

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

ALEXANDRE CASAGRANDE TEIXEIRA

**MODELAGEM POR REDES NEURAIIS DO SISTEMA BIOLÓGICO DO
TRATAMENTO DE EFLUENTES EM REFINARIAS DE PETRÓLEO**

CURITIBA 2012

ALEXANDRE CASAGRANDE TEIXEIRA

MODELAGEM POR REDES NEURAS DO SISTEMA BIOLÓGICO DO
TRATAMENTO DE EFLUENTES EM REFINARIAS DE PETRÓLEO

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, área de concentração em Modelagem, Otimização e Controle de Processos, departamento de Engenharia Química, setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. David Alexander Mitchel.
Coorientador: Prof. Dr. Fernanda de Castilhos.

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

SETOR DE TECNOLOGIA

Departamento de Engenharia Química

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

MODELAGEM POR REDES NEURAIS DO SISTEMA BIOLÓGICO DO TRATAMENTO DE EFLUENTES EM REFINARIAS DE PETRÓLEO

por

ALEXANDRE CASAGRANDE TEIXEIRA

Dissertação de Mestrado submetida ao Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Paraná, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Aprovada por:

ORIENTADOR

Prof. Dr. David Alexander Mitchel
Dep. de Engenharia Química / UFPR

EXAMINADOR INTERNO

Prof. Dr. Marcelo Kaminski Lenzi
Dep. de Engenharia Química / UFPR

CO-ORIENTADOR

Prof. Dr. Fernanda de Castilhos
Dep. de Engenharia Química / UFPR

EXAMINADOR EXTERNO

Prof. Dr. Marcelo Real Prado
Dep. Acadêmico de Química e Biologia / UTFPR

Curitiba 2012

FICHA CATALOGRÁFICA

Teixeira, Alexandre Casagrande

Modelagem por redes neurais do sistema biológico do tratamento de efluentes em refinarias de petróleo / Alexandre Casagrande Teixeira. – Curitiba, 2012.
91 f. : il., tab.

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química.

Orientador: David Alexander Mitchel

Coorientadora: Fernanda de Castilhos

1. Petróleo - Refinaria. 2. Petróleo - Resíduos. 3. Redes Neurais (Computação). I. Mitchel, David Alexander. II. Castilhos, Fernanda de. III. Título.

CDD 665.538

*Dedico à minha
garotinha Maria Luísa.*

AGRADECIMENTOS

Presto meus agradecimentos primeiramente a Deus, por sempre me guiar e me permitir oportunidades e alegrias.

Agradeço minha esposa pela compreensão e paciência durante a elaboração desta dissertação.

Agradeço à empresa Petróleo Brasileiro S.A. – PETROBRAS – por ter me concedido esta oportunidade de crescimento técnico. Especial agradecimento aos Engenheiros Francisco de Oliveira Leme e Cássia Janson Lopes, que me incentivaram a desenvolver este estudo.

Por fim, agradeço meus orientadores, Prof. Dr. David Alexander Mitchell Prof^a Dr^a Fernanda de Castilhos, pelo auxílio prestado na produção desta dissertação.

RESUMO

A necessidade de preservação do meio ambiente tem direcionado atenção do setor industrial às unidades de tratamento de efluentes. Dentre as diversas tecnologias existentes, o tratamento biológico por lodos ativados é uma das mais utilizadas, devido a sua excelente robustez. Na indústria do petróleo, não é diferente, devido principalmente a sua elevada eficiência na remoção de nitrogênio amoniacal. No entanto, a eficiência desta tecnologia está diretamente relacionada com a qualidade do efluente a ser tratado. Uma variação brusca na composição da entrada do sistema pode provocar choques químicos no sistema biológico, ou seja, inibir as reações, alterando significativamente a qualidade do efluente tratado, com o risco de não se atender a legislação. Desta forma, é muito importante prever os resultados da planta quando há uma perturbação nas variáveis de entrada, de forma que ações preventivas possam ser tomadas, minimizando os impactos. No entanto, elaborar um modelo fenomenológico de um sistema de tratamento biológico é uma tarefa extremamente difícil e exaustiva, devido à complexidade das reações envolvidas e a não linearidade do sistema. Devido a isto, a modelagem do sistema de lodos ativados utilizando a técnica de Redes Neurais torna-se uma alternativa viável e interessante. A modelagem por redes neurais foi aplicada no sistema biológico de tratamento de efluentes da Refinaria Presidente Getúlio Vargas – Petrobras, com o objetivo de estimar o teor de nitrogênio amoniacal no efluente tratado, a partir de dados de qualidade da carga e de variáveis medidas diretamente na planta. Os teores de DQO e NH_3 na entrada do sistema, os teores de oxigênio dissolvido e os valores de pH do meio foram utilizados como dados de entrada da rede e são dados reais obtidos da unidade. Foram simuladas diversas estruturas utilizando o programa *Simulated Annealing*, como algoritmo de otimização. Os resultados obtidos na modelagem deste sistema mostram o potencial desta ferramenta na predição do teor de contaminantes no efluente tratado, que pode no futuro, ser implantada na unidade e servir como base para a tomada de decisão de ações preventivas quando da ocorrência de distúrbios operacionais.

Palavras-chave: lodo ativado, redes neurais, ASM1, tratamento de efluentes; refinarias de petróleo.

ABSTRACT

The need for preservation of the environment has forced the industrial sector to focus attention on wastewater treatment. Among the various existing technologies, biological treatment by activated sludge is one of the most used, due to its excellent robustness. It is no different in the petroleum industry: activated sludge systems are widely used, mainly because they are normally highly efficient in removing ammonia nitrogen. However, the efficiency of this technology is directly related to the quality of the effluent to be treated. A sudden change in the concentration of contaminants in the effluent entering the unit can cause chemical shocks to the microorganisms within the activated sludge. In turn, this leads to alterations in the quality of the treated effluent, which has the risk of failing to meet the law. Thus, it is very important to know how the quality of the final treated effluent is affected by disturbances in the input variables, so that preventive measures can be taken to minimize impact. However, the phenomenological modeling of activated sludge units is an extremely difficult and exhausting task due to the complexity of the reactions involved and the nonlinearity of the system. The modeling of activated sludge units using the technique of neural networks is a viable and interesting alternative. A neural network model was developed to describe the performance of the biological effluent treatment system of the President Getúlio Vargas Refinery - Petrobras, with the objective of estimating the ammonia nitrogen content of the final treated effluent from data characterizing the quality of the effluent entering the treatment unit and from several variables measured directly in the plant. The results obtained in modeling this system show the potential of this tool in predicting ammonium levels in the final treated effluent, which may in future serve as a basis for decision making preventive actions upon the occurrence of operational disturbances.

Keywords: activated sludge, neural network, ASM1, wastewater treatment, oil refineries.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 2.1: TANQUES DE AERAÇÃO OU REATORES BIOLÓGICOS - REPAR.....	21
FIGURA 2.2: DECANTADORES SECUNDÁRIOS - REPAR.....	22
FIGURA 2.3: REPRESENTAÇÃO DO FLOCO DE LODO ATIVADO.....	24
FIGURA 2.4: FOTOGRAFIA MOSTRANDO UM FLOCO DE LODO ATIVADO EM MICROSCÓPIO.....	24
FIGURA 2.5: BACTÉRIAS DE FORMA DE BASTONETES.....	25
FIGURE 2.6: AMOSTRA DE LODO ATIVADO CONTENDO BACTÉRIAS FILAMENTOSAS.....	26
FIGURA 2.7: AMOSTRA DE LODO ATIVADO CONTENDO PROTOZOÁRIO CILIADO.....	26
FIGURA 2.8: FOTOGRAFIA DE UMA COLÔNIA DE FUNGOS.....	27
FIGURA 2.9: INFLUÊNCIA DO PH NA TAXA DE NITRIFICAÇÃO.....	32
FIGURA 2.10: DIAGRAMA DOS PROCESSOS ENVOLVIDOS NO MODELO DE LODOS ATIVADOS.....	38
FIGURA 2.11: REPRESENTAÇÃO DE UMA REDE NEURAL.....	47
FIGURA 2.13: REPRESENTAÇÃO DE UMA REDE ALIMENTADA COM MÚLTIPLAS CAMADAS.....	50
FIGURA 2.14: REPRESENTAÇÃO DE UMA REDE RECORRENTE.....	51
FIGURA 2.15: TEORES DE AMÔNIA PREDITOS E OBSERVADOS.....	53
FIGURA 2.16: SIMULAÇÃO DO TEOR DE SS COM E SEM A CORREÇÃO DA RNA.....	54
FIGURA 2.17: SIMULAÇÃO DO TEOR DE DQO COM E SEM A CORREÇÃO DA RNA.....	54
FIGURA 2.18: SIMULAÇÃO DO TEOR DE AMÔNIA COM E SEM A CORREÇÃO DA RNA.....	55
FIGURA 2.19: SIMULAÇÃO DO TEOR DE SÓLIDOS SUSPENSOS VOLÁTEIS COM E SEM A UTILIZAÇÃO DE REDES NEURAIS.....	55
FIGURA 2.20: CONCENTRAÇÃO DE DQO PREDITA E OBSERVADA NO EFLUENTE DO UNIDADE DE TRATAMENTO DE İSKENDERUN.....	56
FIGURA 2.21: CONCENTRAÇÃO DE DBO NO EFLUENTE TRATADO OBSERVADO E PREDITO PELA RNA PARA OS GRUPOS A, B, C E D.....	57
FIGURA 2.22: CONCENTRAÇÃO DE SS NO EFLUENTE TRATADO OBSERVADO E PREDITO PELA RNA PARA OS GRUPOS A, B, C E D.....	58
FIGURA 2.23: PREDIÇÃO DA CONCENTRAÇÃO DE DQO, DBO E TEOR DE SS NO EFLUENTE TRATADO.....	59
FIGURA 3.1: ESQUEMA SIMPLIFICADO DO SISTEMA BIOLÓGICO DA UTDI DA REPAR.....	62
FIGURA 4.1: MATRIZ DE CORRELAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE ENTRADA E DA VARIÁVEL DE SAÍDA.....	68
FIGURA 4.2: ERRO MÉDIO DE TREINAMENTO EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE UNIDADES INTERNAS PARA OS CINCO GRUPOS.....	69
FIGURA 4.3: ERRO MÉDIO DE VALIDAÇÃO EM FUNÇÃO DO NÚMERO DE UNIDADES INTERNAS PARA OS CINCO GRUPOS.....	70
FIGURA 4.4: ERRO MÉDIO DE TREINAMENTO (A) E VALIDAÇÃO (B) DO GRUPO SIM02 COM O DESVIO PADRÃO DOS DADOS.....	72
FIGURA 4.5: ERRO MÉDIO DE TREINAMENTO (A) E VALIDAÇÃO (A) DO GRUPO SIM03 COM O DESVIO PADRÃO DOS DADOS.....	72
FIGURA 4.6: ERRO MÉDIO DE TREINAMENTO (A) E VALIDAÇÃO (B) DO SIM05 COM O DESVIO PADRÃO DOS DADOS.....	72

FIGURA 4.7: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM03 COM 13 UNIDADES INTERNAS.	73
FIGURA 4.8: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM03 COM 15 UNIDADES INTERNAS.	74
FIGURA 4.9: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM03 COM 18 UNIDADES INTERNAS.	74
FIGURA 4.10: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM03 COM 20 UNIDADES INTERNAS.	75
FIGURA 4.11: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM05 COM 13 UNIDADES INTERNAS.	75
FIGURA 4.12: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM05 COM 15 UNIDADES INTERNAS.	75
FIGURA 4.13: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM05 COM 18 UNIDADES INTERNAS.	76
FIGURA 4.14: DADOS PREDITOS E OBSERVADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO DO GRUPO SIM05 COM 20 UNIDADES INTERNAS.	76
FIGURA 4.15: RESULTADOS DE AMÔNIA REAIS E SIMULADOS DE TREINAMENTO - GRUPO SIM05 COM 18 UNIDADES INTERNAS.	77
FIGURA 4.16: RESULTADOS DE AMÔNIA REAIS E SIMULADOS DE VALIDAÇÃO - GRUPO SIM05 COM 18 UNIDADES INTERNAS.	77
FIGURA 4.17: AVALIAÇÃO DO ERRO DE MÉDIO DE TREINAMENTO DOS ALGORITMOS PSO E SA.	78
FIGURA 4.18: AVALIAÇÃO DO ERRO DE MÉDIO DE VALIDAÇÃO DOS ALGORITMOS PSO E SA.	79
FIGURA 4.19: COMPARAÇÃO DOS ERROS DE TREINAMENTO DAS DISTRIBUIÇÕES 70/30 E 81/19 PARA AS ESTRUTURA DE 18 UNIDADES DO GRUPO SIM05.	80
FIGURA 4.20: COMPARAÇÃO DOS ERROS DE VALIDAÇÃO DAS DISTRIBUIÇÕES 70/30 E 81/19 PARA AS ESTRUTURA DE 18 UNIDADES DO GRUPO SIM05.	80
FIGURA 4.21: TESTE DINÂMICO DA REDE SIM05 COM 18 UNIDADES INTERNAS NA DISTRIBUIÇÃO 70/30....	81
FIGURA 5.1: DIAGRAMA DE BLOCOS COM O SISTEMA ATUAL E PROPOSTO DE MONITORAMENTO DA UNIDADE DE TRATAMENTO DE EFLUENTES.....	84

LISTA DE TABELAS

TABELA 2.1: DESCRIÇÃO DOS TERMOS ENVOLVIDOS NAS REAÇÕES.....	40
TABELA 2.2: APLICAÇÕES DE RNA'S EM ENGENHARIA QUÍMICA	52
TABELA 3.1: GRUPOS DE VARIÁVEIS DE ENTRADA.	65

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Descrição	Valor/Unidade de
$\mu_{\max,A}$	Velocidade Específica de Crescimento Máximo Autotrófico	dias ⁻¹
$\mu_{\max,H}$	Velocidade Específica de Crescimento Máximo Heterotrófico	dias ⁻¹
η_g	Fator de Correção do Crescimento Anóxico Heterotrófico	0,8
η_h	Fator de Correção de Hidrólise Anóxica	0,4
b	Razão de Reciclo	-
b_A	Coeficiente de Decaimento Autotrófico	0,05 dias ⁻¹
b_H	Coeficiente de Decaimento Heterotrófico	0,22 dias ⁻¹
f_P	Fração da Biomassa com Produção de Particulados	-
		mg DQO/mg
F/M	Razão Alimento/Microorganismo	SS
\dot{I}_{XB}	Razão de Nitrogênio na Biomassa	86 g N/g SS
\dot{I}_{XP}	Razão de Nitrogênio nas Partículas Inertes	60 g N/g SS
		0,08 mg/
k_A	Coeficiente de Amonificação	DQO
k_h	Coeficiente de Hidrólise	3 dias ⁻¹
k_{LA}	Coeficiente de Transferência de Oxigênio	4 day ⁻¹
k_{NH}	Coeficiente de Saturação de Amônia	1 mg N/l
k_{NO}	Coeficiente de Saturação de Nitrato	0,5 mg N/l
$k_{O,A}$	Constante de Saturação de Oxigênio para Autotróficos	0,4 mg O ₂ /l
$k_{O,H}$	Constante de Saturação de Oxigênio para Heterotróficos	0,2 mg O ₂ /l
k_S	Constante de Saturação do Substrato por Heterotróficos	20 mg/l
k_{sat}	Coeficiente de Saturação Cinética	-
K_X	Constante de Saturação do Substrato Particulado por Hidrólise	0,03
I_8	Cinética de Consumo de Oxigênio	-
M_2	Cinética de Monod para Substrato Biodegradável	-
M_{8a}	Cinética de Monod para S _O relativa aos Autotróficos	-
M_{8h}	Cinética de Monod para S _O relativa aos Heterotróficos	-
M_9	Cinética de Monod para Nitrogênio na forma Nitrito e Nitrato	-

M_{10}	Cinética de Monod para Nitrogênio na forma de Amônia	-
q	Razão de Alimentação	-
q_r	Razão de Alimentação de Reciclo	-
S_I	Concentração de Matéria Orgânica Solúvel Inerte	mg/l
S_{ND}	Nitrogênio Orgânico Solúvel	mg/l
S_{NH}	Nitrogênio na forma NH_4^+ e NH_3	mg/l
S_{NO}	Nitrogênio na forma de Nitrato	mg/l
S_O	Concentração de Oxigênio Dissolvido	mg/l
S_{Omax}	Concentração Máxima de Oxigênio Dissolvido	mg/l
S_S	Substrato	mg/l
$S_{S,in}$	Substrato na Entrada	mg/l
V	Volume do Reator	Litros
X_{BA}	Concentração de Microorganismos Autotróficos	mg/l
X_{BH}	Concentração de Microorganismos Heterotróficos	mg/l
X_{BAin}	Concentração de Microorganismos Autotróficos na Entrada	mg/l
X_{BHin}	Concentração de Microorganismos Heterotróficos na Entrada	mg/l
X_{ND}	Nitrogênio Orgânico Particulado Biodegradável	mg/l
X_I	Concentração de Matéria Orgânica Particulada	mg/l
X_P	Concentração de Produto não Biodegradável	mg/l
X_S	Substrato Lentamente Biodegradável	mg/l
Y_A	Coefficiente de Rendimento Autotrófico	0,24 g/g N
Y_H	Coefficiente de Rendimento Heterotrófico	0,67 g/gDQO

LISTA DE ABREVIações

Abreviação	Descrição	Unidade
ASM	Activated Sludge Models	-
ASM1	Activated Sludge Model N°1	-
ASM2	Activated Sludge Model N°2	-
ASM2d	Activated Sludge Model N°2 com Atividade Denitrificante	-
ASM3	Activated Sludge Model N°3	-
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio	mg/l
DQO	Demanda Química de Oxigênio	mg/l
OD	Oxigênio Dissolvido	-
pH	Potencial Hidrogeniônico	-
SA	<i>Simulated Annealing</i>	-
SS	Sólidos Suspensos	-
UTDI	Unidade de Tratamento de Despejos Industriais	-

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	16
1.1	MOTIVAÇÃO.....	16
1.2	OBJETIVOS.....	18
1.2.1	Objetivo Geral	18
1.2.2	Objetivos Específicos	18
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	19
2.1	LODOS ATIVADOS – DESCRIÇÃO DO SISTEMA	19
2.1.1	Microbiologia de Lodos Ativados	22
2.1.2	Parâmetros de Acompanhamento do Sistema de Lodos Ativados	28
2.2	PROCESSOS BIOLÓGICOS DO SISTEMA DE LODOS ATIVADOS	29
2.2.1	Amonificação e Assimilação.....	29
2.2.2	Nitrificação	30
2.2.3	Denitrificação.....	33
2.3	DESAFIOS E DIFICULDADES DA OPERAÇÃO DO SISTEMA DE LODOS ATIVADOS.....	34
2.4	MODELAGEM DO PROCESSO DE LODOS ATIVADOS.....	35
2.4.1	Modelagem Fenomenológica – Modelos Caixa Branca.....	35
2.4.2	Modelos Matemáticos ASM	36
2.4.3	Modelo ASM1 – Activated Sludge Model N°1	37
2.4.4	Aplicação do Modelo ASM N°1	45
2.5	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	46
2.5.1	Descrição.....	46
2.5.2	Modelo de um Neurônio	47
2.5.3	Arquiteturas de Rede	49
2.5.4	Características.....	51
2.6	APLICAÇÕES DE REDES NEURAIS.....	51
2.7	MODELAGEM DE SISTEMAS DE LODOS ATIVADOS POR REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	52
2.8	CONSIDERAÇÕES FINAIS DA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	59
3	METODOLOGIA	61
3.1	O SISTEMA DE TRATAMENTO BIOLÓGICO DA REPAR	61
3.2	DADOS OPERACIONAIS	62

3.3	ANÁLISE DA CORRELAÇÃO DOS DADOS.....	63
3.4	ESTRUTURA DO ESTIMADOR DE ESTADO/SENSOR VIRTUAL.....	64
3.5	ARQUITETURA DA REDE NEURAL.....	64
3.6	AVALIAÇÃO DO ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO.....	65
3.7	AVALIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DOS DADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO	66
3.8	TESTE DINÂMICO	66
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	67
4.1	ANÁLISE DE CORRELAÇÃO DOS DADOS.....	67
4.2	ARQUITETURA DA REDE NEURAL.....	68
4.3	AVALIAÇÃO DO ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO.....	78
4.4	AVALIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DOS DADOS	79
4.5	TESTE DINÂMICO	81
4.6	COMPARAÇÃO COM A LITERATURA.....	82
4.7	OPORTUNIDADE DE APLICAÇÃO NA UNIDADE DE TRATAMENTO DE EFLUENTES DA REPAR.....	82
5	CONCLUSÕES	85
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	87

1 INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

A escassez de água potável se configura como um dos grandes problemas da sociedade moderna. Em uma refinaria, a água é tão importante quanto o petróleo por ser o principal insumo, sendo utilizada principalmente na geração de vapor e no sistema de resfriamento. O vapor gerado possui inúmeras aplicações, como a retificação dos derivados de petróleo, aquecimento de produtos e geração de energia elétrica. O vapor utilizado na retificação dos derivados de petróleo entra em contato direto com hidrocarbonetos e compostos nitrogenados presentes na corrente, desta forma a geração de efluentes contaminados com hidrocarbonetos e compostos nitrogenados é inevitável. Assim, o tratamento destes efluentes é um dos principais processos das refinarias de petróleo. Por sua vez, o tratamento biológico é a principal etapa das unidades de tratamento de efluentes. Das inúmeras tecnologias de tratamento biológico, a de lodos ativados tem presença significativa na indústria petrolífera, devido principalmente a sua robustez na remoção de nitrogênio. O nitrogênio é um dos principais elementos presentes nos efluentes gerados em refinarias de petróleo. Outra característica importante é o espaço necessário para a instalação de uma unidade: sistemas de lodos ativados se distinguem de outros sistemas de tratamento biológico por oferecem a possibilidade de se remover, de águas residuárias, os nutrientes nitrogênio e fósforo com requisitos mínimos de área (SANTOS, 2009).

Devido às condições de operação do processo de refino, o nitrogênio orgânico presente é convertido à forma amoniacal. Em refinarias de petróleo, o nitrogênio amoniacal é o parâmetro mais sensível aos choques químicos, sofrendo variações em seu teor no efluente tratado com certa facilidade, uma vez que o processo de nitrificação, que converte o nitrogênio amoniacal em nitrato, é o mais impactado.

A variação abrupta na qualidade da carga da unidade de tratamento de despejos industriais (UTDI) ou a presença de contaminantes não esperados no efluente (provenientes da parada de uma unidade de processo, por exemplo) provocam choques químicos no sistema biológico, alterando a qualidade do

efluente tratado. Muitas vezes é possível conhecer antecipadamente qual será a variação na qualidade da carga da unidade (por exemplo, na limpeza de uma unidade de processo, onde são utilizados produtos químicos destinados a este fim), no entanto, por não se ter modelos suficientemente bons, não é possível prever qual será o impacto no efluente final. Se fosse possível prever os impactos que uma variação na qualidade da carga causaria, haveria possibilidade de tomar ações preventivas para minimizar as alterações na saída. Descartar o efluente tratado com a qualidade que seja dentro dos limites especificados pela legislação não é uma tarefa fácil, uma vez que é muito difícil manter a estabilidade do sistema.

Uma possível estratégia para tentar prever os impactos seria utilizar um modelo fenomenológico para descrever o desempenho do sistema biológico de tratamento de efluentes. Entretanto, a modelagem fenomenológica de lodos ativados é extremamente difícil e exaustiva, uma vez que os inúmeros fenômenos biológicos são complexos e não lineares. Além disso, há uma grande dificuldade para determinar os parâmetros do modelo e não é possível utilizar os valores dos parâmetros de outra unidade de tratamento de efluentes, uma vez que sistemas diferentes possuem características distintas. Devido a isto, a modelagem de lodos ativados utilizando a técnica de Redes Neurais torna-se uma alternativa viável e interessante. Segundo HANISCH (2000), a forma empírica como os problemas são abordados pela técnica neural e o paralelismo natural inerente a sua arquitetura criam a possibilidade de um desempenho superior ao dos modelos fenomenológicos. Este tipo de técnica modela o sistema como se fosse uma caixa preta, ou seja, não é necessário conhecer os fenômenos internos, nem suas inter-relações, basta ter dados experimentais da entrada e saída do sistema para que se ajuste um modelo matemático empírico.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral do presente trabalho é desenvolver um modelo do sistema biológico da unidade de tratamento de efluentes da Refinaria Presidente Getulio Vargas pertencente à empresa Petrobras, baseado em Redes Neurais Artificiais. A função do modelo será inferir o teor de nitrogênio amoniacal no efluente tratado diante de variações na qualidade da carga da unidade.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Descrever a etapa biológica do sistema de tratamento de efluentes da REPAR;
- Levantar os dados operacionais para análise de correlação;
- Desenvolver uma estrutura neural baseado nos parâmetros escolhidos;
- Avaliar as variáveis de entrada, arquitetura da rede neural, a distribuição dos dados e o desempenho dos algoritmos de otimização utilizados;
- Efetuar teste dinâmico do modelo desenvolvido.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão está dividida em três partes. Na primeira parte do capítulo será apresentada a tecnologia de lodos ativados, onde serão abordadas as características e as diversas configurações de sistemas de lodo ativado, bem como as variáveis de acompanhamento de uma unidade industrial. Na segunda parte, serão expostas as principais diferenças entre a modelagem empírica e fenomenológica destes sistemas. Serão descritos os modelos aplicados a sistema de lodos ativados desenvolvidos pela International Water Association, com atenção especial ao modelo ASM1, com o objetivo de apresentar as dificuldades de descrever matematicamente o sistema de lodos ativados. Na terceira parte será abordada a modelagem por redes neurais. Esta seção começará com uma visão geral dos fundamentos da técnica e suas aplicações na área de engenharia química, e terminará com uma revisão de sua aplicação especificamente na área de sistemas de lodo ativados.

