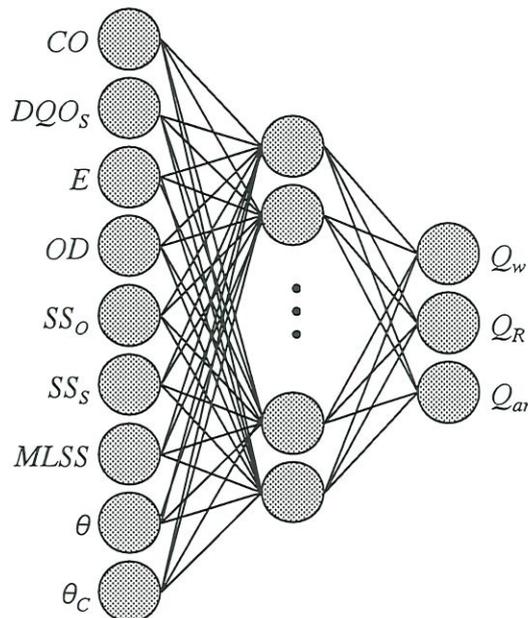


Figura 3.7: Esquema da rede MLP proposta.

O número mais adequado de neurônios na camada escondida também foi investigado. Arquiteturas com 3, 5, 7, 9, 11 e 13 neurônios na camada escondida foram implementadas e analisadas. Redes com duas camadas intermediárias também foram analisadas. Nas redes com duas camadas, foram examinadas arquiteturas com 5 e 7 neurônios em cada uma delas.

3.2.2 NORMALIZAÇÃO DOS DADOS

Antes de sua utilização pelas redes, o banco de dados gerado foi normalizado, pois as funções de ativação utilizadas trabalham somente com valores entre 0 e 1 ou -1 e 1. Devido à escolha da função de ativação tangente hiperbólica (Equação 3.50), o intervalo de normalização empregado foi de -0,8 a 0,8. Optou-se por este intervalo mais estreito, porque as funções de ativação têm dificuldade de atingir seus valores extremos, neste caso, -1 e 1.

$$\varphi(v_j) = \tanh(v_j) = \frac{1 - \exp(-v_j)}{1 + \exp(-v_j)} \quad (3.50)$$

em que $\varphi(v_j)$ = função de ativação aplicada à soma total ponderada no neurônio j .

A normalização é conseguida através da Equação 3.51:

$$x' = \frac{(x - x_{\min, \text{exp}})(x'_{\max} - x'_{\min})}{x_{\max, \text{exp}} - x_{\min, \text{exp}}} + x'_{\min} \quad (3.51)$$

em que: x é um valor da variável, x' é o valor normalizado, $x_{\max, \text{exp}}$ é o valor máximo da variável, $x_{\min, \text{exp}}$ é o valor mínimo, x'_{\max} é o valor máximo da variável normalizada e x'_{\min} o valor mínimo da variável normalizada. O Matlab 5.2 possui uma função para a normalização e desnormalização dos dados (ver listagem dos programas no Apêndice). Contudo, os valores de x'_{\max} e x'_{\min} já estão fixados em -1 e 1 , o que forçou a divisão de todo o conjunto de dados por $1,25$. Assim, todo o conjunto ficou normalizado para valores entre $-0,8$ e $0,8$.

3.2.3 DIVISÃO DO CONJUNTO DE DADOS

Do conjunto original de dados, 50% foi reservado para a fase de treinamento, 25% para a fase de validação e 25% para a fase de teste. Os registros destes três conjuntos foram selecionados aleatoriamente. Este procedimento foi repetido três vezes, gerando três partições distintas de treinamento, validação e teste para amenizar os efeitos da inicialização dos pesos, que podem provocar a estabilização da solução em mínimos locais e, mais ainda, proporcionar uma avaliação mais precisa do desempenho das redes.

3.2.4 ALGORITMOS DE TREINAMENTO

Todas as arquiteturas estabelecidas foram treinadas com os algoritmos Rprop, backpropagation com taxa de aprendizagem adaptativa (backpropagation with adaptive learning rate) e backpropagation com termo de momentum (backpropagation with momentum).

No algoritmo com taxa de aprendizagem adaptativa, utilizou-se os parâmetros padrões do pacote de Redes Neurais do Matlab 5.2. Neste algoritmo, são calculadas

inicialmente as saídas da rede e seus erros. A cada ciclo, novos pesos e *biases* são calculados. Se o novo erro excede o anterior em uma razão predefinida (neste caso 1,04), os novos pesos e *biases* são descartados e a taxa de aprendizagem é diminuída em 70%. Caso contrário, os pesos são mantidos. Se o novo erro for menor que o anterior, a taxa de aprendizagem é aumentada em 5%. Este algoritmo tenta minimizar os problemas da fixação da taxa de aprendizagem do algoritmo backpropagation padrão (*standard backpropagation*). Se a taxa de aprendizagem é mantida alta, o algoritmo pode oscilar e tornar-se instável. Por outro lado, se a taxa é muito baixa, o algoritmo pode demorar a convergir.

No algoritmo backpropagation com momentum, atribuiu-se uma taxa de *momentum* de 0,9. Durante o treinamento, se o erro calculado exceder em 4% o anterior, os novos pesos e *biases* são descartados e o termo de momentum é ajustado a 0.

Os parâmetros padrões do algoritmo Rprop foram mantidos nesta pesquisa. Detalhes sobre estes parâmetros podem ser vistos na seção 2.3.1.3. Utilizou-se Δ_{max} (máxima atualização dos pesos) de 50, Δ_{min} (mínima atualização dos pesos) de $1 \cdot 10^{-6}$, Δ_0 (tamanho do primeiro passo de atualização) de 0,07 e fatores de acréscimo (η^+) e decréscimo (η^-) de 1,2 e 0,5, respectivamente.

Os treinamentos foram efetuados em batelada, em que os pesos e *biases* das redes somente eram atualizados após todo o conjunto de treinamento ter sido apresentado. A cada ciclo de treinamento, o conjunto de dados era embaralhado e novamente apresentado às redes.

As redes foram implementadas no software Matlab 5.2. A taxa de aprendizado para todas as arquiteturas e algoritmos de treinamento foi de 0.01.

3.2.5 VERIFICAÇÃO DOS ERROS

As determinações dos erros de treinamento, validação e teste foram realizadas através do erro relativo médio (MRE) (Pu e Hung, 1995) apresentado pela Equação 2.84:

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \left| \frac{y_j - d_j}{d_j} \right| \quad (2.84)$$

em que y é a saída real produzida pelo previsor, d é a saída desejada e n é o número de padrões ou exemplos.

3.2.6 CRITÉRIO DE PARADA

O erro quadrático médio (MSE) máximo foi fixado em 1.10^{-3} . O número máximo de ciclos de treinamento foi fixado em 15.000. Escolheu-se o critério de parada *early-stopping*. Por este critério, quando o erro de validação começa a subir, o treinamento é imediatamente interrompido. Fixou-se, nesta pesquisa, em 10 ciclos consecutivos o limite máximo de aumento do erro de validação, momento em que se cessava o treinamento. Quando qualquer um desses três critérios fosse atingido, o treinamento era encerrado.



4 **DISCUSSÃO DOS RESULTADOS**

Apresentação dos resultados obtidos pelos modelos mecanístico e neural e a discussão detalhada deles.

4.1 MODELO MECANÍSTICO

As Figuras A.1 a A.27 do Anexo A apresentam as curvas fornecidas pelo modelo mecanístico descrito no Capítulo 3. As variáveis mostradas nestas figuras, exceto X_E , X_R , θ_c e Q , são determinadas dentro do tanque de aeração, ou na sua saída, pois o reator é de mistura completa. X_E é a soma de material particulado no efluente clarificado do decantador secundário (Equação 4.1). X_R é a concentração de sólidos na parte inferior do decantador (Equação 4.2), que é a concentração de sólidos na linha de recirculação e de descarte de lodo. Q é a vazão diária média no sistema. Foi visto que a vazão média diária é de 20.000 m³/d, com máxima e mínima entre 25.000 m³/d e 15.000 m³/d.

$$X_E = X_{S_s} + X_{I_s} + X_{B,H_s} + X_{B,A_s} + X_{P_s} \quad (4.1)$$

$$X_R = X_{S_R} + X_{I_R} + X_{B,H_R} + X_{B,A_R} + X_{P_R} \quad (4.2)$$

Os dados de simulação da operação do sistema de lodos ativados se mostraram muito coerentes com aqueles provenientes de uma operação real. Os sólidos X_I , $X_{B,H}$, X_S e X_P se acumularam no sistema. Por sua vez, não houve produção de nitrato, uma vez que o tempo de retenção celular de aproximadamente 10 dias não permitiu a nitrificação do lodo. Na Figura A.1 é observada a baixa concentração de oxigênio dissolvido S_o (OD) no tanque de aeração, menor que 1 mg/L, resultado da baixa vazão de ar Q_{ar} imposta ao sistema. Quando

se aumentou a vazão de ar (ver figuras a partir da Figura A.10), nota-se o aumento da concentração de oxigênio dissolvido. Devido às dimensões limitantes fixadas para o reator e decantador secundário, percebe-se nestas figuras uma grande oscilação na concentração de sólidos no efluente clarificado do decantador. Para se operar o sistema mais eficientemente, dimensões maiores poderiam ter sido escolhidas para esta parte do equipamento, mas isto poderia mascarar as respostas à variação pretendida dos parâmetros. A baixa concentração de amônia no sistema, e também a baixa velocidade de amonificação do nitrogênio orgânico solúvel, levam a um crescimento aeróbio de autotróficas praticamente nulo. A alcalinidade e concentração de material solúvel inerte se mantiveram constantes ao longo dos experimentos. A concentração de sólidos no fundo do decantador também está coerente com valores da literatura (Metcalf & Eddy, 1991), em torno de 10.000g/m^3 .

A Tabela 4.1 apresenta um resumo da análise do resultado do experimento realizado. As eficiências de remoção de matéria orgânica foram determinadas pela *DQO* total de entrada (Equação 3.42) e de saída (Equação 3.43) no sistema.

A Tabela 4.2 apresenta a análise de sensibilidade dos parâmetros e suas interações na determinação da eficiência do processo.

Tabela 4.1: Eficiência de remoção de *DQO* (%) nos experimentos 1 a 27.

vazão de recirculação de lodo (m^3/d)	vazão de descarte de lodo (m^3/d)								
	200			300			400		
	vazão de ar (m^3/d)			vazão de ar (m^3/d)			vazão de ar (m^3/d)		
	100.000	120.000	140.000	100.000	120.000	140.000	100.000	120.000	140.000
10.000	71,67	73,34	74,61	79,23	81,13	82,43	88,64	89,30	90,49
15.000	73,94	76,95	75,87	77,90	82,56	81,95	86,73	90,71	89,04
20.000	73,29	76,35	76,45	78,53	81,63	81,62	85,56	87,30	88,00

Tabela 4.2: Análise da variância para o modelo de 3 fatores fixos

fonte de variação	soma dos quadrados	graus de liberdade	quadrado médio	F ₀
Q_R	0,01339	2	0,006696	0,6151
Q_w	4,1491	2	2,0745	190,5780 *
Q_{ar}	0,2142	2	0,1071	9,8403 *
$Q_R Q_w$	0,08942	4	0,02236	2,0537 **
$Q_R Q_{ar}$	0,02919	4	0,007296	0,6703
$Q_w Q_{ar}$	0,006944	4	0,001736	0,1595
$Q_R Q_w Q_{ar}$	0,006219	8	0,0007774	0,07141
Erro	14,1076	1296	0,01089	
Total	18,6161	1322		

* efeito significativo a 1%.

** efeito significativo a 10%.

De acordo com método de Montgomery (1984), os efeitos da vazão de ar Q_{ar} e da vazão de descarte de lodo Q_w (Tabela 4.2) são significativos a 1% e a interação entre a vazão de descarte de lodo Q_w e vazão de recirculação de lodo Q_R é significativa a 10%. Esperava-se que a determinação da eficiência do processo de lodos ativados, de acordo com o Modelo Número 1 da IAWQ, também fosse sensível à vazão de recirculação de lodo. Uma possível explicação pode ser o intervalo de vazões de recirculação utilizada. Utilizou-se vazões de recirculação de 50%, 75% e 100% da vazão média diária. Pode ser que estes níveis de recirculação estejam muito altos e vazões menores devam ser avaliadas. É surpreendente notar que a análise identificou uma interação entre a vazão de descarte de lodo e vazão de recirculação de lodo. A velocidade de retirada dos sólidos no fundo do decantador é função de Q_R e Q_w . Esta velocidade influi diretamente na qualidade do efluente clarificado, pois evita que sólidos em excesso se acumulem no sistema e sejam eliminados na parte superior do decantador. Esta pode ser mais uma indicação de que o processo é sensível à vazão de recirculação, mas não na faixa de vazões estabelecidas.

As Figuras 4.1 a 4.9 apresentam os gráficos dos resultados de eficiência de remoção de matéria orgânica (E) da Tabela 4.1. Nas Figuras 4.1 a 4.3 são mostrados os gráficos da eficiência de remoção de matéria orgânica (E) em função da vazão de ar, mantendo-se Q_R e Q_w constantes. Nas Figuras 4.4 a 4.6, mantém-se Q_R e Q_{ar} constantes e varia-se Q_w . Nas Figuras 4.7 a 4.9, varia-se Q_R e mantém-se as outras vazões constantes.

Percebe-se claramente, nas Figuras 4.1 a 4.6 a influência de Q_{ar} e Q_w na eficiência de remoção de DQO. Por outro lado, nas Figuras 4.7 a 4.9, as curvas constantes confirmam a quase nula influência de Q_R na eficiência desse processo.

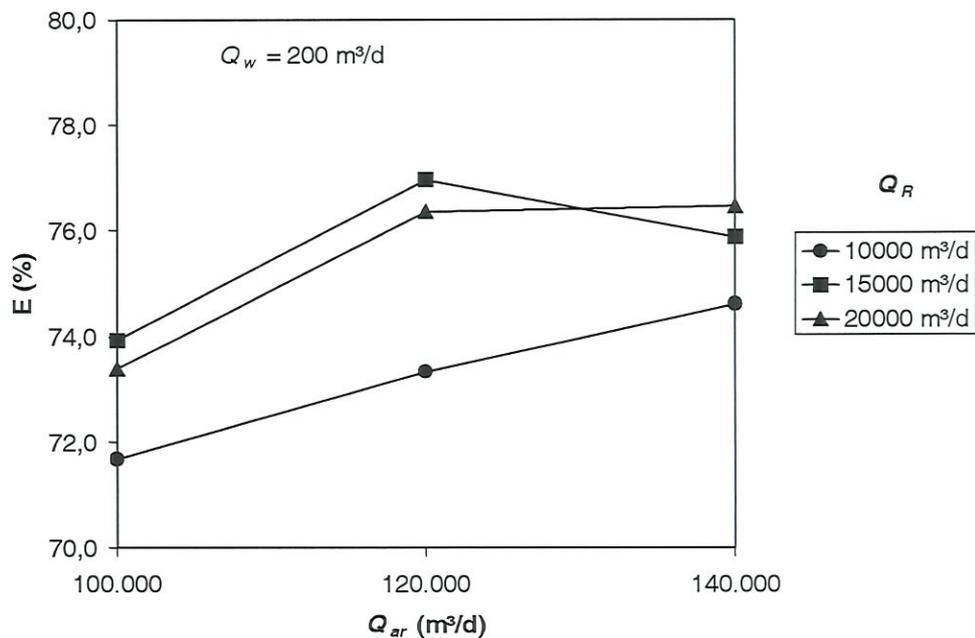


Figura 4.1: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de $200 \text{ m}^3/\text{d}$.

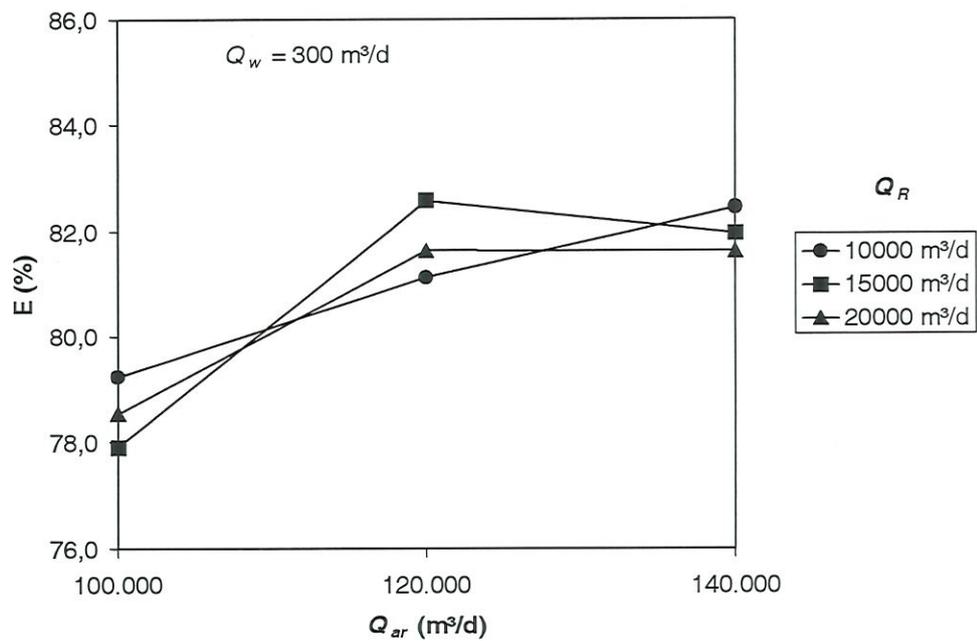


Figura 4.2: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de $300 \text{ m}^3/\text{d}$.

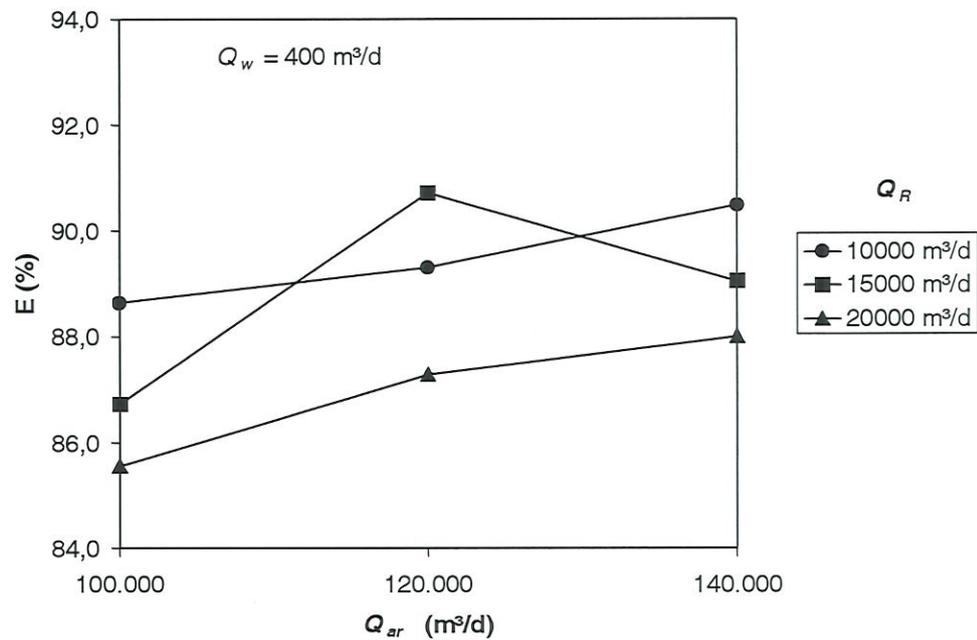


Figura 4.3: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão ar (Q_{ar}) para a vazão de descarte de lodo (Q_w) de $400 \text{ m}^3/\text{d}$.

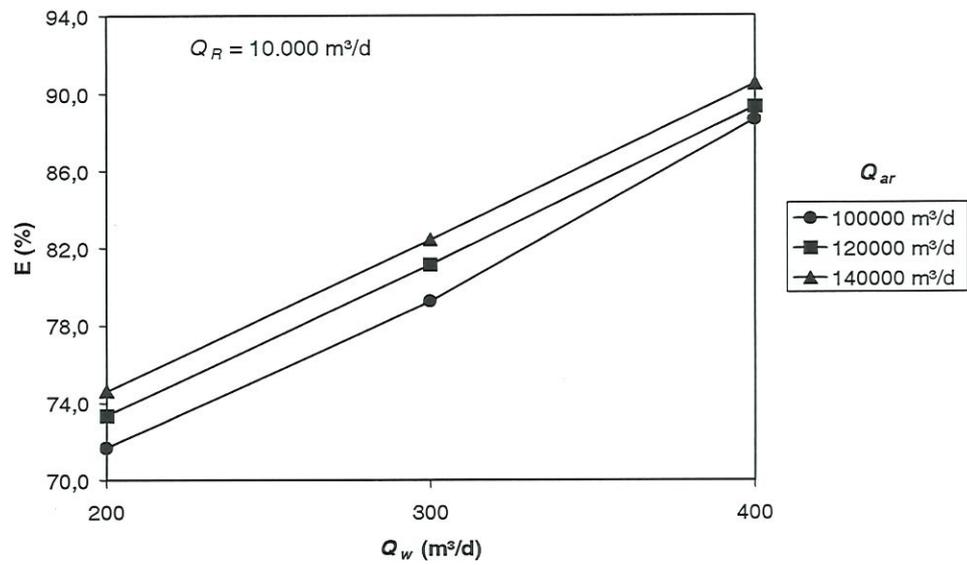


Figura 4.4: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de $10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

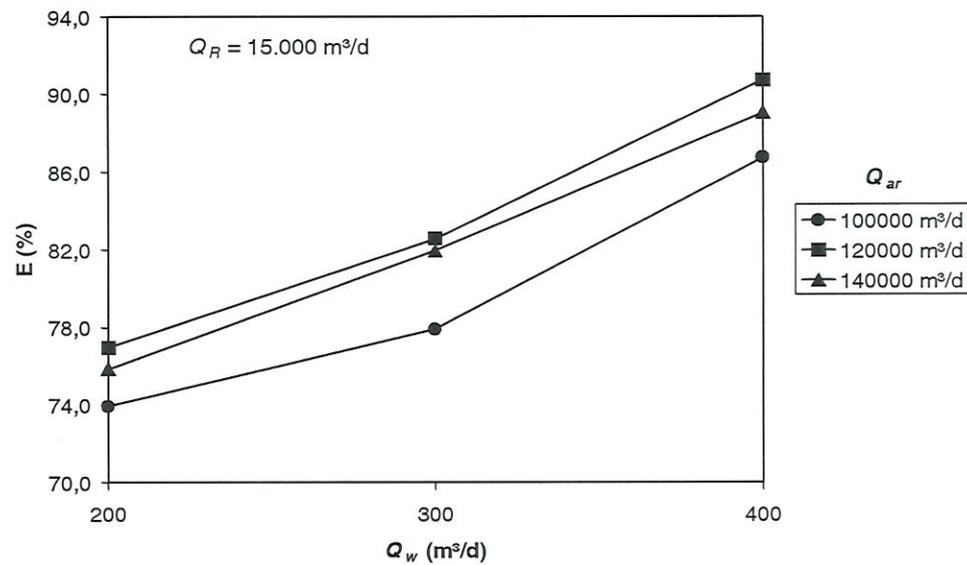


Figura 4.5: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de $15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

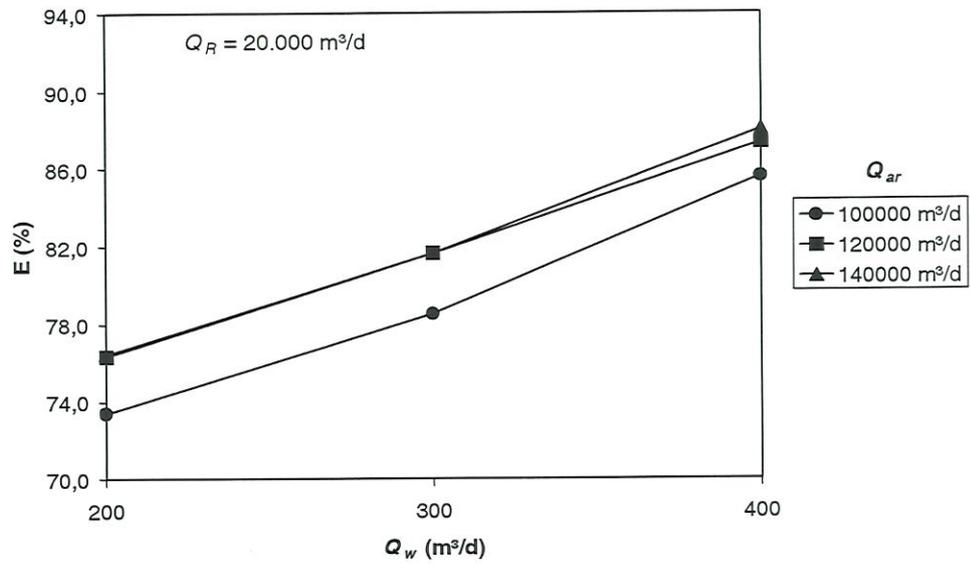


Figura 4.6: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de descarte de lodo (Q_w) para a vazão de recirculação de lodo (Q_R) de 20.000 m³/d.

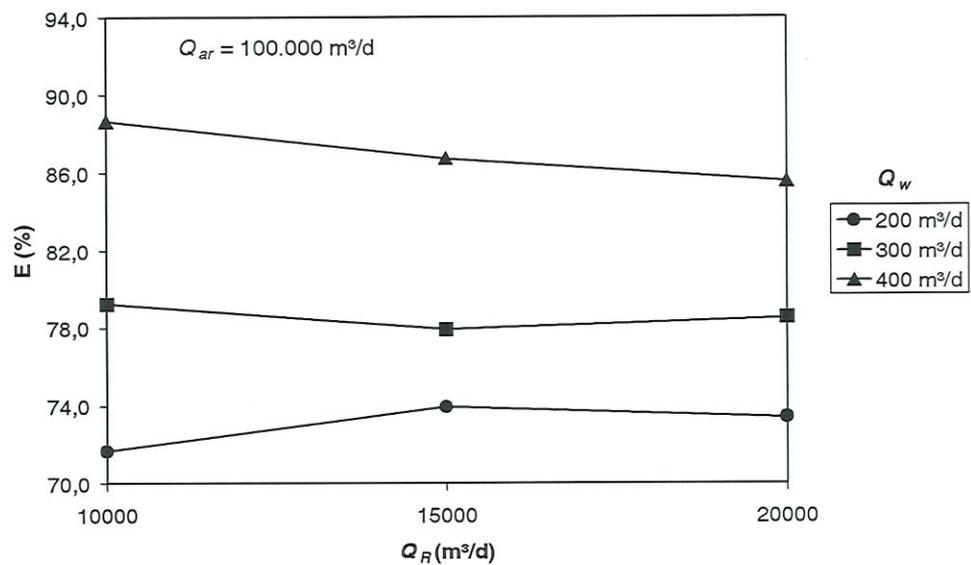


Figura 4.7: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de 100.000 m³/d.

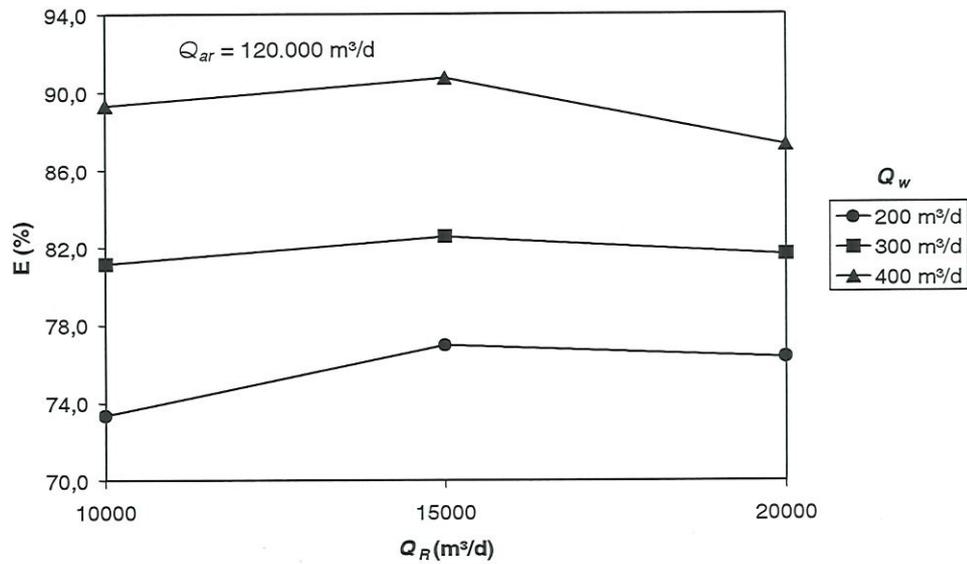


Figura 4.8: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de $120.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

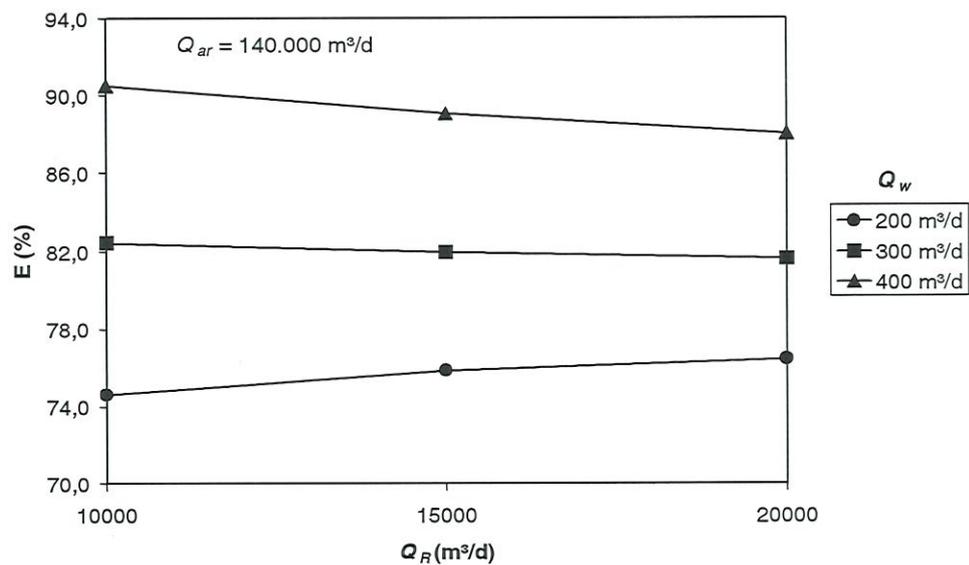


Figura 4.9: Eficiência de remoção de DQO (E) em função da vazão de recirculação de lodo (Q_R) para a vazão de ar (Q_{ar}) de $140.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

Todas as constantes cinéticas do Modelo Número 1 e os parâmetros de sedimentação do modelo do decantador secundário de Takács et al. (1991) foram atribuídos com base em valores encontrados em literatura. Alguns, segundo os comentários apresentados no capítulo 2, não variam, mas outros devem ser levantados experimentalmente. Deixa-se como continuação a esta pesquisa a operação de um sistema de lodos ativados em escala de laboratório e a caracterização do esgoto sanitário e do lodo pelos métodos descritos no capítulo 2 para uso no Modelo Número 1. Esses parâmetros certamente serão bastante diferentes e muito mais adequados para serem inclusos nos modelos baseados no Número 1 da IAWQ desenvolvidos no Brasil. Por fim, seria possível o ajuste de dados experimentais a esse modelo.

Outra avaliação importante que deve ser realizada é a determinação do coeficiente global de transferência de oxigênio K_{la} para o esgoto sanitário em estudo. Deve-se também confrontar o valor determinado com o valor obtido, através da Equação 2.47, de conversão do K_{la} da água de abastecimento para o do esgoto sanitário.

O modelo de Takács et al. (1991) mostrou-se efetivo para a representação do decantador secundário. Variações das características do afluente e das vazões manipuladas provocaram mudanças significativas no efluente clarificado. Takács et al. (1991) afirmam que os erros de previsão dos sólidos suspensos no efluente clarificado são de no máximo 1%. Já para os sólidos na saída de fundo do decantador, os erros de previsão podem chegar a 18,2% para sistemas de lodos ativados operando com alta carga orgânica. Contudo, algumas condições experimentais dos experimentos de Pflanz (1969) podem ter prejudicado as análises. Deve-se, ainda, determinar os parâmetros de sedimentação do modelo de Takács et al. (1991). Segundo os autores, tais parâmetros podem ser avaliados por uma combinação de experimentos em laboratório e técnicas de otimização não-linear. A concentração mínima de sólidos suspensos (f_{ns}), a máxima velocidade de sedimentação (v'_o), a máxima velocidade de sedimentação de Vesilind (v_o) e o parâmetro de sedimentação da zona compactada (r_h) podem ser determinados experimentalmente. O parâmetro de sedimentação da zona floculenta (r_p) é melhor avaliado por técnicas de otimização não-linear.

Propositadamente não se projetou o sistema para que houvesse nitrificação e desnitrificação. Mas isto pode ser efetuado apenas adicionando-se novas câmaras sem aeração e com aeração ao sistema. Deixa-se como sugestão formular o modelo para processos com nitrificação e desnitrificação.

Este tipo de formulação é uma ferramenta poderosa para justificar o estudo de modificações do processo de lodos ativados. Pode-se verificar a viabilidade delas apenas comparando os resultados pretendidos com aqueles do Modelo Número 1.

Uma nova etapa deste trabalho pode consistir em estudar uma variação do processo de lodos ativados com diminuição da produção de lodo através do retorno do lodo em excesso ao tanque de aeração, que passa por um processo de lise celular (Springer et al., 1996). Através de simulações desse processo, pode-se verificar a viabilidade e potencialidade desse tipo de variação do processo de lodos ativados.

4.2 MODELO EMPÍRICO (MODELO DE REDES NEURAIS)

O monitoramento do erro quadrático médio (MSE) do treinamento das arquiteturas com 3, 5, 7, 9 e 13 neurônios na camada intermediária e das redes com 5 e 7 neurônios em duas camadas intermediárias são mostrados nas Figuras B.1 a B.72 do Anexo B. Todas essas arquiteturas foram treinadas com 3 conjuntos de dados diferentes, escolhidos conforme procedimento descrito na seção 3.2. O erro quadrático médio dos conjuntos de treinamento, validação e teste eram avaliados a cada ciclo de treinamento. O treinamento só era interrompido quando o critério de parada, a quantidade máxima de ciclos, ou o erro máximo desejado fossem atingidos. O treinamento de todas as arquiteturas utilizando os algoritmos Rprop e backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa foi interrompido antes de se atingir o erro quadrático médio (MSE) desejado, 0,001, pois o erro de validação apresentou tendência contínua de aumento por 10 ciclos. O número de apresentações dos conjuntos de treinamento não ultrapassou 700 para nenhuma dessas arquiteturas. Já o treinamento de todas as arquiteturas neurais com o algoritmo *backpropagation* com momentum seguiu-se até que o número de ciclos máximo fosse atingido. O erro máximo desejado não foi atingido para nenhum dos três algoritmos escolhidos.

As Tabelas 4.3 a 4.11 apresentam um resumo do desempenho durante o treinamento de todas as arquiteturas propostas para a avaliação do algoritmo de treinamento mais adequado a essas arquiteturas, assim como do número de neurônios na camada intermediária. Os erros médios relativos (MRE) apresentados são as médias dos erros relativos para o treinamento de cada arquitetura com os três conjuntos de treinamento, validação e teste diferentes. As Tabela 4.3 a 4.11 apresentam também os desvios padrões (σ) dos erros de treinamento, validação e teste. Nota-se que se variou o número de neurônios na camada intermediária e também o número de camadas intermediárias. Para as arquiteturas com duas camadas intermediárias, utilizou-se topologias com 5 e 7 neurônios em cada uma delas.

Optou-se por avaliar o desempenho das redes através do erro relativo médio (MRE) em vez de empregar o erro quadrático médio (MSE). O MSE é definido pela Equação 4.3, enquanto que o MRE já o foi na Equação 2.86.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m (d_j - y_j)^2 \quad (4.3)$$

em que: n = número de padrões de treinamento;

m = número de saídas da rede neural;

d_j = saída desejada do neurônio j ;

y_j = saída real do neurônio j .

O cálculo do MSE é sempre realizado durante o treinamento, com os conjuntos de dados normalizados. A diferença entre a saída real e desejada pode encobrir grandes erros após a desnormalização desses dados. Por exemplo, uma diferença entre a saída desejada e real de 0,1, ou seja, um erro absoluto de 0,1 pode resultar em um pequeno erro relativo se a magnitude das respostas estiver próxima de 1. Inversamente, se a grandeza das saídas estiverem próxima de 0, o erro relativo após a desnormalização atingirá um valor muito maior. Por isso, nem sempre o MSE representa um parâmetro adequado para se avaliar o desempenho do treinamento de Redes Neurais. Assim, o MRE fornece uma estimativa mais adequada dos erros, considerando as diferentes ordens de grandeza dos parâmetros impostos ao modelo.

Tabela 4.3: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	12,6459	0,7532	7,2694	0,7514	3,3429	0,2239
5	13,1229	1,1552	7,2328	1,0124	2,9215	0,7093
7	11,7784	0,5298	7,2436	0,5643	2,5583	0,4234
9	10,0182	1,3436	7,5104	1,0448	2,0122	0,2312
11	9,5059	0,6180	7,1337	0,9983	2,2273	0,7333
13	8,8062	0,3286	6,9034	1,0567	2,0430	0,2793
5 – 5	13,3952	0,8969	7,6414	0,9982	2,9371	0,7061
7 – 7	10,8412	1,0044	7,5426	1,2401	2,1914	0,4701

Tabela 4.4: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	21,0495	7,3122	22,6338	12,6149	15,5895	19,7925
5	13,5461	0,7790	8,3181	1,6206	3,6142	0,6194
7	15,1162	1,7499	9,4301	1,8203	4,2791	1,0604
9	14,6919	2,5634	9,5942	2,8450	3,7906	0,9606
11	13,5360	0,4043	9,3655	1,2806	3,7112	0,3721
13	16,0796	2,4360	11,3990	3,6666	4,0964	1,0333
5 – 5	27,3928	8,9612	20,0184	7,6345	6,5159	1,5498
7 – 7	24,9294	11,2122	24,3972	9,3041	9,2421	4,4886

Tabela 4.5: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	19,5220	2,2169	23,3080	10,1794	15,7081	19,6931
5	16,8655	4,0060	9,1601	2,9871	4,0800	0,5493
7	14,5124	1,9423	8,9938	1,9639	3,3301	0,2367
9	13,4991	1,1903	8,2134	1,0010	3,6821	0,5533
11	13,0483	1,7910	8,1327	1,6326	3,5363	0,3709
13	12,8487	1,0245	8,0186	1,4857	3,2578	0,3808
5 – 5	14,8480	1,6187	15,9836	12,2727	4,4065	0,9077
7 – 7	16,2388	5,0106	8,8289	1,6783	3,5460	0,7052

Tabela 4.6: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	12,5744	0,2347	6,9144	1,3469	3,4187	0,2052
5	13,0979	0,9417	7,0095	1,1867	3,1063	0,6144
7	11,5022	2,6678	7,1214	1,5967	2,6813	0,3454
9	10,8783	2,4784	7,4801	1,0654	2,2425	0,1486
11	9,3727	1,8989	6,8320	1,5936	2,4359	0,6114
13	9,3343	1,6016	6,8746	0,7679	2,3197	0,3234
5 – 5	13,8450	0,6126	7,4361	1,9699	3,2885	0,6312
7 – 7	10,9689	0,5199	7,3154	1,6948	2,4595	0,3427

Tabela 4.7: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	20,4639	6,8575	21,7248	13,3294	17,5263	22,6875
5	13,6873	0,4452	7,9715	0,4534	3,7732	1,0690
7	14,7954	2,3749	9,0686	0,9153	4,4711	1,0888
9	15,0970	3,4522	9,2636	1,0991	3,8663	0,9212
11	13,7034	1,6893	9,0619	1,0199	3,9425	0,5031
13	15,4469	1,3114	11,5127	4,0944	4,6162	1,0099
5 – 5	27,5128	8,3804	20,3184	9,5880	6,7521	1,6160
7 – 7	24,5418	12,4711	23,6380	10,9256	9,1332	4,0737

Tabela 4.8: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	19,7497	2,0127	23,6154	12,7194	17,6061	22,6254
5	16,5548	4,6205	8,8572	0,9865	4,2391	1,0301
7	14,5979	0,5905	9,0446	1,9727	3,6138	0,1764
9	13,9891	1,3198	7,9990	1,7044	3,9247	0,5446
11	13,6328	1,3151	7,9199	0,6548	3,8014	0,4760
13	12,8777	0,4887	7,7597	0,7113	3,4469	0,5281
5 – 5	15,9922	1,1163	15,4020	10,8863	4,7621	1,0581
7 – 7	16,5356	6,5841	8,9335	1,3376	3,6227	0,8969

Tabela 4.9: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	12,7387	0,2068	6,8387	1,0012	3,3694	0,2174
5	12,9874	0,9166	7,0474	0,6087	3,0165	0,6155
7	11,4832	2,2248	7,1007	1,0891	2,6306	0,3746
9	10,7799	2,2908	7,4821	0,6879	2,1409	0,1454
11	9,5029	1,7393	6,9319	0,9424	2,4145	0,7013
13	9,3198	1,4000	6,8056	0,6883	2,2349	0,2924
5 – 5	14,0235	0,4614	7,3789	1,3942	3,1471	0,6423
7 – 7	11,1050	0,2961	7,4176	0,9593	2,3917	0,4704

Tabela 4.10: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	21,2959	7,2718	22,1473	13,0494	16,7196	21,5377
5	13,8962	0,7145	8,0331	0,9798	3,7440	0,9553
7	15,1247	2,4800	9,2978	1,6516	4,4179	1,0889
9	14,9795	3,4059	9,4226	1,9030	3,8939	0,9742
11	13,8860	1,2799	9,2872	0,5544	3,8820	0,3986
13	15,7830	1,3616	11,5263	3,6825	4,4496	1,0942
5 – 5	28,1077	9,2702	19,8697	8,4119	6,5892	1,4566
7 – 7	25,5414	13,5346	24,1999	10,7305	9,1651	4,3688

Tabela 4.11: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para redes MLP utilizando algoritmo Backpropagation com momentum.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
3	19,5220	1,6687	23,4037	12,0334	16,9290	21,3603
5	16,6923	4,9300	8,8553	1,8876	4,2534	0,8961
7	15,0170	0,8357	9,1601	1,4676	3,6366	0,1605
9	14,1586	0,8072	7,9228	1,0629	3,8932	0,6280
11	13,5547	1,3300	7,8866	0,1064	3,8091	0,4985
13	12,6610	0,0958	7,6129	0,4149	3,4518	0,4785
5 – 5	15,7146	0,7573	15,4978	0,9018	4,5994	0,9491
7 – 7	16,3492	6,1181	8,7452	1,5181	3,5835	0,8307

Os gráficos das Figuras C.1 a C.33 (Anexo C) são derivados das Tabelas 4.3 a 4.11. As Figuras C.1 a C.9 auxiliam a verificação da influência do aumento do número de neurônios e de camadas intermediárias sobre o desempenho das redes neurais para cada algoritmo de treinamento utilizado. As Figuras C.10 a C.33, por outro lado, avaliam o desempenho dos algoritmos de treinamento para cada uma das arquiteturas estudadas. A abreviatura **trainrp** indica o algoritmo Rprop, **traingda** o algoritmo backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e **traingdm** o algoritmo backpropagation com momentum.

Observa-se, pelas Figuras C.1 a C.9, que as arquiteturas com baixo número de neurônios e duas camadas intermediárias apresentaram, em geral, os maiores MRE's de treinamento, validação e teste. A adição de neurônios na camada intermediária melhorou o desempenho das redes neurais. Entretanto, a adição de mais uma camada intermediária não melhorou o desempenho das redes treinadas. As Figuras C.10 a C.33 apontam que o algoritmo Rprop, comparado com os outros algoritmos, sempre levou aos menores erros de treinamento, validação e teste, para todas as arquiteturas definidas.

O treinamento dessas redes com o algoritmo Rprop se mostrou, ainda, mais estável que com os outros dois avaliados. Os desvios padrão dos erros relativos médios (MRE) de treinamento, validação e teste foram baixos para todas as arquiteturas avaliadas. Para o treinamento com o algoritmo backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa, o desvio padrão dos erros de treinamento, validação e teste foi elevado para as arquiteturas com 3 e 5 neurônios na camada intermediária e para as arquiteturas com duas camadas intermediárias. O desvio padrão dos erros para o treinamento com algoritmo backpropagation com momentum se mostrou melhor que o algoritmo com taxa de aprendizado adaptativa, mas inferior ao do treinamento com o Rprop. Em geral, os desvios foram baixos, mas um pouco mais altos que no treinamento com o Rprop nas arquiteturas com menor quantidade de neurônios na camada escondida e com 2 camadas escondidas.

A escolha da melhor arquitetura foi baseada no cálculo do comprimento euclidiano (ou norma euclidiana) dos erros médios de validação das saídas da rede neural. Para o treinamento com algoritmo Rprop e backpropagation com momentum, as redes com 13 neurônios na camada intermediária apresentaram a menor norma. A rede com 5 neurônios na camada intermediária foi considerada a melhor para o treinamento com o algoritmo com taxa de aprendizado adaptativa.

Entre todas as arquiteturas e algoritmos estudados, a rede com 13 neurônios e algoritmo de treinamento Rprop apresentou a menor norma euclidiana dos erros de

validação na saída. E mais, lembrando-se que o erro médio de validação foi determinado a partir de três redes com 13 neurônios treinadas com 3 diferentes conjuntos de dados, era necessário ainda, definir qual dessas três seria escolhida para representar o comportamento do sistema. Optou-se novamente pela determinação da norma euclideana. A rede cujas saídas apresentaram norma mais próxima da norma do erro médio de validação, foi designada a mais adequada, e seus pesos sinápticos e *biases* armazenados. As Equações 4.4 e 4.5 apresentam o melhor modelo obtido, cujos desvios padrão de generalização (conjunto de teste) para cada uma das saídas da rede (Q_w , Q_R e Q_{ar}) são 1,4000, 0,6883 e 0,2924, respectivamente.

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10} \\ y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \end{bmatrix} = f \left(\begin{bmatrix} -0.2529 & 0.6909 & -0.0722 & -0.9731 & -0.6282 & 0.0124 & 0.5214 & -0.4696 & 1.0787 \\ 0.6856 & -0.4291 & 0.4191 & 1.0164 & 0.5137 & 0.6231 & -0.5355 & 1.5800 & 0.0284 \\ 0.6839 & 0.0667 & -0.4757 & 0.7006 & -0.0991 & 0.0676 & 0.4695 & -0.5122 & -1.3017 \\ 1.1249 & -0.0323 & -0.9449 & 1.4921 & 0.4825 & -1.3777 & 0.5091 & 1.3432 & 0.1733 \\ 0.0216 & -0.6721 & 0.5309 & -0.6267 & 0.9743 & -2.7347 & -0.2916 & -1.4309 & -0.7213 \\ 0.6000 & 1.1359 & 0.0714 & 0.0541 & 0.2756 & 1.0016 & -0.9763 & 0.7304 & 0.1614 \\ -0.2723 & 0.9160 & 0.9084 & 0.8689 & 1.3124 & -2.0116 & 0.0047 & 0.4984 & 1.5142 \\ 1.2796 & -0.9396 & 0.4594 & -0.2277 & -0.4969 & 0.0390 & -1.2833 & -0.9095 & 0.3974 \\ 0.9214 & 0.2448 & 0.3561 & 1.2011 & -0.0287 & 0.8049 & 0.0604 & -0.9841 & 1.1371 \\ 0.3655 & 0.9317 & -0.4976 & 2.0954 & -1.9941 & 0.4256 & 0.0808 & 1.6438 & 0.3973 \\ -0.2792 & 1.1641 & 0.4739 & 0.0993 & -0.2202 & -0.5344 & -0.5808 & 1.5862 & 0.4667 \\ 1.4123 & -0.2893 & 1.3055 & 0.3002 & -1.1546 & -0.6731 & 0.4039 & -1.4637 & 2.8700 \\ 0.4922 & 0.9397 & -0.2254 & 1.3097 & 2.3346 & -1.7513 & 0.5444 & 1.3673 & 0.0084 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} CO \\ DQO_S \\ E \\ OD \\ SS_e \\ SS_S \\ MLSS \\ \theta \\ \theta_c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2.2428 \\ -2.0080 \\ -1.4099 \\ -0.7568 \\ 0.3283 \\ -0.5635 \\ -0.0012 \\ 0.3572 \\ 0.3507 \\ 0.4182 \\ -1.0429 \\ 0.9507 \\ -2.1788 \end{bmatrix} \right) \quad (4.4)$$

$$\begin{bmatrix} Q_w \\ Q_R \\ Q_{ar} \end{bmatrix} = f \left(\begin{bmatrix} -0.6953 & 0.5902 & 0.2023 \\ 0.6226 & 0.7494 & 0.5410 \\ 2.2911 & -0.5629 & 0.2418 \\ 0.0577 & 0.2507 & 0.5147 \\ -0.1242 & -0.1116 & 0.3240 \\ 0.2254 & 0.6035 & -0.3817 \\ -0.2212 & -0.5481 & 0.0009 \\ 0.7675 & -1.4178 & -0.4013 \\ -1.0124 & -0.1863 & -0.3979 \\ -0.0291 & 0.1259 & -0.3348 \\ -0.3175 & 1.0286 & 1.1363 \\ -0.6513 & -0.1337 & 0.0894 \\ 0.0483 & 0.0329 & 0.7111 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \\ y_6 \\ y_7 \\ y_8 \\ y_9 \\ y_{10} \\ y_{11} \\ y_{12} \\ y_{13} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1.3907 \\ 0.0083 \\ 1.4301 \end{bmatrix} \right) \quad (4.5)$$

em que: y = vetor de neurônios na camada escondida;

$f []$ = função de ativação tangente hiperbólica aplicada à saída dos neurônios (Equação 3.50);

matriz 13×9 = matriz de pesos sinápticos;

matriz transposta 13×3 = matriz de pesos sinápticos;

matrizes 1×13 e 1×3 = matrizes de *biases*;

As correlações das saídas desnormalizadas dessa rede (Q_w , Q_R e Q_{air}), comparadas com as saídas reais, para os conjuntos de treinamento, validação e teste, são apresentadas nas Figuras 4.10 a 4.18. As redes foram indicadas pela sigla 9_13_3, especificando a rede com 9 entradas, 13 neurônios na camada escondida e 3 na camada de saída. Nessas figuras pode-se observar a boa correlação entre as saídas reais do modelo neural (y_j) e as saídas desejadas (d_j).

