



UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**DESENVOLVIMENTO DE METAMODELOS KRIGING E
OTMIZAÇÃO DE UMA PLANTA DE TRATAMENTO DE
EFLUENTES (BSM2)**

Adriana Barbosa da Costa

Orientador:

Antonio Carlos Brandão de Araújo

Campina Grande

Dezembro/ 2016

ADRIANA BARBOSA DA COSTA

**DESENVOLVIMENTO DE METAMODELOS KRIGING E
OTMIZAÇÃO DE UMA PLANTA DE TRATAMENTO DE
EFLUENTES (BSM2)**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação de Engenharia Química, da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientador:

Antonio Carlos Brandão de Araújo

**Campina Grande
2016**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCC

C837d	<p>Costa, Adriana Barbosa da. Desenvolvimento de metamodelos kriging e otimização de uma planta de tratamento de efluentes (BSM2) / Adriana Barbosa da Costa. – Campina Grande, 2017. 84 f. : il. color.</p> <p>Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2016. "Orientação: Prof. Dr. Antonio Carlos Brandão de Araújo". Referências.</p> <p>1. Águas Residuais - Tratamento. 2. Metamodelos Kriging 3. Otimização – Tratamento de Efluentes. I. Araújo, Antonio Carlos Brandão de. II. Título.</p>
CDU 628.2/.3(043)	

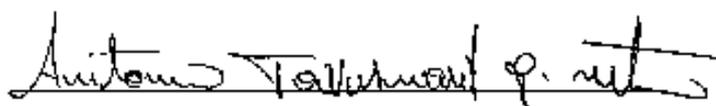
ADRIANA BARBOSA DA COSTA

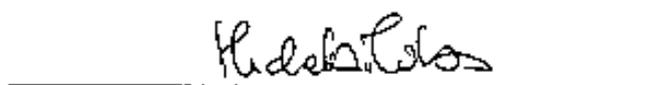
DESENVOLVIMENTO DE METAMODELOS KRIGING E OTMIZAÇÃO DE UMA
PLANTA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES (BSM2)

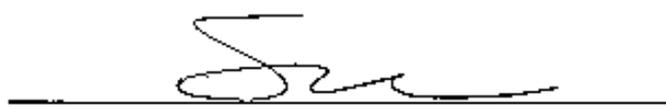
DISSERTAÇÃO APRESENTADA EM: 14/12/16

BANCA EXAMINADORA


Antonio Carlos Brandão de Araújo (DEQ/CCT/UFCG)


Antônio Tavernard Pereira Neto (DEQ/CCT/UFCG)


Michela Mulas (DEQ/CCT/UFCG)


Sidinei Kleber da Silva (DEQ/CCT/UFCG)

Dedico este trabalho a Deus, sempre bondoso, e aos meus pais Adalberto Vieira da Costa e Maria do Socorro Barbosa da Costa por toda força e amor em toda minha caminhada.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por ter me concebido o dom da vida e me segurado nos momentos mais difíceis, me mostrando que a fé nunca falha.

Aos meus queridos pais Adalberto e Socorro por toda a luta de vida para que eu pudesse trilhar meu caminho da melhor forma possível, me alimentando diariamente de amor e esperança. Muito obrigada por me apoiarem e estarem ao meu lado em cada passo dado, vibrando a cada novidade, o que sou devo a vocês.

À minha irmã Adriele por todas as conversas e companheirismo, em toda essa caminhada. Tenha a certeza que estarei aqui sempre que precisar.

Ao meu padrinho João de Deus Soares por sempre me ajudar e não medir esforços para me ver bem.

Ao meu namorado Leonardo Pereira, amoroso e companheiro, por fazer parte do meu mundo me aconselhando e apoiando sempre. Vibrar a cada vitória minha como se fosse sua, só concretiza mais ainda o fato de cada vitória ser nossa.

Aos meus amigos da engenharia química para a vida, especialmente a Daniela Passos, Jocyelis Rodrigues, Cristiane Arcoverde e Francieudeny Leite, alguns distantes fisicamente, mas que se fazem sempre presentes em todos os dias. Obrigada por todos os encontros e momentos de descontração.

À minha amiga Savana Barbosa pelos inúmeros momentos de companheirismo e solidariedade. Obrigada pela sua linda amizade, e por compartilharmos esses anos tão desafiadores, apoiando uma à outra.

Á minha co-orientadora Michela Mulas por toda ajuda, atenção e serenidade. Agradeço pela oportunidade de trabalharmos juntas, e conhecer além do lado profissional, a pessoa humana que és. Tenho certeza que o meu mestrado selou o início da nossa amizade.

Ao meu orientador Antonio Carlos Brandão por me receber de braços abertos em seu grupo de pesquisa. Agradeço pela ajuda e apoio prestados nos momentos mais difíceis da realização deste trabalho.

Ao professor e amigo Severino Rodrigues, por ter desde o primeiro momento acreditado no meu potencial e me proporcionado vários anos de aprendizado junto a ele.

Ao professor Sidinei Kleber, que se tornou um amigo durante minha caminhada, obrigada por me escutar e ajudar sempre, bem como pelas inúmeras contribuições.

Ao professor Antônio Tavernard por contribuir mais que positivamente para realização deste trabalho. Obrigada pela disponibilidade e ajuda.

Aos amigos do LCTF e LPFI, equipe que fiz parte e levo para todo sempre como exemplo de trabalho e amizade.

À equipe do LENP pelo compartilhamento de ideias, especialmente a Victor e Felipe pela ajuda prestada na reta final deste trabalho.

Aos meus amigos da vida, por sempre me fazerem acreditar que sou capaz. Vocês sempre farão parte da minha trajetória.

Ao Departamento de Engenharia Química e todos os professores, parabéns pelo trabalho e compartilhamento de experiências e aprendizado.

“Without ambition, one starts nothing.
Without work, one finishes nothing.
The prize will not be sent to you.
You have to win it.”

Ralph Waldo Emerson

RESUMO

Um constante estudo para o tratamento de águas residuais e descarte de efluentes é necessário a fim de lidar com normas cada vez mais rígidas nesse âmbito. As estações de tratamento de águas residuais podem ser consideradas sistemas altamente não-lineares, devido a existência de perturbações, bem como a interação de um número considerável de variáveis do processo. Neste contexto, o estudo, otimização e controle dessas plantas são essenciais para o bom funcionamento do processo em atenção às exigências. Vários métodos de otimização são propostos na literatura, e suas implementações em aplicações de engenharia podem ser significativamente melhoradas pelo uso de metamodelos representando o modelo rigoroso do processo a partir de dados computacionais. O presente trabalho trata do desenvolvimento de metamodelos, pela aplicação do modelo *Kriging*, para um processo de tratamento de águas residuais. Para tal, são realizadas as etapas de amostragem de pontos, por meio do *Latin Hypercube Sampling*, estimação dos parâmetros e validação. A metodologia proposta baseia-se na geração de dados computacionais por meio do modelo rigoroso para o *Benchmark Simulation Model N°2*, implementado no Simulink[®], e na otimização do processo utilizando os metamodelos *Kriging*. Estes modelos obtidos através de dados de processo rigoroso mostram uma alta precisão e minimização do esforço computacional para o processo de otimização. A Programação Quadrática Seqüencial e o Algoritmo Genético são utilizados para a tarefa de otimização, bem como a geração do modelo de Otimização em Tempo Real. Os resultados obtidos no modelo de referência demonstram a potencialidade da metodologia proposta para minimizar o custo do processo enquanto obedecem as restrições do efluente para as águas residuais tratadas.

Palavras-chave: Tratamento de águas residuais, Benchmark Simulation Model N°2, Metamodelos Kriging, Otimização.

ABSTRACT

A continuous study for improving the treatment of wastewater and the effluent disposal is necessary in order to deal with increasingly stringent environmental laws in this field. Wastewater treatment plants can be considered as highly non-linear systems, due to the existing disturbances as well as the interaction of a considerable number of process variables. In such a context, the study, optimization and control of these plants are essential for the proper operation of the process with respect to requirements. Several optimization methods are proposed in the literature and, their implementation for engineering applications can be significantly improved by the use of metamodels representing the rigorous model of the process starting from computational data. The present work deals with the development of metamodels, such as the Kriging model, a wastewater treatment process. To this end, the steps of data sampling, through Latin Hypercube Sampling, parameter estimation and validation are performed. The proposed methodology is based on the generation of computational data through the rigorous model of the Benchmark Simulation Model No. 2, implemented in Simulink[®], and the optimization of the process using of the Kriging metamodels. These models obtained through the rigorous process data show a high accuracy and the computational effort of the optimization methods. The Sequential Quadratic Programming and Genetic Algorithm are used for the optimization task, as well as the generation of the Real Time Optimization model. The achieved results on benchmark model demonstrate the potentiality of the proposed methodology, to minimize the process cost while obeying the effluent restrictions of the treated wastewater.

Keywords: Wastewater treatment, Benchmark Simulation Model N°2, Kriging Metamodels, Optimization.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	11
LISTA DE TABELAS	13
LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS	14
CAPÍTULO 1	15
1. INTRODUÇÃO	15
1.1. Motivação.....	16
1.2. Objetivos	16
CAPÍTULO 2.....	17
2. TRATAMENTO DE ÁGUAS RESIDUAIS	17
2.1. Processo por Lodos Ativados	18
2.2. Processo de Digestão Anaeróbica.....	21
2.3. Modelo BSM2.....	23
2.3.1. ASM1 (<i>Activated Sludge Model N°1</i>).....	24
2.3.2. ADM1 (<i>Anaerobic Digester Model N°1</i>).....	27
2.4. Geração de Modelos Substitutos.....	28
2.4.1. <i>Latin Hypercube Sampling</i> (LHS)	29
2.4.2. Modelo <i>Kriging</i>	30
2.5. Otimização pelo Toolbox DACE.....	33
2.6. Programação Quadrática Sequencial (SQP).....	34
2.7. Algoritmos Genéticos	35
CAPÍTULO 3.....	37
3. OPERAÇÃO DA PLANTA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES	37
3.1. Modelagem da Planta	37
3.2. Função Objetivo e Restrições	39
CAPÍTULO 4.....	43
4. CONSTRUÇÃO DO METAMODELO KRIGING	43
4.1. Identificação das Variáveis.....	44
4.2. Planejamento Experimental – Hiper cubo Latino	45
4.3. Geração do Metamodelo <i>Kriging</i>	45
4.4. Avaliação do Desempenho	51
CAPÍTULO 5.....	55
5. OTIMIZAÇÃO DO BSM2	55
5.1. Algoritmos SQP e GA	56
5.2. Comparação - Caso Teste	58

5.3. Otimização em Tempo Real (RTO).....	61
6. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	67
7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	68
REFERÊNCIAS BIBIOGRÁFICAS	69
APÊNDICE.....	75
ANEXO I	76
ANEXO II.....	80

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquematisação dos mecanismos biológicos.	19
Figura 2 - Etapas no processo de digestão anaeróbica.	22
Figura 3 - Layout geral do BSM2.....	23
Figura 4 - Layout geral do BSM1.....	24
Figura 5 - Digestor anaeróbico e processos envolvidos.	27
Figura 6 - Exemplo de LHS: Amostragem de X_1 e X_2 para cinco intervalos e pareamento randômico dessas variáveis pelo hipercubo latino.	30
Figura 7 - Algoritmo Genético.	36
Figura 8 - Representação por subsistemas do BSM2 no ambiente <i>Simulink</i> [®]	38
Figura 9 – Metodologia definida para construção do metamodelo <i>Kriging</i> do BSM2.	43
Figura 10 - Dados da corrente de alimentação para o BSM2.	46
Figura 11 - Memodelos <i>kriging</i> versus respostas do BSM2 no <i>Simulink</i> [®] para o Caso 1. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.	48
Figura 12 - Memodelos <i>kriging</i> versus respostas do BSM2 no <i>Simulink</i> [®] para o Caso 2. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.	49
Figura 13 - Memodelos <i>kriging</i> versus respostas do BSM2 no <i>Simulink</i> [®] para o Caso 3. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.	50
Figura 14 – Metodologia definida para construção do metamodelo <i>Kriging</i> do BSM2.	55
Figura 15 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o Caso 1 de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.	63
Figura 16 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o Caso 2 de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.	64
Figura 17 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o Caso 3 de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio,	

SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total. 65

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Variáveis de Estado ASM1.-----	25
Tabela 2 – Composição típica do biogás.-----	27
Tabela 3 - Funções de correlação disponíveis no Toolbox DACE do <i>Matlab</i> [®] . ($d_j = w_j - x_j$) -----	34
Tabela 4 - Limites de qualidade do efluente. -----	40
Tabela 5 - Variáveis manipuladas e controladas para o BSM2.-----	44
Tabela 6 - Valores das variáveis distúrbios para os seis casos do planejamento LHS. -----	47
Tabela 7 - Índices para avaliação do desempenho dos metamodelos <i>kriging</i> . -----	53
Tabela 8 - Resultado da otimização SQP e GA pelo metamodelo <i>kriging</i> para o processo BSM2, para 10 casos de distúrbios.-----	57
Tabela 9 - Comparação entre os resultados das CVs da otimização SQP e modelo <i>Simulink</i> [®] . -----	59
Tabela 10 - Comparação entre os resultados das CVs da otimização GA e modelo <i>Simulink</i> [®] . -----	60
Tabela 11 – Linhas de distúrbio do processo, para corrente de alimentação.-----	75
Tabela 12 - Matriz de Petersen para o modelo ASM1. -----	76
Tabela 13 - Parâmetros estequiométricos e cinéticos para os processos biológicos. -----	77
Tabela 14 - Equações para taxas cinéticas e coeficientes (i=1-12, j=1-19). -----	78
Tabela 15 - Equações para taxas cinéticas e coeficientes (i=13-24, j=1-19).-----	79

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ADM1	Anaerobic Digester Model N°1
ASM1	Activated Sludge Model N°1
BSM1	Benchmark Simulation Model N°1
BSM2	Benchmark Simulation Model N°2
CVs	Controlled variables (Variáveis Controladas)
DACE	Design and Analysis of Computer Experiments
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DQO	Demanda Química de Oxigênio
DVs	Disturbances Variables (Variáveis Distúrbios)
EQI	Effluent Quality Index (Índice de Qualidade do Efluente)
ETAR	Estação de Tratamento de Águas Residuais
GA	Genetic Algorithm (Algoritmo Genético)
IWA	International Water Association
LHS	Latin Hypercube Sampling
MVs	Manipulated Variables (Variáveis Manipuladas)
OCI	Overall Cost Index (Índice de Custo Operacional)
OD	Oxigênio Dissolvido
pH	Potencial Hidrogeniônico
SQP	Sequential Quadratic Programming (Programação Quadrática Sequencial)
TN	Total Nitrogen (Nitrogênio Total)
TSS	Total Suspended Solids (Sólidos Suspensos Totais)
WWTP	Wastewater Treatment Plant (Planta de Tratamento de Águas Residuais)

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

Estações de tratamento de águas residuais (ETAR) sofrem contínuas mudanças, a fim de satisfazer novas restrições em termos de qualidade do efluente a ser descartado em corpos d'água. Além disso, a atual crise da água tem levado a uma gestão mais cuidadosa com os recursos hídricos e as potencialidades da reutilização de águas residuais tratadas.

Além das melhorias alcançadas por meio da adoção de novas tecnologias de equipamentos, a aplicação de técnicas para otimização e controle desses processos, vêm propiciando benefícios na prática. Em se tratando de sistemas de controle, várias e diferentes estratégias foram propostas e aplicadas a processos de tratamento de águas residuais, muitos deles em comparação ao Modelo de Referência de Simulação N°1 (ALEX et al., 2008b; COPP, 2002) definido como um ambiente dinâmico desenvolvido pelo programa europeu COST/IWA 682 e 624 para avaliar o desempenho de diferentes estratégias de controle em estações de tratamento de águas residuais.

Acerca das pesquisas no âmbito de tratamento de efluentes, o Processo de Lodos Ativados por apresentar flexibilidade (adaptativo a vários tipos de influentes), confiabilidade no processo e menor emissão de poluentes para atmosfera, é comumente utilizado para remoção de substâncias orgânicas (tratamento biológico). Alex et al. (2008a) apresenta a simulação do BSM2, que adiciona ao BSM1, responsável pelo tratamento biológico, um pré-tratamento de águas residuais e um tratamento de lodo concentrado que inclui um digestor anaeróbico.

No entanto, ao se considerar o modelo BSM2, depara-se com um modelo bem mais complexo envolvendo um número bem maior de variáveis. Diante isto, para enfrentar problemas de simulação, projeto e otimização baseados em modelos complexos, de forma viável, muitas soluções baseadas em modelos reduzidos e técnicas de aproximação foram propostas na literatura (PALMER e REALFF, 2002). Portanto, como interesse no presente trabalho está o de apresentar o modelo BSM2 por meio de metamodelos, de forma a capturar o maior número de informações do modelo real para operação ótima da WWTP.

1.1. Motivação

Vários aspectos podem ser apresentados para desenvolvimento do trabalho em questão, e estes podem ser resumidos em duas principais vertentes: Social-Ambiental, para o qual o indevido descarte de águas em corpos hídricos pode acarretar maus odores, e principalmente a proliferação de doenças para a comunidade próxima e, econômica, tratando-se de pesquisas acerca da produção com eficiência e obtenção de processos ótimos.

Desta maneira, a simplificação do problema pela utilização do método de krigagem visa uma resposta mais imediata na otimização, em atenção aos objetivos operacionais e econômicos do processo.

1.2. Objetivos

Diante o apresentado, este trabalho tem como objetivo geral a obtenção e utilização de metamodelos em substituição ou conjuntamente a modelos rigorosos de processos industriais. Um dos modelos classificados como metamodelos é o *kriging*, sendo este utilizado no presente trabalho. Com o intuito de explorar os níveis de confiabilidade e flexibilidade da utilização de modelos reduzidos na otimização, estudou-se um caso referência representando um típico processo envolvendo uma estação de tratamento de águas residuais, o BSM2 (*Benchmark Simulation Model N°2*).

Em suma, os objetivos específicos para estudo e otimização do BSM2, representado no ambiente *Simulink*[®], estão relacionados ao cumprimento dos seguintes pontos:

- Identificação das variáveis para o processo (manipuladas, controladas e medidas), bem como dos possíveis distúrbios na alimentação do BSM2;
- Implementação do planejamento experimental de acordo com a seleção das variáveis para o processo;
- Proposição de uma metodologia baseada na utilização da técnica *kriging* em face á um processo complexo de tratamento de águas residuais, envolvendo uma alta qualidade de efluente para descarte;
- Otimização do processo por meio dos metamodelos obtidos, após boa aproximação do mesmo aos dados reais da planta e/ou modelo rigoroso;
- Construção da RTO para a planta de tratamento de águas residuais.

CAPÍTULO 2

2. TRATAMENTO DE ÁGUAS RESIDUAIS

Os processos para tratamento de efluentes seguem normalmente categorias de acordo com o tipo de tratamento realizado, sendo estes alinhados em físicos, químicos e biológicos. Estes sistemas ou estações de tratamento de águas, aceleram o sistema natural de depuração de esgotos, e são implementados devido à demanda de efluente gerado diante ao não suporte de autodepuração pelos sistemas naturais.

Vários componentes podem estar presentes em águas residuais, dentre eles materiais particulados, óleos e graxas, nutrientes (acarretando o crescimento de microrganismos e algas), bem como substâncias tóxicas, geralmente encontradas em efluentes industriais ou locais que lidam com processos químicos. A classificação geral para os tipos de tratamento de efluentes pode ser dada como segue, sendo a escolha feita de acordo com as exigências para cada tipo de água a ser tratada.

O tratamento preliminar dar-se-á pela remoção de sólidos suspensos através da utilização de equipamentos tipo grelhas e grades. Esta mesma linha de remoção de sólidos é ainda verificada no tratamento primário, sendo este realizado por meio de decantadores, que promovem a separação dos sólidos ainda suspensos da parte líquida do influente. O tratamento secundário configura-se como terceira etapa do processo, e constitui-se do tratamento biológico e físico-químico, sendo promovidos por tanques ou reatores com zonas anóxicas e aeradas, e por fim, segue para o tratamento terciário no qual ocorre a desinfecção e remoção de nutrientes das águas.

Este capítulo apresenta uma revisão de trabalhos acadêmicos para melhor entendimento dos processos que ocorrem no tratamento de águas residuais, apresentado neste trabalho como o modelo BSM2. Como pontos principais do presente capítulo, também estão a modelagem de algumas das unidades da planta, responsáveis pelo tratamento das águas de acordo com o mencionado nas etapas acima. Por fim, inicia-se a fundamentação sobre a geração de metamodelos e a representatividade destes frente ao processo existente, e em estudo, para uma operação ótima do BSM2.

2.1. Processo por Lodos Ativados

No que concerne aos processos por lamas ativadas, também conhecidos como processos de lodos ativados, principais reações podem ser mencionadas como as responsáveis pela remoção da matéria carbonácea e nitrogenada. Nestes processos, sistemas que combinam a nitrificação e pré-desnitrificação permitem a remoção de tais compostos, requerendo condições tanto aeróbias quando anóxicas.

O sistema de lamas ativadas é o mais comumente utilizado para tratamento biológico de efluentes, no qual a remoção de componentes poluentes é realizada por meio de diversos mecanismos. Nestes mecanismos há a atuação de uma população de microrganismos normalmente composta por bactérias, algas, fungos e protozoários, responsáveis pela oxidação e consumo da matéria orgânica presente. Esta, segundo Henze et al. (2008), podendo tradicionalmente ser medida como DBO e DQO.