2.1 LODOS ATIVADOS – DESCRIÇÃO DO SISTEMA

As unidades de tratamento de efluentes em refinarias de petróleo são compostas basicamente das etapas clássicas de um sistema de tratamento de efluentes industriais, ou seja, o tratamento primário ou físico-químico e o tratamento secundário ou biológico. Essas unidades diferem das unidades de tratamento tradicionais pela inclusão de uma etapa de pré-tratamento da carga, chamada de separação água-óleo, que tem como objetivo a remoção de hidrocarboneto (óleo livre) presente nas correntes que compõem o efluente de refinarias de petróleo. Esta etapa visa preparar a carga para a etapa biológica, visto que o óleo livre causa graves problemas ao processo biológico uma vez que o hidrocarboneto envolve as bactérias, dificultando a transferência de oxigênio. Diversas tecnologias são utilizadas no tratamento biológico, por exemplo, lagoas de aeração, biodiscos e lodos ativados, sendo este último o mais difundido nas indústrias.

O tratamento de efluentes por lodos ativados foi testado, pela primeira vez na Inglaterra em 1914, pelos pesquisadores Edward Arden e William T. Lockett. Eles estudaram o uso repetido dos sólidos floculados com a aeração do efluente, denominando-os de lodo ativo, e observaram o aumento de sua capacidade de purificação por simples aeração (LEVY, 2007).

O processo de lodo ativado se originou da observação de que, quando um efluente (doméstico ou industrial) era aerado por um longo período de tempo, a concentração de matéria orgânica diminuía ao mesmo tempo em que eram formados flocos de lodo (RAMALHO, 1983). A utilização de aeração suplementar para o tratamento de efluente data do século XX. Segundo MELCHIOR et al (2003), o tratamento biológico por lodos ativados é atualmente o mais utilizado na depuração de efluentes industriais contaminados por carga orgânica e produtos nitrogenados, representando um sistema de tratamento com baixo custo de investimento e alta eficiência (remoção de DBO/DQO). Neste sistema, a matéria orgânica é, em parte, convertida em biomassa bacteriana (que compõe o lodo) e, em parte, mineralizada para CO_2 e H_2O .

A unidade de tratamento de efluentes por lodo ativado é composta por três elementos importantes: o tanque de aeração, o decantador secundário e a linha de recirculação de lodo. O tanque de aeração, também conhecido como reator biológico, normalmente é composto por tanque aberto em concreto, como mostra a Figura 2.1. Nos tanques de aeração ocorre a biodegradação dos contaminantes (matéria orgânica, amônia, etc.) presentes no efluente, que constituem a fonte de alimento para o crescimento dos microrganismos presentes no lodo. Os tanques de aeração são dotados de sistema de aeração que fornece oxigênio para as reações de biodegradação. As duas tecnologias principais do sistema de aeração são a aeração mecânica e o sistema de ar difuso. A aeração mecânica é composta por agitadores que provocam o turbilhonamento no sistema. O sistema por ar difuso é constituído por difusores submersos no líquido, que normalmente são posicionados no fundo do tanque para evitar a sedimentação do lodo, e que promovem a injeção de ar ou oxigênio puro em toda a extensão do tanque de aeração.



Figura 2.1: Tanques de Aeração ou Reatores Biológicos - REPAR.

Os decantadores secundários são tanques abertos em concreto, geralmente circulares, que tem como principal função promover a separação entre a massa biológica e o efluente tratado, como mostra a Figura 2.2. A separação ocorre pela sedimentação do lodo no fundo do decantador.

Apesar dos tanques de aeração formarem o coração do sistema de lodo, pois é lá que ocorrem as reações biológicas, a sedimentação é uma etapa fundamental para o processo de lodos ativados, ou seja, o sucesso da estação como um todo depende da sua adequada operação (MELCHIOR, 2003).



Figura 2.2: Decantadores Secundários - REPAR.

O lodo sedimentado tem dois destinos: o reciclo até a entrada dos reatores biológicos e o descarte do excesso. No caso do reciclo, o lodo ativado extraído dos decantadores é conduzido para um tanque anexo, com penúria de alimento, e permanece por um período de tempo suficiente para induzi-lo ao estado de respiração endógena, dessa forma, os microorganismos, deficientes de alimento e aclimatados às características da carga da unidade, são reciclados à entrada dos reatores biológicos. Esta reciclagem de microorganismos em fase de respiração endógena é necessária para se obter os melhores índices de eficiência do processo, ou seja, obter baixos teores de contaminantes no efluente final. O descarte é necessário para manter a relação entre alimento e microorganismos (F/M) no valor necessário para um bom desempenho da unidade.

2.1.1 Microbiologia de Lodos Ativados

Tipos de Microorganismos Presentes

Embora o ambiente dos lodos ativados possa ser considerado como aquático, ele não é um habitat adequado para toda a microfauna aquática, devido à constante agitação e recirculação do lodo. Nessas condições, os estudos do ambiente e da atividade da população no processo de lodos ativados são

especialmente relacionados com os microorganismos que se desenvolvem no processo, como bactérias, protozoários e fungos.

As bactérias são os microorganismos essenciais na formação dos flocos, sendo universalmente presentes no processo de lodos ativados. Muitas destas bactérias são heterotróficas, isto é, bactérias que usam o material orgânico como fonte de energia. Outra característica importante é a flexibilidade metabólica em relação ao tipo de metabolismo, com muitas das bactérias presentes sendo capazes de fazer respiração aeróbia (utilização de oxigênio como o aceptor final de elétrons), respiração anaeróbia (utilização de outros aceptores finais de elétrons, como nitrato e nitrito, por exemplo) ou fermentação (onde não tem aceptor final de elétrons exógeno), dependendo das condições.

Para uma unidade de tratamento de efluentes, a fonte de nutrientes para o lodo é justamente a carga de contaminante presente no efluente a ser tratado. Diante da variedade de compostos orgânicos e inorgânicos disponíveis nos esgotos, um diversificado ecossistema se desenvolve nos reatores de um sistema de lodo ativado (ECKENFELDER, 1992). A composição dessa comunidade depende da competição pela variada e limitada disponibilidade de alimento, sendo também influenciada por parâmetros ambientais, principalmente pH, temperatura e oxigênio dissolvido. Para as refinarias, o hidrocarboneto tem grande influência nesta composição.

A Figura 2.3 apresenta uma representação simplificada da estrutura do floco de lodo ativado. O floco é um aglomerado de mais ou menos 1 mm de diâmetro, constituído de substâncias, na sua maior parte orgânica, e também uma numerosa população de microorganismos. A Figura 2.4 apresenta uma foto de um floco bem definido de lodo ativado obtida em microscópio.

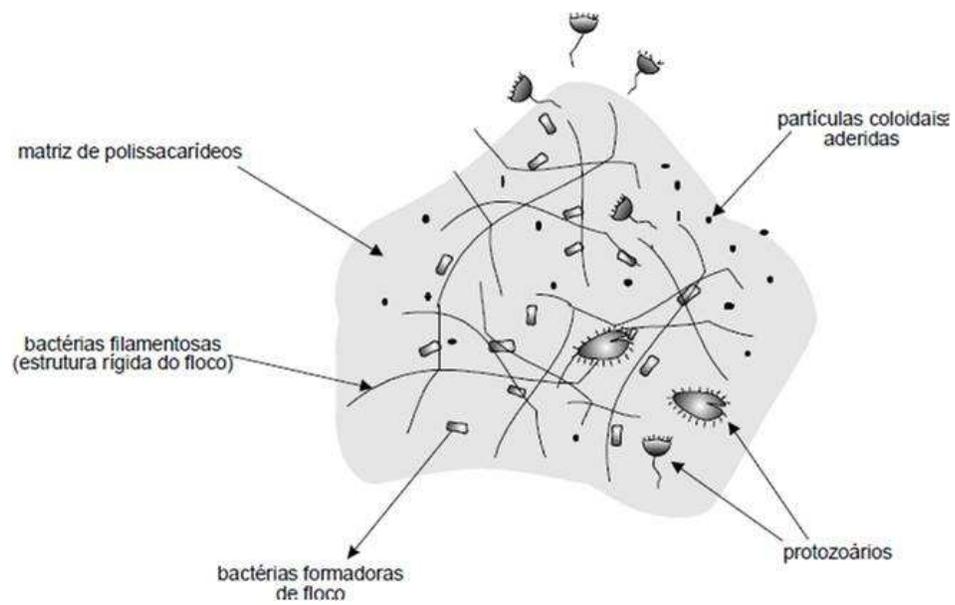


Figura 2.3: Representação do floculo de lodo ativado (Manual de Operação da UTDI da REPAR, 2009).

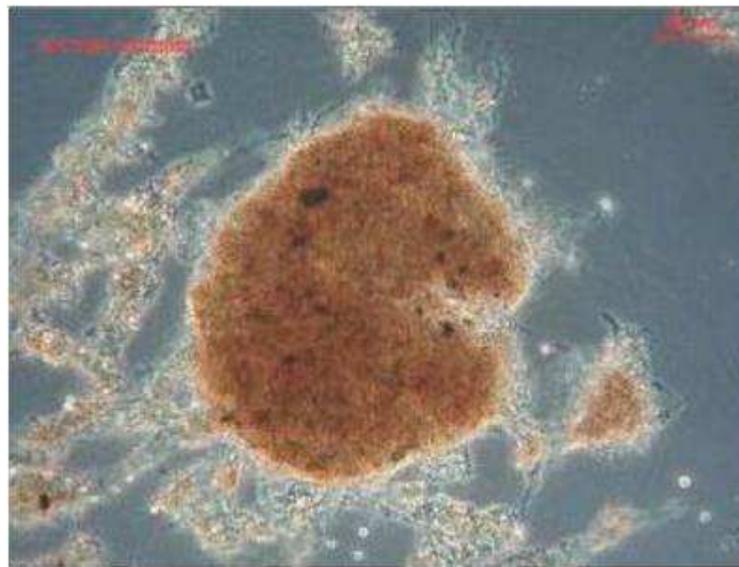


Figura 2.4: Fotografia mostrando um floculo de lodo ativado em microscópio (SOUSA, 2010).

A importância das bactérias é facilmente justificável, visto que as tarefas bases do sistema, degradação da matéria orgânica e a formação de flocos que possibilitam a separação do efluente do lodo, são executadas por elas. Embora a flora bacteriana do lodo ativado seja diversificada, para um sistema operando adequadamente, a comunidade é normalmente dominada por bastonetes gram-negativos dos gêneros *Pseudomonas*, *Achromobacter* e *Flavoracterium cytoplaga*. A Figura 2.5 mostra uma foto de bactérias de forma de bastonetes.



Figura 2.5: Bactérias de forma de bastonetes (SOUSA, 2010).

As bactérias filamentosas também são muito importantes para a formação de um bom floco, pois elas funcionam como um sistema de sustentação. No entanto, quando estão presentes em grande número no floco (deficiência de N/P ou insuficiência de O.D.), as bactérias filamentosas se tornam um grande problema, pois há um entrelaçamento dos flocos que impede uma boa aglomeração e dificulta a sedimentabilidade do lodo. Assim, há dificuldade na separação do lodo e do efluente no clarificador. Esse fenômeno é conhecido como *bulking*. As bactérias filamentosas que mais comumente causam problemas de sedimentabilidade dos lodos ativados são: *Sphaerotilus natans*, *Beggiatoa*, *Thiothrix*, *Lireola-longa*, *Actinomycetes nocardia*, *Streptomyces*, *Micromonospora*, *Flexibactérias saprospira albida* (ou *Spirulina albida*), *Pelomena*, *Microscilla*, *Acheroonema*, *Vitreoscilla* e *Leucotrix*. Muitas outras bactérias filamentosas têm sido encontradas

em lodos ativados, porém, com menor frequência do que as citadas acima. A Figura 2.6 ilustra as bactérias filamentosas.

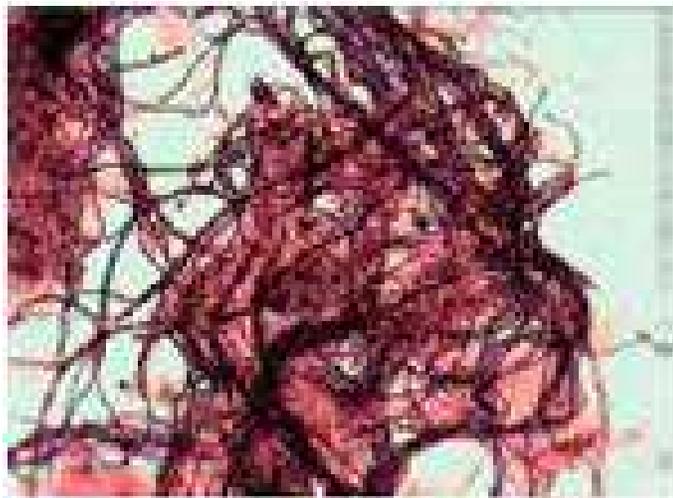


Figure 2.6: Amostra de Lodo Ativado Contendo Bactérias Filamentosas (SOUSA, 2010).

Depois das bactérias, os protozoários são os organismos mais numerosos no lodo ativado, quando se têm boas condições de operação no processo. O principal grupo de protozoários encontrado em lodo ativado é o de ciliados (Figura 2.7). Estes normalmente representam, aproximadamente, 5% do peso seco dos sólidos em suspensão presentes no reator biológico.

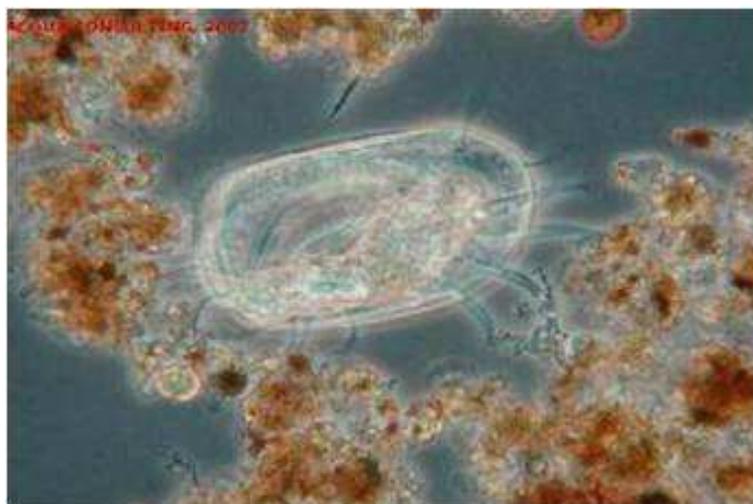


Figura 2.7: Amostra de Lodo Ativado Contendo Protozoário Ciliado (SOUSA, 2010).

Os protozoários têm uma participação importante no processo de lodo ativado. Na ausência de protozoários, um grande número de bactérias não floclula e segue com o efluente final. No entanto a presença de uma grande população de protozoários também é prejudicial devido a sua ação predatória reduzindo a quantidade de bactérias no sistema. Assim, a presença dos protozoários possui uma função importante na clarificação do efluente. Em relação à qualidade do efluente final, a identificação de certos tipos de protozoários pode fornecer informações importantes. Em geral, a presença de protozoários flagelados e de rizópodes indica que o efluente final não é de boa qualidade.

Fungos não estão presentes em grandes quantidades nos sistemas de lodo ativado operados adequadamente. Os gêneros de fungos mais observados nos lodos ativados são: *Fusarium*, *Grotrichoides*, *Oospora*, *Phoma*, *Pullularia* e *Sporotrichum*. Estes microorganismos ocorrem especialmente em condições não comumente encontradas no processo de lodos ativados, tais como baixo pH e efluente deficiente em nitrogênio, podendo dominar a comunidade e tornando-se os maiores responsáveis pelo tratamento.

Para a estabilização da matéria orgânica, os fungos são tão eficientes quanto às bactérias, mas, por serem filamentosos, sua presença, como organismos predominantes, cria dificuldades na separação do lodo do efluente no clarificador.

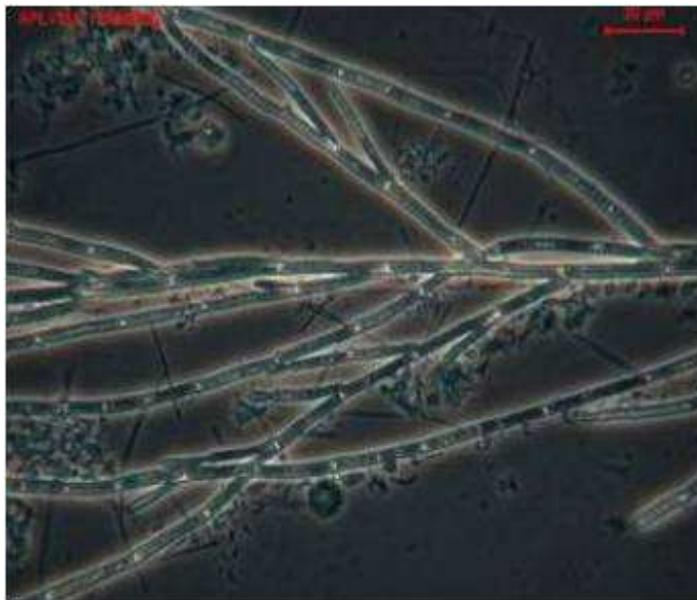


Figura 2.8: Fotografia de uma colônia de fungos (SOUSA, 2010).

2.1.2 Parâmetros de Acompanhamento do Sistema de Lodos Ativados

A avaliação da eficiência de uma unidade de tratamento de efluentes que utiliza lodos ativados é realizada por meio de alguns parâmetros que indicam o comportamento da biomassa. Os principais parâmetros de análise do sistema de lodos ativados, para o caso da REPAR, são:

- **Idade do Lodo:** representa o tempo médio que o lodo permanece no sistema e é dado pela razão entre a massa de lodo existente no sistema e a vazão mássica de lodo que deixa o sistema. O valor é expresso em dias. Um número entre 15 e 40 dias representa uma biomassa de boa qualidade (TEIXEIRA, 2009).
- **Índice Volumétrico de Lodo:** representa a relação entre a sedimentabilidade e o teor de sólidos suspensos no lodo. Valores entre 40 e 150 mL/mg indicam uma boa operação do decantador secundário (TEIXEIRA, 2009).
- **Relação F/M (Food/Microorganism):** é a relação mássica de alimento por microorganismos. É extremamente importante manter esta relação adequada, uma vez que a falta ou o excesso de alimento impacta no desenvolvimento da biomassa. Os valores deste parâmetro devem ficar no intervalo entre 0,5 e 1,0 (TEIXEIRA, 2009).
- **Sedimentabilidade:** indica como está a operação do decantador. Quando o ensaio de sedimentabilidade mostra uma boa decantação dos sólidos, o decantador secundário terá bom rendimento. Quando a sedimentabilidade está comprometida, poderá haver dificuldades na operação do decantador. Um elevado valor no teste de sedimentabilidade pode indicar a ocorrência de *bulking*. O ensaio de sedimentabilidade é efetuado colocando amostra do reator biológico em uma proveta até a marca de 1 litro. Após 30 minutos é efetuada a leitura do volume de sólido decantado. O valor deve estar entre 300 e 500 mL (TEIXEIRA, 2009).
- **Teor de Sólidos Suspensos:** Para cada sistema de lodo ativado, há uma concentração ideal de microorganismos no reator que depende do teor de contaminantes na carga e da vazão a ser tratada. Assim, valores de sólidos

suspensos de 8.000 a 12.000 mg/l refletem um bom desempenho do sistema (TEIXEIRA, 2009).

Além destes parâmetros que indicam a qualidade do lodo, outras variáveis são monitoradas e seus valores indicam principalmente variações na qualidade da carga do sistema e possíveis distúrbios no tratamento biológico. As principais variáveis são o oxigênio dissolvido, temperatura e pH.

2.2 PROCESSOS BIOLÓGICOS DO SISTEMA DE LODOS ATIVADOS

Os processos relacionados ao sistema de lodos ativados consistem basicamente da degradação da matéria orgânica e da oxidação de compostos inorgânicos.

A maioria das bactérias presentes em sistemas de lodo ativado oxida a matéria orgânica a gás carbônico e água (quimioheterotróficas), utilizando oxigênio molecular como acceptor de elétrons (HORAN, 1990). Também são encontradas bactérias quimioautotróficas que realizam a síntese de biomassa a partir de gás carbônico e água, utilizando com fonte de energia a oxidação aeróbia de compostos inorgânicos formados por nitrogênio, enxofre e ferro (ECKENFELDER, 1992).

Assim como em esgotos sanitários, os compostos orgânicos de nitrogênio e fósforo são encontrados em efluentes de refinarias de petróleo e constituem uma das principais fontes de energia para os microorganismos. Para o caso da REPAR, o esgoto sanitário é a principal fonte de microorganismos para o sistema de lodo ativado. Ao longo do processo biológico, o nitrogênio orgânico é levado a N_2 , passando pela forma amoniacal, de nitrito e nitrato, por meios de reações de amonificação, assimilação, nitrificação e denitrificação.

2.2.1 Amonificação e Assimilação

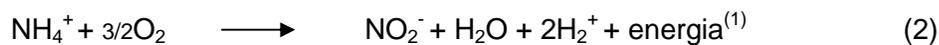
No processo de amonificação, como o próprio nome sugere, o nitrogênio orgânico é convertido em nitrogênio amoniacal. O processo inverso, ou seja, a conversão do íon amônio em nitrogênio orgânico é chamada de assimilação.

No processo de amonificação, há o aumento de alcalinidade devido ao consumo de íons H^+ na reação. Como normalmente o pH do meio é próximo da neutralidade, o íon amônio será predominante, conforme descreve a seguinte reação (SANTOS, 2009):

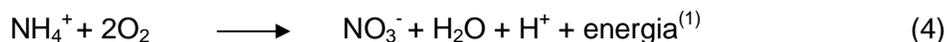


2.2.2 Nitrificação

O processo de nitrificação é a conversão do nitrogênio amoniacal a nitrato por duas etapas, chamadas de nitritação e nitratação, pela ação de bactérias autotróficas. Na nitritação a amônia é oxidada a nitrito pelas bactérias do gênero *Nitrosomonas* e na nitratação o nitrito é oxidado a nitrato pelas bactérias do gênero *Nitrobacter*. As reações de nitritação e nitratação são representadas pelas equações (2) e (3), respectivamente:



A equação global é representada pela equação (4):



⁽¹⁾ Refere-se à energia absorvida pelos microorganismos utilizada para o seu crescimento

O processo de nitrificação deve ser muito bem controlado, devido ao risco de os próprios produtos do metabolismo causarem toxicidade às bactérias e comprometer o sistema, neste caso pela redução do pH do meio. Os principais parâmetros do processo de nitrificação são pH e oxigênio dissolvido, sendo possível atingir eficiências de 99% de nitrificação quando estes parâmetros são controlados adequadamente. No entanto, outros parâmetros também precisam ser controlados, como a idade do lodo, que influencia no desempenho do sistema quando seu valor fica acima de 40 dias.

As bactérias responsáveis pelo processo de nitrificação são muito sensíveis à toxicidade do meio, seja ela oriunda das reações de degradação da matéria orgânica ou da presença de algum composto tóxico no efluente a ser tratado, como o clorofórmio. Os microrganismos são fortemente impactados pela variação da qualidade da carga de uma unidade de tratamento de efluente, sendo assim necessário o controle de seguintes parâmetros para uma boa eficiência do processo:

- **Temperatura:** O processo de nitrificação depende fortemente da temperatura, ocorrendo numa faixa de 4 a 45 °C, sendo 35°C a temperatura ótima para os microrganismos (FERREIRA, 2000).

