

08 a 11 de Outubro de 2018
Instituto Federal Fluminense
Búzios - RJ

APLICAÇÃO DO PSO PARA A ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS DE UMA ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE EFLUENTES

Ariadine Bitencourt Barroso¹ – Ariadne.bitencourt22@gmail.com

Rogério Luz Pagano¹ – rparano@ufs.br

Cristina Ferraz Silva¹ – ferrazcristina@yahoo.com.br

¹ Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Sergipe – Campus São Cristóvão, SE, Brasil.

Resumo. Os índices de matéria orgânica e nutrientes presentes nos efluentes biológicos precisam ser reduzidos, pois estes contribuem diretamente para a eutrofização entre outros danos nos corpos d'água. Numa Estação de Tratamento de Efluentes, o sistema de lodo ativado é o processo biológico mais aplicado ao redor do mundo. Neste trabalho, foi realizado o estudo de um modelo matemático para este sistema, conhecido como ASM – Activated Sludge Model, cujo objetivo é realizar a estimação dos principais parâmetros deste modelo. O modelo utilizado no presente trabalho foi o de Bournazou, o qual foi implementado em FORTRAN, resolvido com a aplicação da sub-rotina DASSL (código computacional para resolução de equações algébrico-diferenciais) e os parâmetros cinéticos foram estimados por meio do programa ESTIMA associado ao algoritmo de Enxame de Partículas. Os dados utilizados para as estimativas foram concentrações das espécies de interesse a serem analisadas, as quais foram obtidas na literatura, NH_4 , NO_2 , NO_3 , S_s , X_H e O_2 . O oxigênio foi ajustado para ser inserido a cada 3h durante o processo de tratamento, que foi de 10h. Apesar da grande quantidade de parâmetros a serem estimados, os resultados encontrados apresentaram boas estimativas para o modelo matemático estudado, ajustando com uma boa precisão aos dados da literatura.

Palavras chave: tratamento de efluente, lodo ativado, ASM, estimação.

1. INTRODUÇÃO

Além da devastação no meio, o não tratamento adequado dos efluentes domésticos (esgoto urbano) a serem lançados nos corpos d'água é também um modo de transmissão de doenças patológicas de origem hídrica. Dados divulgados pelo Ministério da Saúde, a cada R\$ 1,00 investido em saneamento básico são economizados R\$ 4,00 em saúde. Assim, o decaimento do número de infectados por doença de transmissão hídrica só pode ser alcançado através do devido tratamento dos efluentes, bem como a adequação da qualidade dos mesmos a serem lançados nos corpos d'água. Desta forma, estações de tratamento de efluente (ETE) possuem um papel importante neste cenário (Funasa, 2004; Mendes, 2016).

No Brasil, 45% da população não recebe nenhum tipo de tratamento do efluente urbano, gerando um aumento nos riscos de poluição dos rios, lagos e mananciais. A Agência Nacional de Águas realizou uma pesquisa sobre o tratamento de esgoto no país, a qual revelou que, apesar da maioria da população receber algum tipo de tratamento do que é coletado dos seus esgotos, estes não são tratados de forma adequada e eficiente. Este fato está diretamente relacionado com o abastecimento de água para a população, pois a poluição dos corpos hídricos inviabiliza esta água para o consumo humano. Assim, o tratamento adequado destes efluentes é fundamental não apenas para a redução da poluição hídrica, mas também para a manutenção adequada do abastecimento de água da população (SNIS, 2016).

No tratamento de efluentes em uma ETE, o sistema de lodo ativado é o processo biológico mais comumente utilizado em todo mundo para os diversos tipos de efluente. O sistema de lodo ativado, possui características não lineares de estrutura multivariadas e uma escala dinâmica de tempos em seu processo. Em virtude disto, para a obtenção de uma boa avaliação e previsão da eficiência do processo das ETEs durante a remoção biológica de nutrientes (nitrogênio e fósforo, por exemplo) e matéria orgânica, alguns modelos matemáticos dinâmicos foram desenvolvidos. Estes modelos permitem compreender o funcionamento do processo biológico de tratamento de águas residuais e a resposta de diferentes variáveis neste tratamento, como também analisar os parâmetros do processo de forma mais acessível e econômica. Neste sentido, a modelagem matemática é vista como uma parte indispensável do projeto e operação de um sistema de tratamento de efluente (Wu *et al.* 2016).