Para que possam desempenhar as atividades, os microrganismos necessitam basicamente de energia, carbono e nutrientes (nitrogênio, fósforo, enxofre, potássio, etc.). No crescimento celular é utilizado o substrato e os nutrientes e o processo pode ser descrito em uma forma simplificada na Equação (2.1) (RODRIGUES, 2013):



No processo de produção de lamas, a matéria orgânica vai sendo assimilada pelos microrganismos em atividade, a DBO da água residual diminui e há a geração de células ativas que dão origem a tais lamas.

O oxigênio é usado por microrganismos para oxidar a matéria orgânica. Algumas bactérias podem usar o oxigênio quer como oxigênio dissolvido ou não: estas são chamadas bactérias heterotróficas. Elas representam a maior parte das bactérias em lamas ativadas e usam carbono orgânico sob a forma de pequenas moléculas orgânicas como substrato. Outras bactérias essenciais para o processo de lamas ativadas são autótrofas. Elas podem crescer somente com o oxigênio dissolvido e usar carbono inorgânico como substrato (METCALF e EDDY, 2003).

Algumas unidades estão envolvidas no tratamento biológico do sistema de lamas ativadas, exemplificadas por:

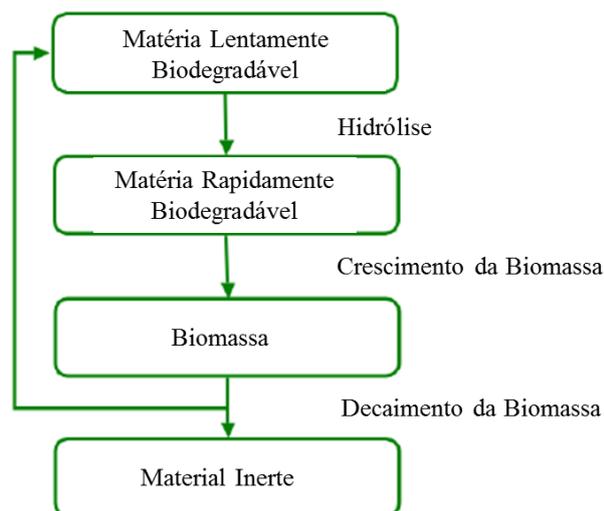
- Tanque aerador (reator biológico);
- Sistema de aeração;

- Tanque decantador (decantador secundário);
- Processo de recirculação de lodo.

O sistema de aeração é realizado nas zonas aeróbias do reator. Neste, estabelecem-se condições que permitem o desenvolvimento rápido de microrganismos aeróbios que através das suas atividades metabólicas reduzem o conteúdo orgânico das águas residuais, e a floculação do material em suspensão tornando-o fácil de remover através de uma simples operação de sedimentação (MOURA, 2012), isto é, pelo tanque decantador. O processo de recirculação do lodo é etapa primordial para manter a estabilização da carga por meio da reposição de nutrientes no reator.

Vários fatores ou variáveis de projeto estão envolvidos nos mecanismos que comportam o sistema de lamas ativadas, dentre eles temperatura, pH, OD (quantidade de O₂ necessário para que a matéria orgânica seja metabolizada), quantidade de biomassa, etc. Estes e outros, influenciam em etapas dos principais mecanismos biológicos do processo, ilustrados na Figura 1.

Figura 1 - Esquemática dos mecanismos biológicos.



Fonte: Adaptado de MULAS (2006).

Em resumo, a etapa de hidrólise propicia a conversão de compostos orgânicos maiores em menores para então haver o consumo destes pela membrana celular. A etapa de crescimento da biomassa é limitada pela quantidade de concentração de substrato no meio e se dá pela junção ou fissão dos microrganismos. Por último, na etapa de decaimento da

biomassa, parte dele biologicamente inerte, ocorre a transformação da biomassa, antes em atividade, em substrato lentamente biodegradável.

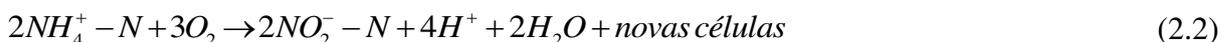
Remoção da Matéria Carbonácea e Nitrogenada

A fração de carbono insolúvel presente sofre processo de hidrólise para ser convertido a carbono orgânico solúvel. Desta forma, o carbono orgânico solúvel, em sua maior parte é removido pela atuação dos microrganismos chamados heterótrofos, a partir da utilização deste composto como substrato na etapa de crescimento da biomassa, sendo a outra parcela do carbono solúvel oxidada para geração de energia. O processo de remoção do carbono orgânico solúvel pode ser realizado tanto pelo crescimento anóxico (utilizando o nitrato como fonte de oxigênio) quanto pelo aeróbio (com presença de oxigênio).

Nitrogênio também conhecido como azoto, está presente em várias formas em águas residuais, segundo Luiz (2012) sua caracterização é realizada principalmente nas formas seguintes: azoto total (N_t), azoto *Kjeldahl* (N_{kt}), azoto amoniacal, nitritos (NO_2^-), nitratos (NO_3^-), azoto orgânico e azoto molecular (N_2). A quantificação do azoto total é realizada considerando os compostos presentes no efluente.

Nas águas residuais, presente principalmente na forma de azoto amoniacal ou amônio, o nitrogênio é removido em duas etapas, são elas: nitrificação e desnitrificação.

O processo de nitrificação ocorre pela presença de microrganismos autótrofos, isto é, que utilizam o carbono inorgânico como fonte de oxigênio para síntese celular, e em condições aeróbias convertem a amônia a nitrato. A energia necessária para o crescimento celular é obtida por meio da oxidação do carbono inorgânico (CO_2), e as bactérias envolvidas em tal processo são dois tipos: as *Nitrossomonas* e as *Nitrobacter*, o primeiro oxida amônia para produto intermediário nitrito (Equação (2.2)), e o segundo converte nitrito em nitrato (Equação (2.3)).



A Equação (2.4) representa o processo total de oxidação da amônia. Bactérias nitrificantes são organismos sensíveis e extremamente susceptíveis a uma grande variedade de inibidores, tais como elevadas concentrações de amônia e ácido nitroso, baixos níveis de OD (<1 mg / l), um pH fora do intervalo ótimo (7,5 – 8,6), e assim por diante (UN, 2003).

A segunda etapa, na qual é realizada a remoção biológica de compostos nitrogenados trata-se do processo de desnitrificação, que ocorre em condições anóxicas. Bactérias na ausência do oxigênio utilizam como fonte de alimentação o nitrato, convertendo-o à nitrogênio gasoso. Esta reação biológica está apresentada como mostra a Equação (2.5).



Nos sistemas de desnitrificação, a concentração de oxigênio dissolvido é um parâmetro crítico. Na presença de OD, os microorganismos utilizam o oxigênio ao invés do nitrato como acceptor de elétrons, devendo assim ser mantido em um nível mínimo, para que não ocorra a inibição do processo de desnitrificação (OLSSON e NEWELL, 1999; METCALF e EDDY, 2003; RODRIGUES, 2013).

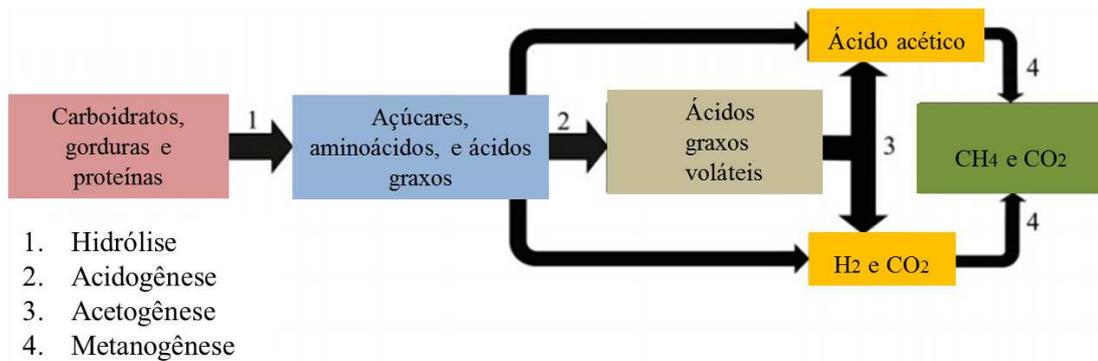
2.2. Processo de Digestão Anaeróbica

A pesquisa e aplicação de unidades por processos de digestão anaeróbica é realidade em se tratando da remoção de material orgânico de águas residuais, e apresenta como vantagens o baixo custo, simplicidade operacional, baixa produção de sólidos e produção de biogás.

A digestão anaeróbia é um processo biológico no qual um consórcio de diferentes tipos de microrganismos, na ausência de oxigênio molecular, promove a transformação de compostos orgânicos complexos (carboidratos, proteínas e lipídios) em produtos mais simples como metano e gás carbônico. Os microrganismos envolvidos na digestão anaeróbia são muito especializados e cada grupo atua em reações específicas. Nos reatores anaeróbios, a formação de metano é altamente desejável, uma vez que a matéria orgânica, geralmente medida como demanda química de oxigênio (DQO) é efetivamente removida da fase líquida, pois o metano apresenta baixa solubilidade na água. Assim, a conversão dos compostos orgânicos em metano é eficaz na remoção do material orgânico, apesar de não promover a sua oxidação completa, a exemplo de sistemas bioquímicos aeróbios (LYRA e PESTANA, 2007).

A obtenção do metano, gás produzido em maior quantidade e incorporado no biogás, se dá por meio de vários processos reacionais (bioquímicos e físico-químicos), havendo em geral a ocorrência de quatro etapas durante a digestão anaeróbica: hidrólise, acidogênese, acetogênese e metanogênese, como ilustra a Figura 2.

Figura 2 - Etapas no processo de digestão anaeróbica.



Fonte: Adaptado de MITCHELL et al. (2015).

Na hidrólise, acontece a conversão de compostos maiores como carboidratos, gorduras e proteínas em compostos menores, sendo os carboidratos convertidos à açúcares, gorduras e/ou lipídios à ácidos graxos, e proteínas à aminoácidos. As etapas de acidogênese e acetogênese trabalham com a conversão dos produtos obtidos em ácidos graxos voláteis e substratos para produção do gás metano, respectivamente.

Por fim, na metanogênese a conversão dos substratos oriundos das duas etapas intermediárias na digestão anaeróbica é realizada, produzindo o metano, como apresenta as Equações (2.6), (2.7) e (2.8).



De acordo com Batstone et al. (2002), além do processo de digestão ter uma produção líquida positiva de energia, o biogás produzido também pode substituir fontes de combustíveis fósseis e, portanto, tem um efeito positivo direto sobre a redução de gases de

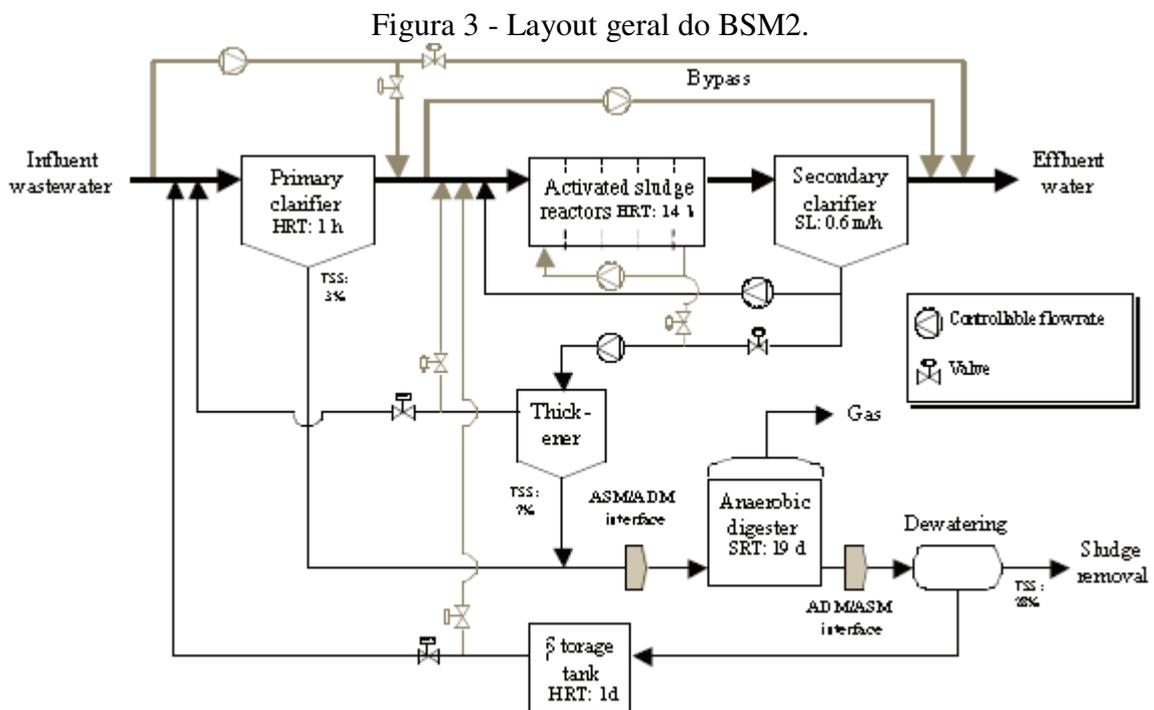
efeito estufa. Isso certamente vai garantir, e provavelmente aumentou drasticamente, a popularidade de processos de digestão anaeróbia de tratamento de resíduos no futuro.

2.3. Modelo BSM2

De 1998 a 2004, o desenvolvimento de ferramentas de referência para a avaliação baseada em simulações de estratégias de controle para plantas de lodos ativados foi realizado na Europa pelos Grupos de Trabalho da ação COST 682 e 624 (Alex et al., 1999). Este trabalho de desenvolvimento está agora continuado pelo Grupo de Trabalho IWA sobre avaliação comparativa das estratégias de controle da ETAR. (ALEX et al., 2008a).

O *Benchmark Simulation Model N°2* (BSM2) é um ambiente computacional que descreve uma planta de tratamento de águas residuais, considerando unidades responsáveis pelo tratamento biológico e unidades responsáveis pelo tratamento da lama.

A Figura 3 apresenta a visão geral da planta BSM2 que envolve um total de sete unidades. O benchmark define o layout da planta, modelo de simulação para cada unidade, parâmetros envolvidos na modelagem, bem como informações sobre carga de influentes da planta juntamente a testes dinâmicos de avaliação de desempenho depois de implementados sistemas de controle.



Fonte: ALEX et al. (2008a).

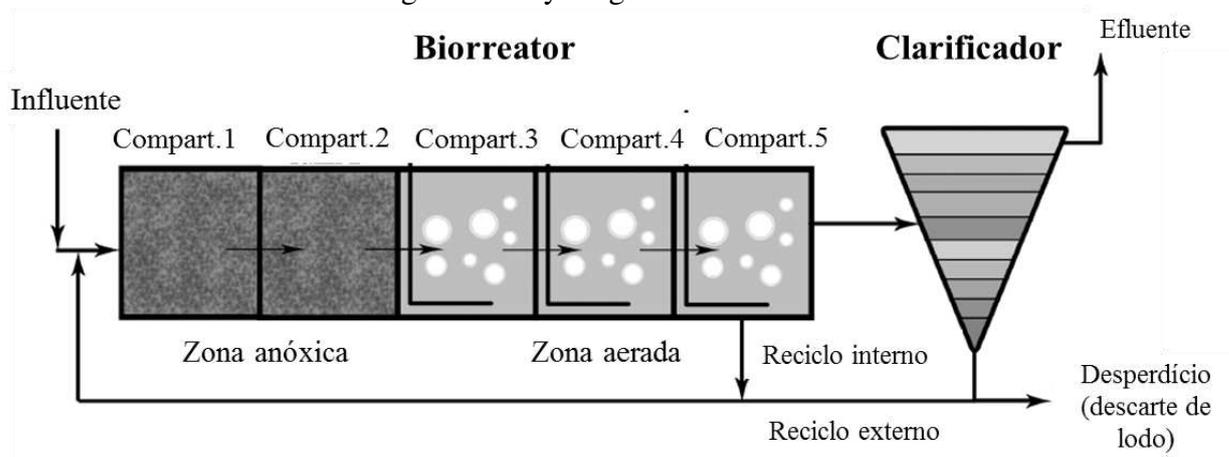
Dois dos modelos utilizados nas unidades do BSM2 são o ASM1 e o do tipo ADM1, o primeiro modela a unidade onde ocorre o tratamento biológico, enquanto o último trabalha com uma das unidades posteriores, responsável pela digestão anaeróbica e geração de biogás.

2.3.1. ASM1 (*Activated Sludge Model N°1*)

Em 1983, a *International Water Association* (IWA), formou um grupo de trabalho com o objetivo de promover a aplicação e adequação de modelos práticos para o desenvolvimento de projeto e operação de sistemas biológicos de tratamento de efluentes em processos por lodos ativados. Em 1987 foi publicado o resultado desse trabalho, culminando no desenvolvimento de uma família de modelos por lodos ativados. O primeiro modelo foi denominado *Activated Sludge Model N°1* (ASM1) (AMARAL, 2014).

O ASM1, considerado como o modelo referência para o processo de tratamento biológico, configura o modelo do biorreator ou *activated sludge reactors* com cinco compartimentos, havendo uma zona anóxica (dois reatores) e uma zona aerada (três reatores), nos quais ocorrem os processos de desnitrificação e nitrificação, respectivamente. Este modelo faz parte do *Benchmark Simulation Model N°1* (BSM1), disposto como mostra detalhadamente a Figura 4, que apresenta um sistema típico de lodo ativado, combinando o modelo ASM1 com uma configuração de sedimentador secundário, não reativo e com dez camadas unidimensionais.

Figura 4 - Layout geral do BSM1.



Fonte: Adaptado de MENESES et al. (2016).

No sedimentador secundário ocorre a separação da água tratada dos lodos decantados, sendo então uma unidade que desempenha atividade importante no tratamento de águas residuais.

De acordo com Haimi et al. (2009), para manter a população microbiológica, o lodo do decantador é recirculado para zona anóxica (devolução de parte do lodo ativado), e parte da carga mista (do quinto compartimento) é reciclada para a entrada do biorreator (reciclo interno). A concentração do lodo é mantida constante por meio de lodo retirado bombeado continuamente a partir do sedimentador.

Na modelagem realizada para o ASM1 está envolvido um total de treze concentrações de componentes, sendo sete destas concentrações solúveis e seis concentrações particuladas, apresentadas na Tabela 1 pelas letras iniciais S e X, respectivamente.

Tabela 1 – Variáveis de Estado ASM1.

Variável de Estado	Notação ASM1
Matéria orgânica solúvel inerte	S_I
Substrato facilmente biodegradável	S_S
Matéria orgânica particulada inerte	X_I
Substrato lentamente biodegradável	X_S
Biomassa heterotrófica ativa	X_{BH}
Biomassa autotrófica ativa	X_{BA}
Produtos particulados resultantes do decaimento de biomassa	X_P
Oxigênio	S_O
Nitrato e nitrito	S_{NO}
$NH_4^+ + NH_3$	S_{NH}
Nitrogênio orgânico solúvel biodegradável	S_{ND}
Nitrogênio orgânico particulado biodegradável	X_{ND}
Alcalinidade	S_{ALK}

Na Tabela 1 está apresentada a notação para as variáveis de estado envolvidas no modelo ASM1. Substrato facilmente biodegradável (S_s) é absorvido pelos organismos de forma a gerir energia e realização da síntese celular, enquanto o substrato lentamente biodegradável (X_s) sofre reação enzimática para então a absorção ser realizada. A biomassa

ativa é dividida em heterotrófica (X_{BH}) e autotrófica (X_{BA}), sendo a primeira classe responsável pela conversão do nitrogênio orgânico solúvel (S_{ND}) em amônia.

Como já mencionado, o modelo ASM1 considera a conversão de amônia para nitrato como reação de uma só etapa, e pode ser verificada na tabela acima pela variável S_{NO} . Ainda na Tabela 1 podem ser observadas as concentrações de matéria orgânica não biodegradável solúvel (S_I) e particulada (X_I), estas sendo biologicamente inertes passam pelo sistema sem sofrer alterações, havendo geralmente a retirada do X_I juntamente ao lodo na corrente de descarte.

De acordo com Mulas (2006), as variáveis de estado incluídos no ASM1 são os componentes fundamentais que atuam sobre o processo, mas eles nem sempre são mensuráveis ou interpretáveis em muitas aplicações práticas. Portanto, algumas variáveis compostas podem ser calculadas a partir das variáveis de estado, a fim de combiná-los em formas que normalmente são medidos em realidade, como DQO (Demanda Química de Oxigênio), TSS (Total de Sólidos Suspensos) e TN (Nitrogênio Total), que serão apresentadas com maior clareza no Capítulo 3.

Em suma, oito processos básicos descrevem o tratamento biológico no sistema de reatores, sendo eles:

- Crescimento Aeróbico dos Heterotróficos;
- Crescimento Anóxico dos Heterotróficos;
- Crescimento Aeróbico dos Autotróficos;
- Decaimento dos Heterotróficos;
- Decaimento dos Autotróficos;
- Amonificação do nitrogênio orgânico solúvel;
- Hidrólise de compostos orgânicos;
- Hidrólise de Compostos Inorgânicos.