- **Oxigênio Dissolvido:** A velocidade de crescimento das bactérias nitrificadoras é significativamente impactada pela concentração de oxigênio dissolvido (OD), reduzindo quando se tem baixos teores de oxigênio. Porém, os impactos causados pela variação do teor de oxigênio dissolvido ocorrem de forma lenta. Segundo FERREIRA (2000), a concentração de OD abaixo de 1,0 mg/l limita o crescimento das bactérias do gênero *Nitrosomonas*. No entanto, normalmente, os lodos ativados requerem teores acima de 2,0 mg/l de oxigênio dissolvido, sendo necessário valores maiores no caso de aumento de temperatura. De forma geral, a concentração de O₂ dissolvido não deve variar muito para não causar impactos no processo biológico (FERREIRA, 2000), no entanto, a experiência na REPAR mostrou que a falta de aeração em até quatro horas não tem efeito danoso a taxa de nitrificação, que comprometa o processo de tratamento.

- **pH:** O pH é um dos fatores mais influentes no processo. O pH deve ficar entre 7,0 e 8,5, pois abaixo de 7,0 há inibição das bactérias do gênero *Nitrobacter*, devido à não dissociação do ácido nitroso, e acima de 8,5 há inibição das bactérias do gênero *Nitrosomonas*, devido à presença de amônia livre (Figura 2.9).

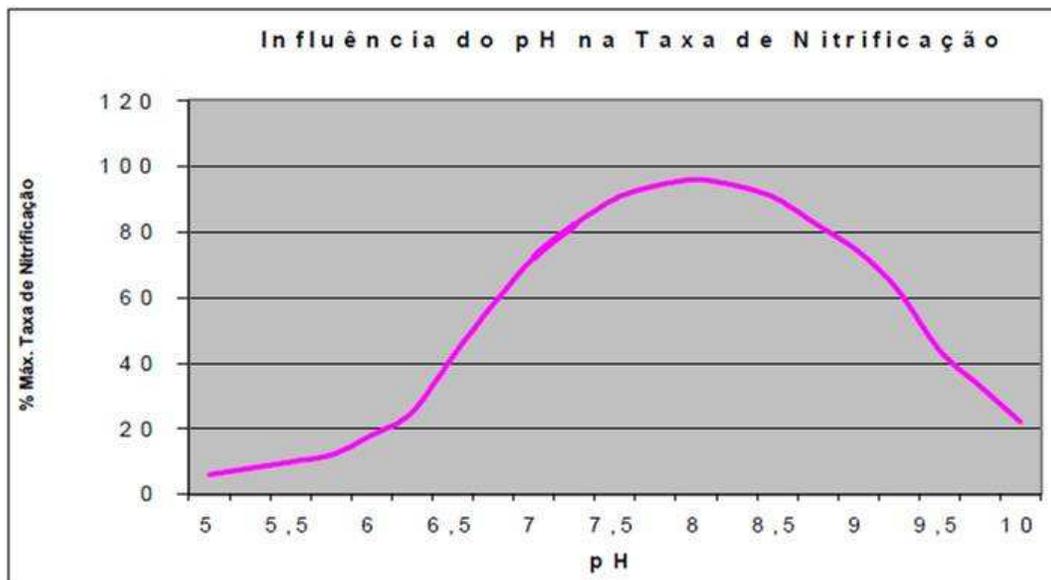


Figura 2.9: Influência do pH na Taxa de Nitrificação (FERREIRA, 2000).

- **Inibidores:** muitas substâncias orgânicas (acetona, etanol, etilenodiamina) e inorgânicas (clorofórmio, ácidos em geral) inibem o processo de nitrificação. Dentre as espécies químicas inibidoras encontradas nos efluentes da indústria petrolífera, pode-se citar fenol, metanol, dietanolamina, cianeto e hidrazina. A inibição pode ocorrer devido a distúrbios no metabolismo celular ou devido à ocorrência de reações de oxidação.

- **Relação Carga Orgânica e Nitrogênio de Entrada:** esta relação é um fator crítico no processo de nitrificação. A carga orgânica presente no efluente serve de alimento para os microorganismos heterotróficos. Assim, caso a concentração de matéria orgânica seja muito maior que a concentração de nitrogênio orgânico, haverá uma geração muito grande de microorganismos não nitrificantes. Para controlar a idade do lodo e a relação F/M, por exemplo, haverá necessidade do aumento de descartes de lodo dos reatores biológicos, provocando a redução da concentração de bactérias nitrificantes. Logo, o processo ficará prejudicado, devido ao número reduzido destes microorganismos no sistema.

2.2.3 Denitrificação

O processo de denitrificação consiste na conversão do nitrito e nitrato formado na nitrificação em nitrogênio gasoso:



O processo ocorre em condições anaeróbias onde os microorganismos utilizam nitrito e nitrato como acceptor final de elétrons, ao invés do oxigênio do ar. Caso haja disponibilidade de O_2 , cerca de $1,0 \text{ mg}/\ell$, a denitrificação é inibida, uma vez que a utilização de O_2 rende mais energia ao processo de respiração.

Muitos microorganismos presentes em sistemas de tratamento de efluentes por lodos ativados são denitrificadores, mesmo em sistemas não dimensionados para operar com denitrificação. A presença destes organismos se deve por seu caráter facultativo, isto é, eles podem utilizar oxigênio ou nitrato como acceptor de elétrons.

Mesmo nos reatores biológicos do sistema de lodo ativado, onde a oferta de oxigênio é alta, pode ocorrer denitrificação devido à formação de zonas mortas, onde a aeração não é eficiente. Os decantadores secundários são pontos onde a velocidade de denitrificação é elevada, uma vez que a oxigenação é baixa e há disponibilidade de nitrato.

Assim como na nitrificação, a denitrificação sofre influência de alguns parâmetros. A taxa de denitrificação é afetada por fatores ambientais como a temperatura, pH e concentração de oxigênio dissolvido. A denitrificação ocorre em temperaturas na faixa de $10 \text{ }^\circ\text{C}$ a $30 \text{ }^\circ\text{C}$. O pH ótimo está na faixa de 6,5 a 8,0 (METCALF e EDDY, 2003).

2.3 DESAFIOS E DIFICULDADES DA OPERAÇÃO DO SISTEMA DE LODOS ATIVADOS

A operação de uma unidade de tratamento de efluentes de uma refinaria de petróleo não é uma tarefa simples e constitui um grande desafio para os profissionais envolvidos no controle e na otimização do sistema.

Dentre os problemas enfrentados no dia a dia da operação da unidade, pode-se destacar, como principal, a variabilidade da qualidade do efluente a ser tratado. As unidades de processo de refino de petróleo, como a destilação, por exemplo, têm suas variáveis ajustadas para a produção de determinado derivado. Por exemplo, pode-se necessitar produzir mais diesel durante as duas primeiras semanas do mês e depois ajustar as variáveis de processo da unidade para a produção de querosene de aviação. Esta alteração no modo de operação das unidades influencia na qualidade do efluente gerado.

Outro fator importante na dinâmica da qualidade do efluente é o tipo de óleo a ser processado. Se considerar como volume de controle toda a refinaria, as correntes de entrada são formadas pelo petróleo e pela água utilizada em várias etapas do processo. Os contaminantes presentes no efluente são oriundos do petróleo e são incorporados ao efluente pelo contato da água e vapor d'água com o petróleo e seus derivados durante o processo de refino ou pelo descarte da chamada "água de produção" que é a água oriunda dos poços de exploração e que são carreadas com o óleo até a refinaria.

Muitas ocorrências foram registradas ao longo dos anos na operação da unidade de tratamento de efluentes da REPAR, como por exemplo, a perda de nitrificação devido à choque químico. Esses choques são causados pela presença de contaminante que normalmente não está presente no efluente e que foi incorporado devido algum distúrbio no processo de refino do petróleo. Pode-se citar a dietanoamina, utilizada para remoção do H_2S presente nos derivados de petróleo. Outra forma de choque ao sistema biológico é a alteração abrupta do teor de algum contaminante comum ao sistema, como a amônia que pode ser gerada em maior quantidade devido a problemas nas unidades de processo, por exemplo, por distúrbio nas unidades de tratamento de água ácida. Assim, essa mudança na

qualidade do efluente resulta em grandes impactos ao tratamento biológico com conseqüente alteração na qualidade do efluente final.

O ajuste das variáveis de operação da unidade não é trivial, uma vez que a qualidade da carga das unidades de tratamento de efluente varia significativamente e não há um modelo que defina de forma satisfatória o comportamento do sistema. A modelagem dos sistemas de lodos ativados de refinarias é extremamente complexa, devido aos inúmeros tipos de microorganismos, a não linearidade do sistema e aos fenômenos químicos e biológicos presentes, como será apresentado na seção seguinte.

2.4 MODELAGEM DO PROCESSO DE LODOS ATIVADOS

2.4.1 Modelagem Fenomenológica – Modelos Caixa Branca

Os modelos caixa branca (fenomenológicos) são assim chamados por se conhecer suas reações, hipóteses, simplificações e os fenômenos envolvidos no sistema e são baseados nas leis e princípios da ciência. Normalmente, os modelos fenomenológicos, também conhecidos como modelos determinísticos, são desenvolvidos a partir de balanços de massa e de energia, formando um conjunto de equações diferenciais.

Para o caso de um sistema de tratamento de efluentes, a modelagem do sistema biológico leva em consideração os fenômenos e processos relativos ao lodo ativado (reações biológicas e químicas no processo de degradação da matéria orgânica), ao modelo hidráulico e à transferência de oxigênio.

A dificuldade de se desenvolver um modelo que represente de forma satisfatória um processo depende da quantidade de reações e fenômenos envolvidos e da determinação dos valores dos parâmetros e constantes. Para o caso de uma unidade de tratamento de efluentes, esta dificuldade se dá principalmente devido ao elevado número de microorganismos presentes na biomassa, à alta dinâmica do processo e à alta sensibilidade às pequenas alterações em parâmetros como temperatura, pH, oxigênio dissolvido e a toxicidade presente na carga.

2.4.2 Modelos Matemáticos ASM

Os modelos matemáticos mais empregados atualmente na predição de comportamentos biológicos em unidades de tratamento de esgotos derivam dos estudos realizados pelo grupo de pesquisadores da IWA – *International Water Association*, denominados de ASM – *Activated Sludge Models* (Modelos para Lodo Ativado). A equipe era formada por pesquisadores da University of Cape Town na África do Sul, coordenada pelo professor G. Marais, em meados da década de 1980.

Os modelos matemáticos da IWA (ASM1, ASM2, ASM2d e ASM3) podem ser usados para dar uma idéia dos parâmetros de projeto para o dimensionamento e a operação da etapa biológica de sistemas de lodo ativado de qualquer configuração, seja convencional ou não.

A literatura mostra a dimensão da importância que os modelos da IWA, principalmente o ASM1, têm nos estudos e projetos envolvendo lodos ativados, haja vista a enorme quantidade de trabalhos que citam este modelo. Esses modelos são aplicados, tanto em trabalhos acadêmicos, como no desenvolvimento de softwares comerciais de modelagem e simulação e também em alguns casos no monitoramento de unidades de tratamento de efluentes.

A primeira versão dos modelos desenvolvidos pela IWA, o ASM1, descreve a remoção de compostos de carbono e nitrogênio, onde o oxigênio e o nitrato eram os aceptores de elétrons. A concentração de matéria orgânica neste modelo é expressa pelo teor da demanda química de oxigênio. Os parâmetros cinéticos são estimados para dois valores de temperatura, 10 e 20 °C, limitando o uso do modelo. Outra característica importante do ASM1 é o pH constante e próximo da neutralidade, desviando-se da realidade, uma vez que algumas reações do sistema de lodos ativados resultam na queda do pH, como a nitrificação, que conseqüentemente age como inibidor em outros fenômenos. No ASM1, os efeitos de inibição pela presença de um contaminante são incluídos na estimação dos parâmetros da nitrificação, por ser a reação mais sensível a inibidores, sendo considerados constantes e possuindo valores médios, ou seja, não há nenhum parâmetro que leve em consideração o impacto quantitativo dos inibidores. Uma

limitação importante do ASM1 é que o modelo não considera os efeitos da deficiência de nitrogênio ou fósforo no crescimento.

O ASM1 foi ampliado, dando origem ao ASM2, que descreve a remoção do fósforo pela vias biológica e química, esta última por precipitação. No ASM2 também foi incluída uma dependência dos parâmetros das reações com a temperatura. Na sequência, foi desenvolvido o ASM2d com a atividade denitrificante dos organismos que acumulam fósforo.

O ASM3 surgiu como um aprimoramento do ASM1 e constitui as principais mudanças na evolução da família ASM e corrige alguns desvios da primeira versão do modelo de lodo ativado da IWA. Neste novo modelo, o decaimento da biomassa foi melhor descrito e a respiração endógena foi incluída. Diferentemente do ASM1, no ASM3 os processos envolvendo organismos heterotróficos e autotróficos foram separados. A produção de N_2 e os produtos da denitrificação foram incluídos, o que permitiu fechar o balanço de nitrogênio.

2.4.3 Modelo ASM1 – Activated Sludge Model N° 1

O ASM1 contém 13 equações diferenciais para descrever os fenômenos envolvidos no sistema de tratamento por lodos ativado. NELSON e SDIHU (2009) excluíram quatro destas equações, considerando que elas descrevem somente o comportamento dos seguintes espécies específicas, sem afetar a dinâmica do sistema:

- Matéria orgânica solúvel inerte: não participa de qualquer reação;
- Matéria orgânica particulada inerte: trata-se de compostos orgânicos particulados que são englobados na massa biológica, porém não sofrem qualquer reação e são removidos do sistema no descarte rotineiro da unidade;
- Matéria não biodegradável: atravessa todo o sistema de lodos ativados sem sofrer qualquer alteração, estando, em sua maior parte, na forma solúvel, podendo ter alguma parcela na forma particulada;
- Alcalinidade.

A seguir, é apresentado o diagrama contendo as espécies e fenômenos considerados no ASM1. Para todas as espécies, as reações foram classificadas em

produção (reações que produzem a espécie em questão) e consumo (reações que consomem ou destroem a espécie em questão).

Diagrama dos Fenômenos Presentes no Modelo ASM1

O diagrama foi elaborado baseado no trabalho de NELSON et al (2009).

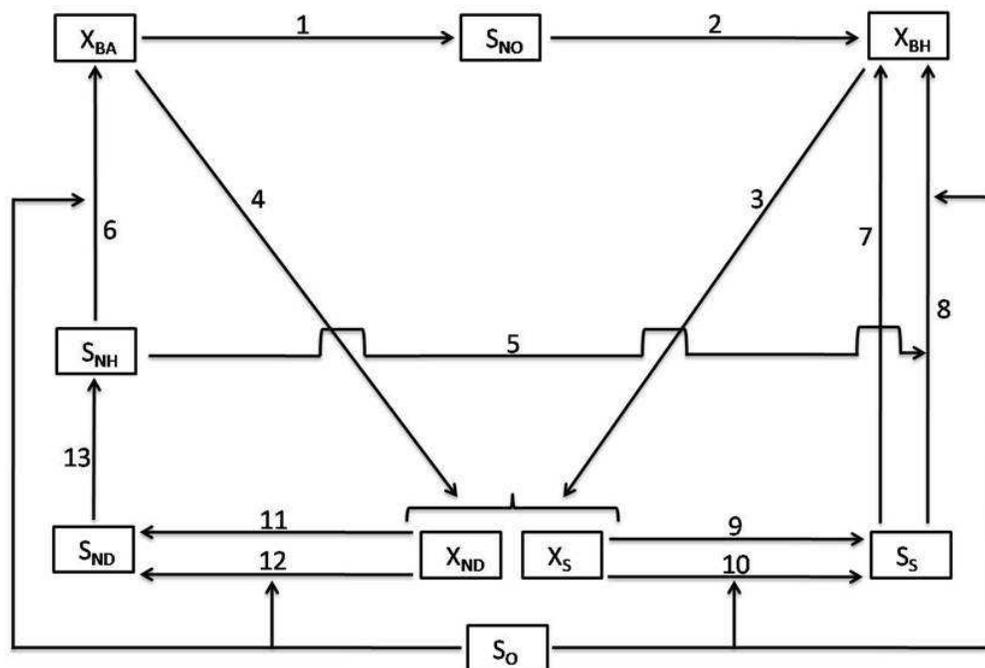


Figura 2.10: Diagrama dos Processos Envolvidos no Modelo de Lodos Ativos (TEIXEIRA, 2010).

Espécies

- S_S : Substrato.
- X_{BH} : Microorganismos Heterotróficos.
- X_{BA} : Microorganismos Autotróficos.
- X_{ND} : Nitrogênio Orgânico Particulado Biodegradável.
- X_S : Substrato Lentamente Biodegradável.
- S_O : Concentração de Oxigênio Dissolvido.
- S_{ND} : Nitrogênio Orgânico Solúvel.
- S_{NH} : Nitrogênio na forma NH_4^+ e NH_3 .
- S_{NO} : Nitrogênio da forma de nitrato.

Fenômenos

1. Crescimento Aeróbio de Autotróficos;
2. Crescimento Aeróbio de Autotróficos;
3. Crescimento Anóxico de Heterotróficos;
4. Decaimento dos Heterotróficos;
5. Decaimento dos Autotróficos;
6. Crescimento Aeróbio de Heterotróficos;
7. Crescimento Aeróbio de Autotróficos;
8. Crescimento Anóxico de Heterotróficos;
9. Crescimento Aeróbio de Heterotróficos;
10. Hidrólise Anóxica;
11. Hidrólise Aeróbia;
12. Hidrólise Anóxica;
13. Hidrólise Aeróbia;
14. Amonificação;

Matéria Orgânica – S_S e X_S

A matéria orgânica é formada pela prontamente biodegradável e pela lentamente biodegradável

A matéria orgânica prontamente biodegradável (S_S), considerada matéria solúvel, é composta de moléculas simples.

A produção ocorre a partir da hidrólise da matéria orgânica particulada englobada pelos flocos.

O consumo se dá por bactérias heterotróficas para crescimento e manutenção do lodo biológico.

O balanço do substrato biodegradável é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dS_S}{dt} = \frac{q}{V} (S_{S,in} - S_S) - \frac{1}{Y_H} \cdot \mu_{max,H} \cdot M_2 \cdot (M_{gh} + I_B \cdot M_g \cdot \eta_g) \cdot X_{B,H} + k_h \cdot k_{sat} (M_{gh} + \eta_h \cdot I_B \cdot M_g) X_{B,H} \quad (6)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes às quantidades de substrato da entrada e da saída do reator, a consumida pelo crescimento aeróbio e anóxico heterotrófico e a formação por hidrólise aeróbia e anóxica.

A seguir são apresentadas as equações de cinética de Monod.

$$M_2 = \frac{S_S}{K_S + S_S} \quad (7)$$

$$M_{ga} = \frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \quad (8)$$

$$M_{gh} = \frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \quad (9)$$

$$M_g = \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \quad (10)$$

$$M_{10} = \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \quad (11)$$

$$I_B = \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \quad (12)$$

$$k_{sat} = \frac{X_S}{K_X X_{B,H} + X_S} \quad (13)$$

A Tabela 2.1 apresenta os termos envolvidos em todas as reações.

Tabela 2.1. Descrição dos termos envolvidos nas reações (NELSON, 2009).

$\mu_{\max,A}$	Velocidade de Crescimento Específico Máximo Autotrófico
$\mu_{\max,H}$	Velocidade de Crescimento Específico Máximo Heterotrófico
η_g	Fator de Correção do Crescimento Anóxico Heterotrófico
η_h	Fator de Correção de Hidrólise Anóxica
b	Razão de Reciclo
b_A	Coefficiente de Decaimento Autotrófico
b_H	Coefficiente de Decaimento Heterotrófico
f_P	Fração da Biomassa com Produção de Particulados
i_{XB}	Razão de Nitrogênio na Biomassa
i_{XP}	Razão de Nitrogênio nas Partículas Inertes
k_A	Coefficiente de Amonificação
k_h	Coefficiente de Hidrólise
k_{LA}	Coefficiente de Transferência de Oxigênio
k_{NH}	Coefficiente de Saturação de Amônia
k_{NO}	Coefficiente de Saturação de Nitrato
$k_{O,A}$	Constante de Saturação de Oxigênio para Autotróficos
$k_{O,H}$	Constante de Saturação de Oxigênio para Heterotróficos
k_S	Constante de Saturação do Substrato por Heterotróficos
k_{sat}	Coefficiente de Saturação Cinética
K_X	Constante de Saturação do Substrato Particulado por Hidrólise
l_B	Cinética de Consumo de Oxigênio
M_2	Cinética de Monod para Substrato Biodegradável
M_{8a}	Cinética de Monod para S_O relativa aos Autotróficos
M_{8h}	Cinética de Monod para S_O relativa aos Heterotróficos
M_9	Cinética de Monod para Nitrogênio na forma Nitrito e Nitrato
M_{10}	Cinética de Monod para Nitrogênio na forma de Amônia
q	Razão de Alimentação
qr	Razão de Alimentação de Reciclo
S_I	Concentração de Matéria Orgânica Solúvel Inerte
S_{ND}	Nitrogênio Orgânico Solúvel
S_{NH}	Nitrogênio na forma NH_4^+ e NH_3
S_{NO}	Nitrogênio na forma de Nitrato
S_O	Concentração de Oxigênio Dissolvido
S_{Omax}	Concentração Máxima de Oxigênio Dissolvido
S_S	Substrato
$S_{S,in}$	Substrato na Entrada
V	Volume do Reator
X_{BA}	Concentração de Microorganismos Autotróficos
X_{BH}	Concentração de Microorganismos Heterotróficos
X_{BAin}	Concentração de Microorganismos Autotróficos na Entrada
X_{BHin}	Concentração de Microorganismos Heterotróficos na Entrada
X_{ND}	Nitrogênio Orgânico Particulado Biodegradável
X_I	Concentração de Matéria Orgânica Particulada
X_P	Concentração de Produto não Biodegradável
X_S	Substrato Lentamente Biodegradável
Y_A	Coefficiente de Rendimento Autotrófico
Y_H	Coefficiente de Rendimento Heterotrófico

A matéria orgânica lentamente biodegradável (X_S) é formada por moléculas complexas que devem ser convertidas em matéria prontamente biodegradável antes de serem consumidas.

A produção ocorre pelo decaimento da biomassa heterotrófica e autotrófica, ou seja, na transformação de material celular em matéria orgânica lentamente biodegradável. O consumo se dá pela hidrólise do X_S a S_S .

O balanço do substrato lentamente biodegradável é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dX_S}{dt} = \frac{q}{V} (X_{S,in} - X_S) + \frac{q_r}{V} (b - 1) X_S + (1 - f_p) (b_H X_{B,H} + b_A X_{B,A}) - k_h \cdot k_{sat} (M_{8h} + \eta_h \cdot I_8 \cdot M_9) X_{B,H} \quad (14)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de substrato de entrada e saída do reator, ao reciclo, à formação por decaimento heterotrófico e autotrófico e ao consumo por hidrólise aeróbia e anóxica.

Microorganismos Heterotróficos e Autotróficos – $X_{B,H}$ e $X_{B,A}$

A produção de microorganismos heterotróficos ($X_{B,H}$) ocorre pelo crescimento, através do consumo da matéria orgânica prontamente biodegradável (S_S) sob condições aeróbias e anóxicas. Caso ocorra a falta de oxigênio, o crescimento é interrompido. Já o crescimento dos microorganismos autotróficos ($X_{B,A}$) ocorre somente sob condições aeróbias.

Tanto para a biomassa heterotrófica quanto para a biomassa autotrófica, o consumo ocorre pelo decaimento e tem como produto a matéria orgânica lentamente biodegradável (X_S) e os produtos particulados (X_P), que não sofrem ação dos microorganismos.

O balanço de microorganismos heterotróficos é dado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{dX_{B,H}}{dt} = & \frac{q}{V} (X_{B,H,in} - X_{B,H}) + \frac{q_r}{V} (b - 1) X_{B,H} + \mu_{max,H} \cdot M_2 \cdot M_{8h} \cdot X_{B,H} \\ & + \mu_{max,H} \cdot M_2 \cdot I_8 \cdot M_9 \cdot \eta_g \cdot X_{B,H} - b_H \cdot X_{B,H}. \end{aligned} \quad (15)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de microorganismos de entrada e saída do reator, ao reciclo, ao crescimento aeróbico e anóxico e ao decaimento da biomassa.

O balanço de microorganismos autotróficos é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dX_{B,A}}{dt} = \frac{q}{V} (X_{B,A,in} - X_{B,A}) + \frac{q_r}{V} (b - 1) X_{B,A} + \mu_{\max,A} \cdot M_{10} \cdot M_{8a} \cdot X_{B,A} - b_A \cdot X_{B,A} \quad (16)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de entrada e saída de microorganismos do reator, ao reciclo, ao crescimento aeróbico e ao decaimento da biomassa.

Oxigênio Dissolvido - S_O

O consumo de oxigênio é suprido pelo sistema de aeração. No balanço, este consumo está representado pela transferência de oxigênio para o meio, que pode ser maior ou menor, dependendo do tipo de sistema de aeração utilizado.

O consumo está associado ao crescimento dos microorganismos heterotróficos e autotróficos e ao processo de hidrólise do X_S , X_{ND} e S_{ND} . No ASM1 são considerados no balanço somente os fenômenos que removem oxigênio do meio. Assim, é possível estimar quantitativamente o oxigênio necessário para suprir os processos microbiológicos considerados no modelo.