De modo geral, a dinâmica dos processos bioquímicos que envolve o sistema de lodo ativado é complexa, isto se deve às interações entre as diversas populações microbianas. Por este motivo, foram desenvolvidos pela Associação Internacional da Água (IWA – *International Water Association*) modelos matemáticos conhecidos como a série de Modelos de Lodo Ativado (ASM – *Activated Sludge Model*), para representar tais interações microbianas com o intuito de prever o desempenho do processo sob diversas condições operacionais. A série de ASM's é dividida em quatro grupos principais – ASM1, ASM2, ASM2d e ASM3, os quais tem por função resumir o entendimento dos fenômenos biológicos e bioquímicos indispensáveis a tais processos. Estes modelos são uma síntese dos modelos de lodo ativado, entretanto, na prática eles precisam ser ajustados, adaptados ou calibrados para o cada caso a ser estudado (Man *et al.*, 2017; Wu *et al.*, 2016; Santa Cruz *et al.*, 2016).

Em função da diversidade de tipos de efluentes e, considerando a complexidade dos processos de lodo ativado, saber como ajustar e corrigir os parâmetros cinéticos de um dado modelo torna-se a chave para uma aplicação de sucesso deste modelo, já que, tais parâmetros em diferentes ambientes operacionais são incertos. A estimação de parâmetros do modelo bioquímico do efluente doméstico é um problema típico de otimização não-linear, pois ao realizar o ajuste dos parâmetros dinâmicos mais relevantes, é gerado um conjunto de valores

desses parâmetros afim de obter o valor mínimo da função objetivo e, assim, o ajuste ótimo entre os valores calculados e os dados experimentais das variáveis do processo do modelo (Du *et al.*, 2018).

2. METODOLOGIA

Para a realização deste trabalho, foi utilizado o modelo matemático (ASM3) disposto no artigo de Bournazou *et al.* (2010), cujo objetivo é remover a matéria orgânica e nitrogênio. Este modelo foi utilizado como base para os estudos da estimação dos principais parâmetros relacionados ao processo de tratamento de efluente com lodo ativado.

O modelo foi implementado em FORTRAN, resolvido com a aplicação da sub-rotina DASSL, sendo que os parâmetros cinéticos foram estimados por meio do programa ESTIMA associado ao algoritmo de enxame de partículas (PSO - *Particle Swarm Optimization*). Estas estimações foram realizadas considerando o tempo de duração do processo de tratamento de 10 horas. Durante o tempo de operação há injeção de 550g/m^3 de oxigênio a cada 3h, pois este perfil favorece que, durante o tratamento, os processos aeróbico e anóxico atuem de maneira adequada afim de que ocorram as transformações necessárias ao tratamento do efluente. Na estrutura do programa definiu-se faixas de busca para realização das estimações, o intervalo de busca para estas faixas foram definidos a partir dos valores encontrados na literatura, bem como foi necessário realizar uma ponderação entre as variáveis de entrada.

2.1 Modelo Bournazou

O modelo utilizado possui taxas cinéticas para o crescimento aeróbico da biomassa e bactérias oxidantes de amônia e nitrito, bem como para o crescimento anóxico de nitrato e nitrito. O modelo é descrito por oito equações diferenciais que reproduzem o comportamento das variáveis de processo existentes no mesmo, como mostram as Tabelas 1 e 2. Este modelo é composto por 21 parâmetros que estão diretamente relacionados com as equações que descrevem todo o processo, são eles, o coeficiente de transferência de oxigênio (KLa), taxa máxima de crescimento para biomassa (X_H), nitrato (NO_3) e nitrito (NO_2) (μ_H , μ_{H1} e μ_{H2}), taxa máxima de crescimento para bactérias oxidantes de amônia (X_{ns}) e nitrito (X_{nb}) (μ_{A1} e μ_{A2}), coeficiente de rendimento em crescimento aeróbico e anóxico (Y_{Haer} e Y_{Hanox}), coeficiente de rendimento para X_H , X_{ns} e X_{nb} (Y_{A1} , Y_{A2} , Y_{A3}), coeficiente de saturação do amônio (NH_4), nitrito, nitrato, substrato e oxigênio em X_{ns} , X_{nb} e X_H (K_{NH} , K_{NO_2} , K_{NO_3} , K_S , K_O e K_{O1}), teor de nitrogênio em X_H e S_S (i_{NB} e i_{NSS}), coeficiente de saturação de X_{nb} (K_{NO_21}) e taxa de armazenamento de energia (St_s).