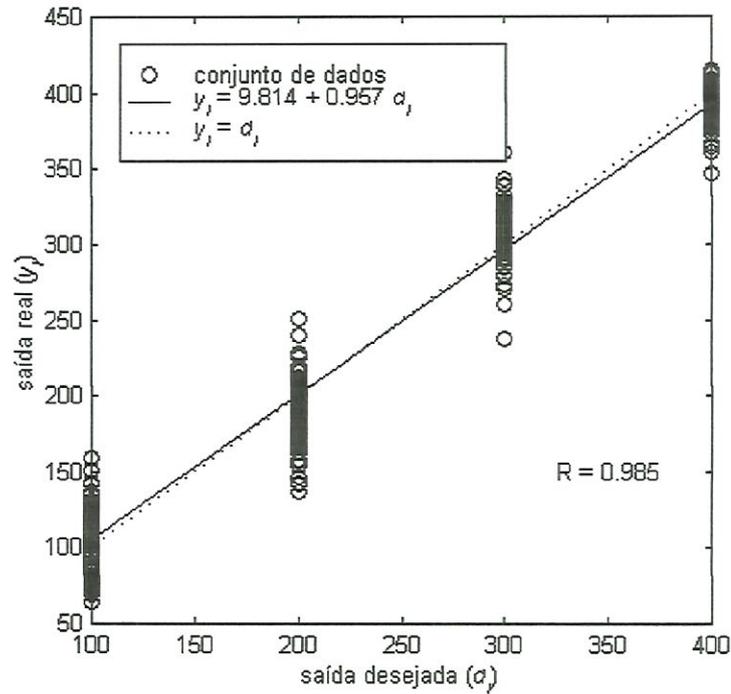


Figura 4.10: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).

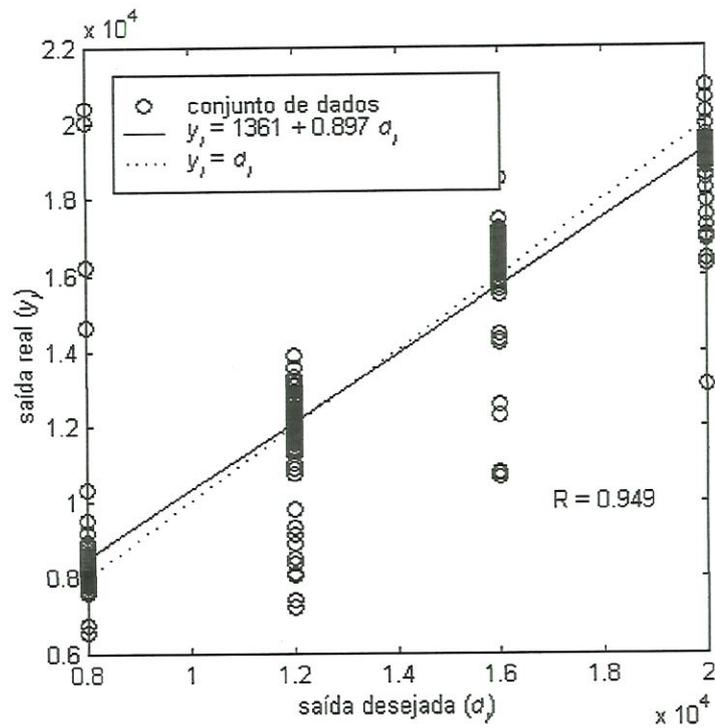


Figura 4.11: Saída real (y_i) em função da saída desejada (d_i) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_r).

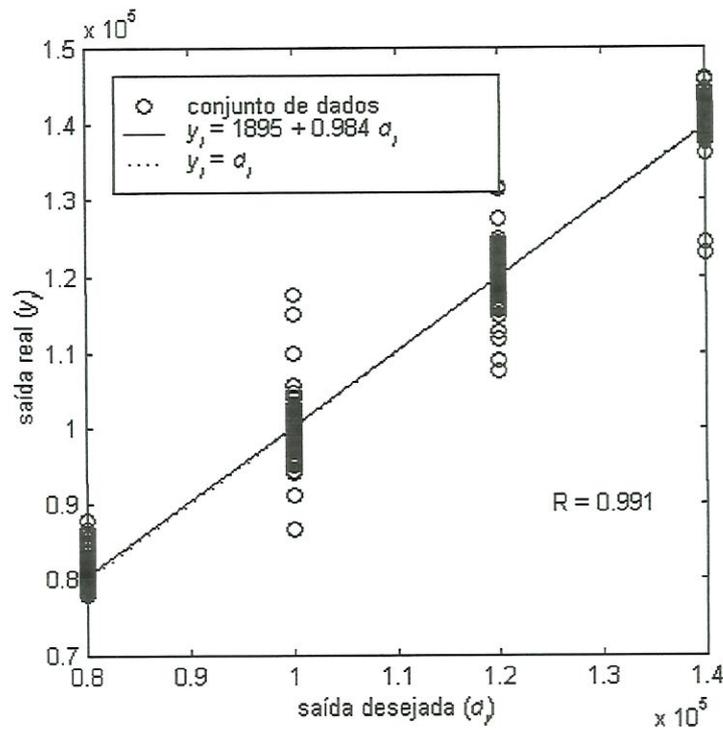


Figura 4.12: Saída real (y_i) em função da saída desejada (d_i) do conjunto de treinamento da rede 9_13_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).

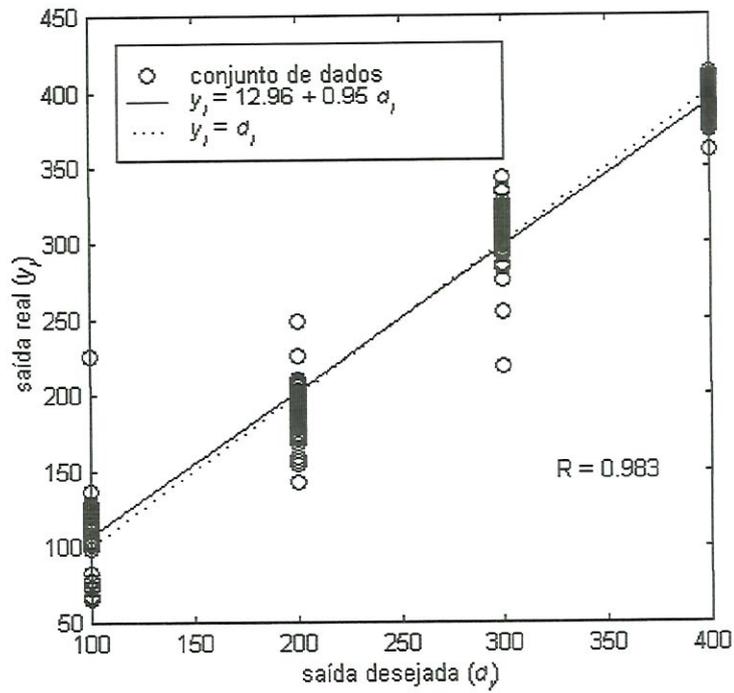


Figura 4.13: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).

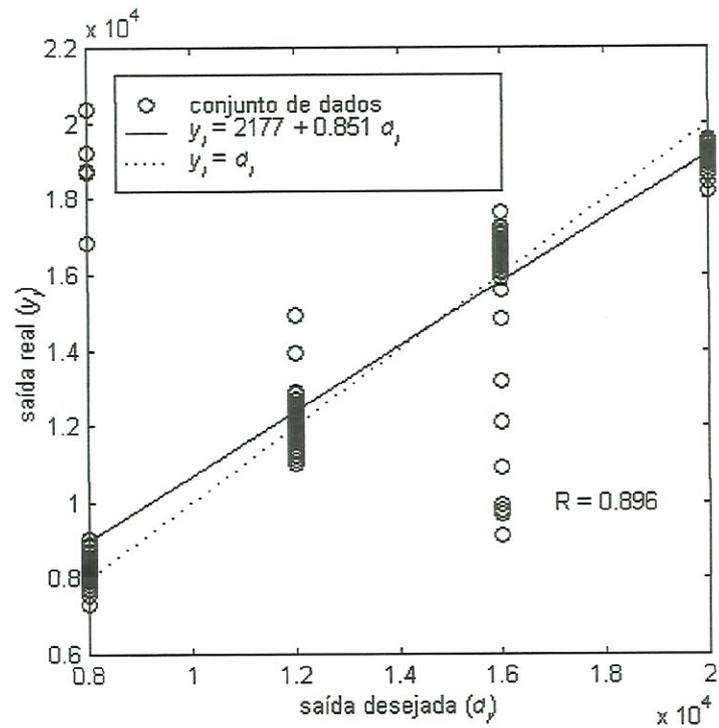


Figura 4.14: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).

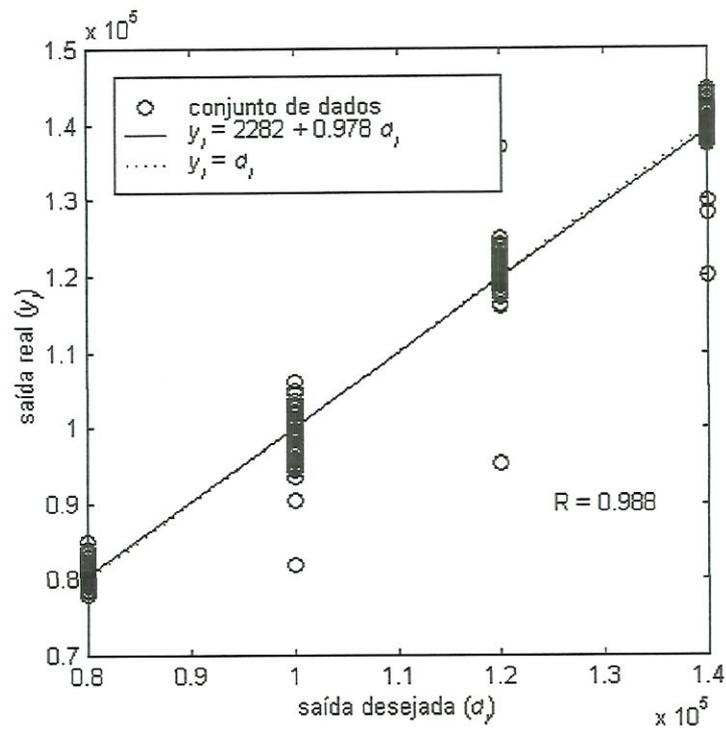


Figura 4.15: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de validação da rede 9_13_3 prevendo a vazão ar (Q_{ar}).

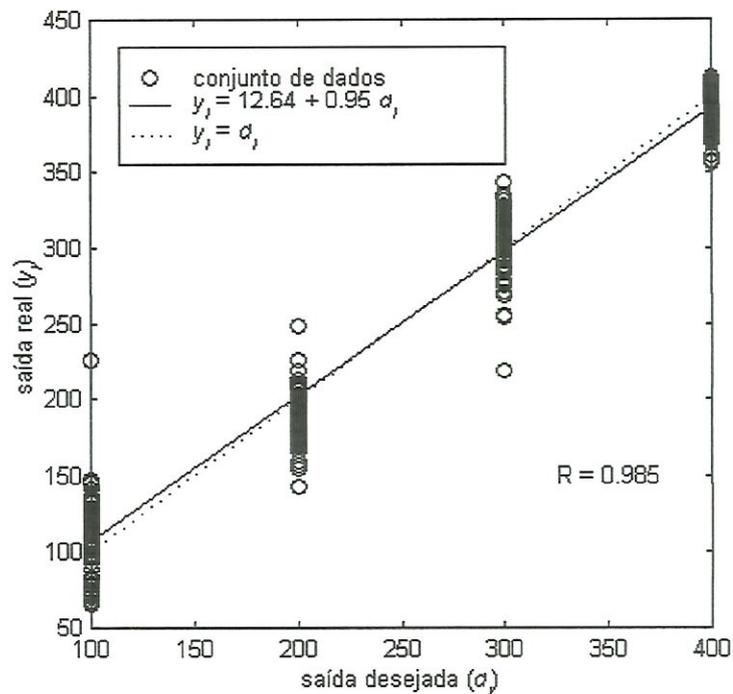


Figura 4.16: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).

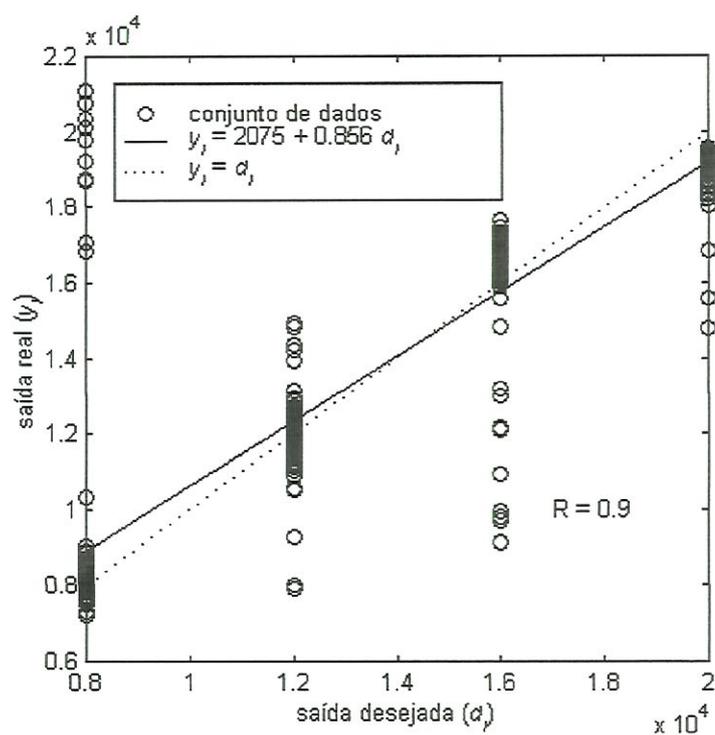


Figura 4.17: Saída real (y) em função da saída desejada (d) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).

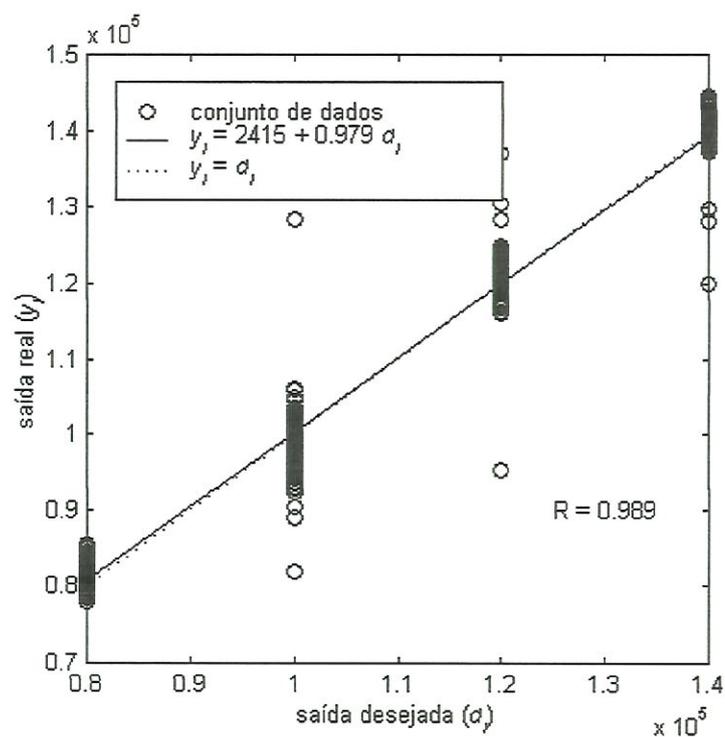


Figura 4.18: Saída real (y) em função da saída desejada (d) do conjunto de teste da rede 9_13_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).

Retornando-se às Tabelas 4.3 a 4.11 e seus gráficos derivados (Figuras C.1 a C.9 do Anexo C), verifica-se que a melhor arquitetura foi aquela com 9 entradas, 13 neurônios na camada escondida e 3 neurônios na camada de saída treinada com algoritmo Rprop. Contudo, observa-se que, com o aumento do número de neurônios na camada intermediária, há uma tendência não estabilizada de diminuição dos erros de treinamento, validação e teste. Novas arquiteturas, com maior número de neurônios, poderiam ser avaliadas de forma a verificar se haveria condições de uma diminuição ainda maior dos erros. Por isso, novas redes com mais neurônios na camada escondida foram treinadas. A quantidade de entradas e neurônios de saída foi mantida a mesma das redes anteriormente definidas. O número de neurônios da camada intermediária foi variado entre 13, 17, 21, 25, 29 e 33. Duas outras arquiteturas com duas camadas escondidas e 17 e 21 neurônios em cada uma delas também foram testadas. Todas essas redes foram treinadas somente com o algoritmo Rprop, cujo desempenho já foi mostrado ser bastante superior entre os analisados.

As Tabelas 4.12 a 4.14 mostram os erros relativos médios (MRE) destas outras arquiteturas e seus desvios padrão. Os gráficos referentes a esta nova avaliação encontram-se no Anexo C (Figuras C.34 a C.36). A melhor arquitetura foi avaliada pelo cálculo da norma euclidiana do MRE de validação da saída da rede. A rede com 33 neurônios apresentou o menor comprimento euclidiano. Novas arquiteturas não foram definidas, pois, apesar da ligeira diminuição dos erros de treinamento, validação e teste, os gráficos das Figuras C.34 a C.36 não apontaram tendência de queda significativa. O modelo neural da arquitetura 9_33_3 não será mostrado devido ao grande tamanho das matrizes envolvidas.

A comparação entre as redes 9_13_3 (ver Tabelas 4.3, 4.6 e 4.9) e 9_33_3 (ver Tabelas 4.12, 4.13 e 4.14) treinadas com algoritmo Rprop, permitiram concluir que não seria necessário testar novas arquiteturas com maior número de neurônios. O aumento de quase 250% no número de neurônios alcançou um MRE de validação apenas em torno de 1% menor.

Os gráficos das Figuras 4.19 a 4.27 apresentam as saídas reais produzidas (y_j) pela rede 9_33_3 (9 entradas, 33 neurônios na camada escondida e 3 na de saída) em função das saídas desejadas (d_j). Novamente, a correlação entre essas duas saídas foi muito boa.

Tabela 4.12: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de treinamento para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
13	10,2496	0,7046	7,1190	0,3974	2,2543	0,6867
17	9,0323	0,2647	7,0046	0,6662	1,9359	0,4185
21	9,0928	1,9446	6,8232	1,1124	1,7544	0,3251
25	8,2686	0,2414	7,0091	0,7293	1,8452	0,1544
29	7,8767	0,1928	7,0601	0,3894	1,9325	0,4185
33	8,0746	1,2560	6,9505	1,1101	1,7745	0,4071
17 – 17	8,2621	2,1405	7,2802	0,3725	1,7200	0,2107
21 – 21	7,7496	0,6172	7,2098	0,7290	1,7249	0,0458

Tabela 4.13: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de validação para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
13	11,2486	1,2903	7,6786	0,1510	2,4557	0,9271
17	10,0541	1,0820	7,5457	0,7528	2,1780	0,4435
21	10,4156	2,1387	7,4340	0,6651	1,9051	0,3458
25	10,0375	1,1966	7,7971	0,6575	2,1269	0,4489
29	9,1407	0,8423	7,9440	0,6808	2,1514	0,3100
33	9,2243	0,7561	7,7432	0,8320	1,9643	0,4354
17 – 17	9,8060	2,6484	8,4670	0,4410	1,9312	0,3601
21 – 21	9,1439	0,2891	8,5955	0,7722	1,9973	0,1959

Tabela 4.14: Erro relativo médio (MRE) e desvio padrão (σ) de teste para outras redes MLP utilizando algoritmo Rprop.

número de neurônios na(s) camada(s) intermediária(s)	saída da rede neural					
	Q_w		Q_R		Q_{ar}	
	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ	MRE (%)	σ
13	11,4585	1,3710	6,9302	0,7102	2,3940	0,8064
17	10,1433	0,5296	6,8565	0,0508	2,1302	0,5006
21	10,4581	2,2296	6,8786	0,2868	1,9295	0,2386
25	9,9168	1,0077	7,1480	0,4260	2,0482	0,3208
29	9,2292	0,7763	7,3120	0,3818	2,1478	0,3956
33	9,3963	1,3614	7,0532	0,1979	1,9481	0,3710
17 – 17	9,7359	2,2688	7,6867	0,8612	1,8857	0,2272
21 – 21	9,5789	0,2213	7,9148	0,2630	1,9739	0,1094

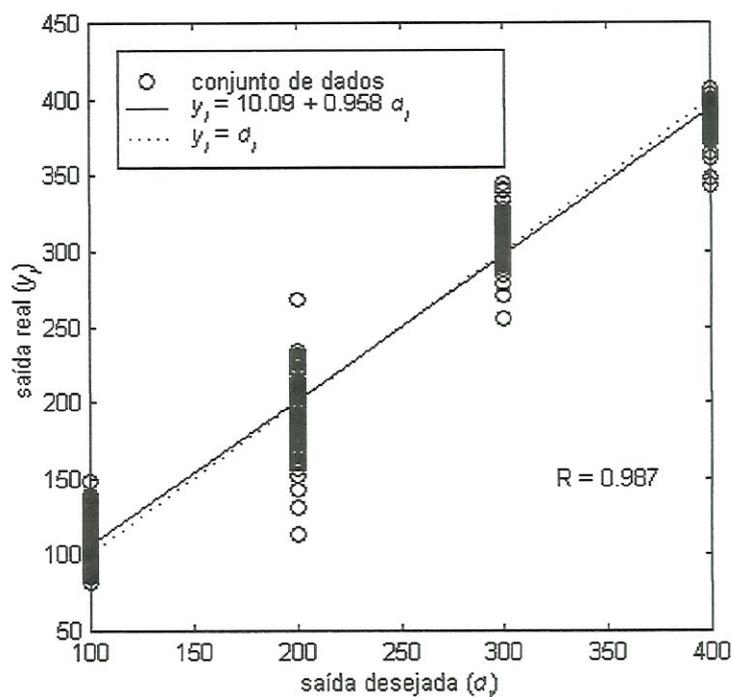


Figura 4.19: Saída real (y_i) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).

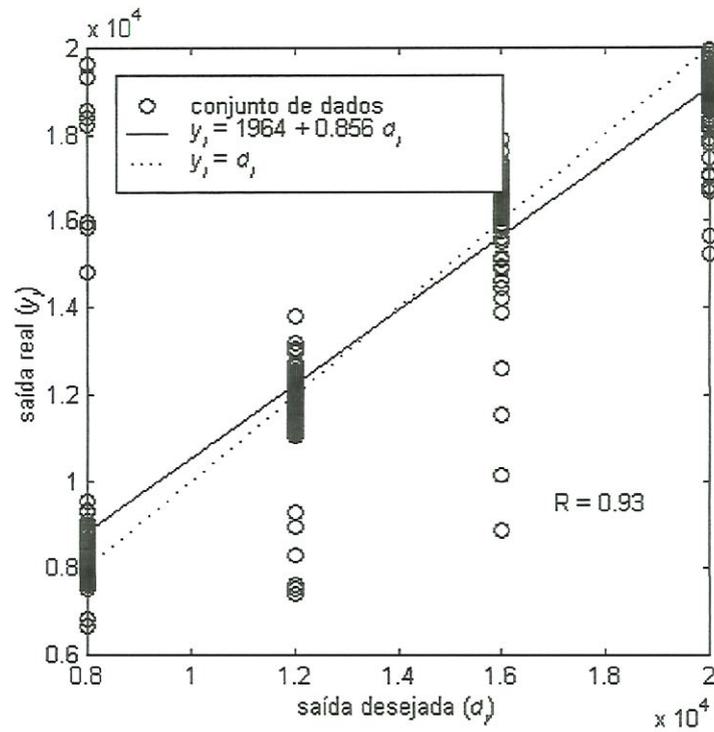


Figura 4.20: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).

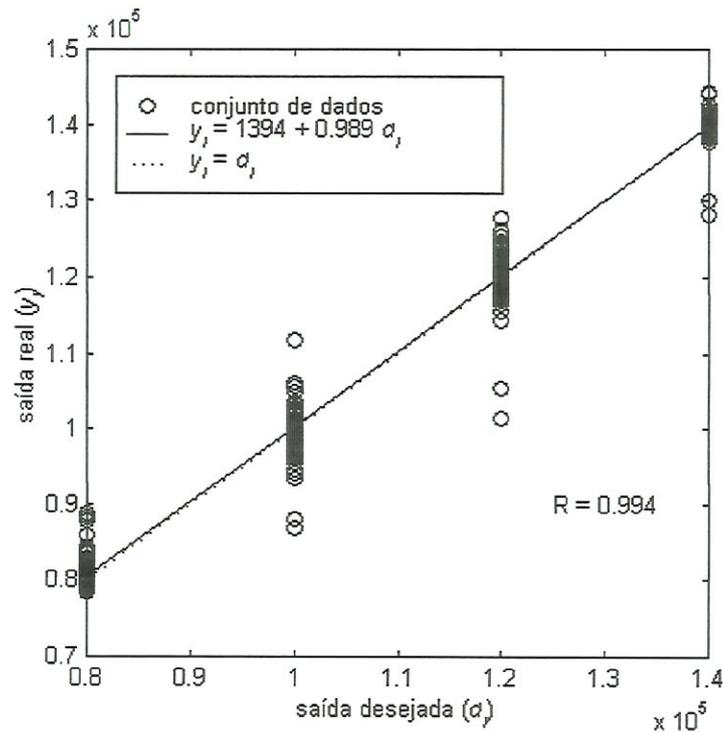


Figura 4.21: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de treinamento da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).

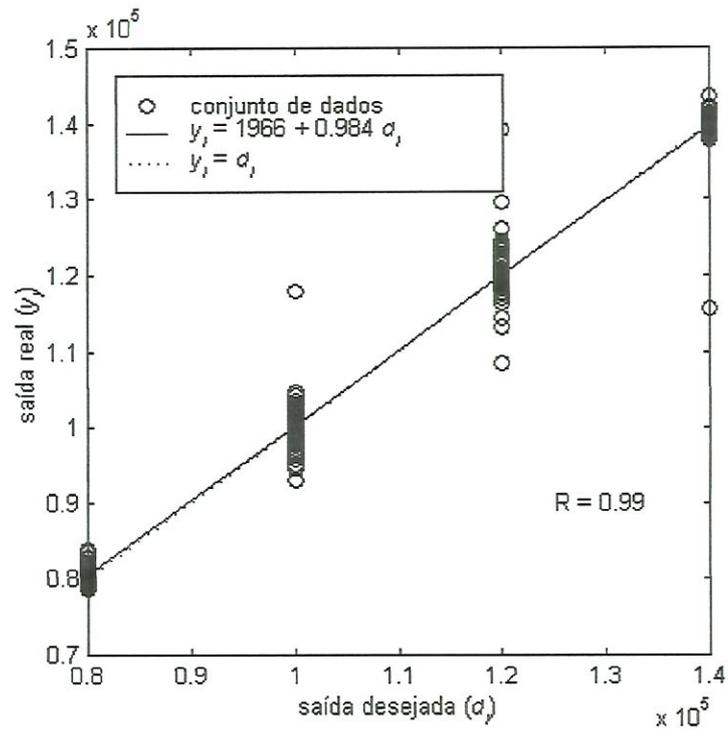


Figura 4.24: Saída real (y_i) em função da saída desejada (d_i) para o conjunto de validação da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).

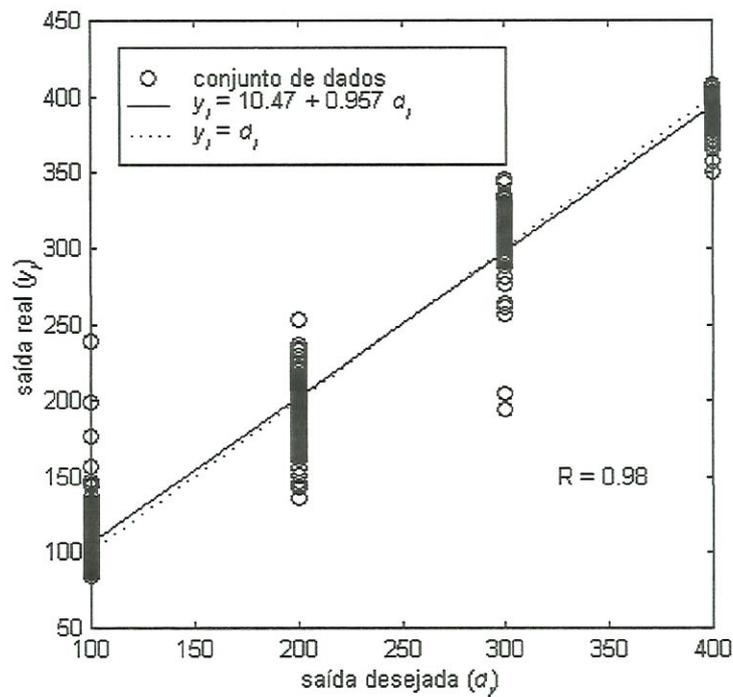


Figura 4.25: Saída real (y_i) em função da saída desejada (d_i) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de descarte de lodo (Q_w).

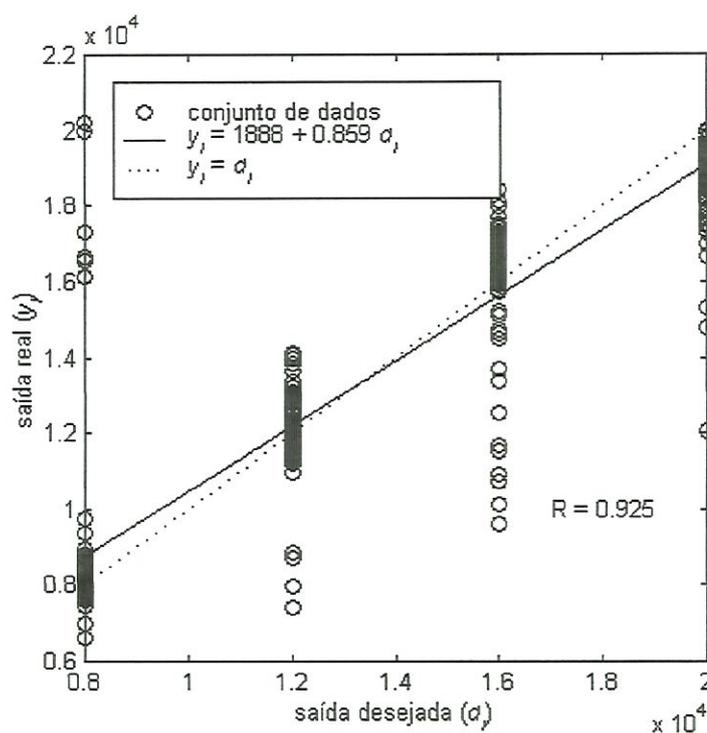


Figura 4.26: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de recirculação de lodo (Q_R).

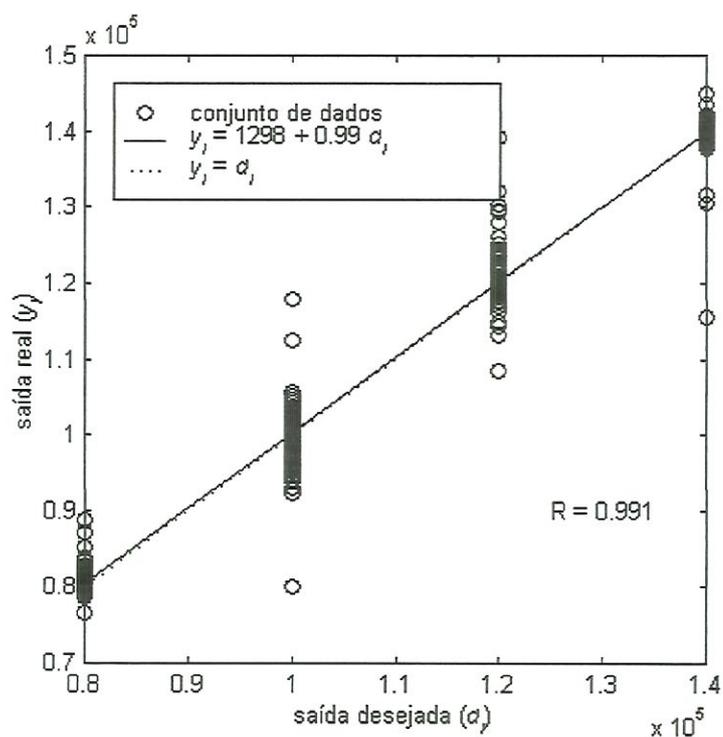


Figura 4.27: Saída real (y_j) em função da saída desejada (d_j) para o conjunto de teste da rede 9_33_3 prevendo a vazão de ar (Q_{ar}).

O modelo de Redes Neurais se mostrou muito eficiente para a previsão de variáveis que podem ser manipuladas em um processo de lodos ativados. Em relação às entradas definidas no modelo, modificações podem e devem ser estudadas. Na presente pesquisa, foi considerada como uma das entradas do modelo neural os sólidos suspensos na entrada da estação (SS_0). Contudo, observando-se a Figura 3.5, vê-se que esta entrada é constante e, portanto, não teve influência nenhuma na determinação das vazões da saída da rede neural. Ela somente foi incluída, porque em situações reais essa concentração varia com o tempo e devem fazer parte do modelo. A idéia era criar um modelo que fosse o mais abrangente possível.

Uma análise mais criteriosa, no que diz respeito à relevância das entradas do modelo, não foi efetuada. De acordo com Demuth e Beale (1998), em algumas situações a dimensão do vetor de entrada é grande, mas os seus componentes podem estar altamente correlacionados, ou seja, redundantes. Um procedimento efetivo para reduzir a dimensão do vetor de entrada é realizar uma análise de componentes principais. Esta técnica ortogonaliza os componentes da entrada, eliminando as interações entre eles; ordena os componentes ortogonais, de modo que aqueles com maior variação venham primeiro; e elimina aqueles componentes que contribuem com menor variação ao conjunto de dados.

Diferentemente de Zanabria Sotomayor et al. (1999), *Working Group Benchmark* (download 20/01/99) e *WEST Wastewater treatment plant modelling and simulation environment* (05/01/99), que simularam e controlaram o processo de lodos ativados utilizando técnicas de controle clássico, objetivando a operação em torno de valores de referência (*set-points*) para as variáveis manipuladas, neste trabalho percorreu-se um caminho oposto. Devido às grandes variações da carga orgânica na entrada de uma estação de tratamento de esgotos sanitários, e outros problemas que dificultam a implementação do controle clássico à estações de tratamento no Brasil, já apontados por von Sperling (1997) e citados na Introdução (Capítulo 1), o objetivo maior desta pesquisa foi estudar alternativas fáceis e de custo reduzido que se adaptassem à realidade das estações em operação pelo Brasil. Neste sentido, o tipo de modelagem aqui proposto visa, em um primeiro momento, tornar-se ferramenta de auxílio à tomada de decisão pelos operadores das estações, uma vez que, dependendo das características do afluente na estação, pode-se optar por um ajuste das vazões de recirculação de lodo (Q_R), de descarte de lodo (Q_w) ou de ar (Q_{ar}). Logo, a estação não é operada em função de valores de referência, mas sim dentro de um intervalo abrangente de vazões para características do afluente altamente variáveis.

Uma outra importante variável que ainda pode ser incorporada a este modelo é o custo energético necessário para se manter as vazões manipuladas nos níveis desejados. Isto seria de extrema importância, pois além de beneficiar o desempenho da estação, minimizaria os custos altos de operação dos processos aeróbios.

Todas as variáveis utilizadas no modelo neural foram as médias diárias. O ideal seria que o intervalo de amostragens fosse o menor possível, aumentando a qualidade das informações, visto que a média diária encobre as grandes oscilações neste período. Entretanto, a falta de medidores *on-line* dificulta e encarece o maior número de amostragens.

Nesta pesquisa somente foram avaliadas as Redes Neurais do tipo MLP (*Multi-layer perceptrons*). Todavia, existem outras estruturas, igualmente eficientes, que também podem ser utilizadas na modelagem de sistemas biológicos de tratamento de esgotos. Entre elas podem ser citadas as Redes RBF (*Radial-Basis Function*) e Redes Recorrentes (Haykin, 1999).

4.3 COMPARAÇÃO ENTRE OS MODELOS MECANÍSTICO E EMPÍRICO

O modelo desenvolvido para o processo de lodos ativados baseado no Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al. 1987) e no modelo de decantador secundário de Takács et al. (1991) se mostrou uma ferramenta efetiva para a simulação deste processo. A grande dificuldade de sua utilização se concentra no grande número de componentes especificados, não usuais para a maioria dos profissionais na área de Engenharia Sanitária e Ambiental. O número de parâmetros cinéticos é também bastante elevado e a determinação deles é ainda objetivo de muitas pesquisas. Apesar de toda a sua complexidade, é um modelo de grande mérito, pois consegue, com enorme êxito, reunir de uma maneira simples e condensada as interações e os processos mais importantes do tratamento aeróbio de esgotos sanitários. Na visão didática, é um modo muito elucidativo de se entender os processos biológicos no sistema de lodos ativados. É evidente também, que como um modelo, possui suas limitações. Entretanto, a introdução do Modelo Número 3 da IAWQ (Gujer et al., 1999) visou uniformizar a grande quantidade de informações dispersas a respeito de algumas falhas e modificações sugeridas para o Modelo Número 1, discutidas ao longo desses mais de dez anos de exaustivos estudos. No Brasil, infelizmente, poucos pesquisadores (Zanabria Sotomayor et al., 1999; Tomita, 1999) têm investido na utilização desse modelo.

Quanto ao modelo neural, a grande dificuldade de sua utilização é a obtenção de dados. É realmente necessário a disposição de dados confiáveis, e quanto maior o número deles e maior a representatividade, melhor será a capacidade de generalização do modelo, não levando à extrapolação de resultados, mas sim à interpolação.

A definição da arquitetura da rede, do algoritmo de treinamento, a divisão de dados, e o próprio treinamento da rede, podem ser tarefas árduas, todavia podem ser tão custosas quanto definir os parâmetros cinéticos e estequiométricos do Modelo Número 1. Grande parte desse esforço foi realizado nessa pesquisa, em que é apresentado um método a ser seguido para o desenvolvimento de um modelo de Redes Neurais.

O modelo neural, após toda a fase de definições de sua estrutura e procedimento de aprendizagem, é bastante simples e fácil de ser utilizado. Basta resolver o sistema de equações em função dos pesos e *biases* (ver modelo neural das Equações 4.5 e 4.6).

Por outro lado, o modelo de Redes Neurais não fornece nenhum acréscimo de conhecimento no entendimento dos processos biológicos e de suas interações. Contudo, se o modelo é apropriado e efetivo para o tipo de aplicação proposto, o conhecimento dos

mecanismos internos se torna menos importante. Além disso, existem técnicas para a extração de conhecimento de Redes Neurais (Tickle et al., 1998).

A implementação de ambos os modelos não é tarefa fácil. Se o tipo de aplicação desejado envolve algum entendimento do processo, como, por exemplo, um estudo de influência de determinado parâmetro sobre o processo de tratamento, com certeza deve-se optar pelo modelo mecanístico. Todavia, se o interesse é somente o controle da operação da estação de tratamento de esgotos, e se levantamento consistente dos seus parâmetros é realizado com frequência, a técnica de Redes Neurais deve ser colocada como alternativa viável para a modelagem de processos biológicos de tratamento de efluentes.

5 **CONCLUSÕES E SUGESTÕES**

Considerações finais sobre a tese desenvolvida.

5.1 CONCLUSÕES

Esta tese comparou um modelo mecanístico de um sistema de lodos ativados para o tratamento de esgoto sanitário com uma formulação empírica utilizando a técnica de Redes Neurais Artificiais. O modelo mecanístico utilizou o equacionamento cinético do Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al., 1987) e o modelo de Takács et al. (1991) para o decantador secundário. Os resultados analisados permitiram concluir que:

- 1) O modelo mecanístico utilizando as equações cinéticas do Modelo Número 1 se mostrou bastante adequado para a modelagem do processo de lodos ativados. As respostas obtidas foram bastante coerentes, embora não se tenha ajustado o modelo a dados experimentais. Uma próxima etapa desta pesquisa considera esse ajuste, com a caracterização do esgoto sanitário e a determinação de seus parâmetros cinéticos. A análise de sensibilidade das vazões de ar, recirculação e descarte de lodo foram de grande importância para a tomada de decisões no controle deste processo e definição do modelo de Redes Neurais. As variações da vazão de descarte de lodo tiveram maior influência na eficiência de remoção da matéria orgânica.
- 2) O modelo de ajuste das vazões de recirculação de lodo, descarte de lodo e ar comprovou que este tipo de abordagem empírica é realmente efetivo para a simulação do processo de lodos ativados com carga orgânica altamente variável. A rede MLP (*multi-layer perceptron*) com nove entradas, 13 neurônios na camada escondida e três na camada de

saída, treinada com algoritmo Rprop, apresentou os menores erros relativos médios de validação. Os erros foram da ordem de $(9,33 \pm 1,60)\%$ para a vazão de descarte de lodo, $(6,87 \pm 0,77)\%$ para a vazão de recirculação de lodo e $(2,32 \pm 0,32)\%$ para a vazão de ar.

- 3) O modelo de Redes Neurais deve ser treinado com dados experimentais de operação de uma estação de bancada, ou se disponível, com dados de uma estação em escala real.
- 4) O uso de um modelo mecanístico ou empírico para a simulação de uma estação de tratamento de esgotos utilizando o sistema de lodos ativados visando o seu controle operacional ótimo (baixo custo e maior eficiência de remoção de matéria orgânica) depende estritamente do propósito desejado. Se for pretendido estudar os mecanismos cinéticos e suas dependências, o melhor é utilizar um modelo mecanístico. Por outro lado, se for aceita a idéia de não se tentar entender o que realmente acontece dentro do reator, e o sistema de tratamento possuir um levantamento de dados consistente, periódico e realmente confiável, um modelo empírico certamente será uma alternativa atraente.

5.2 SUGESTÕES

Estão listadas a seguir, algumas sugestões de trabalhos de pesquisa que podem dar continuidade à esta tese:

- 1) A partir da operação de um sistema de lodos ativados em escala de laboratório, caracterizar o esgoto sanitário e o lodo e determinar os parâmetros cinéticos para a utilização no Modelo Número 1 da IAWQ. Utilizar esses dados para o treinamento do modelo de Redes Neurais;
- 2) Determinar o K_1a para esgotos sanitários;
- 3) Determinar parâmetros de sedimentação do modelo de Takács et al. (1991);
- 4) Formular variação do processo de lodos ativados com diminuição da produção de lodo através do retorno do lodo em excesso que passa por um processo de lise celular;

- 5) Realizar análise dos componentes principais para otimizar o número de entradas do modelo de Redes Neurais;
- 6) Controlar o processo de lodos ativados utilizando o modelo de Redes Neurais proposto;
- 7) Estudar a viabilidade de outros tipos de Redes Neurais (Redes RBF e Recorrentes) para a modelagem de processos de tratamento de esgotos;
- 8) Incorporar o custo energético ao modelo de Redes Neurais, minimizando os altos custos de operação dos processos aeróbios.

ANEXO A

As Figuras A.1 a A.27 apresentam as simulações do modelo desenvolvido utilizando as equações cinéticas do Modelo Número 1 da IAWQ (Henze et al., 1987) e o modelo de decantador secundário de Takács et al. (1991).