O balanço de oxigênio é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dS_O}{dt} = \frac{q}{V} (S_{O,in} - S_O) + K_{LA} (S_{O,max} - S_O) - \frac{(1 - Y_H)}{Y_H} \cdot \mu_{\max,H} \cdot M_2 \cdot M_{8h} \cdot X_{B,H} - \frac{(4.57 - Y_A)}{Y_A} \cdot \mu_{\max,A} \cdot M_{10} \cdot M_{8a} \cdot X_{B,A} \quad (17)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de oxigênio de entrada e saída do reator, à transferência de oxigênio entre as fases líquida e gasosa e ao consumo devido ao crescimento heterotrófico e autotrófico. O número 4,57 tem unidades de “mgO₂/mgN-NH₄” e representa a demanda de

oxigênio associada à oxidação da amônia a nitrato e é usado para descrever o crescimento aeróbio dos organismos autotróficos.

Nitrogênio na Forma de Nitrato - S_{NO}

A produção de nitrogênio na forma de nitrato se dá por meio do crescimento aeróbio dos microorganismos autotróficos. O consumo se dá por meio do crescimento anóxico dos heterotróficos. O ASM1 simplifica este termo: embora a formação de nitrito ocorra durante o processo de nitrificação, o modelo admite que o nitrato seja a única forma oxidada de nitrogênio. O balanço de nitrato é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dS_{NO}}{dt} = \frac{q}{V} (S_{NO,in} - S_{NO}) - \frac{(1 - Y_H)}{2.86Y_H} \cdot \mu_{max,H} \cdot M_2 \cdot I_8 \cdot M_9 \cdot \eta_g \cdot X_{B,H} + \frac{1}{Y_A} \cdot \mu_{max,A} \cdot M_{10} \cdot M_{8a} \cdot X_{B,A} \quad (18)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de entrada e saída de nitrato do reator, ao consumo pelo crescimento heterotrófico e à formação pelo crescimento autotrófico. O número 2,86 tem unidades de “mgO₂/mgN-NH₄” e representa a demanda de oxigênio associada à oxidação da amônia a nitrato e é usado para descrever o crescimento aeróbio dos organismos heterotróficos.

Nitrogênio na Forma de Amônia - S_{NH}

A produção de nitrogênio amoniacal ocorre por amonificação do nitrogênio orgânico solúvel biodegradável. O consumo de nitrogênio amoniacal se dá pelo crescimento da biomassa. O maior consumo desta forma de nitrogênio ocorre pelo crescimento aeróbio dos microorganismos autotróficos. O balanço de amônia é dado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{dS_{NH}}{dt} = \frac{q}{V} (S_{NH,in} - S_{NH}) - i_{XB} \mu_{max,H} \cdot M_2 \cdot (M_{8h} + I_8 \cdot M_9 \cdot \eta_g) X_{B,H} \\ - \left(i_{XB} + \frac{1}{Y_A} \right) \mu_{max,A} \cdot M_{10} \cdot M_{8a} \cdot X_{B,A} + k_A \cdot S_{ND} \cdot X_{B,H}. \end{aligned} \quad (19)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de entrada e saída de amônia do reator, ao consumo pelo crescimento heterotrófico aeróbio e anóxico, ao consumo pelo crescimento autotrófico aeróbio e à formação devido à reação de amonificação.

Nitrogênio Orgânico Biodegradável - S_{ND}

A produção de nitrogênio orgânico biodegradável ocorre pela hidrólise do nitrogênio orgânico particulado. O consumo ocorre por meio da conversão para amônia através de amonificação. O balanço de nitrogênio orgânico biodegradável é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dS_{ND}}{dt} = \frac{q}{V} (S_{ND,in} - S_{ND}) - k_A \cdot S_{ND} \cdot X_{B,H} + k_h \cdot k_{sat} (M_{gh} + \eta_h \cdot I_g \cdot M_g) X_{B,H} \frac{X_{ND}}{X_S} \quad (20)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de entrada e saída de nitrogênio orgânico do reator, ao consumo pela reação de amonificação e à formação por hidrólise aeróbia e anóxica.

Nitrogênio Orgânico Particulado - X_{ND}

A produção de nitrogênio orgânico particulado ocorre pelo decaimento dos microorganismos heterotróficos e autotróficos. O consumo ocorre pela hidrólise, tendo como produto final desta reação o nitrogênio orgânico solúvel - S_{ND} . O balanço de nitrogênio orgânico particulado biodegradável é dado pela seguinte equação:

$$\frac{dX_{ND}}{dt} = \frac{q}{V} (X_{ND,in} - X_{ND}) + \frac{q_r}{V} (b - 1) X_{ND} + (i_{XB} - f_p \cdot i_{XP}) (b_H \cdot X_{B,H} + b_A \cdot X_{B,A}) - k_h \cdot k_{sat} \cdot (M_{gh} + \eta_h \cdot I_g \cdot M_g) X_{B,H} \cdot \frac{X_{ND}}{X_S} \quad (21)$$

onde do lado direito da equação estão os termos referentes à quantidade de entrada e saída de nitrogênio orgânico particulado biodegradável do reator, ao

consumo pelo decaimento heterotrófico e autotrófico e à formação por hidrólise aeróbia e anóxica.

2.4.4 Aplicação do Modelo ASM N^o1

A exigência dos órgãos ambientais por teores de amônia cada vez menores nos efluentes não se aplica somente a refinarias e indústrias em geral, mas também aos efluentes domésticos. O sistema de lodo ativado é uma das tecnologias mais utilizadas para a remoção do nitrogênio amoniacal, devido ao baixo custo e alta eficiência. A busca pelo entendimento dos fenômenos presentes no sistema biológico se intensificou nas últimas décadas, devido à necessidade de se ter o sistema sob controle e permitir sua otimização. NOWAK et al (1995) estudaram o impacto da presença de inibidores no comportamento do processo de nitrificação de lodos ativados utilizando o ASM1. Como o modelo ASM1 considera que a nitrificação ocorre somente em uma etapa, foram inseridas equações de cinética para completar o modelo para esta reação, uma vez que para temperaturas acima de 25 °C, a nitrificação ocorre em duas etapas, uma levando a amônia a nitrito e outra levando o nitrito a nitrato. A simulação utilizou dados de uma planta piloto e o modelo respondeu de forma satisfatória, no entanto, NOWAK et al (1995) chamam a atenção para a dificuldade de simular plantas industriais, devido à grande variabilidade das condições do processo.

Conforme citado anteriormente, o tratamento de efluentes por lodos ativados é um processo não linear. Devido à complexidade dos modelos fenomenológicos, muitos estudos têm sido realizados com o objetivo de conhecer adequadamente o sistema de lodos ativados, para fornecer uma base para o projeto de sistemas de controle e otimização para as unidades de tratamento de efluentes. KABOURIS e GEOGAKAKOS (1995) desenvolveram um método para estimar os parâmetros do processo de nitrificação chamado LML (Linearized Maximum Likelihood), baseado no ASM1. O ASM1 tem sido utilizado em diferentes plataformas de software. Dentre os simuladores comerciais de unidades de tratamento de efluentes que utilizam os modelos ASM da IWA cita-se AQUASIM, BioWin, EFOR, SIMBA, STOAT e WEST (GERNAEY et al, 2004). O modelo ASM1

pode ser considerado como o modelo referência, visto que ele alavancou a modelagem de sistemas de tratamento de efluentes (GERNAEY et al, 2004).

A importância do ASM se deve ao fato do modelo ser o que melhor representa o sistema de lodos ativados, no entanto, isso não significa que haja grande precisão. A estimação dos parâmetros é uma tarefa extremamente difícil, haja vista o nível de complexidade do sistema, a variabilidade dos microorganismos presentes, as variações na qualidade da carga da unidade e a alteração nos valores de alguns parâmetros como pH e oxigênio dissolvido.

Assim, muitos estudos têm sido realizados com o objetivo de aprimorar o modelo ASM devido à dificuldade de representar de forma confiável uma unidade de tratamento de efluentes que possua lodos ativados. Um exemplo é o uso de redes neurais que se mostra uma alternativa simples de se modelar o sistema que utiliza lodos ativados.

2.5 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

2.5.1 Descrição

A origem da teoria de Redes Neurais está associada aos modelos de processamento de informações dos neurônios biológicos. O neurônio é constituído de três partes principais: o soma, que compõe o centro dos processos metabólicos da célula nervosa e os dendritos e o axônio que são extensões filamentosas projetadas a partir do soma. Um neurônio possui inúmeros dendritos que formam a chamada árvore dendritica com volume significativamente maior que o corpo celular. O axônio, também chamado de fibra nervosa, funciona como conector do neurônio com outros do sistema nervoso (KOVÁCS, 2006).

O neurônio funciona como um dispositivo computacional do sistema nervoso que possui várias entradas e uma saída. As entradas ocorrem através das conexões sinápticas, que conectam a árvore dendritica aos axônios de outras células nervosas. Os sinais, impulsos nervosos, são pulsos elétricos que chegam pelos axônios, e constituem a informação que o neurônio processará, resultando numa saída por meio de um impulso nervoso no seu axônio (HAYKIN, 2001).

Uma rede neural possui muitas unidades de processamento de informações (neurônios) interligadas por *links*, correspondentes às sinapses de um neurônio. As redes possuem camadas de entradas, constituídas pelos dados de entrada do processo, camadas de saída e subcamadas ou camadas ocultas. Uma rede neural pode ter várias entradas e várias saídas. Normalmente, as saídas são constituídas de dados das plantas industriais ou de laboratório. Os neurônios são conectados com todos os neurônios das camadas seguintes e assim por diante, como pode ser visto em uma rede neural típica na Figura 2.11.

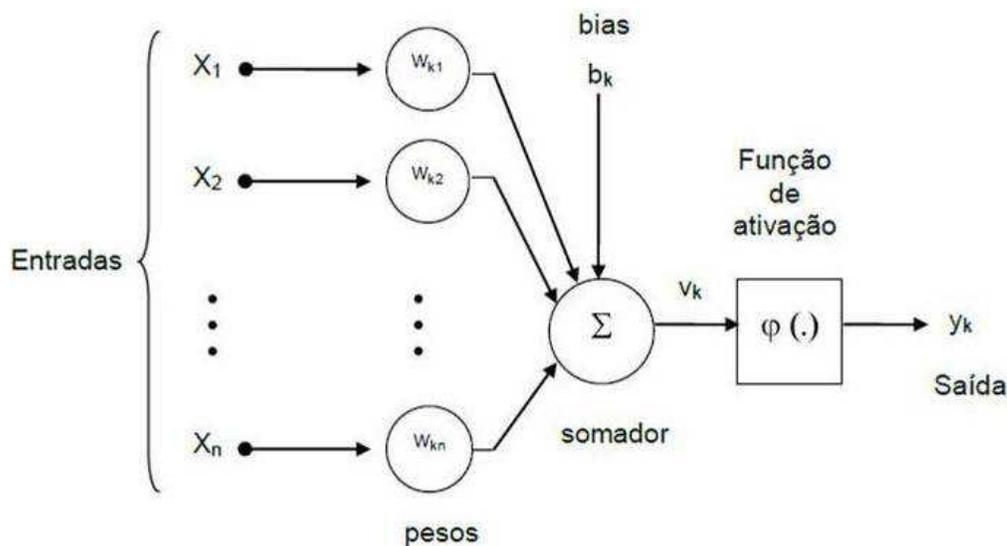


Figura 2.11: Representação de uma Rede Neural (IRIGOYEN, 2010).

2.5.2 Modelo de um Neurônio

O modelo neuronal é formado por 4 elementos:

- Sinapses: são os elos de conexão e são caracterizados por um peso próprio. Um sinal x_j na entrada j conectada ao neurônio k é multiplicado pelo peso sináptico w_{kj} que define o impacto ou a influência deste sinal ou dado no modelo;
- Somador: tem como função somar os sinais de entrada, ponderados por suas sinapses;
- Função de Ativação: objetiva restringir a amplitude da saída de um neurônio. O intervalo normalizado da amplitude da saída de um neurônio é escrito como o intervalo unitário fechado $[0,1]$ ou $[-1,1]$;

- Bias: aplicado externamente e tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo se ele é positivo ou negativo.

Matematicamente, um neurônio é descrito pelas seguintes equações:

$$u_k = \sum w_{kj}x_j \quad (21)$$

$$y_k = \varphi(u_k + b_k) \quad (22)$$

onde:

- x_1, x_2, \dots, x_m são os sinais de entrada;
- $w_{k1}, w_{k2}, \dots, w_{km}$ são os pesos sinápticos do neurônio k ;
- u_k é a saída do combinador linear devido aos sinais de entrada;
- b_k é bias;
- $\varphi(\)$ é a função de ativação;
- y_k é o sinal de saída do neurônio.

Conforme apresentado anteriormente, a função de ativação define a saída de um neurônio em termos de local induzido. Há três tipos básicos:

- *Função de Limiar*: para este tipo de função tem-se

$$\varphi(x) = 1, \text{ se } x \geq 0$$

$$\varphi(x) = 0, \text{ se } x < 0$$

- *Função Linear por Partes*: para este tipo de função tem-se

$$\varphi(x) = 1, \text{ se } x \geq +0,5$$

$$\varphi(x) = x, \text{ se } +0,5 > x > -0,5$$

$$\varphi(x) = 0, \text{ se } x \leq -0,5$$

- *Função Sigmóide*: é o tipo mais comum de função de ativação. É definida como uma função estritamente crescente que exibe um balanceamento adequado

entre o comportamento linear e não-linear. Um exemplo é a chamada função logística:

$$\varphi(x) = [1 + \exp(-ax)]^{-1} \quad (23)$$

A principal vantagem da função sigmóide é que ela assume um intervalo contínuo de valores entre 0 e 1.

A escolha de uma estrutura (também chamada de arquitetura) de uma rede neural exige uma etapa anterior, que é a de ajustar o peso de cada conexão, baseado nas premissas do modelo em estudo. Esta etapa, conhecida também como treinamento da rede, pode ser supervisionada ou não. Em um treinamento supervisionado, a saída é corrigida para cada entrada. O peso das conexões é variado com o objetivo de minimizar o erro entre o dado de saída da rede e o dado experimental. No treinamento sem supervisão, várias entradas são dadas à rede. A rede então explora as relações entre os dados experimentais e os valores preditos pelo modelo sem a correção dos pesos das conexões (HAYKIN, 2001).

Dentre as principais características das redes neurais pode-se citar:

- Não-linearidade: um neurônio pode ser linear ou não-linear. Isso é muito importante, principalmente se o gerador do sinal de entrada for não-linear;
- Adaptabilidade: uma rede neural treinada para operar em condições específicas pode ser re-treinada quando ocorrem pequenas modificações no sistema ou processo;

2.5.3 Arquiteturas de Rede

A arquitetura de uma rede neural é a forma como está estruturada a rede dos neurônios.

Redes Alimentadas Diretamente com Múltiplas Camadas

Esta estrutura se distingue da anterior pela presença de uma ou mais camadas ocultas. Nesta estrutura, os sinais de entrada alimentam a segunda camada de neurônios, ou seja, a primeira camada oculta. Os sinais de saída desta

camada alimentam a segunda camada oculta e assim por diante. A Figura 2.12 apresenta uma representação deste tipo de estrutura.

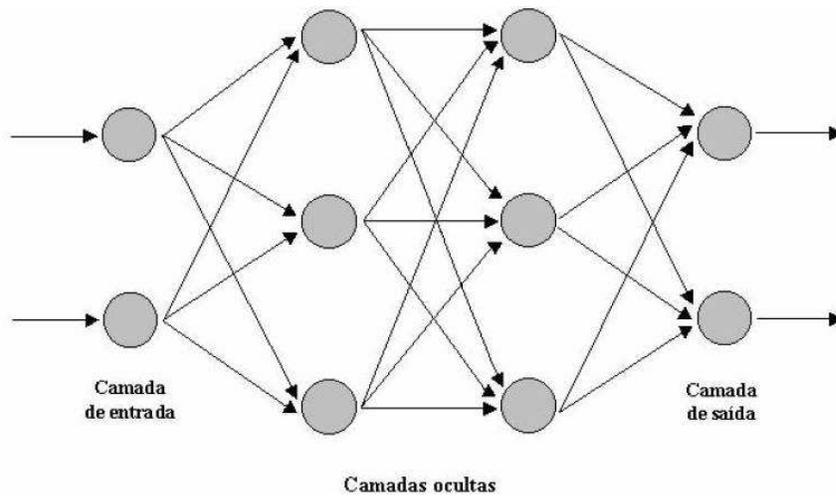


Figura 2.12: Representação de uma Rede Alimentada com Múltiplas Camadas (ZANATA, 2005).

Redes Recorrentes

Esta estrutura se diferencia das anteriores pela presença de pelo menos um ponto de realimentação. A Figura 2.13 ilustra este tipo de arquitetura. A presença de linhas de realimentação tem uma grande influência na rede neural, aumentando a capacidade de aprendizagem e o desempenho.

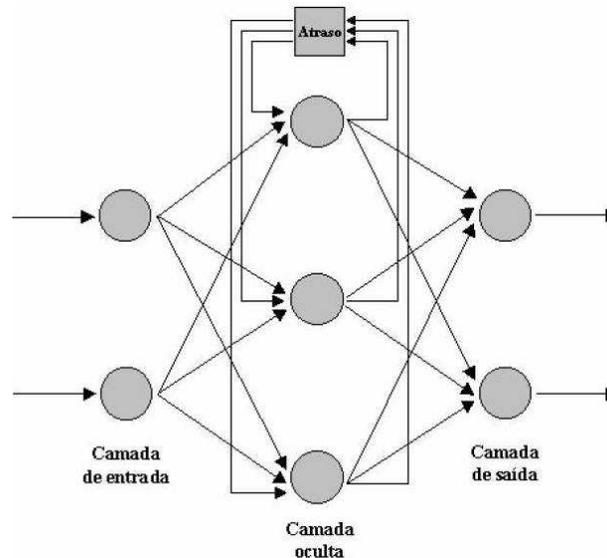


Figura 2.13: Representação de uma Rede Recorrente (ZANATA, 2005).

2.5.4 Características

Redes neurais são comumente usadas na solução de problemas onde os fenômenos que regem o problema são desconhecidos ou difíceis de serem equacionados. A estrutura de dados e os cálculos não lineares das redes permitem se trabalhar com dados multivariados e processar informações em paralelo o que aumenta a robustez do modelo.

Uma desvantagem é que as redes neurais são modelos do tipo caixa preta, ou seja, são totalmente empíricos, logo não há informações a respeito do problema, o que pode ser uma restrição importante quando há necessidade de se conhecer o que ocorre no processo em questão. Se um modelo de redes neurais não consegue convergir, não há meios para descobrir o porquê.

2.6 APLICAÇÕES DE REDES NEURAIIS

Dentre as principais aplicações das redes neurais estão a atribuição de padrões a dados, a aproximação de dados de um experimento ou de uma unidade de processo a uma função, a previsão do resultado de um modelo e a otimização e o controle de processos.

Na engenharia química são comuns as dificuldades de chegar à solução dos problemas, devido às limitações das ferramentas matemáticas disponíveis e à complexidade e não linearidade dos sistemas e processos. As RNA's são capazes de resolver problemas em diversas áreas e na engenharia química não é diferente. A Tabela 2.2 apresenta uma lista com os estudos desenvolvidos utilizando redes neurais.

Tabela 2.2: Aplicações de RNA's na Engenharia Química

Autor(es)	Aplicação
ALDRICH et al (1994)	Modelagem e Monitoramento de Plantas Metalúrgicas
BARATTI et al (1995)	Modelagem de Coluna de Destilação
BAWAZEER et al (1997)	Predição dos Parâmetros de Qualidade da Seção de Fracionamento
KESHAVARAJ et al (1995)	Predição da Atividade de Solventes em Sistemas Poliméricos
MEGHLAOUI et al (1998)	Identificação do Processo de Eletrólise de Alumínio
PETERSEN et al (2002)	Predição do Equilíbrio Líquido-Vapor
PIRON et al (1997)	Modelagem do Processo de Micro-Filtração de Fluxo Cruzado
ZBICINSK et al (1996)	Modelagem de Sistema de Secagem Térmica em Leito Fluidizado

2.7 MODELAGEM DE SISTEMAS DE LODOS ATIVADOS POR REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Como pode ser visto nas seções anteriores, não é uma tarefa trivial obter um modelo que represente adequadamente o comportamento de um sistema de tratamento de efluentes que utiliza a tecnologia de lodos ativados. Vários fatores contribuem para essa dificuldade. Dentre eles estão o grande número de processos biológicos e químicos envolvidos, a necessidade da estimação de muitos parâmetros relacionados à cinética dos processos e a falta de disponibilidade de dados experimentais apropriados.

Na área de tratamento de efluentes é notável a aplicação de redes neurais artificiais. BOGER (1992) e colaboradores utilizaram redes neurais na identificação do comportamento da uma planta de tratamento de efluentes de Shafdan, Israel, a partir de um banco de dados de 106 variáveis obtidas a partir dos dois primeiros anos de operação da planta. Inicialmente foram efetuadas simulações com 86 variáveis de entrada. Este número de entradas foi reduzido gradualmente e o

objetivo era identificar o sistema com a menor estrutura de redes neurais possível. Os resultados foram muito bons, visto que o comportamento da curva simulada é similar a curva dos resultados da planta (Figura 2.14).

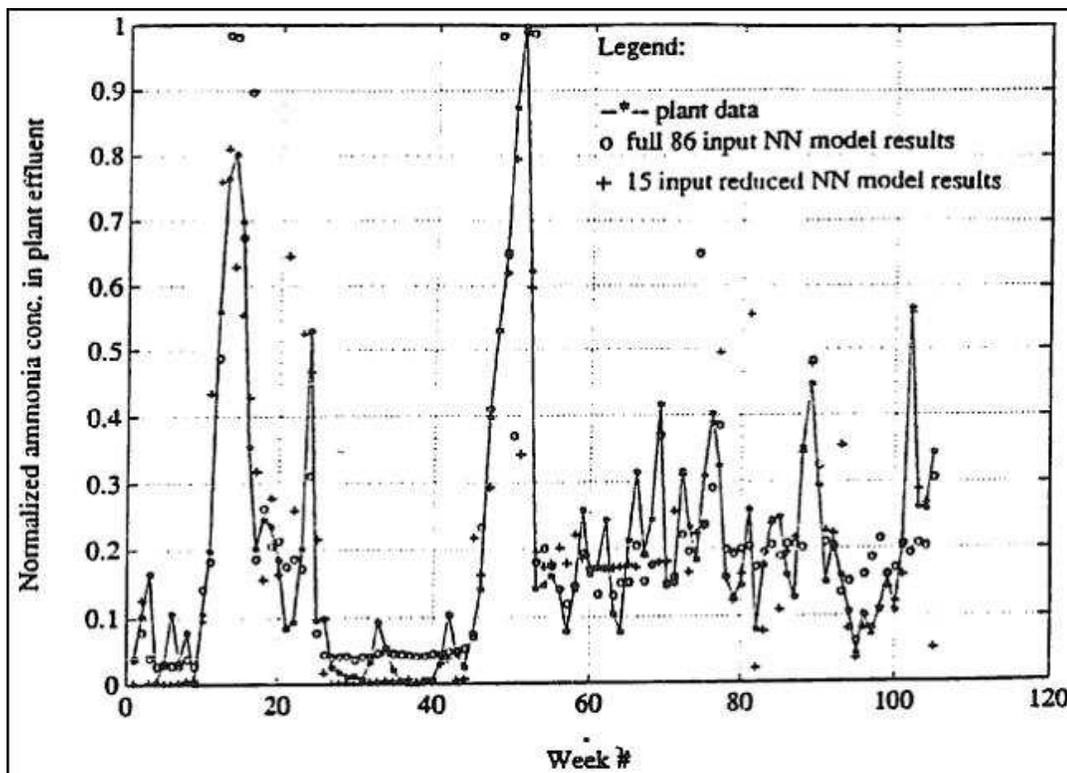


Figura 2.14: Teores de amônia preditos e observados (BOGER, 1992).

CÔTÉ et al (1994) elaboraram um modelo dinâmico do processo de lodo ativado utilizando uma RNA para melhorar a predição de um modelo fenomenológico. Foram considerados como variáveis de saída do modelo: SS, DQO, nitrogênio amoniaco, O_2 dissolvido e SSV na corrente de reciclo. A predição dos valores destas variáveis foi realizada com o modelo fenomenológico e com um modelo híbrido utilizando redes neurais. As Figuras 2.15 a 2.18 apresentam os resultados das simulações. São apresentadas as curvas com os dados medidos na planta, os valores preditos pelo modelo fenomenológico otimizado e pelo modelo híbrido com redes neurais. É possível observar bons resultados do modelo híbrido, onde a linha sólida, que representa as previsões deste modelo, segue as flutuações dos dados muito melhor que a linha do modelo mecanístico.