Após estudar o modelo, foi possível perceber que alguns destes parâmetros são constantes ou não alteram significativamente os resultados das variáveis analisadas. Desta forma, apenas 15 parâmetros foram utilizados para o estudo de estimação, os quais foram KLa, μ_H , μ_{H1} , μ_{H2} , μ_{A1} , μ_{A2} , Y_{Haer} , Y_{Hanox} , Y_{A1} , Y_{A2} , Y_{A3} , K_{NH} , K_S , K_O e St_s .

As variáveis a serem analisadas neste trabalho são composto amoniacal (NH_4), nitrito (NO_2), nitrato (NO_3), substrato (S_s) e oxigênio (O_2). Os dados experimentais utilizados nas execuções do programa foram obtidos do artigo de Bournazou *et al.* (2010), bem como as condições iniciais dos mesmos, Tabela 3.

Após definir os parâmetros a serem estimados, foram limitadas as faixas de busca para realização das estimações.

Tabela 1: Taxas cinéticas retiradas do modelo de Bournazou.

Processo		Taxa cinética
1	Crescimento aeróbico	$\mu_H \frac{S_S}{S_S + K_S} \frac{S_O}{S_O + K_{O1}} \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH}} X_H$
2	Crescimento aeróbico X_{ns}	$\mu_{A1} \frac{S_O}{S_O + K_O} \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH}} X_{ns}$
3	Crescimento aeróbico X_{nb}	$\mu_{A2} \frac{S_{NO2}}{S_{NO2} + K_{NO21}} \frac{S_{NO2}}{S_{NO2} + K_{NO21}} \frac{S_O}{S_O + K_O} \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH}} X_{nb}$
4	Crescimento anóxico NO_3^-	$\mu_{H1} \frac{S_S}{S_S + K_{S1}} \frac{S_{NO3}}{S_{NO3} + K_{NO3}} \frac{K_{O21}}{K_{O21} + S_O} \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH}} X_H$
5	Crescimento anóxico NO_2^-	$\mu_{H2} \frac{S_S}{S_S + K_{S2}} \frac{S_{NO2}}{S_{NO2} + K_{NO2}} \frac{K_{O22}}{K_{O22} + S_O} \frac{S_{NH4}}{S_{NH4} + K_{NH}} X_H$

Tabela 2: Matriz estequiométrica do modelo Bournazou.

Variável Processo	Ss	X _H	X _{ns}	X _{nb}	S _O	S _{NH4}	S _{NO2}	S _{NO3}
1	$\frac{-1}{Y_{Haer}}$	1	-	-	$KLa(S_O^* - S_O) - \frac{1 - Y_{Haer}}{Y_{Haer}}$	$-\left(\frac{-iNSS}{Y_{Haer}} + iNB\right)$	-	-
2	-	-	1	-	$\frac{-3,43}{Y_{A1} - 1}$	$-\left(\frac{1}{Y_{A1}} + iNB\right)$	$\frac{1}{Y_{A1}}$	-
3	-	-	-	1	$\frac{-1,14}{Y_{A2} - 1}$	-iNB	$\frac{-1}{Y_{A2}}$	$\frac{1}{Y_{A3}}$
4	$\frac{-1}{Y_{Hanox}}$	-	-	-	-	$-\left(\frac{-iNSS}{Y_{Hanox}} + iNB\right)$	$\frac{1 - Y_{Hanox}}{1,14Y_{Hanox}}$	$\frac{1 - Y_{Hanox}}{1,14Y_{Hanox}}$
5	$\frac{-1}{Y_{Hanox}}$ (1 + S _{ts})	1	-	-	-	$\left(\frac{-iNSS}{Y_{Hanox}} + iNB\right)$	$-\frac{1 - Y_{Hanox}}{1,14Y_{Hanox}}$	-
		-	-	-	-	-	-	-

Tabela 3: Condições iniciais utilizadas na estimação dos parâmetros.

