

Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Instituto de Pesquisas Hidráulicas
Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental

Antônio Carlos de Oliveira Martins Júnior

**AVALIAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS DO MODELO ASM1
APLICADAS À SIMULAÇÃO DE LODOS ATIVADOS COM DADOS DE
MONITORAMENTO DE ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE ESGOTO DOMÉSTICO
DE GRANDE PORTE**



Porto Alegre

2021

Antônio Carlos de Oliveira Martins Júnior

**AVALIAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS DO MODELO ASM1
APLICADAS À SIMULAÇÃO DE LODOS ATIVADOS COM DADOS DE
MONITORAMENTO DE ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE ESGOTO DOMÉSTICO
DE GRANDE PORTE**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental pelo Programa de Pós-graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do Instituto de Pesquisas Hidráulicas da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Orientador: Prof. Dr. Antônio Domingues Benetti.

Coorientadora: Profa. Dra. Maria Cristina de Almeida Silva.

Porto Alegre

2021

CIP - Catalogação na Publicação

Martins Júnior, Antônio Carlos de Oliveira

Avaliação e otimização de parâmetros do modelo ASM1 aplicadas à simulação de lodos ativados com dados de monitoramento de Estação de Tratamento de Esgoto Doméstico de grande porte / Antônio Carlos de Oliveira Martins Júnior. -- 2021.

151 f.

Orientador: Antônio Domingues Benetti.

Coorientadora: Maria Cristina de Almeida Silva.

Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Porto Alegre, BR-RS, 2021.

1. modelagem matemática. 2. calibração sistemática. 3. análise de sensibilidade. 4. metodologia de superfície de resposta. I. Benetti, Antônio Domingues, orient. II. Silva, Maria Cristina de Almeida, coorient. III. Título.

Elaborada pelo Sistema de Geração Automática de Ficha Catalográfica da UFRGS com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Antônio Carlos de Oliveira Martins Júnior

**AVALIAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE PARÂMETROS DO MODELO ASM1
APLICADAS À SIMULAÇÃO DE LODOS ATIVADOS COM DADOS DE
MONITORAMENTO DE ESTAÇÃO DE TRATAMENTO DE ESGOTO DOMÉSTICO
DE GRANDE PORTE**

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental pelo Programa de Pós-graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do Instituto de Pesquisas Hidráulicas da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Porto Alegre, 9 de julho de 2021

Prof. Dr. Antônio Domingues Benetti – IPH/UFRGS
Orientador

Profa. Dra. Maria Cristina de Almeida Silva – IPH/UFRGS
Co-orientadora

Prof. Dr. José Carlos Alves Barroso Júnior – Faculdade Dom Bosco
Examinador

Prof. Dr. Fernando Mainardi Fan – IPH/UFRGS
Examinador

Prof. Dr. Gino Roberto Gehling – IPH/UFRGS
Examinador

***Aos meus sobrinhos, que sempre
possam valorizar a educação em suas
vidas.***

AGRADECIMENTOS

Heloísa e Antônio Carlos, meus pais, que sempre acreditaram e apoiaram de diversas formas todos os meus sonhos. Minhas avós, Eni e Vani, que apesar de sofrerem com a saudade, não questionam minhas escolhas. Elas e sua experiência de vida são minha principal orientação. Nathalia, minha parceira de vida, que persistiu em superar quase 2 mil quilômetros e longos meses de espera. Ela dividiu comigo muitos momentos de ansiedade e de alegria. Foi minha companhia para explorar o Sul do Brasil. Meu irmão, primas e primos, tias e tios, que acompanharam esta trajetória de idas e vindas e estiveram ao meu lado, mesmo que distantes. Clarice, Brian, Antônio e Théo, sobrinhos que chegaram durante o mestrado e me motivam a acreditar na humanidade e na educação. Grandes e verdadeiros amigos de Governador Valadares, de BH, de Porto Alegre e de outros lugares do Brasil e do mundo, os quais mantêm contato e compartilham comigo muitas conquistas e dificuldades.

Professor Antônio Benetti, que me acolheu desde o início e me ensinou com sua tranquilidade e sensatez. Professora Maria Cristina, muito além de coorientadora, foi amiga e esteve disposta a fazer a diferença no meu trabalho.

Aos superamigxs e colegas do PPGRHSA e do NESA que foram fundamentais para que o meu aprendizado e a evolução da minha pesquisa acontecessem. À biblioteca, LABSAN, secretaria, administração, transporte, RU, SEDETEC e outros setores do IPH e da UFRGS que me proporcionaram momentos de intensa e única experiência acadêmica.

Ao fomento da CAPES, indispensável na vida do pesquisador brasileiro.

Ao apoio do DMAE-POA e do Allan Guedes da ETE São João Navegantes, que forneceram suporte técnico suficiente para a realização deste estudo. À Monique Tatsch pelas importantes dicas e recomendações sobre a modelagem. Ao NAE/UFRGS, especialmente Profa. Stela Castro e Mariana Garcia, pelo suporte no desenvolvimento da Metodologia de Superfície de Resposta. Jeremy Dudley e a comunidade do *WRc STOAT as Freeware* que avançam as barreiras do conhecimento acerca da modelagem matemática e simulação.

À banca de avaliação, professores Fernando Fan, Gino Gehling e José Carlos Barroso Júnior, pelas contribuições finais à pesquisa realizada.

Finalmente, sou feliz por ter conhecido as terras do Rio Grande do Sul e experimentado a cultura gaúcha em sua essência.

Nós somos parte da Terra e ela é parte de nós.

(Chefe Seattle)

RESUMO

A universalização do tratamento de esgoto no Brasil ainda é um grande desafio. A modelagem matemática pode contribuir com o avanço científico e técnico do tratamento de esgotos com lodos ativados (LA), processo amplamente empregado em Estações de Tratamento de Efluentes (ETE) no país. Este estudo ofereceu uma configuração de parâmetros cinéticos e estequiométricos ótimos do modelo ASM1 para a modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical. O processo de LA da ETE-SJNV foi modelado com ASM1, *Version 3* e o simulador STOAT©. Dados médios de monitoramento (2018 e 2019) foram usados após o tratamento de registros ausentes e censurados e a avaliação de *outliers*. Adotaram-se relações teóricas no fracionamento da composição do afluente, padrão de simulação sinusoidal (amplitude=30%) e o descarte do LA com tempo de bombeamento variável. Os parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 foram avaliados e otimizados com análise de sensibilidade e Metodologia de Superfície de Resposta (MSR), visando erro mínimo de previsão para as variáveis alvo da modelagem: SST, DQO e NH₃ efluentes. Na simulação inicial foram obtidos altos erros de previsão (SST: -57,47%; DQO: -45,52%; e NH₃: -88,61%), que justificaram a calibração e validação do ASM1. Foram identificados seis parâmetros sensíveis para o ASM1: Y_H , Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA} . Y_H afetou principalmente SST e DQO e os outros parâmetros afetaram NH₃. As previsões dos modelos de regressão (MSR) e das simulações apresentaram forte correlação ($R^2 > 97\%$). Os valores ótimos estimados foram: Y_H : 0,9903; Y_A : 0,2575; μ_A : 0,012; K_{NH} : 1,4; b_A : 0,0054; e k_{OA} : 0,4536. O ASM1 foi calibrado gerando previsões precisas de SST, DQO e NH₃ efluentes em condições específicas de modelagem. Na validação foram obtidos altos erros de previsão para SST e DQO, que estão relacionados com o aumento de Y_H pela otimização. Os parâmetros ótimos, principalmente os que afetaram as previsões de NH₃, são base para explorar aplicações do ASM1 na modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical. Recomenda-se avaliar o valor ótimo determinado para Y_H , a simulação dinâmica e diferentes amplitudes, métodos de descarte de LA e períodos de simulação.

Palavras-chave: modelagem matemática, calibração sistemática, análise de sensibilidade, metodologia de superfície de resposta.

ABSTRACT

The universalization of wastewater treatment in Brazil is still a big challenge. Mathematical modeling may contribute to the scientific and technical advancement of wastewater treatment with activated sludge (AS), a process widely used in Wastewater Treatment Plants (WWTP) in the country. This study provided a set of optimal kinetic and stoichiometric parameters of ASM1 model for modelling using standard monitoring data of large-scale WWTP located in Brazil in subtropical climate region. WWTP-SJNV's AS process was modeled with ASM1, Version 3 and the STOAT© simulator. Average monitoring data (2018 and 2019) were used after treating missing and censored records and evaluating outliers. The study adopted theoretical ratios for the influent composition fractionation, sinusoidal simulation pattern (amplitude=30%) and variable pumping time for the Waste AS (WAS) wastage. The kinetic and stoichiometric parameters of the ASM1 were evaluated and optimized through sensitivity analysis and Response Surface Methodology (RSM), aiming at minimum prediction errors for the modeling target variables: effluent TSS, COD and NH₃. The initial simulation resulted in high prediction errors (TSS: -57.47%; COD: -45.52%; and NH₃: -88.61%), which justified ASM1 calibration and validation. Six sensitive parameters were identified for ASM1: Y_H , Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A and k_{OA} . Y_H mainly affected TSS and COD and the other parameters affected NH₃. Predictions of the regression models (RSM) and the simulations presented strong correlation ($R^2 > 97\%$). The estimated optimal values were: Y_H : 0.9903; Y_A : 0.2575; μ_A : 0.012; K_{NH} : 1.4; b_A : 0.0054; and k_{OA} : 0.4536. ASM1 was calibrated to provide accurate predictions of effluent TSS, COD and NH₃ regarding specific modeling conditions. Validation resulted in high predictions errors for TSS and COD, which are related to Y_H increase due to the optimization. The optimal parameters, mainly the ones which affected NH₃ predictions, are base for studies on ASM1 modelling using standard monitoring data of large-scale WWTP located in Brazil in subtropical climate region. It is recommended to evaluate the optimal value determined for Y_H , the dynamic simulation and different amplitudes, WAS wastage methods and simulation periods.