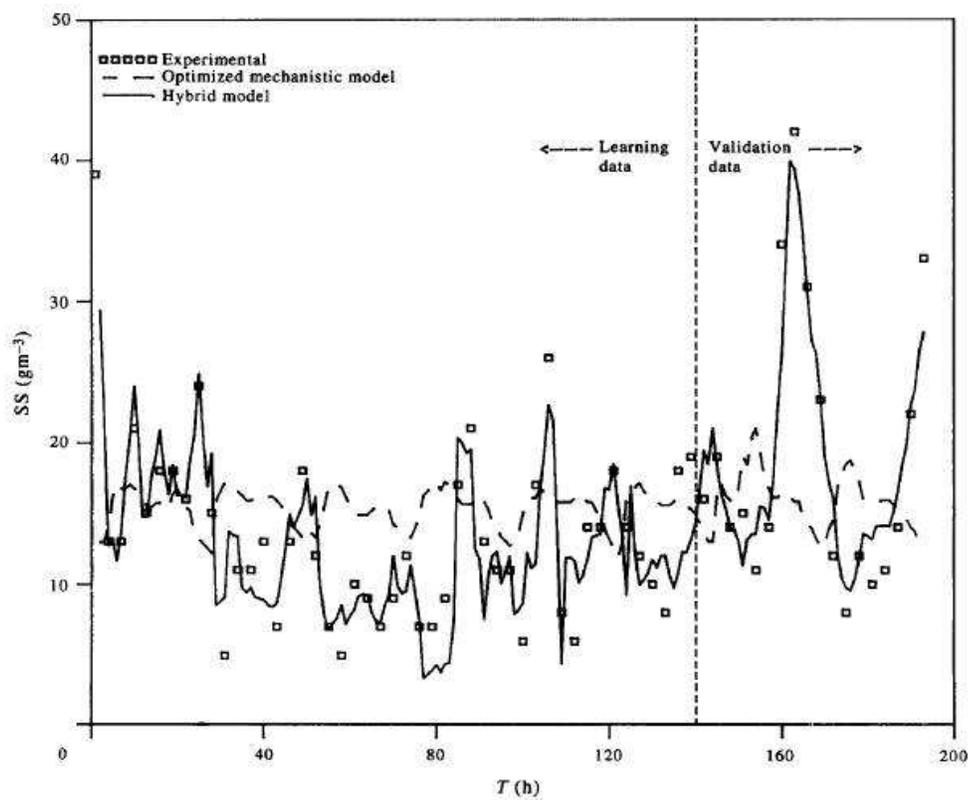


Figura 2.15: Simulação do teor de SS com e sem a correção da RNA (CÔTÉ, 1994)

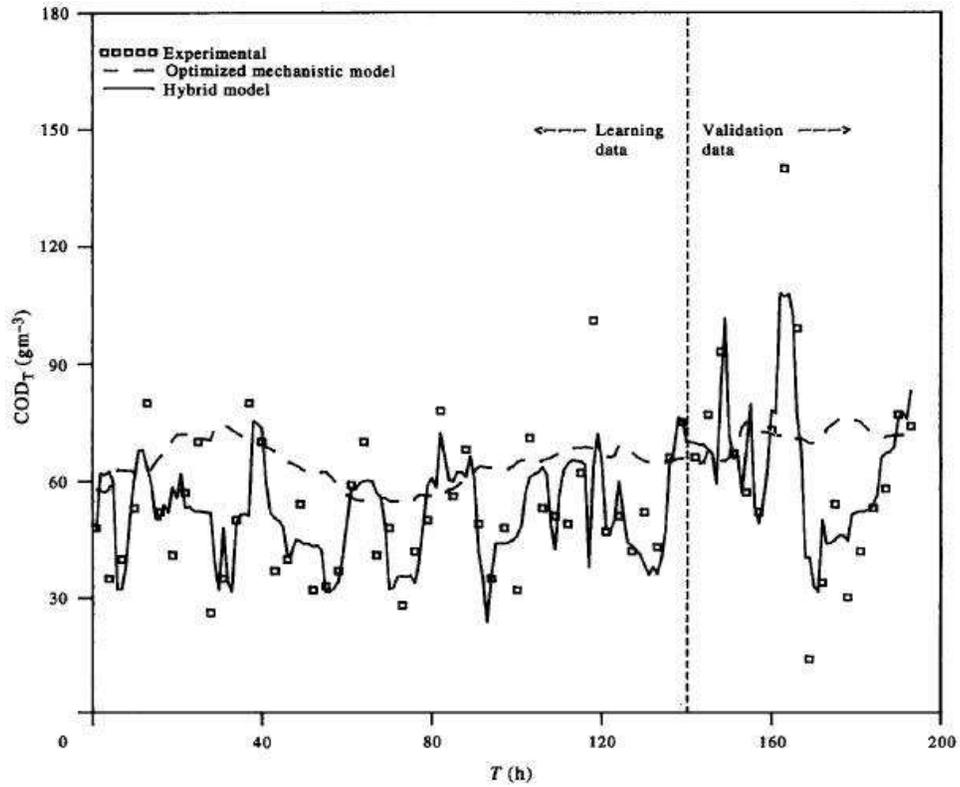


Figura 2.16: Simulação do teor de DQO com e sem a correção da RNA (CÔTÉ, 1994).

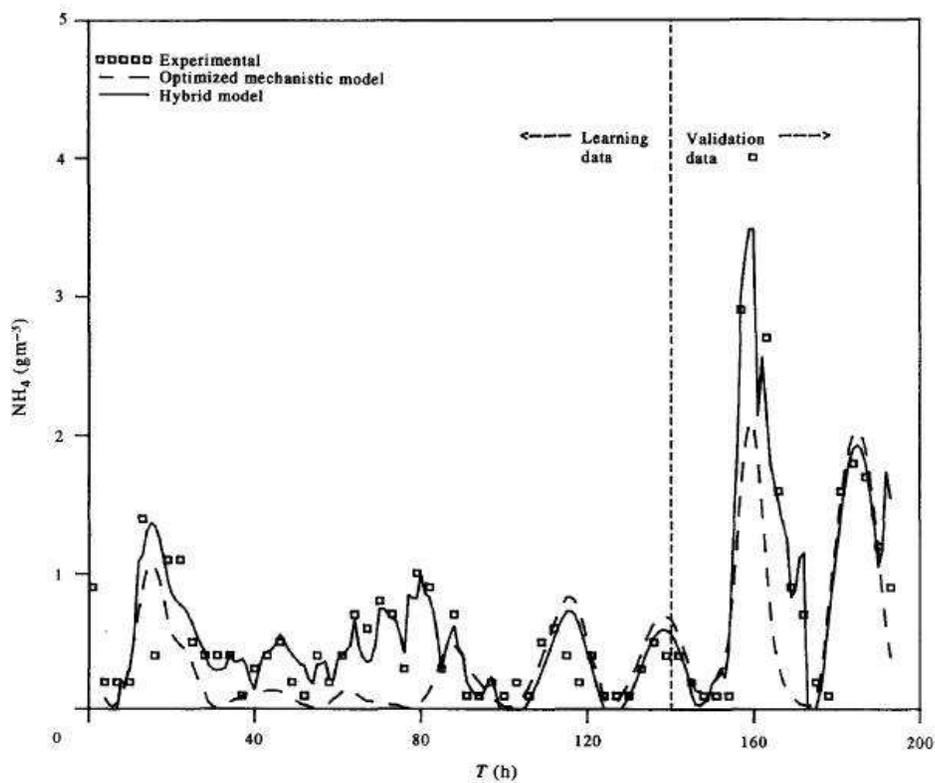


Figura 2.17: Simulação do teor de amônia com e sem a correção da RNA (CÔTÉ, 1994).

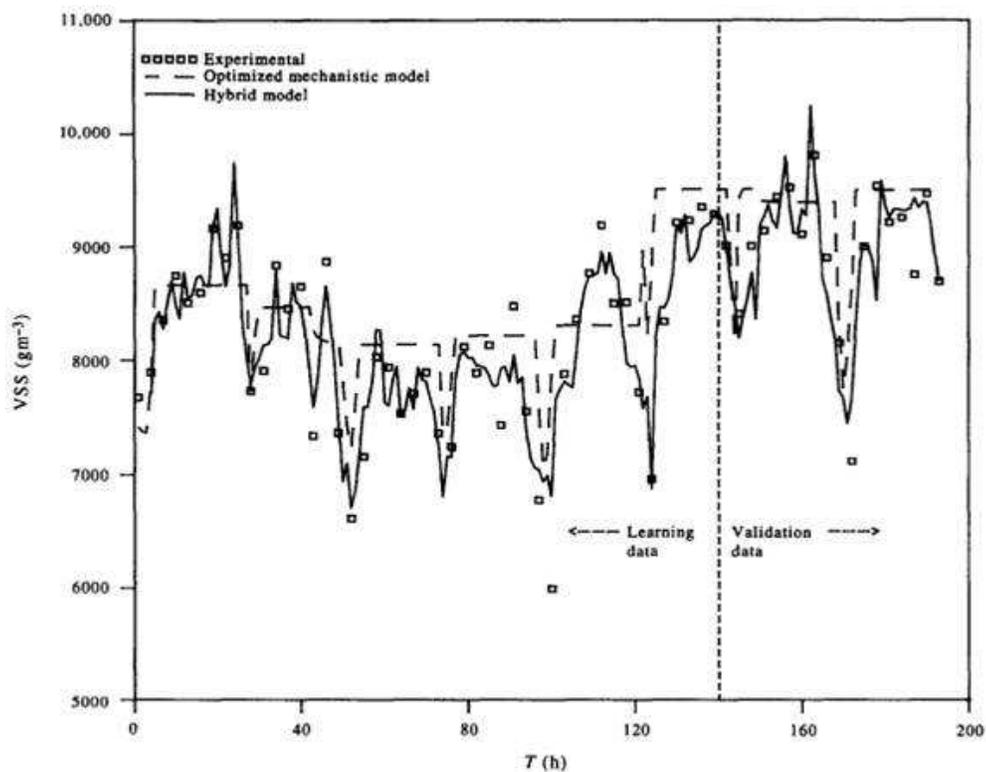


Figura 2.18: Simulação do teor de sólidos suspensos voláteis com e sem a utilização de redes neurais. Fonte: CÔTÉ ET al (1994).

MORAL et al (2008) utilizaram a rotina NNTOOL (Neural Network Toolbox) do Matlab® (Versão 6.5), para desenvolver uma arquitetura de RNA e aplicaram a estrutura construída para modelar o sistema de lodos ativados de uma unidade de tratamento de efluentes em Iskenderun na Turquia. A unidade é composta basicamente de decantadores primários, tanques de aeração e decantadores secundários. Eles criaram e treinaram várias redes de diferentes arquiteturas para definir as melhores. Foram utilizadas 1 e 2 camadas ocultas, variando de 1 até 13 unidades internas para cada camada. Foi utilizado o *backpropagation* como algoritmo de treinamento e a função sigmóide como função objetivo. Os dados foram normalizados entre 0 e 1. Foram avaliadas várias combinações de variáveis de entrada para a construção das redes, utilizando os seguintes parâmetros: pH, DQO e temperatura da carga, sólidos suspensos nos tanques de aeração, sólidos suspensos no efluente tratado, produção de lodo e DQO do efluente tratado. O melhor resultado foi obtido com a rede com 6 unidades internas. A Figura 2.19 apresenta os resultados preditos e observados para o DQO do efluente tratado. Pode-se observar que na maior parte do tempo o modelo utilizando redes neurais descreve muito bem o sistema estudado.

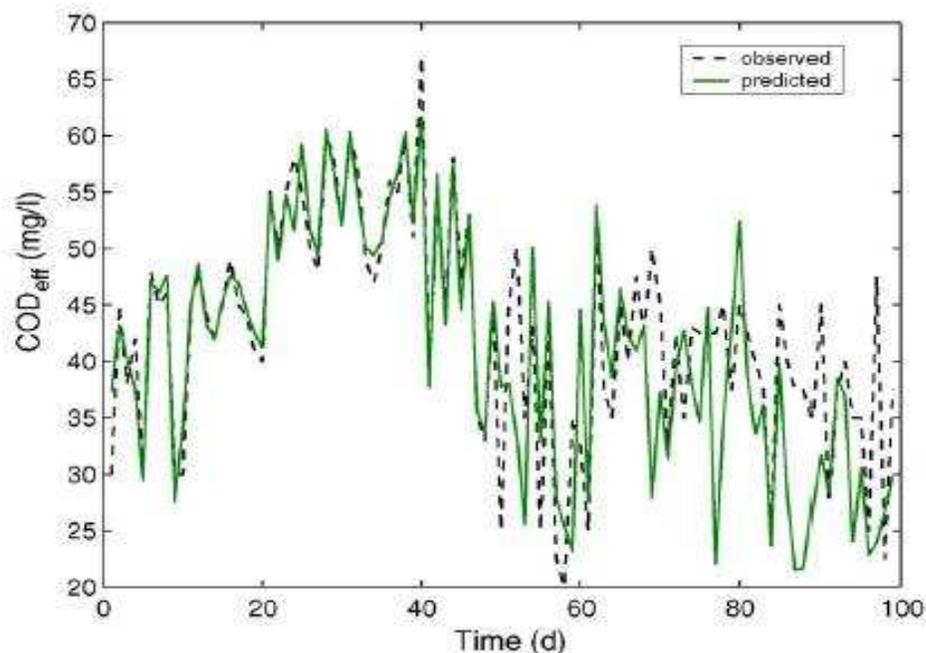


Figura 2.19: Concentração de DQO predita e observada no efluente do unidade de tratamento de Iskenderun (MORAL et al, 2008).

HAMED et al (2003) aplicaram modelos de RNA na unidade de tratamento de efluentes EI-Gabal EI-Asfar no Egito. A primeira etapa do trabalho foi definir as entradas. Foram efetuadas coletas de dados de DBO e concentração de SS em vários pontos da unidade, antes do decantador primário e antes do tanque de aeração. A partir desses dados, foram montadas diversas arquiteturas de redes com uma única variável de entrada (DBO ou SS) e com duas variáveis de entrada. As duas melhores estruturas foram as que tiveram como variáveis de entrada a DBO e o SS medidos antes dos tanques de aeração e uma variável de saída (DBO ou SS). Definidas as melhores estruturas, a partir dos 153 dados obtidos da planta, HAMED et al formaram quatro grupos (A, B, C e D) utilizando 60%, 70%, 80% e 90% dos dados para treinamento, respectivamente. Eles utilizaram o treinamento supervisionado com o algoritmo *backpropagation*. Nos resultados apresentados, é possível observar um melhor desempenho do modelo quando mais dados são utilizados para o treinamento (Caso D) (Figuras 2.20 e 2.21).

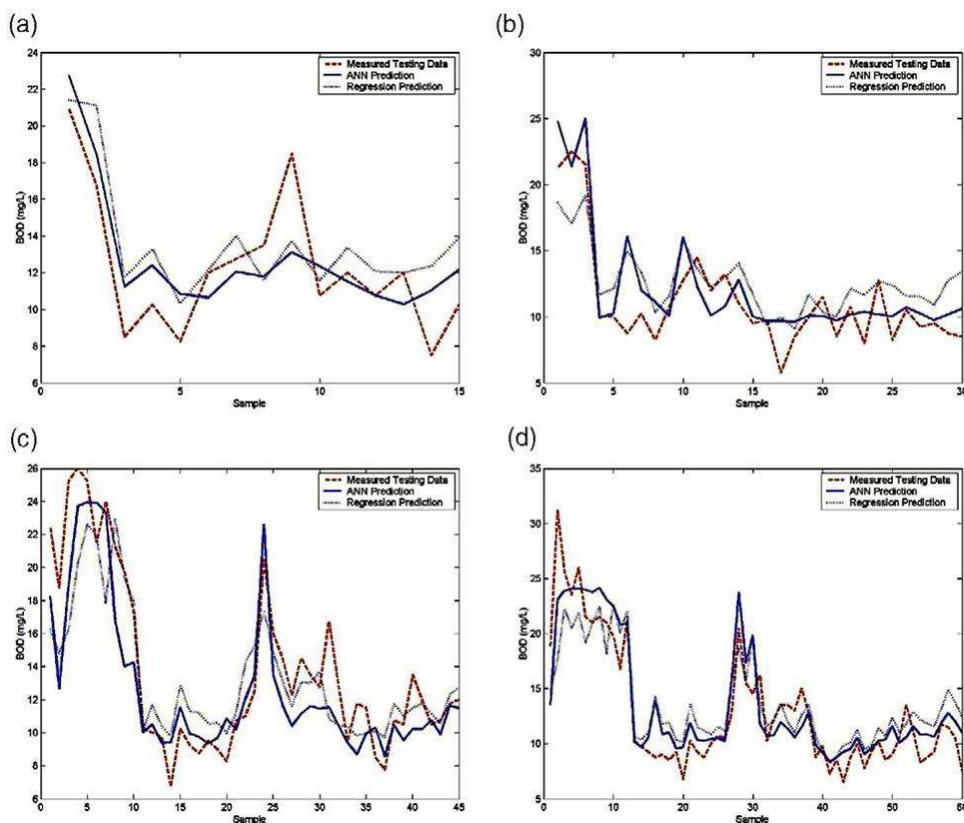


Figura 2.20: Concentração de DBO no efluente tratado observado e predito pela RNA para os Grupos A, B, C e D (HAMED et al, 2003).

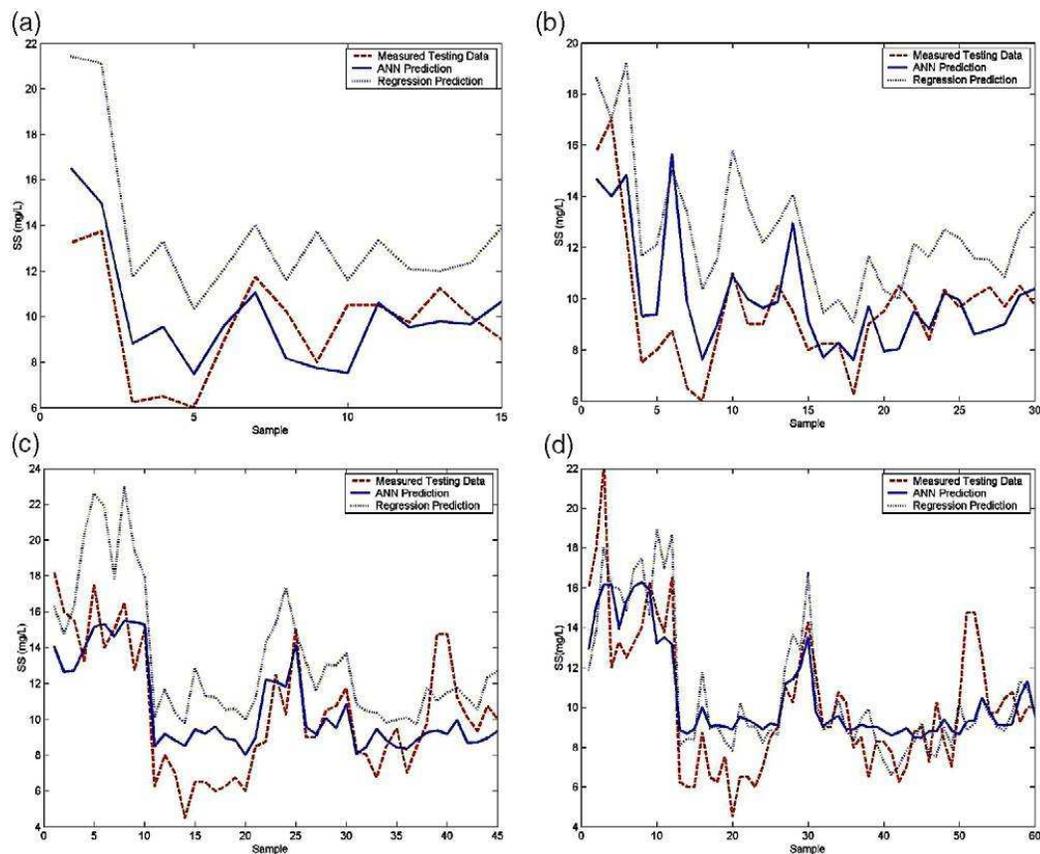


Figura 2.21: Concentração de SS no efluente tratado observado e predito pela RNA para os Grupos A, B, C e D (HAMED et al, 2003).

MJALLI et al (2007) utilizaram redes neurais para predição da eficiência na remoção de DQO, DBO e SS de uma unidade de tratamento de efluentes. O estudo foi desenvolvido com os dados da unidade de tratamento de Doha Oeste no Catar. A unidade é composta basicamente de decantador primário, tanques de aeração e decantador secundário. A DQO, a DBO e o teor de SS foram utilizados como as variáveis de entrada e como variáveis de saída. Os dados foram coletados durante um ano de operação da planta em intervalos de cinco dias. As simulações de treinamento da rede foram executadas utilizando *Levenberg–Marquardt* como algoritmo de otimização. A Figura 2.22 apresenta os resultados da predição de DQO, DBO e o teor de SS no efluente tratado. Como podem ser observados, os resultados foram altamente satisfatórios.

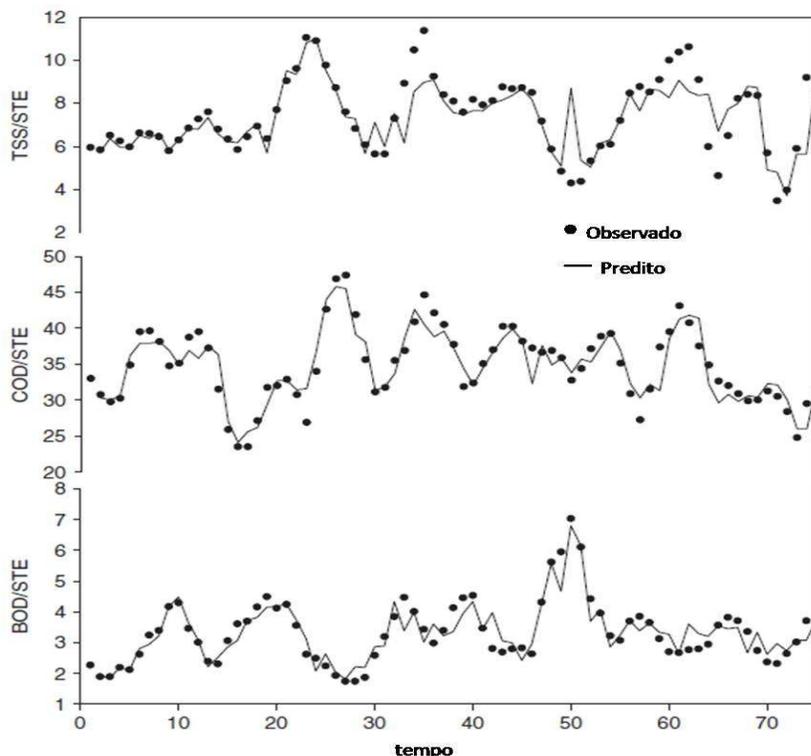


Figura 2.22: Predição da concentração de DQO, DBO e teor de SS no efluente tratado (MJALLI et al, 2007) .

A pesquisa bibliográfica mostrou que a aplicação de redes neurais em processos de tratamento de efluentes é muito promissora, uma vez que os estudos mostraram bons resultados na predição dos parâmetros estudados. A simplicidade e a robustez da modelagem por redes neurais frente à complexidade do processo de tratamento de efluentes é um dos grandes atrativos da técnica.

2.8 CONSIDERAÇÕES FINAIS DA REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A operação de uma unidade de tratamento de efluentes que possui a tecnologia de lodos ativados mostra a dimensão do desafio em otimizar o sistema na busca da maior eficiência. Muitas vezes o sistema não responde da forma esperada quando se faz mudanças nas variáveis de controle, devido a sua complexidade e não linearidade.

Em um sistema físico-químico é possível obter o domínio do processo com maior facilidade. Na operação de uma coluna de destilação, por exemplo, as

mudanças nos parâmetros de processo geralmente atingem o resultado esperado. O aumento na alimentação de gás em um forno certamente irá aumentar a temperatura do sistema. O modelo fenomenológico de um processo físico-químico tende a representar bem o sistema, facilitando sua operação e controle. Quando o sistema envolve reações biológicas, como é o caso do tratamento biológico de efluentes por lodo ativado, o domínio completo do processo é uma tarefa difícil.

Muitas ferramentas (software, modelos, etc.) estão sendo testadas com o objetivo de obter um modelo que represente de forma eficiente um sistema de tratamento por lodos ativados. Aliado à complexidade intrínseca do processo, cada unidade de tratamento é única e um modelo desenvolvido para uma não pode ser utilizada em outra, sendo necessárias grandes modificações (nas equações, nos valores dos parâmetros, etc.) devidas principalmente à massa biológica presente e ao tipo de efluente a ser tratado.