Variáveis	Condições Iniciais
Ss	1000 gDQO/m ³
X _H	500 gDQO/m ³
X _{ns}	100 gDQO/m ³
X _{nb}	100 gDQO/m ³
NH ₄ ⁺	50 gN/m ³
NO ₃ ⁻	7 gN/m ³
NO ₂ ⁻	2,5 gN/m ³
O ₂	5 gO ₂ /m ³

Na Tabela 4, encontra-se as faixas que possibilitaram os melhores resultados para o modelo. Estas faixas de busca foram definidas com base nos valores destes parâmetros encontrados na literatura. Esta definição foi realizada com o intuito de encontrar a faixa que resultasse na minimização da função objetivo, como também resultados que descrevessem melhor o modelo.

Tabela 4: Valores de faixas de busca utilizados.

Parâmetros	Faixa de busca					
	1	2	3	4	5	6
μ_H	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;2,1·10 ⁻²]	[0;2,1·10 ⁻²]	[0;2,1·10 ⁻²]	[0;2,1·10 ⁻²]
μ_{A1}	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]	[0;1,1·10 ⁻²]
μ_{A2}	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻⁴]	[0;3·10 ⁻⁴]
μ_{H1}	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]	[0;3,3·10 ⁻³]	[0;3,5·10 ⁻³]	[0;4,3·10 ⁻³]	[0;4·10 ⁻³]
μ_{H2}	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]	[0;2·10 ⁻³]
K_{NH}	[0;3·10 ⁻¹]	[0;3·10 ⁻¹]	[0;3·10 ⁻¹]	[0;3·10 ⁻¹]	[0;3·10 ⁻¹]	[0;3·10 ⁻¹]
K_S	[0;12]	[0;12]	[0;12]	[0;12]	[0;12]	[0;12]
K_O	[0;1]	[0;1]	[0;1]	[0;1]	[0;1]	[0;1]
K_{La}	[0;60]	[0;65]	[0;65]	[0;65]	[0;65]	[0;65]
Y_{Hanox}	[0;9·10 ⁻²]	[0;1·10 ⁻¹]	[0;1·10 ⁻¹]	[0;1·10 ⁻¹]	[0;1·10 ⁻¹]	[0;1·10 ⁻¹]
Y_{Haer}	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]
Y_{A1}	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]	[0;2·10 ⁻¹]
Y_{A2}	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]	[0;3·10 ⁻³]
Y_{A3}	[0;6·10 ⁻³]	[0;6·10 ⁻³]	[0;6·10 ⁻³]	[0;6·10 ⁻³]	[0;6·10 ⁻³]	[0;6·10 ⁻³]
Sts	[0;7·10 ⁻¹]	[0;7·10 ⁻¹]	[0;2]	[0;7·10 ⁻¹]	[0;7·10 ⁻¹]	[0;7·10 ⁻¹]

Devido a característica da busca aleatória do PSO, para cada faixa de busca escolhida foram executadas 10 estimações, pois a cada estimação um novo conjunto de valores era obtido. Cada um destes conjuntos de respostas foram inseridos na implementação do modelo matemático de Bournazou *et al.* (2010) para que fossem realizadas as análises dos perfis das variáveis.

Segundo Song *et al.* (2012), a concentração de oxigênio e a dinâmica de reação do nitrogênio no processo estão diretamente relacionados. Devido a isto, após as estimações, foi

realizada a análise de sensibilidade para os parâmetros escolhidos. A função sensibilidade relativa foi definida segundo a Equação 1.

$$S(F; \xi) = \frac{F(1+\Delta \cdot \xi) - F(\xi)}{F(\xi)} \quad (1)$$

sendo Δ um incremento de 10^{-4} e ξ o valor do parâmetro estimado.

A análise de sensibilidade do modelo para a variável O_2 apresentou valores maiores que 65% para todos os parâmetros estimados. Comprovando assim, a existência da alta dependência do processo em função concentração desta variável. Para o NH_4 e NO_3 a sensibilidade do modelo variou entre 3% e 18%, apenas o parâmetro μ_{H1} apresentou sensibilidade em torno de 1%. Para as demais variáveis a sensibilidade foi aproximadamente 0%. Como não houve a possibilidade de ajustar todas as variáveis com uma única faixa de busca e, sabendo que é necessário para o processo o ajuste adequado do perfil de O_2 , a definição dos valores para cada parâmetro iniciou-se a partir desta variável.