De forma a representar a cinética e estequiometria de cada processo (j), o modelo adotou uma forma matricial e para cada componente (i) a taxa de reação envolve seus respectivos coeficientes estequiométricos e taxas de processo (ρ), como mostra a Tabela 12 do ANEXO I. Os parâmetros cinéticos estão apresentados na Tabela 13 do mesmo anexo.

2.3.2. ADM1 (Anaerobic Digester Model N°1)

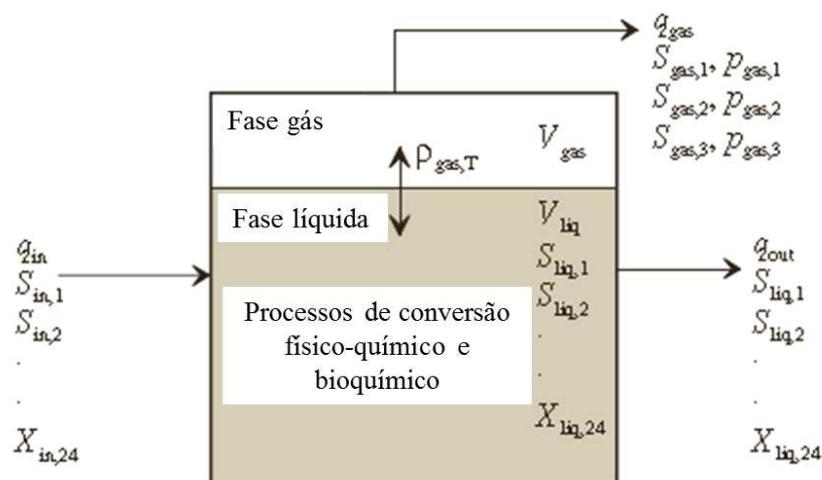
O ADM1, descrito em Batstone et al. (2002), é o modelo que descreve o processo de digestão anaeróbica e sua implementação desvia-se um pouco do descrito pelo autor acima, principalmente por três razões. De acordo com Alex et al. (2008a), em primeiro lugar, o ADM1 é implementado de modo que seja consistente com as outras seções do BSM2. Em segundo lugar, os requisitos de cálculo devem ser considerados. Em terceiro lugar, valores não explícitos são dados em Batstone et al. (2002) no que diz respeito aos conteúdos de carbono e nitrogênio de algumas variáveis de estado.

Como já mencionado na seção de processos por digestão anaeróbica, como principal fonte de energia produzida tem-se o metano que compõe juntamente ao dióxido de carbono e outros gases (valores aproximados na Tabela 2) a corrente do biogás (q_{gas}), como mostra a Figura 5.

Tabela 2 – Composição típica do biogás.

Metano (CH ₄)	50 a 75%
Dióxido de carbono (CO ₂)	25 a 40%
Hidrogênio (H)	5 a 10%
Nitrogênio (N ₂)	1 a 3%
Sulfídrico e outros (H ₂ S, CO, NH ₃)	1 a 2%

Figura 5 - Digestor anaeróbico e processos envolvidos.



Fonte: BATSTONE et al. (2002).

O ADM1 traz consigo equações de equilíbrio ácido-base, taxas de inibição devido ao pH, equações para fase líquida dos componentes e para a fase gasosa. A seguir está representada, de forma geral, a equação para o balanço de massa de cada componente na fase líquida (Equação (2.9)), onde o termo relacionado ao somatório é dado pela multiplicação da taxa cinética de processo (ρ_j) e o coeficiente estequiométrico de cada componente (v_{ij}). As Tabela 14 e Tabela 15 do ANEXO I apresentam todas as taxas e parâmetros cinéticos envolvidos no modelo ADM1.

$$\frac{dS_{liq,i}}{dt} = \frac{q_{in} S_{in,i}}{V_{liq}} - \frac{S_{liq,i} q_{out}}{V_{liq}} + \sum \rho_j v_{ij} \quad (2.9)$$

Há fatores que influenciam diretamente no desempenho do processo de digestão anaeróbica, e alguns dos principais são a temperatura e o pH, sendo a velocidade do metabolismo das bactérias um dos pontos afetados pela temperatura. Com relação ao valor de pH, de acordo com Lyra e Pestana (2007) as bactérias anaeróbicas metanogênicas são consideradas sensíveis ao pH, isto é, o crescimento ótimo ocorre em faixa relativamente estreita de pH. Um reator deve ser operado em pH entre 6.5 e 8.2. Em determinadas condições, é possível a operação satisfatória do reator em pH de até 6.

2.4. Geração de Modelos Substitutos

Como uma forma de otimização, em termos de representação mais simples do problema, redução do esforço computacional e até mesmo redução dos custos agregados à operação de testes, os modelos reduzidos surgiram como meio de substituição parcial ou total do modelo rigoroso, visto o aprimoramento de ferramentas e processos na área da engenharia.

Segundo Gomes (2007) o uso de metamodelos pode ser interessante quando o modelo rigoroso apresenta limitações relacionadas a confiabilidade, como problemas de convergência em procedimentos iterativos. Situações como as descritas são frequentes em diversas áreas do conhecimento, e comuns a diversas áreas da engenharia. Isto explica o esforço realizado para o estudo e aplicação de metamodelos em inúmeras áreas da engenharia, como elétrica, mecânica, aeroespacial e de minas, frequentemente em associação com pesquisas fundamentais em estatística.

Para obtenção dos metamodelos, torna-se necessário a representação e coleta dos dados oriundos do processo rigoroso. Para seleção de pontos a serem considerados para a simulação computacional (modelo rigoroso), utiliza-se de planejamentos experimentais como fonte de aleatoriedade e boa seleção de conjuntos de dados, logo a base da otimização do modelo substituto começa pela identificação local no espaço de projeto, onde irão ser realizadas as simulações. Este processo de identificação de locais no espaço de projeto é conhecido como planejamento experimental (VIANA et al., 2010).

2.4.1. *Latin Hypercube Sampling* (LHS)

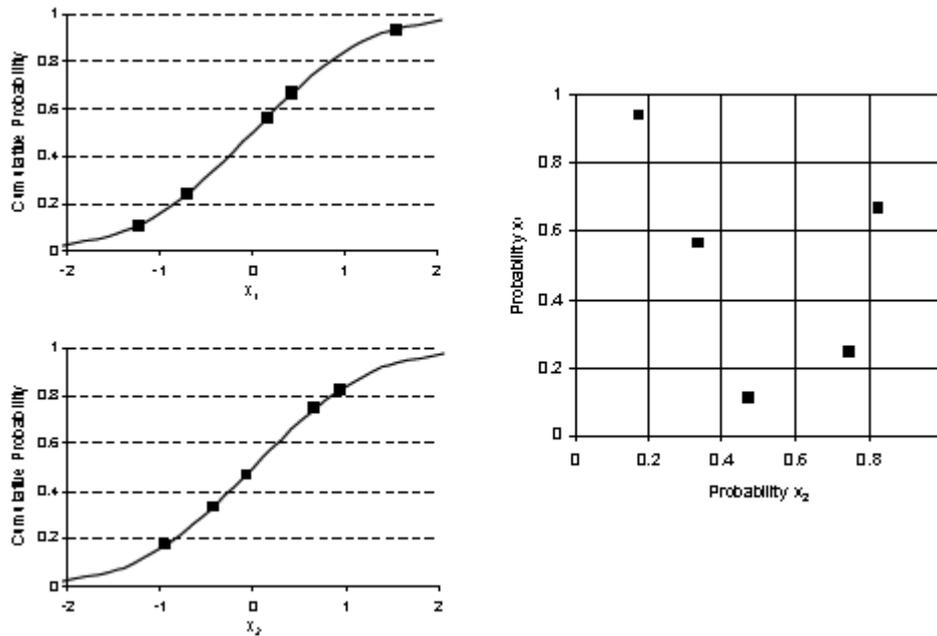
Santner et al. (2003) apresentam diversas metodologias de planejamento experimental voltadas especificamente para experimentos computacionais. Em algumas delas, parte-se da premissa de que características importantes do modelo rigoroso a serem incorporadas ao metamodelo podem estar em qualquer ponto do espaço experimental com igual probabilidade. Estratégias de planejamento experimental baseadas nesta premissa buscam de alguma forma preencher o espaço de busca, sendo frequentemente designados na literatura pela expressão *space filling*. Outras estratégias baseiam-se em um critério específico para orientar a região do espaço a ser explorada. Algumas delas baseiam-se em critérios estatísticos, como as estratégias de Máxima Entropia e diversas variações baseadas no Erro Médio Quadrático de Predição (GOMES, 2007).

O método de planejamento de experimentos pelo LHS é frequentemente utilizado para geração de amostras de distribuições estatísticas multivariadas, e mesmo tendo sido desenvolvido para análises de risco, é amplamente aplicado na engenharia em estudos de casos complexos. Em Keramat e Kielbasa (1997) os autores selecionam o LHS para aplicação em circuitos integrados, apresentando uma variância inferior ao método primitivo de Monte Carlo (MPC). Já no trabalho Mckay et al. (2000) pode-se encontrar uma comparação do LHS com outras técnicas de seleção de amostragem simples, em estudos de Monte Carlo.

Considere um conjunto de n amostras com dimensionalidade k , onde k representará as variáveis envolvidas ($X_1, X_2, X_3, \dots, X_k$). O LHS trabalhará sob a distribuição aleatória de N intervalos para X_i , de forma que $1/N$ seja a probabilidade igual no intervalo considerado para cada uma das variáveis. Cada valor é encontrado aleatoriamente para cada um dos intervalos equiprováveis N e estes são combinados um a um até se completar a seleção de valores em todo o conjunto.

Uma exemplificação gráfica para o conceito apresentado pode ser observado Figura 6, para a qual temos cinco intervalos de amostras em um espaço de projeto de dimensão dois (X_1 e X_2), sendo este o caso do hipercubo latino, como mostrado na Figura 6.

Figura 6 - Exemplo de LHS: Amostragem de X_1 e X_2 para cinco intervalos e pareamento randômico dessas variáveis pelo hipercubo latino.



O método de amostragem por hipercubo latino trabalha com variáveis independentes para distribuição de valores nos intervalos, e garante a seleção de valores aleatoriamente em cada intervalo particionado do conjunto. Note que a Figura 6 traz uma possibilidade de arranjo dos dados (a direita) para o caso acima exemplificado e que somente um ponto estará alocado em cada subintervalo e nessa projeção unidimensional em que se encontra, atendendo assim os critérios do método de amostragem.

A aleatoriedade inerente ao processo significa que existe mais de uma possibilidade do arranjo de amostragem atender aos critérios do LHS (FORRESTER et al., 2008; QUEIPO et al., 2005). Como a amostragem LHS é de natureza estocástica, é aconselhável executar tal programa várias vezes e selecionar a melhor amostra para uso (PINTO, 2014).

2.4.2. Modelo *Kriging*

Técnicas de construção de modelos substitutos podem ser encontradas na literatura, a respeito de várias classes propostas como utilização para tal, por exemplo, funções de base

radial, polinômios, método *kriging*, entre outros. No presente trabalho, o método *kriging*, como aplicação em processos industriais da engenharia química, foi selecionado para geração do metamodelo.

O *kriging*, método estudado nos anos 50 pelo engenheiro de minas sul-africano Daniel G. Krige e mais tarde desenvolvido pelo matemático francês Georges Matheron, para estimar a distribuição espacial de minerais pelo conhecimento de um conjunto de poços de perfuração, traz como princípio a interpolação de dados, proporcionando o conhecimento de uma variável numérica não medida através de pontos amostrais de uma certa região de interesse, nos quais essa variável numérica é conhecida.

Sendo considerado um modelo caixa preta, tendo os dados de saída obtidos pelo experimento computacional, um metamodelo krigagem consiste em (CELSE, 2015):

- (1) A escolha de alguns insumos bem localizados.
- (2) Avaliar a resposta modelo nesses locais.
- (3) Determinação da função krigagem com base em avaliações anteriores.

Dado uma matriz de amostras S , tendo como elementos ou variáveis independentes do processo $x_{:,j}$, onde j representa a j -ésimo coluna da matriz X , a matriz resposta Y denotará as variáveis dependentes do mesmo processo. O conjunto de metamodelos *kriging* Y_{kg} construído a partir de S pontos de projetos e das respostas Y , que representa o modelo rigoroso será dado por:

$$\hat{y}_l(x) = F(\beta_l, x) + z_l(x), \quad l = 1, \dots, q \quad (2.10)$$

onde a notação \hat{y} de forma a simplificar, expressa as respostas determinísticas de $Y_{kg}(x)$, o termo F representa funções do modelo de regressão e z funções baseadas em funções randômicas gaussianas, distribuídas com média zero e variância σ^2 . Parâmetros de regressão são apresentados como β , obtidos para cada variável independente i .

Representado como uma combinação linear de k funções selecionadas, o modelo de regressão pode ser apresentado como:

$$f_i : R^n \mapsto R, \quad (2.11)$$

$$F(\beta, x) = \sum_{i=1}^k \beta_i \cdot f_i(x)$$

Na Equação (2.10), a cada função $z(x)$ há uma covariância associada, para a qual considerando variáveis w e x , tem-se:

$$E[z_l(w) z_l(x)] = \sigma_l^2 R(\theta, w, x), \quad l = 1, \dots, q \quad (2.12)$$

onde σ^2 é a variância associada as variáveis e \mathcal{R} é a matriz correlação, associada ao parâmetros θ . O valor para a correlação R é dependente da escolha do método de correlação a ser utilizado.

Segundo Pinto (2014) uma interpretação da Equação (2.10) é que os desvios do modelo de regressão, embora a resposta seja determinística, pode assemelhar-se a um caminho de uma amostra de um processo estocástico z , convenientemente escolhido.

Preditor Estimado

Considere um conjunto de amostra n , para respostas Y avaliadas em valores de x não experimentados, o preditor estimado, \hat{y} , é dado por:

$$\begin{aligned} \hat{y}(x) &= r^T \cdot R^{-1} \cdot Y - (F^T \cdot R^{-1} \cdot r - f)^T \cdot \beta^* \\ &= f^T \cdot \beta^* + r^T \cdot R^{-1} \cdot (Y - F \cdot \beta^*) \\ &= f(x)^T \cdot \beta^* + r(x)^T \cdot \gamma^* \end{aligned} \quad (2.13)$$

onde $r(x)^T$ é o vector de correlação entre o ponto X e os pontos dos dados amostrados (x_1, x_2, \dots, x_n). Os coeficientes β e γ são encontrados pelas expressões (2.14) e (2.15), respectivamente, sendo o último computado através dos resíduos.

$$\beta^* = (F^T R^{-1} F)^{-1} F^T R^{-1} Y \quad (2.14)$$

$$R\gamma^* = Y - F\beta^* \quad (2.15)$$

O modelo *kriging* é aplicado através do toolbox DACE do *Matlab*[®], para realização da otimização do BSM2.

2.5. Otimização pelo Toolbox DACE

Muitos dos processos a serem otimizados envolvem uma série de características complexas, traduzidas em um grande número de unidades interligadas e variáveis de processo, neste âmbito uma realidade é o uso dos modelos reduzidos ou mais conhecidos como metamodelos em substituição aos processos complexos, mas que representem em um alto nível de fidelidade todo o processo de interesse.

A abreviação DACE denomina uma toolbox *Design and Analysis of Computer Experiments* no qual é realizada a implementação do modelo *kriging*. O toolbox conta com dois principais programas, que de acordo com Lophaven et al. (2002) consta de:

- *dacefit*. Este computa os elementos do modelo *kriging*, especialmente os parâmetros θ a serem encontrados para solução do problema de otimização não-linear;
- *predictor*. Prediz as respostas da amostra não experimentada e estima os erros dessa predição.

Com relação às correlações citadas do modelo *kriging*, estas podem ser apresentadas como o produtório de correlações estacionárias, de forma geral como mostrado em (2.16):

$$R(\theta, w, x) = \prod_{j=1}^n R_j(\theta, w_j - x_j) \quad (2.16)$$

A Tabela 3 apresenta sete das opções disponíveis para predição dos dados.

A escolha da função de correlação deve ser motivada pelo fenômeno subjacente, por exemplo, uma função que queremos otimizar ou um processo físico que queremos modelar. Se o fenômeno subjacente é continuamente diferenciável, a correlação função provavelmente irá mostrar um comportamento parabólico perto da origem, o que significa que a Gaussiana, a cúbica ou a função spline deve ser escolhida. Por outro lado, fenômenos físicos geralmente mostram um comportamento linear perto da origem, e exp, expg, lin ou esférica normalmente têm melhor desempenho (LOPHAVEN et al., 2002).

Tabela 3 - Funções de correlação disponíveis no Toolbox DACE do *Matlab*[®]. ($\mathbf{d}_j = \mathbf{w}_j - \mathbf{x}_j$)

Função Correlação	$R_j(\theta_j, \mathbf{d}_j)$
Exponencial:	$\exp[-\theta_j d_j]$
Exponencial Geral:	$\exp[-\theta_j d_j ^{\theta_{n+1}}], 0 < \theta_{n+1} \leq 2$
Gauss:	$\exp[-\theta_j (d_j)^2]$
Linear:	$\max\{0, 1 - \theta_j d_j \}$
Esférica:	$1 - 1.5\xi_j + 0.5\xi_j^3, \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$
Cúbica:	$1 - 3\xi_j + 2\xi_j^3, \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$
Spline:	$\zeta(\xi_j) = \begin{cases} \zeta(\xi_j), \xi_j = \theta_j d_j \\ 1 - 15\xi_j^2 + 30\xi_j^3, 0 \leq \xi_j \leq 0.2 \\ 1.25(1 - \xi_j)^3, 0.2 \leq \xi_j \leq 1 \\ 0, \xi_j \geq 1 \end{cases}$

Fonte: LOPHAVEN et al. (2002).

2.6. Programação Quadrática Sequencial (SQP)

Baseado no cálculo do gradiente para a função objetivo e restrições do problema, a SQP é um método de otimização que leva em consideração uma aproximação sequencial do problema não-linear em um problema de programação quadrática, para resolução a cada iteração principal.

Nas iterações principais do SQP uma aproximação da Hessiana, H , da função Lagrangeana, L , é obtida utilizando um método de atualização quase-Newton. Logo a Hessiana é usada para gerar um subproblema QP cuja solução serve para formar uma direção de busca num procedimento de procura unidimensional (ANTICH, 2011).

O problema quadrático pode ser indicado como:

$$f_k + \nabla f_k^T * p + 0.5 * p^T * \nabla^2 f_k^T * p \tag{2.17}$$

$$\nabla c_i^T * p + c_i \geq 0$$

onde f_k é o valor da função objetivo, $\nabla f_k T$ é o vetor gradiente da função objetivo, $\nabla^2 f_k T$ é matriz Hessiana (segunda derivada) da função objetivo, c_i e $\nabla c_i T$ são os valores da restrição i e seu gradiente, todos avaliados no ponto de solução da iteração atual x_k . p é um vector que representa a direção da mudança na solução de cada iteração, e é calculada a partir da solução do problema de otimização representada em (2.17) (SEQUERA, 2014).

Após procedimento e determinação, uma nova solução para iteração $k+1$ é obtido, sendo:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k * d^k \quad (2.18)$$

onde α^k é o tamanho do passo.

2.7. Algoritmos Genéticos

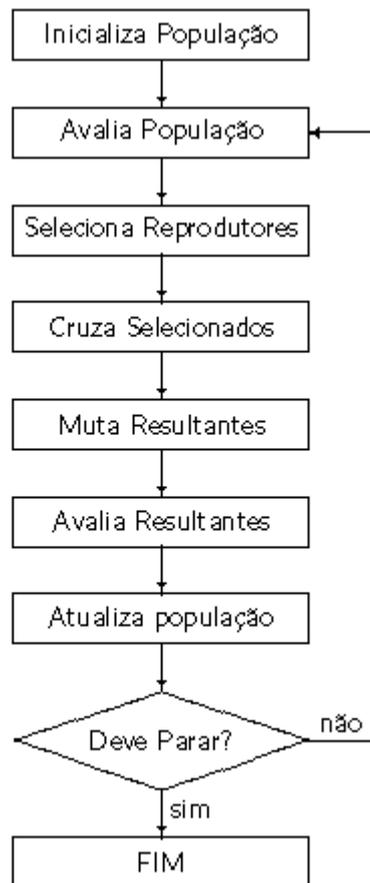
Algoritmos genéticos, também conhecidos como GA, são uma família de algoritmos computacionais, baseados em princípios da evolução dos seres vivos, utilizados em diversos problemas de otimização. Segundo Tanomaru (1995) a grande popularidade que os GAs atingida recentemente se deve a dois importantes fatores: a publicação de um livro tutorial sobre GAs por um dos alunos de doutorado de Holland, David Goldberg um pesquisador extremamente ativo e com excelente potencial didático, e às Conferências Internacionais sobre Algoritmos Genéticos (IC – GAs), que têm se realizado a cada dois anos nos Estados Unidos desde 1985.

Basicamente, os GAs operam num conjunto de soluções aplicando o princípio da sobrevivência dos indivíduos mais aptos para produzir uma solução cada vez melhor, diferentemente de outros métodos que partem de um ponto do espaço de busca para encontrar a solução ótima. Dessa maneira, geração após geração, um novo conjunto de indivíduos é criado pelo processo de seleção dos indivíduos progenitores, de acordo com o nível de aptidão associado ao problema. A procriação é feita entre os progenitores através de operadores extraídos da genética natural. Este processo leva à evolução de indivíduos que se adaptam melhor ao problema, de modo semelhante à adaptação natural (TELES e GOMES, 2010).