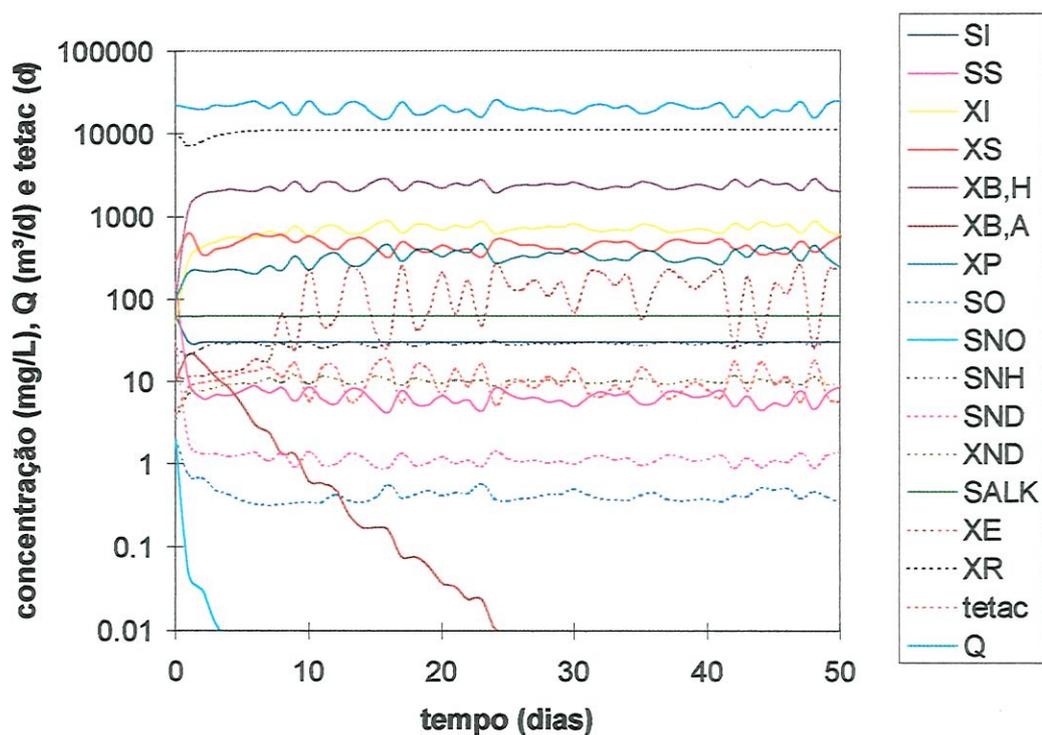


Figura A.1: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

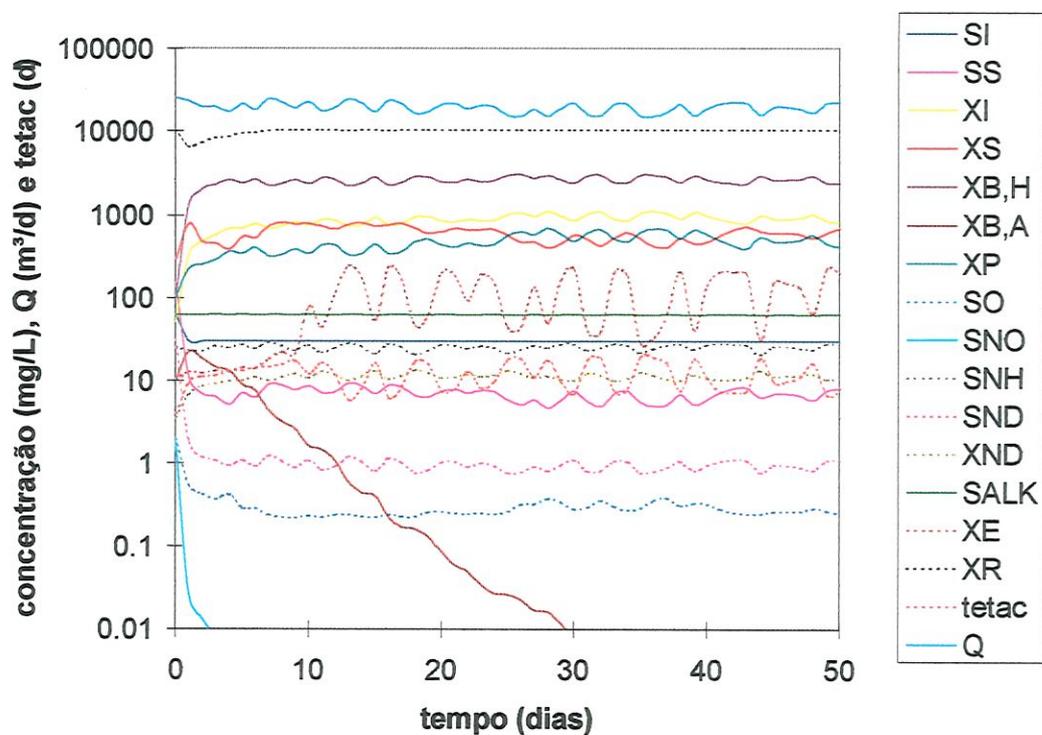


Figura A.2: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

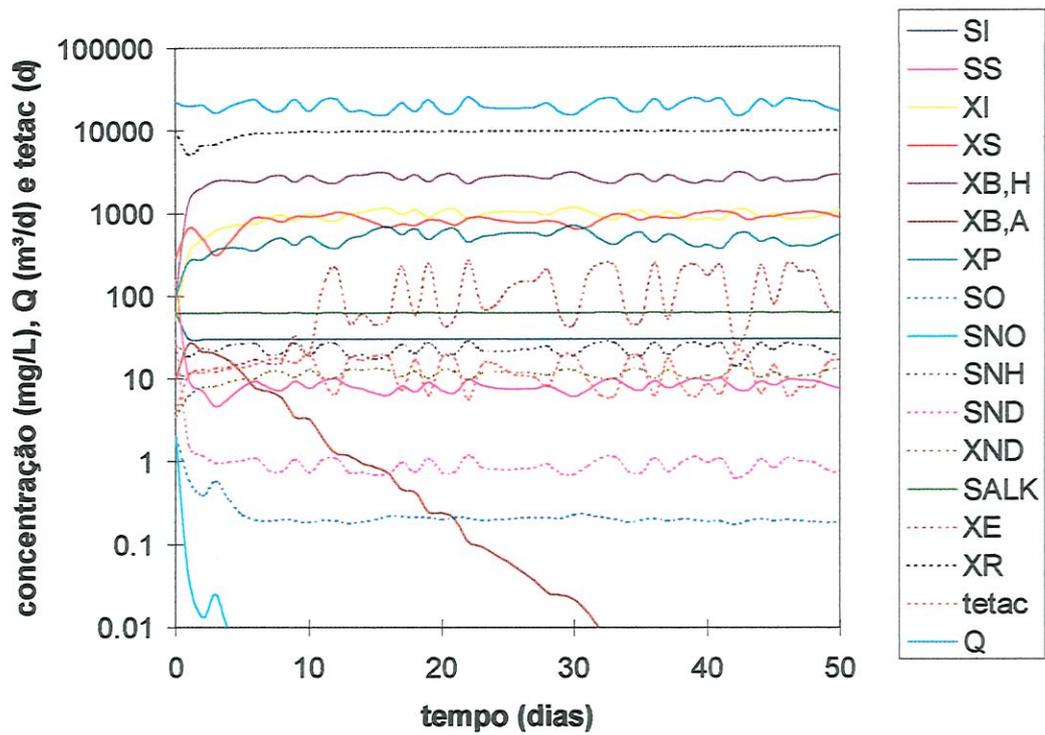


Figura A.3: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

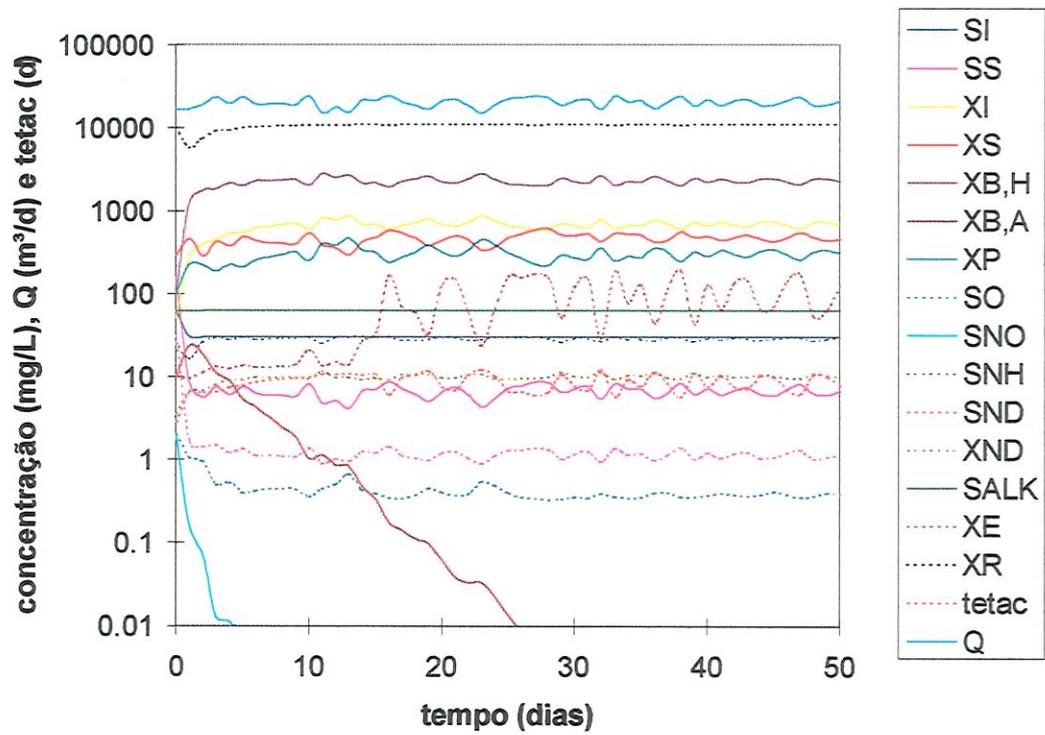


Figura A.4: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

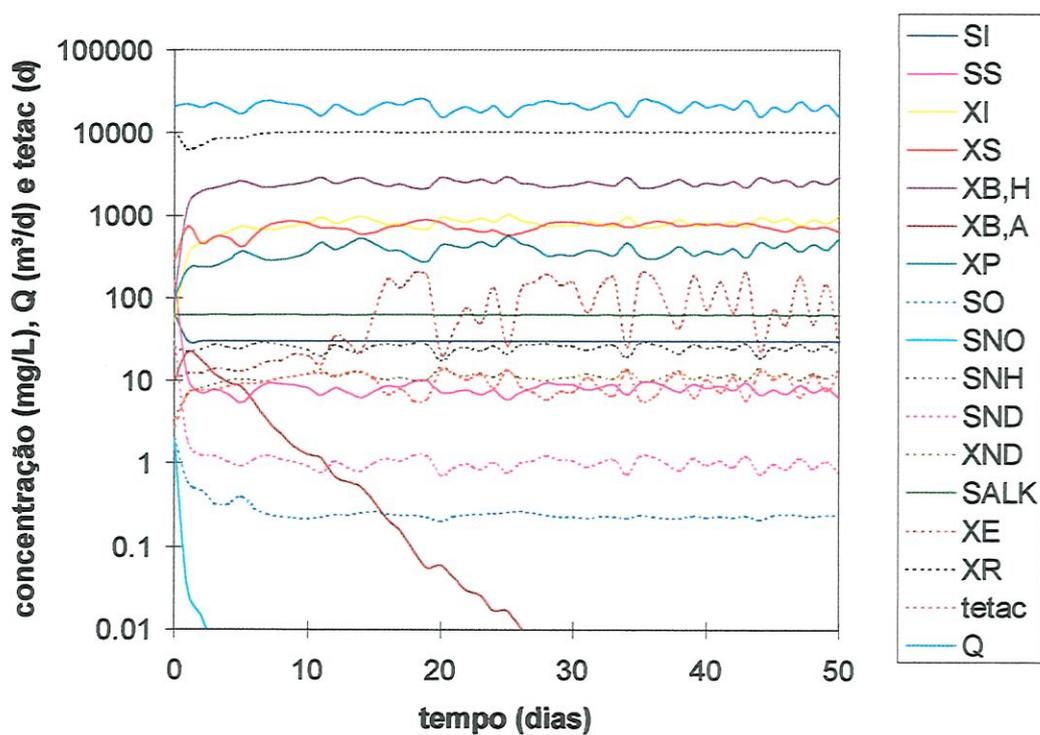


Figura A.5: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

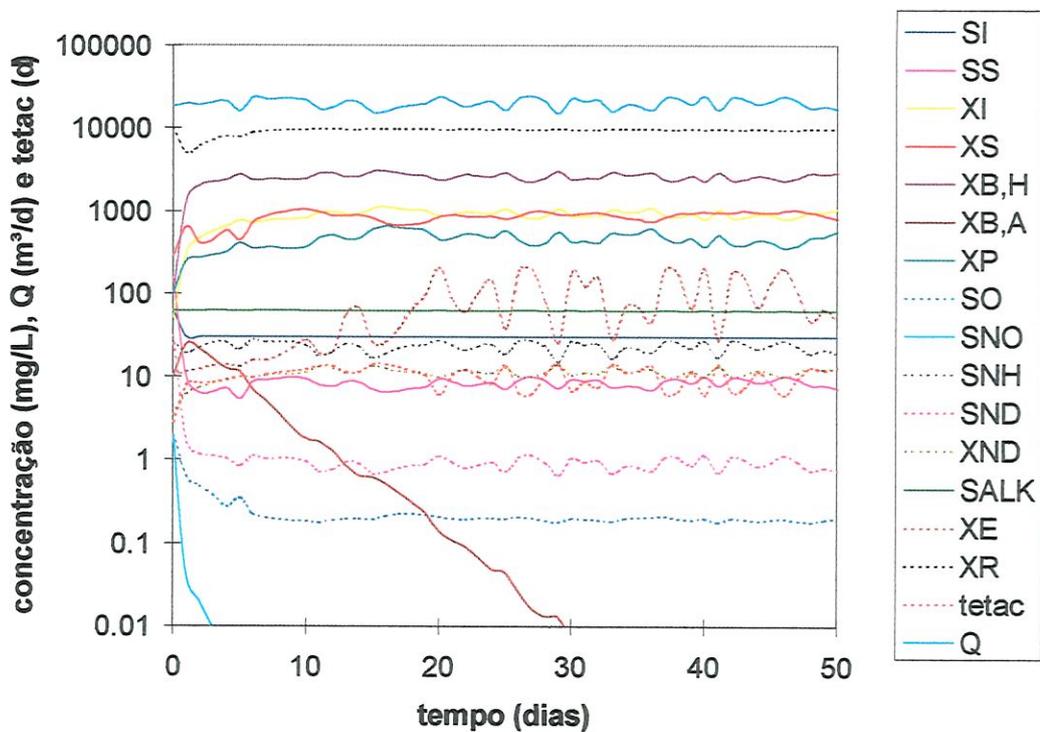


Figura A.6: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

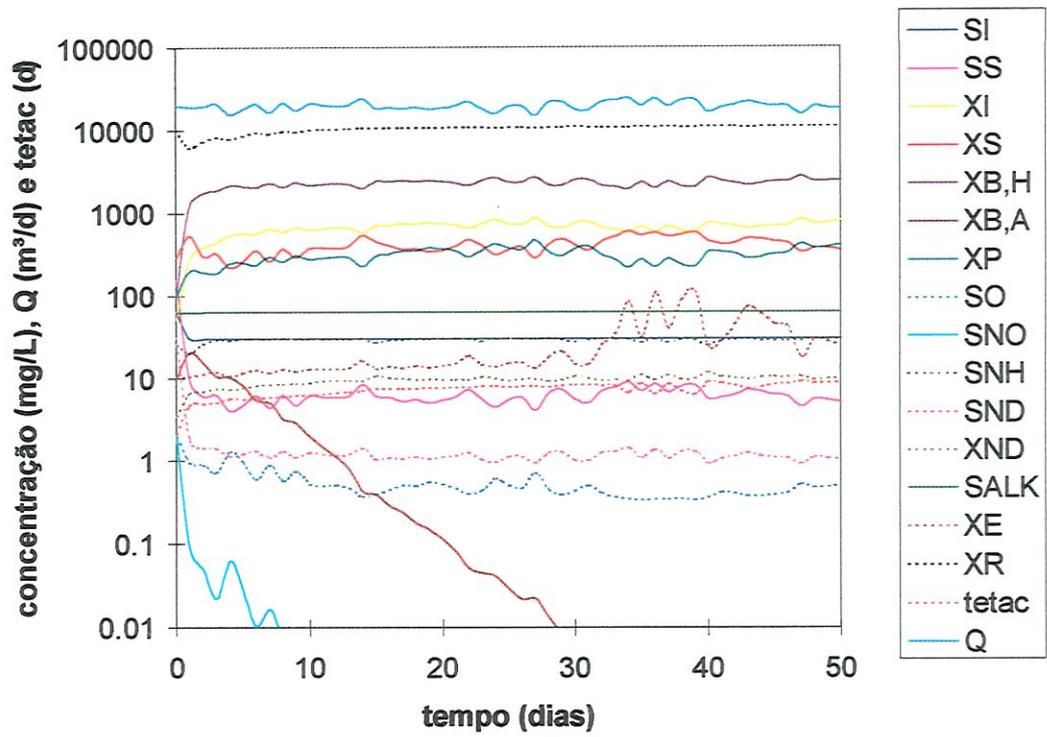


Figura A.7: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

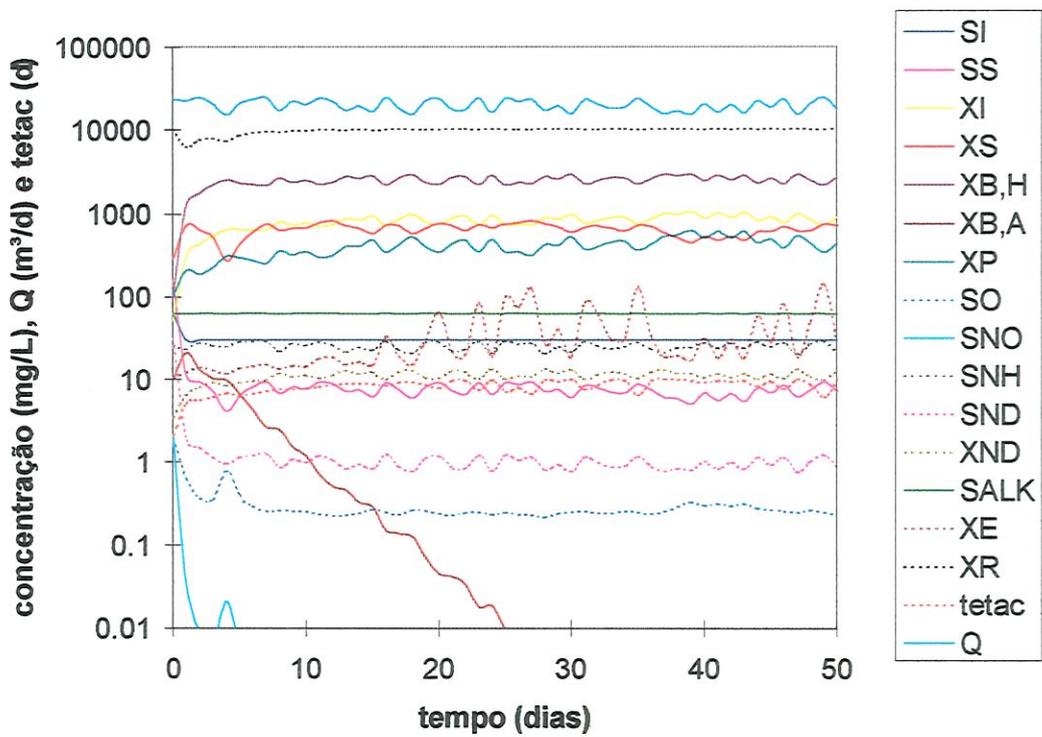


Figura A.8: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

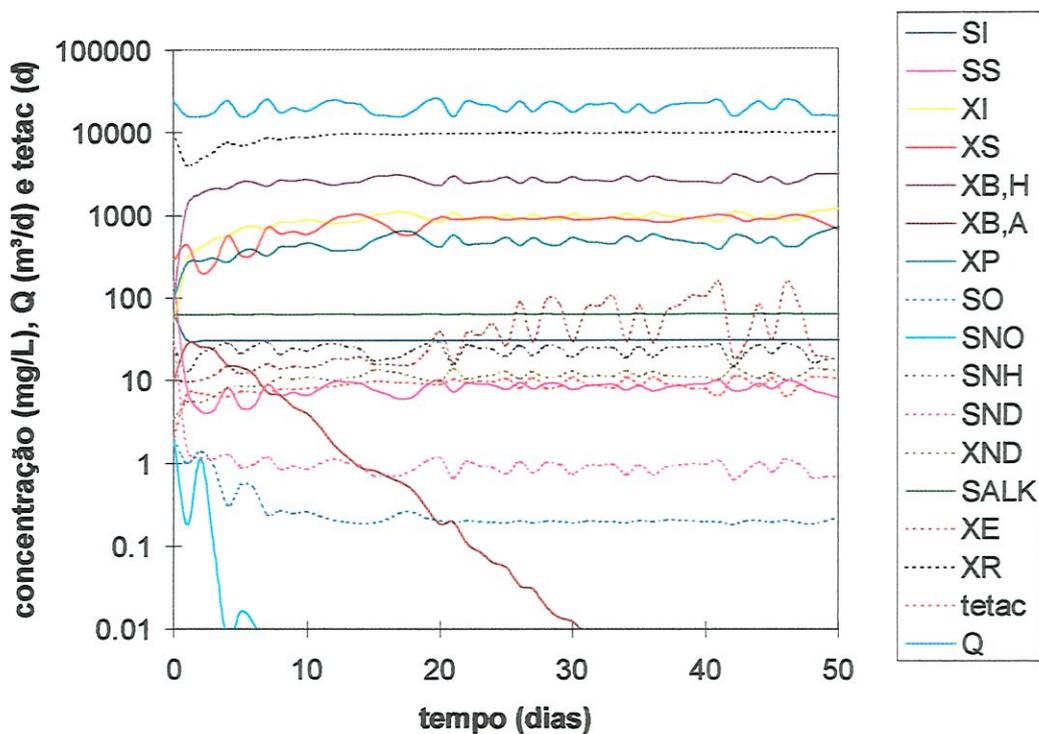


Figura A.9: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 100.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

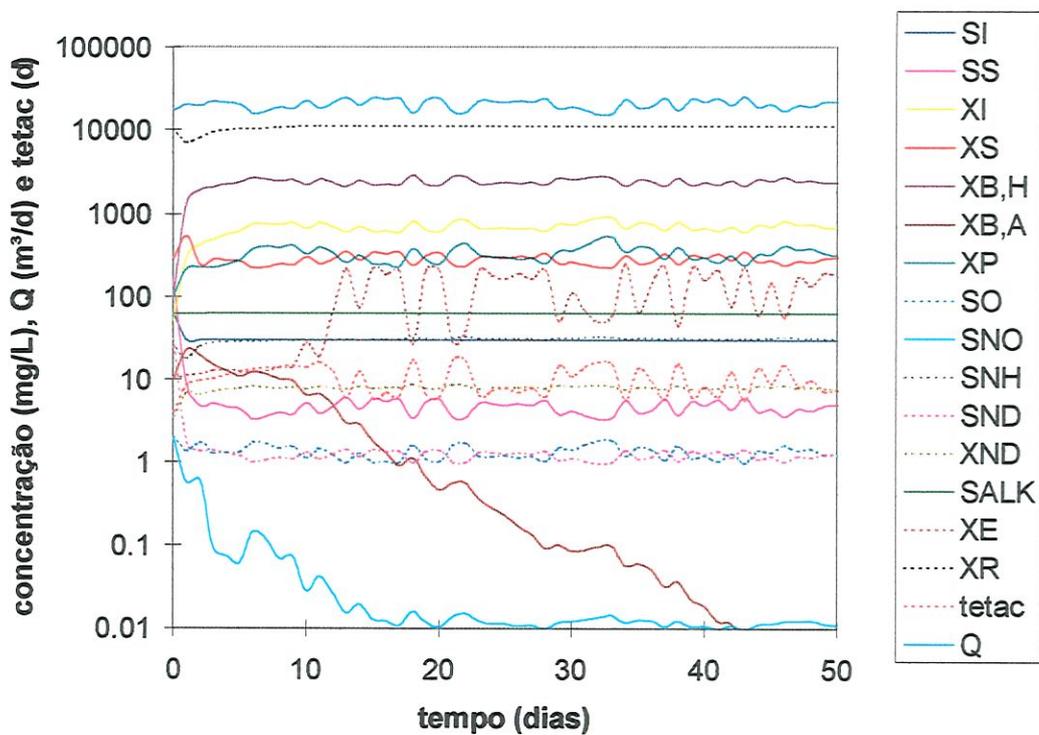


Figura A.10: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

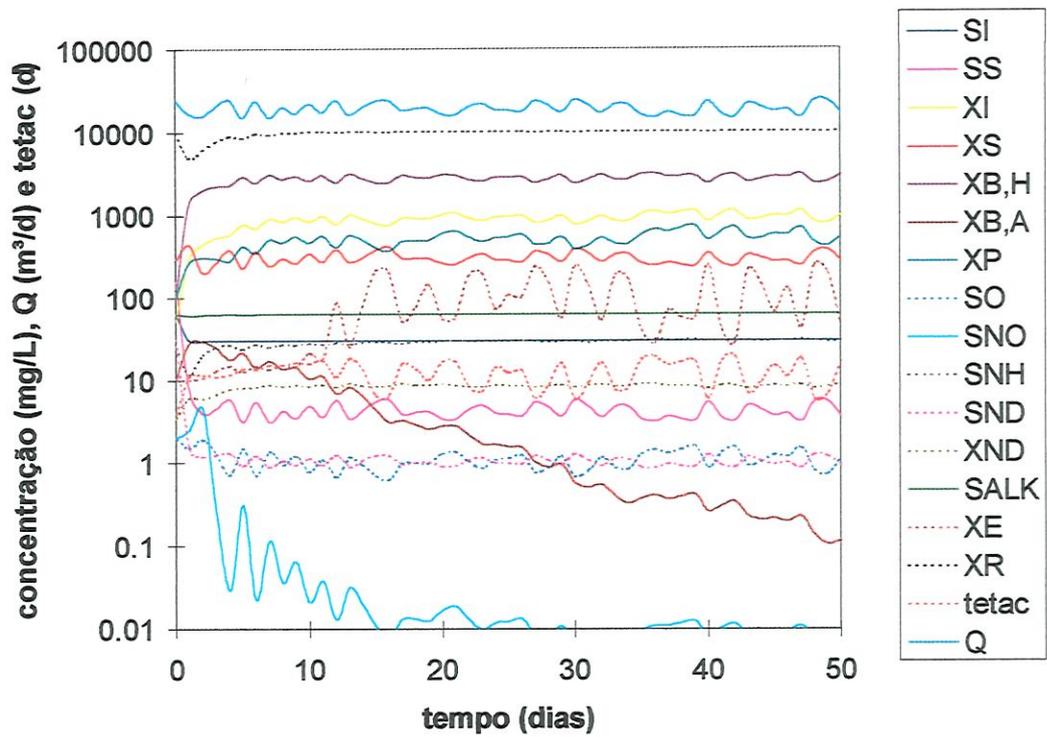


Figura A.11: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

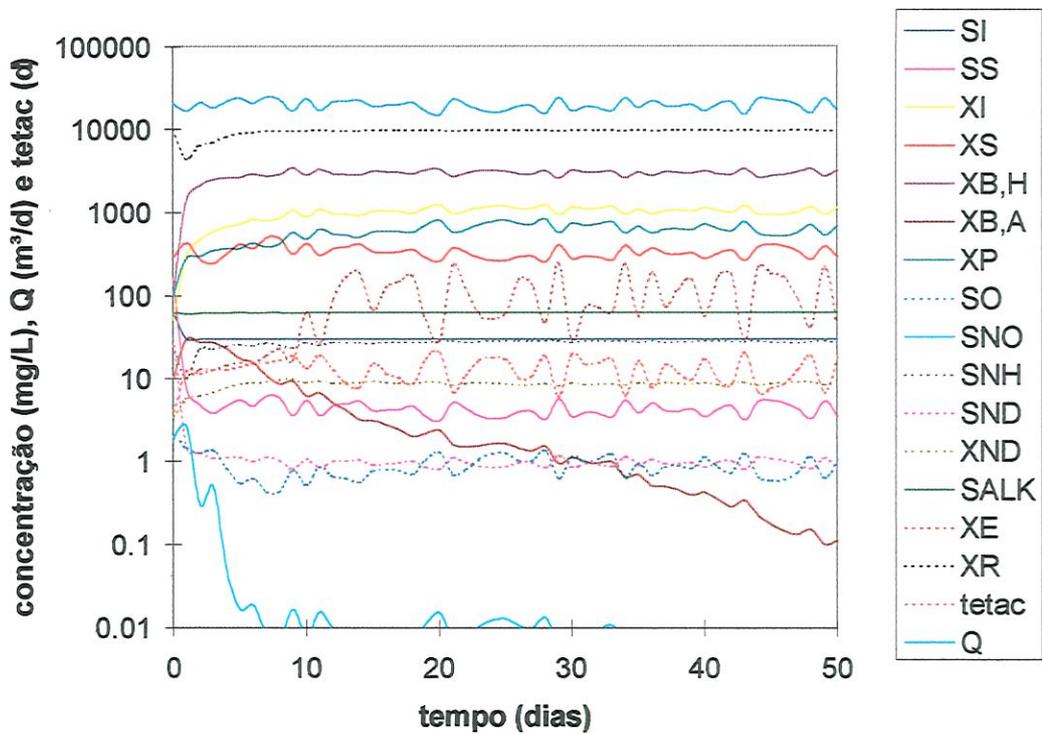


Figura A.12: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

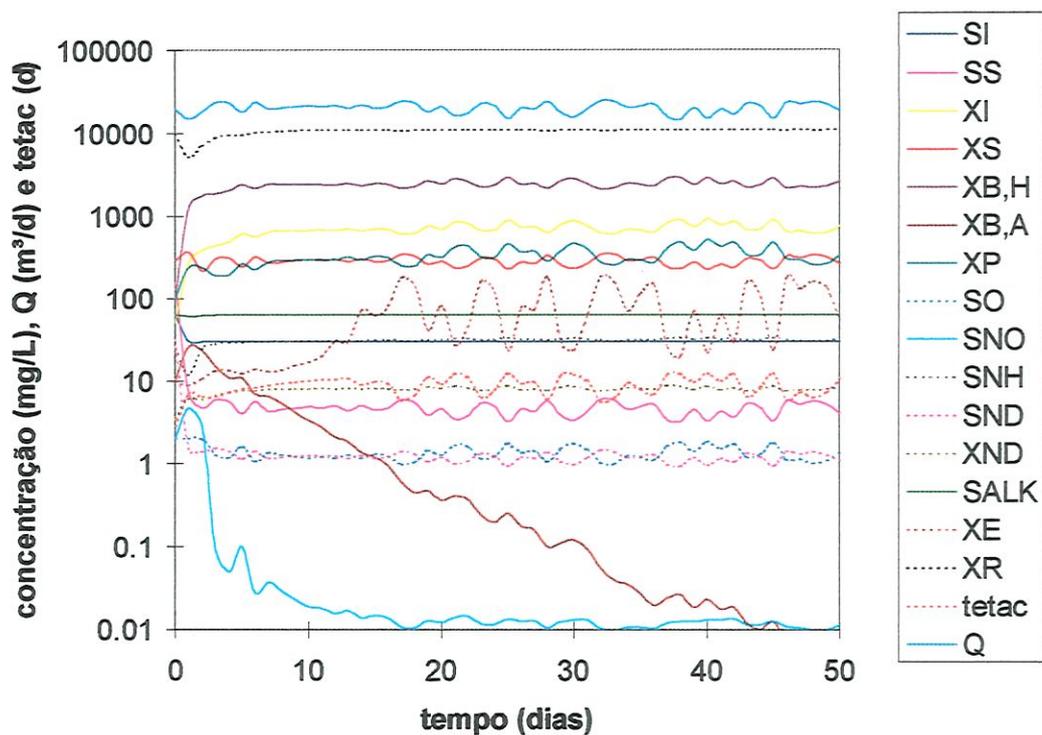


Figura A.13: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

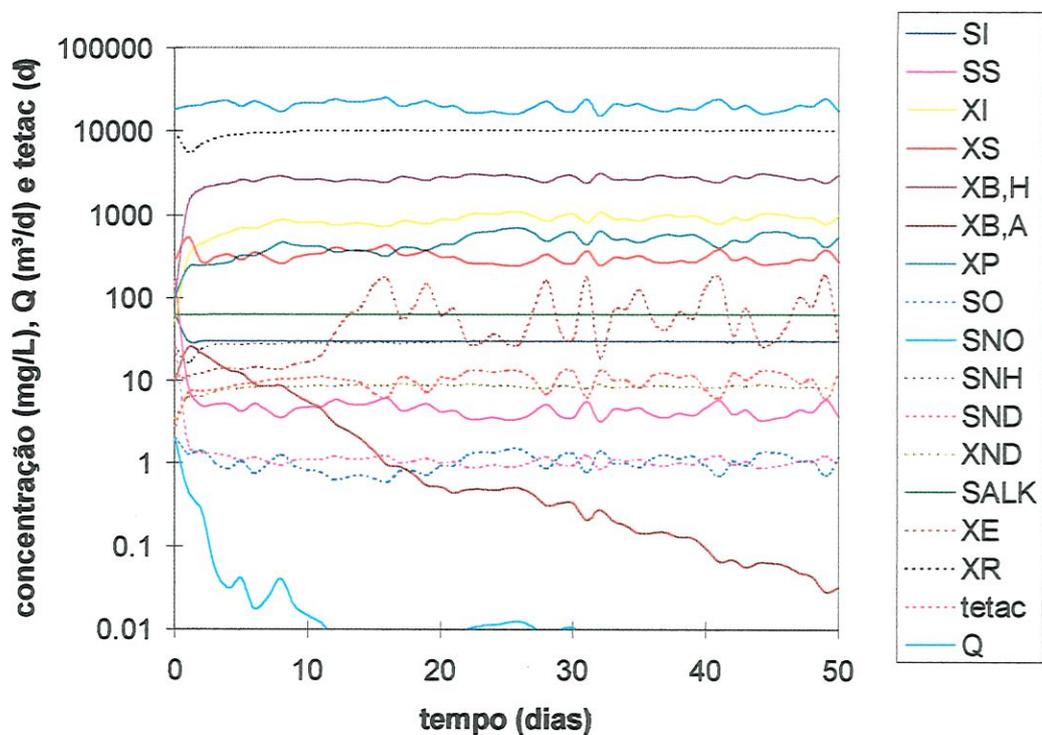


Figura A.14: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

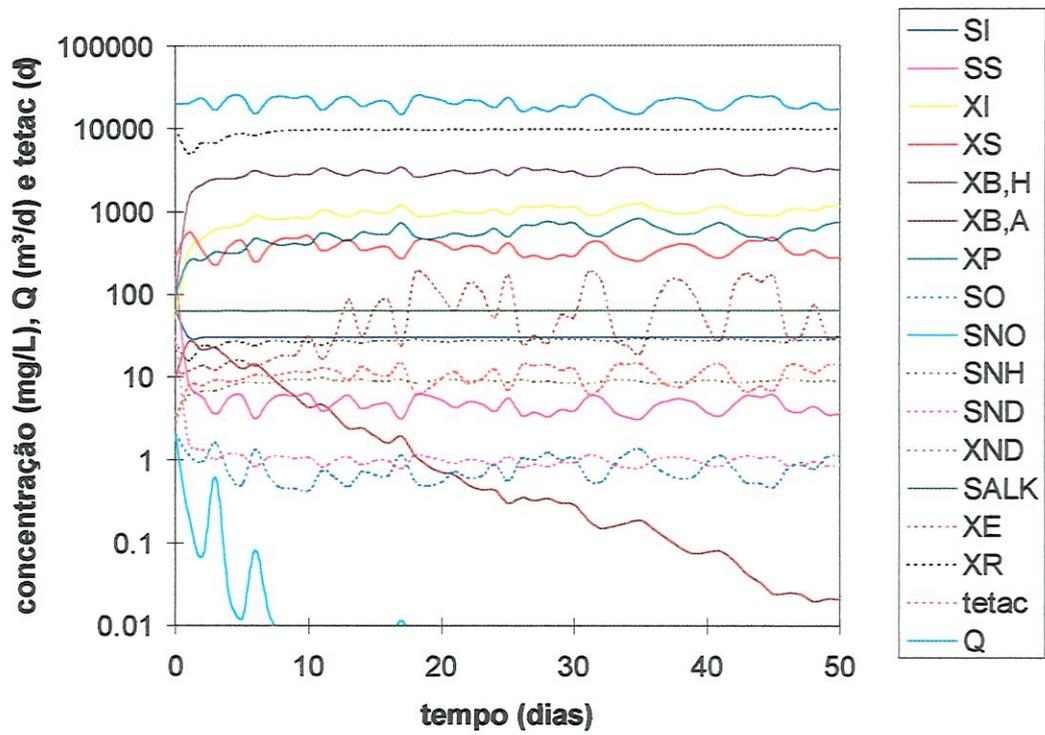


Figura A.15: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

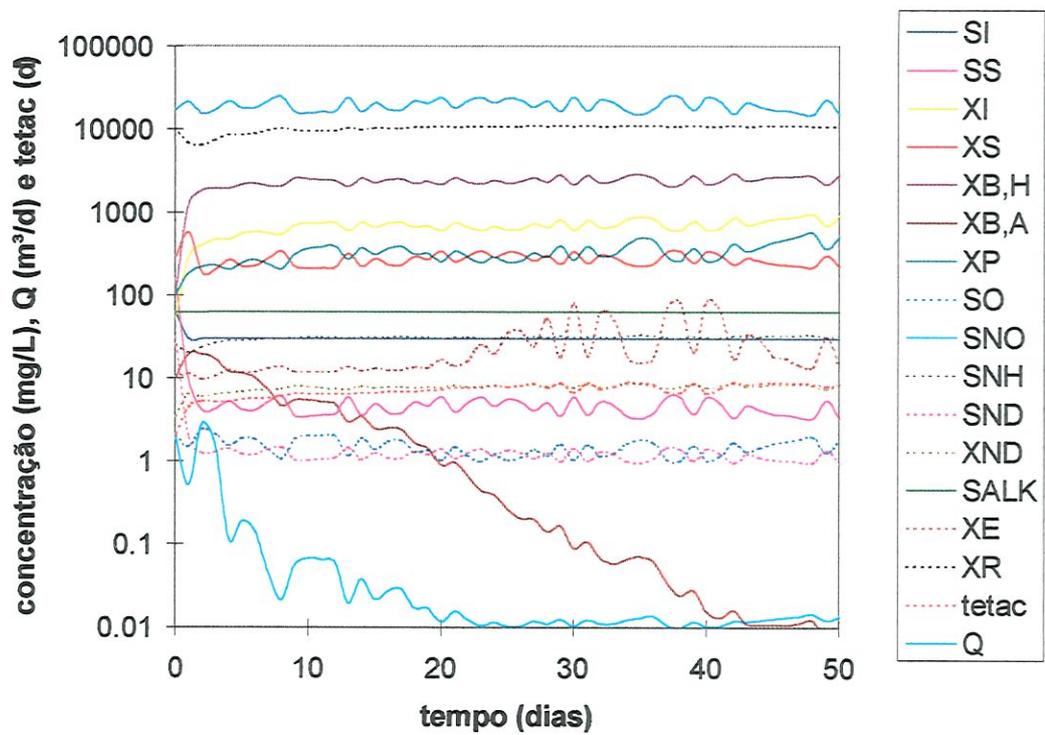


Figura A.16: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

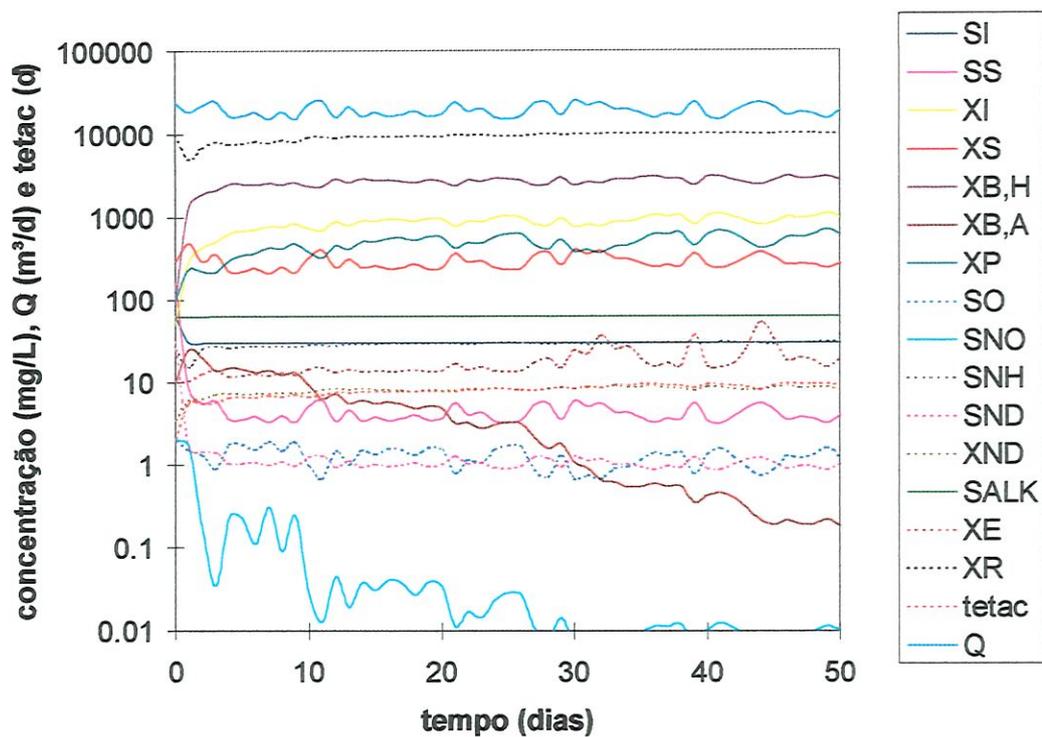


Figura A.17: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

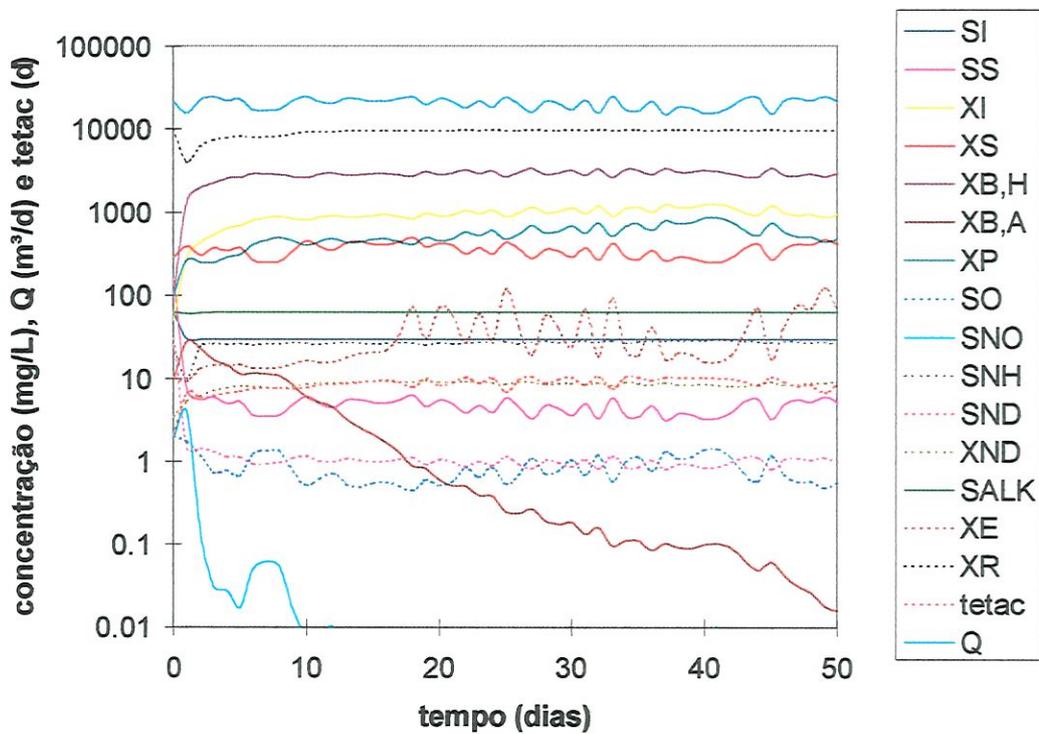


Figura A.18: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 120.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

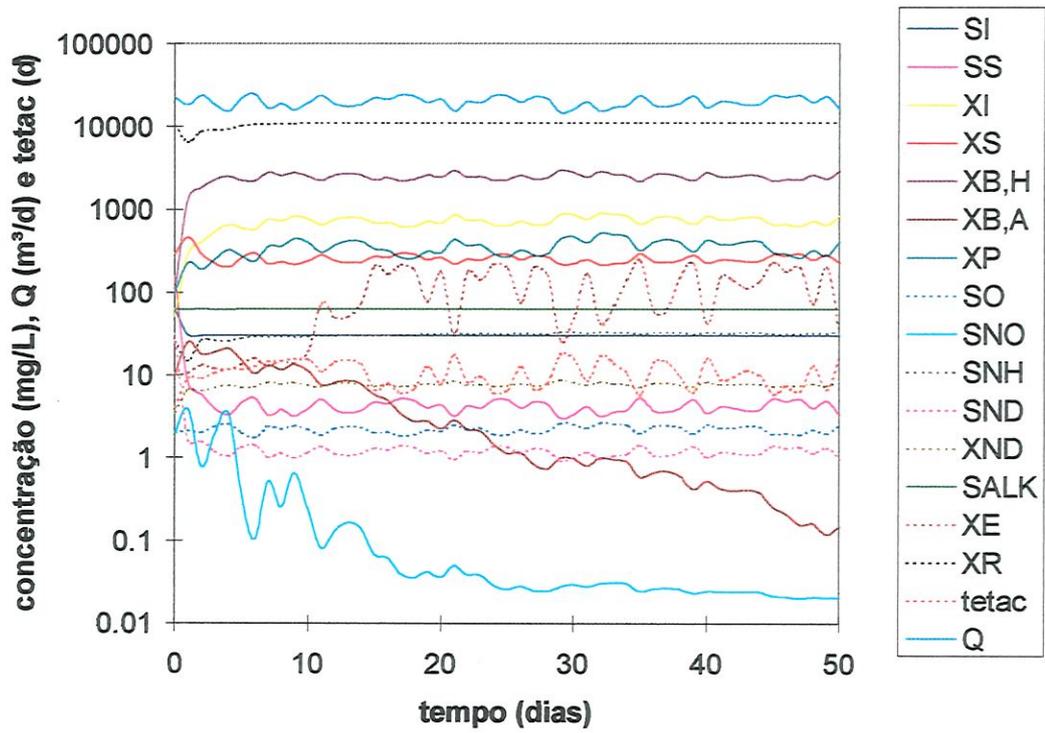


Figura A.19: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/d$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/d$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/d$.

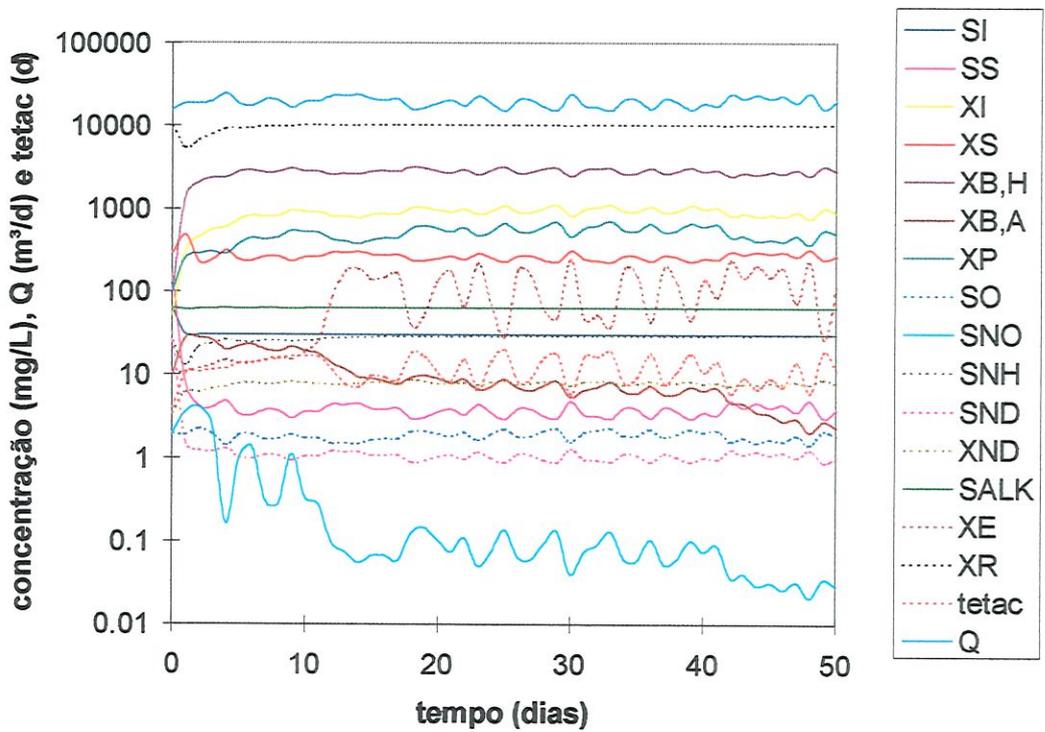


Figura A.20: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/d$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/d$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/d$.

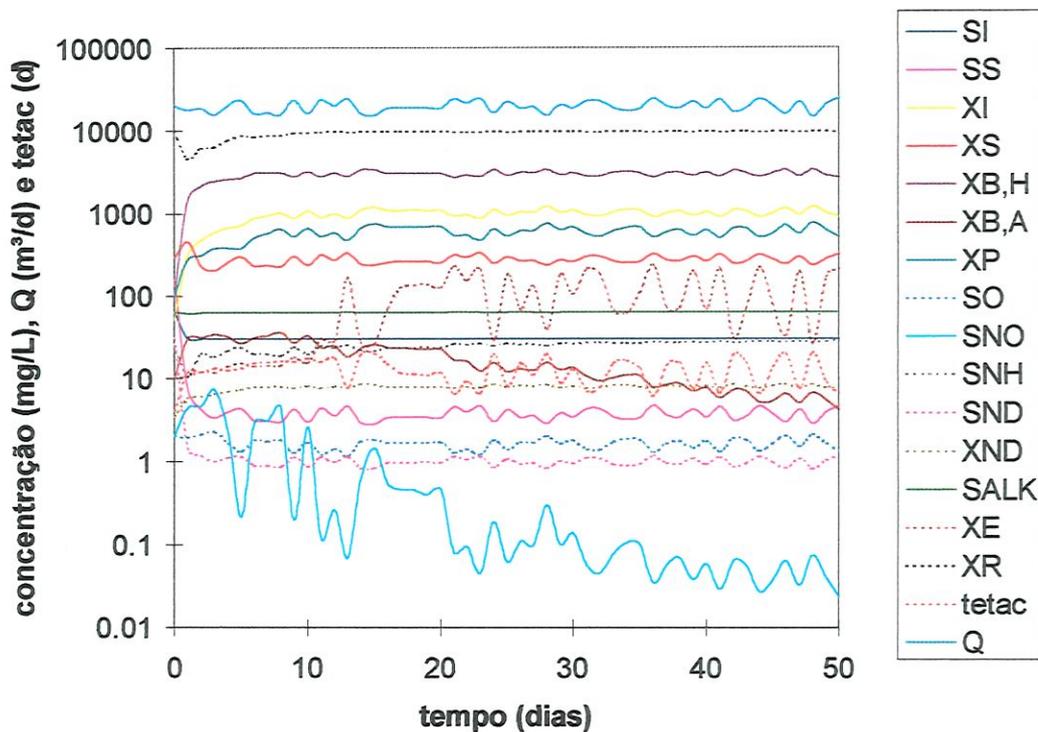


Figura A.21: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 200 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

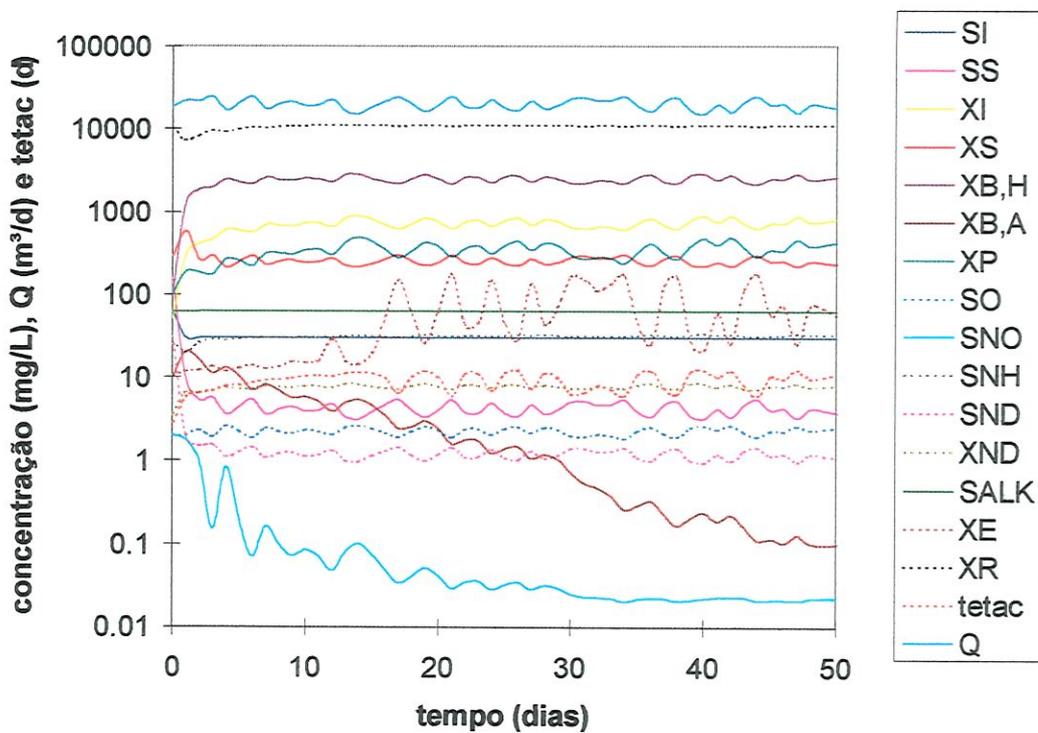


Figura A.22: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$, $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 10.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

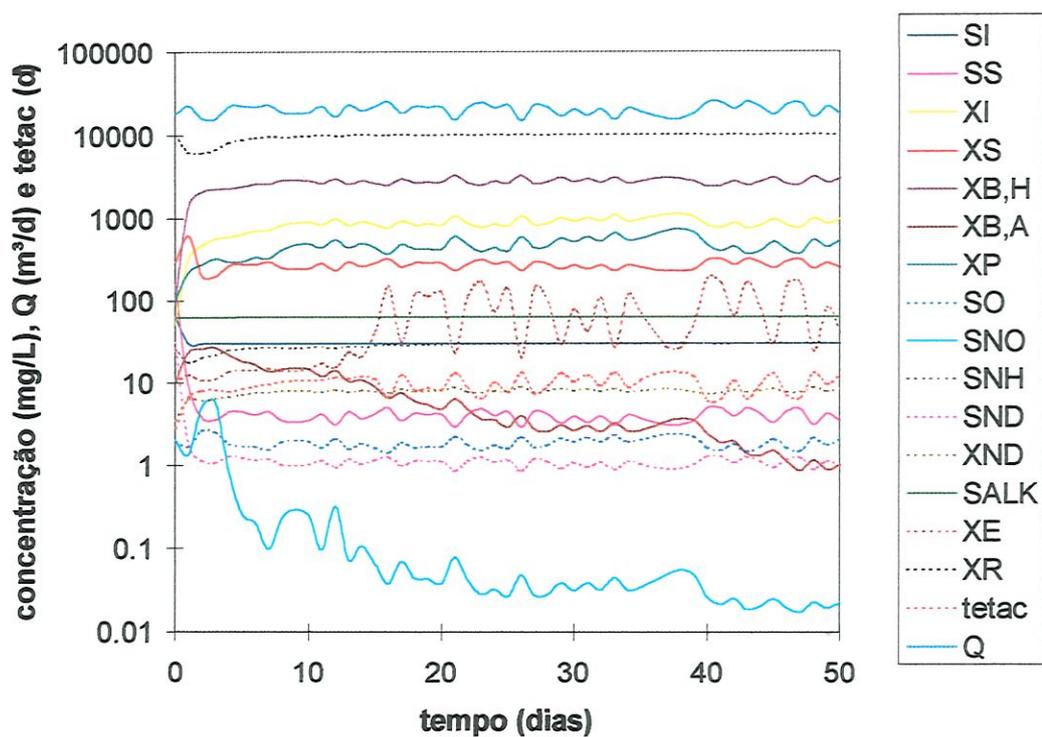


Figura A.23: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 15.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

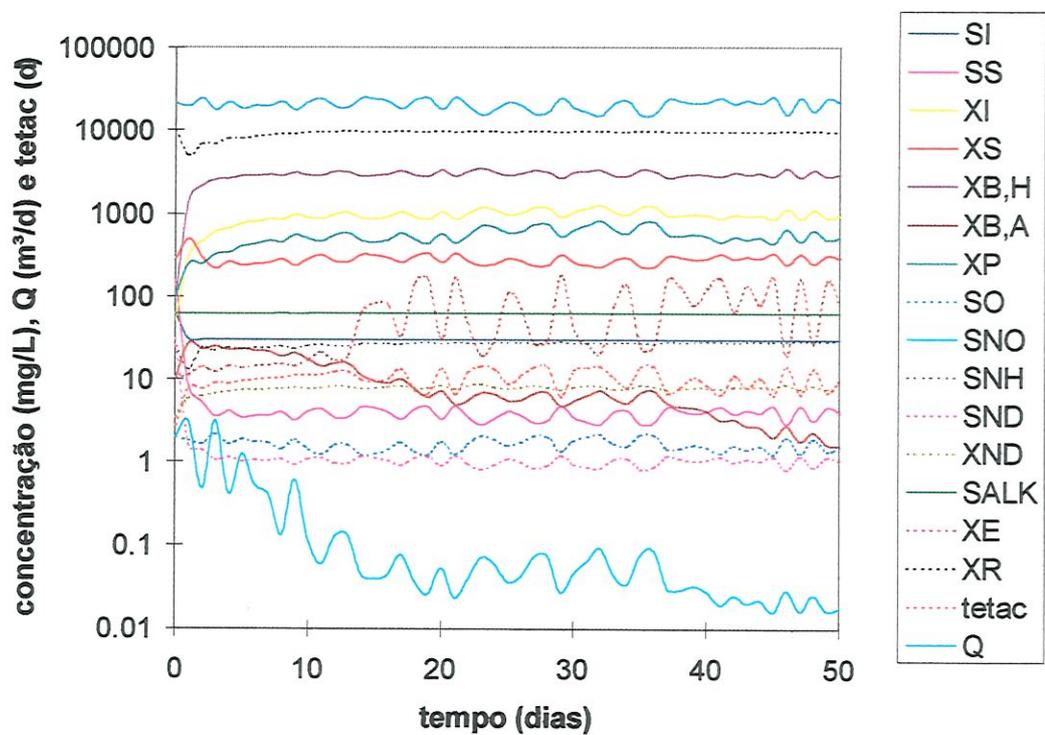


Figura A.24: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 300 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.