Após encontrar o conjunto de valores que permitiu o ajuste do O_2 , os parâmetros que estavam relacionados a esta variável foram mantidos constantes. Afim de encontrar um conjunto de valores que ajustassem todas as variáveis, os demais parâmetros foram sendo modificados de acordo com os resultados encontrados utilizando as faixas de busca escolhidas.

Nas estimações, as faixas de busca dos parâmetros que já haviam sido mantidos constantes não eram alteradas. Apenas as faixas dos parâmetros que ainda estavam sendo estimados foram modificadas. A cada nova simulação com o modelo, eram mantidos constantes aqueles parâmetros que já haviam ajustado o O_2 e alterado os demais.

3. RESULTADOS

Na busca para encontrar resultados que descrevessem o modelo matemático de modo mais preciso e adequado, foram realizadas diversas estimações com o programa ESTIMA. Para a realização da busca confiável de valores dos parâmetros utilizados, o algoritmo foi programado com 1000 interações e 20 partículas, com restrição de passo de 1,5, nível de confiança de 95%.

Os valores dos parâmetros encontrados com a primeira estimacão da segunda faixa de busca, possibilitaram que o perfil do O_2 , NH_4 e S_S se aproximassem dos dados experimentais. Assim, para os parâmetros comuns entre as variáveis (Y_{Haer} , Y_{A1} , K_{NH} , K_S , K_O , μ_{A1} , μ_{A2}) e o KL_a , os valores encontrados com esta faixa foram mantidos constantes. Entretanto, a variável X_H não apresentou um perfil adequado, por isso o parâmetro comum a todos (μ_H) foi considerado para a próxima estimacão. A primeira estimacão da terceira faixa, possibilitou encontrar um valor de μ_H que melhor descreveu todas as variáveis relacionadas com este parâmetro, sendo assim, foi este o valor mantido constante para as próximas simulações do modelo.

Como os perfis de NO_2 e NO_3 estão diretamente relacionados com o NH_4 e, sendo S_S a fonte de NH_4 , o valor do parâmetro comum entre NO_2 , NO_3 e S_S (Y_{Hanox}) obtido através da segunda faixa (primeira estimacão) foi mantido constante dado que o S_S possuía uma boa aproximação com os dados experimentais utilizando-se dos valores obtidos com esta faixa.

A única variável perfeitamente ajustada com os resultados dos parâmetros para a primeira faixa foi o O_2 . Por este motivo, afim de reduzir as simulações para o NO_2 , sendo o parâmetro comum entre as duas variáveis o Y_{A2} , para este foi utilizado o valor encontrado

com a primeira faixa (terceira estimaco) e mantido constante para as prximas simulaes. Com isto, a varivel NO_2 pde se aproximar dos dados experimentais.

Com a primeira estimaco da quarta faixa foi possvel alcanar um bom ajuste para a varivel NO_3 . Entretanto, a varivel NO_2 ainda no estava bem ajustada, por isso foi realizada mais estimaces com uma quinta faixa de busca. Com isso, foi possvel encontrar na decima estimaco com esta faixa, um valor para μ_{H_2} que resultou numa boa aproximao. Por fim, utilizou-se de uma sexta faixa de busca afim de encontrar um valor para St_s que melhor ajustasse o S_s . Na quarta estimaco, foi possvel encontrar um valor para este parmetro que melhor descreveu esta varivel.