Fazendo analogia ao darwinismo, a partir da geração de um conjunto de possíveis soluções para o problema de engenharia, o processo de evolução ou avaliação do problema é

realizado por meio do algoritmo genético. A Figura 7 mostra um fluxograma com as etapas relacionadas ao funcionamento de um GA.

Figura 7 - Algoritmo Genético.



Fonte: LUCAS (2002).

Como critério de parada para os algoritmos genéticos utiliza-se, normalmente, o número máximo de gerações, o tempo limite de processamento ou o critério da estagnação, ou seja, quando não se observa melhoria da população depois de várias gerações consecutivas (TELES e GOMES, 2010).

CAPÍTULO 3

3. OPERAÇÃO DA PLANTA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES

Algumas abordagens no estudo e implementação de métodos para uma operação ótima na área de tratamento de efluentes são encontradas na literatura. Como já mencionado, estações de tratamento de efluentes tratam-se de sistemas envolvendo um grande número de variáveis, isto é, modelos complexos nos quais há a interação das várias operações das unidades consideradas para a realização do processo. Desta forma, um dos métodos difundidos na área de engenharia com aplicação em tais modelos complexos é o método *kriging*, o qual se baseia na geração de metamodelos em substituição parcial ou completa ao modelo computacional do processo.

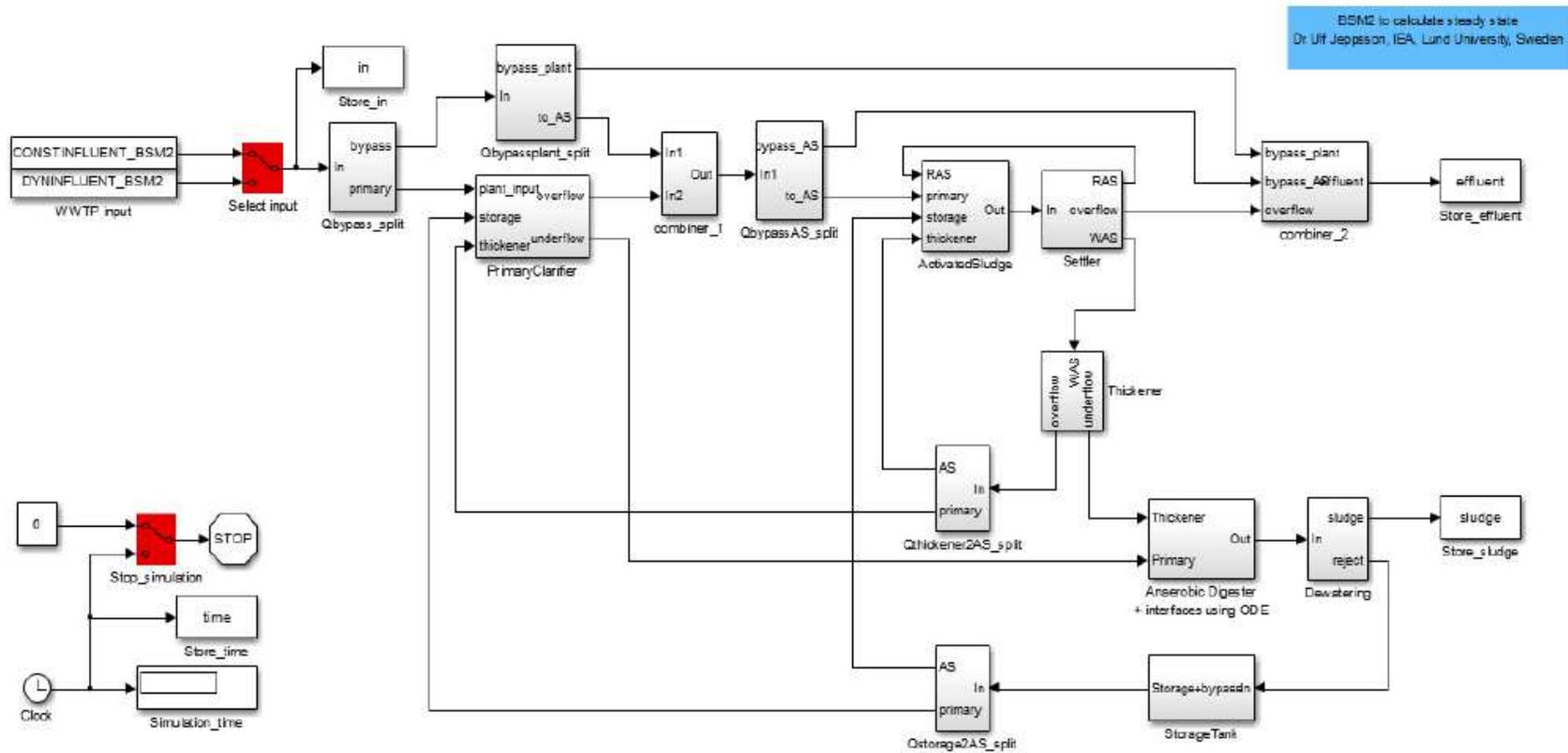
Esta seção apresenta de forma direta e completa os termos envolvidos na função objetivo para o BSM2, bem como as restrições a serem atendidas de forma a considerar uma operação ótima da planta de tratamento de águas residuais.

3.1. Modelagem da Planta

O BSM2 conta com um sistema de cinco biorreatores seguido de um sedimentador secundário para tratamento biológico do efluente e um digestor anaeróbio pra tratamento da lama ativada, como principais unidades do processo de tratamento. Reciclos externos e internos fazem parte da estrutura da planta industrial, visto a necessidade da reposição de material orgânico, bem como um maior aproveitamento no tratamento dos efluentes.

A modelagem e simulação do BSM2 foram realizadas no *Simulink*[®] e *Matlab*[®], construídas por equações e modelos que regem os processos que ocorrem em cada unidade da ETAR. No *Simulink*[®] as operações unitárias estão apresentadas como subsistemas, isto é, cada bloco apresenta internamente a modelagem da unidade. A Figura 8 apresenta o modelo BSM2 desenvolvido por Jeppsson no ambiente Simulink, sendo este utilizado no presente trabalho.

Figura 8 - Representação por subsistemas do BSM2 no ambiente *Simulink*®.



Alex et al. (2008a) apresenta toda a modelagem e considerações para operação do BSM2, tendo sido o trabalho referência para desenvolvimento dessa dissertação.

A alimentação da planta (influyente) foi definida pelos mesmos autores como um arquivo de dados considerando 609 dias de operação, e leva em conta as variações de temperatura sazonais, bem como efeito de precipitação ao longo do ano. Sendo necessário um tempo de estabilização para o processo sob condições dinâmicas, dos dados disponíveis 245 dias são utilizados para tal fim e 364 para avaliação de desempenho da planta.

Um outro arquivo disponível para influyente da planta é apresentado como dados de alimentação no estado estacionário (constinfluent_bsm2.mat), contendo valores médios do arquivo obtido sob condições dinâmicas (609 dias) para as treze concentrações envolvidas, total de sólidos suspensos, vazão de entrada e temperatura de operação do BSM2. Considerando o uso de dados após o período de estabilização do processo para obtenção dos metamodelos, o arquivo “constinfluent_bsm2.mat” foi utilizado para operação da planta no presente trabalho.

3.2. Função Objetivo e Restrições

Sendo, segundo Goldbarg e Luna (2000), a otimização de processos importante em qualquer área de conhecimento, visto que a sua finalidade é solucionar problemas que afetam o desempenho de algum setor, esta pode ser trabalhada no que concerne à maximização ou minimização de uma função objetivo. Desta forma, a definição de objetivos operacionais relacionados às restrições do processo e definição da função objetivo são etapas essenciais na otimização de processos.

O BSM2 traz consigo dois níveis de análise, também conhecidos como níveis de avaliação de desempenho, que dizem respeito à critérios avaliados (índices de qualidade do efluente e custo operacional), e à violação dos limites de qualidade no efluente (como mostra a Tabela 4).

Tabela 4 - Limites de qualidade do efluente.

Variável	Limite
N_{tot}	$\leq 18 \text{ g N.m}^{-3}$
COD_{tot}	$\leq 100 \text{ g COD.m}^{-3}$
SNH	$\leq 4 \text{ g N.m}^{-3}$
TSS	$\leq 30 \text{ g SS.m}^{-3}$
BOD_5	$\leq 10 \text{ g BOD.m}^{-3}$

O EQI (Índice de Qualidade do Efluente), como apresenta a Equação (3.1), está ligado aos impostos e multas pagas devido ao descarte de poluentes em corpos d'água, baseado no peso de cargas de compostos que tem grande influência sob a qualidade dos corpos receptores:

$$EQI = \frac{1}{t_{obs} \cdot 1000} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \left(B_{TSS} \cdot TSS_{eff}(t) + B_{COD} \cdot COD_{eff}(t) + B_{Nkj} \cdot S_{NKj,eff}(t) + B_{NO} \cdot S_{NO,eff}(t) + B_{BOD5} \cdot BOD_{eff}(t) \right) Q_{eff}(t) \cdot dt \quad (3.1)$$

Sendo:

$$S_{NKj,eff} = S_{NH,eff} + S_{ND,eff} + X_{ND,eff} + i_{XB}(X_{B,H,eff} + X_{B,A,eff}) + i_{XP}(X_{P,eff} + X_{I,eff})$$

$$TSS_{eff} = 0.75 \cdot (X_{S,eff} + X_{I,eff} + X_{B,H,eff} + X_{B,A,eff} + X_{P,eff})$$

$$BOD_{5,eff} = 0.25 \cdot (S_{S,eff} + X_{S,eff} + (1 - f_P) \cdot (X_{B,H,eff} + X_{B,A,eff}))$$

$$COD_{eff} = S_{S,eff} + S_{I,eff} + X_{S,eff} + X_{I,eff} + X_{B,H,eff} + X_{B,A,eff} + X_{P,eff}$$

onde Q_{eff} é a taxa de fluxo do efluente, TSS o total de sólidos suspensos no efluente, COD a demanda química de oxigênio no efluente, S_{NKj} , concentração de nitrogênio *Kjeldahl* no efluente, S_{NO} , concentração de nitrato no efluente e BOD_5 a demanda bioquímica de oxigênio no efluente. Os coeficientes B_i são fatores de ponderação para os diferentes tipos de poluição.

Os custos operacionais de uma estação de tratamento dependem do sistema de tratamento em si e pode ser dividido em mão de obra, energia, manutenção, uso de produtos químicos, tratamento de lamas químicas e custos de descarte. O objetivo é basicamente reduzir o custo da energia e da disposição final do lodo, tanto quanto possível (RODRIGUES, 2013). Neste contexto, o OCI (Índice de Custo Operacional) agrega o valor oriundo do funcionamento do BSM2, e envolve as seguintes parcelas do custo total:

- Energia de aeração (AE);

$$AE = \frac{S_o^{sat}}{t_{obs} \cdot 1.8 \cdot 1000} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \sum_{k=1}^5 V_{as,k} \cdot K_{La_k}(t) dt \quad (3.2)$$

Para a qual temos: concentração de saturação do oxigênio, S_o^{sat} , volume dos reatores, V , coeficiente de transferência de oxigênio, K_{La} , dada em d^{-1} , e k referindo-se o número do compartimento do biorreator.

- Energia de bombeamento (PE);

$$PE = \frac{1}{t_{obs}} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \left(0.004 \cdot Q_{int}(t) + 0.008 \cdot Q_r(t) + 0.05 \cdot Q_w(t) + 0.075 \cdot Q_{pu} + 0.06 \cdot Q_{du} + 0.004 \cdot Q_{tu} \right) dt \quad (3.3)$$

Dependendo das vazões de reciclo interno (Q_{int}), reciclo externo (Q_r), taxa de fluxo de saída de resíduos de lodo (Q_w), vazão de saída do clarificador primário (Q_{pu}), vazão de saída da unidade de desidratação (Q_{du}) e vazão de saída do espessante (Q_{tu}) [m^3/d].

- Produção de lama (SP);

$$SP = \frac{1}{t_{obs}} \left(TSS(609 \text{ dias}) - TSS(245 \text{ dias}) + 0.75 \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} (X_{S,w} + X_{I,w} + X_{B,H,w} + X_{B,A,w}) Q_w(t) dt \right) \quad (3.4)$$

onde TSS é a quantidade de sólidos no sistema.

- Consumo de fonte externa de carbono (EC);

$$EC = \frac{COD_{EC}}{t_{obs} \cdot 1000} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \sum_{k=1}^n Q_{EC,k} dt \quad (3.5)$$

onde $Q_{EC,k}$ é a taxa de fluxo de carbono externo adicionado ao compartimento k do reator (para ajudar no tratamento biológico) e COD_{EC} a concentração da matéria rapidamente biodegradável.

- Energia de mistura na zona anóxica (ME);

$$ME = \frac{24}{t_{obs}} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \sum_{k=1}^5 \left[\begin{array}{l} 0.005 \cdot V_{as,k} \text{ if } K_{La_k}(t) < 20d^{-1} \\ 0 \text{ outro valor} \end{array} \right] dt \quad (3.6)$$

- Produção de metano (METprod);

$$MET_{prod} = \frac{16 \cdot P_{atm}}{RT_{ad} t_{obs}} \int_{t=245 \text{ dias}}^{t=609 \text{ dias}} \frac{Q_{gas}(t) \cdot p_{gas, ch4}(t)}{P_{gas}(t)} dt \quad (3.7)$$

Sendo Q_{gas} o fluxo de gás do digestor anaeróbico e T_{ad} a temperatura de operação do mesmo.

- Energia de aquecimento para o digestor (HE^{net});

$$HE^{net} = \max(0, HE - 7 \cdot MET_{prod}) \quad (3.8)$$

A função objetivo global de custo a ser minimizada é dada pela Equação (3.9) para fins no estado estacionário e sujeita a restrições de regulamentação do efluente (legislação) como apresentado na Tabela 4.

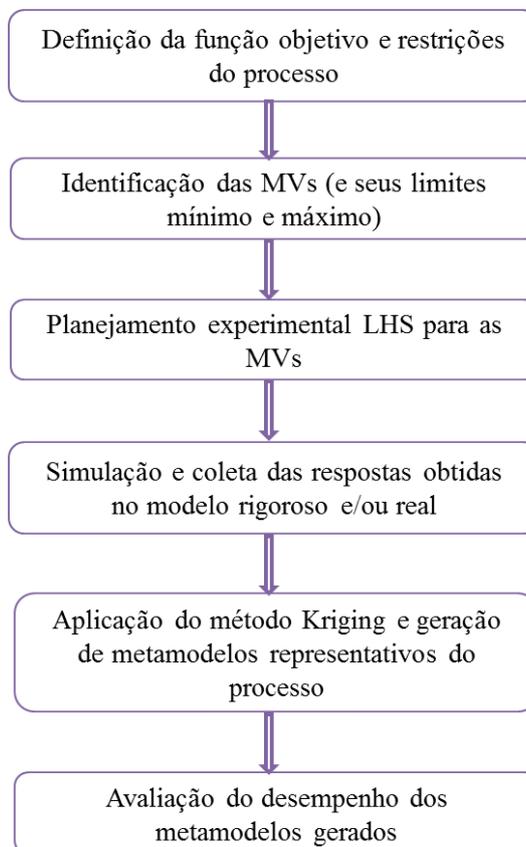
$$OCI = AE + PE + 3SP + 3EC + ME - 6MET_{prod} + HE^{net} \quad (3.9)$$

CAPÍTULO 4

4. CONSTRUÇÃO DO METAMODELO KRIGING

Como etapas primordiais têm-se o estudo acerca de todas as variáveis envolvidas no BSM2, bem como geração de amostras representativas do processo para obtenção do modelo reduzido. O LHS (*Latin Hypercube Sampling*) é utilizado na seleção de tais amostras. A partir da determinação das amostras, são gerados dados de processo com o modelo rigoroso (BSM2 no *Simulink*[®]), sendo estes utilizados na construção dos metamodelos a serem otimizados. A Figura 9 apresenta as etapas iniciais necessárias para geração dos modelos substitutos.

Figura 9 – Metodologia definida para construção do metamodelo *Kriging* do BSM2.



É importante salientar que o modelo de simulação BSM2, disponibilizado pelo grupo de pesquisa COST/ IWA, apresenta um sistema de controle padrão para concentração da amônia no quinto reator. Para avaliação da metodologia proposta no presente trabalho, quaisquer

sistemas de controle foram retirados, de forma a obtermos inicialmente dados oriundos do processo sem atuação de controladores e sensores.

4.1. Identificação das Variáveis

A identificação de variáveis se dá a partir do estudo e exploração do sistema, e também se configura como etapa importante para uma boa confiabilidade no modelo reduzido obtido, visto que a boa escolha das variáveis (manipuladas e controladas) garante boa representativa do processo real.

A Tabela 5 apresenta as variáveis manipuladas (MVs) e controladas (CVs) utilizadas no processo de otimização do BSM2. Para esta seleção final de variáveis, considerou-se intuitivamente um sistema com duas “linhas” de operação, bem como apresentado no trabalho de Barbu et al. (2016), para o tratamento do efluente pelo BSM2, sendo a primeira linha responsável pelo tratamento biológico da água, e a segunda linha responsável pelo tratamento das lamas.

Tabela 5 - Variáveis manipuladas e controladas para o BSM2.

Variáveis Manipuladas (MVs)	Variáveis Controladas (CVs)
Coeficiente de transferência de oxigênio (KLa ₃)	Nitrogênio Total (N _{tot})
Coeficiente de transferência de oxigênio (KLa ₄)	Demanda Química de Oxigênio (COD)
Coeficiente de transferência de oxigênio (KLa ₅)	Concentração de amônia (S _{NH})
Reciclo interno (Q _{int})	Sólidos Suspensos Totais (TSS)
Reciclo externo (Q _r)	Demanda Bioquímica de Oxigênio (BOD)
Fluxo da corrente de descarte de lodo (Q _w)	

Compete à ETAR apresentada pelo modelo BSM2, o envolvimento de um maior número de variáveis principalmente ligadas à linha do tratamento de lamas, entretanto algumas das variáveis não foram consideradas no presente trabalho, pelo fato de ter sido levado em consideração a seleção somente de variáveis independentes, desta forma a “linha” responsável pelo tratamento de lamas fica bem determinada pela taxa de fluxo da corrente do

descarte de lodo do clarificador secundário (Q_w) e toda a influência do comportamento global da planta.

O estudo realizado, para posterior aplicação da técnica *kriging* na ETAR, levou em consideração distúrbios na corrente de alimentação para 28 casos.

4.2. Planejamento Experimental – Hipercubo Latino

O primeiro passo para a construção de um modelo substituto baseado no ajuste de dados é a geração de uma amostra de pontos (PINTO, 2014), que serão alimentados ao modelo rigoroso para obtenção de respostas do mesmo que permitam a geração de metamodelos ou modelos substitutos do processo.

O planejamento experimental realizado não levando em consideração a distância mais uniforme possível entre os pontos amostrais traz consigo erros de predição, podendo ser justificados pela própria aleatoriedade inerente ao processo. Diante isto, para tal planejamento foi realizada a geração de várias amostras de pontos, sendo selecionado o conjunto mais uniforme no espaço hipercubo.

A geração das várias amostras foi permitida através da execução várias vezes do algoritmo para o LHS desenvolvido no ambiente *Matlab*[®], e que pode ser encontrado no ANEXO II, baseado no procedimento descrito por SANTNER et al. (2003).

4.3. Geração do Metamodelo *Kriging*

Modelos reduzidos que são obtidos a partir de dados gerados com um modelo rigoroso são frequentemente designados na literatura por metamodelos (MECKESHEIMER et al, 2002). A metodologia normalmente designada por DACE é a utilizada na geração de metamodelos. De acordo com Martin e Simpson (2005) esta metodologia envolve (i) a escolha de uma estratégia de planejamento experimental para a geração de dados; (ii) a escolha de um modelo para representar os dados e (iii) ajuste do modelo aos dados (GOMES, 2007).

Já tendo sido definido nos tópicos abordados anteriormente a geração dos dados por meio de um planejamento experimental, o toolbox DACE/MATLAB conta com a alimentação dos dados obtidos a partir do modelo rigoroso (utilizando-se do planejamento LHS) e da escolha do modelo de correlação, para estimação de parâmetros para o problema e geração de modelos *kriging*.

Os modelos de correlação disponíveis no toolbox DACE estão apresentados na Tabela 3 do Capítulo 2, ficando a cargo do usuário a determinação de qual modelo utilizar. No presente trabalho foi utilizada a correlação exponencial para geração dos parâmetros pelo método *kriging*.

O processo de obtenção dos dados pelo modelo rigoroso, para posterior geração dos metamodelos *kriging*, contou com a utilização das duas amostras de dados geradas pelo planejamento LHS como dados de entrada do processo, tendo sido realizada a construção dos metamodelos a partir da amostra com 500 experimentos, também chamados neste trabalho por dados de construção, e a validação dos metamodelos obtidos utilizando-se a amostra de 100 experimentos, também chamados aqui como dados de validação.

De acordo com o exposto, e tenho como ideia estudar o processo de geração dos metamodelos para diferentes situações de perturbações na alimentação do BSM2, foi também realizado um planejamento LHS gerando uma matriz 16 (variáveis da alimentação para o BSM2) por 28 linhas/ experimentos (Tabela 11 do APÊNDICE). O estudo consistiu em alimentar o modelo BSM2 do *Simulink*[®] com novos valores para a carga do efluente a ser tratado na ETAR. Foi predefinida uma faixa de variação de 10% (para o LHS) para mais e para menos em cima dos valores apresentados na Figura 10, exceto para o TSS, que foi obtido pela soma das concentrações de particulados envolvidos na carga de acordo com o termo definido na Equação (3.1).