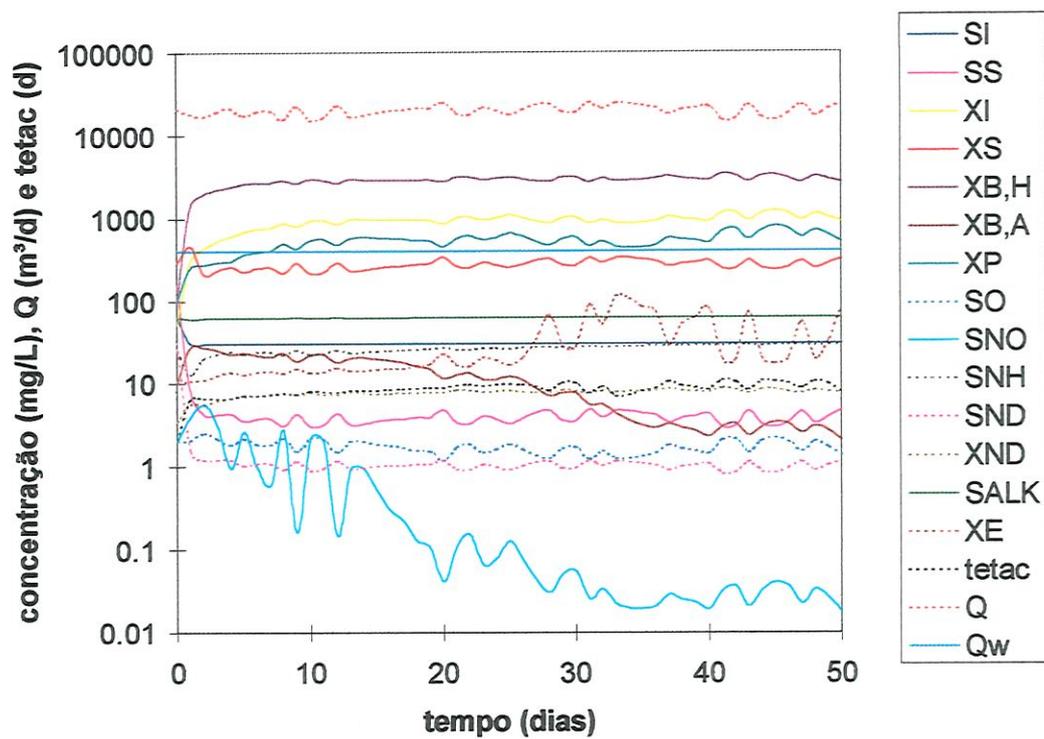


Figura A.27: Resultados dos parâmetros obtidos para experimento com $Q_{ar} = 140.000 \text{ m}^3/\text{d}$,
 $Q_w = 400 \text{ m}^3/\text{d}$ e $Q_R = 20.000 \text{ m}^3/\text{d}$.

ANEXO B

As Figuras B.1 a B.72 apresentam o monitoramento do erro quadrático médio (MSE) durante o treinamento das arquiteturas com 3, 5, 7, 9, 11 e 13 neurônios na camada intermediária e das redes com 5 e 7 neurônios em duas camadas intermediárias.

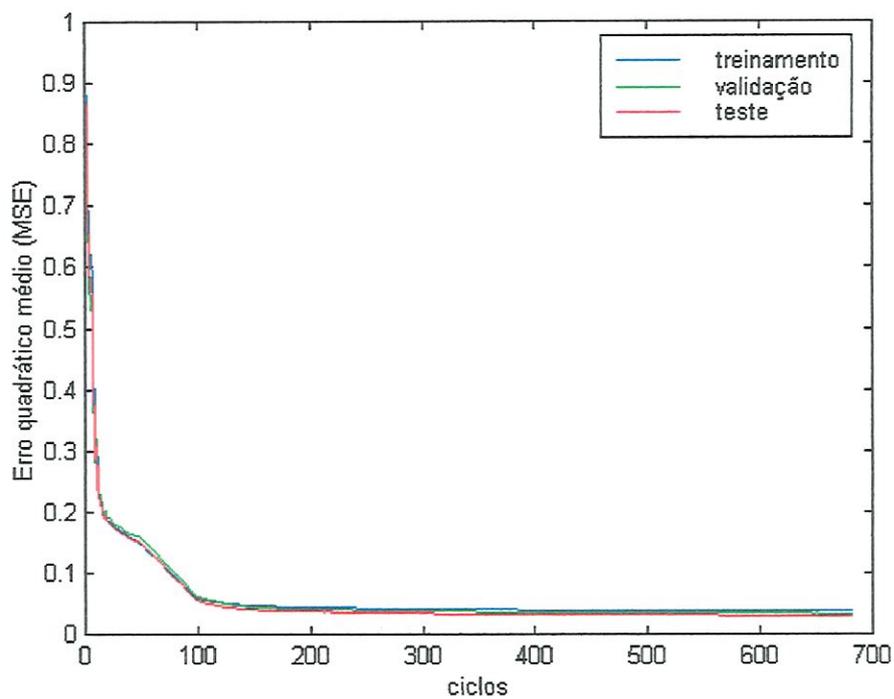


Figura B.1: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 3 neurônios na camada escondida.

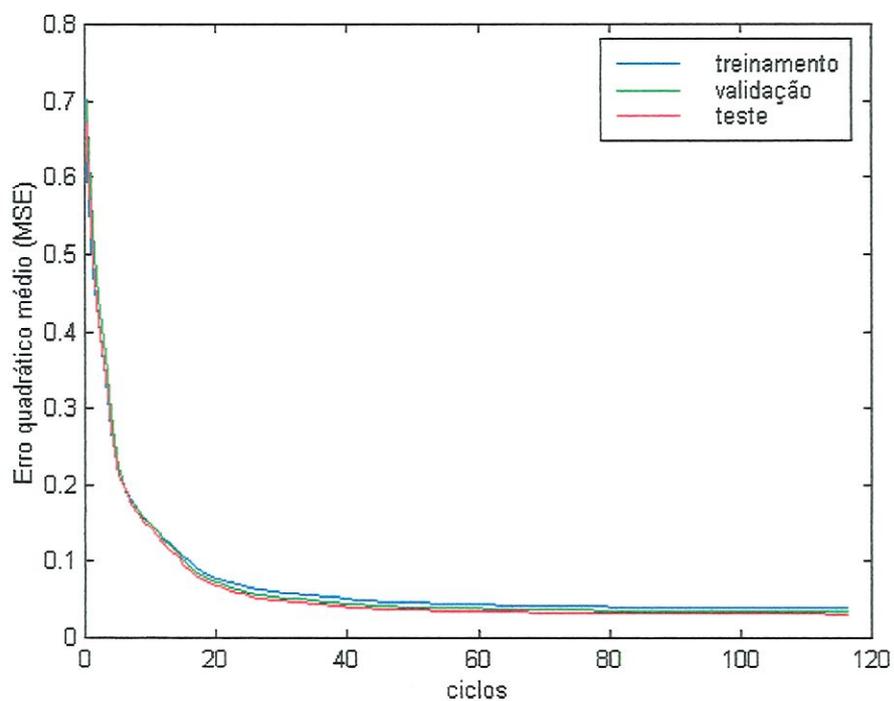


Figura B.2: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 5 neurônios na camada escondida.

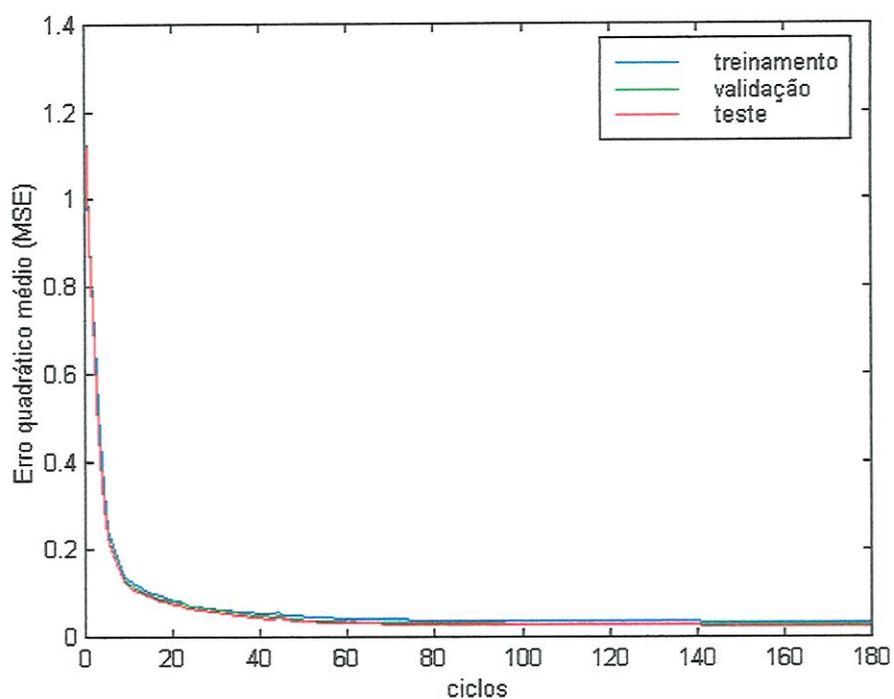


Figura B.3: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 7 neurônios na camada escondida.

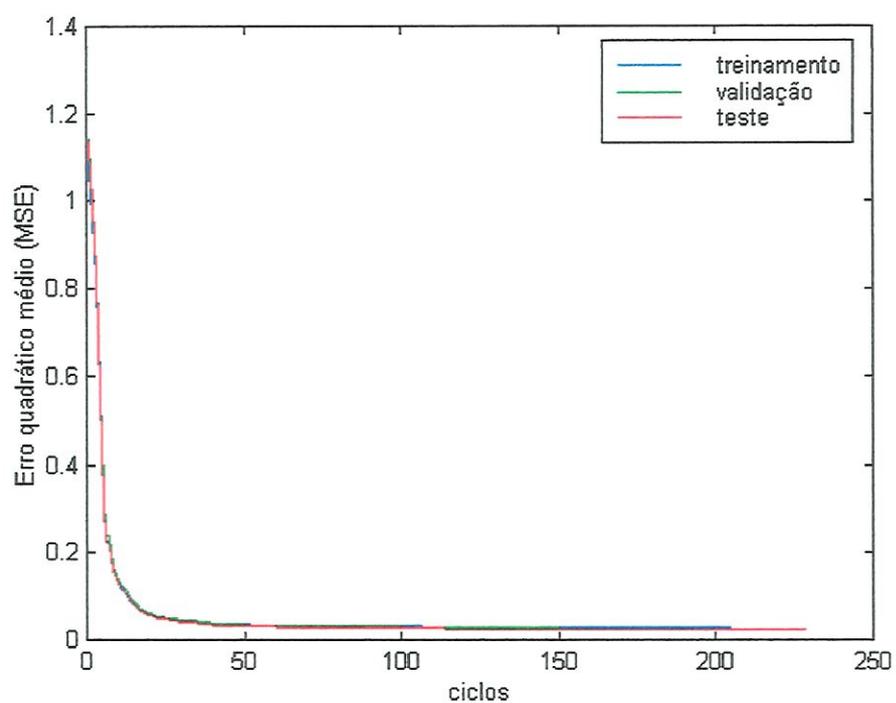


Figura B.4: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 9 neurônios na camada escondida.

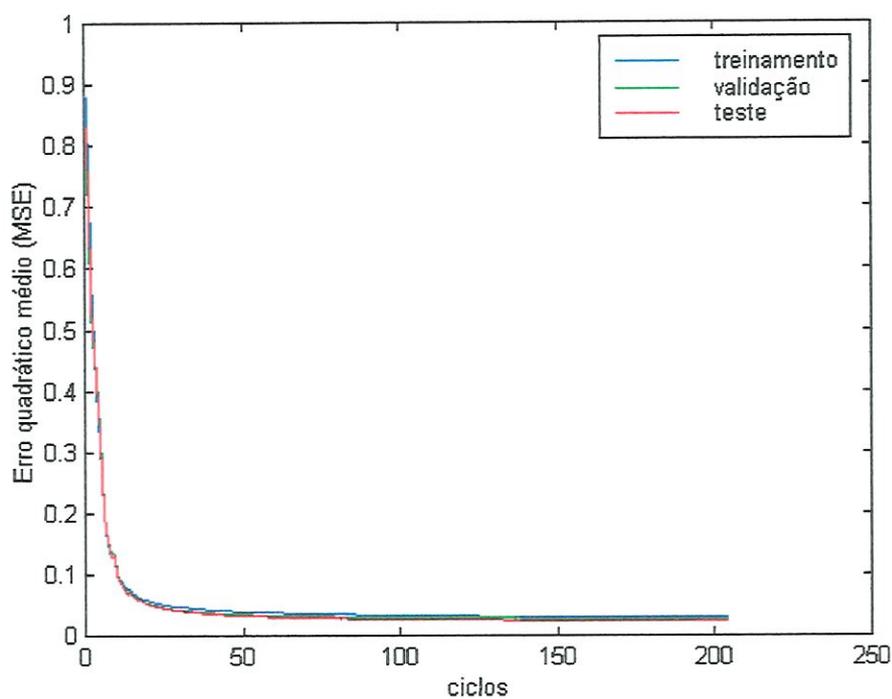


Figura B.5: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 11 neurônios na camada escondida.

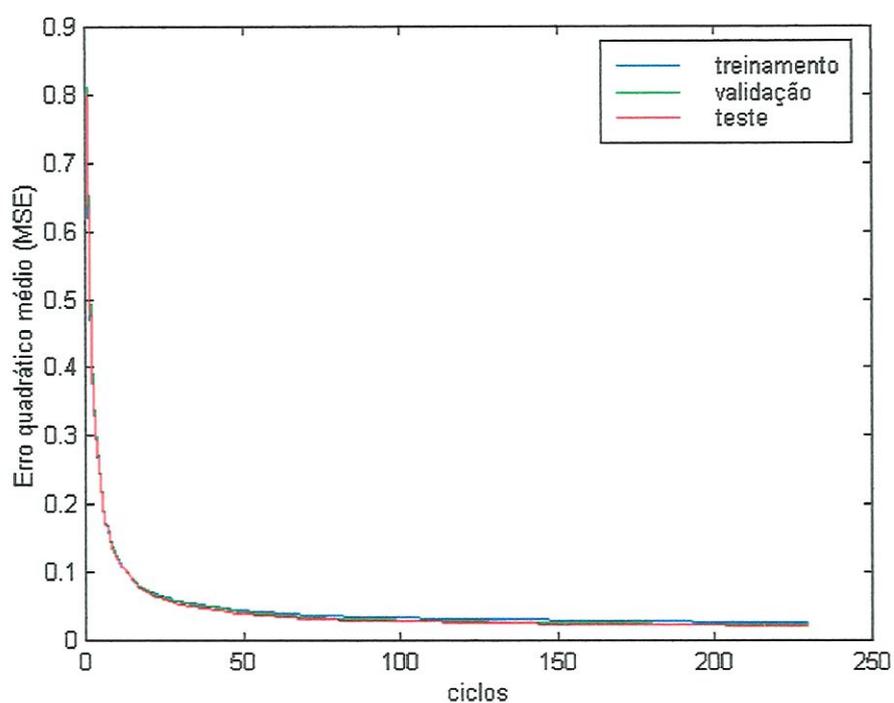


Figura B.6: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 13 neurônios na camada escondida.

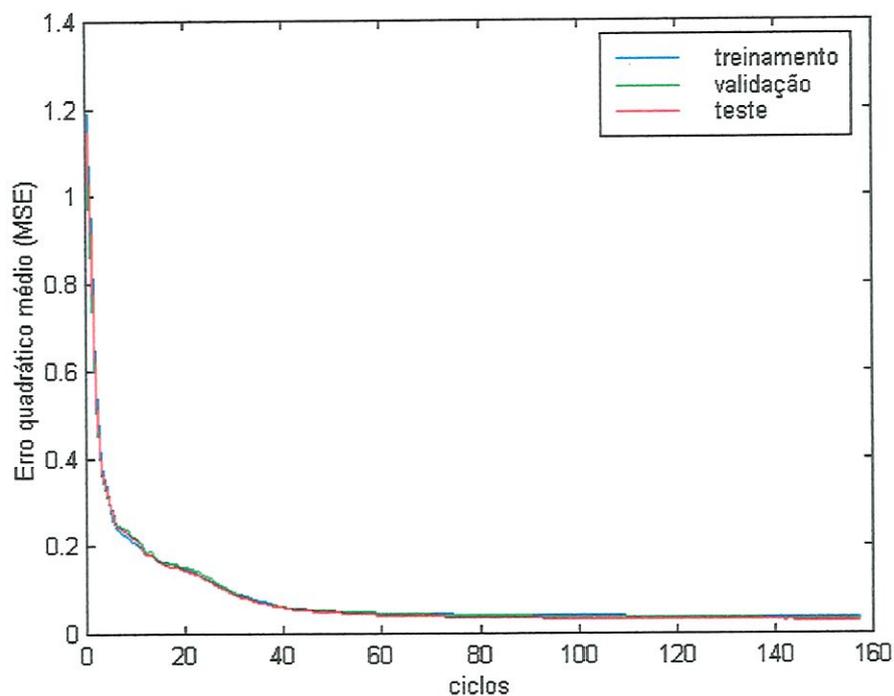


Figura B.7: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

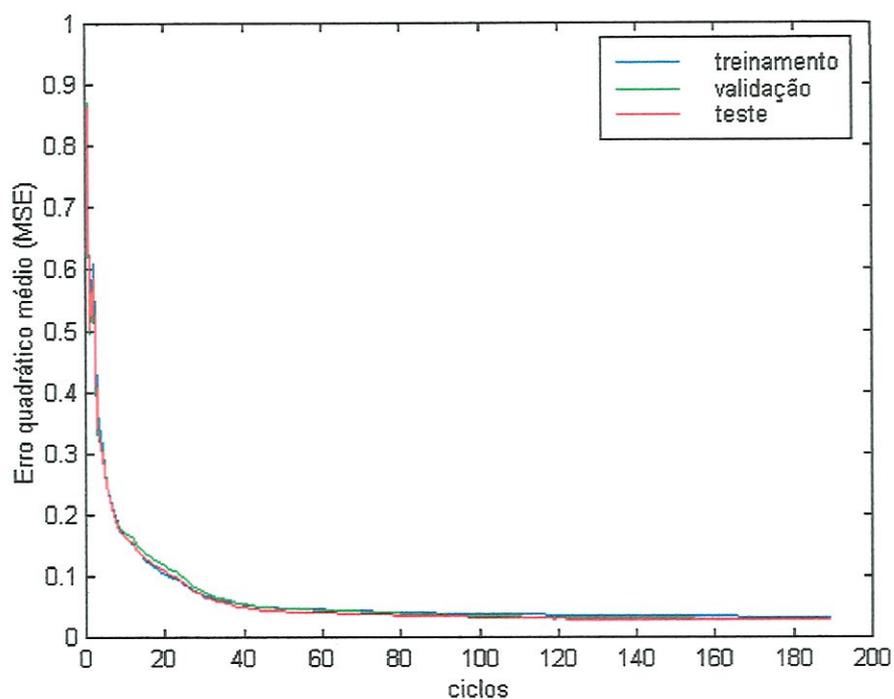


Figura B.8: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

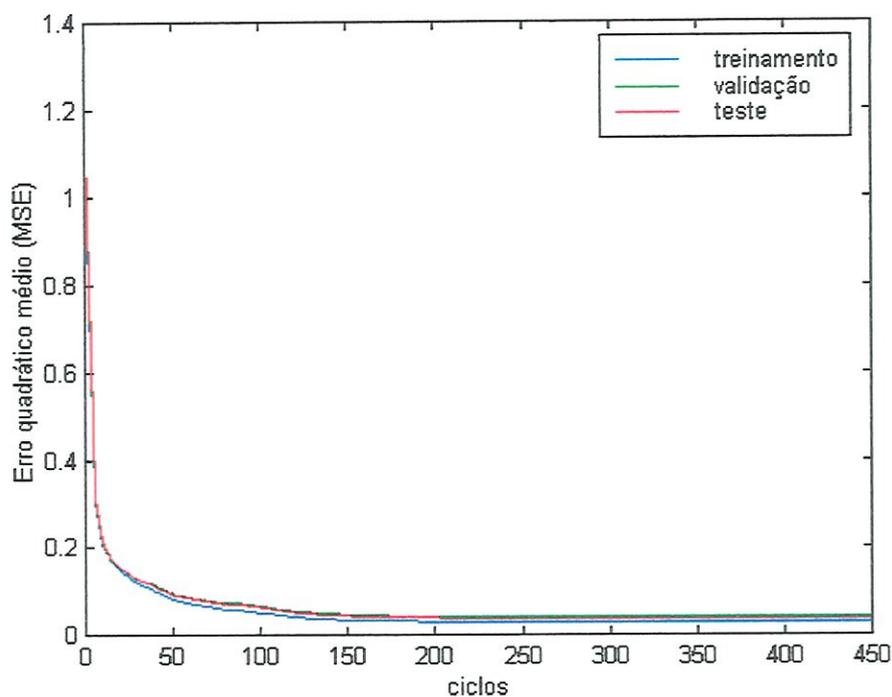


Figura B.9: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 3 neurônios na camada escondida.

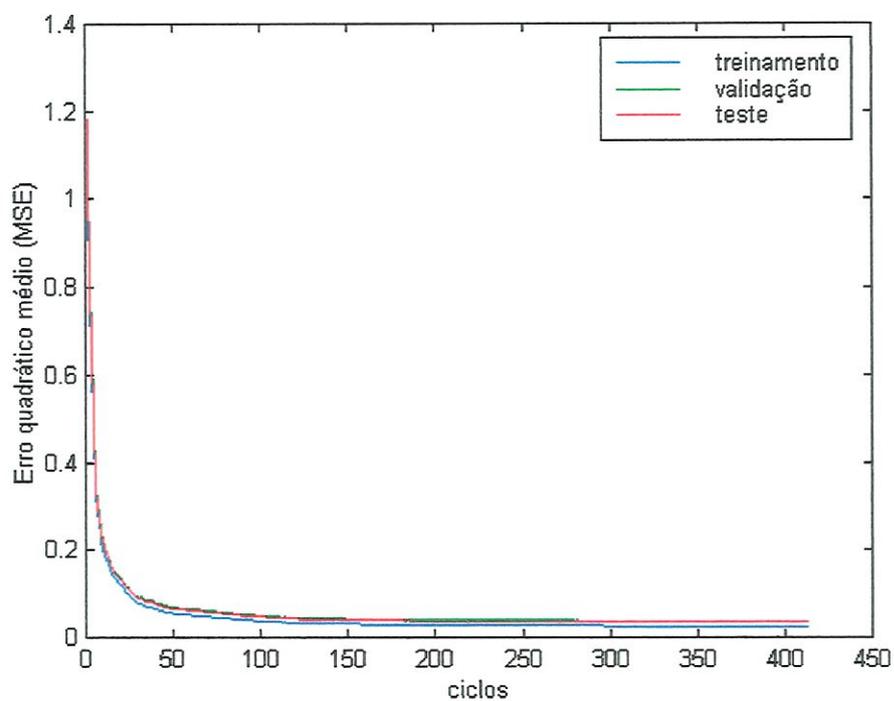


Figura B.10: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 5 neurônios na camada escondida.

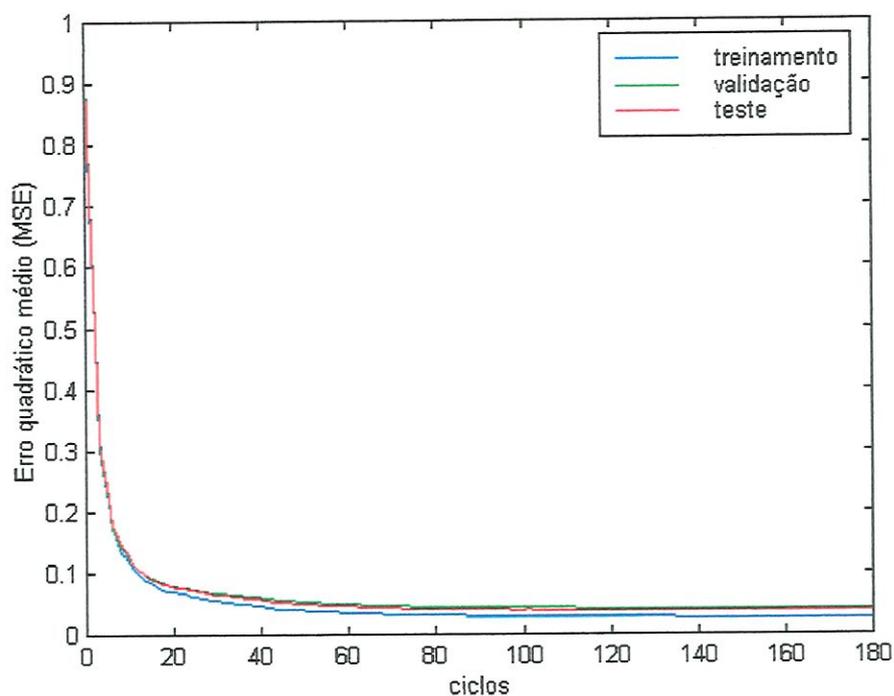


Figura B.11: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios na camada escondida.

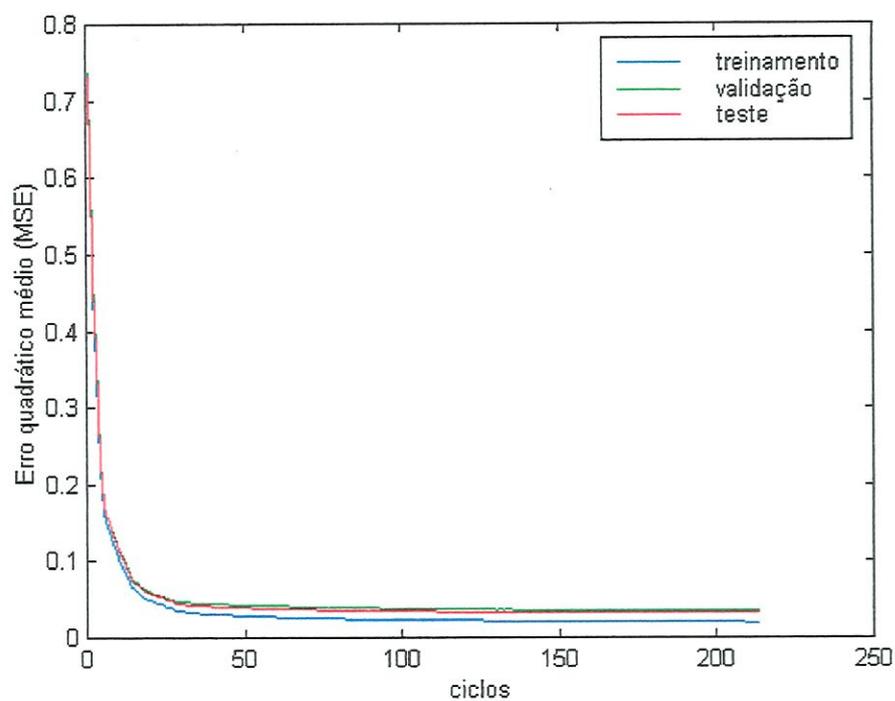


Figura B.12: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 9 neurônios na camada escondida.

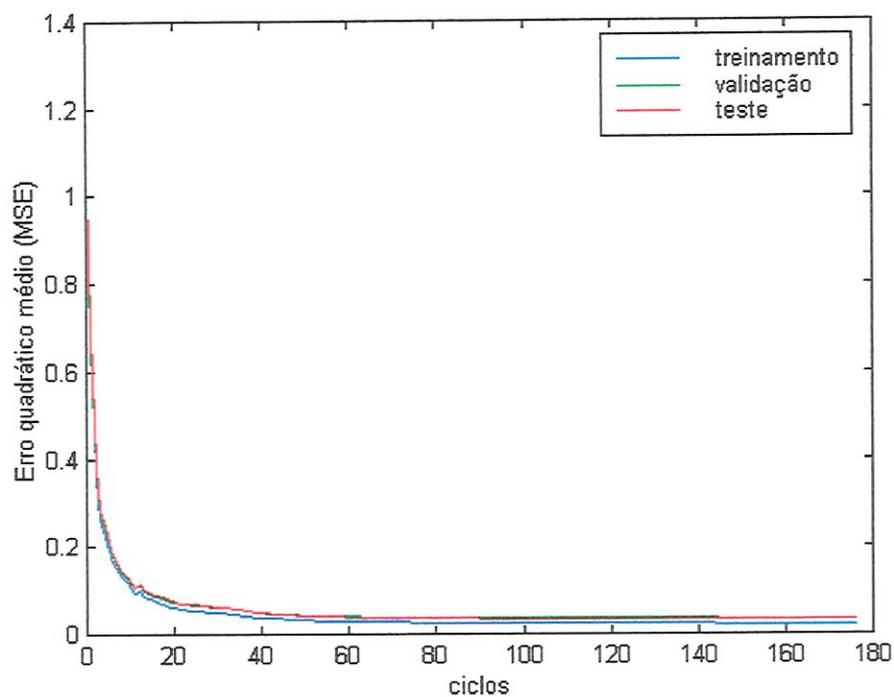


Figura B.13: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 11 neurônios na camada escondida.

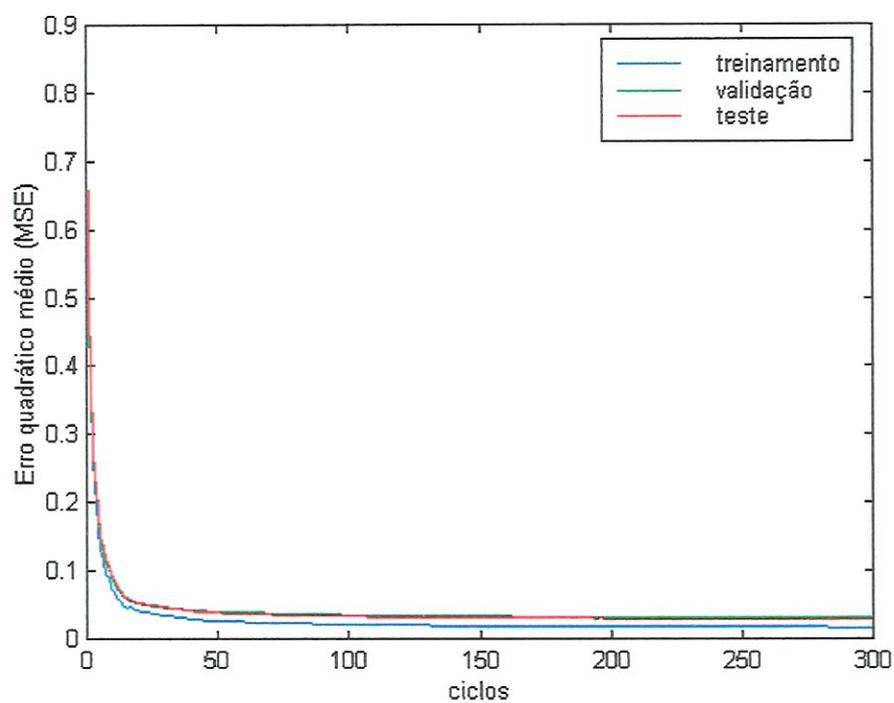


Figura B.14: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 13 neurônios na camada escondida.

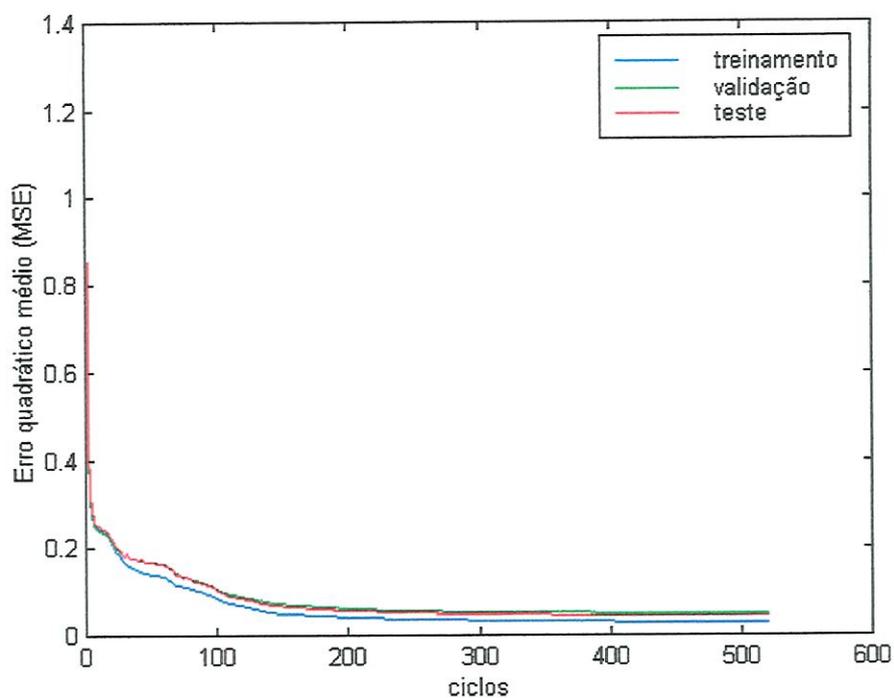


Figura B.15: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

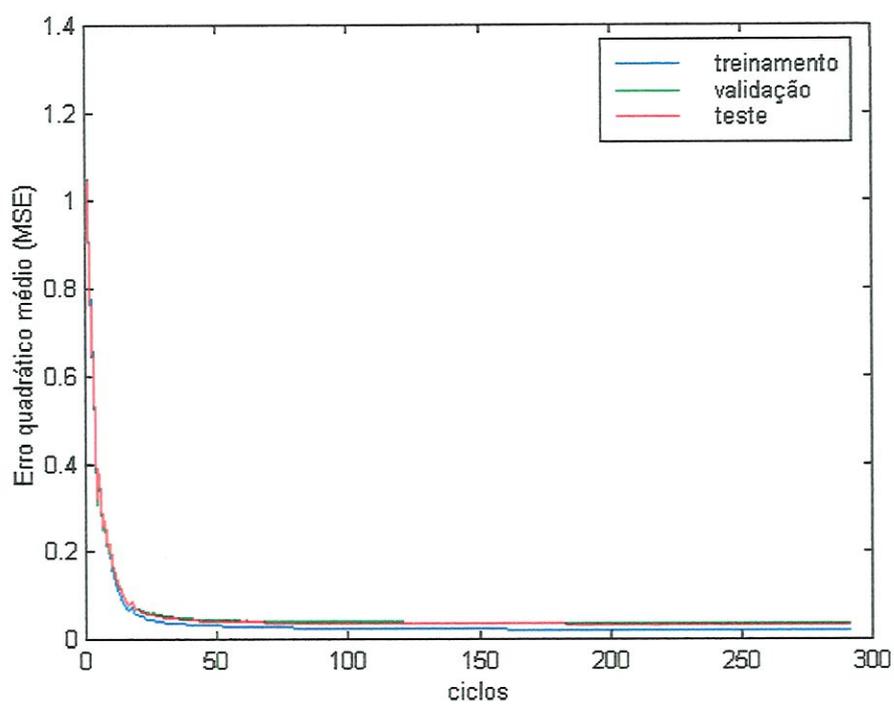


Figura B.16: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Rprop e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

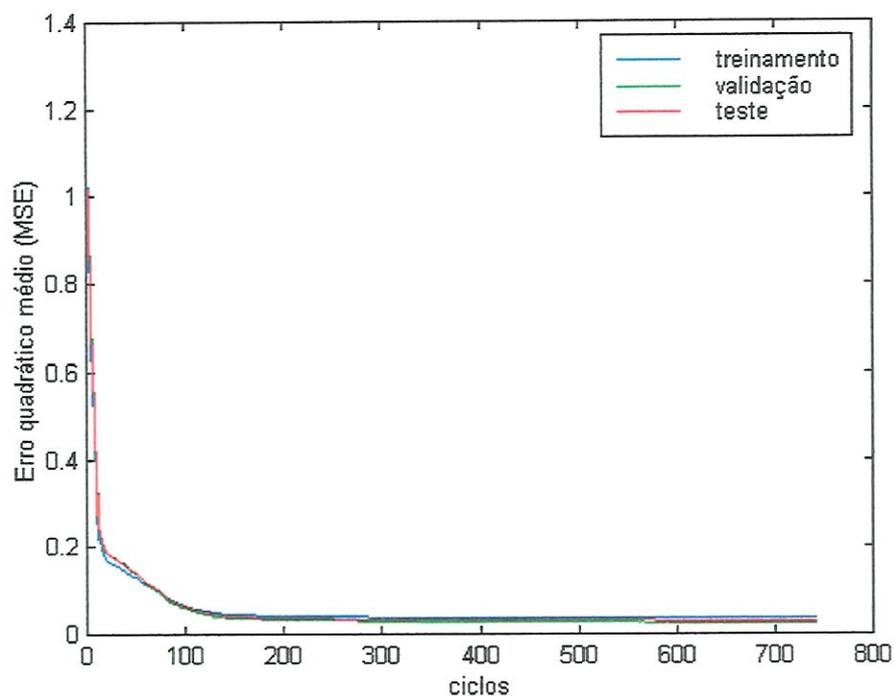


Figura B.17: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 3 neurônios na camada escondida.

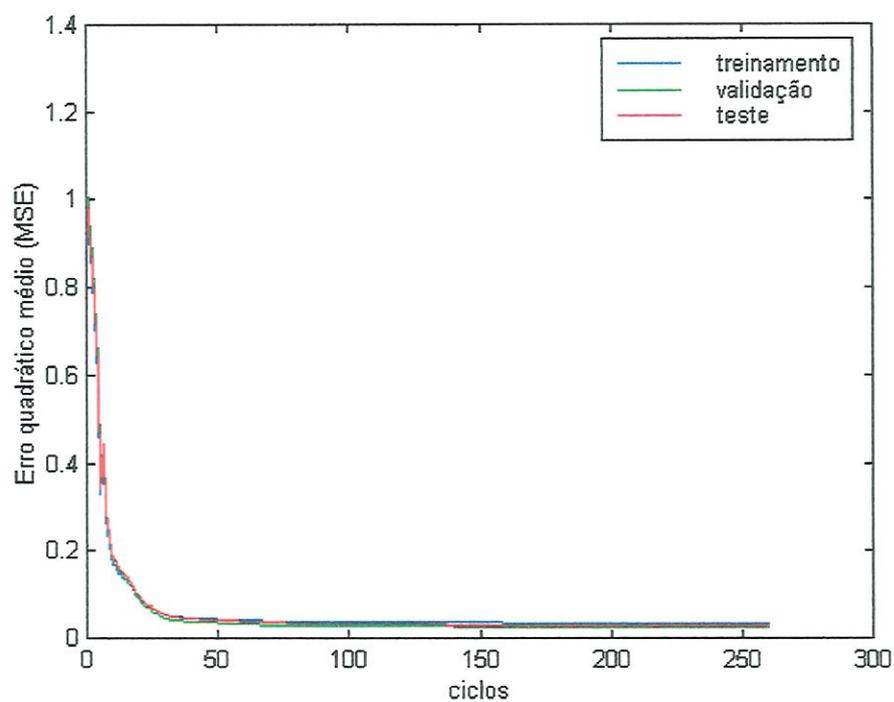


Figura B.18: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 5 neurônios na camada escondida.

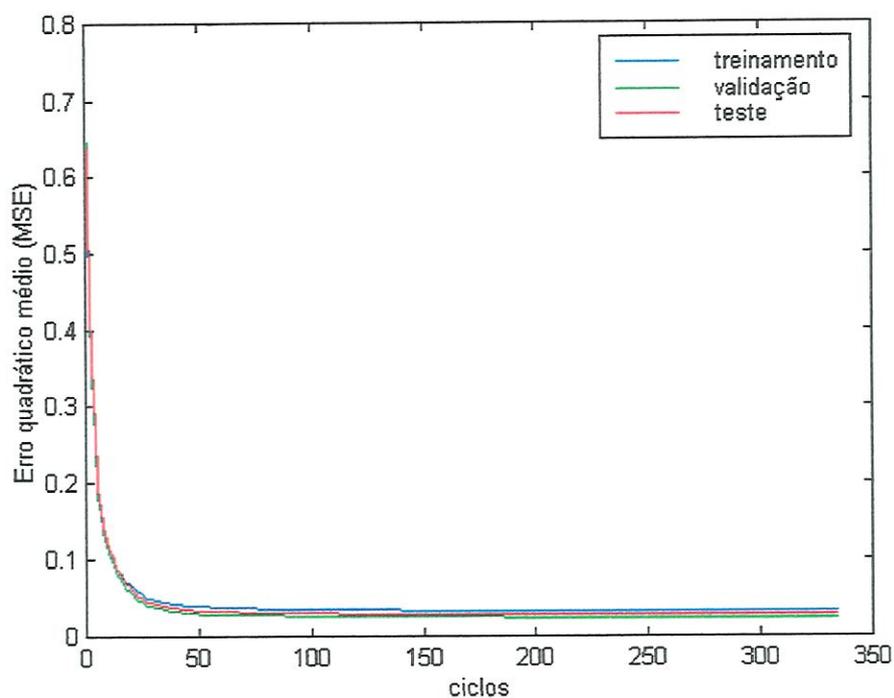


Figura B.19: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 7 neurônios na camada escondida.

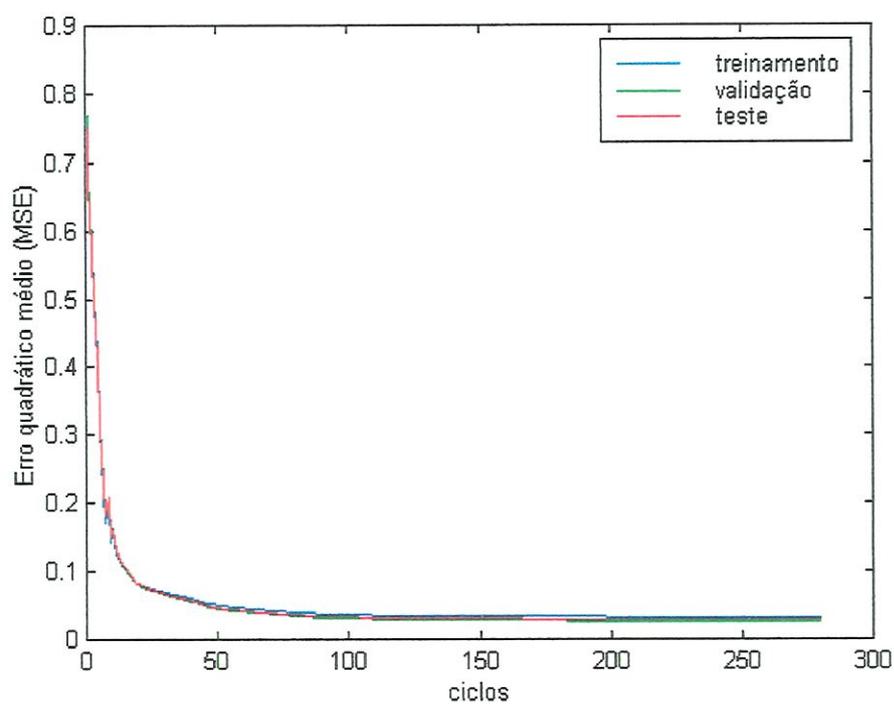


Figura B.20: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 9 neurônios na camada escondida.

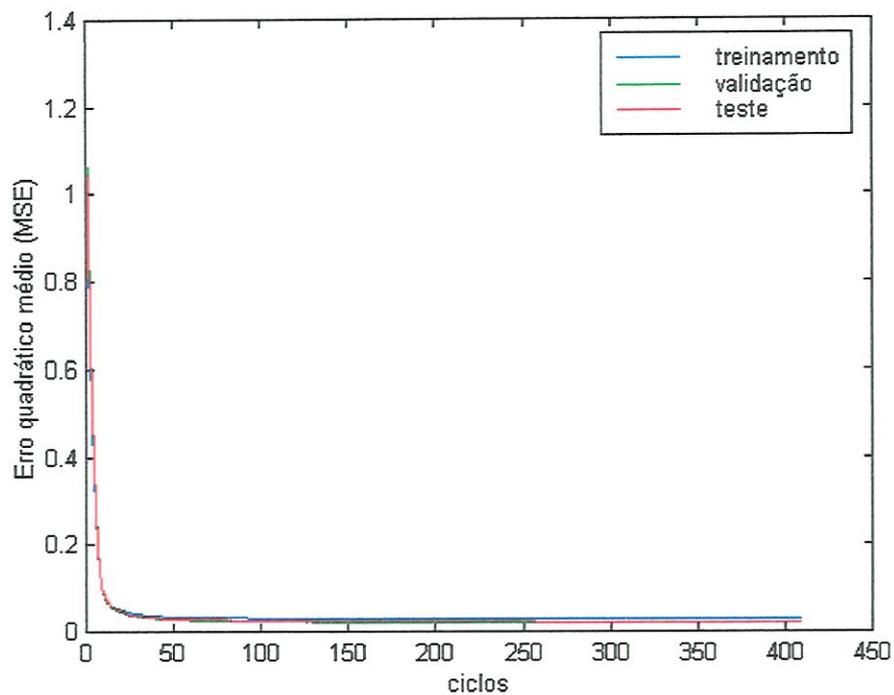


Figura B.21: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 11 neurônios na camada escondida.

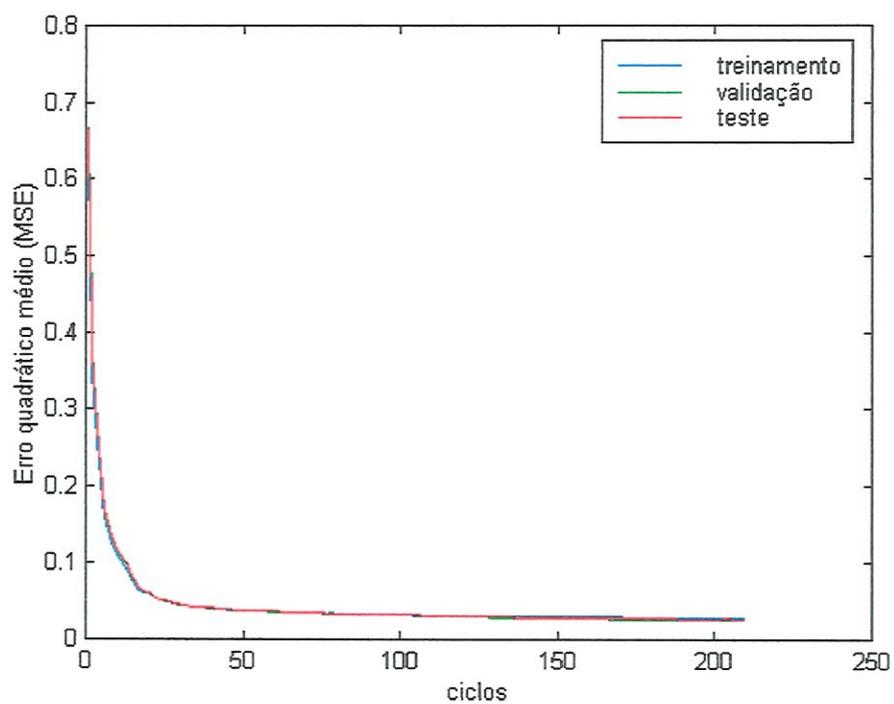


Figura B.22: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Rprop e 13 neurônios na camada escondida.