Durante a realização da revisão bibliográfica da literatura foi possível observar o desenvolvimento de modelos fenomenológicos para vários sistemas, assim como para a aplicação de redes neurais na modelagem de processos envolvendo lodos ativados. Os bons resultados obtidos nos trabalhos apresentados envolvendo redes neurais, aliados à necessidade de se predizer a concentração de amônia na UTDI da REPAR, torna interessante a aplicação desta técnica na refinaria. Uma das principais vantagens da identificação do sistema por redes neurais é a necessidade de apenas parâmetros de entrada e saída para a elaboração do modelo. Já para o modelo fenomenológico, é necessário conhecer e determinar um número enorme de parâmetros e coeficientes, muitas vezes com grande incerteza nos valores, por se tratar de uma planta industrial. Neste caso, o trabalho se torna exaustivo e com grande risco de não representar bem o sistema, devido à falta de dados e valores incorretos para a conclusão do modelo.

3 METODOLOGIA

3.1 O SISTEMA DE TRATAMENTO BIOLÓGICO DA REPAR

A unidade de tratamento de efluentes da Refinaria Presidente Getúlio Vargas - REPAR, pertencente à Petrobras, é constituída por três etapas principais: separador água-óleo, tratamento físico-químico e tratamento biológico. Este trabalho consiste na modelagem do processo de tratamento biológico da REPAR, utilizando redes neurais. A Figura 3.1 apresenta um desenho esquemático do sistema modelado. O efluente é monitorado após o tratamento físico-químico (ponto 01), efetuando-se análises químicas de diversos parâmetros. Após o ponto de monitoramento, o efluente é dividido em dois ramais e enviado aos tanques de aeração construídos em concreto armado e dotados de um sistema de aeração de superfície (ponto 02). Cada tanque de aeração possui um decantador secundário (ponto 03) que separa o efluente dos sólidos em suspensão que compõe a biomassa. Parte do lodo separado nos decantadores secundários é enviada a um tanque anexo (ponto 05) antes de ser injetado na entrada dos tanques de aeração por meio da linha de reciclo de lodo (ponto 04). No tanque anexo, não há suprimento de oxigênio e injeção de alimento aos microorganismos. O objetivo é induzir a biomassa ao estado de respiração endógena, dessa forma, estes microorganismos, deficientes de alimento e aclimatados às características da carga da unidade, são reciclados à entrada dos reatores biológicos. Esta reciclagem de microorganismos em fase endógena é necessária para se obter os melhores índices de eficiência do processo. A qualidade do efluente tratado é medida na saída dos decantadores secundários, conforme indicado pelo ponto 06.

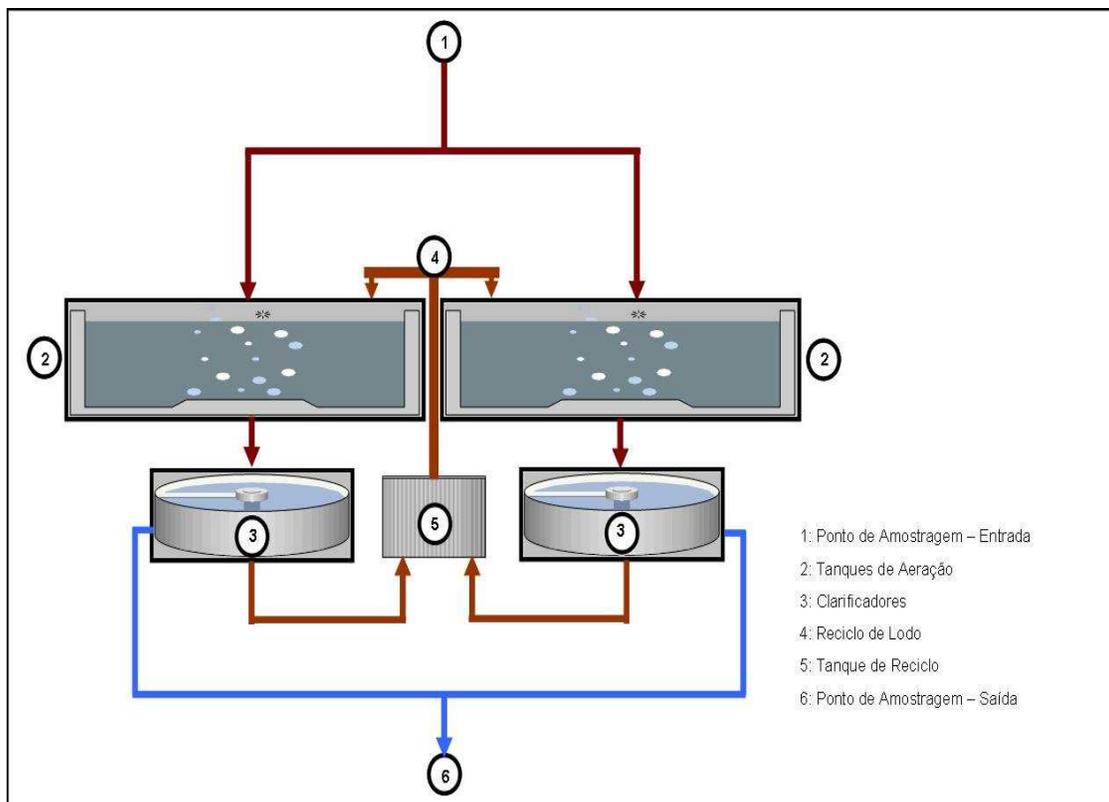


Figura 3.1: Esquema Simplificado do Sistema Biológico da UTDI da REPAR.

3.2 DADOS OPERACIONAIS

Para elaboração do modelo, o teor de nitrogênio amoniacal do efluente tratado (medido em mg/ℓ) foi definido como variável de saída. Este parâmetro foi escolhido devido a sua sensibilidade quanto a alterações do sistema biológico. Conforme exposto no Capítulo 2, a nitrificação é a principal reação impactada pela variação dos parâmetros do sistema de tratamento (tanques de aeração), como pH e teor de O_2 dissolvido.

Os parâmetros a seguir foram selecionados para o estudo de definição das variáveis de entrada do modelo:

- Demanda química de oxigênio (DQO) do efluente a ser tratado (mg/ℓ);
- Teor de nitrogênio amoniacal do efluente a ser tratado (mg/ℓ);
- pH nos reatores biológicos;

- Oxigênio dissolvido nos reatores biológicos (mg/l).

A literatura e a experiência obtida no acompanhamento da operação da unidade de tratamento de efluentes da REPAR apontam estes parâmetros como as principais variáveis de controle do sistema de lodo ativado.

A DQO e o nitrogênio amoniacal do efluente na entrada dos reatores biológicos são determinados por meio de análises químicas realizadas no laboratório próprio da refinaria. A análise de DQO é realizada pelo o método microespectrofotométrico conforme o padrão ASTM D1252-06 *Standard Test Method for Chemical Oxygen Demand of Water (Test Method B - Micro Spectrofotométric Procedure)*. A análise de amônia é realizada pelo método de eletrodo íon seletivo conforme o padrão ASTM D1426-08 *Standard Test Method for Ammonia Nitrogen in Water (Test Method B - Ion Seletive Electrode)*. A demora na obtenção dos resultados das medições destes parâmetros tem impacto negativo no controle do sistema. A mediação de pH e O₂ dissolvido é realizada por analisadores em linha instalados nos tanques de aeração. Os analisadores de pH são da marca Yokogawa, modelo PH-202, com eletrodos do tipo eletrólito gel INPRO 4501, com range de 0 a 14. Os analisadores de oxigênio dissolvido são da marca Hach, modelo Evyta 4000 com sonda flutuante e sensor eletroquímico (polarográfico).

Os dados foram obtidos do banco de dados do laboratório próprio da REPAR e dos relatórios operacionais na unidade de tratamento de efluentes relativos ao ano de 2011. Foi gerado um conjunto de 133 dados, os quais foram divididos em dois grupos: 108 dados (81% do total) para o treinamento da rede e 25 dados (19% do total) para a validação.

3.3 ANÁLISE DA CORRELAÇÃO DOS DADOS

Nesta etapa, foi construída a matriz de correlação dos dados utilizando o software *Statística*® 5.1. O objetivo foi avaliar se há correlação entre os parâmetros utilizados na construção da rede neural e a influência de cada um nos resultados da concentração de amônia no efluente tratado.

3.4 ESTRUTURA DO ESTIMADOR DE ESTADO/SENSOR VIRTUAL

O tipo de rede neural utilizado para a identificação do sistema de lodos ativados da REPAR foi o MLP (Perceptron Multi-Camadas). A função de ativação utilizada foi a função tangente hiperbólica:

$$f_{xy} = \tanh(\alpha_{xy}) \quad (24)$$

onde f_{xy} é a função de ativação do neurônio y da camada x . Os dados foram normalizados através da equação da reta usando os valores de máximo e mínimo de cada variável e os dados normalizados ficaram entre -1 e 1. A função a ser minimizada pelas rotinas de otimização foi a soma dos quadrados dos desvios entre as variáveis preditas e observadas (função erro):

$$F = \sum (\text{NH}_{3\text{pred}i} - \text{NH}_{3\text{obs}i})^2 \quad (25)$$

onde

$\text{NH}_{3\text{pred}i}$: concentração de amônia no efluente predita pelo modelo

$\text{NH}_{3\text{obs}i}$: concentração de amônia no efluente observada na planta

$i = 1, 2, 3 \dots$ número de pontos

e a função erro está sujeita a

$$\text{NH}_{3\text{pred}i} = \text{RN}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) \quad (26)$$

onde \mathbf{x} é o vetor com as variáveis de entrada da rede neural e $\boldsymbol{\theta}$ é o vetor de pesos.

3.5 ARQUITETURA DA REDE NEURAL

A partir do conjunto de dados, composto de 133 pontos, obtido da planta e da pré-seleção das variáveis de entrada, foi realizado o estudo para definição do melhor estrutura da RNA. Para o treinamento da rede foram utilizados 81% dos dados (108 pontos) e o restante foi usado para a validação. Assim, os parâmetros

DQO, NH₃, pH e O₂ dissolvido foram organizados em cinco grupos, conforme mostra a Tabela 3.1.

Tabela 3.1: Grupos de Variáveis de Entrada.

Grupo	Variáveis de Entrada
Sim01	DQO, NH ₃
Sim02	DQO, NH ₃ e pH
Sim03	DQO, NH ₃ e O ₂
Sim04	NH ₃ , pH e O ₂
Sim05	DQO, NH ₃ , pH e O ₂

Para cada grupo de variáveis, foram criadas dez estruturas de RN com 1, 5, 7, 10, 13, 15, 18, 20, 22 e 25 unidades internas e, para cada estrutura, foram realizadas cinco simulações utilizando o algoritmo de otimização *Simulated Annealing* (SA). Uma vez definidos os grupos de variáveis de maior influência no modelo, foram definidas as estruturas com o número mais adequado de unidades internas. Para tal, foram avaliados o erro médio de treinamento, o erro médio de validação e o desvio padrão dos erros das cinco simulações executadas para cada estrutura dos grupos selecionados na etapa de definição das variáveis de entrada.

3.6 AVALIAÇÃO DO ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO

Os métodos de otimização matemática foram criados com o objetivo de encontrar os máximos e mínimos de uma função com uma ou mais variáveis independentes. Como a definição da melhor estrutura de RN foi realizada utilizando o algoritmo de otimização *Simulated Annealing*, o objetivo desta etapa foi simular novamente a melhor estrutura de RN selecionada na etapa anterior, utilizando o algoritmo de otimização *Particle Swarm Optimization* (PSO) e checar o método de otimização. Assim, foram realizadas cinco simulações para cada estrutura e avaliados os resultados dos dois algoritmos.

3.7 AVALIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DOS DADOS DE TREINAMENTO E VALIDAÇÃO

Em função de número restrito de dados, na etapa de avaliação das variáveis de entrada e da estrutura da rede, os dados foram divididos na proporção 81/19 (81% de dados para o treinamento da rede e 19% para a validação, com o objetivo de priorizar o treinamento da rede). Com o objetivo de avaliar a influência da distribuição dos dados para o treinamento e validação da rede nos resultados, nesta etapa do estudo os dados foram rearranjados na proporção 70/30 (70% para o treinamento e 30% para a validação) e simulado para as estruturas selecionadas nas etapas anteriores.

3.8 TESTE DINÂMICO

Uma vez definidas as estruturas de rede neural que melhor representam o sistema de lodos ativados, com um novo conjunto de dados (22 pontos) obtido nos meses de novembro e dezembro de 2011, e janeiro de 2012, foi realizado um teste dinâmico para avaliar a resposta do modelo.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 ANÁLISE DE CORRELAÇÃO DOS DADOS

A matriz de correlação foi construída utilizando as quatro variáveis de entrada (DQO, NH_3 , O_2 e pH) e a variável de saída (amônia). A avaliação da linha de tendência aplicada aos dados obtidos da unidade permite concluir que não há possibilidade de desenvolver correlações entre as variáveis, como esperado (Figura 4.1). No entanto, a tendência no comportamento de algumas variáveis é esperada, visto que eles sofrem a influência das outras variáveis. Por exemplo, a demanda química de oxigênio aumenta com o aumento da concentração de amônia na carga, como era de se esperar, visto que há consumo de oxigênio na reação de nitrificação, no entanto, há alguns valores elevados de DQO para a mesma concentração de amônia, pois outros contaminantes elevam a DQO. O oxigênio dissolvido diminui com o aumento da DQO, pois quando há elevação de DQO significa que há necessidade de uma quantidade maior de oxigênio para a degradação dos contaminantes presentes na carga. Logo há uma redução no teor de oxigênio dissolvido nos tanques de aeração. Para o parâmetro amônia, há uma correlação entre os resultados de entrada e saída, com a elevação da concentração de amônia na entrada também há a elevação da concentração de amônia na saída. Para o pH, não há correlação com os parâmetros DQO, NH_3 de entrada e O_2 dissolvido. Assim, analisando a matriz de correlação dos dados utilizados, verifica-se que o comportamento dessas variáveis é não-linear, o que justifica o emprego de redes neurais artificiais.

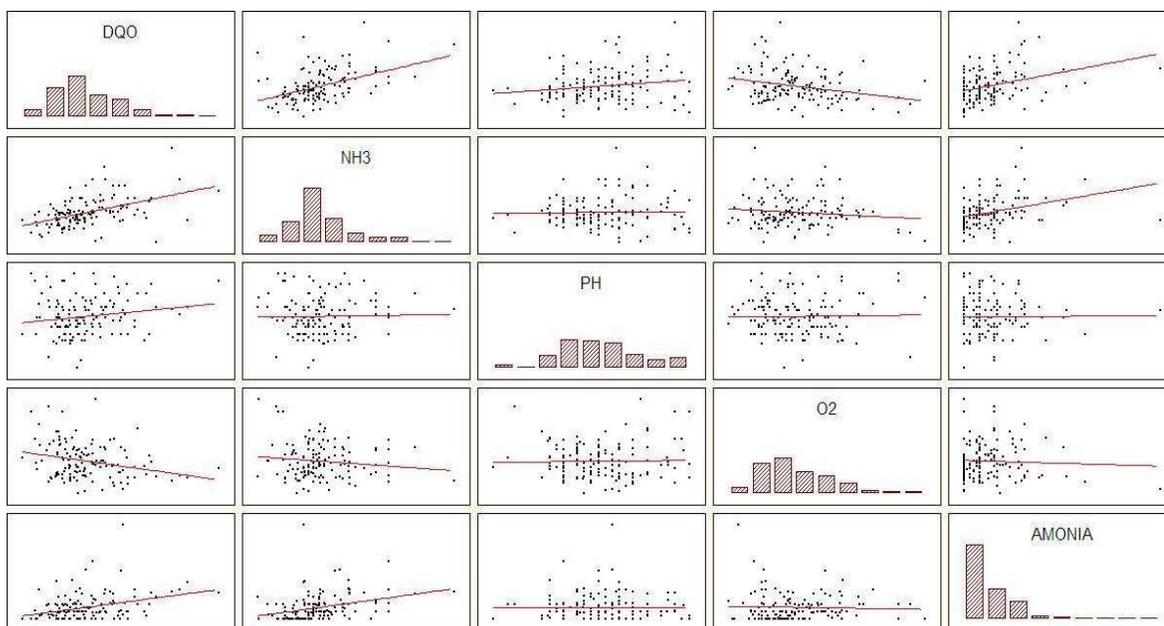


Figura 4.1: Matriz de Correlação das Variáveis de Entrada e da Variável de Saída.

4.2 ARQUITETURA DA REDE NEURAL

Conforme descrito no item 3.4, a primeira etapa do estudo consistiu na definição da arquitetura da rede. Para cada grupo de variáveis de entrada (veja Tabela 3.1), foram realizadas cinco simulações com o número de unidades internas variando entre 1 e 25. A Figura 4.2 apresenta o erro médio (equação 25) de treinamento da rede neural em função do número de unidades internas para cada grupo de variáveis de entrada.

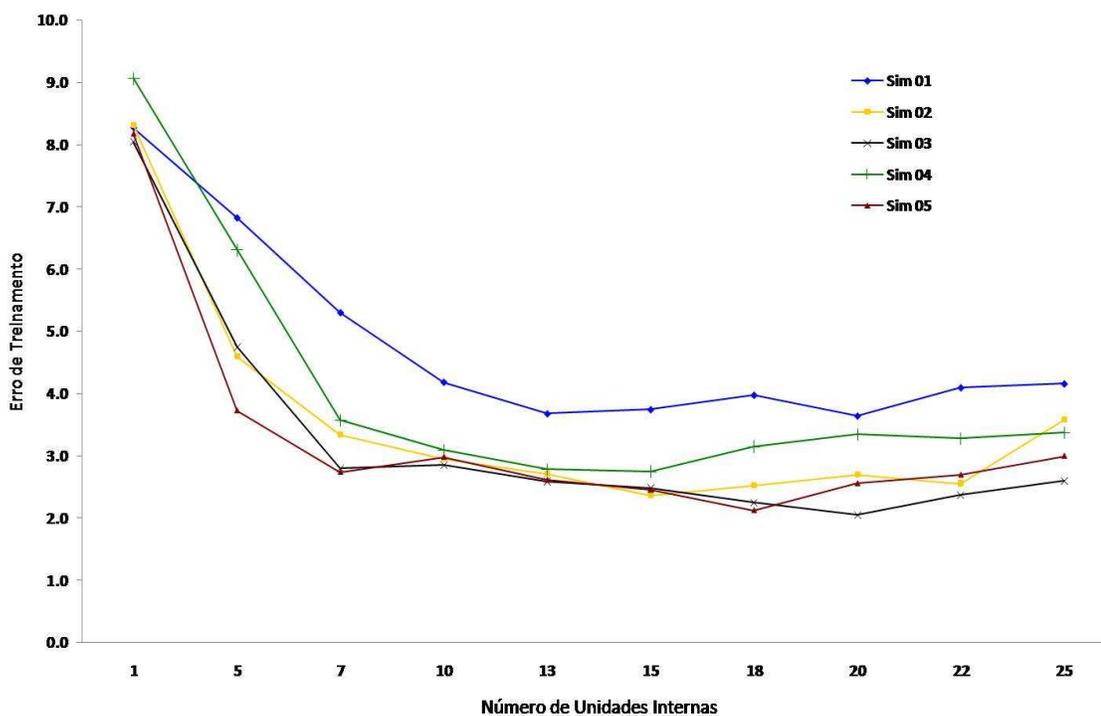


Figura 4.2: Erro médio de treinamento em função do número de unidades internas para os cinco grupos.

Para todos os grupos, o erro médio de treinamento diminui com o aumento do número de unidades internas, exceto, a partir da estrutura com 20 unidades internas, onde há um pequeno aumento do erro com a elevação do número de unidades internas. O erro médio obtido foi maior para os grupos Sim01 e Sim04, tanto na etapa de treinamento quanto na etapa de validação. Os valores obtidos para o erro de validação se encontram na Figura 4.3.

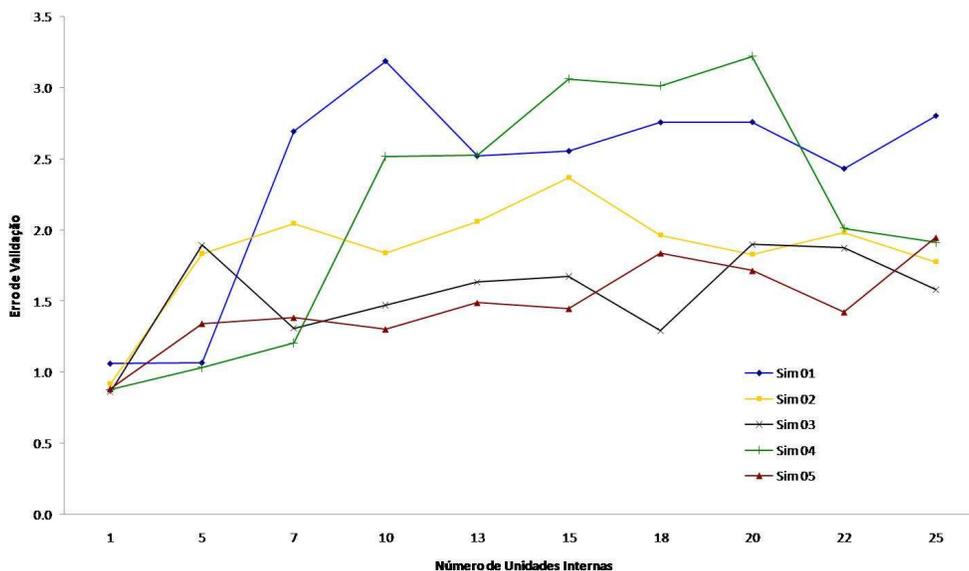


Figura 4.3: Erro médio de validação em função do número de unidades internas para os cinco grupos.

A análise conjunta dos erros de treinamento e validação permite avaliar a influência dos parâmetros no desempenho da rede neural. A simulação feita com o grupo Sim01, que possui apenas a concentração de DQO e NH_3 da carga como variáveis de entrada, apresenta o maior erro. Com a inserção do pH como variável de entrada (Sim02), há uma queda significativa no erro de treinamento. No Sim03, onde o pH é substituído pelo O_2 dissolvido como variável de entrada, há uma pequena redução do erro, em relação ao Sim02. Considerando o desvio médio dos dados de entrada de ambos os grupos, não se pode afirmar que o OD possui maior influência do que pH tem sobre os resultados de NH_3 na saída. O desvio médio é definido como a média dos desvios absolutos dos pontos de dados a partir de sua média. O desvio médio normalizado foi calculado pela divisão do desvio médio pela média dos dados da planta. O objetivo deste cálculo é avaliar a amplitude de variação dos dados da planta de um determinado parâmetro. A Tabela 4.1 apresenta os valores de máximo, mínimo e o desvio médio para o conjunto de dados de OD e pH.

Tabela 3.1: Valores máximos, mínimos e desvio médio dos valores das variáveis de entrada OD e pH

	pH	OD (mg/ℓ)
Valor Máximo	7,9	6,5
Valor Mínimo	6,5	1,2
Média	7,3	3,0
Desvio Médio	0,23	0,81
Desvio Médio Normalizado	0,032	0,268

O OD possui uma faixa de variação de seus valores em relação a sua média se comparado ao pH. Isso explica por que o pH não influenciou nos resultados da rede. Caso haja uma variação maior dos valores dos dados de pH em relação a sua média, poderá haver um impacto maior deste parâmetro nos erros médios de treinamento e validação da rede neural. Desta forma, não é possível afirmar que o pH não tem influência no modelo.

No Sim04, onde os dados de parâmetro DQO são removidos das variáveis de entrada, observa-se uma elevação significativa do erro em relação às simulações anteriores, permitindo concluir que este parâmetro tem grande influência sobre o desempenho do sistema. No Sim05, onde todos os parâmetros são inseridos como variáveis de entrada, novamente há uma redução tanto no erro médio de treinamento como no erro médio de validação em relação aos outros grupos.

Para definição da estrutura da RN, foi analisado o erro de treinamento e validação, levando em consideração o desvio padrão dos dados (Figuras 4.4 a 4.6) calculado pela equação 27. Foram excluídos da análise os grupos Sim01 e Sim04, visto que apresentaram erro de treinamento e validação maiores que os demais grupos:

$$s = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (27)$$

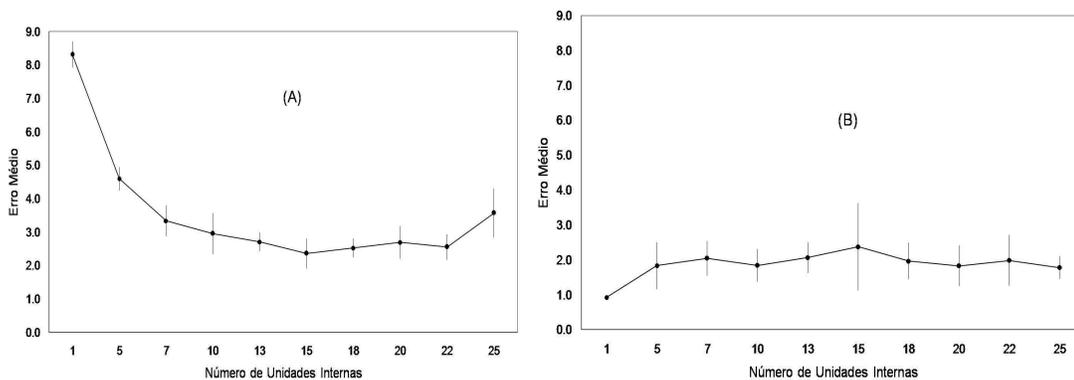


Figura 4.4: Erro médio de treinamento (A) e validação (B) do grupo Sim02 com o desvio padrão dos dados.