Figura 10 - Dados da corrente de alimentação para o BSM2.

VARIÁVEL	VALOR	UNIDADE
$S_{I,stab}$	27.22	g COD.m ⁻³
$S_{S,stab}$	58.17	g COD.m ⁻³
$X_{I,stab}$	92.49	g COD.m ⁻³
$X_{S,stab}$	363.94	g COD.m ⁻³
$X_{B,H,stab}$	50.68	g COD.m ⁻³
$X_{B,A,stab}$	0	g COD.m ⁻³
$X_{P,stab}$	0	g COD.m ⁻³
$S_{O,stab}$	0	g (-COD)/m ³
$S_{NO,stab}$	0	g N.m ⁻³
$S_{NH,stab}$	23.85	g N.m ⁻³
$S_{ND,stab}$	5.651	g N.m ⁻³
$X_{ND,stab}$	16.12	g N.m ⁻³
$S_{ALK,stab}$	7	mole.m ⁻³
TSS_{stab}	380.34	g .m ⁻³
$Q_{I,stab}$	20648.36	m ³ .d ⁻¹
T_{stab}	14.85	°C

Fonte: Adaptado de ALEX et al. (2008).

A Tabela 6 apresenta os valores obtidos para cada variável da corrente de alimentação da ETAR por meio do planejamento LHS realizado, sendo apresentados e analisados 6 dos 28 casos gerados (como mencionado acima).

Tabela 6 - Valores das variáveis distúrbios para os seis casos do planejamento LHS.

Variável	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5	Caso 6
S _I	27,79	24,97	25,36	26,98	27,86	27,12
S _S	60,53	62,36	55,57	63,40	58,51	52,66
X _I	101,51	83,92	88,66	92,35	95,57	91,21
X _S	399,09	339,47	333,01	354,93	350,54	391,68
X _{B,H}	51,90	46,46	53,41	54,94	47,45	53,14
X _{B,A}	0	0	0	0	0	0
X _P	0	0	0	0	0	0
S _O	0	0	0	0	0	0
S _{NO}	0	0	0	0	0	0
S _{NH}	25,85	22,84	24,64	22,12	26,04	22,31
S _{ND}	5,44	5,16	5,61	5,79	5,23	5,45
X _{ND}	17,73	15,06	16,72	15,80	16,56	15,65
S _{ALK}	7,00	7,00	7,00	7,00	7,00	7,00
TSS	414,38	352,40	356,32	376,68	370,17	402,03
Q	22639,55	18807,56	19295,89	21448,67	22283,08	20824,56
T	15,82	15,75	14,48	13,63	13,71	14,79

Tendo em vista a similaridade do comportamento das curvas observado após obtenção dos resultados, as Figuras 11 a 13 apresentam o ajuste dos dados do metamodelo *kriging* gerado e dos dados de resposta do modelo rigoroso para cada uma das restrições (TN, COD, SNH, TSS, BOD) e função objetivo do BSM2 avaliados para o Caso1, Caso 2 e Caso 3 dos seis casos de perturbação no sistema apresentados na Tabela 6.

Figura 11 - Memodelos *kriging* versus respostas do BSM2 no *Simulink*[®] para o **Caso 1**. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.

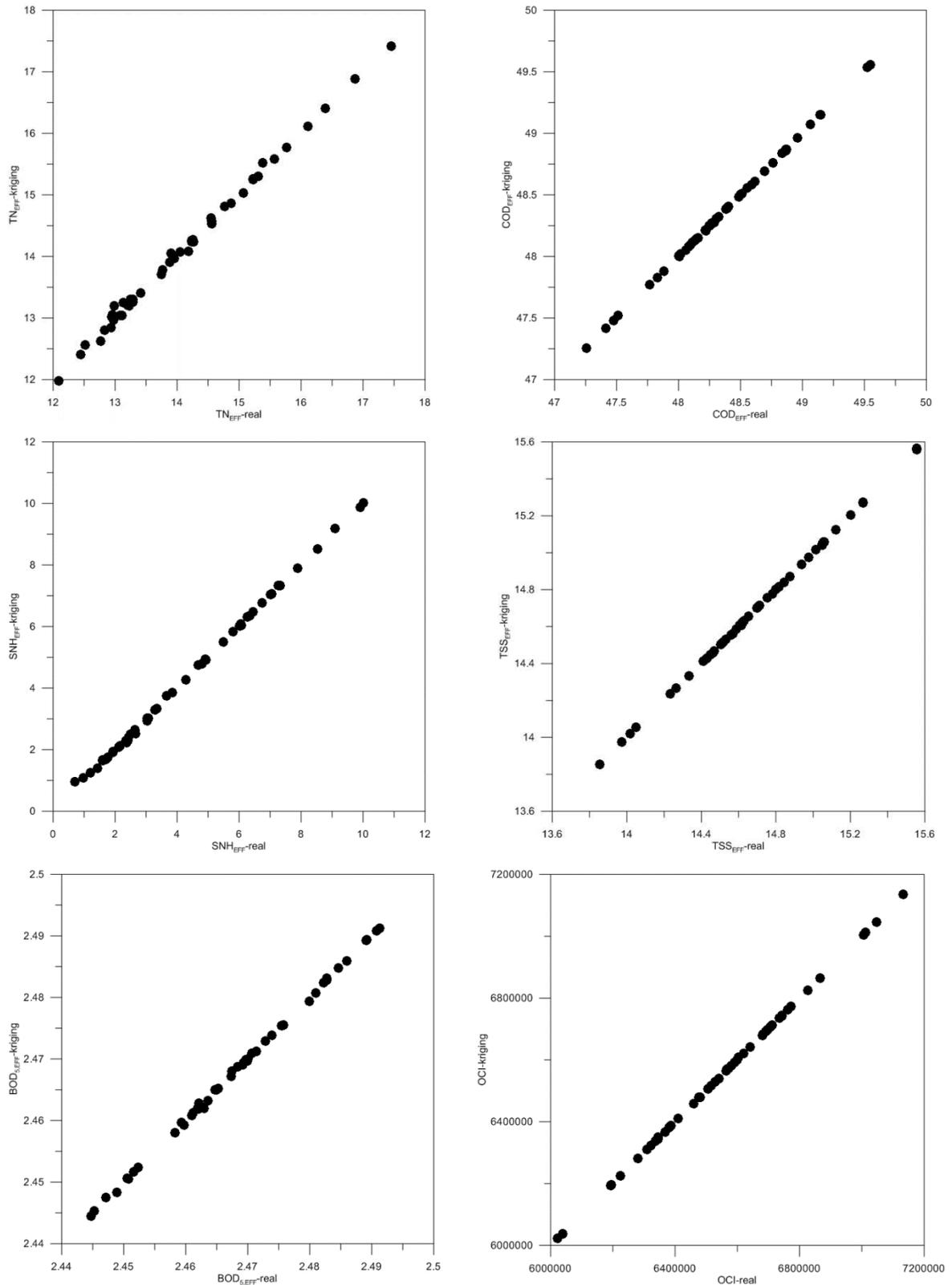


Figura 12 - Memodelos *kriging* versus respostas do BSM2 no *Simulink*[®] para o **Caso 2**. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.

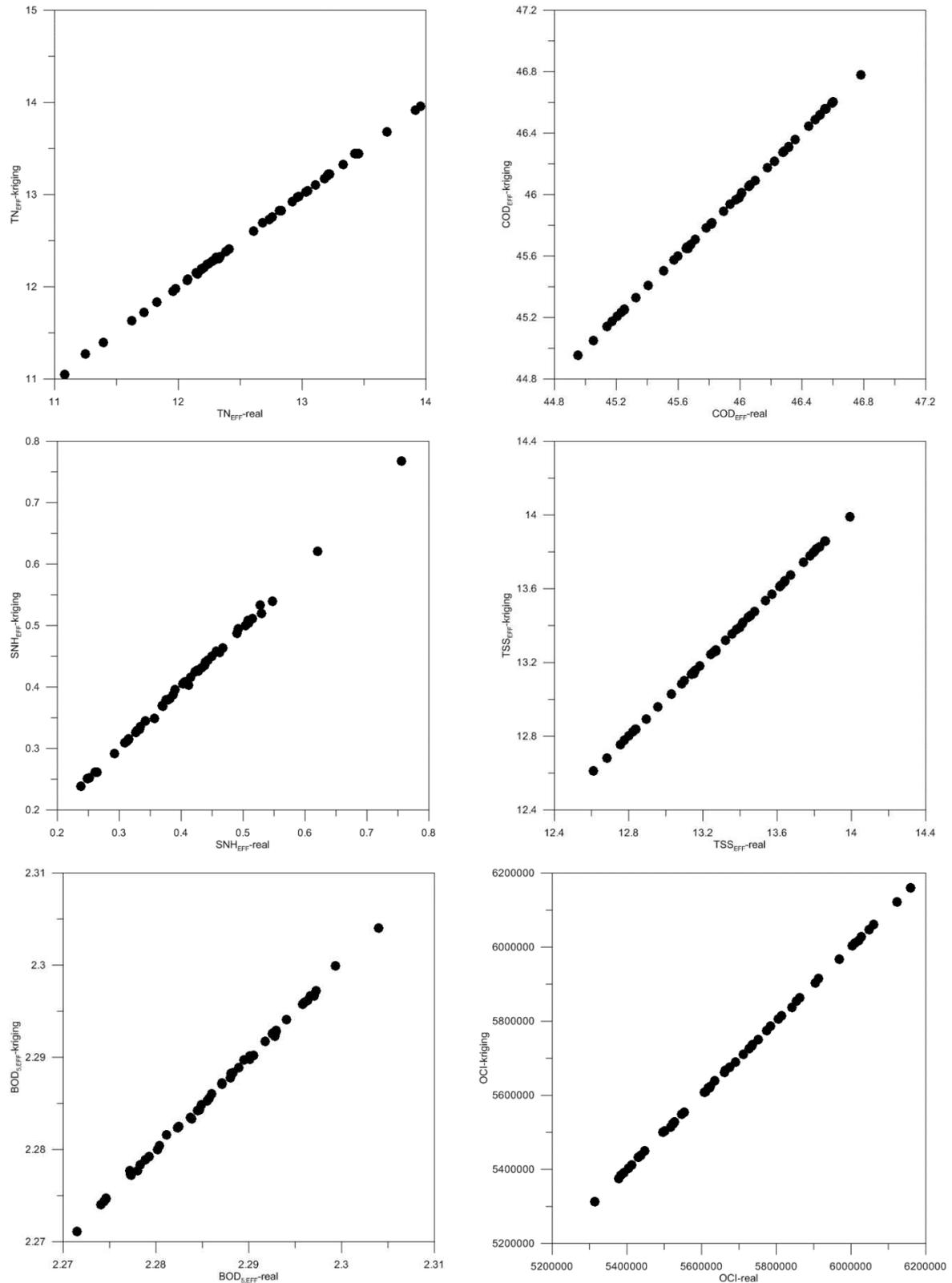
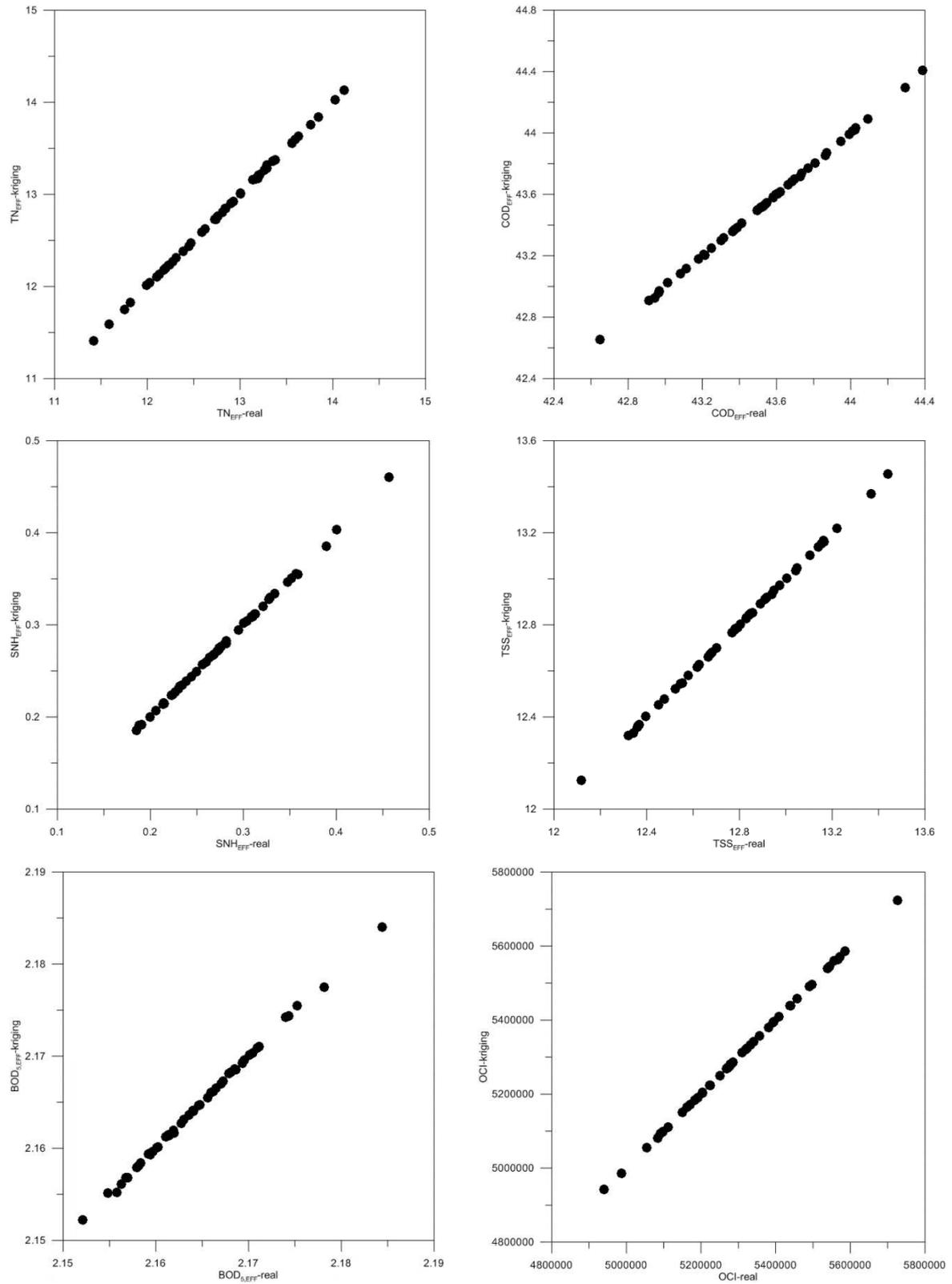


Figura 13 - Memodelos *kriging* versus respostas do BSM2 no *Simulink*[®] para o **Caso 3**. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.



Os diagramas apresentados mostram a correlação entre os dados obtidos pelo método *Kriging* (após obtenção dos metamodelos para restrições de saída do efluente) e pelo modelo rigoroso, que diz respeito a planta de tratamento de efluentes simulada no pacote *Simulink*[®].

Com base nos comportamentos observados, pode-se verificar uma tendência de alinhamento dos resultados na angulação de 45° no espaço gráfico, como já era esperado, e uma distribuição quase uniforme dos pontos ao longo dessa linha diagonal, confirmando a correlação supracitada.

Realizando uma análise minuciosa, e possível observar na Figura 11 que a predição dos metamodelos para a variável de nitrogênio total na saída do BSM2 apresenta um desempenho inferior quando comparada com as demais, e este comportamento pode ser notado graficamente por meio da região de pequena dispersão de dados obtida para o TN. Entretanto, isto se configura como apenas um desalinhamento na região inicial do gráfico, ainda assim apresentando uma relação quase linear entre os dados gerados pelos metamodelos (dados estimados) e os dados do modelo rigoroso (dados reais do BSM2).

De acordo com o abordado na literatura, torna-se possível a realização de análises de desempenho dos interpoladores, por meio dos indicadores estatísticos propostos por Camargo & Sentelhas (1997). No presente trabalho, visando um resultado mais quantitativo relacionado ao desempenho dos metamodelos *Kriging* gerados, tais indicadores foram calculados para os casos estudados acima e estão apresentados na próxima seção.

4.4. Avaliação do Desempenho

Com base nos dados obtidos para os metamodelos gerados para a ETAR (modelo BSM2) foi possível realizar avaliação do desempenho para os mesmos.

Muitos autores utilizam dos indicadores estatísticos propostos por Camargo & Sentelhas (1997), definidos como coeficiente de correlação (r) e índice de concordância (d), para avaliações dos métodos utilizados em seus trabalhos, a exemplo de Leitão et al. (2007), Castro et al. (2010) e Acosta et al. (2009) muitos deles ligados ao estudo de ações climatológicas da região.

A precisão ou grau de dispersão dos dados em relação à média é verificado pelo indicador “ r ”, enquanto o grau de exatidão do modelo ou afastamento dos dados em relação aos dados medidos (observados) pode ser aferido pelo indicador “ d ”, e estes são calculados como mostram as Equações (4.1) e (4.2), respectivamente. O índice de concordância “ d ”,

varia entre os valores zero e 1, sendo que quanto mais próximo da unidade, maior a concordância entre os dados.

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(E_i - \bar{E})}{\sqrt{\left(\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2\right)\left(\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2\right)}} \quad (4.1)$$

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - E_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|O_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} \quad (4.2)$$

onde N é o número total de experimentos, O_i é o valor real e E_i é o valor da variável estimada pelo método.

A classificação em termos de desempenho é definida pelo índice de confiança “ c ”, dado pela multiplicação dos índices de precisão e exatidão, sendo ótimo para valores maiores que 0,85, muito bom para valores entre 0,76 e 0,85, bom entre 0,66 e 0,75, mediano para valores entre 0,61 e 0,65, sofrível entre 0,51 e 0,60, ruim entre 0,41 e 0,50; e péssimo para valores menores ou iguais a 0,4.

$$c = r * d \quad (4.3)$$

Na Tabela 7 são apresentados os resultados obtidos para o coeficiente de correlação (r), índice de concordância (d) e índice de confiança (c) por meio dos dados estimados via técnica *kriging* e medidos para cada restrição do processo, correspondentes aos comportamentos observados das Figuras 11 a 13, isto é, Caso 1, Caso 2 e Caso 3, bem como para o Caso 4, Caso 5 e Caso 6 também avaliados no presente trabalho.

Pode-se observar, o ótimo desempenho na predição dos dados por meio da técnica *Kriging* para todas as variáveis de saída consideradas para o BSM2, sendo notória a boa precisão e exatidão dos modelos substitutos ao processo, a verificar pelos índices e status de desempenho ótimo para cada um dos casos.

Tabela 7 - Índices para avaliação do desempenho dos metamodelos *kriging*.

	<i>r</i>	<i>d</i>	<i>c</i>	Desempenho
<i>TN</i>	0,9978	0,9989	0,9967	Ótimo
<i>COD</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9994	0,9996	0,9990	Ótimo
<i>TSS</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9996	0,9997	0,9993	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 1				
<i>TN</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>COD</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9985	0,9992	0,9977	Ótimo
<i>TSS</i>	1,0000	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9994	0,9999	0,9991	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 2				
<i>TN</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>COD</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9997	0,9998	0,9995	Ótimo
<i>TSS</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9997	0,9998	0,9995	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 3				
<i>TN</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>COD</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>TSS</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 4				
<i>TN</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>COD</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9989	0,9992	0,9981	Ótimo
<i>TSS</i>	0,9999	0,9999	0,9998	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9998	0,9999	0,9997	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 5				
<i>TN</i>	0,9961	0,9974	0,9935	Ótimo
<i>COD</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>SNH</i>	0,9978	0,9987	0,9965	Ótimo
<i>TSS</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
<i>BOD</i>	0,9995	0,9997	0,9992	Ótimo
<i>Custo</i>	1,0000	0,9999	0,9999	Ótimo
Caso 6				

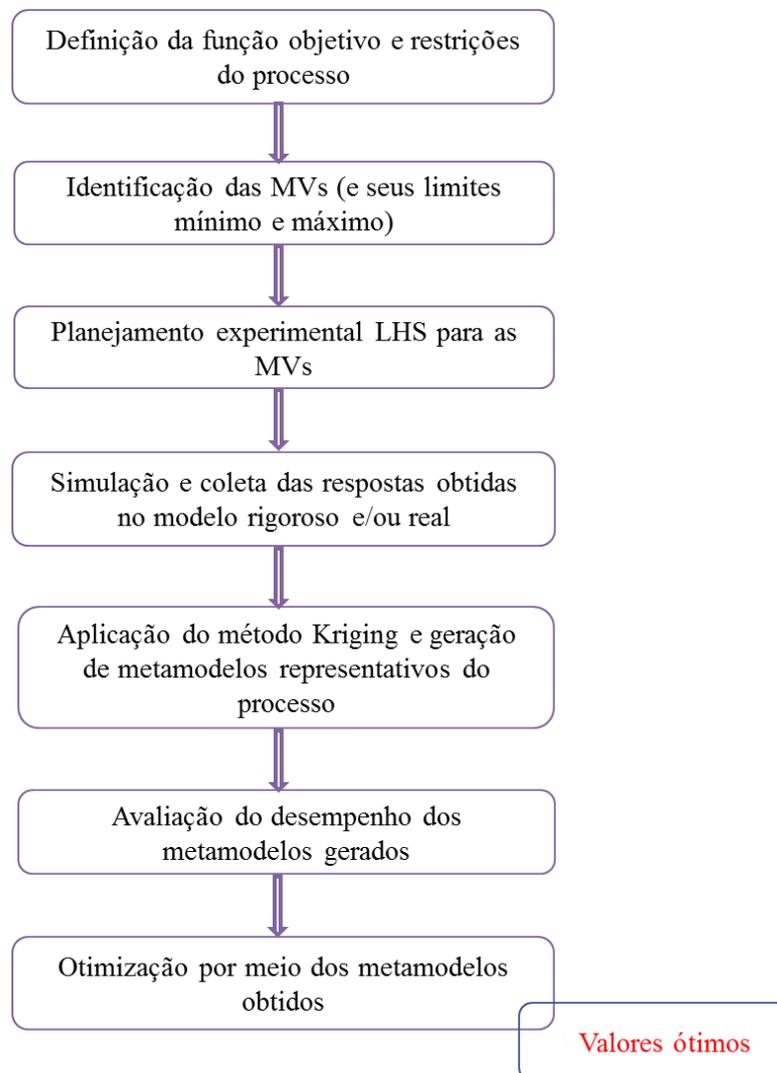
É interessante notar que para a maioria dos casos onde o coeficiente de correlação (r) para a variável SNH não se encontra entre $1 \leq r \leq 0.9999$, o mesmo não ocorre para a concentração de TN, ou vice-versa. Isso mostra a influência que uma variável tem sobre a outra, também verificado em alguns outros estudos realizados no BSM2 tendo como base o uso da técnica *Kriging*.