Os ajustes das variveis foram possveis utilizando os valores dos parmetros para $\mu_H = 1,677 \cdot 10^{-2} h^{-1}$, $\mu_{A1} = 8,944 \cdot 10^{-3} h^{-1}$, $\mu_{A2} = 1,445 \cdot 10^{-2} h^{-1}$, $\mu_{H1} = 2,123 \cdot 10^{-3} h^{-1}$, $\mu_{H2} = 2,340 \cdot 10^{-4} h^{-1}$, $K_{NH} = 8,997 \cdot 10^{-3} gNm^{-3}$, $K_S = 5,664 \cdot 10^{-1} gNm^{-3}$, $K_O = 4,758 \cdot 10^{-1} gNm^{-3}$, $KL_a = 65 h^{-1}$, $Y_{Hanox} = 9,992 \cdot 10^{-2} gDQOgDQO^{-1}$, $Y_{Haer} = 2,881 \cdot 10^{-2} gDQOgDQO^{-1}$, $Y_{A1} = 8,332 \cdot 10^{-2} gDQOgN^{-1}$, $Y_{A2} = 2,843 \cdot 10^{-3} gDQOgN^{-1}$, $Y_{A3} = 4,702 \cdot 10^{-3} gDQOgN^{-1}$, $St_s = 6,403 \cdot 10^{-2}$. Aps a execuo com os valores apresentados, observou-se que para os valores de μ_{A2} e μ_{H1} encontrados no artigo de Bournazou, o modelo apresentou melhores resultados do que os encontrados com a estimaco, quando em conjunto com os demais parmetros estimados.

Novak e Hovart (2012), demonstraram a influncia direta que o perfil do oxignio exerce durante o processo do tratamento de efluente. Devido a isto, a adequao desta varivel deve ocorrer da maneira mais precisa possvel. A Figura 1, descreve os perfis das concentraes de NH_4 e O_2 . Nesta figura, pode-se observar que os parmetros estimados para o modelo matemtico utilizado representou satisfatoriamente ambos os compostos. Percebe-se que tais parmetros possibilitaram uma melhor aproximao com os dados experimentais do que aqueles parmetros encontrados no prprio artigo de Bournazou *et al.* (2010).

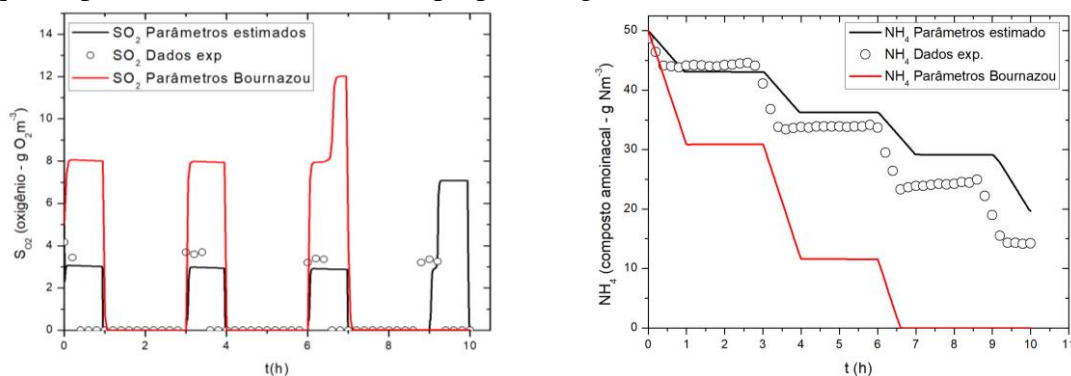


Figura 1: Comparao entre os valores estimados e dos dados experimentais da concentrao do oxignio (A) e composto amoniacal (B) ao longo do tempo de operao

A Figura 2 destaca os perfis de concentrao de NO_2 e NO_3 . Analisando estes perfis,  possvel perceber que apesar de o modelo matemtico no acompanhar perfeitamente os dados experimentais, os resultados encontrados so considerados coerentes, pois acompanha o perfil dos mesmos.  possvel perceber claramente que os parmetros estimados proporcionaram um ajuste mais satisfatrio em comparao com os parmetros apresentados no artigo de Bournazou *et al.* (2010). Kaelin *et al.* (2010), em seu estudo com o ASM3 demonstram que o comportamento oscilatrio destas variveis est diretamente relacionado com a quantidade de substrato presente no processo.