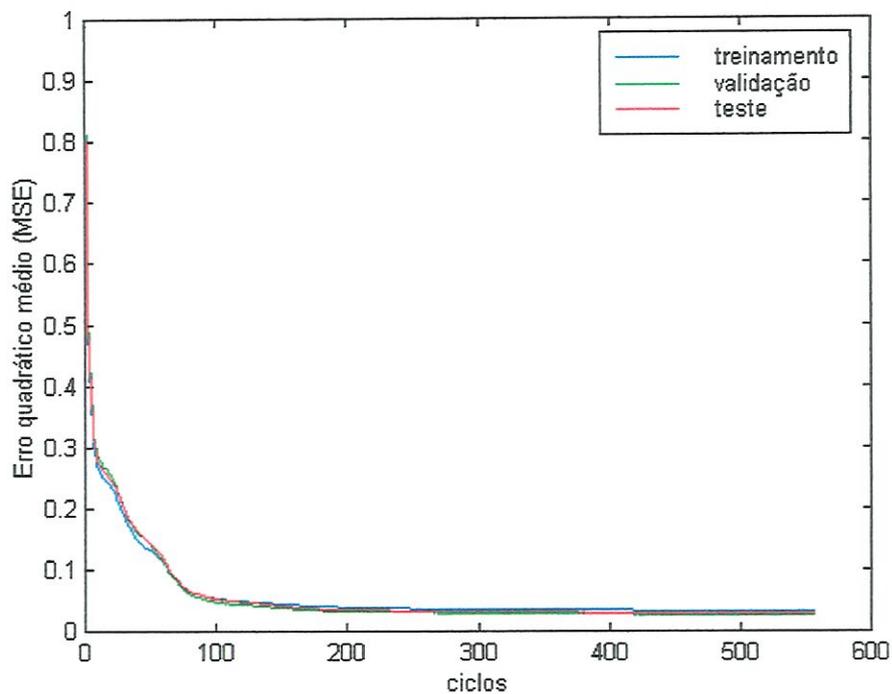


Figura B.23: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

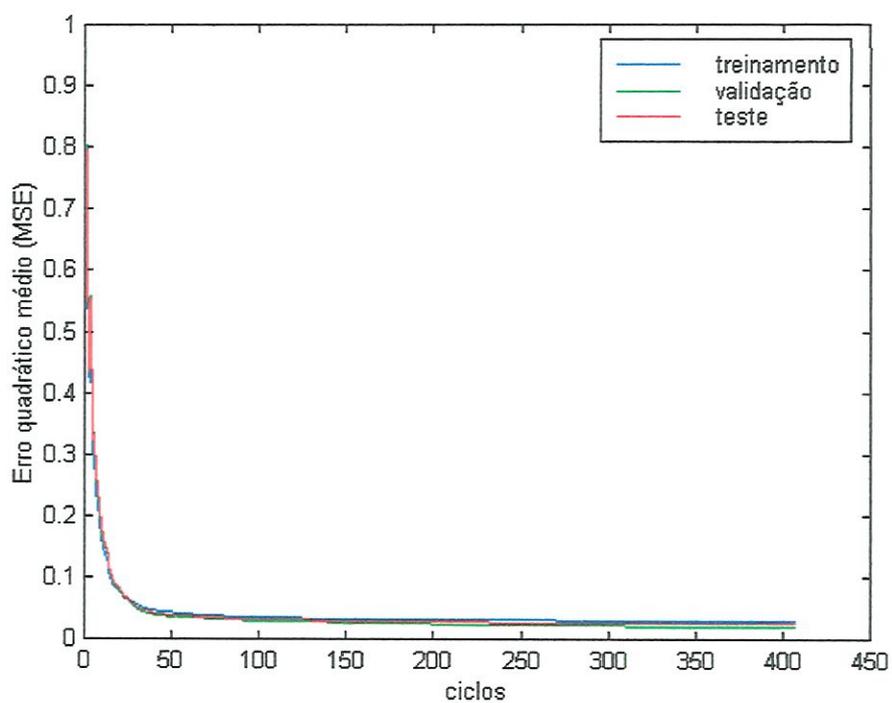


Figura B.24: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Rprop* e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

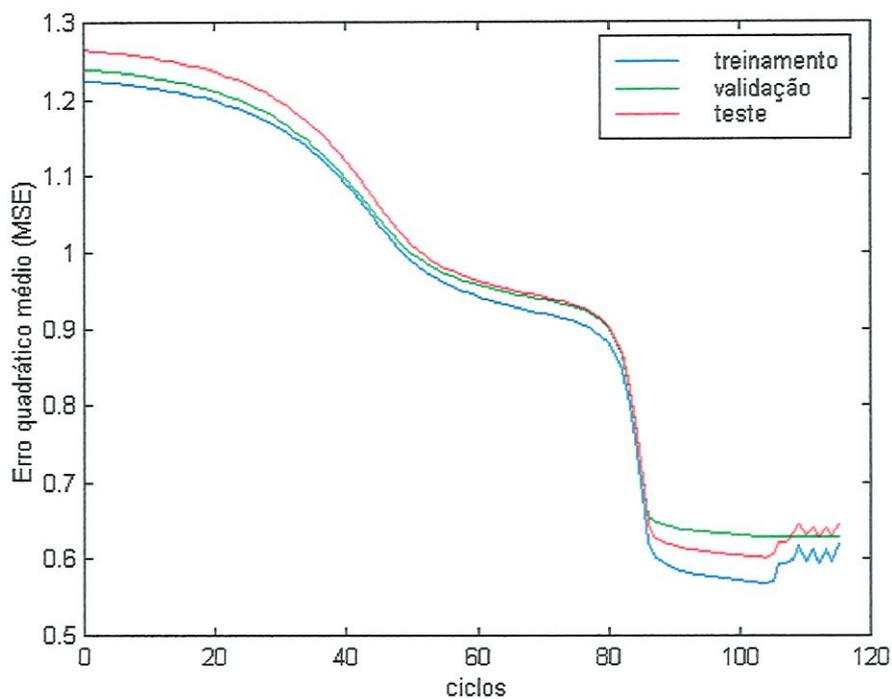


Figura B.25: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.

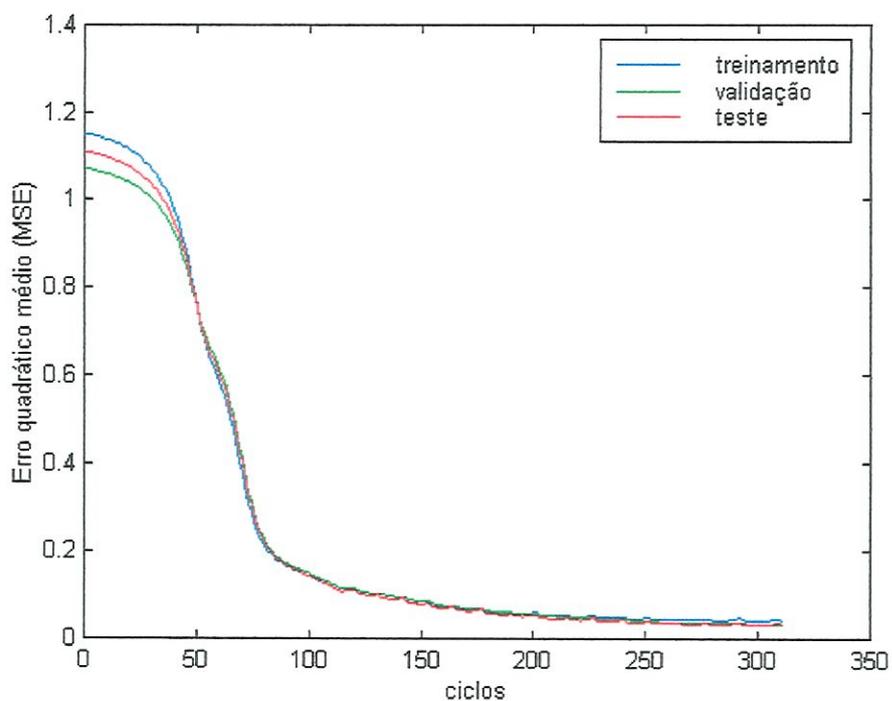


Figura B.26: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.

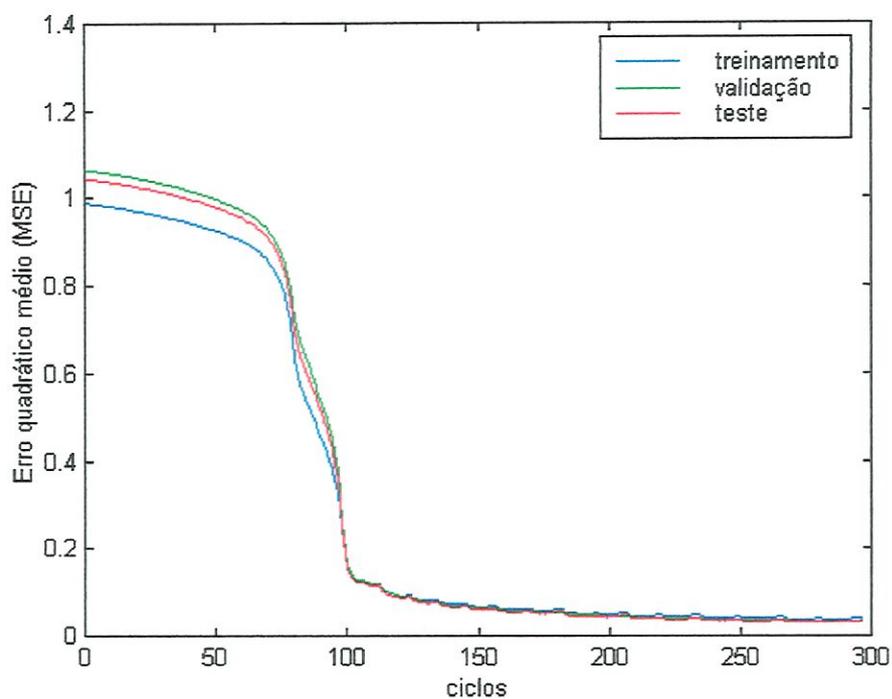


Figura B.27: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.

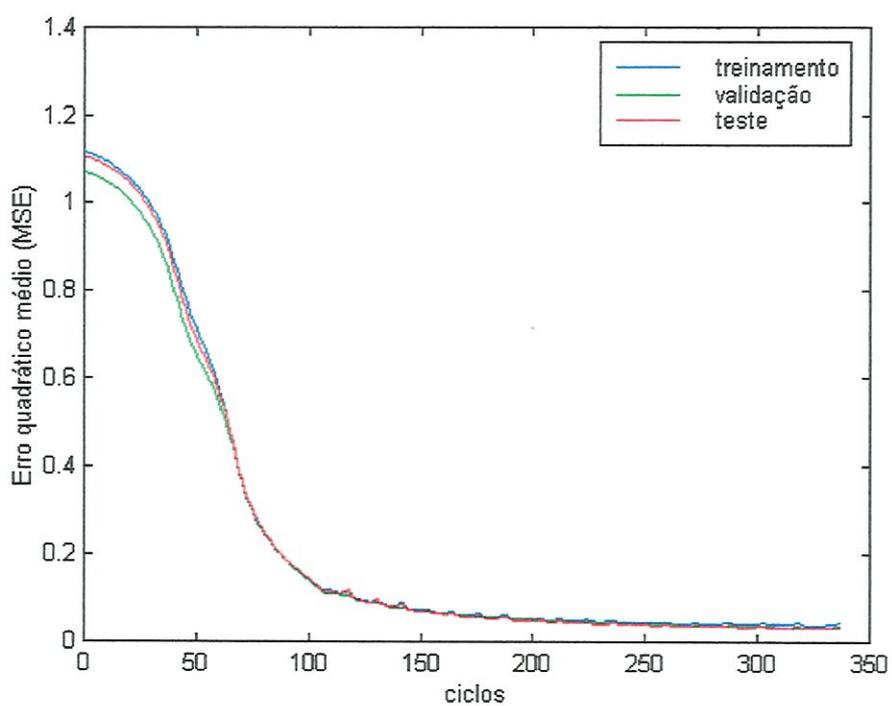


Figura B.28: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.

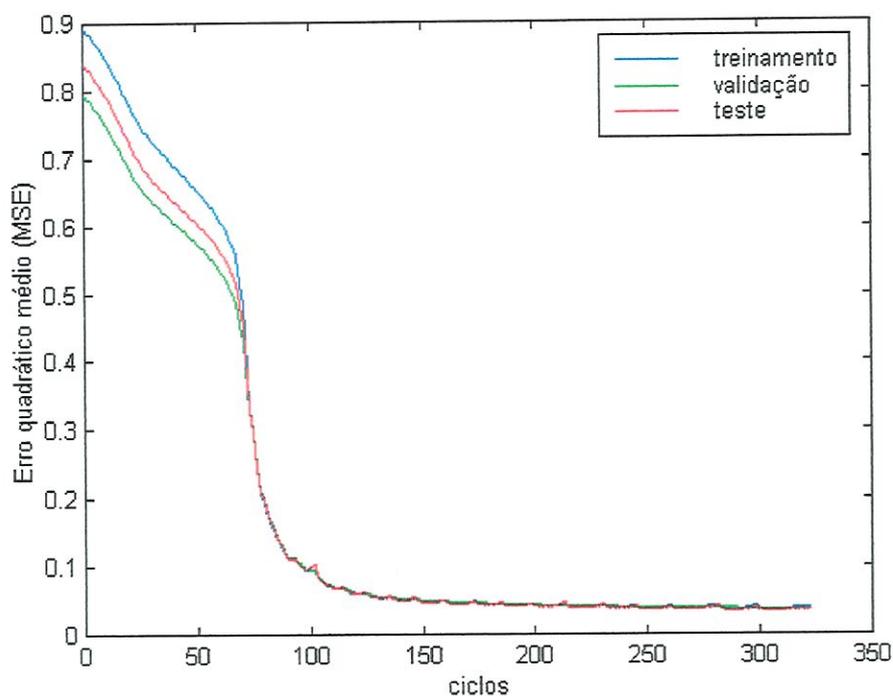


Figura B.29: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.

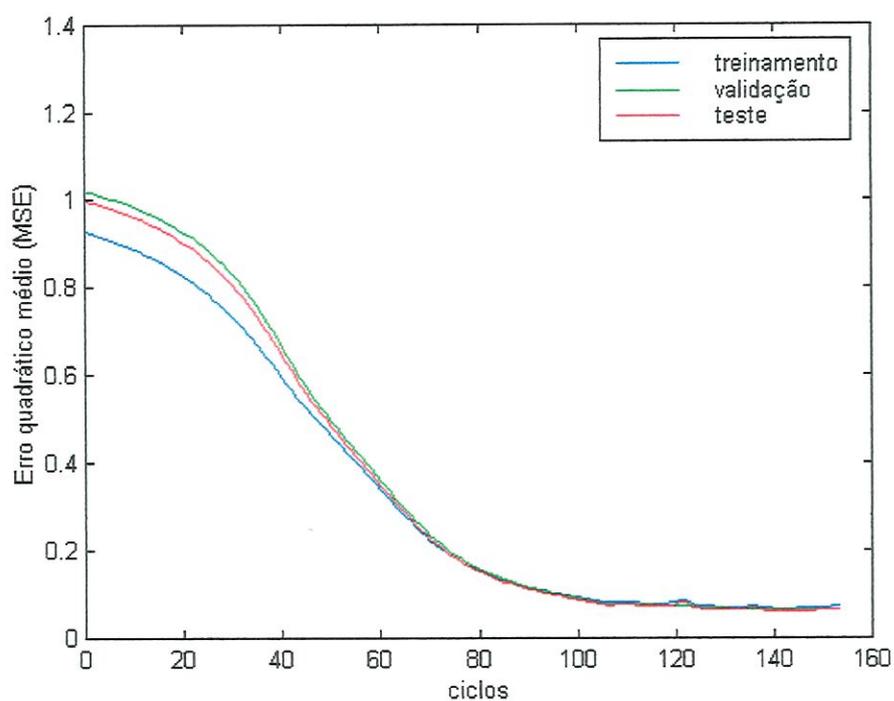


Figura B.30: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.

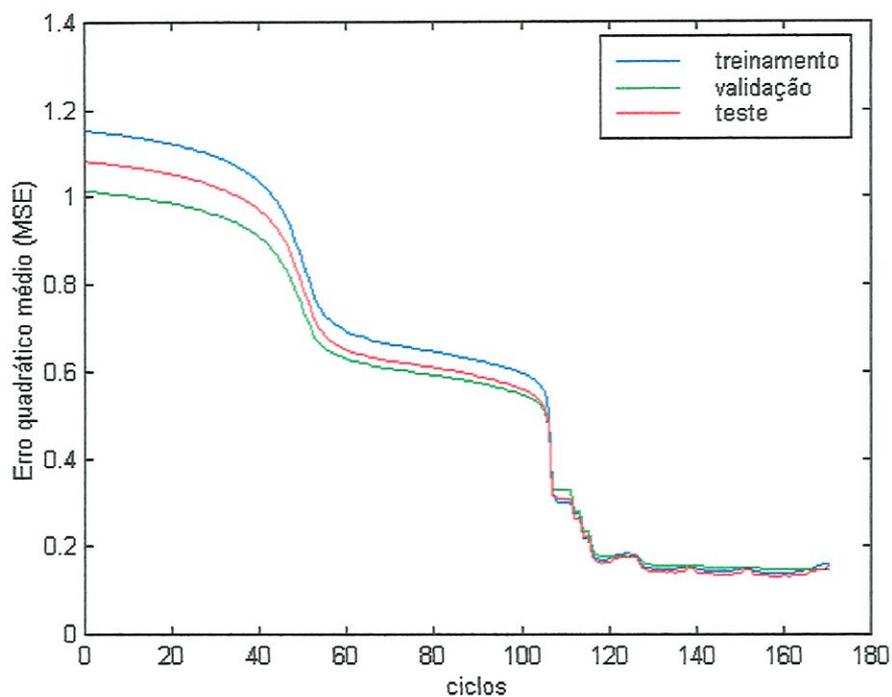


Figura B.31: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

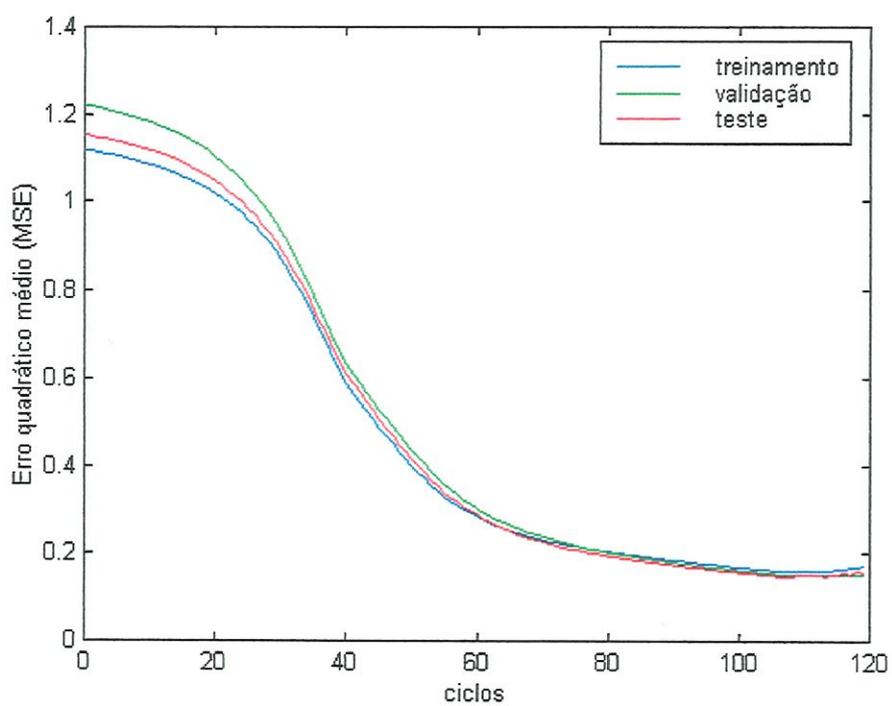


Figura B.32: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

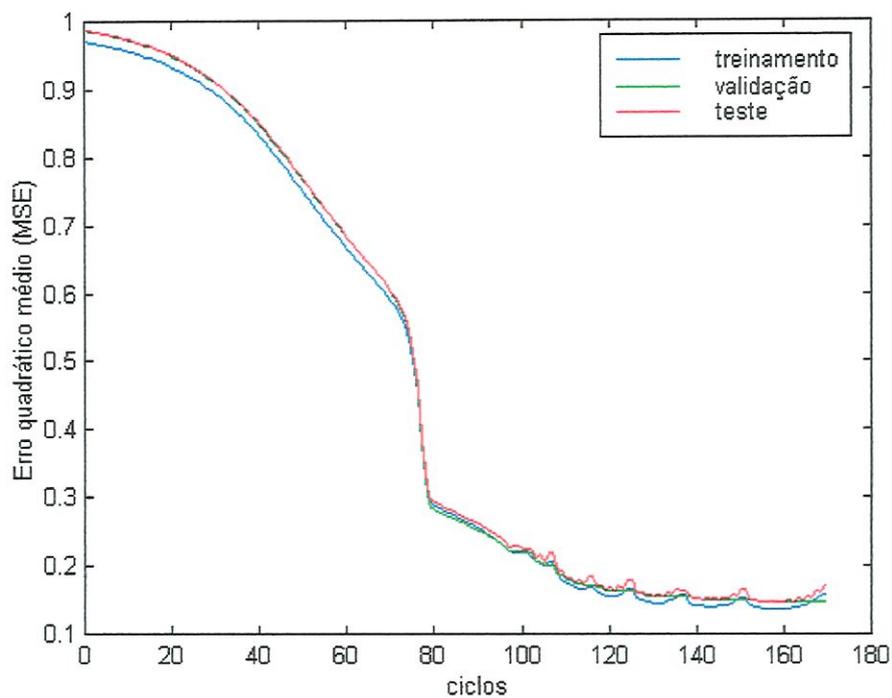


Figura B.33: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.

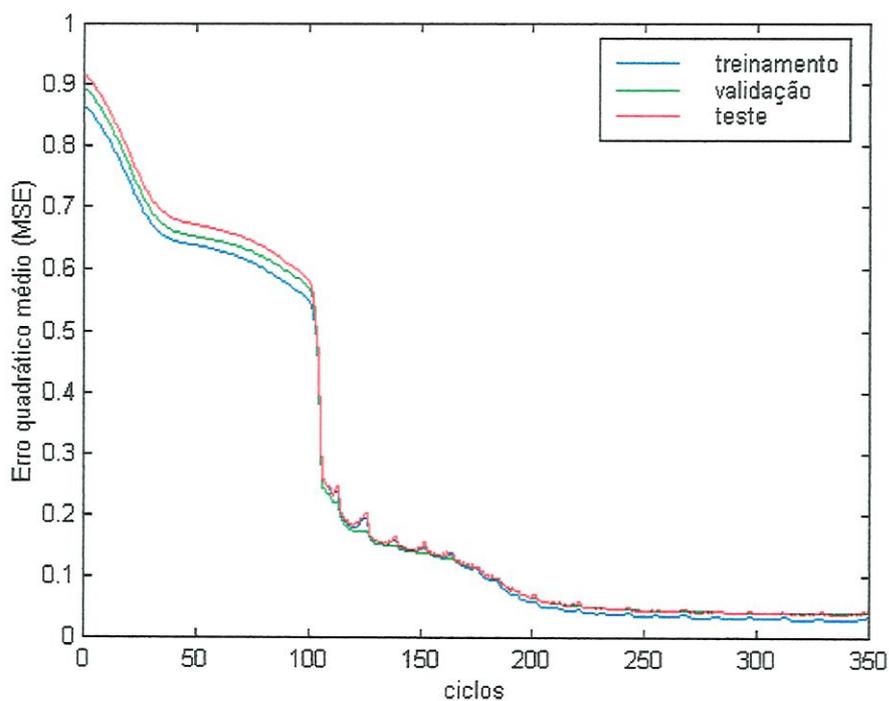


Figura B.34: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.

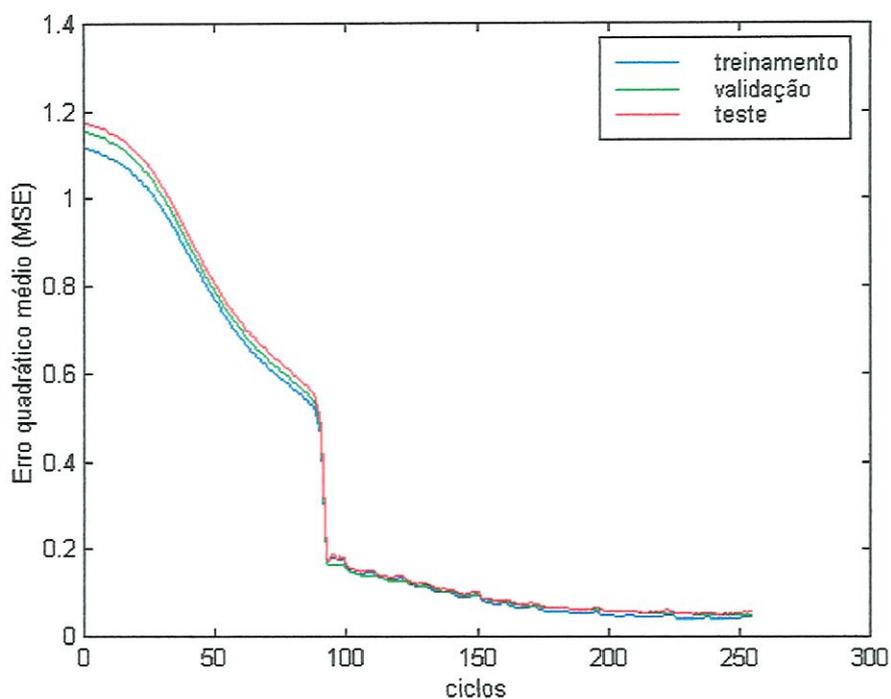


Figura B.35: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.

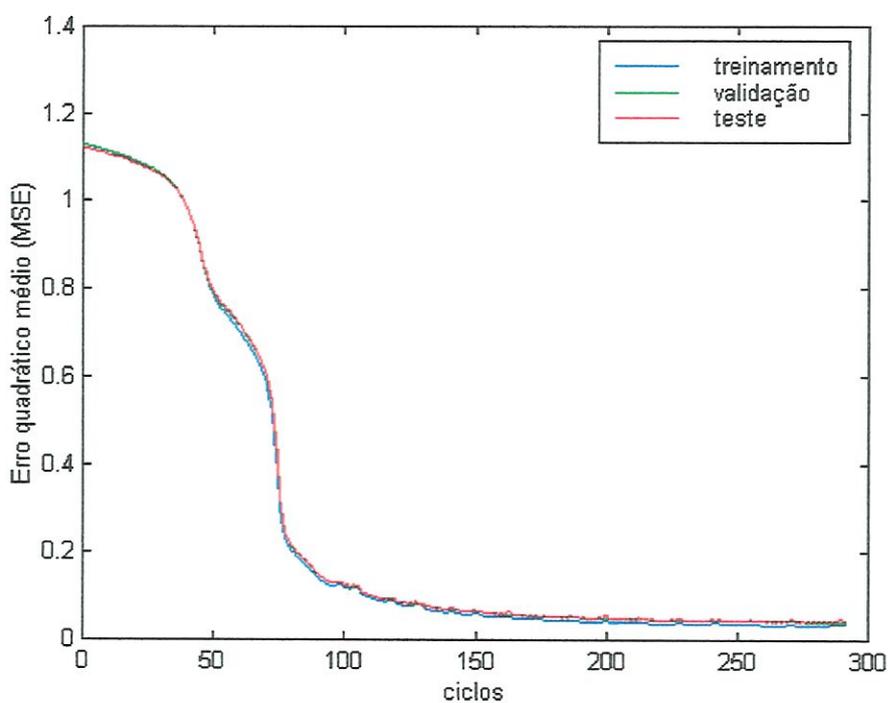


Figura B.36: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.

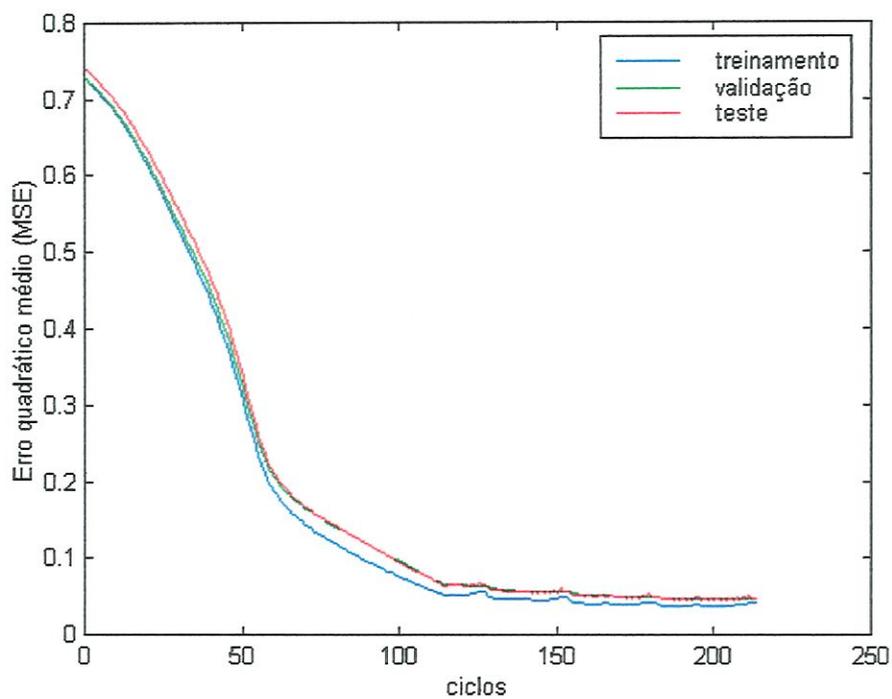


Figura B.37: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.

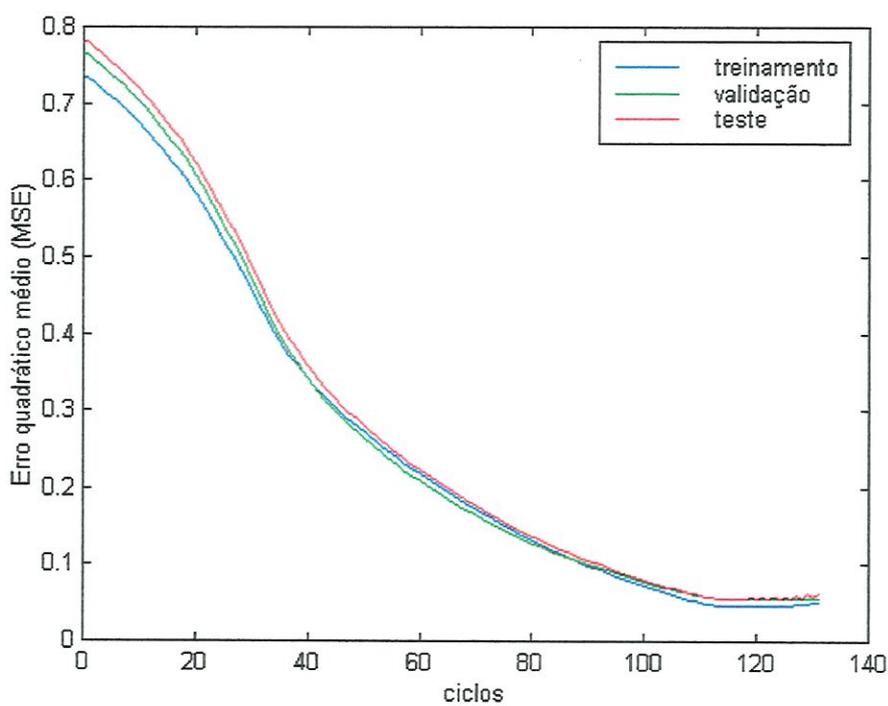


Figura B.38: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.

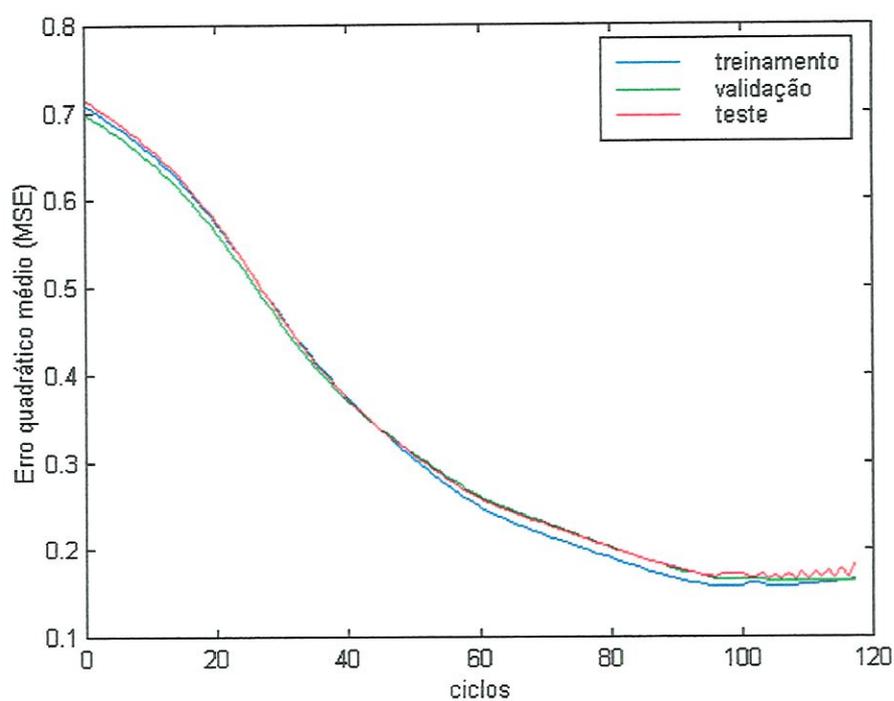


Figura B.39: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

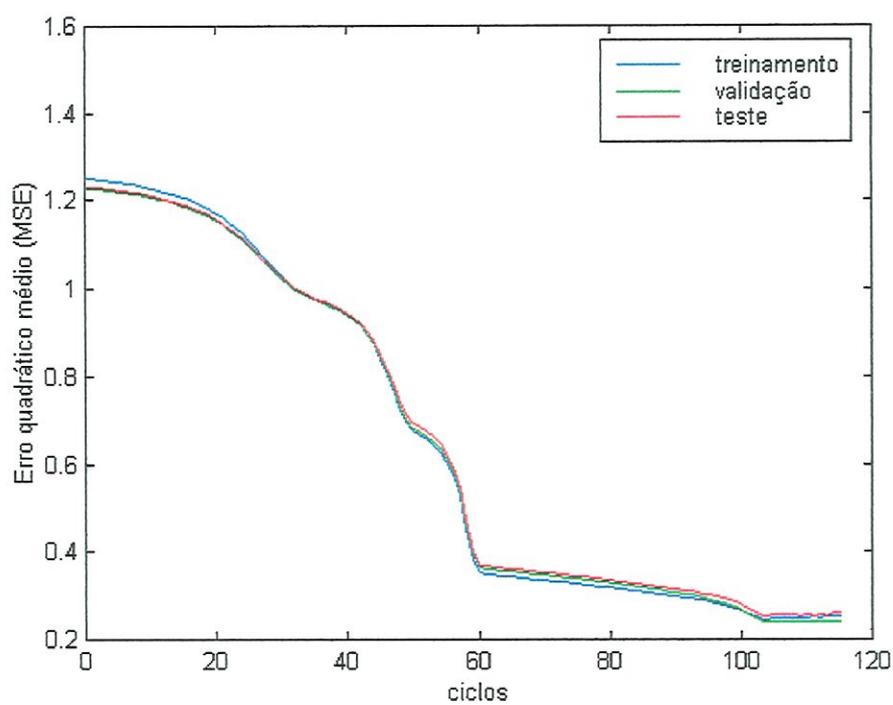


Figura B.40: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

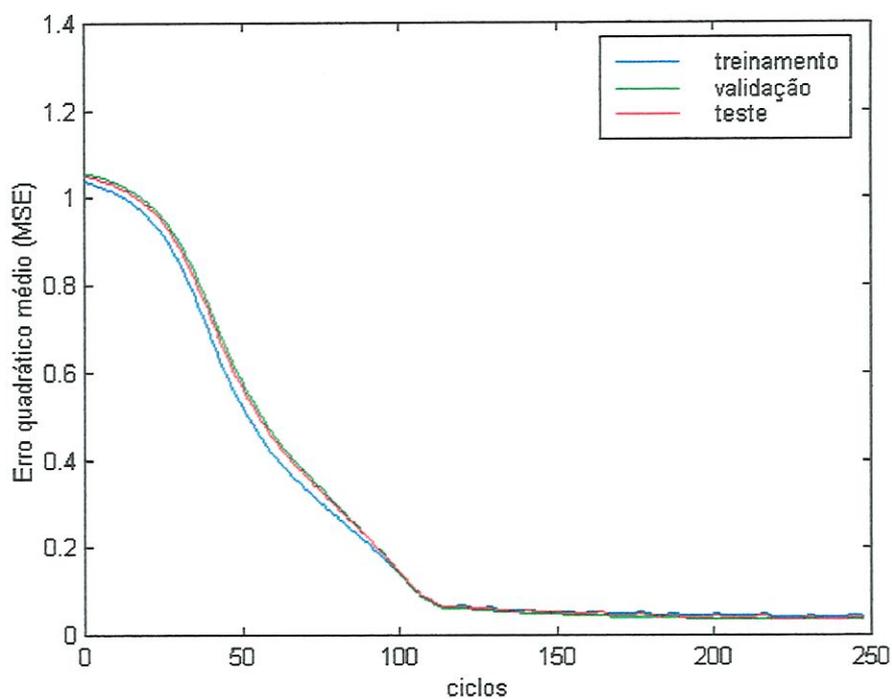


Figura B.41: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 3 neurônios na camada escondida.

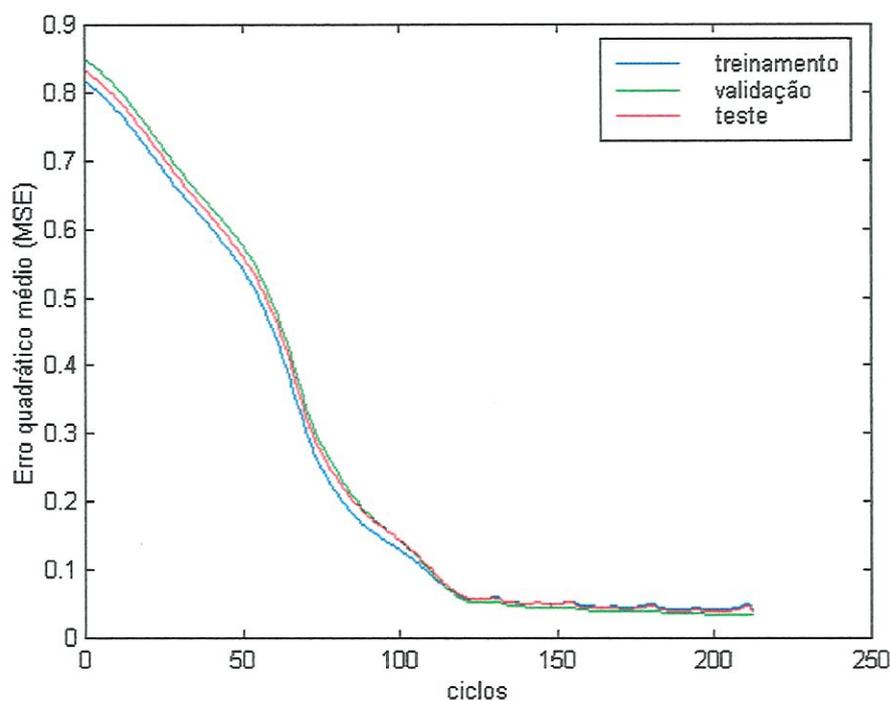


Figura B.42: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios na camada escondida.

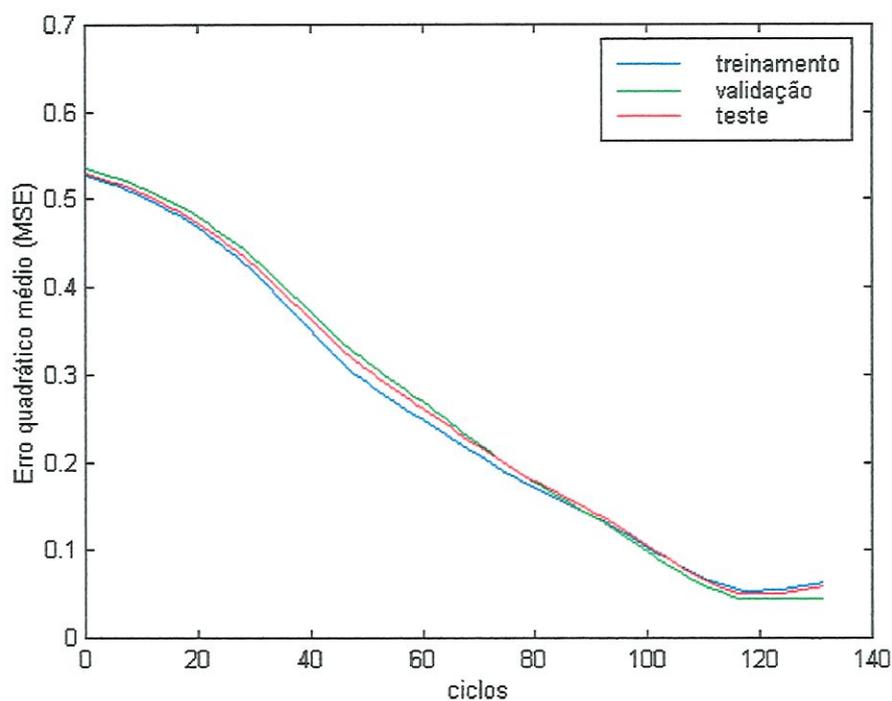


Figura B.43: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios na camada escondida.

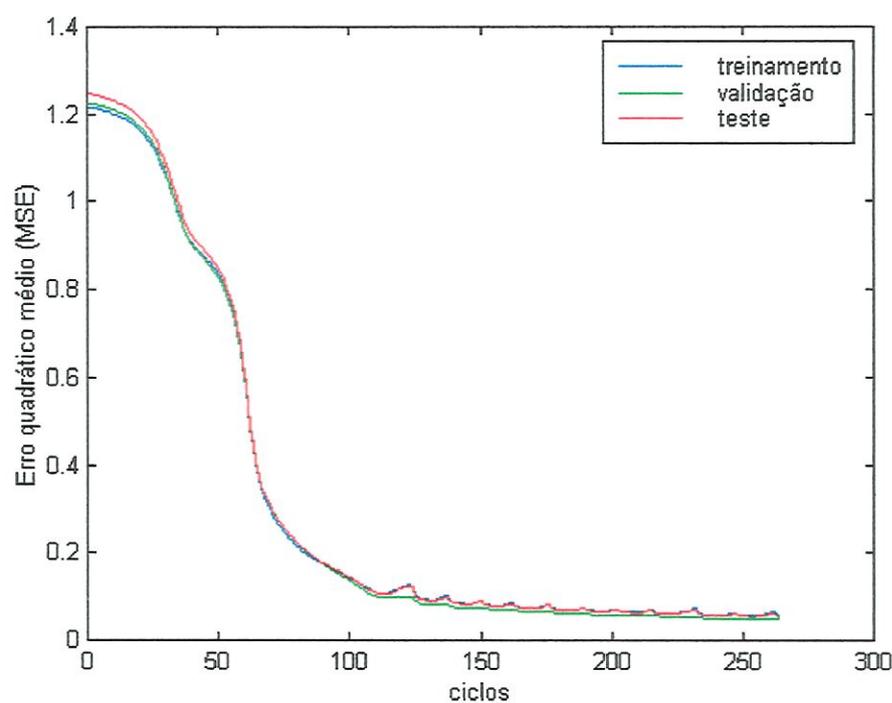


Figura B.44: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e 9 neurônios na camada escondida.

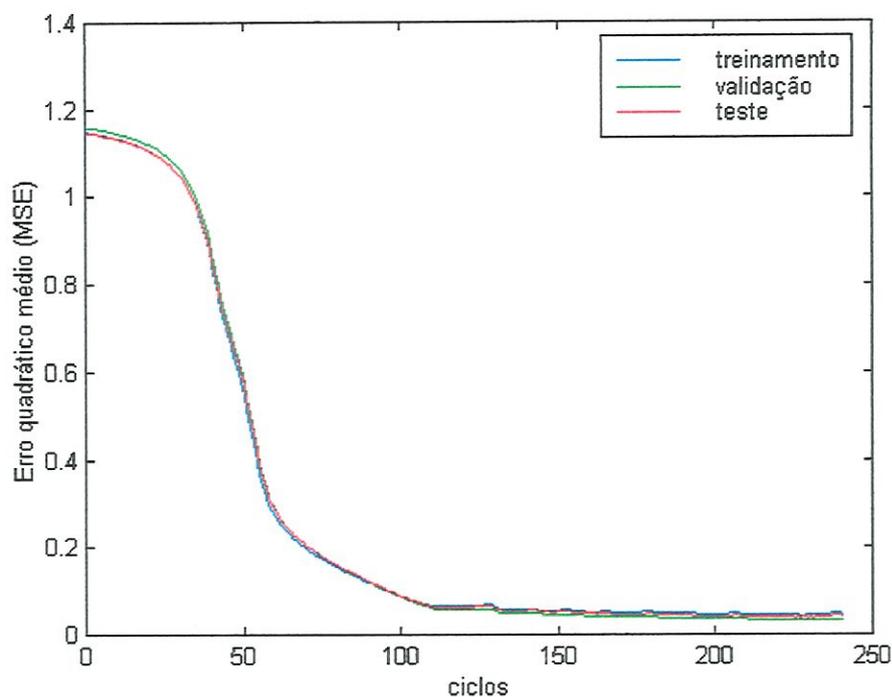


Figura B.45: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com taxa de aprendizado adaptativa e 11 neurônios na camada escondida.

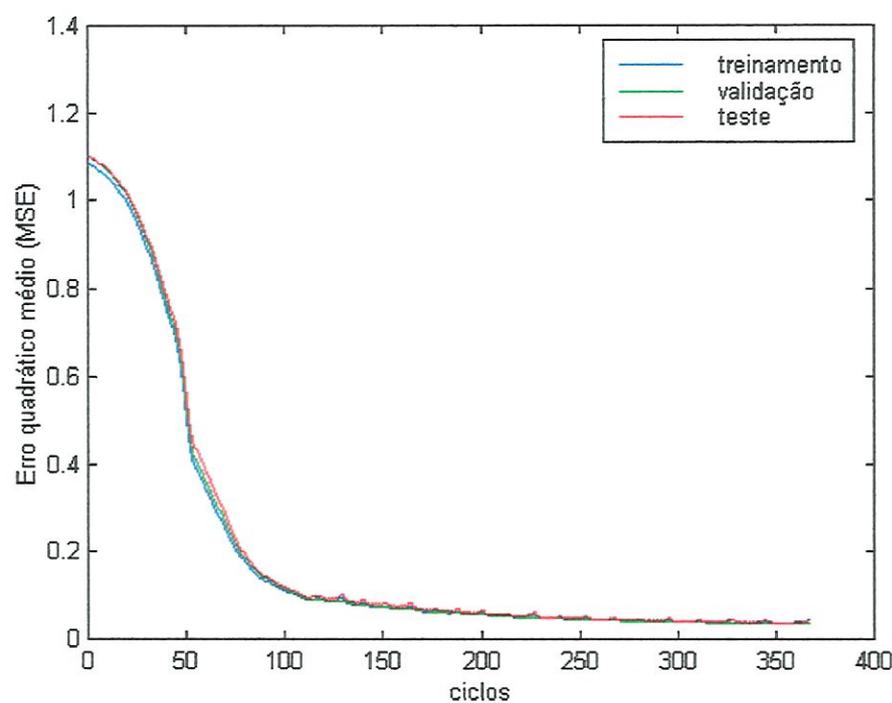


Figura B.46: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com taxa de aprendizado adaptativa e 13 neurônios na camada escondida.

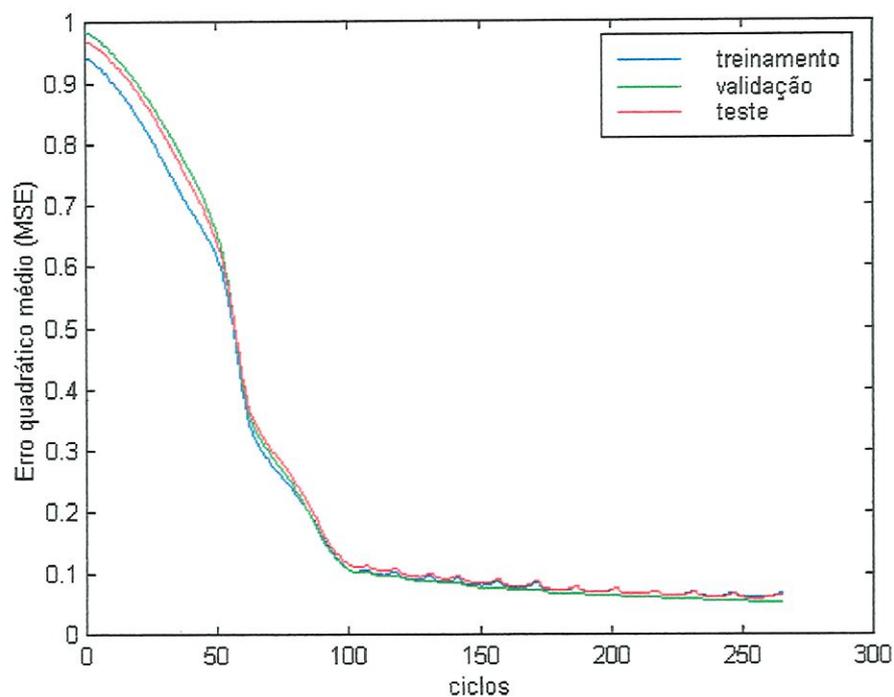


Figura B.47: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com taxa de aprendizado adaptativa e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

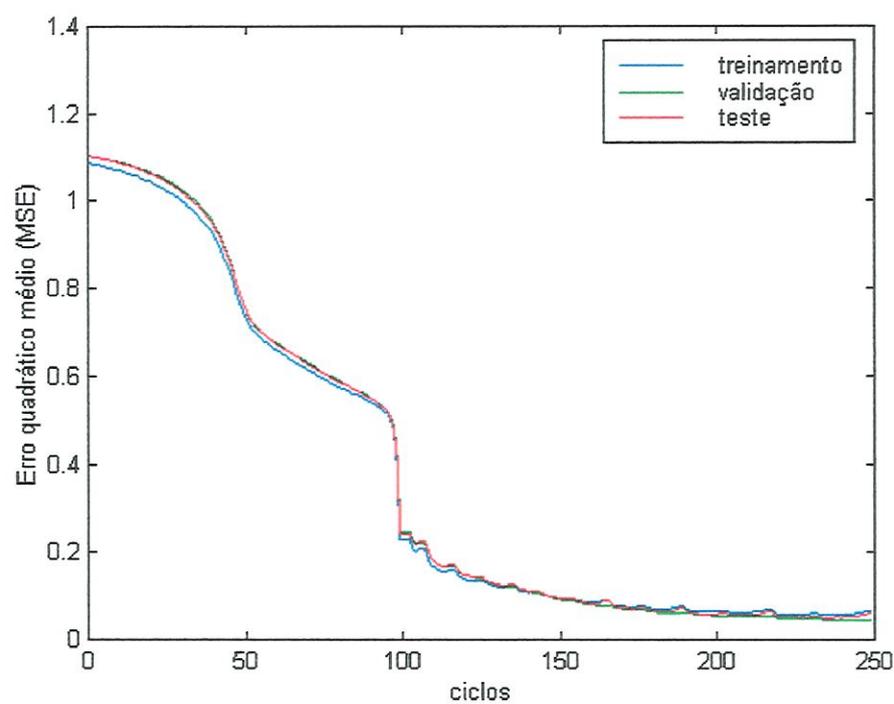


Figura B.48: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com taxa de aprendizado adaptativa e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

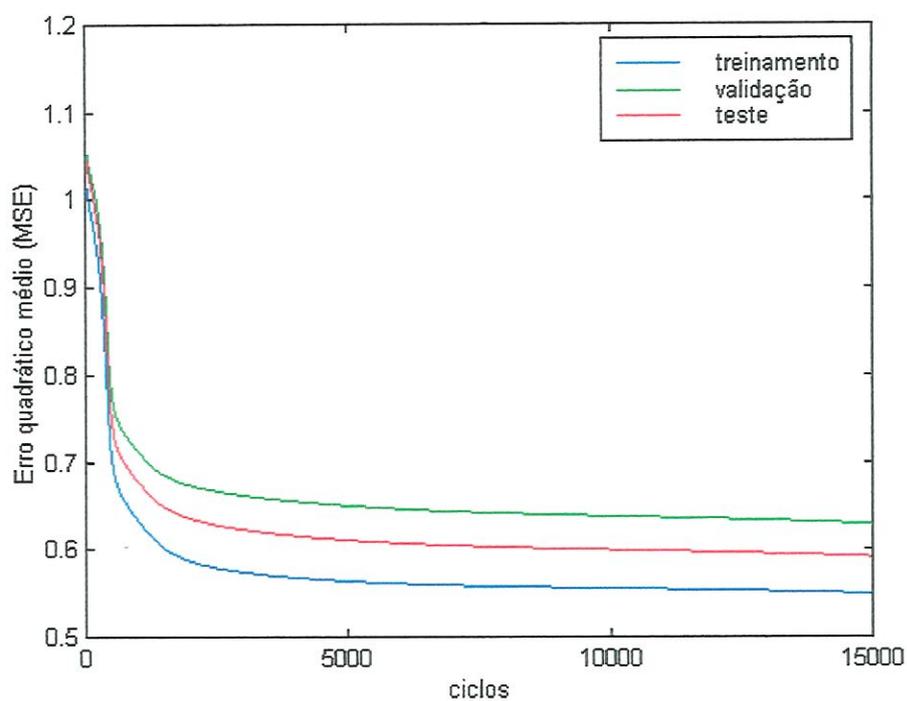


Figura B.49: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.