Keywords: mathematical modelling, systematic calibration, sensitivity analysis, response surface methodology.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 4-1 – Esquema do processo de lodos ativados.....	25
Figura 4-2 – Esquema de metodologia para calibração sistemática de parâmetros do modelo matemático ASM. MSRM: Metodologia de Superfície de Resposta Múltipla.....	42
Figura 4-3 – Resultado da análise de sensibilidade para determinação dos principais parâmetros do modelo ASM1 em relação à DQO efluente.....	46
Figura 4-4 – Coeficientes de sensibilidade de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM3 para resultados de DQO gerados pelo modelo.....	48
Figura 5-1 – (a) Esquema e (b) vista aérea do sistema de tratamento da ETE-SJNV.....	62
Figura 5-2 – Etapas da calibração sistemática e otimização de parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1, aplicadas à modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. As cores representam a relação das etapas do trabalho com: a ETE de estudo (azul), a modelagem matemática e simulação computacional do processo de tratamento (amarelo) e a modelagem estatística (verde). Os principais objetivos das etapas estão em negrito.....	63
Figura 6-1 – Registros (mg/l) de (a) afluente e (b) efluente de parâmetros monitorados pela ETE-SJNV em 2018, referentes ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. <i>Outliers</i> identificados com o símbolo “X”. A descontinuação da linha representa ausência de registros da variável em determinada data.....	84
Figura 6-2 – Vazão de esgoto tratado monitorada pela ETE-SJNV em 2018, referente ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. Registros diários de vazão, exceto para janeiro (10 registros) e fevereiro (um registro).....	85
Figura 6-3 – Variação do pH (efluente - afluente) no tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV ao longo de 2018. <i>Outlier</i> identificado nos meses com caixa cheia. Valor do <i>outlier</i> no pH efluente em vermelho.....	86
Figura 6-4 – Registros (mg/l) de (a) afluente e (b) efluente de parâmetros monitorados pela ETE-SJNV em 2019, referentes ao tratamento de esgoto	

sanitário com lodos ativados. <i>Outliers</i> identificados com o símbolo “X”. A descontinuação da linha representa ausência de registros da variável em determinada data.	87
Figura 6-5 – Vazão de esgoto tratado monitorada pela ETE-SJNV em 2019, referente ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. Registros diários de vazão.	89
Figura 6-6 – Variação do pH (efluente - afluente) no tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV ao longo de 2019. <i>Outlier</i> identificado nos meses com caixa cheia. Valor do <i>outlier</i> no: pH afluente em verde; pH efluente em vermelho.	90
Figura 6-7 – Registros médios do afluente (mg/l) das variáveis de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Comparação entre registros obtidos no presente estudo para os anos de 2018 e 2019, e registros de outros períodos apresentados na literatura.	93
Figura 6-8 – Registros médios do efluente (mg/l) das variáveis de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Comparação entre registros obtidos no presente estudo para os anos de 2018 e 2019, e registros de outros períodos apresentados na literatura.	94
Figura 6-9 – Estrutura do processo de tratamento de esgoto com lodos ativados no simulador computacional.	97
Figura 6-10 – Previsões do efluente da ETE-SJNV gerados pela simulação inicial. (a) Comparação de diferentes amplitudes (10-70%) adotadas na simulação utilizando o padrão sinusoidal com os valores médios registrados na ETE e com os resultados da simulação com padrão constante. (b) Diferença entre as previsões da simulação sinusoidal e as previsões da simulação constante, para diferentes valores de amplitude no padrão sinusoidal.	101
Figura 6-11 – Previsões das médias das variáveis alvo no efluente geradas pelas simulações iniciais do processo de lodos ativados da ETE-SJNV: (a-c) perfil do esgoto afluente utilizando padrão sinusoidal (oscilações durante o processo de tratamento) com diferentes amplitudes e (d) perfil do esgoto afluente utilizando padrão constante.	103

Figura 6-12 – Coeficientes de sensibilidade de parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 identificados na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.....	106
Figura 6-13 – Efeitos Padronizados dos fatores (parâmetros sensíveis do ASM1) dos modelos de regressão gerados para SST e DQO efluentes na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).....	112
Figura 6-14 – Superfícies de Resposta [do erro de] da previsão de SST efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Relações entre variações nos valores do rendimento heterotrófico (Y_H) e dos demais parâmetros sensíveis do ASM1. Intervalos próximos ao zero são considerados favoráveis por representarem mínimo erro de previsão. Valores fixados no nível de teste central.	113
Figura 6-15 – Superfícies de Resposta da [erro de] previsão de DQO efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Relações entre variações nos valores do rendimento heterotrófico (Y_H) e dos demais parâmetros sensíveis do ASM1. Intervalos próximos ao zero são considerados favoráveis por representarem mínimo erro de previsão. Valores fixados no nível de teste central.	114
Figura 6-16 – Efeitos Padronizados dos fatores (parâmetros sensíveis do ASM1) do modelo de regressão gerado para NH_3 efluente na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).	117
Figura 6-17 – Superfícies de Resposta [do erro de] da previsão de amônia efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Interações entre fatores significativas conforme ANOVA. Erro de previsão próximo ao zero é considerado favorável por representar previsão aproximada ao observado na ETE. Valores fixados no nível de teste central.	119
Figura 6-18 – Erros de previsão da concentração efluente das variáveis alvo. Correlação entre erros estimados pelo modelo de regressão e pela simulação com o ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.....	121

Figura 6-19 – Solução da otimização dos parâmetros sensíveis do ASM1 para a modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Valores ótimos para parâmetros sensíveis em vermelho. Valores ótimos para os erros de previsão das variáveis alvo em azul.....	123
Figura 6-20 – Resultado da simulação de calibração do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores ótimos estimados para os parâmetros sensíveis do ASM1.....	126
Figura 6-21 – Resultado da simulação de validação do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores ótimos estimados para os parâmetros sensíveis do ASM1.....	129

LISTA DE TABELAS

Tabela 4-1 - Valores médios típicos (mg/l) de características físicas e químicas de esgoto sanitário em diversos processos de tratamento com lodos ativados.....	26
Tabela 4-2 – Características dos sistemas de lodos ativados convencional e com aeração prolongada usados para o tratamento de esgoto sanitário.....	27
Tabela 4-3 – Características e quantidades de lodo produzido no sistema de lodos ativados	28
Tabela 4-4 – Padrões de lançamento estabelecidos pela Resolução CONSEMA nº 355/2017 para lançamento de efluentes oriundos de sistemas de tratamento de esgoto sanitário em águas superficiais no Estado do Rio Grande do Sul, Brasil.	31
Tabela 4-5 – Componentes/variáveis usados no modelo ASM1 e sua composição em termos de Carbono (C) e Nitrogênio (N).	34
Tabela 4-6 – Parâmetros físicos para calibração dos modelos de sedimentação do processo de lodos ativados.....	38
Tabela 4-7 – Parâmetros estequiométricos e cinéticos das reações do processo de lodos ativados adotados no modelo ASM1.....	44
Tabela 4-8 – Parâmetros sensíveis do modelo ASM1 identificados com análise de sensibilidade em relação as variáveis de controle do processo de lodos ativados. Variáveis iguais identificadas com cores, independente da etapa de tratamento: azul (SST), laranja (DQO) e amarelo (compostos de nitrogênio).	55
Tabela 4-9 – Dados observados na ETE e resultados de simulações com ASM1 utilizando parâmetros cinéticos e estequiométricos com valores padrão do modelo e com valores otimizados pela MSR.....	57
Tabela 5-1 – Relações teóricas para fracionamento da DQO, sólidos suspensos e nitrogênio aplicadas na modelagem da ETE-SJNV com ASM1.....	73
Tabela 6-1 – Características físicas da ETE-SJNV.....	78
Tabela 6-2 – Quantidade de registros das variáveis avaliadas no banco de dados do monitoramento padrão da ETE-SJNV.	80

Tabela 6-3 – Número de registros de concentrações com valor de efluente maior que afluente (eficiência de remoção negativa) e <i>outliers</i> identificados e descartados para cada variável em 2018 e 2019.....	82
Tabela 6-4 – Estatísticas descritivas dos registros das variáveis avaliadas referentes ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV em 2018 e 2019. CV: coeficiente de variação. Dados de 2018 para calibração e de 2019 para validação do modelo ASM1.	91
Tabela 6-5 – Comparação entre os valores (mg/l) do limite máximo da legislação e a mediana do efluente de cada variável de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. $\alpha=0,05$. Vazão de esgoto tratado >10.000 m ³ /d.....	96
Tabela 6-6 – Parâmetros adotados para descarte de lodo de excesso na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.	98
Tabela 6-7 – Parâmetros de calibração dos modelos matemáticos para simulação inicial. (1) Verificação de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1 que são dependentes da temperatura. (2) Parâmetros de sedimentação estimados pelo STOAT para o modelo Version 3, com base no IVLA _{3,5}	99
Tabela 6-8 – Composição física e química do esgoto afluente para calibração (2018) e validação (2019) do ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV, a partir de valores médios dos registros de monitoramento do processo de tratamento.....	100
Tabela 6-9 – Concentrações (mg/l) das variáveis alvo da modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV aplicando valores padrão de parâmetros do ASM1.	104
Tabela 6-10 – Faixa experimental aplicada no <i>Central Composite Design</i> para simulações de calibração do ASM1.	108
Tabela 6-11 – Valores adotados para parâmetros alternativos nas simulações no ponto central do delineamento experimental.....	110
Tabela 6-12 – Resultados da ANOVA para os modelos de regressão de previsão das variáveis SST e DQO efluentes na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).....	111