CAPÍTULO 5

5. OTIMIZAÇÃO DO BSM2

Após definição da função a ser minimizada e restrições a serem atendidas, bem como geração dos metamodelos *Kriging* que representem com grande propriedade o modelo rigoroso da ETAR, a otimização do processo é então realizada. Esta seção traz toda a metodologia aplicada (Figura 14), incluindo os passos apresentados no Capítulo 4, para obtenção de uma operação ótima da planta BSM2 frente aos vários cenários de perturbação na planta já mencionados.

Figura 14 – Metodologia definida para construção do metamodelo *Kriging* do BSM2.



Para otimização do BSM2 levou-se em consideração os metamodelos gerados, via técnica *kriging*, a partir dos dados obtidos do modelo rigoroso no *Simulink*[®]. Sendo definida como a minimização da função custo, que relaciona os gastos operacionais de todas as unidades envolvidas na planta de tratamento de águas residuais e sujeita a restrições de concentração de componentes presentes, os processos de otimização foram realizados.

Duas otimizações foram consideradas no presente trabalho, sendo estas: otimização por programação quadrática sequencial (SQP) e otimização por algoritmos genéticos (GA). Utilizando-se dos scripts definidos no ambiente do *Matlab*[®], a otimização centrou-se na obtenção dos valores ótimos para as cinco restrições do processo, isto é, da concentração de nitrogênio total (TN), demanda química de oxigênio (COD), concentração de amônia (SNH), sólidos suspensos totais (TSS) e demanda bioquímica de oxigênio (BOD), pela minimização de OCI.

5.1. Algoritmos SQP e GA

Levando em consideração o problema não-linear em questão, bem como um número pequeno de variáveis a serem otimizadas, o processo de otimização SQP apresenta bom desempenho. No presente trabalho a implementação foi realizada através da função “*fmincon*” do *Matlab*[®], para a qual o algoritmo SQP foi obtido a partir de 100 valores de estimativas iniciais para cada uma das 28 linhas de distúrbios da alimentação da ETAR obtidas pelo planejamento LHS inicial.

É importante salientar que o processo iterativo descrito acima utiliza de uma matriz de valores iniciais visando atingir um ótimo global para o problema de otimização.

A Tabela 8 apresenta os resultados obtidos para as variáveis manipuladas (MVs) e Custo (OCI), após o processo de otimização pelos metamodelos *kriging* do BSM2 utilizando otimização SQP e GA. São apresentados os resultados para 10 dos 28 casos de distúrbios na alimentação apresentados no APÊNDICE (tendo sido 6 destes apresentados anteriormente na Tabela 6 da seção 4.3).

Tabela 8 - Resultado da otimização SQP e GA pelo metamodelo *kriging* para o processo BSM2, para 10 casos de distúrbios.

Algoritmo	Variável Manipulada (MVs)					
	KLa ₃	KLa ₄	KLa ₅	Q _{INT}	Q _R	Q _W
<i>SQP</i>	80,04	99,76	93,81	24387,68	20000	320
<i>GA</i>	99,18	85,17	87,33	26970,62	19997,4	320,01
Caso 1						
<i>SQP</i>	80	100	80	26950,45	20000	320
<i>GA</i>	80,17	99,97	80,17	27568,24	19970,38	320,03
Caso 2						
<i>SQP</i>	80	80	80	22000	20000	320
<i>GA</i>	80,00	80,00	80,00	22095,8	20000	320,00
Caso 3						
<i>SQP</i>	84,11	82,95	81,72	27452,31	20000	320
<i>GA</i>	84,16	82,94	81,78	27676,63	19941,89	320,01
Caso 4						
<i>SQP</i>	83,86	80,07	84,28	27367,3	20000	320
<i>GA</i>	83,74	82,57	82,42	27256,81	19658,6	320,02
Caso 5						
<i>SQP</i>	91,60	80,00	99,99	26709,36	20000	320
<i>GA</i>	91,59	80,17	99,94	26428,93	19999,96	320,02
Caso 6						
<i>SQP</i>	80,23	82,76	80,00	22716,21	20000	320
<i>GA</i>	99,96	97,60	89,38	27961,64	20000	320,00
Caso 6						
<i>SQP</i>	80,48	80,00	82,76	23368,43	20000	320
<i>GA</i>	80,49	84,86	82,76	23368,43	20000	320
Caso 8						
<i>SQP</i>	80,00	86,46	80,00	26960,27	20000	320
<i>GA</i>	88,95	94,24	94,79	25323,7	19993,36	320,05
Caso 9						
<i>SQP</i>	80	80	80	28000	20000	320
<i>GA</i>	80,00	80,00	80,00	26770,59	20000	320,01
Caso 10						

É possível observar que os resultados obtidos pelos processos de otimização referenciados como SQP e GA apresentaram resultados bem semelhantes, principalmente em se tratando da vazão de reciclo externa (Q_R) e vazão da saída de lodo (Q_W). Estas se

comportaram com valores ativos para o processo, tendo em vista a estipulação destes na etapa do planejamento experimental LHS para as seis MVs.

Com relação aos valores obtidos para os coeficientes KLa_3 , KLa_4 e KLa_5 correspondentes aos três compartimentos do biorreator, pode-se notar uma certa faixa de valores (entre 80 e 100) na qual estão distribuídos, bem como a aproximação dos valores obtidos para ambas as otimizações utilizadas.

5.2. Comparação - Caso Teste

Após a obtenção dos resultados da otimização, objetivando um resultado que demonstrasse o bom desempenho dos metamodelos gerados e otimizados em comparação ao modelo rigoroso substituído pelos mesmos, um caso teste foi realizado. Este consistiu em alimentar ao modelo rigoroso do *Simulink*[®] (o mesmo utilizado para geração das saídas para o *kriging*) os valores ótimos obtidos nos processos de otimização para as variáveis manipuladas consideradas.

Desta forma, mesmo se tratando de uma leitura parcial das propriedades do modelo real (modelo rigoroso), é possível observar uma boa concordância dos valores obtidos pelos metamodelos *kriging* tanto quando o modelo *Simulink*[®] e alimentando com os valores ótimos de MVs da otimização SQP quanto da otimização GA, apresentados nas Tabelas 9 e 10, respectivamente.

Tabela 9 - Comparação entre os resultados das CVs da otimização SQP e modelo *Simulink*[®].

Modelo	Restrição (Variável Controlada) e Custo					
	TN ≤ 18	COD ≤ 100	SNH ≤ 4	TSS ≤ 30	BOD ₅ ≤ 10	OCI
<i>Matlab</i> (otimização)	12,74	49,59	3,99	15,60	2,47	6005539
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,66	49,61	3,89	15,61	2,46	6010329
Caso 1						
<i>Matlab</i> (otimização)	12,89	42,44	0,14	12,38	1,90	4091745
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,90	42,46	0,14	12,40	1,90	4093133
Caso 2						
<i>Matlab</i> (otimização)	14,48	43,43	0,38	12,84	2,02	4484721
<i>Simulink</i> (caso teste)	14,43	43,48	0,40	12,87	2,02	4487108
Caso 3						
<i>Matlab</i> (otimização)	11,23	47,39	0,98	14,59	2,41	5567509
<i>Simulink</i> (caso teste)	11,20	47,41	1,07	14,61	2,42	5571361
Caso 4						
<i>Matlab</i> (otimização)	13,81	48,79	3,99	15,01	2,45	5763642
<i>Simulink</i> (caso teste)	13,91	48,81	4,12	15,02	2,45	5767033
Caso 5						
<i>Matlab</i> (otimização)	11,08	46,96	0,39	14,13	2,27	5220058
<i>Simulink</i> (caso teste)	11,09	46,99	0,39	14,15	2,27	5218658
Caso 6						
<i>Matlab</i> (otimização)	12,84	44,99	0,27	12,65	1,93	4319538
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,85	45,03	0,28	12,66	1,94	4321103
Caso 6						
<i>Matlab</i> (otimização)	12,77	43,08	0,28	13,07	2,04	4662017
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,75	43,12	0,29	13,10	2,04	4664318
Caso 8						
<i>Matlab</i> (otimização)	12,29	46,40	0,22	12,45	1,94	4153365
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,24	46,42	0,23	12,46	1,95	4152717
Caso 9						
<i>Matlab</i> (otimização)	10,41	44,45	0,44	13,48	2,16	4924249
<i>Simulink</i> (caso teste)	10,36	44,50	0,49	13,51	2,17	4925990
Caso 10						

Tabela 10 - Comparação entre os resultados das CVs da otimização GA e modelo *Simulink*[®].

Modelo	Restrição (Variável Controlada) e Custo					
	TN ≤ 18	COD ≤ 100	SNH ≤ 4	TSS ≤ 30	BOD ₅ ≤ 10	OCI
<i>Matlab</i> (otimização)	12,20	49,57	3,99	15,59	2,46	6008292
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,10	49,59	3,93	15,60	2,46	6009911
Caso 1						
<i>Matlab</i> (otimização)	12,93	42,44	0,14	12,38	1,90	4093600
<i>Simulink</i> (caso teste)	12,93	42,46	0,14	12,40	1,90	4094582
Caso 2						
<i>Matlab</i> (otimização)	14,48	43,43	0,38	12,84	2,02	4484737
<i>Simulink</i> (caso teste)	14,43	43,48	0,40	12,87	2,02	4487124
Caso 3						
<i>Matlab</i> (otimização)	11,23	47,38	0,97	14,59	2,41	5571877
<i>Simulink</i> (caso teste)	11,20	47,40	1,06	14,60	2,42	5575060
Caso 4						
<i>Matlab</i> (otimização)	13,96	48,73	4,00	14,97	2,45	5788808
<i>Simulink</i> (caso teste)	13,93	48,75	3,96	14,98	2,45	5790137
Caso 5						
<i>Matlab</i> (otimização)	11,11	46,96	0,39	14,13	2,27	5220333
<i>Simulink</i> (caso teste)	11,12	46,99	0,39	14,15	2,27	5218871
Caso 6						
<i>Matlab</i> (otimização)	16,51	44,96	0,10	12,63	1,93	4320109
<i>Simulink</i> (caso teste)	16,59	45	0,11	12,64	1,92	4322728
Caso 6						
<i>Matlab</i> (otimização)	13,13	43,08	0,25	13,07	2,04	4661468
<i>Simulink</i> (caso teste)	13,12	43,11	0,25	13,09	2,04	4664634
Caso 8						
<i>Matlab</i> (otimização)	14,05	46,39	0,13	12,44	1,93	4154101
<i>Simulink</i> (caso teste)	14,06	46,39	0,13	12,45	1,93	4153970
Caso 9						
<i>Matlab</i> (otimização)	10,45	44,45	0,452	13,48	2,16	4924555
<i>Simulink</i> (caso teste)	10,44	44,50	0,49	13,52	2,17	4926056
Caso 10						

Os resultados apresentados nas Tabelas 9 e 10 trazem à tona a boa representatividade do modelo rigoroso do Simulink através dos metamodelos gerados via técnica *kriging*. Isto pode ser melhor exemplificado se tomado como base valores para a função custo do processo, obtidos na otimização do Matlab, em comparação ao obtidos no modelo do *Simulink*[®] (após alimentação do processo com os valores otimizados das MVs), correspondendo a erros em porcentagens inferiores a 8%.

Sendo um metamodelo dado por uma função de aproximação da resposta ao modelo numérico rigoroso, ele se baseia nas informações compartilhadas para a predição da resposta, desta forma a diferença supracitada pode ser justificada como função de prováveis erros de estimação inerentes ao processo de aproximação, bem como a complexidade do modelo em estudo.

De acordo com os valores máximos estipulados para as concentrações de componentes no efluente, como mostra a segunda linha das Tabela 9 e 10, pode-se observar que todas as variáveis mantiveram-se em seus limites desde os processos de otimização realizados no *Matlab*[®] até a alimentação do modelo rigoroso do *Simulink*[®] com esses valores ótimos obtidos na otimização. A maioria dos resultados obtidos só apresentam valores diferentes a partir da segunda casa decimal e mesmo assim com diferenças bem pequenas, isso mostra o bom desempenho e adequação dos metamodelos *kriging* ao problema.

Com relação à atenção aos limites para as restrições, observa-se ainda que a única variável que apresentou algumas poucas vezes valor no limite estipulado foi a concentração de amônia (SNH), no entanto para os dez casos analisados essa mudança representou 20% destes, e todos para os casos de distúrbios 1 e 4.

De forma geral, todas as outras variáveis obedeceram a seus limites impostos na otimização do problema, e mesmo no *Simulink*[®] não sendo realizada a otimização, mas sim somente substituição dos valores ótimos do *Matlab*[®] e leitura das restrições na simulação, é possível averiguar a afirmação acima.

5.3. Otimização em Tempo Real (RTO)

As ferramentas de otimização em tempo real baseiam-se na associação de um modelo matemático do processo a um algoritmo de otimização que periodicamente determina o ponto ótimo operacional a ser perseguido (GOMES, 2007).

Para desenvolvimento desse estudo fez-se necessária a execução de algumas etapas e utilização de alguns resultados já obtidos. Inicialmente, a seleção de variáveis manipuladas foi realizada, levando-se em consideração os valores ótimos obtidos para essas MVs após implementação dos algoritmos SQP e GA, como mostrado na Tabela 8. Tendo em vista a obtenção da vazão de reciclo externa (Q_R) e vazão da saída de lodo (Q_W) em seus valores máximos determinados, estas foram mantidas com valores constantes (os valores máximos obtidos) para a execução da metodologia RTO.

É importante citar que para construção da RTO para a planta de tratamento de efluentes, outras linhas de distúrbios tiveram que ser consideradas, de forma a ser realmente algo independente dos resultados já obtidos neste trabalho. Portanto, assim como executado o LHS anteriormente para geração das 28 linhas de distúrbios na alimentação (APÊNDICE), um novo LHS foi realizado para os distúrbios do modelo RTO.

Novos scripts no *Matlab*[®] foram construídos para a RTO e implementados juntamente ao BSM2 do *Simulink*[®] para leitura da nova matriz obtida para os distúrbios de alimentação na planta e matriz com valores ótimos para as quatro MVs selecionadas. Foi possível, através da técnica *Kriging* a interpolação, entre os valores ótimos da MVs para o SQP e GA, a obtenção de uma nova matriz com valores ótimos de MVs para cada novo distúrbio inserido. Após conclusão do processo, foi possível obter curvas relacionando valor de concentração para cada restrição do processo em função do tempo simulado, tendo em vista a alimentação dos distúrbios e MVs no modelo rigoroso do *Simulink*[®].

Diante o exposto e visando uma base de comparação para o modelo RTO construído, foi utilizado novamente o modelo rigoroso do *Simulink*[®] desenvolvido por Jeppsson. O modelo original proposto está descrito no trabalho de Alex et al. (2008) e consta do uso de um controlador para SO_4 tendo como variáveis manipuladas os coeficientes de transferência KLa_3 , KLa_4 e KLa_5 . As Figuras 15 a 17 mostram graficamente o comportamento para as concentrações de saídas do efluente tratado (restrições) obtidos pelos dois modelos, ou seja, modelo RTO construído no presente trabalho e modelo no *Simulink*[®] do referido autor com atuação do controlador.

Figura 15 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o **Caso 1** de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.

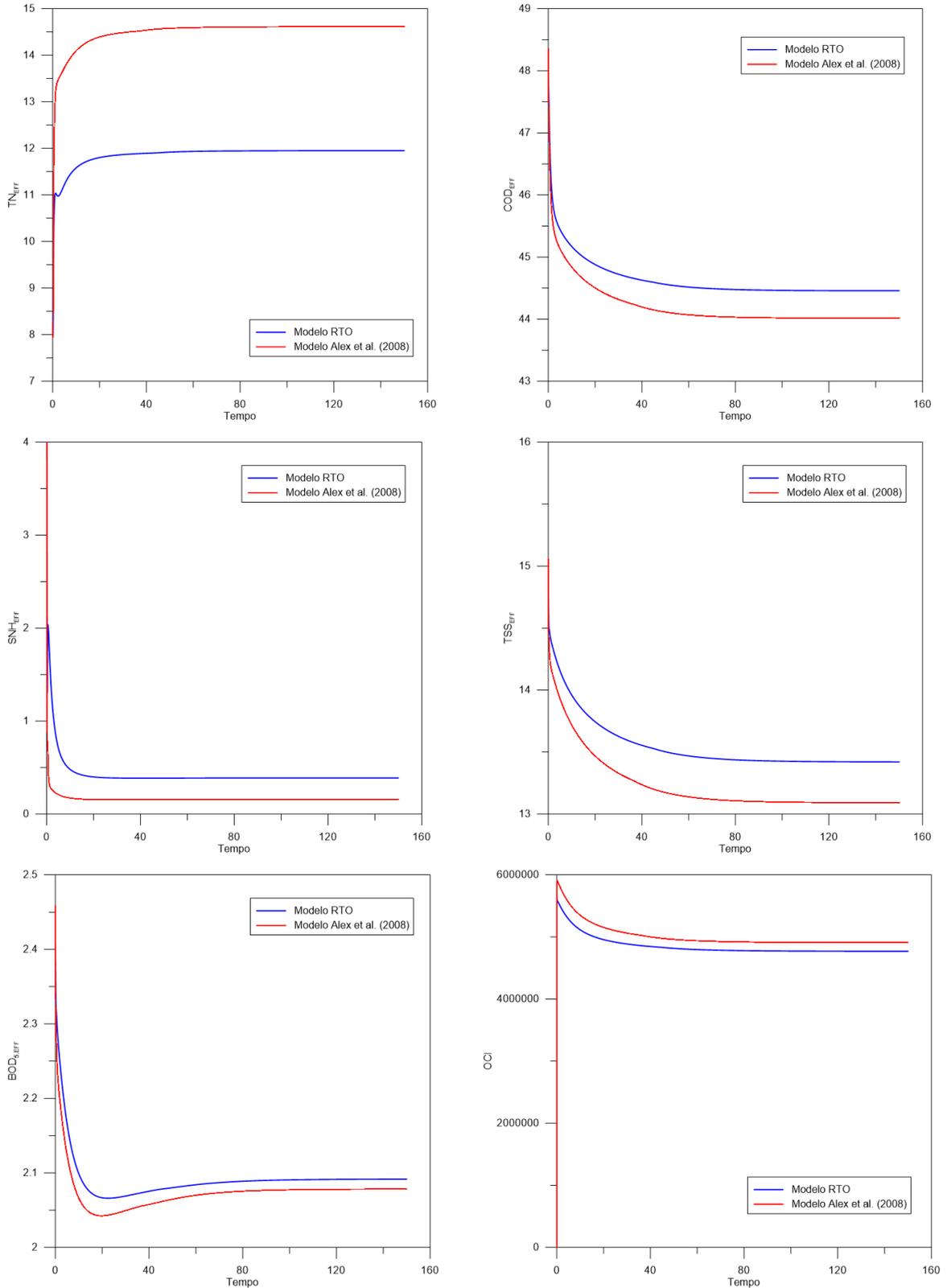


Figura 16 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o **Caso 2** de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.