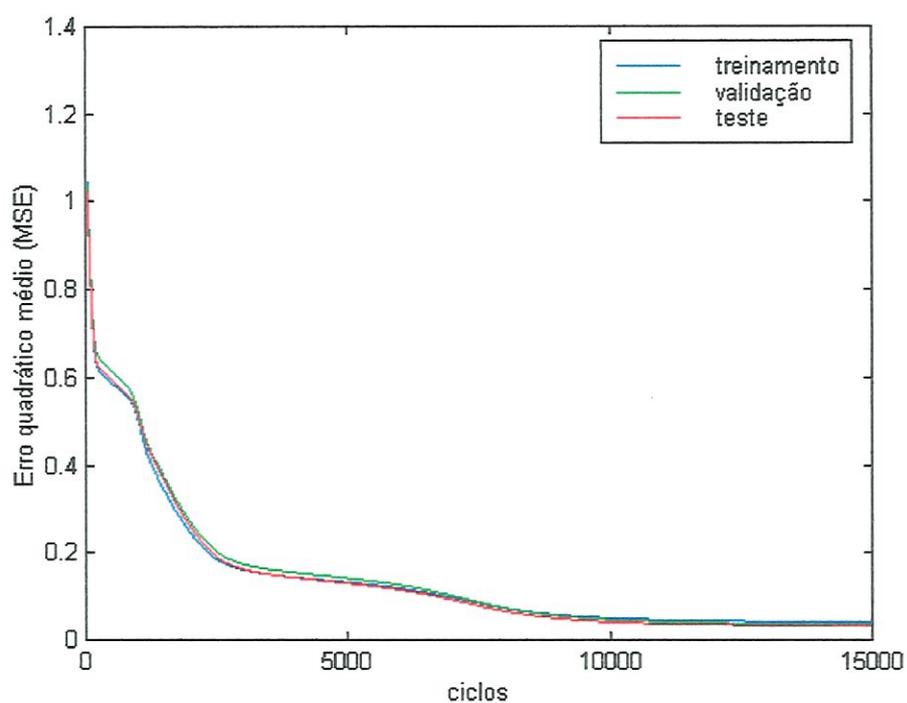


Figura B.50: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.

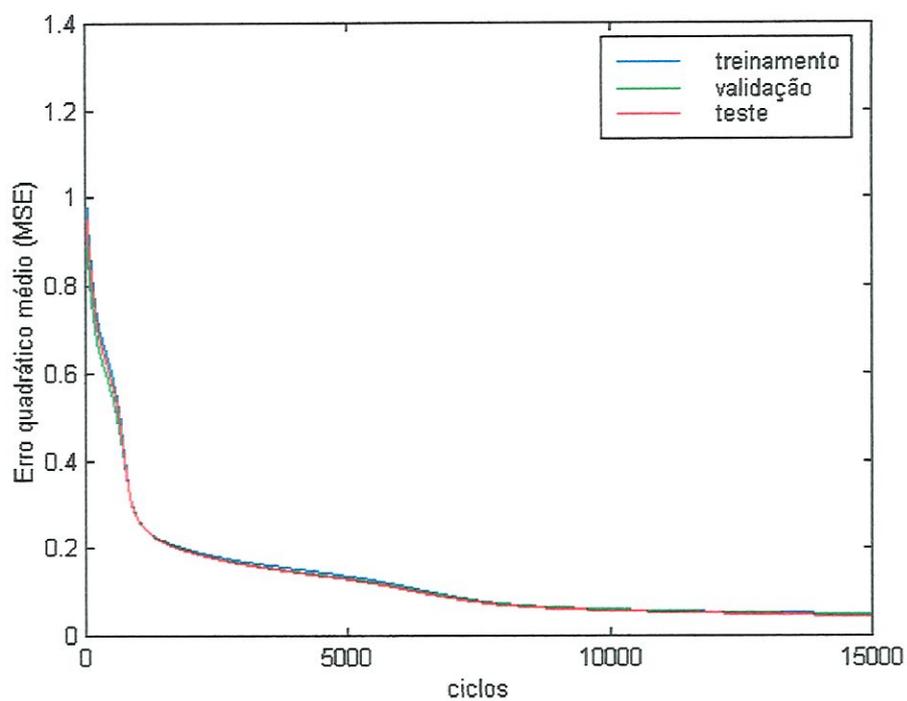


Figura B.51: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 7 neurônios na camada escondida.

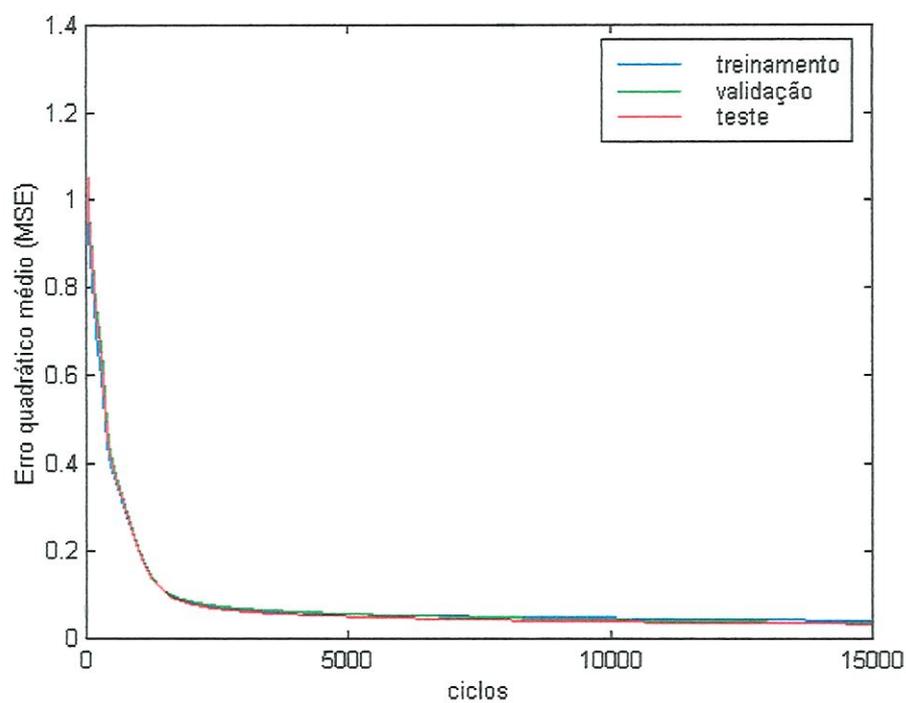


Figura B.52: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 9 neurônios na camada escondida.

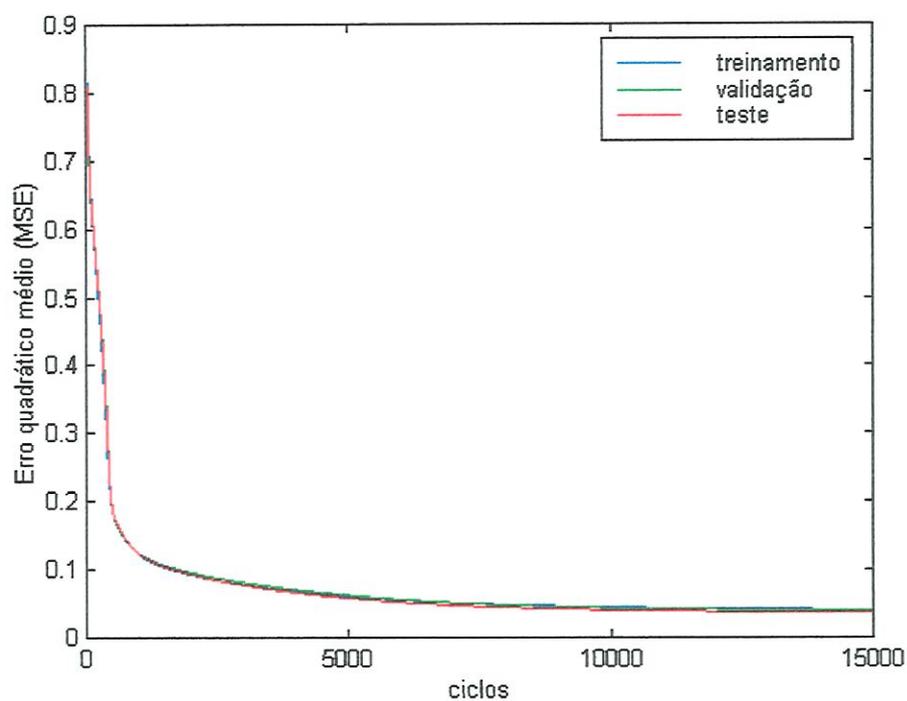


Figura B.53: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 11 neurônios na camada escondida.

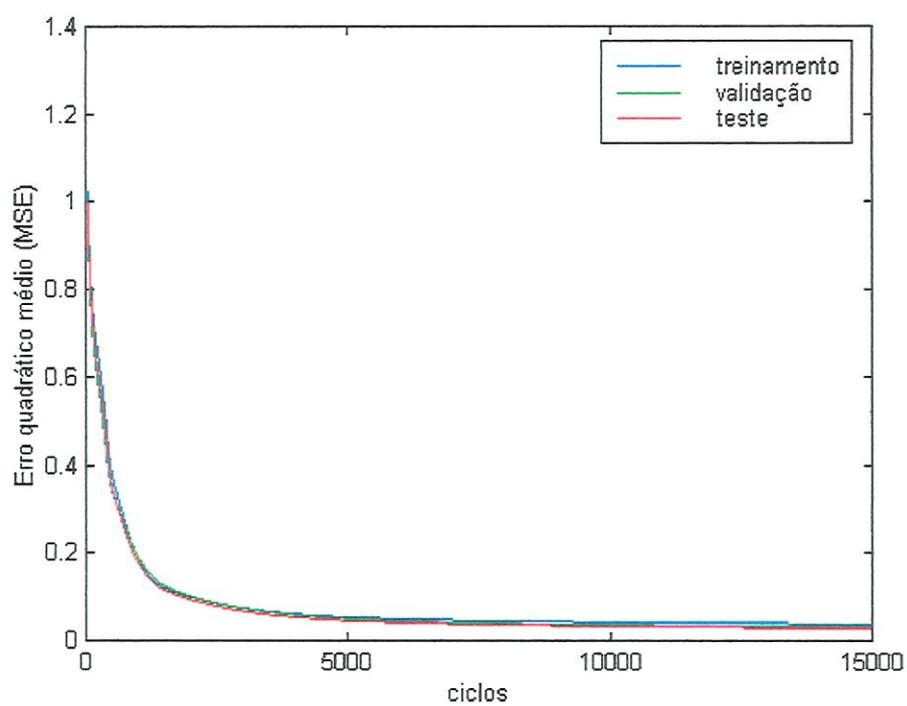


Figura B.54: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 13 neurônios na camada escondida.

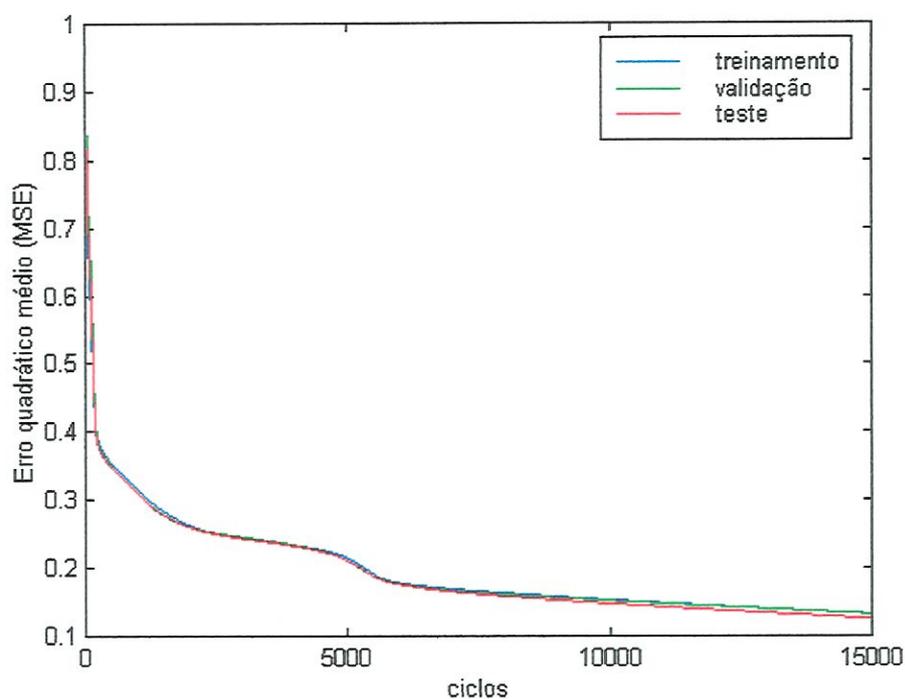


Figura B.55: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

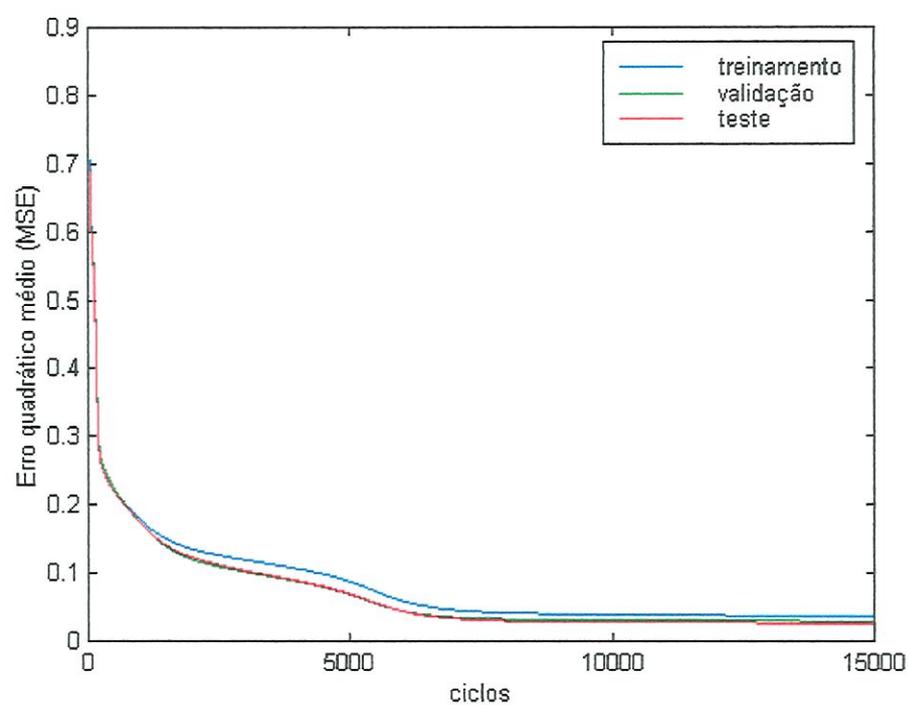


Figura B.56: Desempenho do treinamento do primeiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

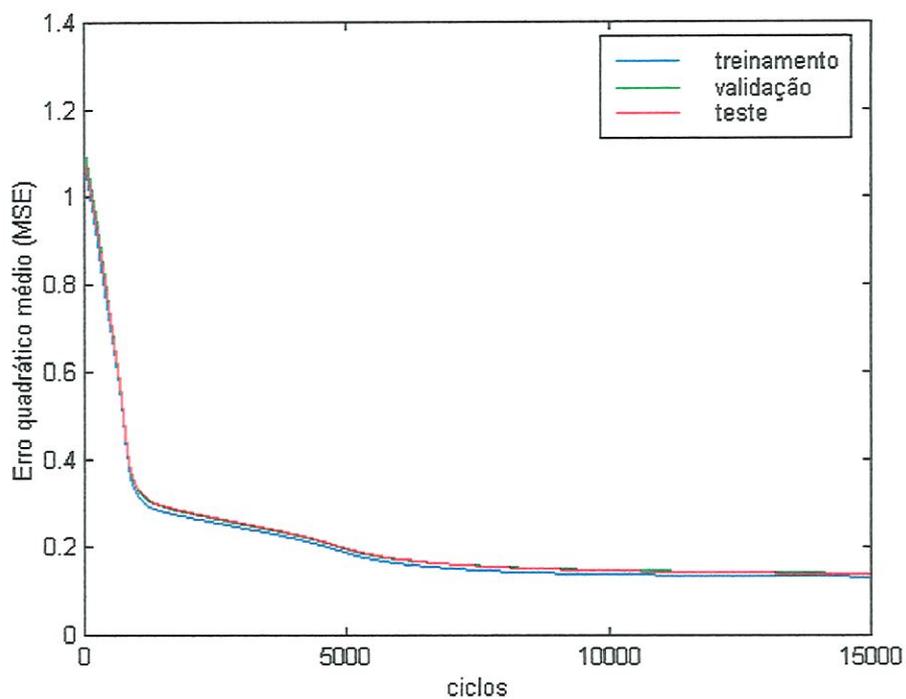


Figura B.57: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.

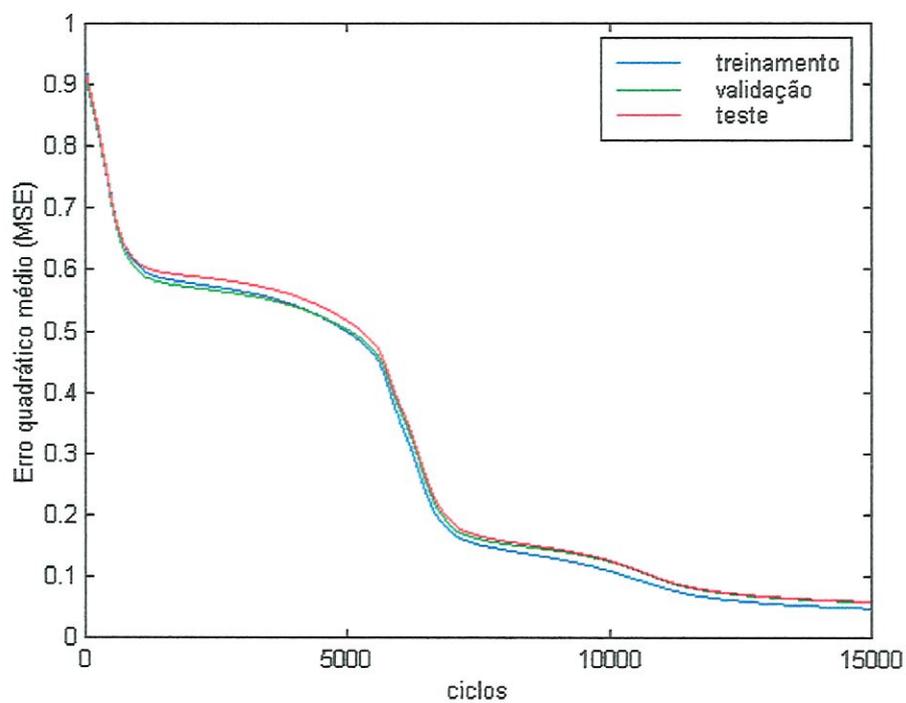


Figura B.58: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.

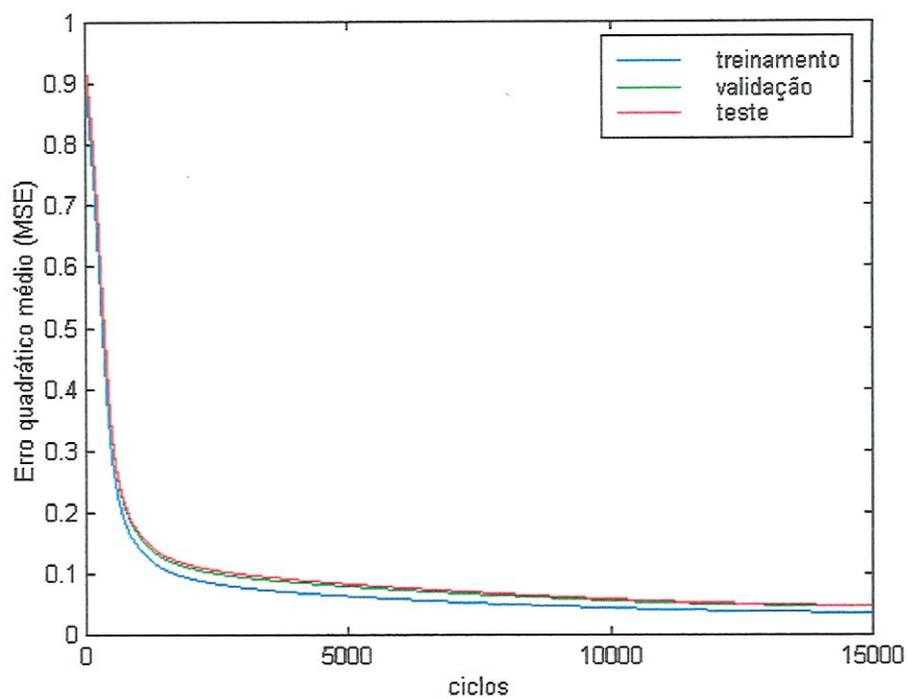


Figura B.59: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios na camada escondida.

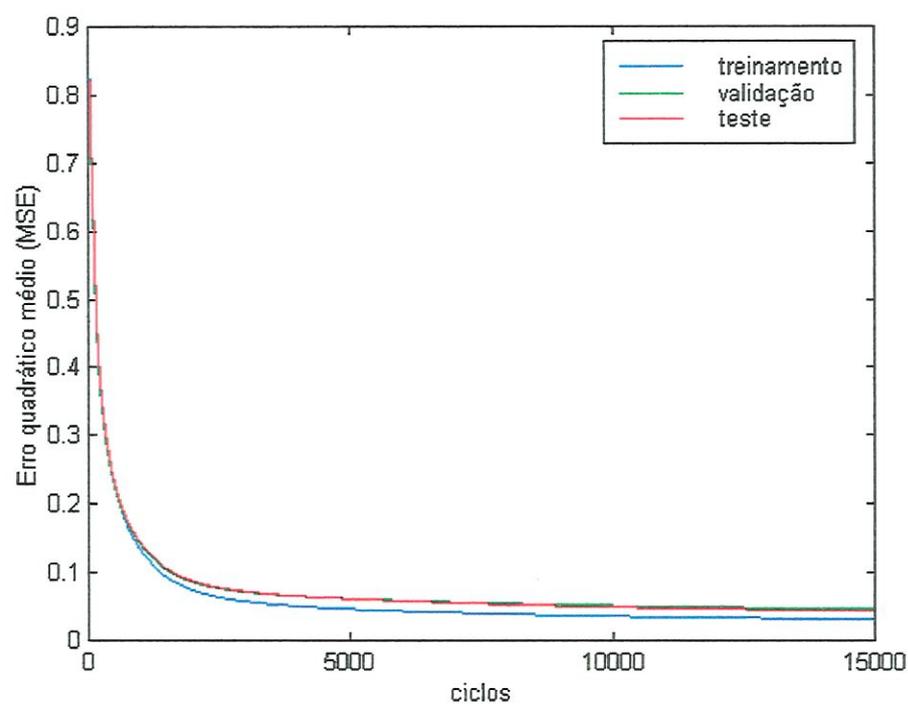


Figura B.60: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 9 neurônios na camada escondida.

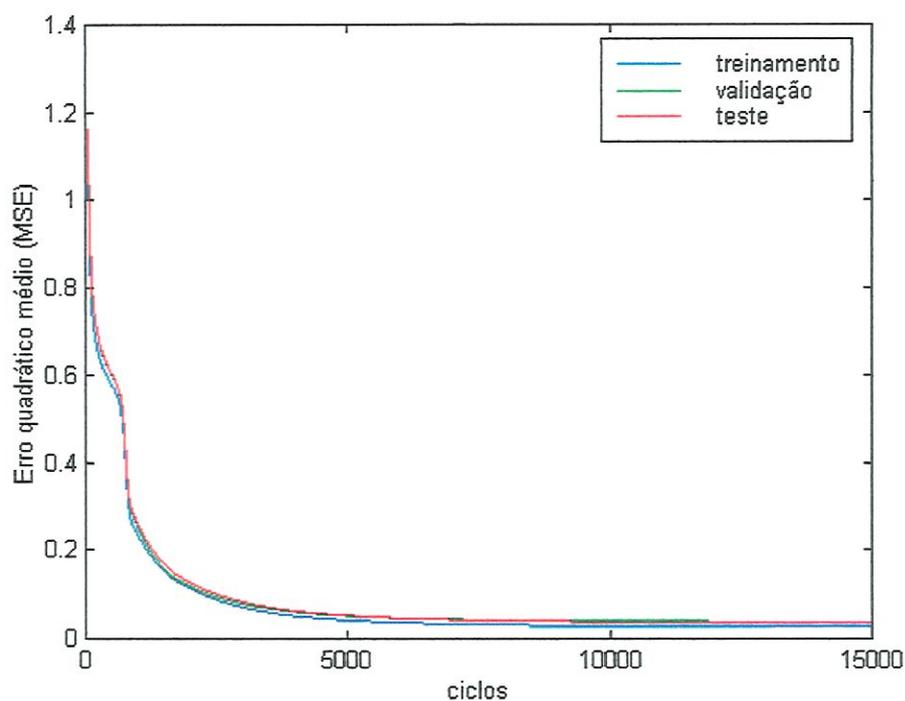


Figura B.61: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 11 neurônios na camada escondida.

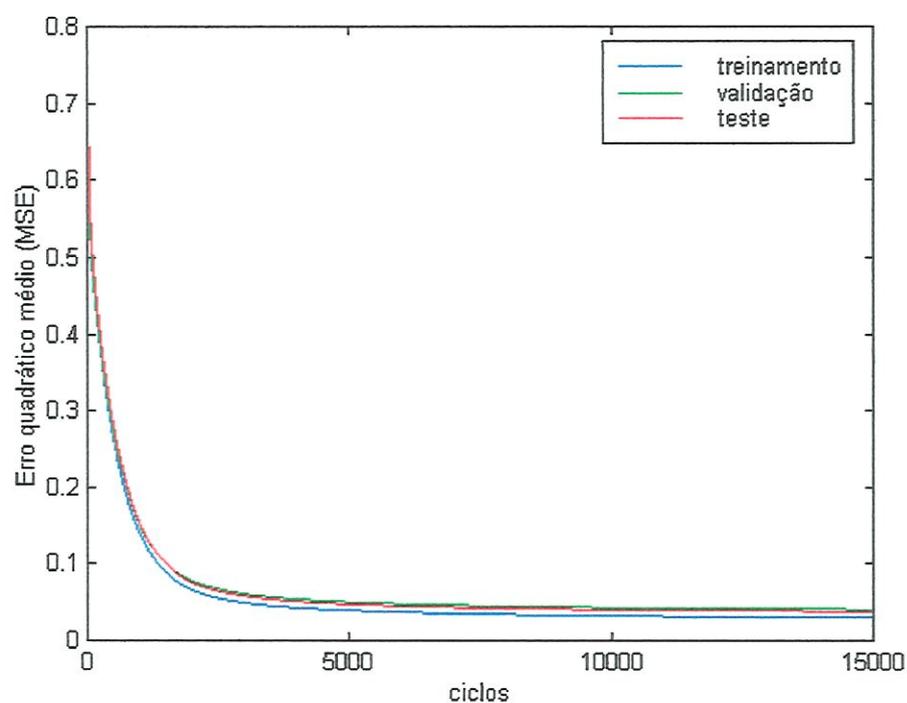


Figura B.62: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 13 neurônios na camada escondida.

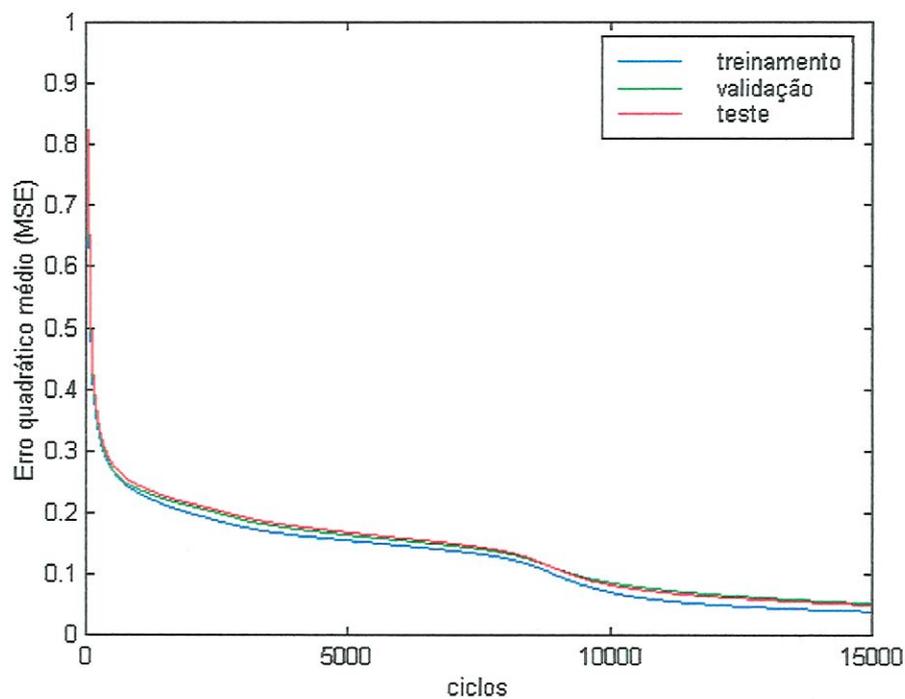


Figura B.63: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

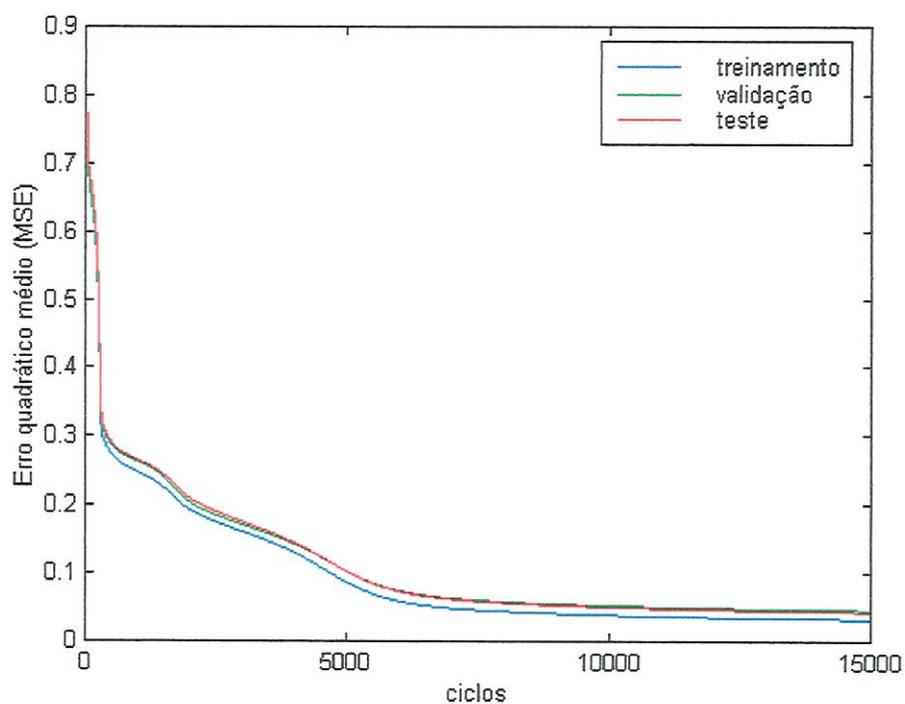


Figura B.64: Desempenho do treinamento do segundo conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

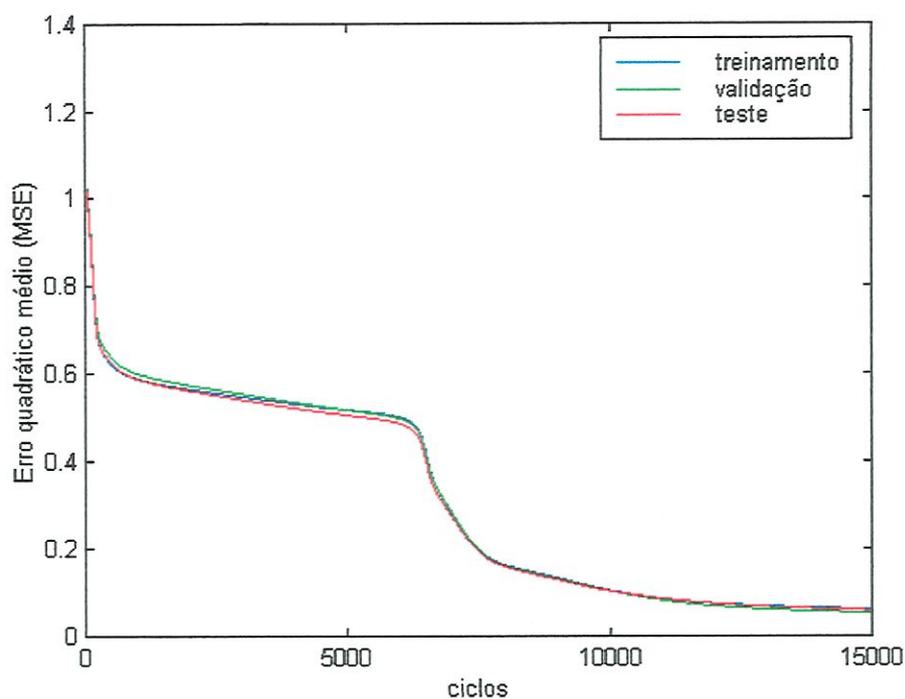


Figura B.65: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 3 neurônios na camada escondida.

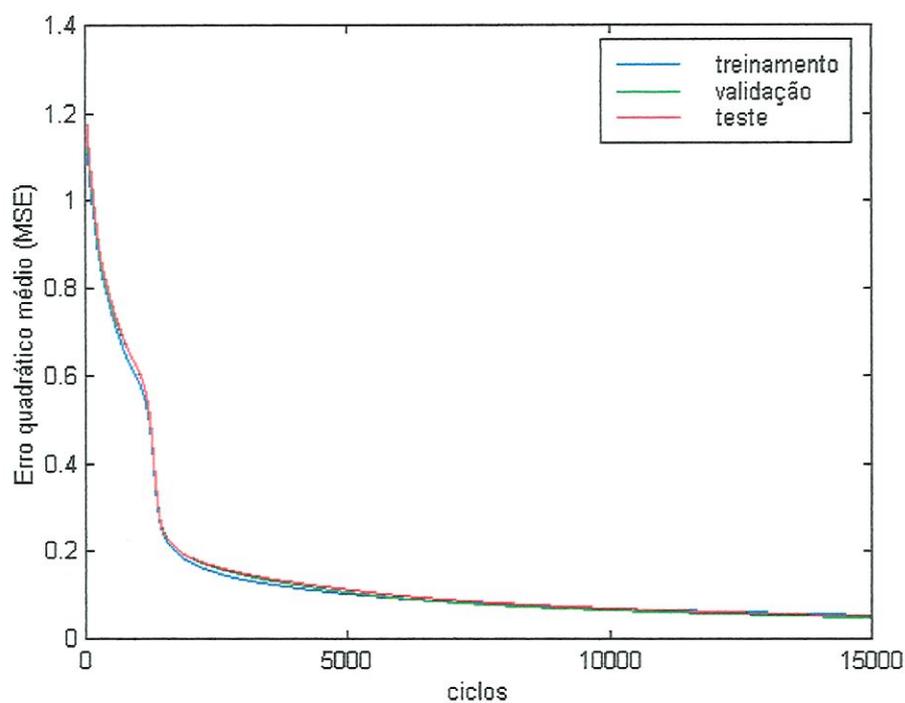


Figura B.66: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios na camada escondida.

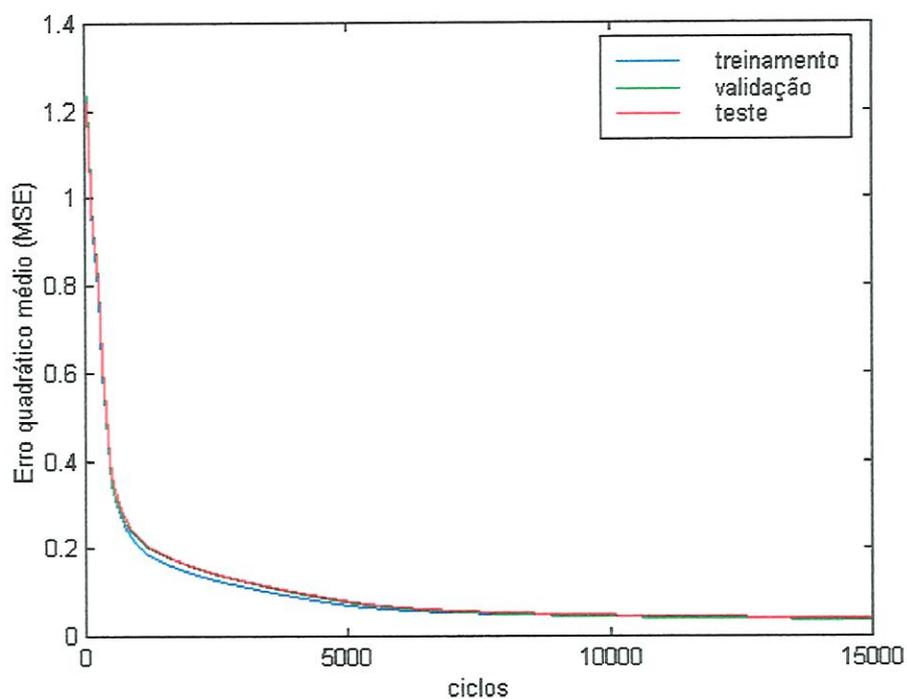


Figura B.67: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios na camada escondida.

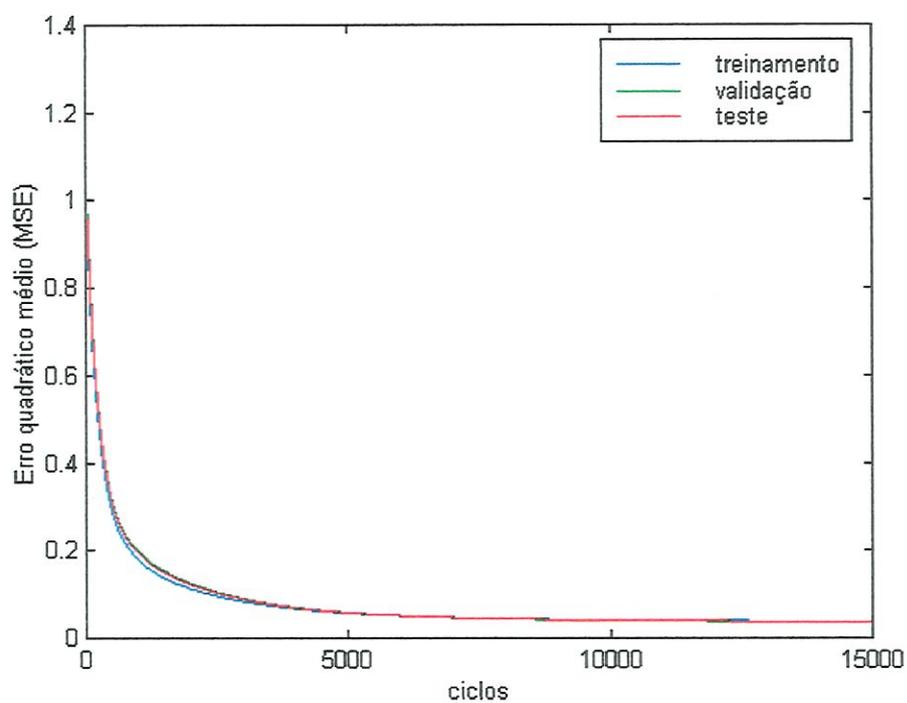


Figura B.68: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 9 neurônios na camada escondida.

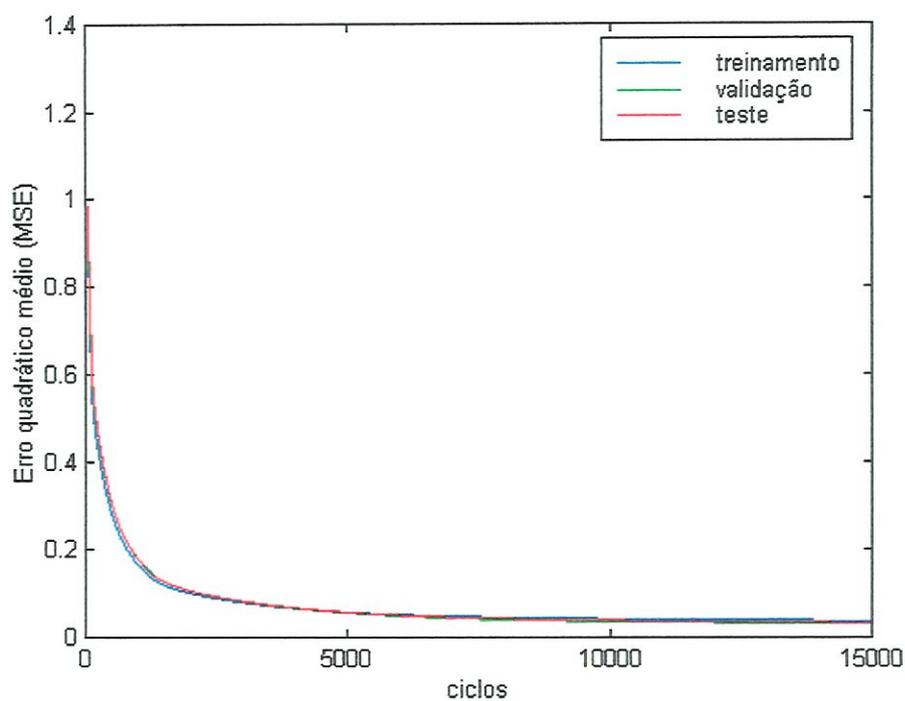


Figura B.69: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 11 neurônios na camada escondida.

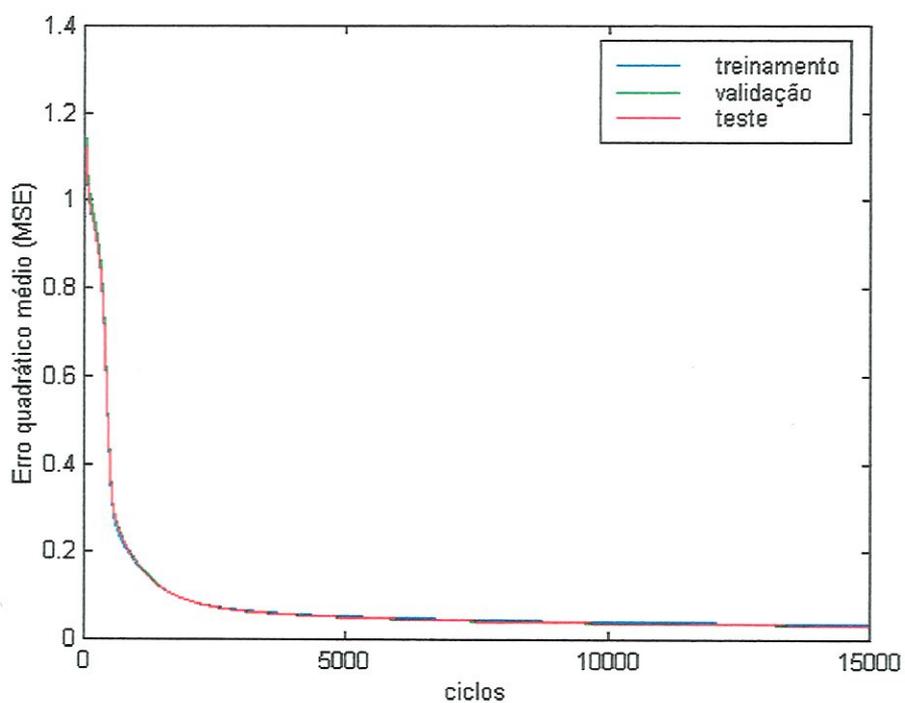


Figura B.70: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo *Backpropagation* com momentum e 13 neurônios na camada escondida.

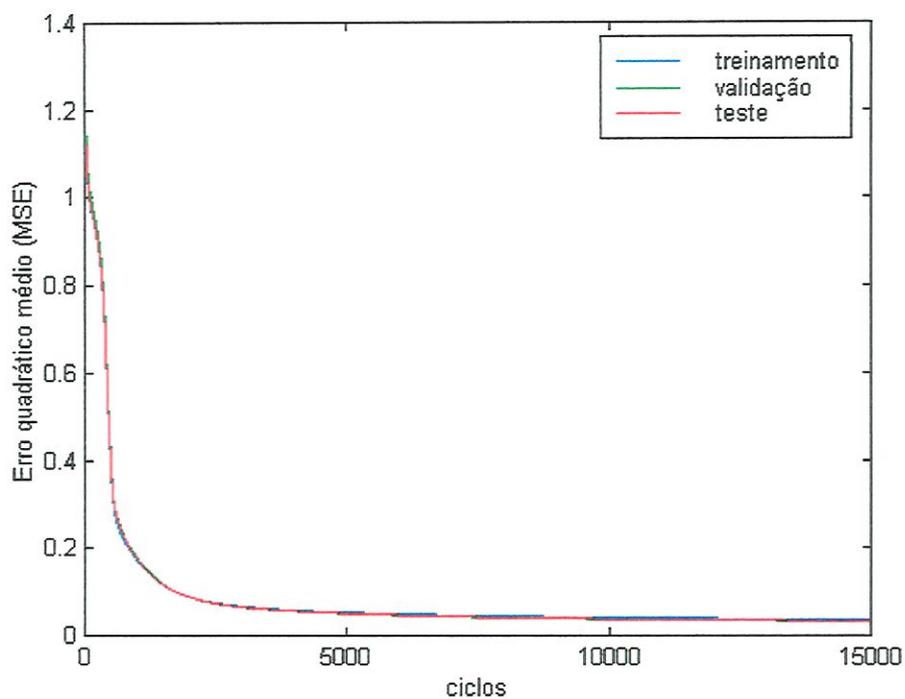


Figura B.71: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 5 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

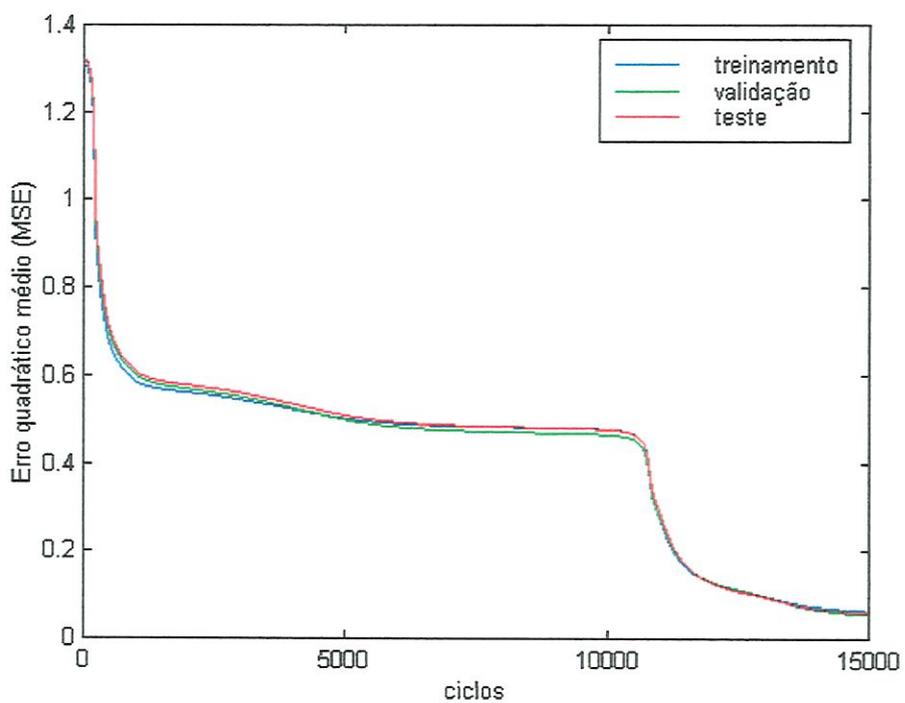


Figura B.72: Desempenho do treinamento do terceiro conjunto de dados com algoritmo Backpropagation com momentum e 7 neurônios em cada uma das duas camadas escondidas.

ANEXO C

As Figuras C.1 a C.36 apresentam os erros relativos médios (MRE) de treinamento, validação e teste para todas as arquiteturas de Redes Neurais implementadas utilizando algoritmos de treinamento Rprop, backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa e backpropagation com momentum.