Tabela 6-13 – Resultados da ANOVA para o modelo de regressão de previsão da variável NH ₃ efluente na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).	116
Tabela 6-14 – Medidas de precisão e de erro dos modelos de regressão gerados para as variáveis alvo em relação às previsões da simulação.	120
Tabela 6-15 – Erros de previsão (mg/l) obtidos na simulação do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores otimizados para os parâmetros sensíveis do ASM1.....	126
Tabela 6-16 – Concentrações (mg/l) reais e simuladas médias das variáveis alvo da modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.....	128

LISTA DE QUADROS

Quadro 4-1 – Vantagens e limitações da Metodologia de Superfície de Resposta.53

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASM1	<i>Activated Sludge Model N°1</i>
BBD	<i>Box-Behnken Design</i>
CCD	<i>Central Composite Design</i>
DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio
DQO	Demanda Química de Oxigênio
ETE-SJNV	Estação de Tratamento de Esgoto - São João Navegantes
IVLA	Índice Volumétrico do Lodo Agitado
IWA	<i>International Water Association</i>
LDM	Limite de Detecção do Método Analítico
MSR	Metodologia de Superfície de Resposta
SST	Sólidos Suspensos Totais
STOAT©	<i>Sewage Treatment Operation and Analysis over Time</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

Y_H	Rendimento heterotrófico
Y_A	Rendimento autotrófico
f_P	Fração de biomassa produzindo particulados
i_{XB}	Massa de nitrogênio por massa de DQO na biomassa
i_{XP}	Massa de nitrogênio por massa de DQO em produtos da biomassa
μ_H	Crescimento heterotrófico
K_S	Coeficiente de meia saturação para heterotróficos
K_{OH}	Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa heterotrófica
K_{NO}	Coeficiente de meia saturação de nitrato para biomassa heterotrófica denitrificante
b_H	Coeficiente de decaimento endógeno de biomassa heterotrófica
μ_A	Crescimento autotrófico
K_{NH}	Coeficiente de meia saturação de amônia para biomassa autotrófica
K_{OA}	Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa autotrófica
b_A	Coeficiente de decaimento endógeno autotrófico
η_g	Fator de correção para crescimento anóxico de heterotróficas
k_A	Taxa de amonificação
K_h	Taxa específica máxima de hidrólise
K_X	Coeficiente de meia saturação para hidrólise de substrato lentamente biodegradável
η_h	Fator de correção para taxa de hidrólise sob condições anóxicas

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	21
2. OBJETIVOS.....	22
2.1. Geral	22
2.2. Específicos.....	22
3. JUSTIFICATIVA.....	23
4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	24
4.1. Processo de lodos ativados	24
4.1.1. Características do esgoto sanitário.....	25
4.1.2. Principais variáveis do sistema de lodos ativados	26
4.1.3. Produção de lodo.....	27
4.1.4. Controle do processo.....	28
4.1.5. Monitoramento do processo e legislação pertinente.....	30
4.2. Modelagem matemática e simulação computacional de lodos ativados	31
4.2.1. Procedimentos.....	32
4.2.2. ASM1	33
4.2.3. Outros modelos ASM.....	37
4.2.4. Modelos de sedimentação.....	37
4.2.5. STOAT©.....	39
4.3. Calibração sistemática e otimização de parâmetros do ASM1	40
4.3.1. Modelagem dos processos de tratamento.....	42
4.3.2. Parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1.....	43
4.3.3. Análise de Sensibilidade.....	43
4.3.4. Metodologia de Superfície de Resposta (MSR).....	48
4.4. Estudos de referência	53
5. METODOLOGIA	61
5.1. ETE de estudo	61
5.2. Calibração sistemática do modelo ASM1	61
5.2.1. Coleta de dados.....	64
5.2.2. Tratamento dos dados.....	64
5.2.3. Modelagem do processo de lodos ativados.....	67
5.2.4. Análise de Sensibilidade.....	73
5.2.5. Otimização dos parâmetros sensíveis	74
5.3. Validação do modelo ASM1	77

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO	78
6.1. Medidas descritivas do processo de tratamento da ETE de estudo.....	78
6.1.1. Dados coletados	78
6.1.2. Registros ausentes	80
6.1.3. Registros censurados	81
6.1.4. Avaliação de <i>outliers</i>	81
6.1.5. Estatísticas descritivas dos registros	90
6.1.6. Conformidade com a legislação ambiental	96
6.2. Simulação inicial do processo de lodos ativados	97
6.2.1. Verificação dos parâmetros dos modelos matemáticos.....	98
6.2.2. Perfil do esgoto bruto.....	99
6.3. Identificação dos parâmetros sensíveis do ASM1	104
6.4. Simulações de calibração do ASM1	108
6.5. Modelos de regressão individuais	109
6.6. Adequação dos modelos de regressão	120
6.7. Estimativa de parâmetros ótimos do ASM1	122
6.8. Validação do modelo ASM1	128
7. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	132
REFERÊNCIAS.....	135
APÊNDICE 1 – <i>Outliers</i> identificados.....	142
APÊNDICE 2 – Análise de sensibilidade.....	144
APÊNDICE 3 – Simulações de calibração	145
ANEXO 1 – Matriz do ASM1	150

1. INTRODUÇÃO

Os brasileiros geram em um dia mais de nove toneladas de esgoto e menos da metade da população (43%) possui esgoto coletado e tratado. Cerca de 18% dos habitantes têm esgoto coletado, mas não tratado; e 27% não são atendidos com coleta e tratamento de esgoto (ANA, 2017). Essas são evidências de quanto o setor de tratamento de esgotos precisa avançar no Brasil.

Entre as alternativas adotadas em Estações de Tratamento de Esgotos (ETE), se pode citar o processo de lodos ativados. Esta tecnologia existe há mais de 100 anos e consiste no processo de tratamento biológico mais comum no mundo. Lodos ativados é utilizado para o tratamento de efluentes sanitários e industriais, com aplicação em pequena escala para residências, até em enormes plantas de tratamento atendendo grandes centros urbanos (JENKINS; WANNER, 2014). Particularmente no Brasil, 354 ETEs (10% do total) operam pelo processo de lodos ativados e estão concentradas nas regiões metropolitanas de Porto Alegre, Florianópolis, São Paulo, Rio de Janeiro e Vitória (ANA, 2020).

A modelagem matemática e simulação computacional são importantes ferramentas para contribuir com o avanço científico, técnico e operacional do tratamento de esgotos com lodos ativados. Nesse sentido, há mais de três décadas a *International Water Association* oferece um conjunto de modelos matemáticos padronizado ao alcance de pesquisadores e profissionais interessados nessa temática (EKAMA; TAKÁCS, 2014; GERNAEY et al., 2004).

Nesse conjunto está inserido o modelo ASM1 (*Activated Sludge Model N°1*), apresentado pela primeira vez em 1987 (HENZE et al., 1987) e amplamente utilizado em estudos científicos e aplicações operacionais. Como qualquer ferramenta, no entanto, o ASM1 possui limitações as quais têm aberto espaço para que muitas pesquisas sejam realizadas visando seu aprimoramento.

A calibração do ASM1 é fundamental para garantir que as previsões do modelo sejam confiáveis e coerentes com a realidade de um processo de tratamento (RIEGER et al., 2013). Portanto, explorar meios de aperfeiçoamento do procedimento de calibração soma esforços para a constante melhoria de aplicação dessa ferramenta no tratamento de esgotos com lodos ativados.

2. OBJETIVOS

Os objetivos da pesquisa foram os que seguem.

2.1. Geral

Oferecer uma configuração de parâmetros cinéticos e estequiométricos ótimos do modelo ASM1 para a modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical.

2.2. Específicos

2.2.1. Determinar as medidas descritivas do processo de lodos ativados empregado em ETE de grande porte existente no Brasil em região de clima subtropical.

2.2.2. Modelar o processo de lodos ativados utilizando ASM1 e dados de monitoramento padrão da ETE avaliada.

2.2.3. Identificar os parâmetros cinéticos e estequiométricos sensíveis do ASM1 para previsão das concentrações efluentes de SST, DQO e NH_3 .

2.2.4. Estimar valores ótimos para os parâmetros sensíveis visando reduzir o erro de previsão da simulação em relação aos dados de monitoramento padrão.

2.2.5. Aplicar os parâmetros otimizados em simulações de calibração e validação do modelo ASM1 para previsões de SST, DQO e NH_3 efluentes.

3. JUSTIFICATIVA

A presente pesquisa usou registros de monitoramento padrão do processo de tratamento de esgoto com lodos ativados, constituindo uma extensa amostra de dados. Foi proposta uma investigação com base em ferramentas e técnicas padronizadas, reconhecidas e rigorosamente testadas, sendo elas o modelo matemático ASM1, o simulador gratuito STOAT®, o procedimento de análise de sensibilidade e a Metodologia de Superfície de Resposta. A viabilidade e acessibilidade desse conjunto metodológico associadas ao uso de registros de monitoramento padrão subsidiaram a pesquisa independentemente de análises laboratoriais, que demandam quantidade considerável de recursos e tempo.

Os resultados da avaliação e otimização de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1, a partir de um procedimento de calibração sistemática, podem complementar demais pesquisas sobre modelagem e simulação do processo de lodos ativados.

No âmbito internacional, tal calibração visa oferecer uma configuração do modelo ASM1 representativa de esgoto afluyente da região da ETE considerada neste estudo, diversificando a base de dados de parâmetros do modelo. Essa contribuição pode ser útil principalmente no uso do ASM1 em processos de tratamento com características semelhantes.

No Brasil, o presente estudo ajuda a ampliar o conhecimento sobre a modelagem do processo de lodos ativados em estações do país. A calibração e otimização de parâmetros do ASM1 aplicando técnicas estatísticas, por sua vez, podem ser adotadas na prática para avaliar e melhorar o desempenho do processo de tratamento de esgoto doméstico. A modelagem do processo de lodos ativados também pode ser empregada na formação e qualificação dos operadores de ETEs, auxiliando na previsão de possíveis efeitos de variações na composição do esgoto afluyente sobre o tratamento e qualidade do efluente.