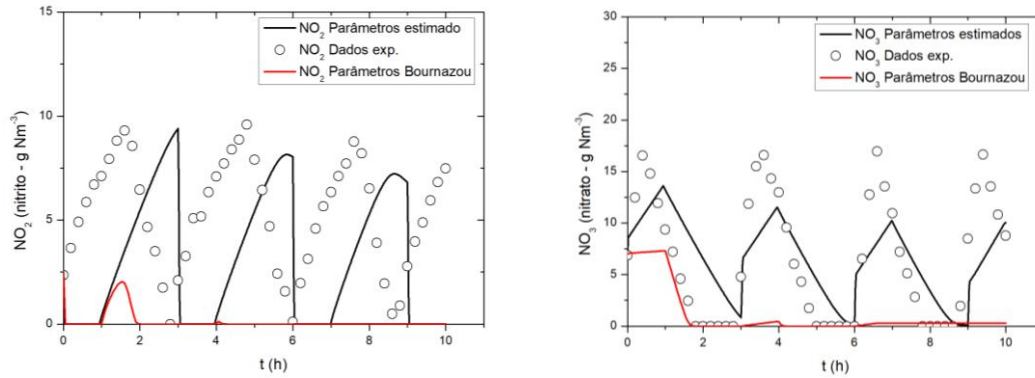


Figura 2: Comparação entre os valores estimados e dos dados experimentais da concentração do nitrito (A) e nitrato (B) ao longo do tempo de operação.

Na Figura 3 estão representados os perfis de S_S e X_H , ambos se comportaram satisfatoriamente. Nota-se que o modelo matemático acompanhou os dados experimentais. Mesmo demonstrando uma razoável distância entre modelo e dados experimentais no perfil do S_S , é notável que existe a similaridade entre os perfis. Estas duas variáveis estão diretamente relacionadas, ao passo que o substrato é consumido durante o processo, a biomassa é formada, o que demonstra a necessidade dos parâmetros inerentes a estas duas variáveis estejam adequadamente ajustados. Nota-se que os valores dos parâmetros apresentados no artigo, ajustam satisfatoriamente o modelo. Entretanto, observa-se que, com os parâmetros estimados este ajuste obteve uma maior proximidade.

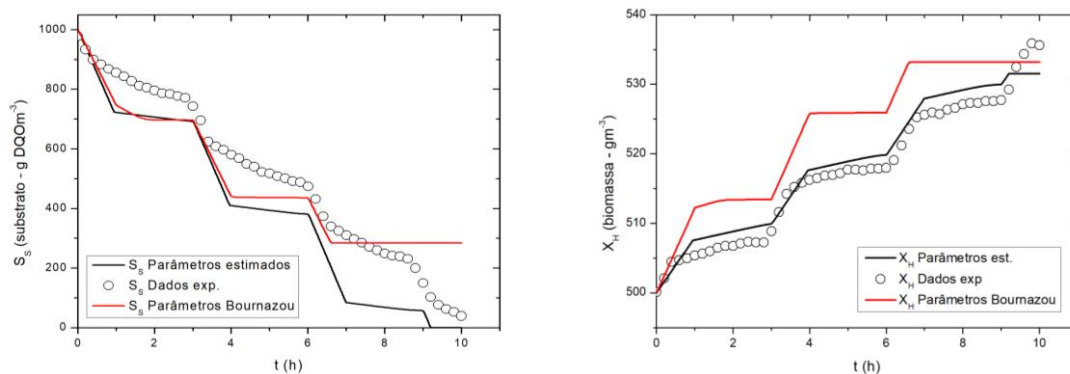


Figura 3: Comparação entre os valores estimados e dos dados experimentais da concentração do substrato (A) e biomassa (B) ao longo do tempo de operação.

4. CONCLUSÕES

A dificuldade para a definição dos parâmetros a serem estimados é uma barreira a ser ultrapassada, pois o sucesso da estimação está diretamente relacionada com essa escolha. A quantidade de parâmetros também é um fator relevante em razão de que sendo alta esta quantidade há um aumento considerável do erro durante as estimações, além da alta probabilidade de correlação entre os parâmetros. Isto foi algo que precisou ser ponderado, pois há uma grande quantidade de parâmetros no modelo matemático estudado. A definição das faixas de busca também é um fator limitante, visto que a busca para os valores dos parâmetros fica limitada as mesmas. Devido a diversidade de valores encontrados na literatura para estes parâmetros, as faixas de busca para este estudo foram limitadas de acordo com os valores encontrados no artigo de Bournazou *et al.* (2010) e Kaelin *et al.* (2009), contudo, com um alto intervalo para a faixa de busca dos parâmetros eram gerados altos erros.

A provável causa da falta de precisão dos ajustes entre modelo e dados experimentais pode ser direcionada a alta quantidade de parâmetros correlacionados. Desta maneira, a compreensão da interação entre os parâmetros, além da possibilidade de existência de mínimos locais, são pontos a serem explorados que podem contribuir para o aperfeiçoamento das estimações.