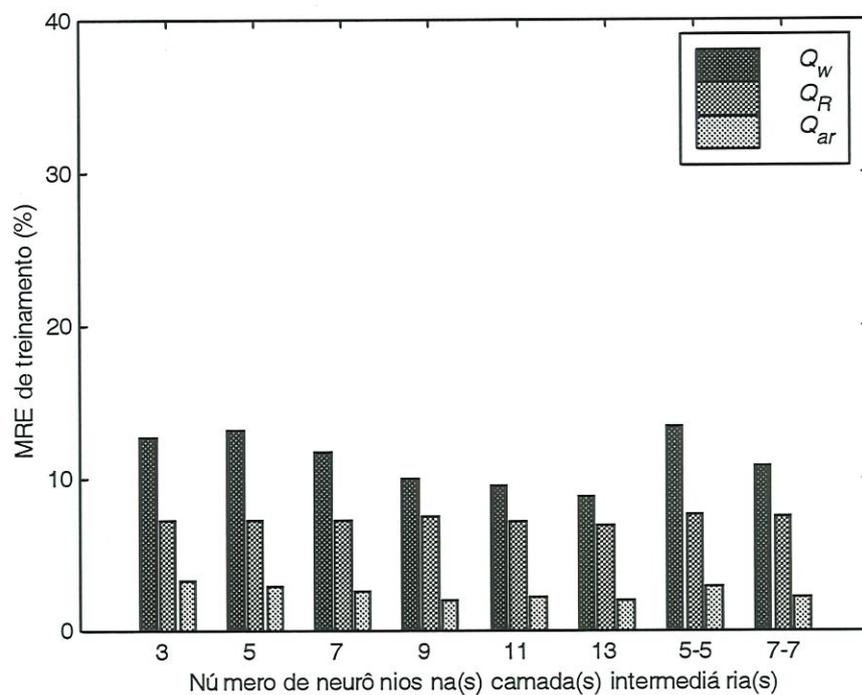


Figura C.1: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

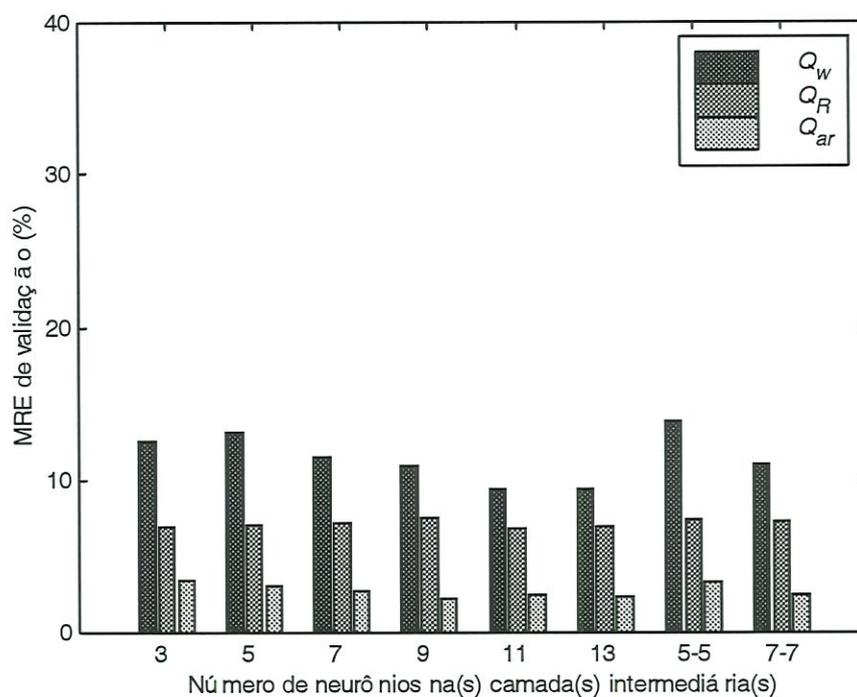


Figura C.2: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

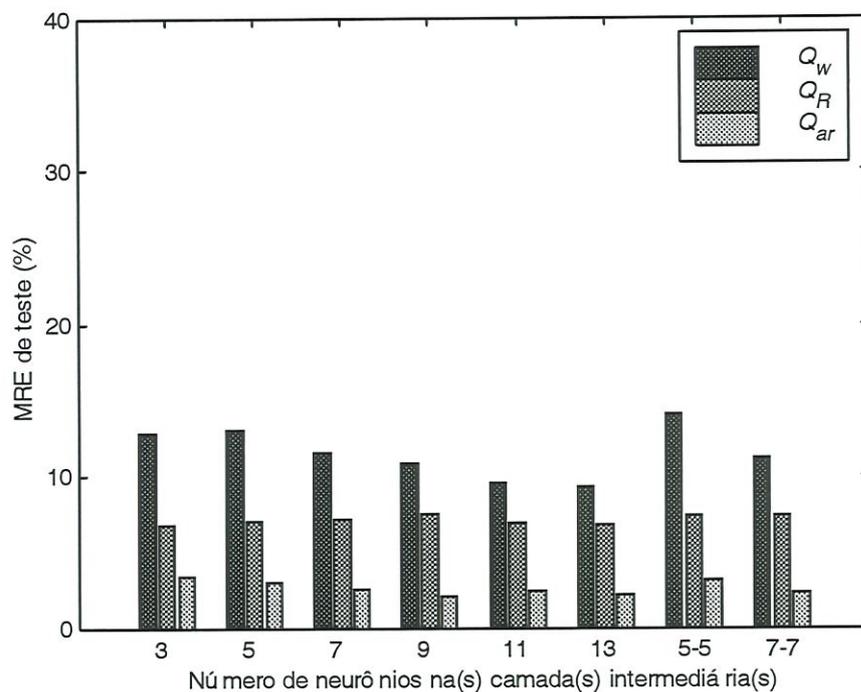


Figura C.3: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

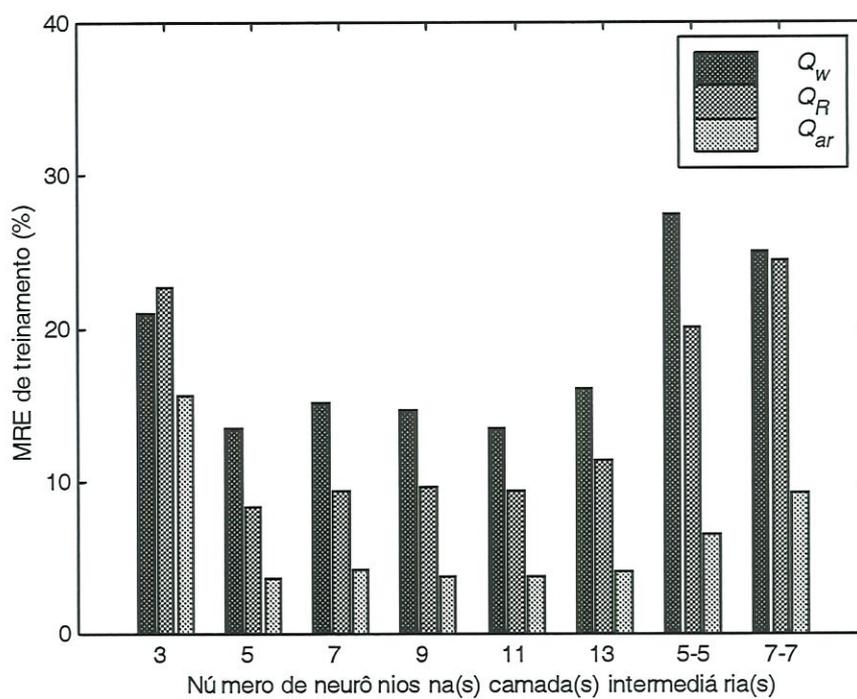


Figura C.4: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

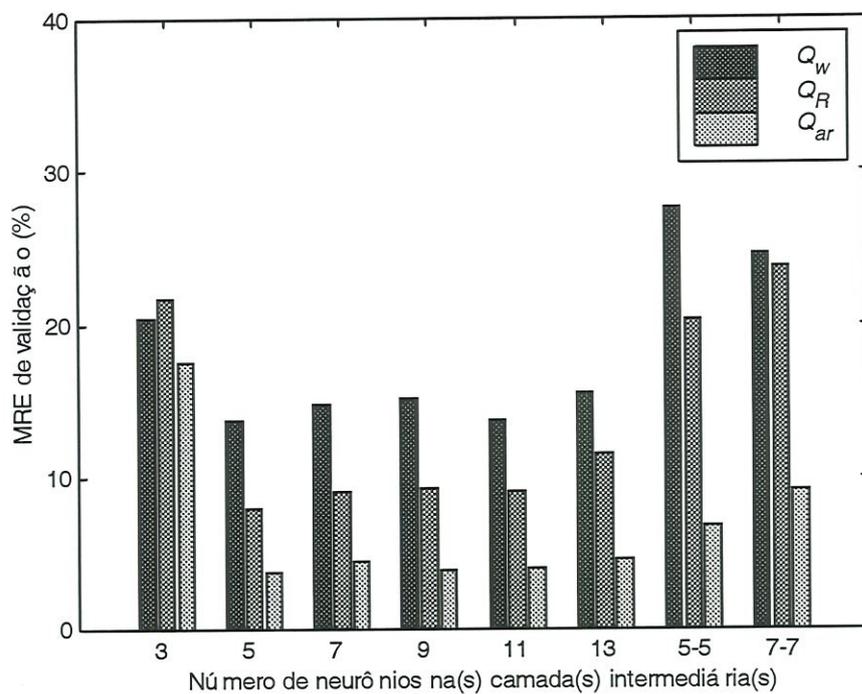


Figura C.5: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

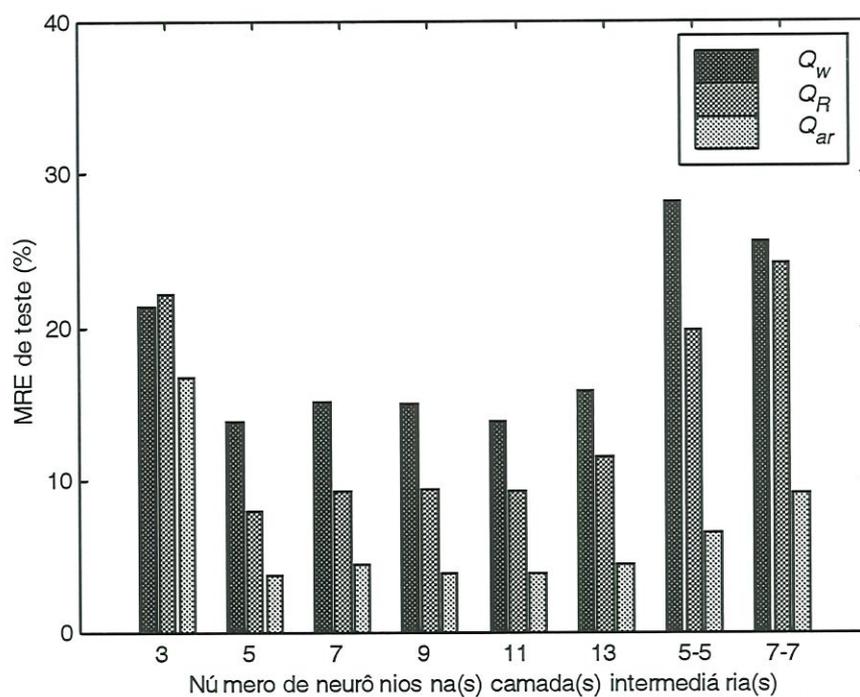


Figura C.6: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com taxa de aprendizado adaptativa em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

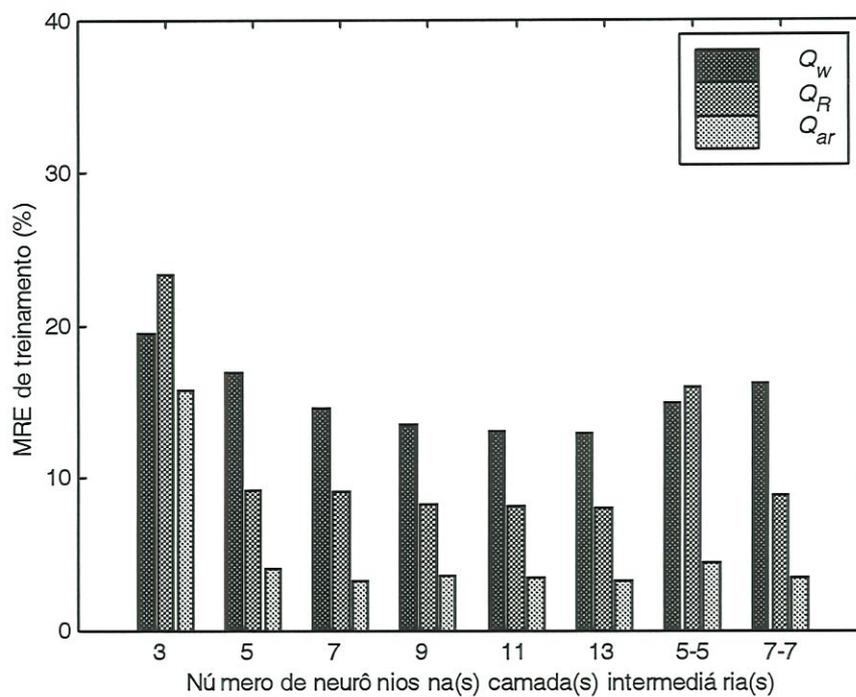


Figura C.7: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo *Backpropagation* com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

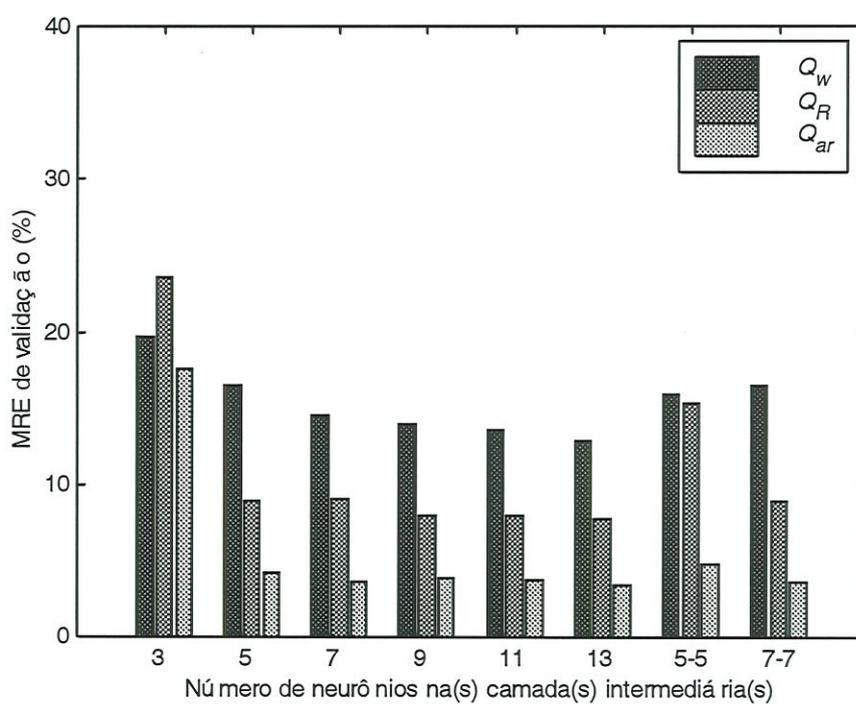


Figura C.8: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo *Backpropagation* com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

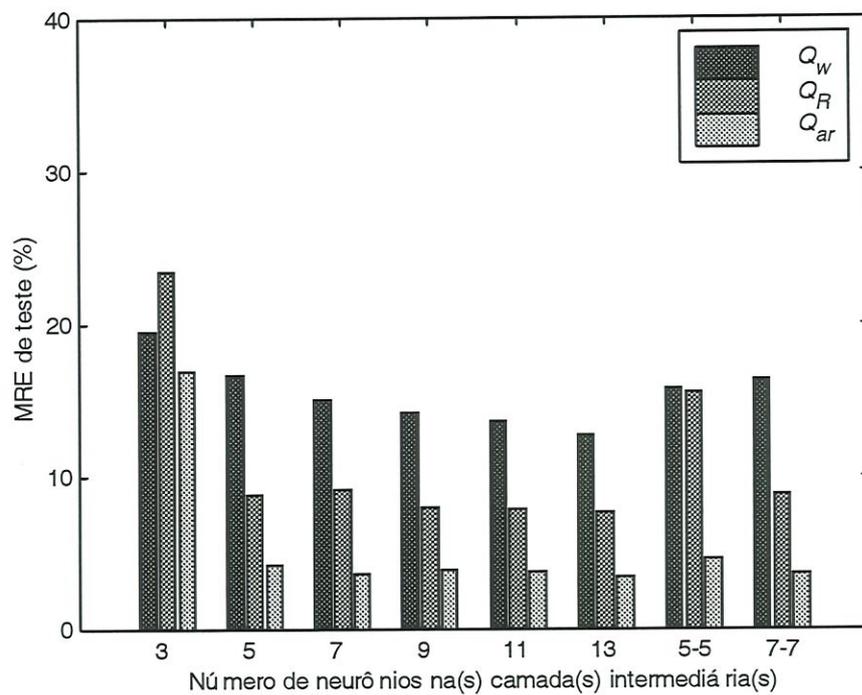


Figura C.9: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Backpropagation com momentum em função do número de neurônios nas camadas intermediárias.

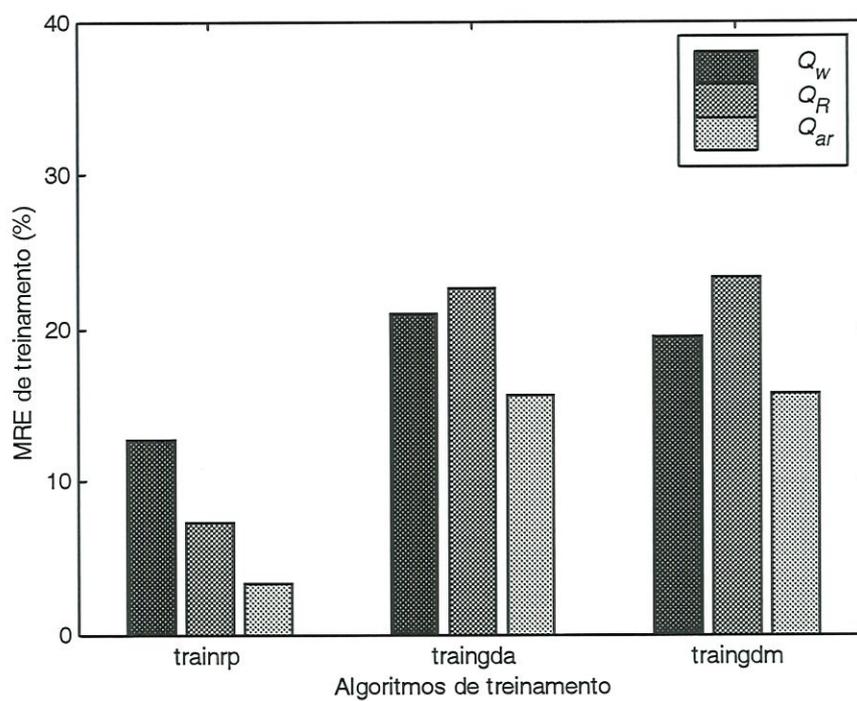


Figura C.10: MRE médio de treinamento para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.

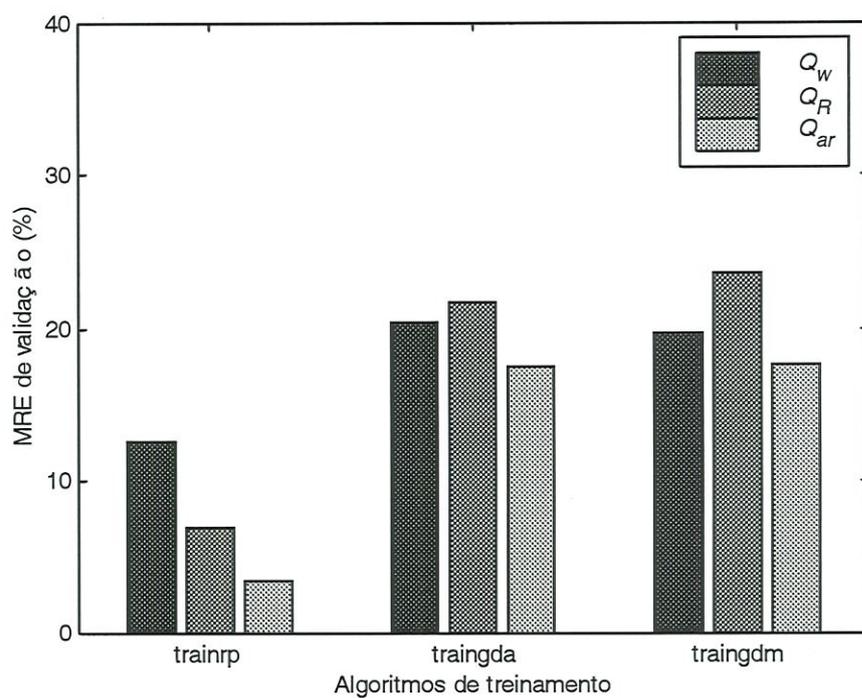


Figura C.11: MRE médio de validação para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.

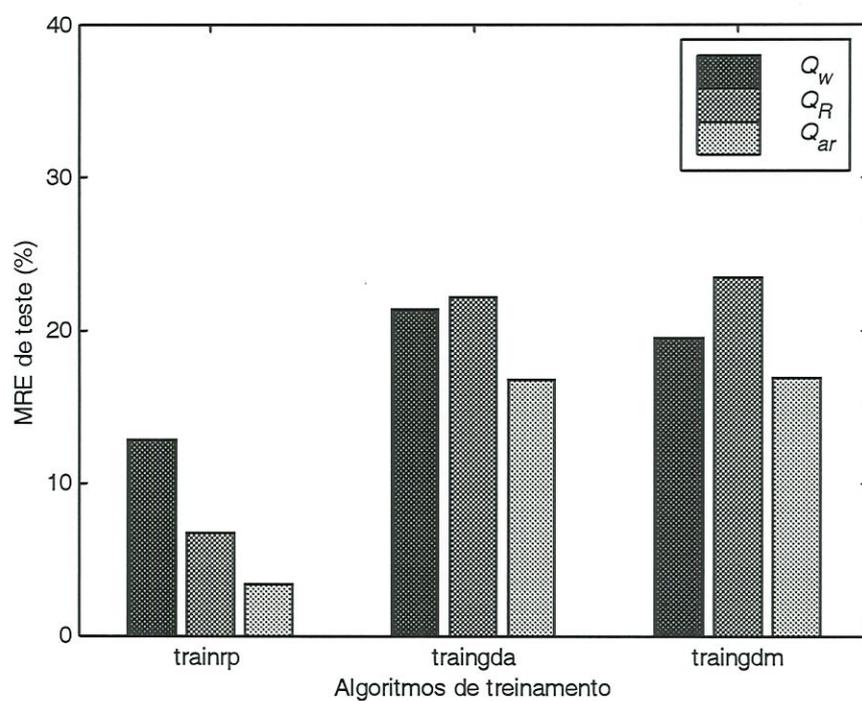


Figura C.12: MRE médio de teste para as redes com 3 neurônios na camada intermediária.

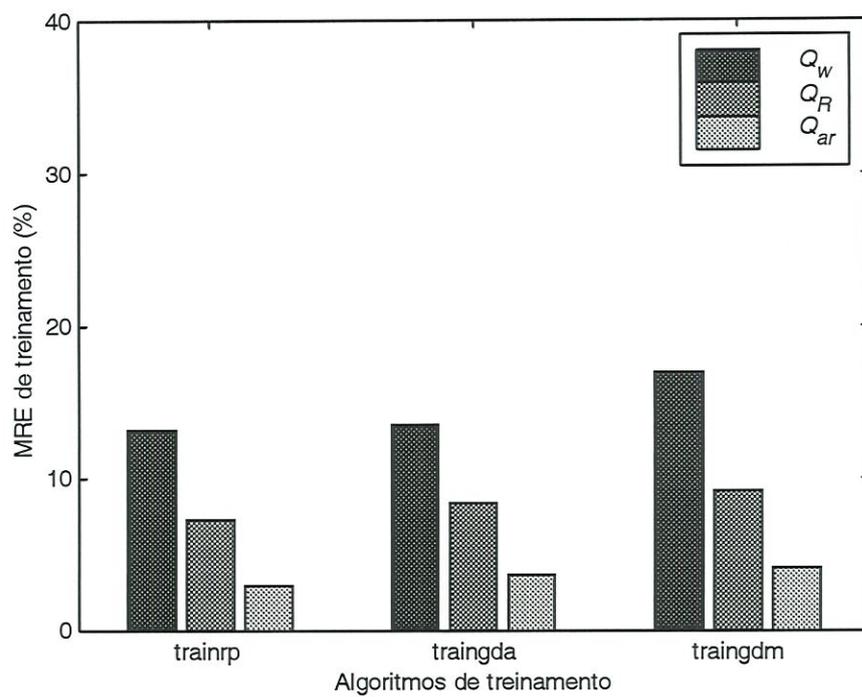


Figura C.13: MRE médio de treinamento para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.

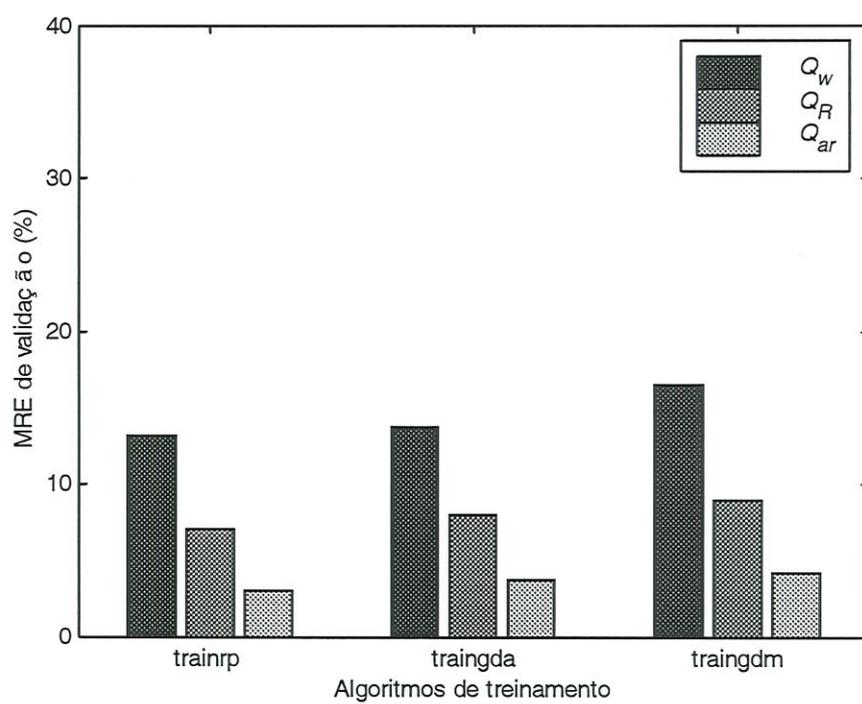


Figura C.14: MRE médio de validação para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.

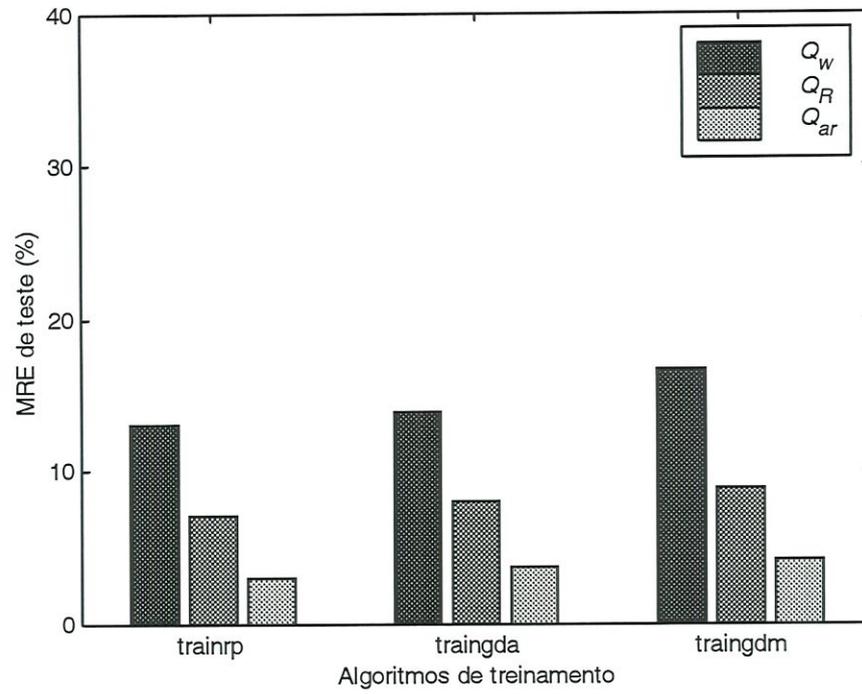


Figura C.15: MRE médio de teste para as redes com 5 neurônios na camada intermediária.

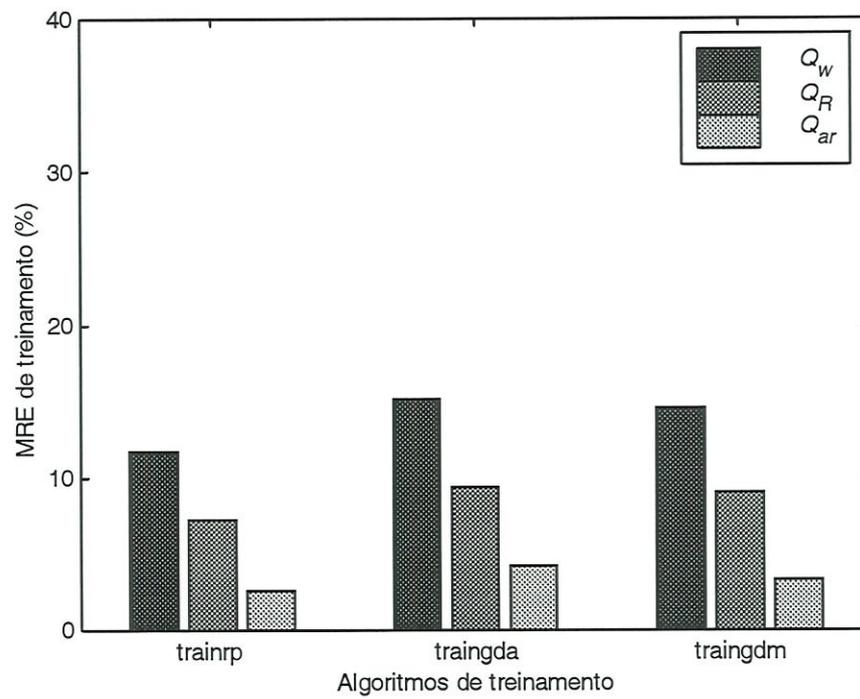


Figura C.16: MRE médio de treinamento para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.

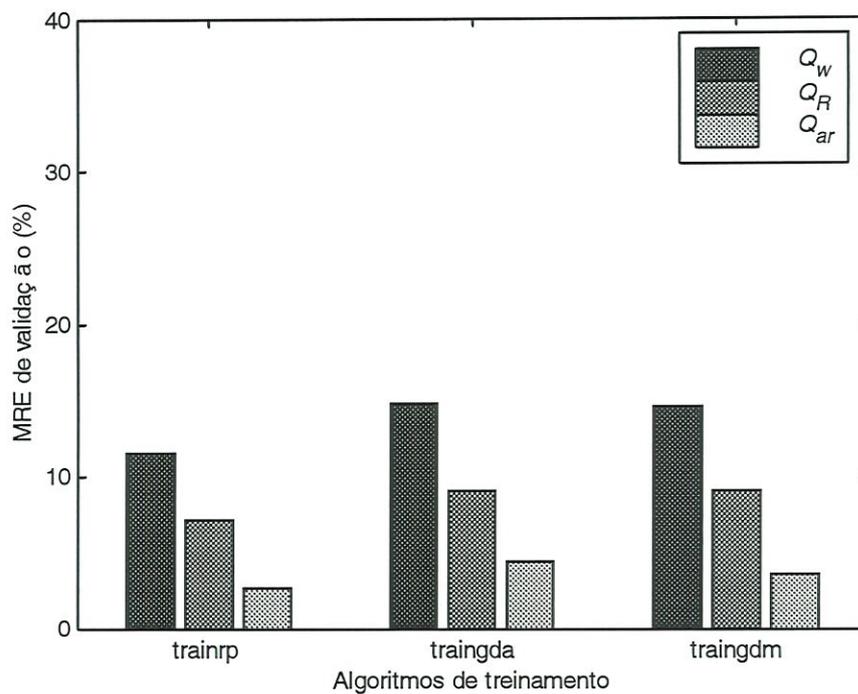


Figura C.17: MRE médio de validação para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.

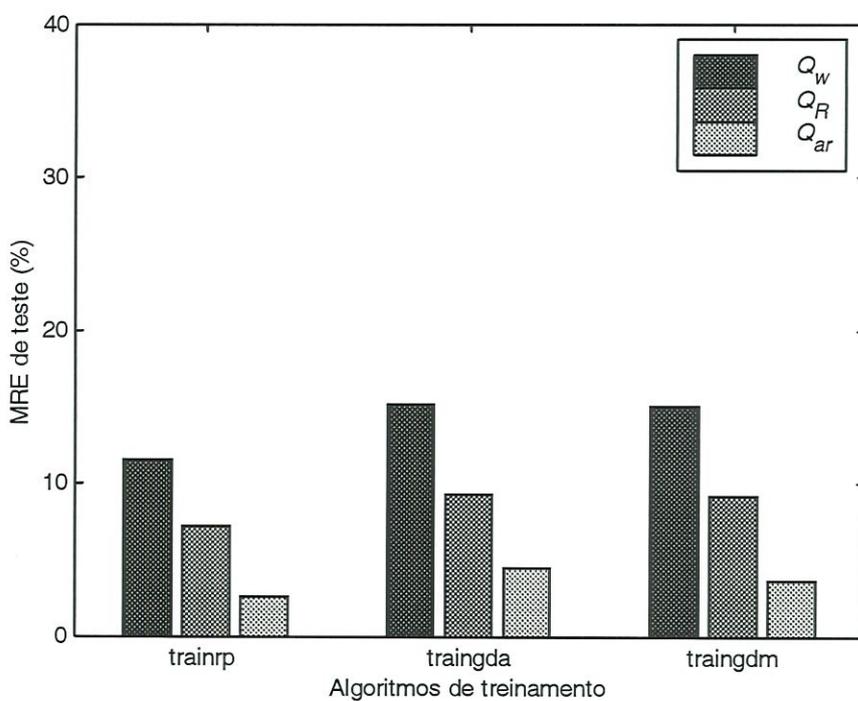


Figura C.18: MRE médio de teste para as redes com 7 neurônios na camada intermediária.

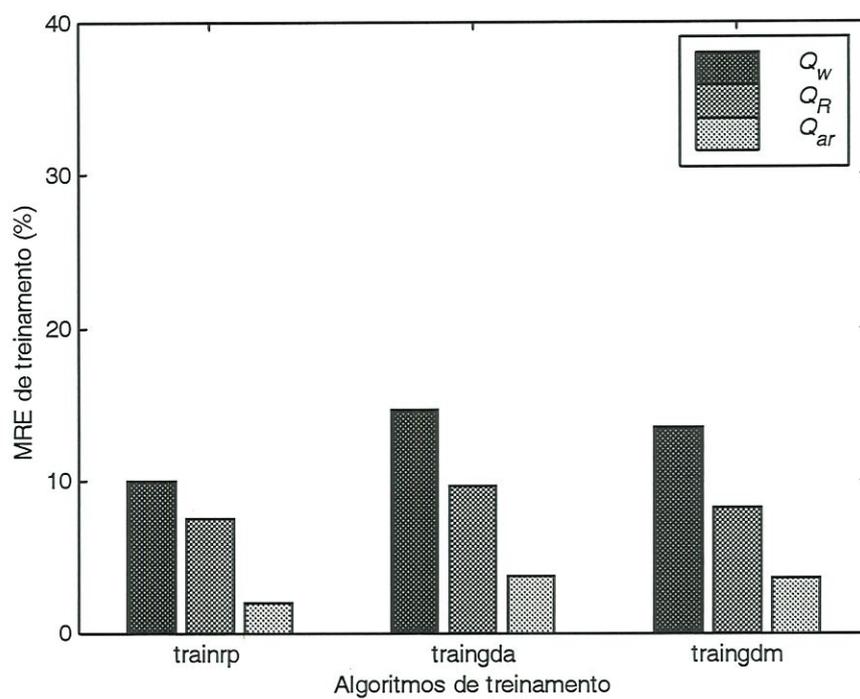


Figura C.19: MRE médio de treinamento para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.

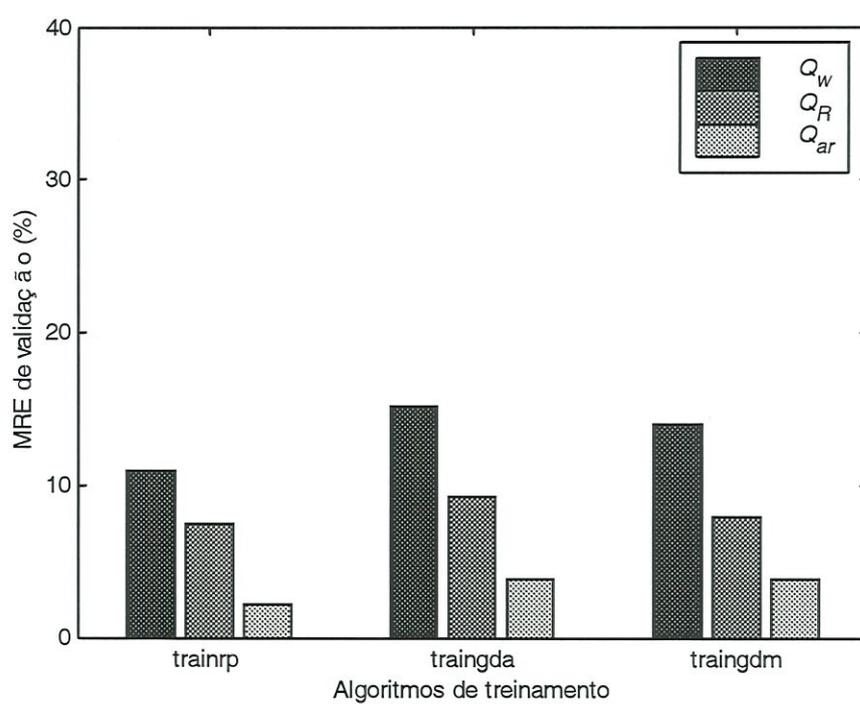


Figura C.20: MRE médio de validação para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.



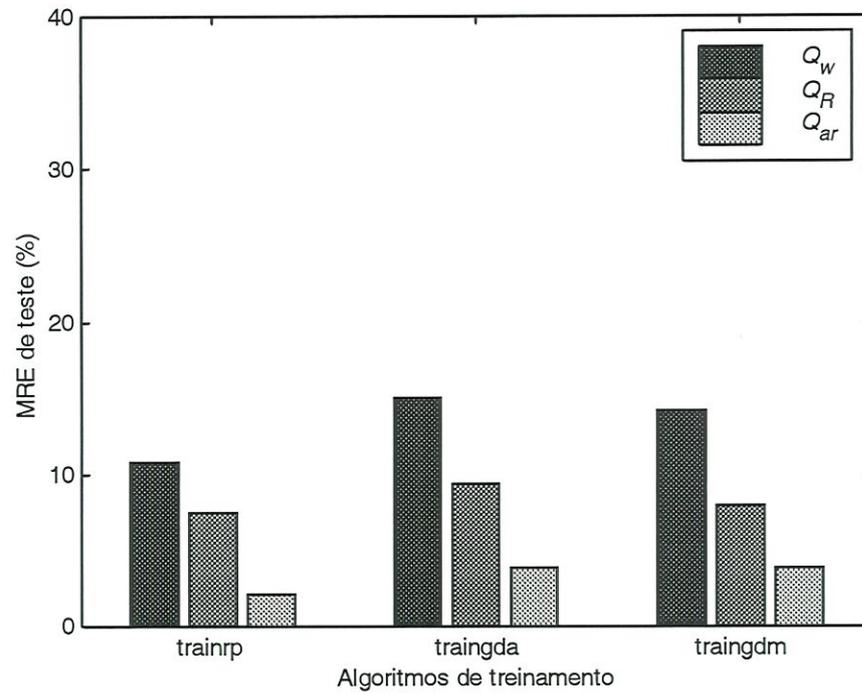


Figura C.21: MRE médio de teste para as redes com 9 neurônios na camada intermediária.

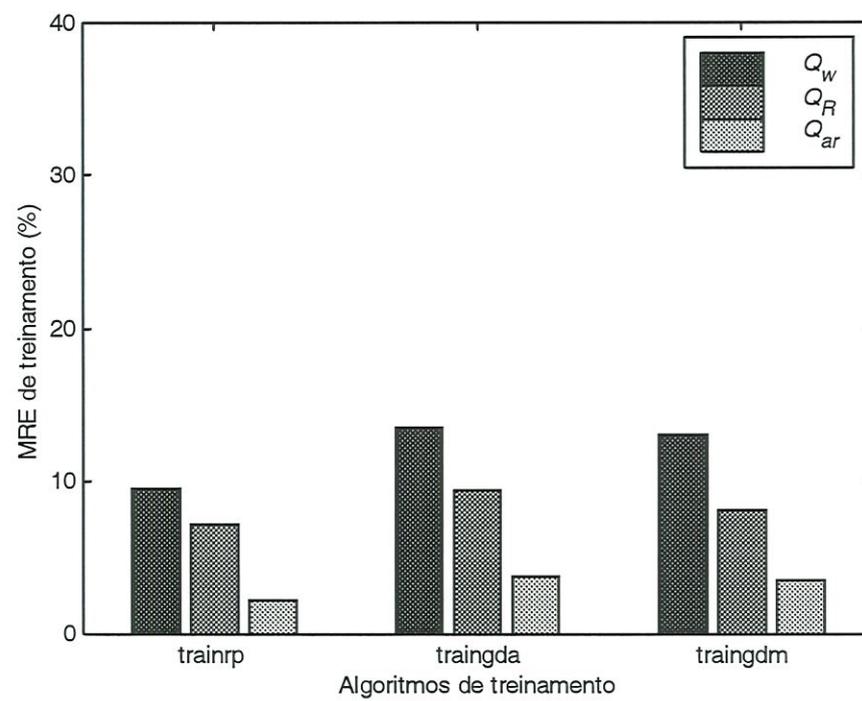


Figura C.22: MRE médio de treinamento para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.

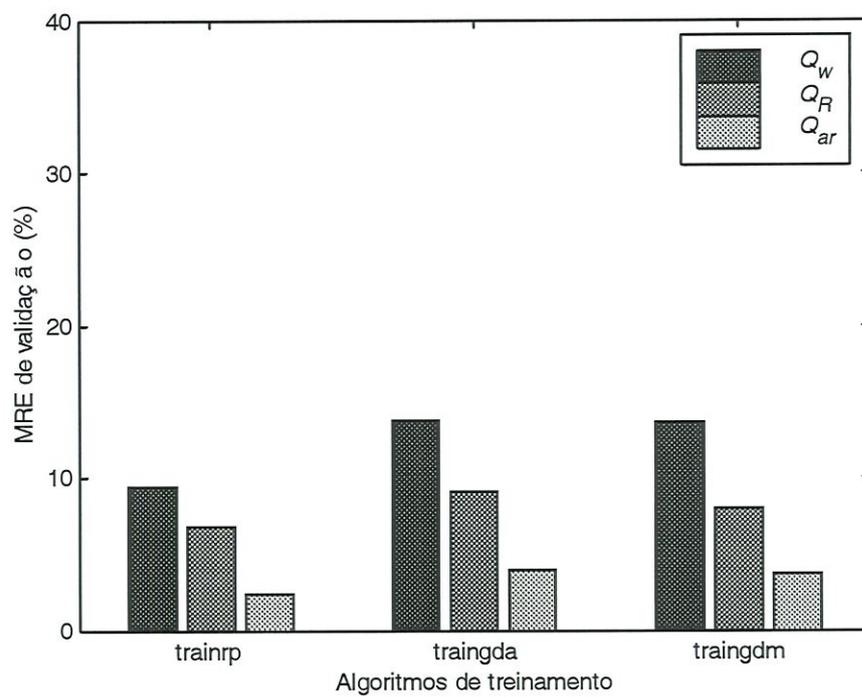


Figura C.23: MRE médio de validação para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.

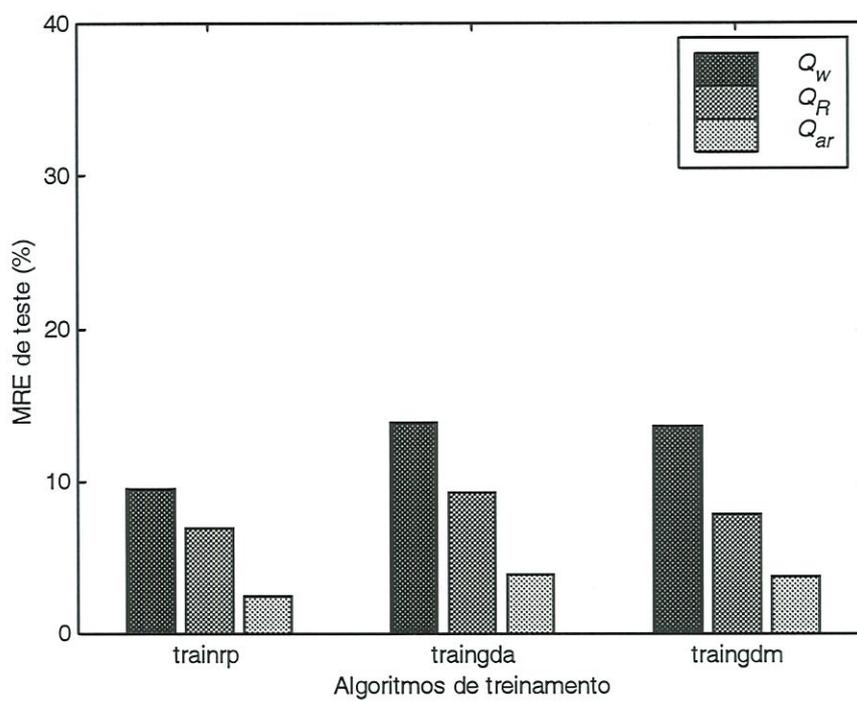


Figura C.24: MRE médio de teste para as redes com 11 neurônios na camada intermediária.

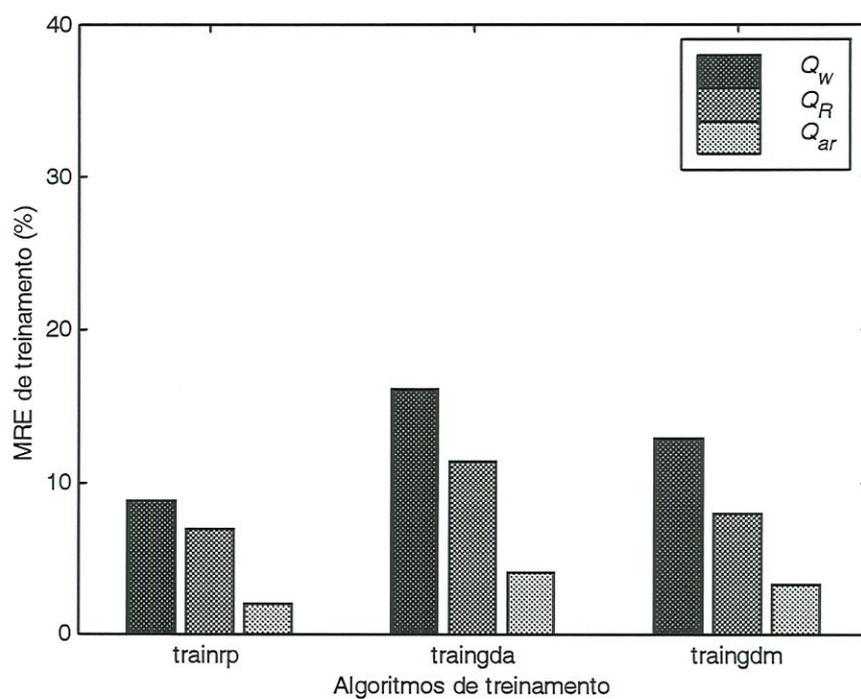


Figura C.25: MRE médio de treinamento para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.

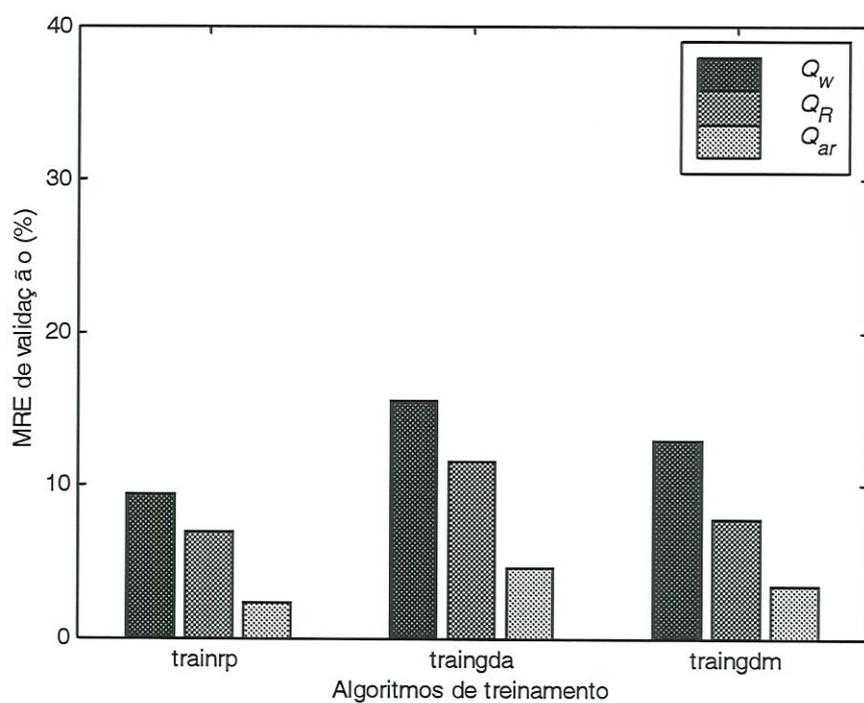


Figura C.26: MRE médio de validação para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.

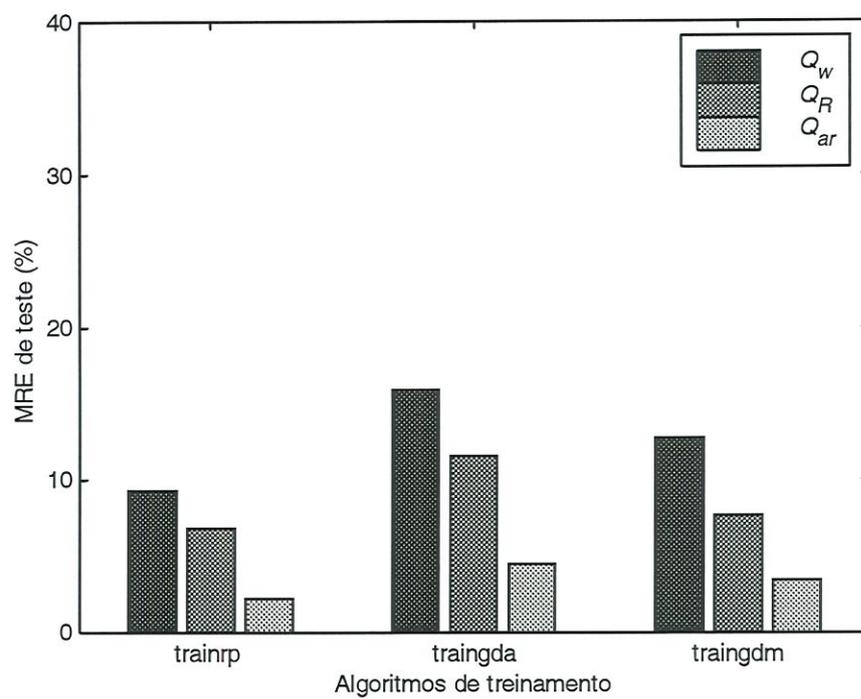


Figura C.27: MRE médio de teste para as redes com 13 neurônios na camada intermediária.