A aplicação da modelagem matemática nos contextos mencionados é fundamental para amparar as ETEs no atendimento à legislação ambiental pelo descarte de efluentes sanitários com maior qualidade no ambiente. Isto beneficia a conservação dos recursos hídricos e a saúde pública.

4. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Nesta seção, como contextualização do tema são apresentados detalhes do processo de lodos ativados e dos procedimentos para sua modelagem matemática e simulação computacional.

O processo metodológico de calibração sistemática e otimização de parâmetros do modelo ASM1 é apresentado em seguida. Na seção 4.4 são descritos estudos de referência, cujos resultados se relacionam com os objetivos do presente estudo.

Para facilitar a referência, as siglas de alguns termos específicos em inglês são previamente traduzidas para o português, mas no decorrer do texto são mencionadas em inglês, por serem mais disseminadas desta forma na literatura.

4.1. Processo de lodos ativados

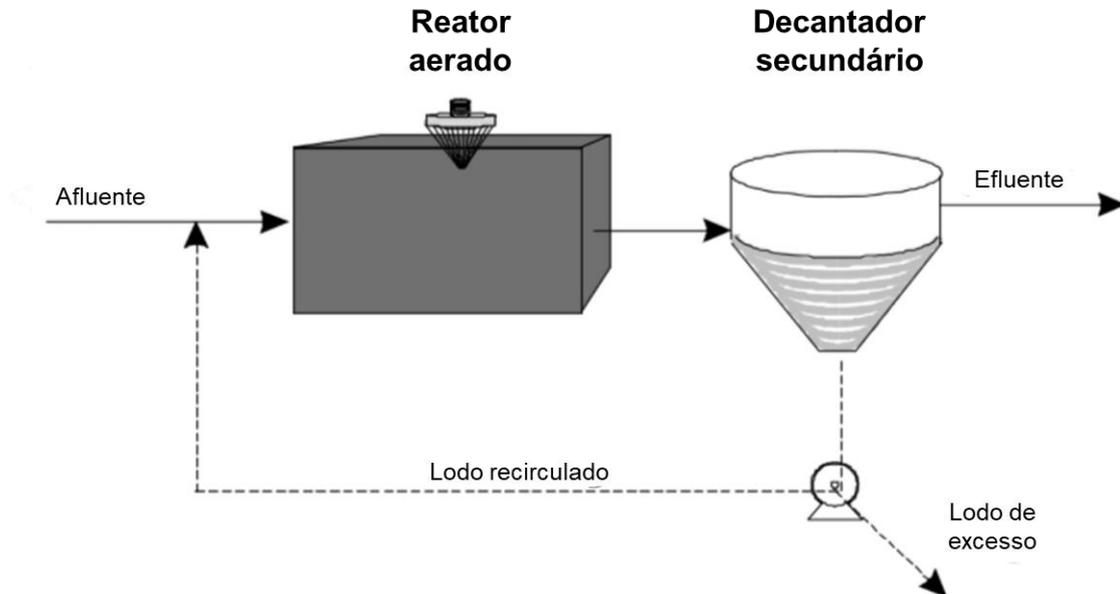
Este processo de tratamento de efluentes foi anunciado cientificamente em três de maio de 1914 por Ardern e Lockett, cujo nome Lodos Ativados remete à produção de uma massa de microrganismos ativada capaz de promover a estabilização aeróbia da matéria orgânica existente no esgoto sanitário (LOFRANO; BROWN, 2010; TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

Uma representação básica das principais unidades do tratamento biológico de afluentes utilizando o processo de lodos ativados reúne um tanque de aeração e um decantador secundário (Figura 4-1). Além do afluente e efluente, o lodo recirculado e lodo de excesso constituem outros importantes fluxos deste processo.

No reator aerado os microrganismos responsáveis pela decomposição da matéria orgânica são mantidos em suspensão e providos com oxigênio. Nesse reator, as reações bioquímicas associadas à remoção de matéria orgânica contam com condições específicas de nutrientes e as bactérias que realizam o tratamento se desenvolvem utilizando substrato advindo do esgoto afluente. A separação líquido-sólidos acontece geralmente no decantador secundário com vista a clarificar o efluente. A recirculação do lodo ativado promove o retorno de parte dos sólidos removidos no decantador, visando a manutenção de alta concentração de biomassa no reator aerado e, por conseguinte, a alta eficiência do sistema. O lodo de excesso (também chamado de lodo secundário, lodo biológico, lodo residual) é retirado do

sistema e direcionado à etapa de tratamento de lodo (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016; VON SPERLING, 2007).

Figura 4-1 – Esquema do processo de lodos ativados.



Fonte: adaptado de von Sperling (2007).

Os processos de lodos ativados podem adotar reatores em série, operando em condições aeróbicas, anóxicas e anaeróbicas, usando bombeamento e tubulações de recirculação interna. As plantas podem promover tratamentos para nitrificação (oxidação da amônia em nitrito e depois em nitrato), remoção biológica de nitrogênio e/ou remoção biológica/química de fósforo (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

Podem ser citados cerca de 17 tipos de processos com lodos ativados, que abrangem desde os mais comuns como fluxo em pistão, mistura completa e reatores em batelada sequenciais (*SBR* em inglês), até processos mais recentes como bioreatores com membranas (*MBR* em inglês) (1990), lodos ativados com filme fixo integrado (*IFAS* em inglês) (2002), processos de alta taxa de remoção de DBO com nitrificação e desnitrificação (*A/B* em inglês) (2004) e *SBR* com lodos ativados granular (2009) (STENSEL; MAKINIA, 2014).

4.1.1. Características do esgoto sanitário

Os componentes do esgoto sanitário reúnem substratos carbonáceos, compostos de nitrogênio, fósforo, sólidos e alcalinidade. Tchobanoglous et al. (2016) listaram os constituintes relacionados aos componentes citados, que envolvem as

frações da Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO), Demanda Química de Oxigênio (DQO), Sólidos Suspensos Totais (SST), Sólidos Suspensos Voláteis (SSV), entre outros.

Alguns valores típicos desses componentes foram apresentados por Jordão e Pessôa (2017) para esgoto sanitário do Brasil, envolvendo diferentes processos com lodos ativados (Tabela 4-1). Para a alcalinidade, que não aparece na Tabela 4-1, ressalta-se sua importância no desempenho dos processos de nitrificação biológica (TCHOBANOGLOUS et al., 2016).

Tabela 4-1 - Valores médios típicos (mg/l) de características físicas e químicas de esgoto sanitário em diversos processos de tratamento com lodos ativados.

Esgoto	Processo	SS ¹	DBO	DQO	N ²	P ³
Bruto	-	200	220	500	40	10
Secundário	Lodos Ativados convencional	30	25	75	30	8
Secundário	Lodos Ativados com Nitrificação	20	10	35	30	8
Secundário	Lodos Ativados c/Nitrif. + Denitrific.	20	10	30	8	8
Secundário	Lodos Ativados c/Rem. Biológica de F	15	10	30	20	2
Terciário	L. Ativ. + Remoção N, F + Filtração	10	5	25	<5	<2

Fonte: Adaptado de JORDÃO e PESSÔA (2017, p. 85). (1) Sólidos Suspensos. (2) Nitrogênio. (3) Fósforo.

4.1.2. Principais variáveis do sistema de lodos ativados

A idade do lodo e a relação Alimento/Microrganismo (A/M) são variáveis usadas para classificação do sistema de lodos ativados, sendo diferentes para os sistemas convencional e com aeração prolongada. Outras variáveis que distinguem nos dois sistemas são as eficiências de remoção, área requerida para a planta de tratamento, volume total e energia (Tabela 4-2).

A relação A/M representa a quantidade de substrato disponível para as bactérias que realizam o tratamento biológico. A idade do lodo, por sua vez, representa o período durante o qual o lodo ativado é retido no processo de tratamento, sendo considerado o parâmetro mais crítico para o desempenho e projeto das unidades. Sistemas com idade do lodo inferior a quatro dias não são usuais (TCHOBANOGLOUS et al., 2016; VON SPERLING, 2007).

Por outro lado, o sistema de aeração prolongada apresenta alta faixa de idade de lodo e menores relações A/M. Isso acontece uma vez que com o aumento da idade do lodo sem alteração na carga de DBO afluente (A), a relação A/M diminui devido ao aumento da produção de biomassa (M) pela recirculação do lodo.

Havendo menor quantidade de matéria orgânica por unidade de volume no tanque de aeração, as bactérias passam a usar a matéria orgânica biodegradável existente em suas células. Este processo resulta na estabilização da biomassa no tanque de aeração (VON SPERLING, 2007). Conseqüentemente, esse tipo de sistema precisará de mais energia e pode apresentar melhor eficiência de remoção da matéria carbonácea e de coliformes, comparado aos lodos ativados convencional (Tabela 4-2).

Tabela 4-2 – Características dos sistemas de lodos ativados convencional e com aeração prolongada usados para o tratamento de esgoto sanitário.

Variável	Especificidade/unidade	Convencional	Aeração prolongada
Idade do lodo	Dia	4 – 10	18 – 30
Relação A/M	kg DBO/kg liquor misto.dia	0,25 – 0,50	0,07 – 0,15
	DBO (%)	85 – 95	93 – 98
	DQO (%)	85 – 90	90 – 95
	Sólidos suspensos (%)	85 – 95	85 – 95
Eficiência de remoção	Amônia (%)	85 – 95	90 – 95
	Nitrogênio (%)	25 – 30	15 – 25
	Fósforo (%)	25 – 30	10 – 20
	Coliformes (%)	60 – 90	70 – 95
Área requerida	m ² /habitante	0,2 – 0,3	0,25 – 0,35
Volume total	m ³ /habitante	0,1 – 0,12	0,1 – 0,12
	Potência instalada (W/hab.)	2,5 – 4,5	3,5 – 5,5
Energia	Consumo de energia (Kw.h/hab.ano)	18 – 26	20 – 35

Fonte: adaptado de von Sperling (2007).