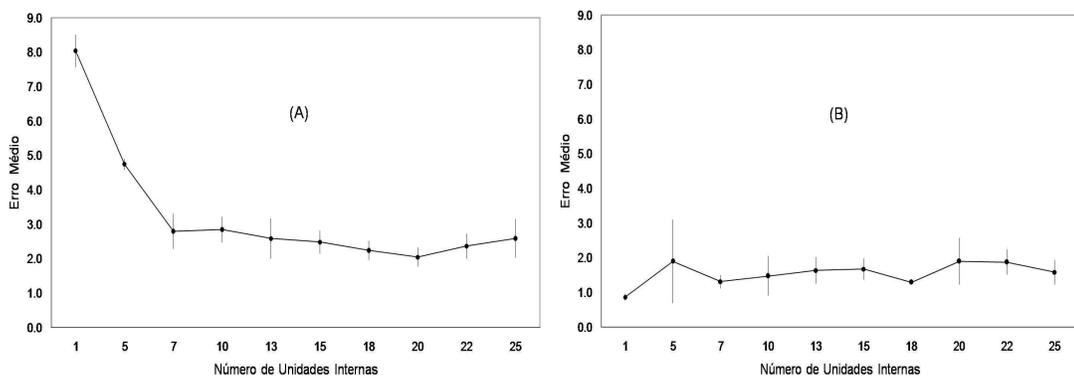


Figura 4.5: Erro médio de treinamento (A) e validação (A) do grupo Sim03 com o desvio padrão dos dados.

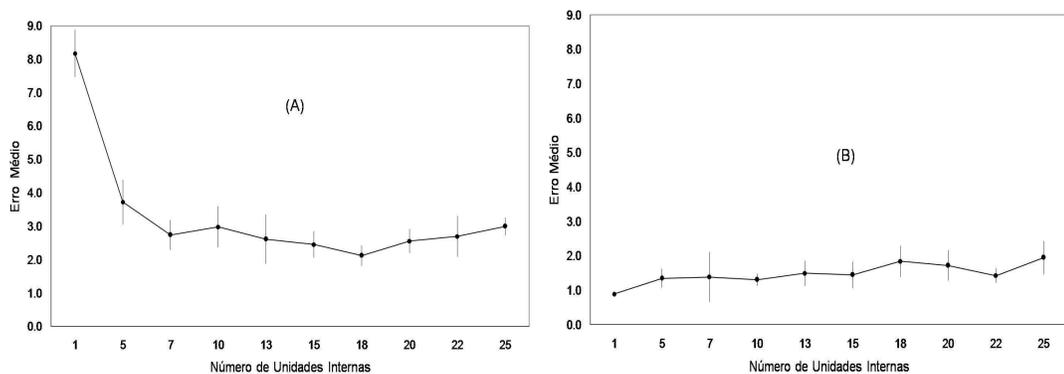


Figura 4.6: Erro médio de treinamento (A) e validação (B) do Sim05 com o desvio padrão dos dados.

A avaliação das Figuras 4.4 a 4.6 mostra que o erro de treinamento e o erro de validação apresentam comportamento similar para Sim02, Sim03 e Sim05.

No entanto, o Sim02 apresenta maiores valores de desvio padrão, o que remete a uma menor confiabilidade de seus valores de erro de treinamento e validação se comparados a dos grupos Sim03 e Sim05.

Os resultados obtidos permitem concluir que o O_2 dissolvido possui uma influência maior no sistema, se comparado com o pH, considerando os dados utilizados. Este resultado corrobora a experiência na planta, onde se observa um impacto maior no desempenho da unidade (avaliado com base no teor de amônia na saída), quando há variação do teor de oxigênio dissolvido em relação à variação de pH do meio.

A queda no erro de treinamento do Sim02 em relação a Sim01, ou seja, quando o parâmetro pH é inserido nas variáveis entrada, mostra que há uma influência do pH no sistema, mesmo que menor do que a influência do O_2 dissolvido. Com base nos erros de treinamento e validação, foram selecionadas as estruturas com 13, 15, 18, 20 unidades internas, dos Grupos Sim03 e Sim05 para as etapas seguintes, avaliação do algoritmo de otimização, avaliação da distribuição dos dados e teste dinâmico. Então, os resultados de amônia da saída preditos dessas estruturas foram plotados com os valores observados na planta (Figuras 4.7 a 4.14). A avaliação qualitativa das figuras proporcionou a escolha da estrutura com 18 unidades internas do grupo Sim05 como a rede neural mais adequada.

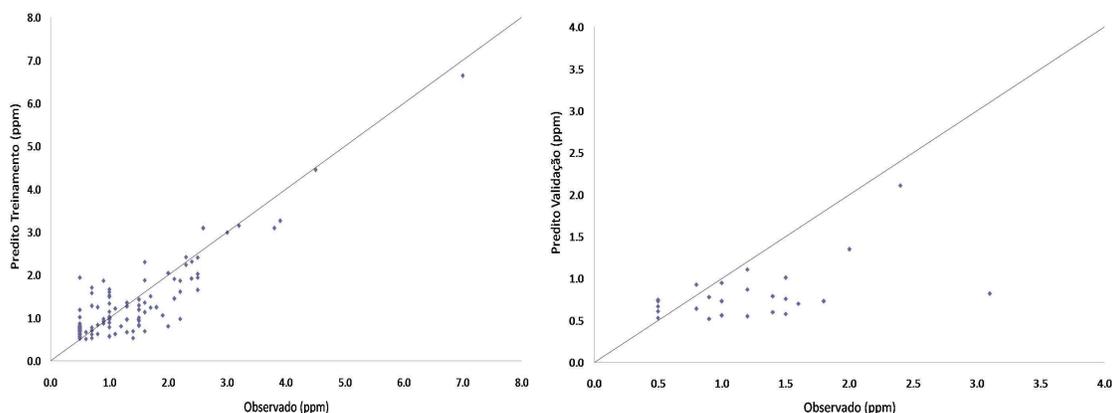


Figura 4.7: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim03 com 13 unidades internas.

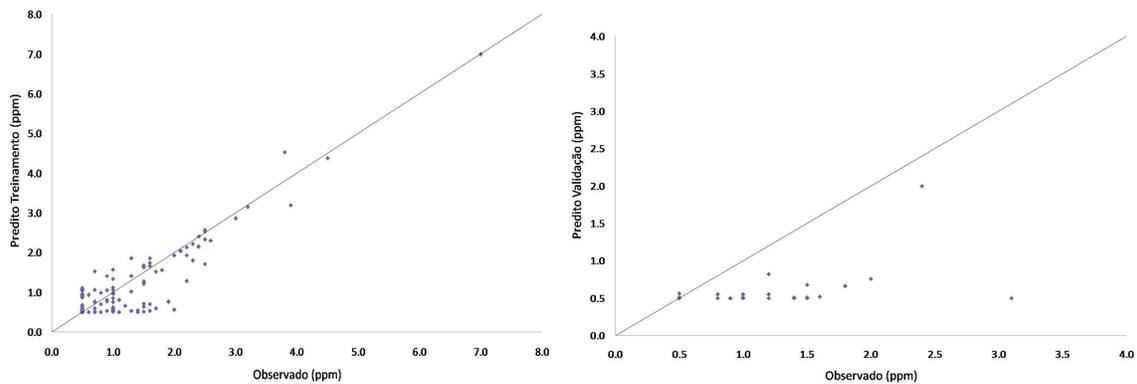


Figura 4.8: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim03 com 15 unidades internas.

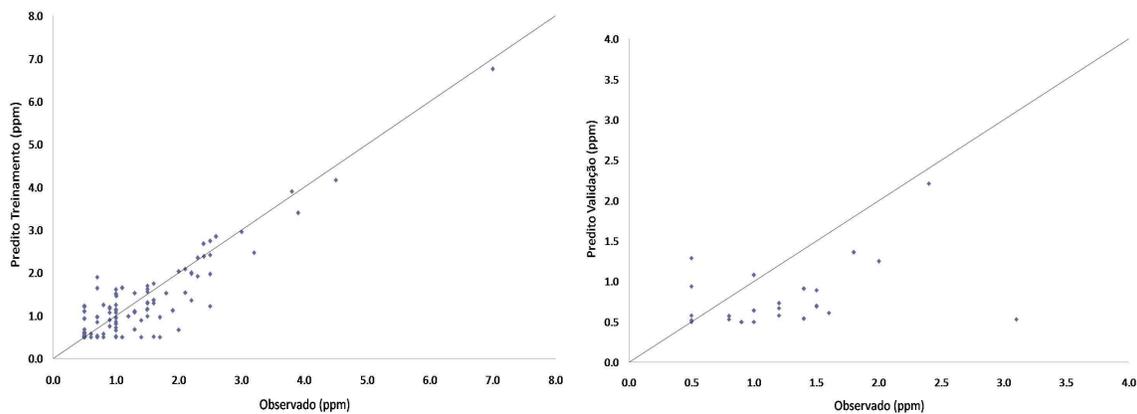


Figura 4.9: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim03 com 18 unidades internas.

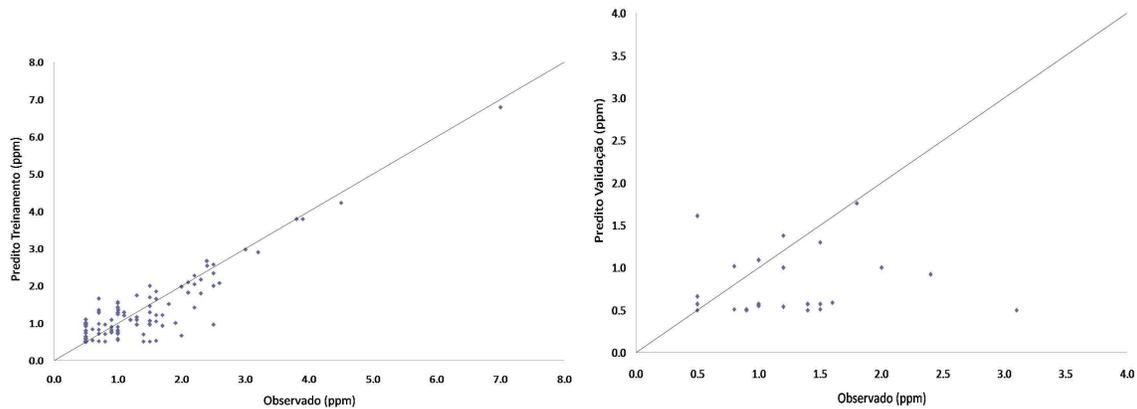


Figura 4.10: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim03 com 20 unidades internas.

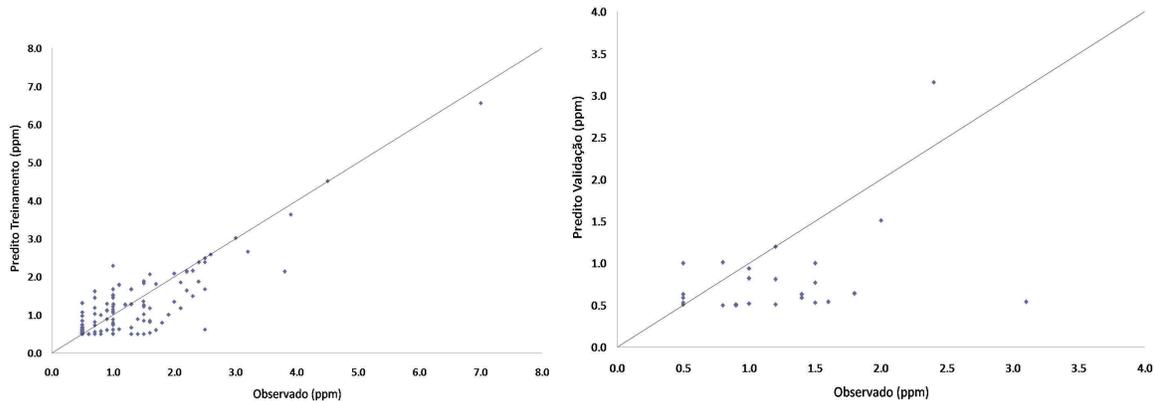


Figura 4.11: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim05 com 13 unidades internas.

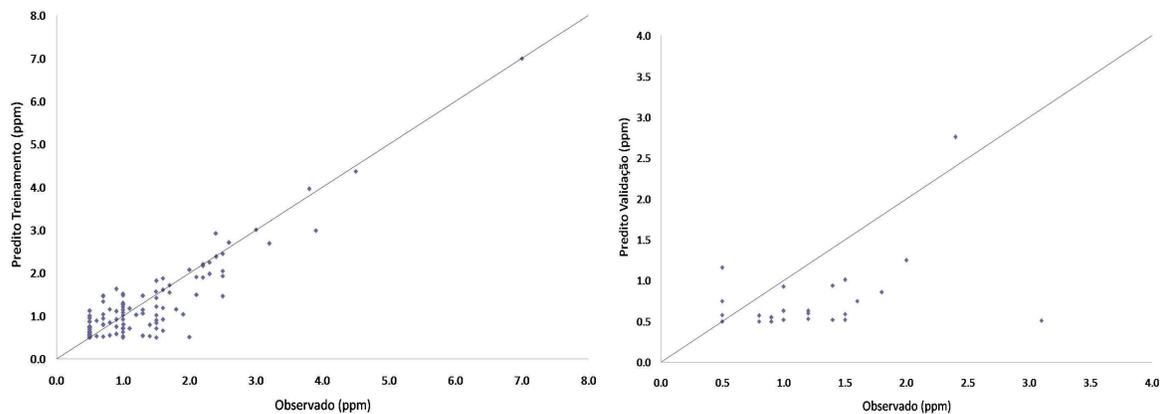


Figura 4.12: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim05 com 15 unidades internas.

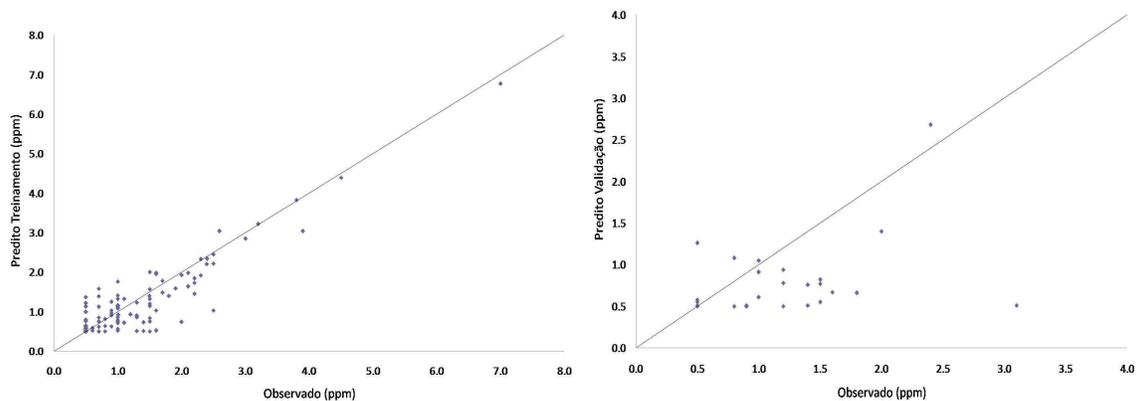


Figura 4.13: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim05 com 18 unidades internas.

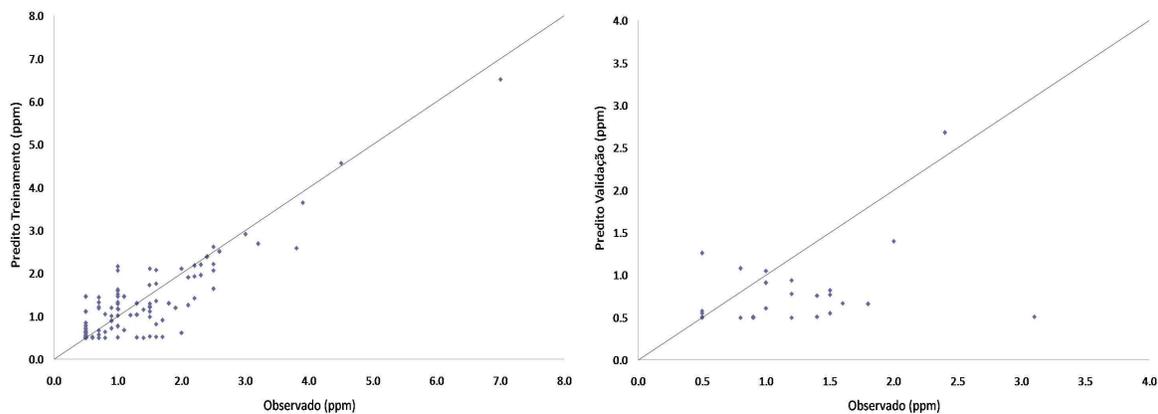


Figura 4.14: Dados preditos e observados de treinamento e validação do grupo Sim05 com 20 unidades internas.

As Figuras 4.15 e 4.16 apresentam os teores de amônia reais e simulados obtidos nas etapas de treinamento e de validação da estrutura com 18 unidades do grupo Sim05, estrutura definida para as etapas seguintes do estudo.

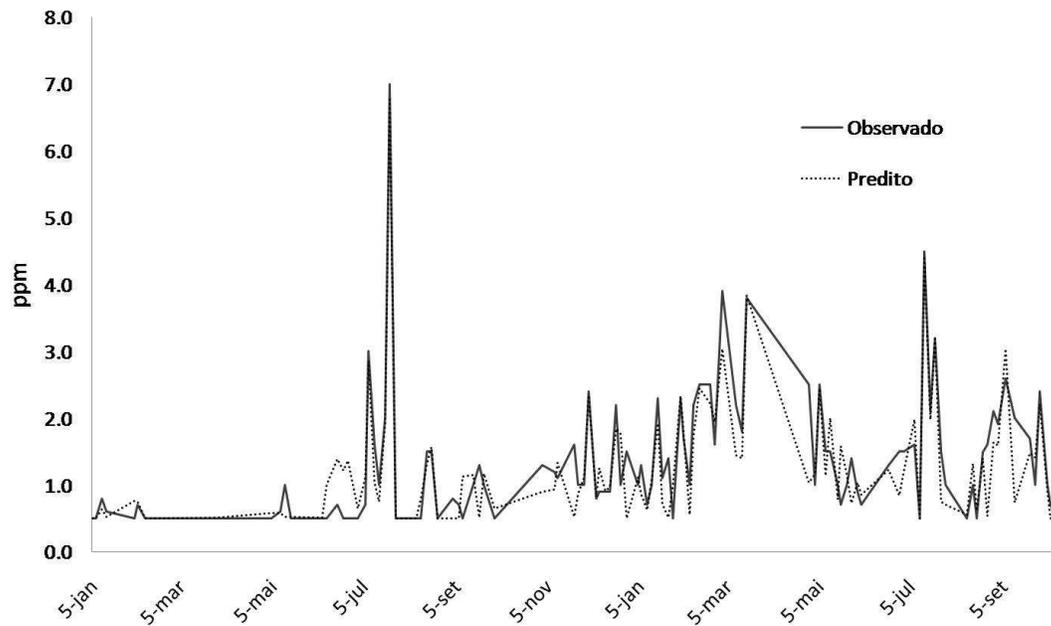


Figura 4.15: Resultados de amônia reais e simulados de treinamento - Grupo Sim05 com 18 unidades internas.

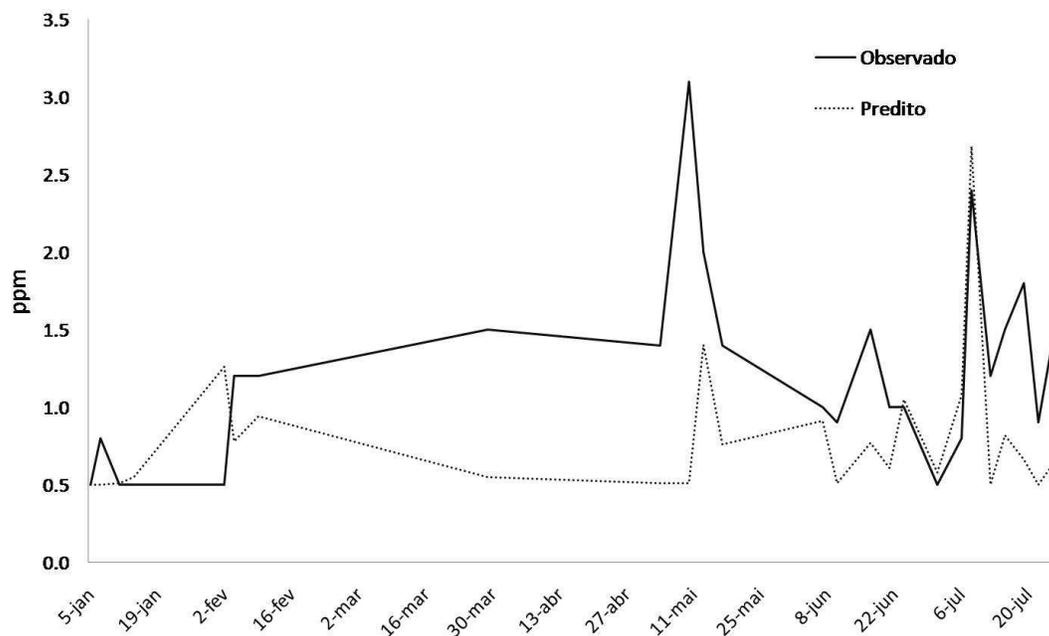


Figura 4.16: Resultados de amônia reais e simulados de validação - Grupo Sim05 com 18 unidades internas.

4.3 AVALIAÇÃO DO ALGORITMO DE OTIMIZAÇÃO

A estrutura com 18 unidades internas do grupo Sim05, selecionada anteriormente, foi novamente simulada com o algoritmo de otimização PSO – *Particle Swarm Optimization*, com o objetivo de avaliar o algoritmo de otimização mais adequado para o caso em estudo. Assim como para o algoritmo *Simulated Annealing*, foram realizadas cinco simulações. Como pode ser observado na Figura 4.17, o erro médio de treinamento para o algoritmo PSO é muito maior que o erro médio de treinamento para o algoritmo SA, além do desvio padrão dos dados ser superior. Para o algoritmo PSO, o desvio padrão médio ficou em torno de 0,65, enquanto para o algoritmo SA o valor foi de 0,3. No entanto, ambos os algoritmos apresentaram erros de validação muito similares (Figura 4.18). Em virtude do erro de treinamento ter sido muito superior para o algoritmo PSO, o SA foi selecionado para a avaliação da distribuição de dados e para o teste dinâmico do modelo.

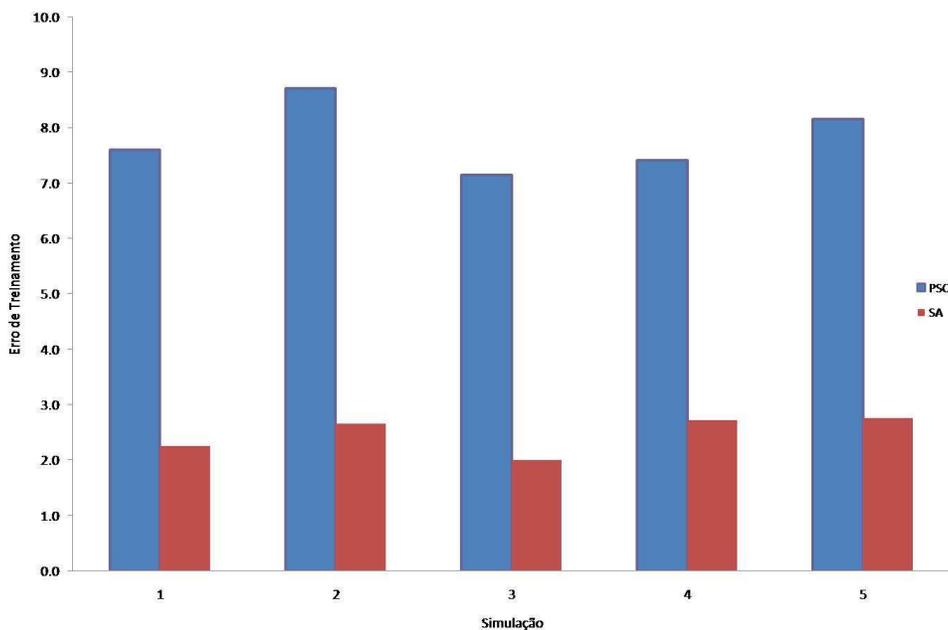


Figura 4.17: Avaliação do erro de médio de treinamento dos algoritmos PSO e SA.