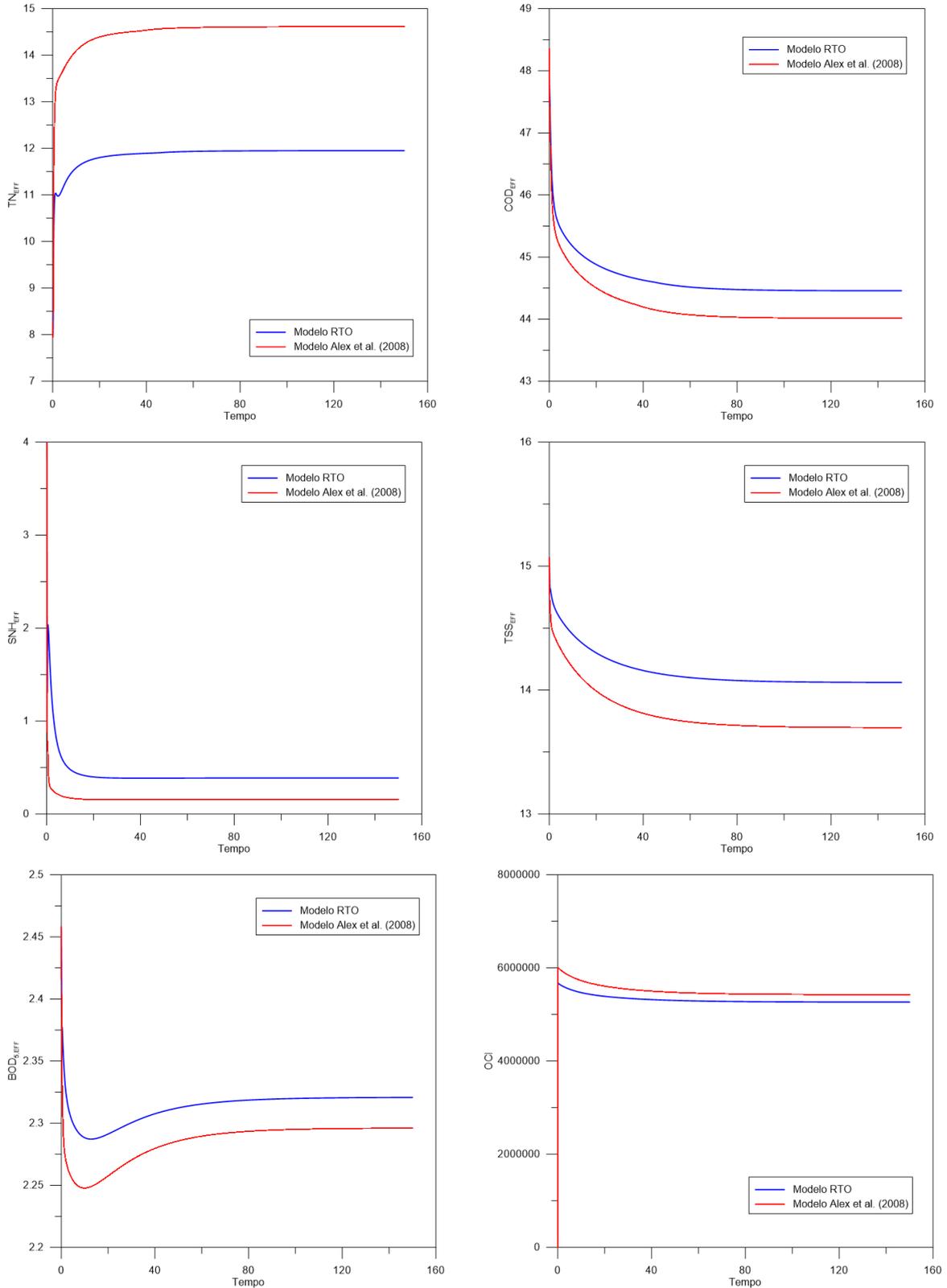
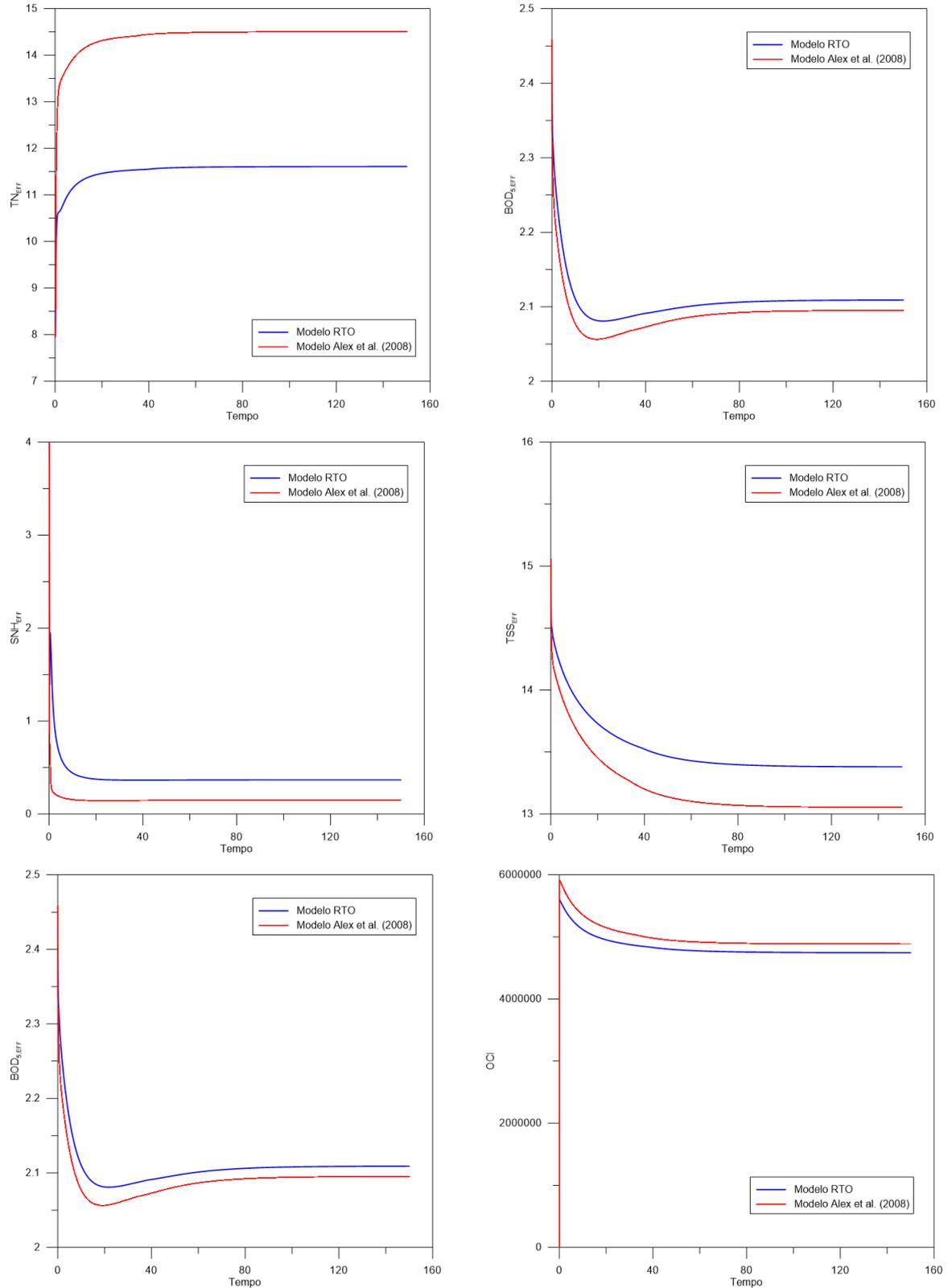


Figura 17 – Modelo RTO construído versus modelo apresentado por Alex et al. (2008) para o **Caso 3** de distúrbio gerado. TN – nitrogênio total, COD – demanda química de oxigênio, SNH – concentração de amônia, TSS – sólidos suspensos totais, BOD – demanda bioquímica de oxigênio e OCI – custo total.



Foram simulados seis cenários de distúrbios, sendo apresentados três destes nas Figuras 15, 16 e 17. Pode-se observar a similaridade no comportamento quando comparados o modelo RTO e modelo Alex et al. (2008), para cada uma das restrições, entretanto um afastamento dos dados quando comparados ponto a ponto nas curvas. Isso mostra a não exatidão do modelo RTO em atingir os valores de saída das variáveis do modelo com atuação do controlador.

Um outro ponto, que pode ser observado nos diagramas, é o maior afastamento dos dados em se tratando da variável TN, comportamento já observado (em menor magnitude) nos metamodelos quando comparados ao modelo rigoroso. Isso pode ser justificado observando os índices qualitativos calculados para cada metamodelo obtido, desta forma a pequena diferença observada também é traduzida quando gerado um novo modelo, no caso o modelo RTO.

Levando em conta as particularidades da planta de tratamento de águas residuais BSM2 e complexidade do modelo contendo ciclo de material, com os casos simulados acima foi possível obter resultados no que diz respeito às restrições ativas, dentre elas variáveis com controle mais difícil, e obtenção da redução de custo oriundo do processo global em atuação. Pode-se afirmar ainda a obtenção de resultados satisfatórios no que tange a aproximação de um modelo RTO com perturbações no processo em comparação à um modelo com perturbações no processo contendo um controle de concentração com grande influência na ETAR.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Considerando o uso de modelos reduzidos em substituição ao modelo rigoroso BSM2, pode-se extrair do presente trabalho os seguintes pontos:

- O alto desempenho dos metamodelos *kriging* pôde ser observado pela minimização do esforço computacional;
- A atenção às restrições de processo foi obtida para todos os casos estudados na otimização dos metamodelos *kriging*;
- O modelo de otimização RTO apresentou resultados satisfatórios, funcionando desta forma como estudo inicial na exploração de RTO em sistemas de tratamento de efluentes;
- Em suma, a aplicação da técnica *Kriging*, não utilizada anteriormente em estações de tratamento de efluentes, mostrou-se como boa proposta no estudo de processos envolvendo um considerável esforço computacional.

7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Algumas sugestões para aprimoramento do presente trabalho são:

- Estudo mais aprofundado acerca da influência de distúrbios na alimentação do processo diante a atenção das restrições do processo, principalmente SNH;
- Utilização do método *kriging* para geração de dados e realização de um controle *plantwide* para o BSM2;
- A partir da realização da otimização RTO no presente trabalho, dar prosseguimento para tal, agora considerando um maior controle de variáveis para operação ótima e em tempo real do processo.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACOSTA, J. F., CARDOZO, N. P., MARIN, F. R. “Avaliação do Desempenho de um Modelo de Estimativa de Saldo de Radiação em algumas Culturas” *Trabalho apresentado no XVI Congresso Brasileiro de Agrometeorologia. Belo Horizonte, MG, 2009.*
- ALEX, J., BENEDETTI, L. COPP, J., GERNAEY, K.V., JEPSSON, U., NOPENS, I., PONS, M.N., ROSEN, C., STEYER, J.P., and VANROLLEGHEM, P. “Benchmark Simulation Model No. 2. Technical report”, IWA Taskgroup on Benchmark control strategies for WWTPs, 2008a.
URL: <http://www.benchmarkwwtp.org/>.
- ALEX, J., BENEDETTI, L. COPP, J., GERNAEY, K.V., JEPSSON, U., NOPENS, I., PONS, M.N., ROSEN, C., STEYER, J.P., VANROLLEGHEM, P, and WINKLER, S. “Benchmark Simulation Model No. 1. Technical report”, IWA Taskgroup on Benchmark control strategies for WWTPs, 2008b.
URL: <http://www.benchmarkwwtp.org/>.
- AMARAL, C. do, “Contribuição para a Modelagem e Simulação do processo de Lodos Ativados em Sistemas de Tratamento de Efluentes em Simulador baseado em Equações” *Trabalho de Conclusão de Cursos (Engenharia de Alimentos)* 60 f. Fundação Universidade Federal de Rondônia – UNIR, Ariquemes, 2014.
- ANTICH, R.E. “Comparação de Métodos Genéticos e SQP para Otimização de Resposta em Frequência em Sistemas Vibroacústicos” Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, RS, Brasil, 2011.
- BARBU, M., VILANOVA, R., SANTIN, I. “Control Strategies for the Sludge Line in Wastewater Treatment Plants” *Conference 2016 IEEE International Conferenre on Automation Quality and Testing, Robotics (AQTR)*, 2016.
- BATSTONE, D. J., KELLER, J., ANGELIDAKI, I., KALYUZHNYI, S. V., PAVLOSTATHIS, S. G., ROZZI, A., SANDERS, W. T. M., SIEGRIST, H. and

- VAVILIN, V.A. “The IWA Anaerobic Digestion Model N°1 (ADM1)” *Water Science and Technology*, v. 45 n. 10, pp. 65-75, 2002.
- CAMARGO, Â. P., SENTELHAS, P.C. “Avaliação do desempenho de diferentes métodos de estimativa da evapotranspiração potencial no estado de São Paulo”, Brasil. *Revista Brasileira de Agrometeorologia*, v.5, n.1, p.89-97, 1997.
- CASTRO, F. S. PEZZOPANE, J. E. M., CECÍLIO, R. A., PEZZOPANE, J. R. M. and XAVIER, A. A. “Avaliação do Desempenho dos Diferentes Métodos de Interpoladores para Parâmetros do Balanço Hídrico Climatológico” *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental* v.14, n.8, p.871–880, 2010.
- CELSE, B., COSTA, V., WAHL, F., VERSTRAETE, J. J. “Dealing with uncertainties: Sensitivity Analysis for Cavuum gas oil Hydrotretament” *Chemical Engineering Journal*, v. 278, pp. 469–478, 2015.
- COPP, J. “The COST simulation benchmark: Description and simulator manual”. Technical report, *Office for official publications of the European Communities*, Luxembourg, 2002.
- FORRESTER, A., SOBESTER, A. & KEANE, A., 2008. *Engineering Desing Via Surrogate Modelling: A Practical Guide*. Wiley. Giunta, A.A. “Use of data sampling, surrogate models, and numerical optimization in engineering design”. *In Proceedings of the 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. Reno, NV, 2002.*
- GOLDBARG, M. C., LUNA, H. P. L. *Otimização combinatória e programação linear: modelos e algoritmos*. Rio de Janeiro: Campus, 2000.
- GOMES, M.V.C., “Otimização Sequencial por Aproximações RTO – Uma aplicação em tempo real para o refino de petróleo”. Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.
- HAIMI, H., MULAS M., SAHLSTEDT, K. and VAHALA, R. “Advanced Operation and Control Methods of Municipal Wastewater Treatment Processes In Finland”

Teknillinen korkeakoulu Vesihuoltotekniikan julkaisu Helsinki University of Technology Water and Wastewater Engineering, Espoo 2009.

HENZE, M., VAN LOOSDRECHT, M.C.M., EKAMA, G.A., BRDJANOVIC, D., “Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design”, London, UK: IWA Publishin, 2008.

KERAMAT, M. and KIELBASA, R. “Latin Hypercube Sampling Monte Carlo Estimation of Average Quality Index for Integrated Circuits” *Analog Integrated Circuits And Signal Processing*, v. 14, n. 1/2, pp. 131-142, 1997.

LOPHAVEN, S.N., NIELSEN, H.B., SONDERGAARD, J., “Aspects of MATLAB Toolbox DACE”, Technical Report IMM-REP-2002-13,2002 Technical University of Denmark, Denmark, 2002.

LEITÃO, M. M. V. B. R., OLIVEIRA, G. M. and LEITÃO, T. J. V. “Avaliação do Desempenho de Diferentes Métodos de Estimativa da Evaporação para Duas Regiões da Paraíba” *Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental* v.11, n.6, p.585–593, 2007.

LUCAS, D.C., “Algoritmos Genéticos: Uma Introdução”. (Apostila elaborada sob a orientação de Luís Otávio Alvares, para a disciplina de Ferramentas de Inteligência Artificial). 48 f. 2002.

LYRA, D.G.P., PESTANA,M. “Apostila de Tratamento de Efluentes”. (Desenvolvimento de material didático ou instrucional - Material Didático - Apostila e Apresentação). 69 f. Centro Federal de Educação Tecnológica – CEFET/BA, 2007.

LUIZI, R. P. S. L., “Operação de Sistemas de Tratamento de Águas Residuais por Lamas Activadas com Arejamento Prolongado” 102 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa, 2012.

MARTIN, J.D., SIMPSON, T.W., “Use of Kriging Models to Approximate Deterministic Computer Models”, *AIAA Journal*, v. 43, No. 4, pp. 853-863, 2005.

- MCKAY, M. D., BECKMAN, R. J., and CONOVER W. J. “A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code” Source: *Technometrics*, v.42, n.1, Special 40th Anniversary Issue (Feb., 2000), pp. 55-61 Published by: *American Statistical Association and American Society for Quality*, 2000.
- MENESES, M., CONCEPCIÓN, H. and VILANOVA, R., “Joint Environmental and Economical Analysis of Wastewater Treatment Plants Control Strategies: A Benchmark Scenario Analysis”, *Sustainability* 2016, 8, 360; doi:10.3390/su8040360. www.mdpi.com/journal/sustainability
- MECKESHEIMER, M., BOOKER, A.J., BARTON, R. et al., “Computationally Inexpensive Metamodeling Assessment Strategies”, *AIAA Journal*, v. 40, n. 10, pp. 2053-2060, 2002.
- METCALF and EDDY Inc. *Wastewater engineering - treatment and reuse*. McGraw-Hill, New York, USA, 4th edition, 2003.
- MITCHELL, S. M., KENNEDY, N., MA, J., YORGEY, G., KRUGER, C., ULLMAN, J. L., FLEAR, C. “Anaerobic Digestion Effluents and Processes: The Basics – Anaerobic Digestion Systems Series” 16 p. Washington State - University Extension, 2015.
- MOURA, I. N. S. C. de, “Opções de Tratamento de Águas Residuais por Sistemas Clássicos de Lamas Activadas numa Perspectiva de Minimização de Recursos Aplicados” 114 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia do Ambiente) – Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Lisboa, 2012.
- MULAS, M., “Modelling and Control of Activated Sludge Processes” 159 f. Tese (Doutorado em Engenharia Industrial) - Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Itália, 2006.
- OLSSON, G.; NEWELL, B. *Wastewater Treatment Systems*. IWA Publishing, London, UK, 1st edition, 1999.

- PALMER, K., REALFF, M., “Metamodeling Approach to Optimization of Steadystate Flowsheet Simulations – Model Generation”, *Trans IChemE*, v. 80, Part A, pp. 760-772, 2002.
- PINTO, J. W. O., “Uso da otimização sequencial aproximada a problemas Uni e multiobjectivos de gerenciamento de reservatórios”. Dissertação (Universidade Federal de Pernambuco) Recife, PE, Brasil, 2014.
- QUEIPO, N.V., HAFTKA, R.T., SHYY, W., GOEL, T., VAIDYANATHAN, R., TUCKER, P.K., “Surrogate-based analysis and optimization” *Progress in Aerospace Sciences*, v. 41, pp. 1–28, 2005.
- RODRIGUES, S. C. G., “Projeto de Estrutura de Controle Aplicado a Sistema de Tratamento de Efluentes” 148 f, Tese (Doutorado em Engenharia Química) - UFCG, Campina Grande , 2013.
- SANTNER, T.J., WILLIAMS, B.J., NOTZ, W.I., “The Design and Analysis of Computer Experiments”, New York, Springer-Verlag, 2003.
- SEQUERA, V.A.L., “Estudio comparativo sobre la aplicación de los algoritmos PSO y SQP en la optimización de pórticos planos de concreto armado.”, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, 2014.
- TANOMARU, J., MARTIN, J.D., “Motivação, Fundamentos e Aplicações de Algoritmos Genéticos”, *II Congresso Brasileiro de Redes Neurais*, 1995.
- TELES, M.L., GOMES, H.M., “Comparação de Algoritmos Genéticos e Programação Quadrática Sequencial para Otimização de Problemas em Engenharia”, *Teoria e Prática na Engenharia Civil*, n.15, p.29-39, 2010.
- UNITED NATIONS – Economic and Social Commission Western Asia. “Wastewater Treatment Technologies: A general Review” 132f. New York, 2003.

VIANA, F. A. C., VENTER, G. and BALABANOV, V. “An Algorithm for fast Optimal Latin Hypercube Design of Experiments” *International Journal for Numerical Methods in Engineering, Int. J. Numer. Meth. Engng* 2010; 82: 135-156, 2010.

APÊNDICE

Tabela 11 – Linhas de distúrbio do processo, para corrente de alimentação.