4.1.3. Produção de lodo

A quantidade de lodo produzida em estações de tratamento de efluentes pode ser expressa em termos de massa na base seca (g de sólidos totais por dia) e de volume na base úmida (m³ de lodo por dia). O lodo é formado por parte da DQO removida e convertida em biomassa durante o tratamento biológico (ANDREOLI; VON SPERLING; FERNANDES, 2007).

A determinação da produção de lodo pode ser feita com base na estimativa de um rendimento da produção de lodo observado a partir de dados publicados de plantas semelhantes. Esta estimativa utiliza equações que calculam a produção de lodo diária. Outro método considera um processo de lodos ativados existente, no qual é feita a caracterização do esgoto e as diversas fontes da produção de lodo são levantadas (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

A produção e descarte de lodo originado da fase líquida no processo de lodos ativados podem ser descritas de diferentes maneiras: relação entre sólidos e DQO,

conteúdo de sólidos secos, massa e volume de lodo em função da quantidade de habitantes (Tabela 4-3). Embora o sistema operando com aeração prolongada necessite de maior consumo energético, dado o aumento da idade do lodo (Tabela 4-2), apresenta produção de lodo relativamente menor em comparação com o total de lodo gerado pelo processo convencional de lodos ativados (Tabela 4-3).

Tabela 4-3 – Características e quantidades de lodo produzido no sistema de lodos ativados

Sistema de lodos ativados	Características do lodo produzido e descartado da fase líquida (direcionado para a etapa de tratamento do lodo)			
	kg SS/kg DQO aplicado	Conteúdo de sólidos secos (%)	Massa de lodo (g SS/habitante.dia) ^a	Volume de lodo (L/habitante.dia) ^b
Convencional				
Lodo primário	0,35 – 0,45	2 – 6	35 – 45	0,6 – 2,2
Lodo secundário	0,25 – 0,35	0,6 – 1	25 – 35	2,5 – 6,0
Total	0,60 – 0,80	1 – 2	60 – 80	3,1 – 8,2
Aeração prolongada				
	0,50 – 0,55	0,8 – 1,2	40 – 45	3,3 – 5,6

Fonte: adaptado de Andreoli, von Sperling e Fernandes (2007). (a) Assumindo 0,1 kg DQO/habitante.dia e 0,06 kg SS/habitante.dia; (b) Litros de lodo/habitante.d = [(g SS/hab.d)/(sólidos secos (%))] × (100/1.000) (assumindo uma densidade do lodo de 1.000 kg/m³).

A geração de lodo de esgoto, por sua vez, constitui uma grave problemática, dado que todo o lodo precisa, além de ser devidamente tratado para remoção de contaminantes, disposto de forma adequada. A disposição do lodo em aterros sanitários pode ser onerosa e acaba reduzindo cada vez mais a vida útil destes locais.

Alternativamente, existem muitas possibilidades de aproveitamento do lodo do tratamento de esgoto pela sua aplicação no solo e na agricultura (respeitando fatores limitantes) e em materiais de construção. Outra alternativa interessante consiste no uso do lodo para produção de biogás (energia e combustível) no digestor anaeróbio. Esta última opção vem crescendo mundialmente diante da busca pela sustentabilidade energética de ETEs. Inobstante, a maioria dos usos benéficos de lodos de esgoto são considerados viáveis, porém a escolha da melhor alternativa deve considerar características locais, culturais, históricas, geográficas, legais, políticas e econômicas (URBAN; ISAAC; MORITA, 2019).

4.1.4. Controle do processo

Para garantir altos níveis de eficiência do sistema de tratamento de lodos ativados é preciso controlar algumas condições de operação importantes no desempenho do sistema. Estas condições são geralmente manipuladas para que os

níveis das variáveis de saída do sistema sejam controlados de acordo com os limites estabelecidos por órgãos ambientais (OLSSON; YUAN; KIM, 2014).

A concentração de **oxigênio dissolvido** (relacionada ao coeficiente K_La) é uma dessas condições, sendo necessário oferecer oxigênio suficiente para o crescimento de microrganismos, evitando a predominância de organismos filamentosos com conseqüente deterioração da qualidade e capacidade de sedimentação do lodo ativado (OLSSON; YUAN; KIM, 2014; TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

O controle do oxigênio dissolvido nos tanques de aeração é normalmente feito pela variação do nível de aeração (1) de acordo com o horário do dia, (2) de acordo com a vazão afluyente ou (3) de acordo com um controle da concentração de oxigênio dissolvido (VON SPERLING, 2007). Em geral, deve-se prover entre 1,5 e 2 mg/l de oxigênio dissolvido no tanque de aeração, sendo que, concentrações superiores a 4 mg/l não melhoram a operação e ainda aumentam os custos com energia (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016). Ainda é preciso ressaltar que o tipo do sistema de aeração (difusa ou mecânica) afeta o equilíbrio da temperatura do esgoto devido à evaporação. E a temperatura do esgoto afeta todas as reações biológicas, incluindo a demanda e eficiência de transferência de oxigênio. Por isso, a temperatura deve ser observada nesse contexto de controle do processo (WAGNER; STENSTROM, 2014).

Outra variável de controle consiste no **reciclo de lodo ativado (Q_r)**, cujo bombeamento deve ser suficiente para garantir o funcionamento do tratamento biológico no tanque de aeração e ser o necessário para manter a manta de lodo no decantador secundário em nível inferior à saída do efluente tratado (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

Esta variável é expressa em termos de vazão ou como taxa em relação à vazão afluyente. A Q_r pode ser mantida constante, adotado em muitas estações de tratamento ou seu valor pode ser manipulado mantendo-o (1) proporcional à vazão afluyente, (2) em função do Índice Volumétrico do Lodo ou (3) em função do nível da manta de lodo no decantador secundário (OLSSON; YUAN; KIM, 2014; VON SPERLING, 2007). A resposta do sistema para a manipulação de Q_r é rápida nos decantadores secundários e devagar no tanque de aeração (VON SPERLING, 2007). Taxas de 50 a 75% da vazão média de projeto da planta de tratamento são

típicas, com concentrações advindas do decantador secundário correspondendo entre 4.000 e 12.000 mg/l (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016).

A **vazão de descarte do lodo de excesso (Q_{ex})** representa a segunda variável de controle dos sólidos no processo de lodos ativados (OLSSON; YUAN; KIM, 2014). Esta vazão é normalmente extraída da linha de Q_r e auxilia a garantir a idade do lodo estabelecida para a eficiência do tratamento biológico. A manipulação da Q_{ex} é geralmente feita para manter constante o valor (1) da concentração de sólidos do liquor misto, (2) da relação A/M ou (3) da idade do lodo. A resposta do sistema para a manipulação de Q_{ex} é geralmente lenta (VON SPERLING, 2007).

Para as duas últimas variáveis de controle descritas, Q_r e Q_{ex} , as quais estão relacionadas, é importante ressaltar que sua manipulação deve ser simultânea e levar em consideração a interação entre o tanque de aeração e o decantador secundário, remoções conjuntas de DBO, SST e amônia. Além disso, sempre que possível, também deve ser considerada a abrangência econômica do funcionamento da estação de tratamento (VON SPERLING, 2007).

4.1.5. Monitoramento do processo e legislação pertinente

Como forma de avaliar o desempenho dos processos de tratamento biológico do esgoto sanitário e orientar o controle do processo como um todo, a qualidade do efluente deve ser avaliada. Esta etapa visa monitorar principalmente os parâmetros de compostos orgânicos, sólidos suspensos e nutrientes (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016). Dessa forma, no efluente do sistema de tratamento são geralmente monitorados os parâmetros: DBO, DQO, SST, SSV, Nitrogênio Total Kjeldahl (NTK), amônia, nitrito, nitrato, pH e fósforo (VON SPERLING, 2007).

A qualidade do efluente, além de orientar o controle do processo, deve prioritariamente atender às regulamentações que estabelecem critérios e padrões de lançamento de efluente líquidos. A nível federal tem-se a Resolução CONAMA nº 430 (BRASIL, 2011), que especifica as condições de lançamento de efluentes de Sistemas de Tratamento de Esgotos Sanitários, entre elas o pH (entre 5 e 9), temperatura (menor que 40 °C, sem variação superior a 3 °C na zona de mistura), materiais sedimentáveis (até 1 ml/l), entre outras.

No estado do Rio Grande do Sul, a Resolução CONSEMA nº 355 (RIO GRANDE DO SUL, 2017), com base na resolução federal mencionada, estabelece

as concentrações e eficiências mínimas de remoção para parâmetros orgânicos, físicos e patogênicos, em função da vazão do efluente lançado (Tabela 4-4).

Tabela 4-4 – Padrões de lançamento estabelecidos pela Resolução CONSEMA nº 355/2017 para lançamento de efluentes de sistemas de tratamento de esgoto sanitário em águas superficiais no Estado do Rio Grande do Sul, Brasil.

Faixa de vazão do efluente (m³/d)	DBO ₅ (mg/l)	DQO (mg/l)	SST (mg/l)	Coliformes termotolerantes		Nitrog. amoniacal (mg/l)	Fósforo total	
				NMP/100ml	Efic. (%)		mg/l	Efic. (%)
Q < 200	120	330	140	-	-	20	4	75
200 ≤ Q < 500	100	300	100	10 ⁶	90	20	4	75
500 ≤ Q < 1.000	80	260	80	10 ⁵	95	20	4	75
1.000 ≤ Q < 2.000	70	200	70	10 ⁵	95	20	3	75
2.000 ≤ Q < 10.000	60	180	60	10 ⁴	95	20	2	75
10.000 ≤ Q	40	150	50	10 ³	99	20	1	75

Fonte: adaptado de Rio Grande do Sul (2017).