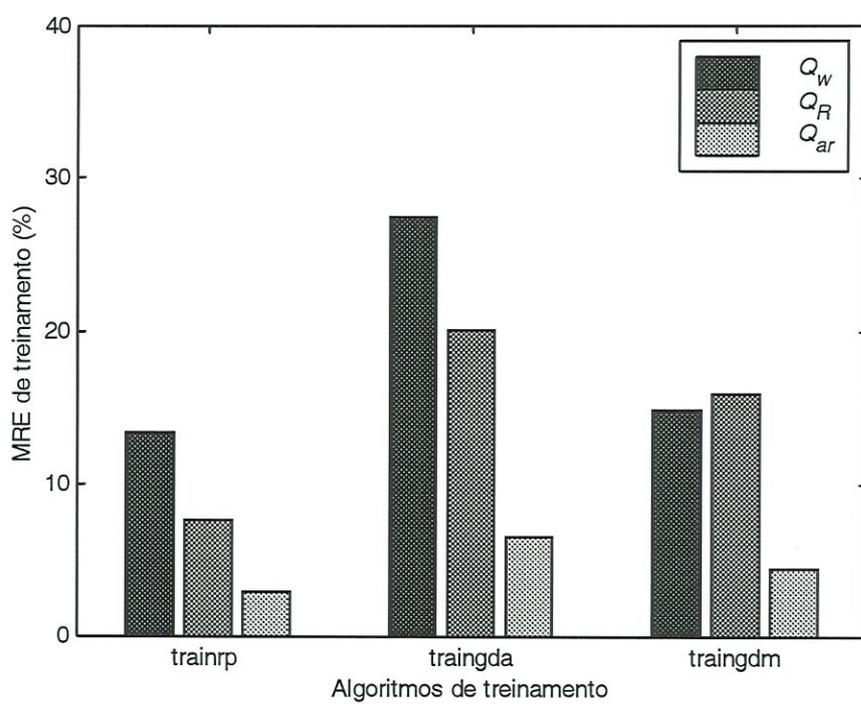


Figura C.28: MRE médio de treinamento para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

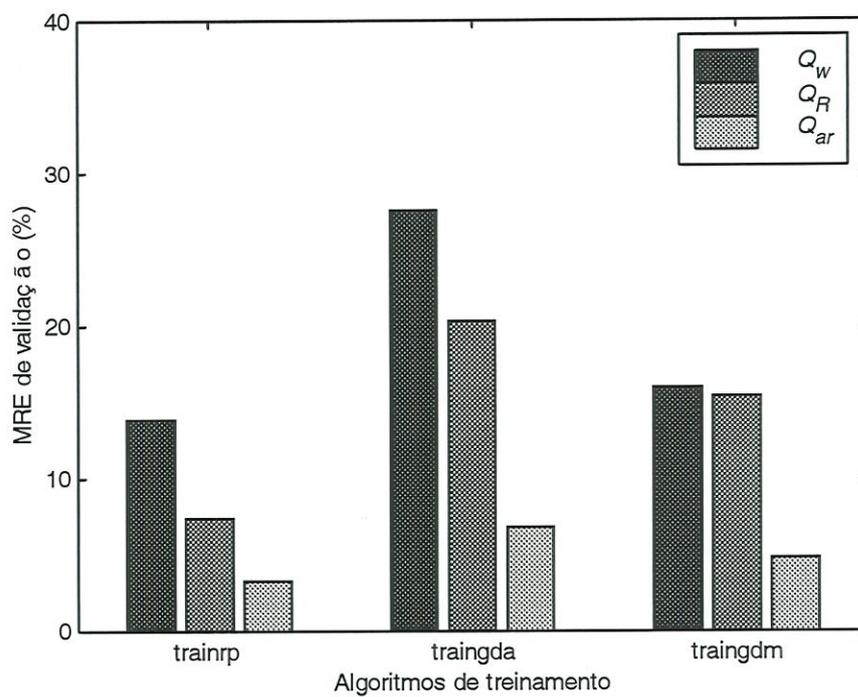


Figura C.29: MRE médio de validação para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

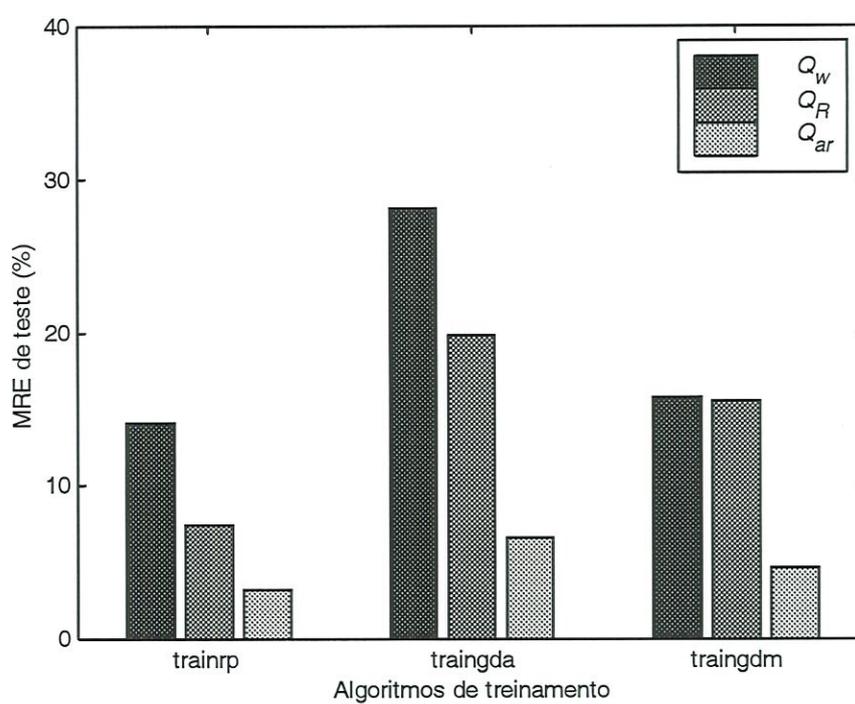


Figura C.30: MRE médio de teste para as redes com 5 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

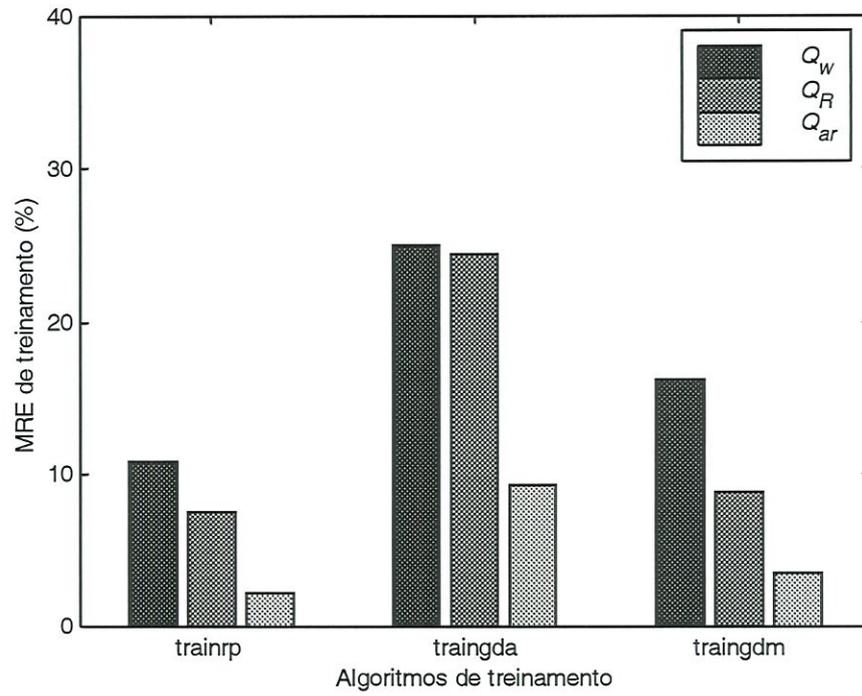


Figura C.31: MRE médio de treinamento para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

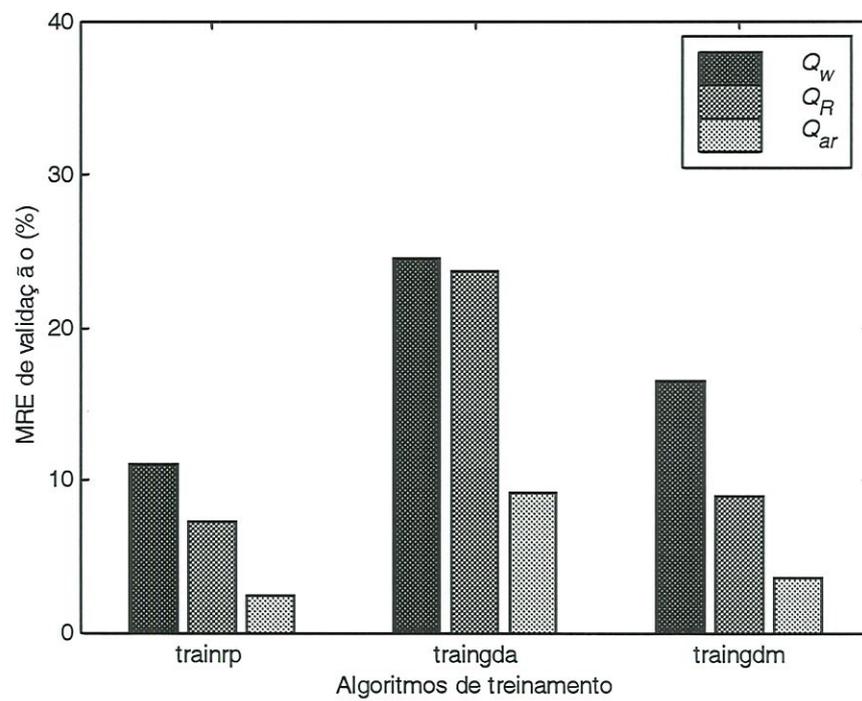


Figura C.32: MRE médio de validação para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

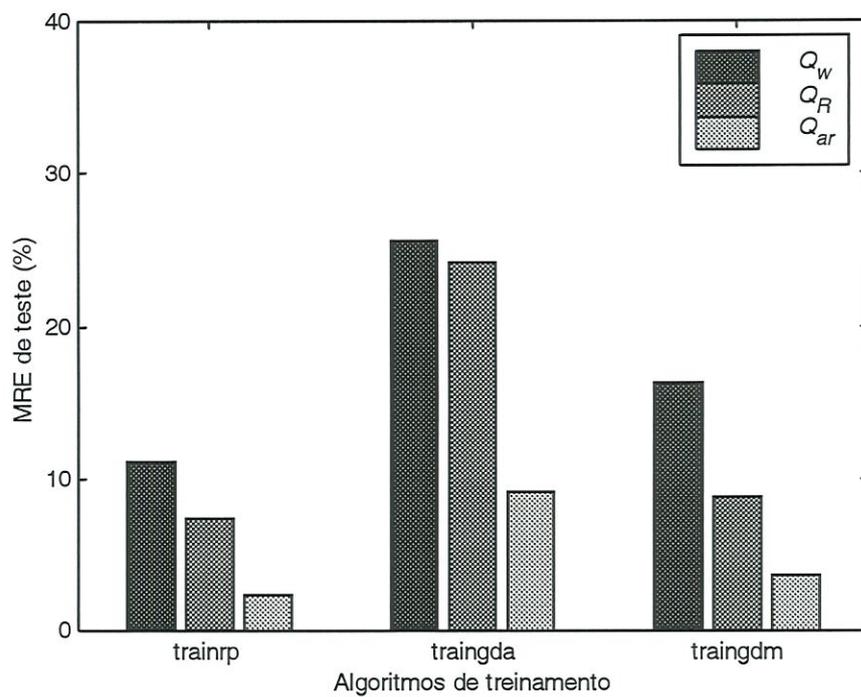


Figura C.33: MRE médio de teste para as redes com 7 neurônios em cada uma das duas camadas intermediárias.

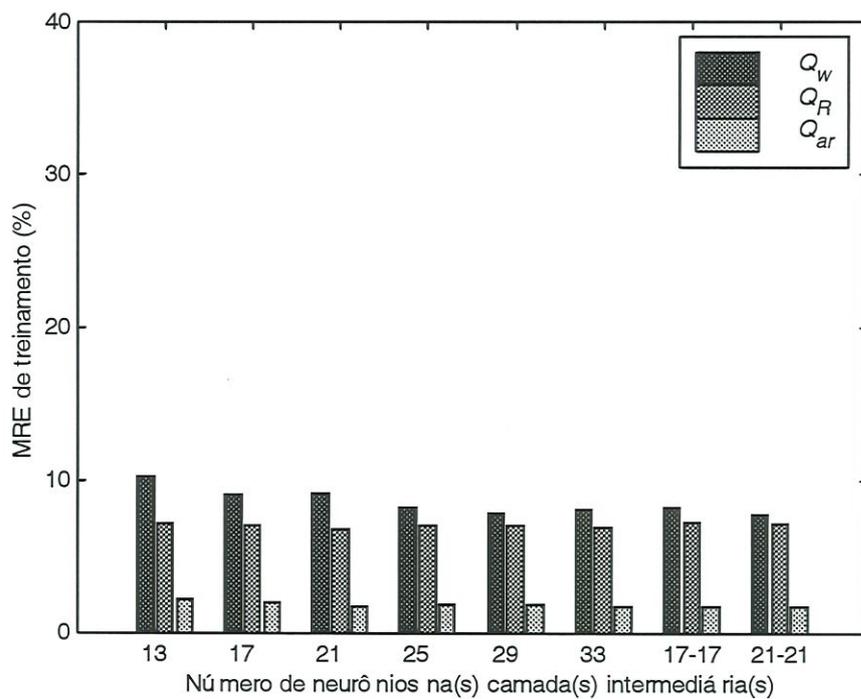


Figura C.34: MRE médio de treinamento para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (análise complementar).

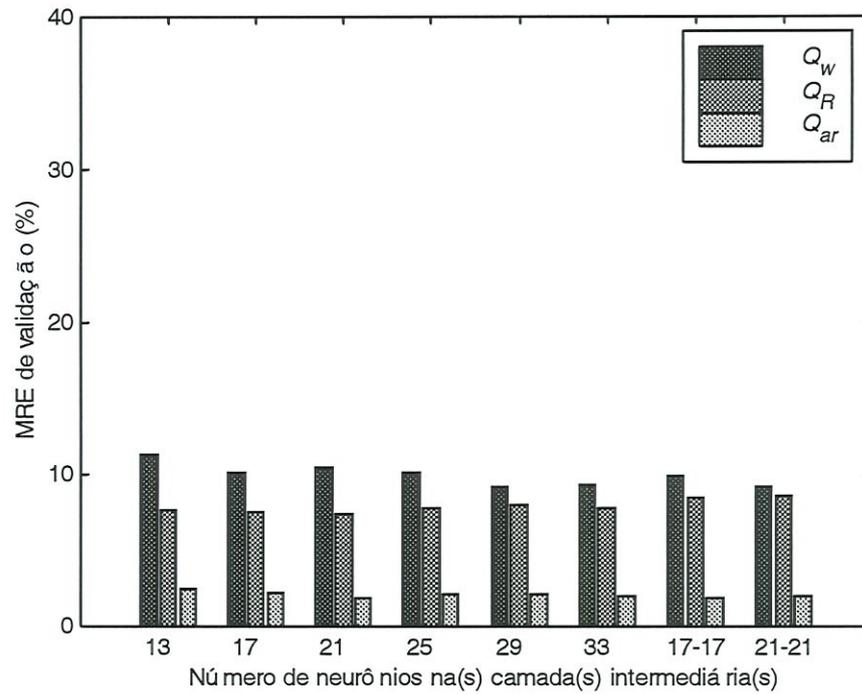


Figura C.35: MRE médio de validação para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (análise complementar).

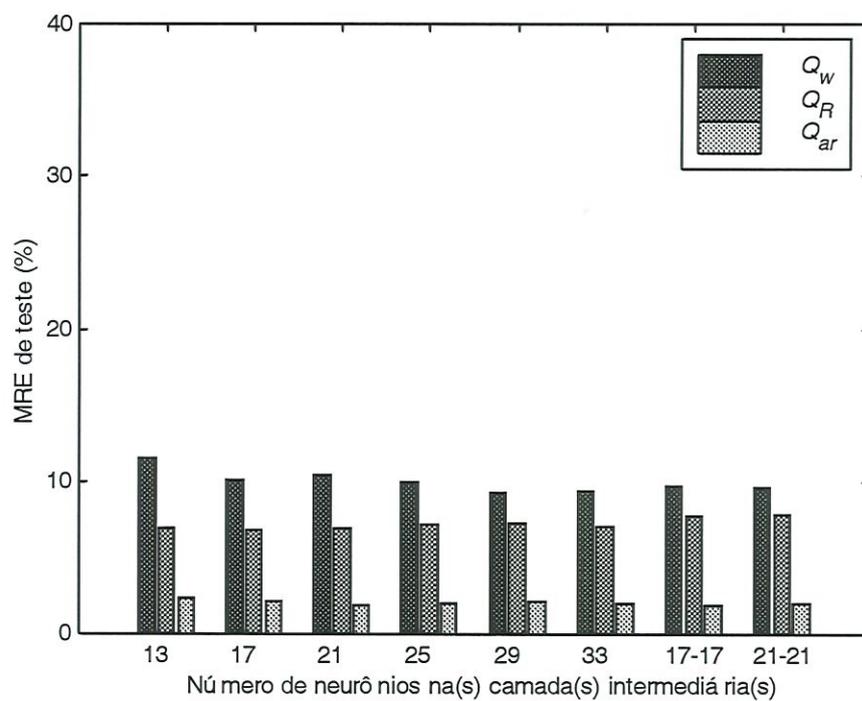


Figura C.36: MRE médio de teste para as três saídas da rede neural utilizando algoritmo Rprop em função do número de neurônios nas camadas intermediárias (análise complementar).

BIBLIORREVENÇIAS

BIBLIOGRÁFICAS

Lista da bibliografia efetivamente utilizada no desenvolvimento dos modelos mecânico e neural.

- Andrews, J. F. (1992). *Dynamics and control of the activated sludge process*. In: Water Quality Management Library, v. 6. Technomic Publishing, 280p.
- Argaman, Y. (1995). A steady-state model for the single sludge activated sludge system-I. Model description. *Water Research*, v. 29, n.1, p. 137-145.
- Argaman, Y. e Papkov, G. (1995). A steady-state model for the single sludge activated sludge system-II. Model application. *Water Research*, v. 29, n. 1, p. 147-153.
- Artan, N., Orhon, D., Beler Baykal, B. (1990). Implications of the task group model – I. The effect of initial substrate concentration. *Water Research*, v. 24, n. 10, p. 1251-1258.
- Avancini, E. e Favaretto, J.A. (1997). *Biologia: uma abordagem evolutiva*. 1ª ed., v. 2, Moderna, 655p.
- Barros Neto, B., Scarminio, I. S., Bruns, R. E. (1996). Planejamento e otimização de experimentos. 2a edição, Editora da Unicamp, 299p.
- Baykal, B. B. et al. (1990). Implications of the task group model-II. Response to intermittent loadings. *Water Research*, v. 24, n. 10, p. 1259-1268.
- Beale, R.; Jackson, T. (1990). *Neural computing: an introduction*. IOP Publishing, Bristol, 239p.
- Becraft, W. R. et al. (1995). Integration of neural networks and expert systems for process fault diagnosis. *Learning and knowledge Acquisition*, p. 832-837.
- Béjar, J. et al. (1993). *LINNEO⁺: a classification methodology for ill-structured domains*. Department de Llenguatges I Sistemes Informàtics, Universitat Politècnica de Catalunya. (Report LSI-93-22-R).
- Belanche, L. et al. (1992). A knowledge-based system for the diagnosis of waste-water treatment plant. *Proceedings of the 5th international conference of industrial and engineering applications of AI and Experts Systems IEA/AIE*, Ed. Springer-Verlag, Alemanha, p. 326-336.
- Bhat, N. V. et al. (1990). Modelling chemical process systems via neural computation. *IEEE Control Systems*, v. 10, n.3, p. 24-30.
- Capodaglio, A. G. et al. (1991). Sludge bulking analysis and forecasting: application of system identification and artificial neural computing technologies. *Water Research*, v. 25, n. 10, p. 1217-1224.
- Carvalho, A. L.; Braga, A. P.; P. Braga, C. M.; Guimarães, T. L. V.; Pena, R. T. (1997). Modelagem de um reator piloto de manta de lodo utilizando redes neurais artificiais. In: IV Simpósio Brasileiro de Redes Neurais, Goiânia, 1997. *Anais*, p. 41-43.
- Cérebro & Mente: Revista Eletrônica de Divulgação Científica em Neurociência. (1998). [/www.epub.org.br/download/01/06/1999](http://www.epub.org.br/download/01/06/1999).

- Chapra, S. C. (1997). *Surface water-quality modelling*. Ed. WCB McGraw-Hill, 844p.
- Côté, M. et al. (1995). Dynamic modelling of the activated sludge process: improving prediction using neural networks. *Water Research*, v. 29,n. 4, p. 995-1004.
- Cruz, A. J. G.; Giordano, R. C. (1995). *Relatório interno sobre redes neuronais*. Universidade Federal de São Carlos, Centro de Ciências e Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, São Carlos.
- Demuth, H. e Beale, M. (1998). *Neural Network Toolbox User's guide: for use with Matlab*. MathWorks, Inc.
- Dold, P.L., Marais, G. v. R. (1986). Evaluation of the general activated sludge model proposed by the IAWPRC task group. *Water Science and Technology*, v. 18, p. 63-89.
- Droste, R. L. (1997). *Theory and practice of water and wastewater treatment*. John Wiley & Sons, Inc.
- Eckenfelder, W. W., Grau, P. (1992). *Activated sludge process design and control: theory and practice*. Water Quality Management Library – v. 1, Technomic Publishing, 268p.
- Folha De São Paulo (1996) 5º caderno, domingo, 24 de março.
- Griffiths, P. (1994). Modifications to the IAWPRC task group general activated sludge model. *WaterResearch*, v. 28, n. 3, p. 657-664.
- Gujer, W. et al. (1995). The activated sludge model no. 2: biological phosphorus removal. *Water Science and Technology*, v. 31, p. 1-11.
- Gujer, W. et al. (1999). Activated sludge model no.3. *Water Science and Technology*, v. 39, p. 183-193.
- Gujer, W., Henze, M. (1991). Activated sludge modelling and simulation. *Water Science and Technology*. v. 23, p. 1011-1023.
- Hanisch, W. S., Carvalho, A. C. P. L. F., Milaré, C. R., Pires, E. C. (1996). Modelagem preliminar de uma estação de tratamento de esgotos utilizando redes neurais. In: III Simpósio Brasileiro de Redes Neurais, Recife. *Anais*, p. 271-278.
- Hanisch, W. S., Carvalho, A. C. P. L. F., Milaré, C. R., Pires, E. C. (1997). Modelagem de uma estação de tratamento de esgotos utilizando redes neurais: conceituação e avaliação preliminar. In: XIX Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, Foz do Iguaçu. *Anais*, pp. 560-568.
- Hanisch, W. S., Pires, E. C., Carvalho, A. C. P. L. F. (1998). A neural network model to predict operational parameters of a wastewater treatment plant. *Proceedings of the third International Conference on Hydroinformatics*, Ed. A. A. Balkema Rotterdam, v. 2, p. 765-770.

- Haykin, S. (1999). *Neural networks: a comprehensive foundation*. 2^a ed., Macmillan College Publishing Company, New York, 842p.
- Henze, M. (1992). Characterization of wastewater for modelling of activated sludge processes. *Water Science and Technology*, v. 25, n. 6, p. 1-15.
- Henze, M. et al. (1987). Abbreviated report: a general model for single-sludge wastewater treatment systems. *Water Research*, v. 21, n. 5, p. 505-515.
- Henze, M. et al. (1995). Wastewater and biomass characterization for the activated sludge model no. 2: biological phosphorus removal. *Water Science and Technology*, v. 31, p. 13-23.
- Henze, M. et al. (1996). *Wastewater treatment: biological and chemical processes*. 2^a ed., Springer, 383p.
- Henze, M. et al. (1997). *Wastewater treatment: Biological and chemical processes*. 2^a ed., Springer, 383p.
- Henze, M et al. (1999). Activated sludge model no. 2, ASM2D. *Water Science and Technology*, v. 39, n. 1, p. 165-182.
- Hoskins, J. C.; Himmelblau, D. M. (1988). Artificial neural network models of knowledge representation in chemical engineering. *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n.9/10, p. 881-890.
- Huang, Y. W.; Fan, L. T. (1988). Designing an object-relation hybrid database for chemical process engineering. *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n. 9/10, p. 973-983.
- Kappeler, J., Gujer, W. (1992). Estimation of kinetic parameters of heterotrophic biomass under aerobic conditions and characterization of wastewater for activated sludge modelling. *Water Science and Technology*, v. 25, n. 6, p. 125-139.
- Kawai, H. et al. (1991). *Avaliação do desempenho de estações de tratamento de esgotos*. CETESB, São Paulo, 38p.
- Kolmogorov, A. N. (1963). On the representation of continuous functions of many variables by superposition of continuous functions of one variable and addition. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, v. 144, p. 679-681. (*American Mathematical Society Translation*, 28: 55-59).
- Krovvidy, S.; Wee, W. E. (1993). Wastewater treatment systems from case-based reasoning. *Machine Learning*, v. 10, p. 341-363.
- Lakshmanan, R., Stephanopoulos, G. (1988a). Synthesis of operating procedures for complete chemical plants -I. Hierarchical structured modelling for nonlinear planning. *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n. 9/10, p. 985-1002.

- Lakshmanan, R., Stephanopoulos, G. (1988b). Synthesis of operating procedures for complete chemical plants -II. Hierarchical structured modelling for nonlinear planning. *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n. 9/10, p. 1003-1021.
- Lapolli et al. (1992). Utilização de técnicas de inteligência artificial e da teoria dos conjuntos difusos no controle operacional de estações de tratamento de esgotos. Simpósio Ítalo-brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, In: *Anais*. Rio de Janeiro.
- Leslie Grady Jr., C.P. (1989). Dynamic modeling of suspended growth biological wastewater treatment processes. In: *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater*, capítulo 1, p. 1-38, editado por Giles G. Patry and David Chapman, Lewis Publishers, Inc, Chelsea, MI, 395p.
- Leslie Grady, Jr., C. P. e Lim, H. C. (1980). *Biological wastewater treatment*. Ed. Marcel Dekker, Inc., 963p.
- Lesouef et al. (1992). Optimizing nitrogen removal reactor configurations by on-site calibration of the IAWPRC Activated Sludge Model. *Water Science and Technology*, v. 25, n. 6, p-105-123.
- Lessard, P. e Beck, M. B. (1993). Dynamic modelling of the activated sludge process: a case study. *Water Research*, v. 27, n. 6, p. 963-978.
- Maier, H. R.; Dandy, G. C. (1996). The use of artificial neural networks for the prediction of water quality parameters. *Water Resources Research*, v. 32, n. 4, p. 1013-1022.
- Metcalf & Eddy, Inc. (1991). *Wastewater Engineering: treatment, disposal and reuse*. 3. ed., McGraw Hill, 1334p.
- Mino, T. et al. (1997). Application of the IAWQ activated sludge model to nutrient removal process. *Water Science and Technology*, v. 35, p. 111-118.
- Montgomery, D. C. (1984). *Design and analysis of experiments*. 2 ed., John Wiley & Sons, 538p.
- Morris, A. J. et al. (1994). Artificial neural networks: studies in process modelling and control. *Trans IchemE*, v. 72, p. 3-19.
- Mpé, A. et al. (1995). Using self-organising feature maps for water monitoring. ICANN 1995, In: *Proceedings*. Paris, p. 1-6.
- Nott, P. J. K. et al. (1996). Fault and contamination detection in a continuous bakers yeast fermentation. *Computers and Chemical Engineering*, v. 20, p. s611-s616.
- Nova Enciclopédia Ilustrada Folha (1996). Folha da Manhã, p. 681-682.
- Oliva, L. C. H. V. (1997). Tratamento de esgotos sanitários com reator anaeróbio de manta de lodo (UASB) protótipo: desempenho e respostas dinâmicas às sobrecargas hidráulicas.

- São Carlos. 218p. Tese (Doutorado) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo.
- Olsson, G. (1989). Practical experiences of identification and modeling from experiments. *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater*, capítulo 10, editado por Giles G. Patry and David Chapman, Lewis Publishers, Inc, Chelsea, MI, 395p.
- Otterpohl, R. e Freund, M. (1992). Dynamic models for clarifiers of activated sludge plants with dry and wet weather flows. *Water Science and Technology*, v. 26, n. 5-6, p. 1391-1400.
- Patry, G. G., Takács, I. (1990). Simulator-based modelling of wastewater treatment plants. In *Proceedings Annual Conference and 1st Biennial Environmental Speciality Conference CSCE*, v. 1, p. 491-505.
- Pu, H. C. & Hung, Y. T. (1995). Use of artificial neural networks predicting trickling filter performance in a municipal wastewater treatment plant. *Environmental Management and Health*, v. 6, n. 2, p. 16-27.
- Ramesh, T. S. et al. (1988). A structured framework for efficient problem solving in diagnostic expert systems. *Computers and Chemical Engineering*, v. 12, n. 9/10, p. 891-902.
- Resolução Conama N. 20. (1986).
- Riedmiller, M. (1994). *Rprop – Description and Implementation Details*. Institut für Logik, Komplexität und Deduktionssysteme, University of Karlsruhe. (Relatório Técnico W76128).
- Riedmiller, M., Braun, H. (1993). A direct adaptive method for faster backpropagation learning: the RPROP algorithm. In: IEEE International Conference on Neural Networks (ICNN), San Francisco. *Anais*, p. 586-591.
- Roure, J.; Béjar, J. (1993). *Not-Yet classification algorithm*. Department de Llenguatges I Sistemes Informàtics, Universitat Politècnica de Catalunya. (Report LSI-93-33-R).
- Rumelhart et al. (1989). *Parallel distributed processing: explorations in the microstructure of cognition*. v.1, MIT Press, 545p.
- Serra, P. et al. (1993). *DEPUR: a knowledge based tool for wastewater treatment plants*. Department de Llenguatges I Sistemes Informàtics, Universitat Politècnica de Catalunya. (Report LSI-93-39-R).
- Silva Júnior, R. J. C. (1996). A indústria da água como atividade econômica. *Bio*, ABES, n. 1, jan/mar, p.22-33.
- Springer, A. M. et al. (1996). Feasibility study of sludge lysis and recycle in the activated-sludge process. *TAPPI Journal*, v. 79, n.5, p. 162-170.

- Takács, I., Patry, G. G., Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification - thickening process. *Water Research*, v.25, n.10, p. 1263-1271.
- Tickle, A. B. et al. (1998). The truth will come to light: directions and challenges in extracting the knowledge embedded within trained artificial neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 9, n. 6, p.1057-1068.
- Tinôco Filho (1996). Primeira página: o interesse municipal. *Bio*, ABES, n. 1, jan/mar, p.1.
- Tomita, R. K. (1999). Monitoramento estatístico de sistemas de tratamento de efluentes. São Paulo. 172p. Dissertação (Mestrado) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
- Tyagi, R. D.; Du, Y. G. (1992). Operational determination of the activated sludge process using neural networks. *Water Science and Technology*, v. 26, n. 9/11, p. 2461-2464.
- van Haandel et al. (1981). The activated sludge process-III. Single sludge denitrification. *Water Research*, v. 15, p. 1135-1152.
- Venkatasubramanian, V. et al. (1990). Process fault detection and diagnosis using neural networks-I. Steady-state processes. *Computers and Chemical Engineering*, v. 14, n.7, p. 699-712.
- Venkatasubramanian, V.; Chan, K. (1989). A neural network methodology for process fault diagnosis. *AIChE Journal*, v. 35, n.12, p. 1993-2002.
- Vitasovic, Z. (1989). Continuous settler operation: a dynamic model. In: *Dynamic Modeling and Expert Systems in Wastewater*, capítulo 3, p. 59-81, editado por Giles G. Patry and David Chapman, Lewis Publishers, Inc, Chelsea, MI, 395p.
- von Sperling, M. (1996). *Princípios do tratamento biológico de águas residuárias. Volume 2: Princípios básicos do tratamento de esgotos*. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, 211p.
- von Sperling, M. (1997). *Princípios do tratamento biológico de águas residuárias. Volume 4: Lodos ativados*. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, 415p.
- Watanabe, K. et al. (1989). Incipient fault diagnosis of chemical processes via artificial neural networks. *AIChE Journal*, v. 35, n. 11, p. 1803-1812.
- WEST *Wastewater treatment plant modelling and simulation environment*. <http://hobbes.rug.ac.be/~peter/WEST.html>. (download 05/01/1999).
- Wilcox, S. J. et al. (1995). A neural network, based on bicarbonate monitoring, to control anaerobic digestion. *Water Research*, v. 29, n. 6, p. 1465-1470.

Working group. Benchmark study. www.ensic.u-nancy.fr/COSTWWTP/Benchmark/Benchmark1.htm. download 20/01/99.

Zanabria Sotomayor, O. A., Park, S. W., Garcia, C. (1999). *Um modelo de referência para o controle do processo de lodo ativado*. São Paulo. /Boletim Técnico da Escola Politécnica da USP/BT/PEE/9918.

APPENDICE I

EQUACIONAMENTO CLÁSSICO DE ECKENFELDER
 (PARA O PROJETO E OPERAÇÃO DE SISTEMAS DE LODOS ATIVADOS)

O processo de lodos ativados é tipicamente descrito utilizando o diagrama de blocos da Figura I.1. O princípio básico é manter uma massa de lodo sobre agitação ou aeração. A quantidade de sólidos suspensos no reator é regulada pela recirculação do lodo sedimentado do decantador secundário. A recirculação tem por finalidade aumentar o tempo de residência celular, aumentando a assimilação de carga de matéria orgânica pelos microrganismos. O material orgânico que entra tem três possíveis saídas: conversão a gás carbônico, lodo de excesso ou efluente clarificado (Henze et al., 1997).

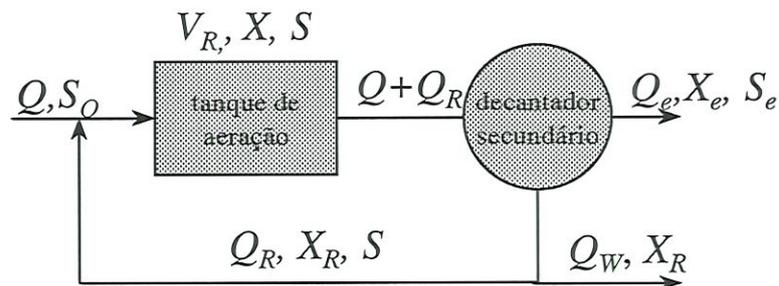


Figura I.1: Diagrama do sistema de lodos ativados (reator aeróbio e decantador secundário).

em que: Q = vazão afluyente do reator (m^3/dia);

Q_e = vazão do clarificado de saída (m^3/dia);

Q_R = vazão de lodo de retorno (m^3/dia);

Q_w = vazão de descarte do lodo (m^3/dia);

S_o = concentração do substrato limitante na entrada do reator (mg/L);

S = concentração do substrato limitante na saída do reator (mg/L);

V_R = volume do reator (tanque de aeração) (L);

X = concentração de microrganismos no tanque de aeração (mg/L);

X_e = concentração de microrganismos no efluente do sistema de decantação (mg/L);

X_R = concentração de microrganismos na linha de retorno de lodo (mg/L).

Fonte: Metcalf e Eddy (1991)

Alguns critérios têm sido utilizados para o projeto e controle do processo de lodos ativados. O controle deste processo é extremamente importante para a manutenção de uma alta eficiência de tratamento sobre amplas condições de operação. Os dois parâmetros mais comuns são o tempo médio de residência celular (θ_c) e a razão alimento/microrganismos

(F/M). von Sperling (1997) enfatiza que o controle do processo de lodos ativados é importante para manter altos níveis de eficiência de tratamento sobre várias condições de operação, sendo que os principais fatores usados em um processo de controle são a manutenção do nível de oxigênio dissolvido no tanque de aeração, a regulagem da quantidade de lodo de retorno e o controle do lodo descartado.

O tempo médio de residência celular (θ_c), ou idade do lodo, pode ser obtido por meio de um balanço de massa no sistema da Figura I.1:

$$\theta_c = \frac{\text{massa de sólidos no sistema}}{\text{massa de sólidos retirada do sistema por unidade de tempo}} \quad (\text{I.1})$$

$$\theta_c = \frac{V_r X}{Q_w X_R + Q_e X_e} \quad (\text{I.2})$$

em que: Q_w = vazão de descarte do lodo (m^3/dia);

Q_e = vazão do clarificado de saída (m^3/dia);

V_r = volume do reator (tanque de aeração) (m^3).

X = concentração de microrganismos no tanque de aeração (mg/L);

X_e = concentração de microrganismos no efluente do sistema de decantação (mg/L);

X_R = concentração de microrganismos na linha de retorno de lodo (mg/L);

Normalmente despreza-se a concentração de sólidos no efluente do decantador secundário, muito mais baixa que as concentrações de microrganismos no tanque de aeração e efluente do sistema e a equação para a idade do lodo resulta:

$$\theta_c = \frac{V_r X}{Q_w X_R} \quad (\text{I.3})$$

Esta situação caracteriza a retirada do lodo excedente pela linha de recirculação. Ou ainda, se a retirada de lodo for efetuada diretamente do tanque de aeração, X e X_R na Equação I.2 podem ser considerados iguais. Daí resulta outra expressão para a idade do lodo:

$$\theta_c = \frac{V_r}{Q_w} \quad (\text{I.4})$$

A determinação dos outros parâmetros de projeto e controle dependem da formulação do balanço de massa global neste sistema para os microrganismos:

$$\left[\begin{array}{l} \text{acúmulo de} \\ \text{microrganismos} \\ \text{dentro do sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{entrada de} \\ \text{microrganismos} \\ \text{no sistema} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{saída de} \\ \text{microrganismos} \\ \text{do sistema} \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{crescimento líquido} \\ \text{de microrganismos} \\ \text{no sistema} \end{array} \right] \quad (I.5)$$

Matematicamente expressando-se:

$$\underbrace{V_r \frac{dX}{dt}}_{\text{acúmulo}} = \underbrace{QX_0}_{\text{entrada}} - \underbrace{(Q_w X + Q_e X_e)}_{\text{saída}} + \underbrace{V_r r'_g}_{\text{crescimento}} \quad (I.6)$$

em que: Q = vazão afluyente do reator (m^3/dia);

r'_g = velocidade líquida de crescimento bacteriano ($\text{mg}/\text{L} \cdot \text{dia}$).

X_0 = concentração de microrganismos na entrada do sistema (mg/L);

A velocidade de crescimento bacteriano pode ser expressa em função da própria concentração de bactérias em um dado instante no reator:

$$r'_g = \frac{dX}{dt} = \mu X \quad (I.7)$$

em que: μ = velocidade de crescimento específico (dia^{-1})

A velocidade líquida de crescimento bacteriano considera fatores como morte e destruição de células. Considera-se que este decaimento da massa celular é proporcional à concentração de microrganismos presentes no meio:

$$r'_g = \mu X - K_d X \quad (I.8)$$

em que: K_d = coeficiente de decaimento endógeno (dia^{-1})

Experimentalmente foi determinado que o efeito limitante do substrato ou nutriente no crescimento bacteriano pode ser definido adequadamente pela expressão de Monod:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_s + S} \quad (I.9)$$

em que: μ_{\max} = velocidade máxima de crescimento específico (dia^{-1});

K_s = constante de meia-velocidade (concentração de substrato quando o crescimento é a metade do crescimento máximo) (mg/L);

S = concentração do substrato limitante (mg/L);

O crescimento bacteriano também pode ser expresso em função do consumo de substrato. Quanto mais alimento é assimilado pelos microrganismos, maior o crescimento bacteriano:

$$r_g = -Yr_{su} \quad (\text{I.10})$$

$$\frac{dX}{dt} = -Y \frac{dS}{dt} \quad (\text{I.11})$$

em que: Y = coeficiente de produção máxima (razão de células formadas por massa de substrato consumido) (mg/mg);

r_{su} = velocidade de utilização do substrato (mg/L.dia).

Considerando-se o termo de decaimento bacteriano, a velocidade líquida de crescimento pode ser escrita como:

$$r'_g = -Yr_{su} - K_d X \quad (\text{I.12})$$

Retornando-se ao balanço de massa da Equação I.6, faz-se as suposições de regime permanente, $\frac{dX}{dt} = 0$, em que não há acúmulo de microrganismos no sistema e ainda que a quantidade de microrganismos na entrada do sistema é desprezível:

$$r'_g = \frac{Q_w X + Q_e X_e}{V_r} \quad (\text{I.13})$$

Substituindo-se a Equação I.13 em I.12:

$$\frac{Q_w X + Q_e X_e}{V_r} = -Yr_{su} - K_d X \quad (\text{I.14})$$

Dividindo-se os dois lados da Equação I.14 por X :

$$\frac{Q_w X + Q_e X_e}{V_r X} = -\frac{Y r_{su}}{X} - K_d \quad (\text{I.15})$$

Nota-se que o lado esquerdo da Equação I.15 é exatamente o inverso da definição de idade do lodo da Equação I.2. Logo:

$$\frac{1}{\theta_c} = -\frac{Y r_{su}}{X} - K_d \quad (\text{I.16})$$

Um balanço de massa para o substrato pode ser escrito como:

$$V_r \frac{dS}{dt} = Q S_0 - Q S - V_r r_{su} \quad (\text{I.17})$$

Em regime permanente, $\frac{dS}{dt} = 0$ e:

$$r_{su} = \frac{(S_0 - S)}{\theta} \quad (\text{I.18})$$

em que: $\theta = \frac{V_r}{Q}$ = tempo de residência hidráulico do reator (dias).

Substituindo-se a Equação I.18 em I.16 e explicitando-se X:

$$X = Y \frac{\theta_c}{\theta} \frac{(S_0 - S)}{1 + \theta_c K_d} \quad (\text{I.19})$$

O termo $-\frac{r_{su}}{X}$ é conhecido como a taxa específica de utilização de substrato U (d^{-1}). Utilizando-se esta definição na Equação I.18:

$$U = -\frac{r_{su}}{X} = \frac{(S_0 - S)}{\theta X} \quad (\text{I.20})$$

Outro termo estreitamente relacionado com a taxa de utilização de substrato (U) e utilizado rotineiramente como parâmetro de projeto e controle operacional é conhecido como a razão alimento/microrganismo (F/M do inglês *food to microorganisms ratio*):

$$F/M = \frac{S_0}{\theta X} \quad (I.21)$$

Os termos U e F/M podem ser inter-relacionados multiplicando-se o numerador e denominador da Equação I.20 por S_0 :

$$U = \underbrace{\left(\frac{S_0 - S}{S_0} \right)}_E \underbrace{\left(\frac{S_0}{\theta X} \right)}_{F/M} \quad (I.22)$$

em que: $\frac{S_0 - S}{S_0} \cdot 100$ é a eficiência global de remoção de substrato, E (%).

Assim:

$$U = \frac{E}{100} \left(\frac{F}{M} \right) \quad (I.23)$$

APPENDICE II

DETALHES DOS BALANÇOS DE MASSA

O ponto de partida para qualquer balanço de massa em qualquer sistema é a especificação do volume de controle. Dependendo do tipo de reator, o volume de controle pode ser o reator inteiro, ou parte dele, um elemento de volume diferencial. No caso do sistema de lodos ativados, o tanque de aeração foi definido como o volume de controle para o balanço de massa das espécies solúveis e particuladas (ver Figura II.1). Um balanço de massa também pode ser feito no decantador secundário, e para isso, um outro volume de controle, nessa parte do sistema também é definido.

Definido o volume de controle no tanque de aeração, um balanço de massa sobre cada uma das espécies envolvidas (reagentes e produtos) é realizado, especificando-se as quantidades da espécie entrando ou deixando o volume de controle, além das quantidades produzidas ou consumidas neste volume (Leslie Grady e Lim, 1980).

O balanço de massa em estado não-estacionário para uma espécie S solúvel no tanque de aeração (ver volume de controle na Figura II.1) de um sistema de lodos ativados é:

$$\left[\begin{array}{l} \text{acúmulo de espécies } S \text{ dentro do} \\ \text{volume de controle } ([M][L^{-3}][t^{-1}]) \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{entrada de espécies } S \text{ no} \\ \text{volume de controle } ([M][L^{-3}][t^{-1}]) \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{saída de espécies } S \text{ do} \\ \text{volume de controle } ([M][L^{-3}][t^{-1}]) \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{taxa de conversão de espécies } S \text{ no} \\ \text{volume de controle } ([M][L^{-3}][t^{-1}]) \end{array} \right] \quad (\text{II.1})$$

ou simplesmente:

$$[\text{acúmulo}] = [\text{entrada}] - [\text{saída}] \pm [\text{conversão}] \quad (\text{II.2})$$

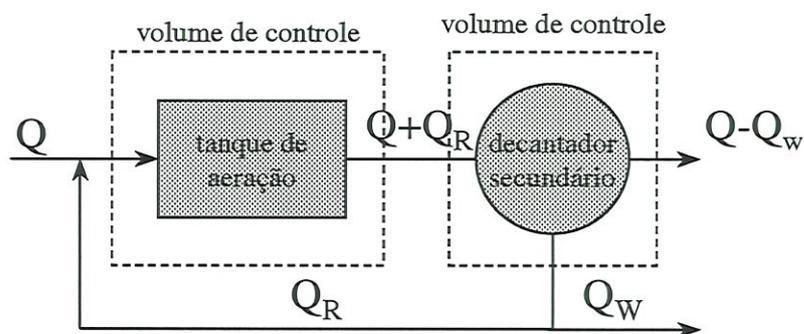


Figura II.1: Volumes de controles para os balanços de massa no tanque de aeração e decantador secundário.

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q}{V} S_O + \frac{Q_R}{V} S - \frac{(Q + Q_R)}{V} S \pm [\text{convers\~{a}o}] \quad (\text{II.3})$$

ac\u00famulo entrada sa\u00edda

em que o \u00edndice O se refere \u00e0 concentra\u00e7\u00e3o da esp\u00e9cie S na entrada do tanque de aera\u00e7\u00e3o e o \u00edndice R \u00e0 concentra\u00e7\u00e3o da esp\u00e9cie S na linha de recircula\u00e7\u00e3o do lodo.

Notando-se que a concentra\u00e7\u00e3o de esp\u00e9cies sol\u00faveis S na linha de recircula\u00e7\u00e3o do lodo \u00e9 sempre igual \u00e0 sa\u00edda do tanque de aera\u00e7\u00e3o, pode-se eliminar o termo $\frac{Q_R}{V} S$ na equa\u00e7\u00e3o II.3:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{Q}{V} (S_O - S) \pm [\text{convers\~{a}o}] \quad (\text{II.4})$$

O termo $[\text{convers\~{a}o}]$ \u00e9 obtido por meio da Tabela 2.1 (Cap\u00edtulo 2) do Modelo N\u00famero 1 da IAWQ. \u00c9 necess\u00e1rio no balan\u00e7o de cada componente sol\u00favel i , somar todos os coeficientes estequiom\u00e9tricos (v_{ij}) dessa coluna i , multiplicados pelas velocidades dos processos (ρ_j) das linhas de interse\u00e7\u00e3o. Um sinal negativo no termo de convers\u00e3o indica que essa esp\u00e9cie \u00e9 consumida e um sinal positivo que \u00e9 produzida.

Um exemplo da obten\u00e7\u00e3o do termo de rea\u00e7\u00e3o no balan\u00e7o de massa para o componente S_S do Modelo N\u00famero 1 \u00e9 apresentado a seguir:

$$[\text{convers\~{a}o}] = r_i = \sum_j v_{ij} \rho_j = -\frac{1}{Y_H} \rho_1 - \frac{1}{Y_H} \rho_2 + 1 \cdot \rho_7 \quad (\text{II.5})$$

em que:

$$\rho_1 = \hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H} \quad (\text{3.7})$$

$$\rho_2 = \hat{\mu}_H \left(\frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_s X_{B,H} \quad (\text{3.8})$$

$$\rho_7 = k_H \frac{X_S/X_{B,H}}{K_X + (X_S/X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{ND}}{K_{ND} + S_{ND}} \right) \right] X_{B,H} \quad (\text{3.13})$$

A substitui\u00e7\u00e3o da Equa\u00e7\u00e3o II.5 na Equa\u00e7\u00e3o II.4 produz a Equa\u00e7\u00e3o 3.2 apresentada na se\u00e7\u00e3o 3.1.1.1.

APPENDICE III

MÉTODO DE RUNGE-KUTTA

É uma família de métodos numéricos extensivamente utilizada para a resolução de equações diferenciais. Todos os métodos Runge-Kutta (RK) têm a seguinte forma geral:

$$c_{i+1} = c_i + \phi h \quad (\text{III.1})$$

em que: ϕ = estimativa do coeficiente angular (função incremento).

O método Runge-Kutta mais utilizado é o de quarta ordem, que tem a seguinte forma:

$$c_{i+1} = c_i + \left[\frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \right] h \quad (\text{III.2})$$

em que:

$$k_1 = f(t_i, c_i) \quad (\text{III.3})$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, c_i + \frac{1}{2}hk_1\right) \quad (\text{III.4})$$

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, c_i + \frac{1}{2}hk_2\right) \quad (\text{III.5})$$

$$k_4 = f(t_i + h, c_i + hk_3) \quad (\text{III.6})$$

e a função f é a equação diferencial original avaliada nos pontos específicos c e t :

$$f(c, t) = \frac{dc}{dt}(c, t) \quad (\text{III.7})$$

A Figura III.1 apresenta uma representação gráfica do método de Runge-Kutta de quarta ordem.

Para a solução de sistemas de equações diferenciais (Equação III.8), n condições iniciais precisam ser conhecidas. Assim, o sistema de equações diferenciais pode ser empregado para estimar os coeficientes angulares de todas as incógnitas. Valores destes coeficientes são utilizados para a previsão da variável c em um instante de tempo futuro e assim sucessivamente.

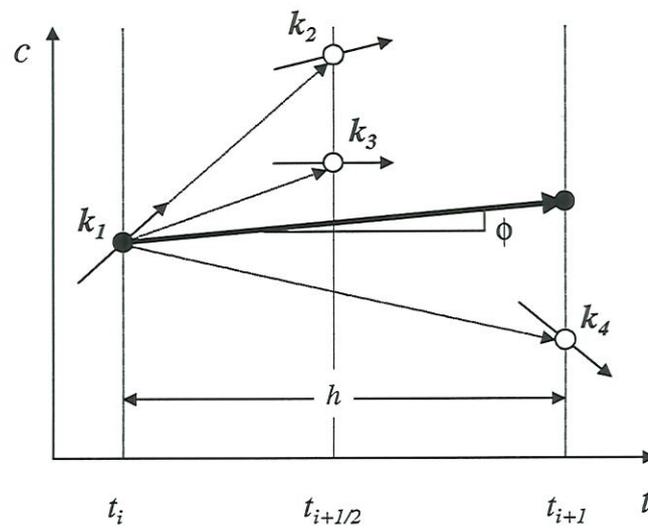


Figura III.1: Descrição gráfica do método de Runge-Kutta de Quarta ordem.

Fonte: Chapra (1997).

$$\frac{dc_1}{dt} = f_1(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

$$\frac{dc_2}{dt} = f_2(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

$$\vdots$$

$$\frac{dc_n}{dt} = f_n(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

(III.8)