Caso	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}	TSS	Q	T
1	27,7927	60,5314	101,5188	399,0977	51,9034	0	0	0	0	25,8529	5,4493	17,7387	7	414,3898	22639,5558	15,8201
2	24,9731	62,3672	83,9267	339,4751	46,4673	0	0	0	0	22,8431	5,1603	15,0680	7	352,4018	18807,5650	15,7535
3	25,3637	55,5722	88,6633	333,0134	53,4198	0	0	0	0	24,6466	5,6104	16,7221	7	356,3224	19295,8966	14,4892
4	26,9892	63,4072	92,3597	354,9385	54,9443	0	0	0	0	22,1297	5,7995	15,8085	7	376,6819	21448,6764	13,6357
5	27,8673	58,5190	95,5732	350,5410	47,4561	0	0	0	0	26,0477	5,2361	16,5661	7	370,1777	22283,0864	13,7143
6	27,1250	52,6657	91,2117	391,6821	53,1489	0	0	0	0	22,3112	5,4576	15,6515	7	402,0320	20824,5632	14,7955
7	27,1749	58,7663	90,1159	345,5546	50,1473	0	0	0	0	24,9552	5,2745	15,4488	7	364,3634	18918,9951	15,4764
8	24,7206	53,8877	93,3134	334,2376	52,4282	0	0	0	0	21,7338	5,6913	14,8547	7	359,9844	19551,1596	14,1434
9	28,8097	61,8216	83,5427	353,5868	47,8434	0	0	0	0	22,3561	5,8771	16,9594	7	363,7297	18713,3727	15,6236
10	25,4501	56,1687	92,5379	390,4811	47,5433	0	0	0	0	22,6723	5,9252	14,7470	7	397,9217	19635,0494	14,2952
11	24,5812	58,2789	93,9715	370,3823	49,8366	0	0	0	0	22,0416	5,7606	15,8864	7	385,6428	19162,2977	15,8721
12	26,2918	52,5367	97,6358	369,6727	48,5849	0	0	0	0	22,6062	5,3324	16,6214	7	386,9201	20646,3506	15,2939
13	29,4427	56,8013	84,3702	377,0985	55,5576	0	0	0	0	24,6506	6,1609	15,1051	7	387,7697	19121,6060	14,4542
14	29,0654	57,9495	100,9492	347,2574	46,6749	0	0	0	0	22,4436	5,1859	16,8388	7	371,1611	18940,7973	14,6619
15	25,1380	52,8990	88,8897	335,7568	52,8719	0	0	0	0	21,8558	6,0928	15,3214	7	358,1388	19737,1403	15,9895
16	25,0459	54,4499	99,9352	358,3096	55,7097	0	0	0	0	23,3799	5,2172	17,2901	7	385,4658	19252,9104	14,8367
17	26,8073	59,8475	86,5967	378,6109	46,1097	0	0	0	0	22,2356	5,8246	14,5387	7	383,4880	19451,3121	16,0843
18	24,6569	57,3737	91,7998	337,6398	51,2689	0	0	0	0	23,4683	6,1298	14,6307	7	360,5313	22320,4580	14,9659
19	28,3760	56,4268	83,7596	352,2323	50,7970	0	0	0	0	25,2785	5,9569	14,7987	7	365,0916	20504,0023	13,9939
20	29,8383	61,2322	87,7199	381,6351	50,2520	0	0	0	0	23,8484	5,5318	17,5606	7	389,7053	22119,2210	15,1475
21	27,4007	55,0184	86,2086	363,7494	50,3973	0	0	0	0	26,1758	6,1858	17,3819	7	375,2664	22711,6879	13,4370
22	28,2470	58,7183	100,6052	341,7847	51,0614	0	0	0	0	21,4863	5,7462	14,9143	7	370,0885	21198,7798	14,8890
23	28,5430	61,5095	94,3080	343,4425	45,9449	0	0	0	0	25,3447	5,3915	16,0611	7	362,7716	18602,7569	14,3894
24	25,2505	58,1419	95,2214	328,0677	53,6525	0	0	0	0	23,5739	5,5379	15,2620	7	357,7062	20247,3339	16,3088
25	26,1024	63,6810	98,8849	372,3441	45,6541	0	0	0	0	24,8487	6,1000	15,5963	7	387,6623	19008,7283	15,1963
26	27,2273	59,4659	93,0842	342,8305	54,8609	0	0	0	0	25,8242	5,1963	15,5184	7	368,0817	18738,4303	14,5705
27	26,5841	53,2462	94,8784	359,6057	51,8362	0	0	0	0	23,8603	5,6724	15,1831	7	379,7402	19346,5042	16,1039
28	26,9337	63,0070	92,0832	396,3940	54,5572	0	0	0	0	24,0829	5,4204	15,7100	7	407,2758	22190,0438	14,5514

ANEXO I

Tabela 12 - Matriz de Petersen para o modelo ASM1.

$\dot{z} \rightarrow$ $\downarrow j$	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	Reaction
	S_I	S_S	X_I	X_S	X_{BH}	X_{BA}	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}	
ρ_1		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-iX_B$			$-\frac{iX_B}{14}$	$\mu_H \frac{S_S}{K_S+S_S} \frac{S_O}{K_{OH}+S_O} X_{BH}$
ρ_2		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$		$-iX_B$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86Y_H} \frac{S_S}{K_S+S_S} \frac{K_{OH}}{K_{OH}+S_O} \frac{S_{NO}}{K_{NO}+S_{NO}} \eta_g X_{BH}$	
ρ_3						1		$-\frac{4.57-Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-iX_B - \frac{1}{Y_A}$			$-\frac{iX_B}{14} - \frac{1}{7Y_A}$	$\mu_A \frac{S_{NH}}{K_{NH}+S_{NH}} \frac{S_O}{K_{OA}+S_O} X_{BA}$
ρ_4				$1-f_P$	-1		f_P					iX_B $-f_P iX_P$		$b_H X_{BH}$
ρ_5				$1-f_P$		-1	f_P					iX_B $-f_P iX_P$		$b_A X_{BA}$
ρ_6										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{BH}$
ρ_7		1		-1										$k_b \frac{X_S/X_{BH}}{K_X+X_S/X_{BH}} \left[\frac{S_O}{K_{OH}+S_O} + \eta_h \frac{K_{OH}}{K_{OH}+S_O} \right] \frac{S_{NO}}{K_{OH}+S_{NO}} X_{BH}$
ρ_8											1	-1		$\rho_7 (X_{ND}/X_S)$

Fonte: RODRIGUES (2013).

Tabela 13 - Parâmetros estequiométricos e cinéticos para os processos biológicos.

Parâmetros	UNIDADE	VALOR
Estequiométricos		
Y_A	g de célula de DQO formada. (g N oxidado) ⁻¹	0.24
Y_H	g de célula de DQO formada. (g N oxidado) ⁻¹	0.67
f_P	adimensional	0.08
i_{XB}	g N. (g DQO) ⁻¹ em biomassa	0.08
i_{XP}	g N. (g DQO) ⁻¹ em produtos particulados	0.06
Parâmetros Cinéticos		
μ_H	d ⁻¹	4.0
K_S	g DQO.m ⁻³	10.0
$K_{O,H}$	g (-DQO).m ⁻³	0.2
K_{NO}	g NO ₃ -N.m ⁻³	0.5
b_H	d ⁻¹	0.3
n_g	adimensional	0.8
n_R	adimensional	0.8
K_R	g DQO lentamente biodegradável. (g de célula de DQO.d ⁻¹)	3.0
K_X	g DQO lentamente biodegradável. (g de célula de DQO) ⁻¹	0.1
μ_A	d ⁻¹	0.5
K_{NH}	g NH ₃ -N.m ⁻³	1.0
b_A	d ⁻¹	0.05
$K_{O,A}$	g (-DQO).m ⁻³	0.4
k_a	m ³ . (g DQO.d) ⁻¹	0.05

Fonte: Adaptado de RODRIGUES (2013).

Tabela 14 - Equações para taxas cinéticas e coeficientes (i=1-12, j=1-19).

Component →	j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Rate (q _i , kg COD.m ⁻³ .d ⁻¹)
Process ↓		S _{su}	S _{aa}	S _{fa}	S _{va}	S _{bu}	S _{pro}	S _{ac}	S _{h2}	S _{ch4}	S _{ic}	S _{in}	S _i	
1 Disintegration														$f_{sl,xc}$
2 Hydrolysis carbohydrates	1													$k_{dis}X_c$
3 Hydrolysis of proteins			1											$k_{hyd,ch}X_{ch}$
4 Hydrolysis of lipids	$1-f_{fa,li}$			$1-f_{fa,li}$										$k_{hyd,pr}X_{pr}$
5 Uptake of sugars	-1					$(1-Y_{su})f_{bu,su}$	$(1-Y_{su})f_{pro,su}$	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$	$(1-Y_{su})f_{h2,su}$		$-\sum_{i=0,1,1-24} C_i V_{i,5}$	$-(Y_{su})N_{bac}$		$k_{hyd,li}X_{li}$
6 Uptake of amino acids			-1		$(1-Y_{aa})f_{va,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{bu,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{pro,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa})f_{h2,aa}$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,6}$	$N_{aa}-(Y_{aa})N_{bac}$		$k_{m, su} \frac{S_{su}}{K_S + S} X_{su} I_1$
7 Uptake of LCFA				-1				$(1-Y_{fa})0.7$	$(1-Y_{fa})0.3$			$-(Y_{fa})N_{bac}$		$k_{m, aa} \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} X_{aa} I_1$
8 Uptake of valerate					-1		$(1-Y_{cd})0.54$	$(1-Y_{cd})0.31$	$(1-Y_{cd})0.15$			$-(Y_{cd})N_{bac}$		$k_{m, fa} \frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}} X_{fa} I_2$
9 Uptake of butyrate						-1		$(1-Y_{cd})0.8$	$(1-Y_{cd})0.2$			$-(Y_{cd})N_{bac}$		$k_{m, va} \frac{S_{va}}{K_S + S_{va}} X_{va} \frac{1}{1+S_{va}/S_{su}}$
10 Uptake of propionate							-1	$(1-Y_{pro})0.57$	$(1-Y_{pro})0.43$		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,10}$	$-(Y_{pro})N_{bac}$		$k_{m, bu} \frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}} X_{bu} \frac{1}{1+S_{bu}/S_{su}}$
11 Uptake of acetate								-1			$(1-Y_{ac})-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,11}$	$-(Y_{ac})N_{bac}$		$k_{m, pr} \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}} X_{pro} I_2$
12 Uptake of hydrogen									-1		$(1-Y_{h2})-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,12}$	$-(Y_{h2})N_{bac}$		$k_{m, ac} \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}} X_{ac} I_3$
13 Decay of X _{su}														$k_{m, h2} \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}} X_{h2} I_1$
14 Decay of X _{aa}														$k_{dec, X_{su}} X_{su}$
15 Decay of X _{fa}														$k_{dec, X_{aa}} X_{aa}$
16 Decay of X _{cd}														$k_{dec, X_{fa}} X_{fa}$
17 Decay of X _{pro}														$k_{dec, X_{cd}} X_{cd}$
18 Decay of X _{ac}														$k_{dec, X_{pro}} X_{pro}$
19 Decay of X _{h2}														$k_{dec, X_{ac}} X_{ac}$
														$k_{dec, X_{h2}} X_{h2}$
		Monosaccharides (kgCOD.m ⁻³)	Amino acids (kgCOD.m ⁻³)	Long chain fatty acids (kgCOD.m ⁻³)	Total valerate (kgCOD.m ⁻³)	Total butyrate (kgCOD.m ⁻³)	Total propionate (kgCOD.m ⁻³)	Total acetate (kgCOD.m ⁻³)	Hydrogen gas (kgCOD.m ⁻³)	Methane gas (kgCOD.m ⁻³)	Inorganic carbon (kmoleC.m ⁻³)	Inorganic nitrogen (kmoleN.m ⁻³)	Soluble inerts (kgCOD.m ⁻³)	Inhibition factors: I ₁ = $\frac{1}{1+K_{i1}X_{su}}$ I ₂ = $\frac{1}{1+K_{i2}X_{fa}}$ I ₃ = $\frac{1}{1+K_{i3}X_{h2}}$

Fonte: BATSTONE et al. (2002).

Tabela 15 - Equações para taxas cinéticas e coeficientes (i=13-24, j=1-19).

<i>j</i>	Component → Process ↓	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	Rate (ρ_j , kg COD.m ⁻³ .d ⁻¹)
		X_c	X_{ch}	X_{pr}	X_{li}	X_{su}	X_{aa}	X_{fa}	X_{c4}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}	X_i	
1	Disintegration	-1												$k_{dis} X_c$
2	Hydrolysis carbohydrates		$f_{ch,xc}$											$k_{hyd,ch} X_{ch}$
3	Hydrolysis of proteins		-1											$k_{hyd,pr} X_{pr}$
4	Hydrolysis of lipids													$k_{hyd,li} X_{li}$
5	Uptake of sugars					Y_{su}								$k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_S + S} X_{su} I_1$
6	Uptake of amino acids						Y_{aa}							$k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} X_{aa} I_1$
7	Uptake of LCFA							Y_{fa}						$k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}} X_{fa} I_2$
8	Uptake of valerate								Y_{c4}					$k_{m,v} \frac{S_{va}}{K_S + S_{va}} X_{va} \frac{1}{1 + S_{va}/S_{aa}} I_1$
9	Uptake of butyrate								Y_{c4}					$k_{m,b} \frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}} X_{bu} \frac{1}{1 + S_{bu}/S_{va}} I_1$
10	Uptake of propionate									Y_{pro}				$k_{m,pr} \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}} X_{pro} I_3$
11	Uptake of acetate										Y_{ac}			$k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}} X_{ac} I_3$
12	Uptake of hydrogen											Y_{h2}		$k_{m,h2} \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}} X_{h2} I_1$
13	Decay of X_{su}	1				-1								$k_{dec,Xsu} X_{su}$
14	Decay of X_{aa}	1					-1							$k_{dec,Xaa} X_{aa}$
15	Decay of X_{fa}	1						-1						$k_{dec,Xfa} X_{fa}$
16	Decay of X_{c4}	1							-1					$k_{dec,Xc4} X_{c4}$
17	Decay of X_{pro}	1								-1				$k_{dec,Xpro} X_{pro}$
18	Decay of X_{ac}	1									-1			$k_{dec,Xac} X_{ac}$
19	Decay of X_{h2}	1										-1		$k_{dec,Xh2} X_{h2}$

Composites (kgCOD.m ⁻³)	Carbohydrates (kgCOD.m ⁻³)	Proteins (kgCOD.m ⁻³)	Lipids (kgCOD.m ⁻³)	Sugar degraders (kgCOD.m ⁻³)	Amino acid degraders (kgCOD.m ⁻³)	LCFA degraders (kgCOD.m ⁻³)	Valerate and butyrate degraders (kgCOD.m ⁻³)	Propionate degraders (kgCOD.m ⁻³)	Acetate degraders (kgCOD.m ⁻³)	Hydrogen degraders (kgCOD.m ⁻³)	Particulate inerts (kgCOD.m ⁻³)	Inhibition factors: $I_1 = \frac{1}{1 + \rho_1 / N_{lim}}$ $I_2 = \frac{1}{1 + \rho_2 / N_{lim}}$ $I_3 = \frac{1}{1 + \rho_3 / N_{lim}}$
--	---	--------------------------------------	------------------------------------	---	--	--	--	--	---	--	--	---

Fonte: BATSTONE et al. (2002).

ANEXO II

Script - lhsdesign_modified.m

```

function
[X_scaled,X_normalized]=lhsdesign_modified(n,min_ranges_p,max_ranges_p,maxi
ter)
%lhsdesign_modified is a modification of the Matlab Statistics function
lhsdesign.
%It might be a good idea to jump straight to the example to see what does
%this function do.
%The following is the description of lhsdesign from Mathworks documentation
% X = lhsdesign(n,p) returns an n-by-p matrix, X, containing a latin
hypercube sample of n values on each of p variables.
%For each column of X, the n values are randomly distributed with one from
each interval (0,1/n), (1/n,2/n), ..., (1-1/n,1), and they are randomly
permuted.

%lhsdesign_modified provides a latin hypercube sample of n values of
%each of p variables but unlike lhsdesign, the variables can range between
%any minimum and maximum number specified by the user, where as lhsdesign
%only provide data between 0 and 1 which might not be very helpful in many
%practical problems where the range is not bound to 0 and 1
%
%Inputs:
%   n: number of radomly generated data points
%   min_ranges_p: [1xp] or [px1] vector that contains p values that
correspond to the minimum value of each variable
%   max_ranges_p: [1xp] or [px1] vector that contains p values that
correspond to the maximum value of each variable
%   maxiter: maximum number of iterations to perform in an attempt to
improve the design (default=5)
%Outputs
%   X_scaled: [nxp] matrix of randomly generated variables within the
%   min/max range that the user specified
%   X_normalized: [nxp] matrix of randomly generated variables within
the
%   0/1 range
%
%Example Usage:
%   [X_scaled,X_normalized]=lhsdesign_modified(100,[-50 100 ],[20
300],10);
%   figure
%   subplot(2,1,1),plot(X_scaled(:,1),X_scaled(:,2),'*')
%   title('Random Variables')
%   xlabel('X1')
%   ylabel('X2')
%   grid on
%   subplot(2,1,2),plot(X_normalized(:,1),X_normalized(:,2),'r*')
%   title('Normalized Random Variables')
%   xlabel('Normalized X1')
%   ylabel('Normalized X2')
%   grid on

p=length(min_ranges_p);
[M,N]=size(min_ranges_p);
if M<N
    min_ranges_p=min_ranges_p';

```

```

end

[M,N]=size(max_ranges_p);
if M<N
    max_ranges_p=max_ranges_p';
end

slope=max_ranges_p-min_ranges_p;
offset=min_ranges_p;

SLOPE=ones(n,p);
OFFSET=ones(n,p);

for i=1:p
    SLOPE(:,i)=ones(n,1).*slope(i);
    OFFSET(:,i)=ones(n,1).*offset(i);
end
X_normalized = lhs_maximin(n,p,maxiter);

X_scaled=SLOPE.*X_normalized+OFFSET;

% -----
function X = lhs_maximin(n,p,maxiter)
%LHS_MAXIMIN Generate a latin hypercube sample using the max-mi distance
criterion.
% X=LHSDESIGN(N,P,MAXITER) generates a latin hypercube sample X
containing N
% values on each of P variables with MAXITER maximum number of iterations
to perform in an
% attempt to improve the design (default=5). For each column, the N
values are
% randomly distributed with one from each interval (0,1/N), (1/N,2/N),
% ..., (1-1/N,1), and they are randomly permuted.
%
% Latin hypercube designs are useful when you need a sample that is
% random but that is guaranteed to be relatively uniformly distributed
% over each dimension.

if isnan(maxiter) || isempty(maxiter) || maxiter<0; maxiter = 5; end
% Start with a plain lhs sample over a grid
X = getsample(n,p);

% Create designs, save best one
bestscore = score(X);
for j=2:maxiter
    x = getsample(n,p);
    newscore = score(x);
    if newscore > bestscore
        X = x;
        bestscore = newscore;
    end
end

% -----
function x = getsample(n,p)
x = rand(n,p);
for i=1:p
    x(:,i) = rank(x(:,i));
end
x = x - rand(size(x));

```

```

x = x / n;

% -----
function s = score(x)
% compute score function, larger is better

if size(x,1)<2
    s = 0;      % score is meaningless with just one point
    return
end
% Maximize the minimum point-to-point difference
[~,dist] = knnsearch_1(x,x,2);
s = min(dist(:,1));

% -----
function r=rank(x)

% Similar to tiedrank, but no adjustment for ties here
 [~, rowidx] = sort(x);
r(rowidx) = 1:length(x);
r = r(:);

% -----
function [idx,D]=knnsearch_1(varargin)
% KNNSEARCH Linear k-nearest neighbor (KNN) search
% IDX = knnsearch(Q,R,K) searches the reference data set R (n x d array
% representing n points in a d-dimensional space) to find the k-nearest
% neighbors of each query point represented by each row of Q (m x d array).
% The results are stored in the (m x K) index array, IDX.
%
% IDX = knnsearch(Q,R) takes the default value K=1.
%
% IDX = knnsearch(Q) or IDX = knnsearch(Q,[],K) does the search for R = Q.
%
% Rationality
% Linear KNN search is the simplest approach of KNN. The search is based on
% calculation of all distances. Therefore, it is normally believed only
% suitable for small data sets. However, other advanced approaches, such as
% kd-tree and delaunary become inefficient when d is large comparing to the
% number of data points. On the other hand, the linear search in MATLAB is
% relatively insensitive to d due to the vectorization. In this code, the
% efficiency of linear search is further improved by using the JIT
% acceleration of MATLAB. Numerical example shows that its performance is
% comparable with kd-tree algorithm in mex.
%
% By Yi Cao at Cranfield University on 25 March 2008

% Check inputs
[Q,R,K,fident] = parseinputs(varargin{:});

[N,M] = size(Q);
L=size(R,1);
idx = zeros(N,K);
D = idx;

if K==1
    % Loop for each query point
    for k=1:N
        d=zeros(L,1);
        for t=1:M

```

```

        d=d+(R(:,t)-Q(k,t)).^2;
    end
    if fident
        d(k)=inf;
    end
    [D(k),idx(k)]=min(d);
end
else
    for k=1:N
        d=zeros(L,1);
        for t=1:M
            d=d+(R(:,t)-Q(k,t)).^2;
        end
        if fident
            d(k)=inf;
        end
        [s,t]=sort(d);
        idx(k,:)=t(1:K);
        D(k,:)=s(1:K);
    end
end
if nargout>1
    D=sqrt(D);
end

function [Q,R,K,fident] = parseinputs(varargin)
% Check input and output
error(nargchk(1,3,nargin));

Q=varargin{1};

if nargin<2
    R=Q;
    fident = true;
else
    fident = false;
    R=varargin{2};
end

if isempty(R)
    fident = true;
    R=Q;
end

if ~fident
    fident = isequal(Q,R);
end

if nargin<3
    K=1;
else
    K=varargin{3};
end

```

Script main.m

```
clear all; clc

% Variable 1 = Oxygen Mass Transfer Coefficient in Z3 (Z3-KLA)
% Variable 2 = Oxygen Mass Transfer Coefficient in Z4 (Z4-KLA)
% Variable 3 = Internal Recirculation Flowrate (Z5-QINT)
% Variable 4 = External Recirculation Flowrate (S-QR)
% Variable 5 = Excess Sludge (S-QW)

N_experiments = 500;
Min_values = [1e-6 1e-6 1e-6 1e-6 1e-6];
Max_values = [120 120 61944 20648 300];

[X_scaled,X_normalized] =
lhsdesign_modified(N_experiments,Min_values,Max_values,10);
figure
subplot(2,1,1),plot(X_scaled(:,1),X_scaled(:,2),'*')
title('Random Variables')
xlabel('X1')
ylabel('X2')
grid on
subplot(2,1,2),plot(X_normalized(:,1),X_normalized(:,2),'r*')
title('Normalized Random Variables')
xlabel('Normalized X1')
ylabel('Normalized X2')
grid on

X_scaled
X_normalized

data_lhs = X_scaled;
```