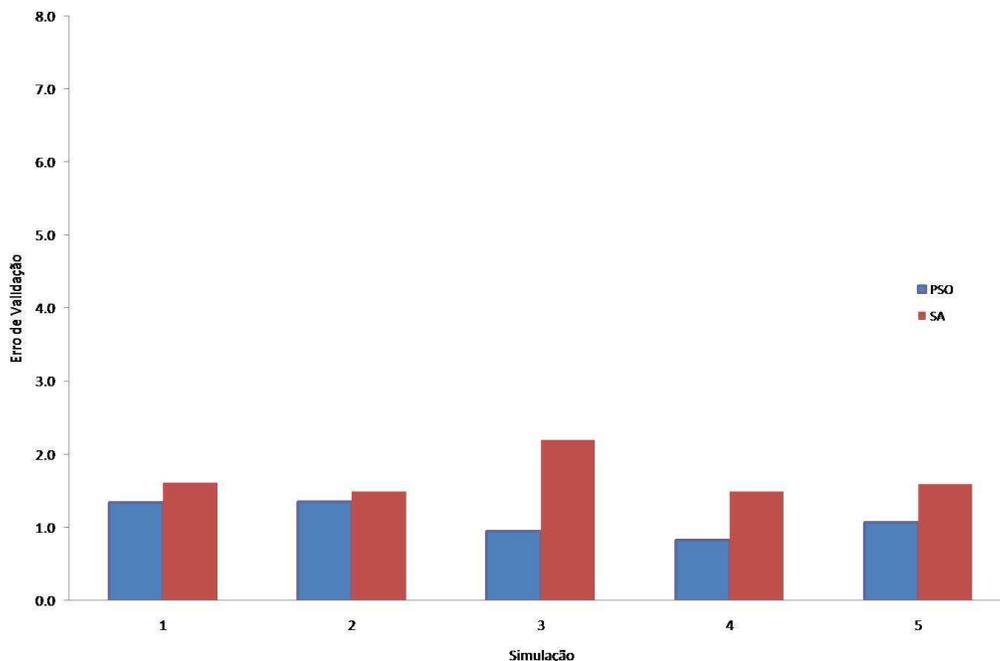


Figura 4.18: Avaliação do erro de médio de validação dos algoritmos PSO e SA.

4.4 AVALIAÇÃO DA DISTRIBUIÇÃO DOS DADOS

Em estudos envolvendo redes neurais, é comum que os dados sejam distribuídos na proporção 70/30 (70% dos dados para o treinamento da rede e 30% para a validação). Desta forma, a estrutura com 18 unidades internas do grupo Sim05 (DQO, NH_3 , OD e pH como variáveis de entrada) foi novamente simulada distribuindo o conjunto de dados de 133 pontos na proporção 70/30 ao invés da distribuição 81/19. As Figuras 4.19 e 4.20 apresentam os erros de treinamento e validação das cinco simulações efetuadas. O erro de treinamento foi maior para a distribuição 81/19. Como o erro é definido pela soma dos termos, para a distribuição 81/09 o erro de treinamento terá mais termos que a distribuição 70/30. O mesmo ocorre para a validação, onde o erro é maior para a distribuição 70/30, pois ele é composto de 30 termos, enquanto que para a distribuição 81/19 o erro de validação é composto de 19 termos, sendo menor para esta distribuição. Apesar

disto, a diferença de seus valores não é significativa, o que mostra a robustez da estrutura.

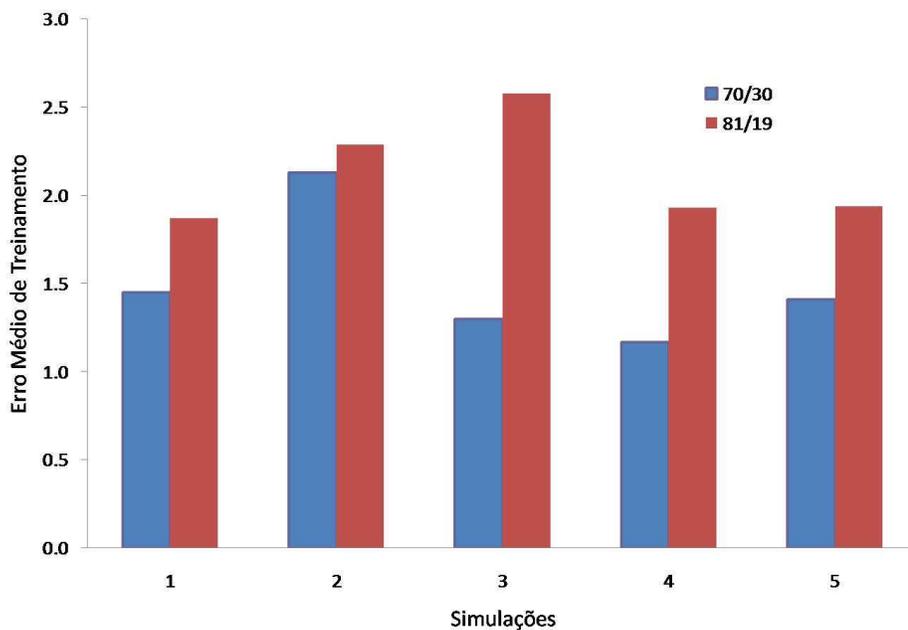


Figura 4.19: Comparação dos erros de treinamento das distribuições 70/30 e 81/19 para as estrutura de 18 unidades do grupo Sim05.

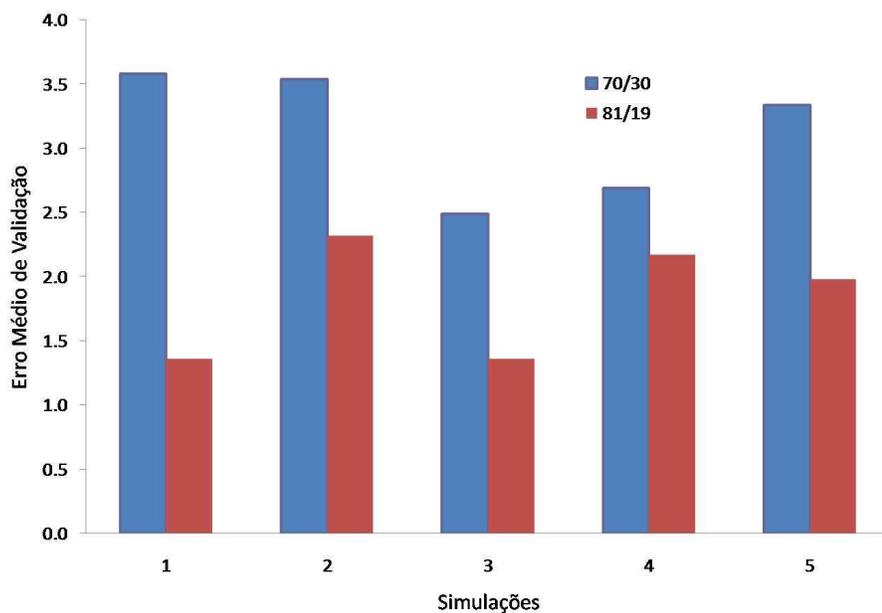


Figura 4.20: Comparação dos erros de validação das distribuições 70/30 e 81/19 para as estrutura de 18 unidades do grupo Sim05.

4.5 TESTE DINÂMICO

O teste dinâmico tem como objetivo avaliar a resposta do modelo aos distúrbios nas variáveis de entrada. Para tal, a rede foi executada com dados de novembro e dezembro de 2011 e janeiro de 2012 que não foram utilizados nos treinamento e validação do modelo, utilizando a estrutura de 18 unidades internas do grupo Sim05 definida no item 4.2. Importante frisar que a faixa de valores utilizados no teste está na mesma faixa dos dados utilizados no treinamento e validação do modelo. A Figura 4.21 mostra os valores observados e preditos. O modelo apresentou um bom resultado apesar da diferença de alguns valores preditos em relação aos observados. Conforme exposto anteriormente, alguns níveis de erro são aceitáveis (em torno de 30 a 40%) e é suficiente que o modelo indique a tendência dos valores.

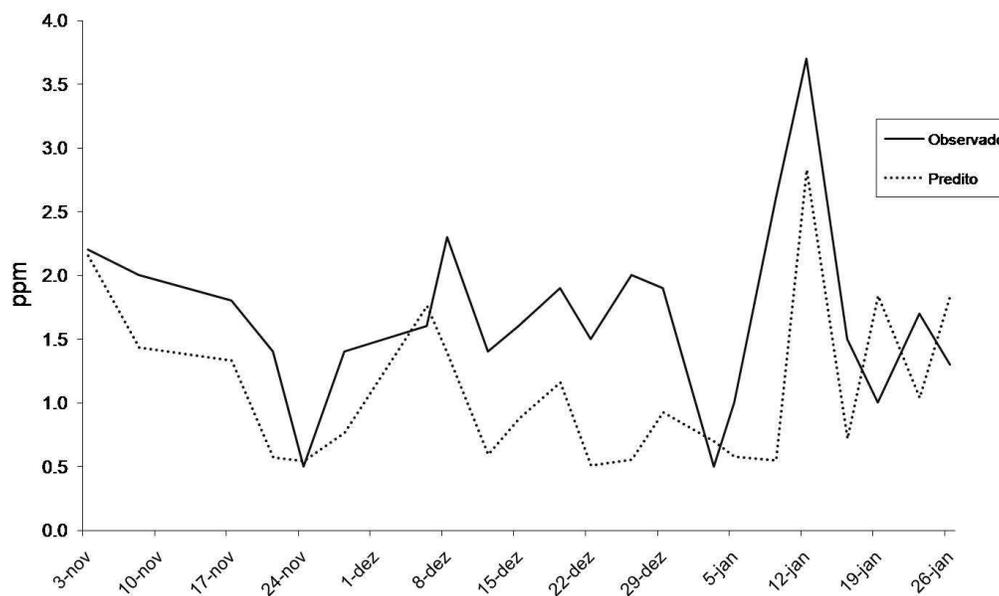


Figura 4.21: Teste Dinâmico da Rede Sim05 com 18 unidades internas na distribuição 70/30.

4.6 COMPARAÇÃO COM A LITERATURA

Assim como apresentado no trabalho de CÔTÉ et al (1994), em que o teor de sólidos suspensos foi utilizado como variável de entrada, além dos parâmetros utilizados aqui, os resultados do treinamento da rede neural construída aqui foram muito próximos dos dados reais, com erros extremamente baixos, considerando uma avaliação qualitativa. A principal diferença é que foram somente redes neurais para a construção do modelo da unidade da REPAR, enquanto CÔTÉ et al (1994) aplicaram um modelo híbrido (fenomenológico + rede neural). Assim como CÔTÉ et al (1994), outros trabalhos também utilizaram o teor de SS como variável de entrada. Desta forma, é interessante inserir outros parâmetros (teor de SS), como variável de entrada para avaliar sua influência no modelo e talvez melhorar os resultados da rede neural.

O trabalho mostra que é possível construir uma estrutura de redes neurais com poucas variáveis de entrada, pois o modelo desenvolvido no presente trabalho apresentou um ótimo desempenho, com resultados tão bons quanto os obtidos pelo trabalho de MORAL et al (2008), porém com menos variáveis de entrada. Em seu trabalho, MORAL et al (2008) utilizaram um modelo com um número maior de variáveis de entrada (pH, DQO e temperatura da carga, sólidos suspensos nos tanques de aeração, sólidos suspensos no efluente tratado, produção de lodo e DQO do efluente tratado).

4.7 OPORTUNIDADE DE APLICAÇÃO NA UNIDADE DE TRATAMENTO DE EFLUENTES DA REPAR

Os resultados do modelo desenvolvido com os dados da REPAR criam excelentes expectativas quanto à aplicação de uma tecnologia de monitoramento virtual do teor de amônia no efluente tratado. A unidade de tratamento de efluentes da refinaria aceita certos níveis de erro. Por exemplo, para o acompanhamento operacional do sistema de lodos ativados, um valor predito de 0,7 mg/l de amônia no efluente tratado, quando o valor observado é 0,5 mg/l, é considerado um excelente resultado, apesar do erro de 40%. O que se deseja conhecer é a ordem

de grandeza dos valores. A experiência de campo do acompanhamento da unidade mostra que valores de amônia no efluente tratado abaixo de 3,0 mg/l indicam um bom desempenho do sistema, independente se este valor seja 1,5 ou 2,5 mg/l. Desta forma, o erro apresentado pelo modelo é aceitável para os objetivos de sua aplicação na REPAR. Conforme exposto acima, os trabalhos desenvolvidos na identificação de lodos ativados por redes neurais utilizaram outros parâmetros para a elaboração do modelo, como o teor de sólidos suspensos no sistema. Desta forma, uma sugestão para trabalhos futuros é a avaliação do desempenho do modelo com a inclusão de novas variáveis de entrada.

Um sistema de monitoramento pode ser aplicado na unidade utilizando o modelo de redes neurais. A Figura 5.1 apresenta a situação atual e a proposta de aplicação do modelo no acompanhamento da unidade. As vantagens do sistema proposto são a redução do tempo de obtenção do valor da concentração de amônia no efluente tratado e a tomada de ação preventiva. No primeiro caso, se ocorrer um distúrbio no sistema, o seu impacto será conhecido somente quando ocorrer. No segundo caso, é possível conhecer o que poderá ocorrer com o processo, então algumas ações podem ser tomadas pelo operador para diminuir os impactos deste distúrbio no sistema e conseqüentemente na qualidade do efluente tratado.



Figura 4.22: Diagrama de blocos com o sistema atual e proposto de monitoramento da unidade de tratamento de efluentes.

5 CONCLUSÕES

A partir dos resultados obtidos neste trabalho, é possível delinear algumas conclusões, as quais se encontram abaixo descritas.

A avaliação da matriz de correlação dos dados industriais utilizados permitiu verificar que os dados não possuem correlação linear ou quadrática e, portanto, a aplicação de uma rede neural é plenamente justificável.

Com relação à definição das variáveis de entrada do modelo, pode-se afirmar que a exclusão do teor de demanda química de oxigênio como uma variável de entrada (Sim04) da rede neural resultou num aumento significativo dos erros de treinamento e validação, o que permite concluir a grande importância deste parâmetro no modelo e a necessidade de manter como variável de entrada.

Para a definição da estrutura da rede neural mais adequada para um determinado problema, é necessária uma avaliação criteriosa das variáveis de entrada e do número de unidades internas. Como puderam ser observados no trabalho, os parâmetros de entrada possuem uma influência muito grande nos resultados. Para o caso de lodos ativados, a inclusão do teor O_2 dissolvido nos tanques de aeração, por exemplo, reduziu significativamente o erro de treinamento e validação da rede.

O resultado obtido na simulação dos dados com a arquitetura escolhida (Sim05 com 18 unidades internas na distribuição 70/30) mostra que os critérios utilizados na definição da arquitetura foram satisfatórios. Os resultados do grupo Sim05 (DQO, NH_3 , O_2 e pH) foram muito similares com o grupo Sim03 (DQO, NH_3 e O_2), no entanto não é possível afirmar que o parâmetro pH não influencia no modelo, pois a amplitude de variação dos dados é muito pequeno quando comparado com os outros parâmetros. Enquanto os valores pH variaram de 6,5 a 7,9 mg/l, os valores de O_2 variaram de 1,2 a 6,5 mg/l. Desta forma, é importante manter o modelo com todas as variáveis de entrada.

Os erros obtidos nas etapas de treinamento e validação do modelo embora não sejam desprezíveis são aceitáveis, visto que para o processo industrial, em muitos casos o que se deseja conhecer é a ordem de grandeza dos resultados. Por exemplo, para um valor real de 0,5 ppm de amônia, um erro de 50% no valor simulado (0,75 ppm) é aceitável.

A distribuição dos dados não apresentou significativa influência nos modelos. Os resultados da distribuição 81/19 e 70/30 foram muito similares. Por outro lado, o algoritmo de otimização apresentou grande impacto nos valores de erro. Assim, uma exploração maior desta etapa do trabalho pode ser realizada com o objetivo de avaliar se os resultados podem ser melhorados com a aplicação de outro algoritmo de otimização.

Assim, mesmo para o teste dinâmico, onde houve erros mais elevados, pode-se afirmar que a modelagem por redes neurais do sistema de lodos ativados irá trazer benefícios à unidade de tratamento de efluentes da REPAR. O modelo proporciona facilidade na obtenção dos resultados de amônia no efluente tratado e a redução de no mínimo 12 horas no tempo para tomada de decisão. Como discutido no item 5.1, o trabalho é passível de ser ampliado e fica a sugestão de incluir novas variáveis de entrada e outras camadas internas na estrutura da rede neural.

Desta forma, o estudo de caso vislumbra um cenário de aplicação de um sensor virtual baseado em redes neurais para prever a qualidade do efluente tratado. Os parâmetros de controle do processo poderão ser medidos on-line com a instalação de analisadores em linha que alimentarão o modelo virtual. O sensor, além de estimar a concentração de amônia no efluente final, poderá indicar as ações mais adequadas para controle do sistema em caso de distúrbio nas variáveis de entrada. Assim, a tomada de decisão pode ser agilizada, sendo possível minimizar os impactos do distúrbio na qualidade da carga na unidade de tratamento de efluente, garantindo a qualidade do efluente final.

Baseado nos resultados obtidos, recomenda-se a avaliação do modelo com a inclusão de novas variáveis de entrada e a aplicação no modelo virtual para o monitoramento e controle do sistema de tratamento de efluentes com lodos ativados.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] BOGER, Z. Application of neural networks to water and wastewater treatment plant operation. **Water and Wasterwater Treatment Instrumentation**, Shafdan, v.31, n.10, p 25-33, 1992.
- [2] CAPODAGLIO A. G., JONES H. V., NOVOTNY V. and FENG X. Sludge bulking analysis and forecasting: application of system identification and artificial neural computing technologies, **Water Research**, Milwaukee, v.25, n.10, p.1217-1224, 1991.
- [3] COSTA, V., S., L. **Avaliação de efeito tóxico utilizando o método respirométrico em processos de lodos ativados**. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Materiais e de Processos Químicos e Metalúrgicos) Departamento de Engenharia de Materiais, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.
- [4] CÔTÉ, M. GRANDJEAN, B. P. A., LESSARD, P. and THIBAUT, J. Dynamic modelling of the activated sludge process: improving prediction using neural networks. **Water Research**, Québec, v.29, n.04, p.995-1004, 1995.
- [5] ECKENFELDER, W. W. **Activated sludge process design and control: Theory and practice Vol 1**. 2 ed. Lancaster: Water Quality Management Library, 1992.
- [6] FERREIRA, E.S. **Cinética química e fundamentos dos processos de nitrificação e desnitrificação biológica**. Trabalho apresentado no 27 Congresso Interamericano de Engenharia Sanitária e Ambiental, Porto Alegre, 2000.
- [7] GERNAEY, K. V., van LOOSDRECHT, M. C. M., HENZE, M., LIND, JORGENSEN, B. Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: state of the art. **Environmental Modelling & Software** Lyngby, n.19, p.763-783, 2004.

- [8] HAMED, M.M., KHALAFALLAH, M.G., HASSANIEN, E.A., Prediction of wastewater treatment plant performance using artificial neural networks. **Environmental Modelling & Software** Cairo, n.19, p.919-928, 2004.
- [9] HANISCH, W.S., PIRES, E.C., CARVALHO, A.C.P.L.F. **Modelo de redes neurais para o processo de lodos ativados de tratamento de esgotos domésticos**. Trabalho apresentado no 13 Congresso Brasileiro de Engenharia Química , Campinas, 2000.
- [10] HAYKIN, S. S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2 ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.
- [11] HIMMELBLAU, D.,M., Applications of artificial neural network in chemical engineering, **Korean J. Chem.** Austin n.17, p.373-392, 2000.
- [12] HORAN, N. J. **Biological wastewater treatment systems theory and operation**. 1 ed. West Sussex, England: John Wiley and Sons Publishing, 1990.
- [13] IRIGOYEN, A. I., **Modelagem da evapotranspiração de referência e da evapotranspiração de limeira ácida com aplicação de técnicas de regressão e redes neurais artificiais**, Tese (Doutorado em Ciência) Departamento de Física do Ambiente Agrícola, Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz, Piracicaba, 2010.
- [14] KABOURIS, J., C., GEORGAKAKOS, A., C. Parameter e state estimation on the activated sludge process I – model development, **Water Research**, Atlanta, v.30, n.12, p.2853-2865, 1995.
- [15] KOVÁCS, Z. L. **Redes neurais artificiais: fundamentos e aplicações: um texto básico**. 2 ed., São Paulo: Livraria da Física, 2006.

- [16] LEVY, A. L. L. **Modelagem e Análise de sensibilidade do processo de tratamento de lodo ativado com reciclo**. Dissertação (Mestrado em Ciências) Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.
- [17] MELCHIOR, S. C., CAMARGO, M. de L., CONEGLIAN, C. M. R., BRITO, N. N., LOPES, T. A., BARROS, R. de M., SOBRINHO, G. D., TONSO, S., PELEGRINI, R. **Tratamento de efluentes por lodos ativados**. Trabalho apresentado no III Fórum de Estudos Contábeis da UNICAMP, Campinas, 2003.
- [18] METCALF e EDDY, Inc. **Wastewater engineering: treatment and reuse**. 4th ed. New York, McGraw Hill, 2003.
- [19] MJALLI, F. S., AI-ASHEH, S., ALFADALA, H. E. Use of artificial neural network black-box modeling for the prediction of wastewater treatment plants performance. **Journal of Environmental Management**, Qatar, v.83, n.3, p.329-338, 2007.
- [20] MORAL, H., AKSOY, A., GOKCAY, C. F., Modeling of the activated sludge process by using artificial neural networks with automated architecture screening, **Computers and Chemical Engineering**, Ankara, v.32, n.10, p.2471-2478, 2008.
- [21] NELSON, M., I., SIDHU, H.,S., Analysis of the activated sludge model number 1, **Applied Mathematics Letters**, Wollongong, v.22, n.5, p.629-635, 2009.
- [22] NOWAK, O., SAVARDAL, K., SCHWEIGHOFER, P. The dynamic behaviour of nitrifying activated sludge systems influenced by inhibiting wastewater compounds, **Water Science and Technology**, Viena, v.31, n.2, p.115-124, 1995.
- [23] RAMALHO, R. S., **Introduction to wastewater treatment processes**, 2 ed., U.S.A., Academic Pres, 1983.

- [24] SANTOS, E. V. M. dos, **Desnitrificação em sistemas de lodos ativados**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil e Ambiental) Departamento de Engenharia Civil e Ambiental, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2009.
- [25] SEZERINO, P. H. **Potencialidade dos filtros plantados com macrófitas (constructed wetlands) no pós-tratamento de lagoas de estabilização sob condições de clima subtropical**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) Departamento de Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2006.
- [26] SOUSA, M., P., de, **Interpretação de parâmetros de ETE's – monitoramento microbiológico**, Rio de Janeiro, CENPES/Petrobras, 2010. 82 p. Apresentação.
- [27] SROKA, E., KAMINSKI, W., BOHDZIEWICZ, J. Biological treatment of meat industry wastewater. **Desalination**, Gliwice, v.162, n.10, p.85–91, 2004.
- [28] TEIXEIRA, A. C.; **Manual de operação da UTDI da REPAR- revisão 2009**. Araucária, Petróleo Brasileiro S/A. Refinaria Presidente Getúlio Vargas, 2009. 84 p. Manual.
- [29] TEIXEIRA, A. C.; **Reprodução do modelo ASM1 em linguagem fortran**. 18 f. Trabalho de Conclusão da Disciplina de Engenharia Bioquímica (Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2010.
- [30] TYAGI R. D. and DU Y. G. Kinetic model for the effects of heavy metals on activated sludge process using neural networks. **Environmental. Technology**, v.13, n.9, p.883-890, 1992.

- [31] VAN HAANDEL, A. C., MARAIS, G. V. R. **O Comportamento do sistema de lodo ativado: teoria e aplicações para projetos e operações.** 1 ed. Campina Grande: Epgraf, 1999.
- [32] VAZOLLER, R. F., GARCIA, A. D., CONCEITUAÇÃO NETO, J. **Microbiologia de lodos ativados: séries manuais.** São Paulo: CETESB – Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 1991. 23 p. Relatório técnico.
- [33] VON SPERLING, M. **Lodos ativados: princípios do tratamento biológico de águas residuárias,** 3. ed Belo Horizonte: Universidade Federal de Minas Gerais. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, 2002.
- [34] ZANATA, D. R. P. **Desenvolvimento de sensor virtual empregando redes neurais para medição da composição em uma coluna de destilação.** Dissertação (Mestrado em Engenharia de Sistemas) Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.
- [35] ZENG, G. M., QIN, X. S., HE, L., HUANG, G. H., LIU, H. L., LIN, Y. P. A neural network predictive control system for paper mill wastewater treatment. **Engineering Applications of Artificial Intelligence.** v.16, n.2, p.121-129, 2003.