4.2. Modelagem matemática e simulação computacional de lodos ativados

Um modelo consiste em uma representação simplificada de determinado objeto ou processo real. Esta realidade é normalmente simulada com base em características específicas do sistema. O modelo numérico utiliza equações matemáticas para a demonstração da situação real e uma simulação nada mais é do que o uso de um modelo numérico dentro de um simulador – um programa computacional (RIEGER et al., 2013).

A modelagem pode ter como finalidade o prognóstico pela previsão de resultados, o diagnóstico com a compreensão de mecanismos envolvidos, e a educação quando se almeja ampliar a comunicação entre especialistas e leigos ou promover capacitações técnicas. A modelagem, portanto, acaba sendo importante no desenvolvimento científico, permitindo o compartilhamento de conhecimento entre aplicações teóricas e práticas (RIEGER et al., 2013; VAN LOOSDRECHT et al., 2015).

Há bastante tempo a modelagem e simulação de lodos ativados é amplamente aplicada, sendo que a implementação do modelo de lodos ativados (ASM – *Activated Sludge Model* – em inglês) pela Associação Internacional da Água (IWA em inglês) ofereceu um conjunto de modelos padronizado que auxiliou pesquisadores e profissionais da área (EKAMA; TAKÁCS, 2014; GERNAEY et al., 2004).

Particularmente, os modelos de lodos ativados da IWA vêm exercendo papel fundamental no desenvolvimento do referido processo de tratamento de esgoto.

Esses modelos se tornaram famosos por serem formulados com a mínima complexidade necessária para descrever as características relevantes do processo na prática. Por esta razão entre outras, ao longo do tempo, a modelagem ganhou força pelo desenvolvimento de novos conceitos teóricos com aplicações em novas áreas, sendo muitas vezes aplicações práticas (EKAMA; TAKÁCS, 2014).

O uso de modelos como ferramentas ainda é incentivado para promover inovação e otimização das tecnologias de tratamento de efluentes (VAN LOOSDRECHT et al., 2015). Não obstante, a aplicação de modelos matemáticos neste sentido deve continuar pelo menos pelos próximos 100 anos (EKAMA; TAKÁCS, 2014).

Neste tópico inicialmente são apresentados os procedimentos básicos do processo de modelagem matemática e simulação computacional de lodos ativados. Depois é caracterizado o modelo ASM1 que será adotado neste estudo e são descritos alguns detalhes de outros modelos relevantes sobre o tema, bem como de modelos de sedimentação. Por fim, são discriminados os atributos do STOAT®, o simulador computacional empregado para aplicação do modelo matemático.

4.2.1. Procedimentos

Os principais procedimentos da modelagem de lodos ativados são apresentados pelo Protocolo Unificado para Boas Práticas de Modelagem (*Good Modelling Practice (GMP) Unified Protocol* em inglês) (RIEGER et al., 2013), elaborado pela IWA e recomendado e utilizado em outros estudos (ANDRAKA et al., 2018; BAPTISTA, 2020; VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 597).

De acordo com esse protocolo, a modelagem de lodos ativados se inicia com a **Definição do Projeto**, o que envolve a determinação dos objetivos da modelagem. Estes podem ser voltados para pesquisa, gestão/planejamento ou controle em tempo real. A segunda etapa consiste na **Coleta e Reconciliação de Dados**, que tem o intuito de reunir as informações necessárias, bem como avaliar a aplicabilidade dos dados de acordo com os objetivos da modelagem. Em seguida, é realizada a **Configuração do Modelo da Planta** no simulador adotado, empregando os modelos matemáticos que se adequam aos processos de tratamento analisados. Nesta etapa também são inseridas as características físicas e químicas da estação e do afluente. Com base no modelo configurado é procedida a **Calibração e Validação** do modelo em utilização. Esta etapa ajusta parâmetros do modelo para

diminuir as diferenças entre as previsões do modelo e os dados medidos/observados em campo. Esta atividade é geralmente longa e complexa, a qual pode ser otimizada com técnicas estatísticas e de sensibilidade de parâmetros, o que serão tratadas na presente pesquisa. A última etapa da modelagem de lodos ativados pode ser a **Simulação e Interpretação do Resultado** em que podem ser simulados possíveis cenários do processo de tratamento, conforme os objetivos da modelagem. Os resultados são então analisados e podem ser discutidos com base em outros estudos e práticas semelhantes.

O presente estudo contemplou a modelagem até as etapas de calibração e validação do modelo, visando otimizar parâmetros cinéticos e estequiométricos que podem ser aplicados em simulações de possíveis cenários de interesse científico e/ou prático.

4.2.2. ASM1

O modelo ASM1 foi apresentado em 1987, sendo referência em diversos projetos científicos e práticos, e aplicado, às vezes com modificações, na maior parte dos simuladores comerciais disponíveis para simulação de estações de tratamento de efluentes (EKAMA; TAKÁCS, 2014; VAN LOOSDRECHT et al., 2015).

O ASM1 modela a remoção de DQO e nitrogênio, consumo de oxigênio e a produção de lodo (VAN LOOSDRECHT et al., 2015). O modelo representa um sistema de lodos ativados de estágio único que desempenha de forma simultânea os processos de oxidação de DQO, nitrificação e desnitrificação (LIM et al., 2012).

Os componentes de caracterização do efluente adotados em diversos modelos ASM foram elencados em um estudo, relacionando sua formação com carbono e nitrogênio (HAUDUC et al., 2013). Os valores para o ASM1 estão apresentados na Tabela 4-5. Também são apresentadas as notações adotadas por Henze et al. (1987) – primeira publicação do ASM1. Neste modelo, o esgoto é composto por sete componentes solúveis e seis particulados que descrevem dois grupos de biomassa, sete frações de DQO e quatro frações de nitrogênio.

A DQO proporciona uma ligação entre equivalentes de elétrons no substrato orgânico, a biomassa e o oxigênio dissolvido. A DQO total do ASM1 é definida pela Equação 4-1 (PETERSEN et al., 2003).

$$DQO_{total} = S_I + S_S + X_I + X_S + X_{B,H} + X_{B,A} + X_P$$

Equação 4-1

Da mesma forma anterior, o nitrogênio pode ser subdividido de acordo com a solubilidade, biodegradabilidade e taxa de biodegradação. A Equação 4-2 define o balanço total de nitrogênio (N) no ASM1 (PETERSEN et al., 2003).

$$N_{total} = S_{NH} + S_{ND} + S_{NO} + X_{ND} + X_{NI} + i_{XB} \times (X_{BH} + X_{BA}) + i_{XP} \times X_P$$

Equação 4-2

Onde, X_{NI} é o nitrogênio orgânico não biodegradável particulado, $i_{XB} \times X_{BH}$ e $i_{XB} \times X_{BA}$ são biomassa ativa heterotrófica e autotrófica, respectivamente.

Tabela 4-5 – Componentes/variáveis usados no modelo ASM1 e sua composição em termos de Carbono (C) e Nitrogênio (N).

Descrição	Notação		Unidade	C	N
	Hauduc et al. (2013)	Henze et al. (1987)			
DQO Solúvel					
Produtos orgânicos biodegradáveis solúveis	S_B	S_S	gDQO.m ⁻³	X	
Prod. orgânicos não biodegradáveis solúveis	S_U	S_I	gDQO.m ⁻³	X	
Oxigênio Dissolvido	S_{O_2}	S_O	-gDQO.m ⁻³	X	
DQO particulada e coloidal					
Prod. orgânicos biodegradáveis particulado e coloidal	X_{CB}	X_S	gDQO.m ⁻³	X	
Prod. orgânicos não biodegradáveis particulado do afluente	$X_{U, Inf}$	X_I	gDQO.m ⁻³	X	
Prod. endógenos não biodegradáveis particulados	$X_{U, E}$	X_P	gDQO.m ⁻³	X	X
Nitrogênio (N)					
Amônio e nitrogênio amoniacal	S_{NHX}	S_{NH}	gN.m ⁻³		X
Nitrato e nitrito	S_{NOX}	S_{NO}	gN.m ⁻³	X	X
N orgânico biodegradável particulado e coloidal	$X_{CB, N}$	X_{ND}	gN.m ⁻³		X
N orgânico biodegradável solúvel	$S_{B, N}$	S_{ND}	gN.m ⁻³		X
Biomassa					
Organismos heterotróficos ordinários	X_{OHO}	$X_{B, H}$	gDQO.m ⁻³	X	X
Organismos nitrificantes autotróficos	X_{ANO}	$X_{B, A}$	gDQO.m ⁻³	X	X
Outro					
Alcalinidade (CaCO ₃)		S_{Alk}	mol CaCO ₃ .m ⁻³		X

Fonte: adaptado de Hauduc et al. (2013).

Na entrada de dados no modelo ASM1 é preciso inserir os valores das frações da DQO e nitrogênio: solúvel, particulada, biodegradável, não biodegradável. Ainda são requeridos dados dos sólidos suspensos: voláteis, não voláteis, não biodegradáveis.

Henze et al. (1987) também descrevem os oito processos fundamentais que constituem o modelo ASM1:

- (1) Crescimento aeróbio de heterotróficos;
- (2) Crescimento anóxico de heterotróficos;
- (3) Crescimento aeróbio de autotróficos;
- (4) Decaimento de heterotróficos;
- (5) Decaimento de autotróficos;
- (6) Amonificação de nitrogênio orgânico solúvel;
- (7) Hidrólise de produtos orgânicos aderidos ao biofilme; e
- (8) Hidrólise de nitrogênio orgânico aderido ao biofilme.

Mais detalhes sobre os oito processos e as 13 variáveis do modelo (Tabela 4-5), bem como a interação entre esses dois aspectos são apresentados no estudo de Henze et al. (1987).