As simulações realizadas neste trabalho demonstram que é possível através da estimação de parâmetros determinar conjuntos de valores que descrevam um mesmo modelo e, desta forma, alcançar um melhor ajuste das variáveis estudadas, bem como realizar otimizações através das estimações.

Agradecimentos

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro para o desenvolvimento do mestrado acadêmico.

REFERÊNCIAS

- Bournazou, M. N. C.; Arellano-Garcia, H.; Wozny, G.; Lyberatos, G.; Kravaris, C. (2010), Model reduction of the ASM3 extended for two-step nitrification. IFAC Proceedings Volumes. Ed. 6, v. 43, p. 60-65.
- Du, X.; Wang, J.; Jegatheesan, V.; Shi, G. (2018), Parameter estimation of activated sludge process based on an improved cuckoo search algorithm. *Bioresource Technology*. v. 248, p. 447-456.
- Fundação Nacional de Saúde (FUNASA) (2004), Manual de Saneamento – Engenharia de Saúde Pública: orientações técnicas. Ed. 3, p. 11.
- Kaelin, D.; Manser, R.; Rieger, L.; Eugster, J.; Rottermann, K.; Siegrist, H. (2009), Extension of ASM3 for two-step nitrification and denitrification and its calibration and validation with batch tests and pilot scale data. *Water research*. Ed. 6, v. 43, p.1680-1692.
- Man, Y.; Shen, W.; Chen, X.; Long, Z.; Pons, M-N. (2017), Modeling and simulation of the industrial sequencing batch reactor wastewater treatment process for cleaner production in pulp and paper mills. *Journal of Cleaner Production*.
- Mendes, A.; Mendes, H.; Anjos, D.; Lopes, V. (2016), Qualidade das águas do Rio Vieira após implantação da estação de tratamento de efluentes. *Revista agroindustrial*, Porto Alegre, v. 8, n. 2, p. 25-33.
- Ministério das Cidades – Secretaria Nacional de Saneamento Ambiental (2016), Sistema Nacional de Informações sobre Saneamento: Diagnóstico dos Serviços de Água e Esgotos. Brasília, fev. 2018.
- Novak, M.; Hovart, P. (2012), Mathematical modelling and optimisation of a waste water treatment plant by combined oxygen electrode and biological waste water treatment model. *Applied Mathematical Modelling*. v. 36, p. 3813-3825.
- Santa Cruz, J. A.; Mussati S. F.; Scenna N. J.; Germaey, K. V.; Mussati, M. C. (2016), Reaction invariant-based reduction of the activated sludge model ASM1 for batch applications. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. v. 4, p. 3654-3664.
- Wu, X.; Yang, Y.; Wu, G.; Mao, J.; Zhou, T. (2016), Simulation and optimization of a coking wastewater biological treatment process by activated sludge models (ASM). *Journal of Environmental Management*. v. 165, p. 235-242.

APPLICATION OF THE PSO FOR THE ESTIMATION OF PARAMETERS OF AN EFFLUENT TREATMENT STATION

Abstract. The levels of organic matter and nutrients present in the biological effluents need to be reduced, since these contribute directly to eutrophication among other damages in the water bodies. In an Effluent Treatment Station (ETE), the activated sludge system is the most applied biological process around the world. In this work, the study of a mathematical model used in ETE, known as ASM - Activated Sludge Model, was carried out, in order to estimate the main parameters of this model. The model used in this work was proposed by Bournazou and implemented in FORTRAN, solved with the DASSL subroutine (computational code for solving algebraic-differential equations) and the kinetic parameters were estimated through the ESTIMA program associated with the Particle Swarm Optimization (PSO) algorithm. The data used for the estimation were concentrations of the species of interest to be analyzed obtained in the literature, NH_4 , NO_2 , NO_3 , S_s , X_H and O_2 . Oxygen was adjusted to be inserted into the process every 3 hours during the treatment process time, which was 10h. Despite the large number of parameters to be estimated, the results found presented good estimates for the mathematical model studied, adjusting with good accuracy in relation with those reported in literature.

Keywords: effluent treatment, activated sludge, ASM, estimation.