O modelo ASM1 ainda é composto por mais 19 parâmetros, sendo 14 cinéticos e 5 estequiométricos. Esses parâmetros com seus respectivos valores serão apresentados adiante no item 4.3, sobre a calibração sistemática do modelo.

Como qualquer ferramenta, o modelo ASM1 também conta com algumas limitações que devem ser consideradas diante de sua aplicação para modelagem, sendo elas (HENZE et al., 1987):

- (1) O sistema deve operar em temperatura constante;
- (2) O pH também deve ser constante e próximo à neutralidade. Contudo, com a inclusão da alcalinidade no modelo é possível avaliar possíveis problemas de controle do pH;
- (3) Os coeficientes das expressões das taxas para os 8 processos também devem ser constantes. Assim, podem ocorrer variações sobre as concentrações dos componentes do afluente, mas não sobre o caráter do mesmo (relação com o fracionamento de DQO e N);
- (4) O modelo não considera efeitos de limitações de nitrogênio, fósforo e outros nutrientes inorgânicos na remoção de substrato orgânico e crescimento celular. Portanto, deve-se atentar para manter quantidades suficientes desses nutrientes para equilibrar o crescimento;
- (5) Os fatores de correção para desnitrificação são mantidos constantes. No entanto, no presente estudo, a sensibilidade dos mesmos em relação ao sistema será avaliada na etapa de calibração sistemática;

- (6) Os coeficientes para nitrificação também são constantes e considerados na incorporação de qualquer efeito inibitório que outros constituintes do afluente apresentem sobre eles;
- (7) A biomassa heterotrófica é homogênea e não é submetida a mudanças na diversidade de espécies ao longo do tempo. Assim como os efeitos dos gradientes de concentração do substrato, configuração do reator sobre a sedimentação do lodo não são considerados;
- (8) A aderência de matéria orgânica particulada na biomassa é assumida como instantânea;
- (9) Hidrólise de matéria orgânica e nitrogênio orgânico ocorrem simultaneamente com taxas iguais; e
- (10) O tipo de acceptor de elétrons presente não afeta a perda de biomassa ativa pelo decaimento.

Não obstante, algumas situações possíveis na matemática podem não ser na prática. Portanto, algumas premissas são recomendadas considerando as restrições do modelo, conforme apontado por Henze et al. (1987) e Petersen et al. (2003):

- (1) O modelo ASM1 é destinado para simulação do tratamento de esgoto sanitário, não sendo recomendado aplicá-lo em sistemas com significativa contribuição de esgoto industrial;
- (2) A idade do lodo deve estar entre 3 e 30 dias;
- (3) A concentração do lodo ativado em termos de DQO, deve resultar entre 750 e 7.500 g.m⁻³, dependendo do tipo de pré-tratamento. Caso contrário, o tamanho do reator deve ser ajustado para garantir a faixa recomendada;
- (4) A fração anaeróbia do volume do reator aerado não deve exceder 50% para evitar deterioração das características de sedimentação do lodo;
- (5) O gradiente de velocidade da mistura no reator aerado não deve superar 240 s⁻¹. Esta premissa deve ser atendida juntamente com a segunda descrita previamente;
- (6) ASM1 não pode funcionar com elevadas concentrações de nitrito.

O **Anexo 1** apresenta a tabela original contendo todos os componentes do modelo ASM1, em que são descritas as equações dos processos associados aos parâmetros estequiométricos e cinéticos do modelo.

4.2.3. Outros modelos ASM

Além do ASM1 outros seis modelos compõem a relação dos mais usados: ASM2d; ASM3; ASM3 + BioP; ASM2d +TUD; Barker & Dold model; e UCTPHO + (HAUDUC et al., 2013).

O modelo ASM3 descreve os mesmos processos que o ASM1, sendo que o ASM3 foi introduzido para correção de algumas deficiências do ASM1, como a inserção de um composto de armazenamento, $X_{STO,S}$. Ele representa a rápida captura da fração rapidamente biodegradável da DQO pelas bactérias e o posterior armazenamento interno desse substrato, que será convertido de forma lenta com o crescimento bacteriano. Entre outras questões, o ASM3 demonstrou diferentes formas, mas não necessariamente melhores, de modelar o processo de lodos ativados (VAN LOOSDRECHT et al., 2015).

Os mesmos autores recomendam o ASM3 para casos em que sejam simulados sistemas de nitrificação-desnitrificação com altas cargas e pequenos tempos de retenção anóxicos, para facilitar a calibração automática entre outros casos específicos (HAUDUC et al., 2013). No ASM3 o fracionamento do esgoto afluente pode ser mais fácil, embora este modelo apresente mais processos e parâmetros estequiométricos e cinéticos em relação ao ASM1 (ANDRAKA et al., 2018). A versão ASM3 + BioP inclui a remoção de fósforo, com consequente aumento no número de processos, variáveis e parâmetros estequiométricos e cinéticos (HAUDUC et al., 2013).

Os demais processos (ASM2d, ASM2d +TUD, Barker & Dold model e UCTPHO +) se diferenciam do ASM1 pelo aumento no número de variáveis relacionadas ao nitrogênio e fósforo em suas reações. O ASM2d e Barker & Dold utilizam o mesmo rendimento de crescimento em condições aeróbias e anóxicas. Mais informações conceituais e sobre as diferenças entre os modelos são apresentadas em uma visão global dos processos dos modelos produzida por Hauduc et al. (2013).

4.2.4. Modelos de sedimentação

O processo de sedimentação seguido do reator de aeração no sistema de lodos ativados pode ser simulado com o uso de diferentes modelos de sedimentação.

Cada modelo de tanque de sedimentação ou decantador secundário é associado a um modelo de reator de aeração, uma vez que o primeiro usa condicionantes específicas correspondentes a cada modelo de aeração (WRC PLC, 2002a). Alguns modelos de sedimentação disponíveis incluem SSED1, SSED2, SSED5, *Generic* e *Version 3* (WRC PLC, 2002b). O *Version 3*, por sua vez, pode ser usado com o modelo original do ASM1 (BAPTISTA, 2020; PISTORELLO, 2018) e os demais modelos de sedimentação podem ser adotados em conjunto com outros modelos elaborados com base nos ASMs (WRC PLC, 2002b).

Os parâmetros envolvidos na caracterização física de um modelo de sedimentação são:

- Área superficial do tanque de sedimentação;
- Profundidade do tanque;
- Profundidade de alimentação do tanque;
- Método de descarte do lodo de excesso (vazão, período e intervalo de bombeamento); e
- Vazão/razão de recirculação do lodo ativado.

Algumas alterações podem ser feitas nos valores padrão do número de camadas do decantador, controle do tanque de aeração e controle de fatores relacionados ao descarte do lodo de excesso.

Os parâmetros físicos que podem ser calibrados no modelo de sedimentação estão apresentados na Tabela 4-6, com os respectivos valores padrão adotados em simulador comercial. O parâmetro de “início da floculação” não é geralmente sensível no modelo, dispensando calibração. Outras considerações acerca da manipulação e determinação dos parâmetros que caracterizam os modelos de sedimentação podem ser encontradas no relatório de descrição das unidades dos processos do *software STOAT*® (WRC PLC, 2002a). Este simulador comercial será apresentado na seção 4.2.5.

Tabela 4-6 – Parâmetros físicos para calibração dos modelos de sedimentação do processo de lodos ativados.

	Parâmetro	Unidade	Valor padrão
1	Velocidade de sedimentação “ <i>Vesilind</i> ”	m/h	9,15
2	Velocidade de sedimentação máxima	m/h	8
3	Parâmetro de sedimentação impedida	l/mg	0,00058
4	Parâmetro discreto	l/mg	0,029
5	Início da floculação	mg/l	350
6	Fração não sedimentável	-	0,001

Fonte: adaptado de WRC plc (2002a).

4.2.5. STOAT©

O simulador *STOAT©* (*Sewage Treatment Operation and Analysis over Time* em inglês) é um pacote de *software* constituído por modelos dinâmicos integrados dos processos utilizados no tratamento de efluentes. O desenvolvimento do programa começou em 1989 com o intuito de investigar a viabilidade da modelagem dinâmica de plantas de tratamento de efluentes completas, pela simulação de processos de unidades individuais. Em 1994 foi lançada a primeira versão do simulador que, desde então, vem sendo usado por diversas organizações como operadoras de saneamento, consultorias e universidades (TOMLINSON; CHAMBERS, 1996).

O *STOAT©* conta com diversos processos geralmente utilizados no tratamento de efluentes, como tanques de equalização; sedimentação primária; tratamento secundário, incluindo lodos ativados e filtros biológicos; decantadores secundários; filtração terciária; digestão anaeróbia e aeróbia de lodo; entre outros.

O *software* apresenta interface flexível operando via sistema *Microsoft Windows*. Os usuários do simulador têm acesso a uma tela em que podem delinear as plantas de tratamento. O modelo é rodado interativamente, sendo possível visualizar as variáveis de interesse na tela durante a operação da simulação. Os resultados da simulação são armazenados em formas de gráficos e estatísticas para cada fluxo ou processo modelado (DUDLEY; BRYAN; CHAMBERS, 1994).

O programa ainda pode ser usado em conjunto com outros modelos, associando sistemas de esgotamento sanitário, estações de tratamento e corpos receptores, visando a determinação de métodos ótimos e menos onerosos para uso racional de recursos e redução da poluição urbana (HERNEBRING; MARK; OHLSSON, 1999).

No final do século passado já eram relatadas aplicações do *STOAT©* na modelagem do processo de lodos ativados em estações de tratamento de efluentes (SMITH; DUDLEY, 1997). Em 2010 um estudo trouxe a validação do programa em condições climáticas tropicais, especificamente na Índia, onde a taxa de crescimento de microrganismos é maior, em comparação com o clima temperado do Reino Unido, onde o *STOAT©* é amplamente estabelecido (SARKAR et al., 2010).

Recentemente, o simulador tem sido empregado no Brasil em plantas de tratamento de efluentes industriais (SHINGO et al., 2019) e esgoto doméstico (BAPTISTA, 2020; PISTORELLO, 2018).

Estas aplicações refletem, em parte, a validação do STOAT© também em clima subtropical. Por outro lado, os estudos ainda sugerem avaliações dos parâmetros dos modelos matemáticos empregados, calibração mais rigorosa associada a dados reais de monitoramento, bem como a simulação de cenários visando a otimização dos processos de tratamento. Tudo isso abre mais espaço para o contínuo uso do STOAT© na modelagem matemática e simulação computacional de estações de tratamento de efluentes no Brasil.

4.3. Calibração sistemática e otimização de parâmetros do ASM1

Como apresentado anteriormente, a calibração de um modelo matemático é uma importante e complexa etapa para validar um modelo e, conseqüentemente, uma simulação computacional de um sistema de tratamento de efluentes. Para garantir confiabilidade ao modelo, é preciso que os resultados gerados pelo mesmo correspondam aos dados monitorados/observados, ou seja, à realidade de um processo/sistema de tratamento.

Uma forma de facilitar a calibração dos parâmetros de um modelo matemático consiste em adotar os valores padrão disponibilizados pelo modelo e ajustar individualmente alguns dos diversos parâmetros existentes, de modo que os resultados modelados se adequem aos dados reais. Alguns estudos adotaram esta metodologia (BAPTISTA, 2020; MU'AZU; ALAGHA; ANIL, 2020; SALLES; DE SOUZA, 2020).

No entanto, a calibração baseada em “tentativa e erro” não é fortemente recomendada, sendo importante priorizar métodos de calibração que levem à geração do máximo de informação possível, auxiliando a formar uma combinação realística de parâmetros (PETERSEN et al., 2003). Os mesmos autores fizeram uma extensa revisão sobre procedimentos de calibração do ASM1 e constataram que não é possível encontrar uma única pesquisa em que seja apresentada uma análise compreensiva. No estudo é construído um esquema com 10 etapas para a calibração do modelo de lodos ativados, incluindo fases de caracterização hidráulica, biológica e de sedimentação dos processos de tratamento. Existem ainda outros guias de calibração desenvolvidos para os ASMs: BIOMATH (VANROLLEGHEM et

al., 2003), STOWA (HULSBEEK et al., 2002), HSG (LANGERGRABER et al., 2004) e WERF (MELCER, 2004).

Entretanto, os procedimentos referidos anteriormente exigem bastante trabalho e recursos financeiros para determinação dos parâmetros do modelo e são geralmente descartados por estações de tratamento e demais interessados na modelagem (BORZOOEI et al., 2019). Logo, métodos de calibração sistemática mais simples que envolvem técnicas para avaliação da sensibilidade e otimização de parâmetros têm demonstrado sucesso (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012; ZHOU et al., 2013).

Com uma calibração sistemática é possível alcançar consistência entre resultados modelados e reais. Contudo, ainda é necessário explorar os métodos de seleção e otimização de parâmetros dos modelos matemáticos para outras plantas de tratamento, considerando diferentes condições climáticas e características do esgoto afluente (CHEN et al., 2020).

A maior parte dos coeficientes de um modelo, especialmente cinéticos, variam de acordo com o espaço ou tempo (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 600). Por isso, cada estação de tratamento deve ser modelada de forma única, tendo em vista seus desafios específicos (BORZOOEI et al., 2019). Essa necessidade é realçada para o Brasil, uma vez que a maior parte das aplicações do ASM1 com calibração sistemática de parâmetros do modelo foram feitas na Europa, América do Norte e Ásia (HAUDUC et al., 2011).

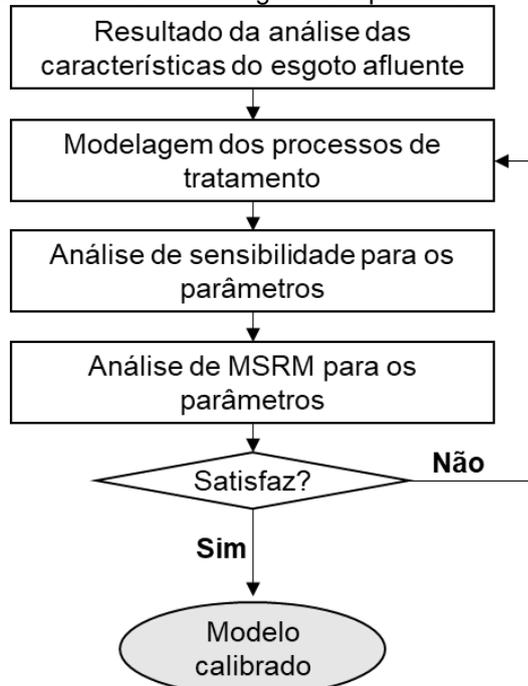
O fluxograma da Figura 4-2 representa de forma geral as etapas de uma calibração sistemática de parâmetros do modelo de lodos ativados.

A calibração sistemática procede as seguintes tarefas:

- Coleta de dados: dados para a caracterização da estação de tratamento e do esgoto afluente e efluente; podem ser monitorados pela estação, obtidos por análises laboratoriais ou ainda teóricos (BAPTISTA, 2020; BORZOOEI et al., 2019; RIEGER et al., 2013);
- Preparo dos dados: tratamento de registros ausentes, censurados, *outliers* para determinação das medidas de estatística descritiva do conjunto de dados que representam o processo de tratamento (EPA, 2006; VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020). Em seguida, os

dados podem ser manipulados para determinação das frações de DQO, nitrogênio e sólidos suspensos.

Figura 4-2 – Esquema de metodologia para calibração sistemática de parâmetros do modelo matemático ASM. MSRM: Metodologia de Superfície de Resposta Múltipla.



Fonte: adaptado de Ahn et al. (2014) e Lim et al. (2012).

Nos itens de 4.3.1 até 4.3.4 serão apresentadas as etapas da calibração sistemática (Figura 4-2), voltada para os parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1.

4.3.1. Modelagem dos processos de tratamento

Com os dados coletados e preparados se procede a modelagem dos processos de tratamento no ambiente de simulação (STOAT© por exemplo). Nesta etapa, o modelo matemático para cada processo de tratamento (primário, biológico, secundário, terciário) é selecionado e o *layout* da planta de tratamento é estruturado discriminando os reatores e fluxos de ligação entre os mesmos.

Nesse momento também são inseridos os valores que caracterizam a planta (dimensões dos reatores) e sua operação (taxa de reciclo do lodo ativado, vazão e intervalos de descarte do lodo de excesso), e o esgoto afluente e efluente (vazão, temperatura, frações de DQO, nitrogênio, sólidos suspensos).

Para a primeira simulação é recomendado que sejam mantidos todos os parâmetros cinéticos e estequiométricos em seus valores padrão, bem como deve

ser adotado um tempo de simulação que possibilite a estabilização dos processos de tratamento, podendo ser entre 20 – 40 dias (RIEGER et al., 2013; WRC PLC, 1994) ou três vezes a idade do lodo média do sistema (BORZOOEI et al., 2019).

4.3.2. Parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1

Como complementação ao item que caracterizou o modelo ASM1 na fundamentação teórica, na presente seção são apresentados os parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1 com seus respectivos valores padrão (Tabela 4-7).

Os valores padrão dos parâmetros foram determinados pelo grupo de tarefas da antiga Associação Internacional de Poluição, Pesquisa e Controle da Água, atualmente a *IWA*. No documento original do ASM1 é possível encontrar os valores para as temperaturas de 10 e 20 °C, recomendados para uso quando não existem dados específicos. Os valores padrão são considerados típicos especialmente para estudos envolvendo esgoto doméstico com pH neutro, embora muitos parâmetros possam ser influenciados por condições ambientais (HENZE et al., 1987).

Por esta razão, a calibração do modelo para esgotos específicos se torna importante, de modo a oferecer um modelo com combinações de parâmetros adequadas e, portanto, subsidiar simulações realísticas e confiáveis para determinado sistema de tratamento.

A análise de sensibilidade pode ser considerada a primeira etapa desse procedimento de calibração mais robusto. Esta análise será apresentada em seguida, continuando o esquema apresentado na Figura 4-2.

4.3.3. Análise de Sensibilidade

Na modelagem de uma planta de tratamento de efluentes nem todos os parâmetros condicionantes das reações envolvidas precisam ser considerados para calibração dos modelos adotados e/ou otimização do processo tratamento. Por isso, para simplificar o aperfeiçoamento dos processos, parâmetros específicos que apresentem maiores efeitos sobre o funcionamento da planta podem ser selecionados para avaliação, enquanto os demais permanecem fixos com seus valores padrão (KIM; RAO; YOO, 2009).

Tabela 4-7 – Parâmetros estequiométricos e cinéticos das reações do processo de lodos ativados adotados no modelo ASM1.

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Padrão (20 °C) ^a	Literatura	
Estequiométricos					
1	Rendimento heterotrófico	Y_H	g DQO formada.(g DQO oxidada) ⁻¹	0,67	0,62 – 0,67 ^b
2	Rendimento autotrófico	Y_A	g DQO formada.(g N oxidada) ⁻¹	0,24	0,07 – 0,28 ^c
3	Fração de biomassa produzindo particulados	f_P	-	0,08	-
4	Massa de nitrogênio por massa de DQO na biomassa	i_{XB}	g N.(g DQO) ⁻¹ na biomassa	0,086	0,079 – 0,086 ^b
5	Massa de nitrogênio por massa de DQO em produtos da biomassa	i_{XP}	g N.(g DQO) ⁻¹ na massa endógena	0,06	-
Cinéticos					
1	Crescimento heterotrófico	μ_H	d ⁻¹	6	5,7 – 6 ^b
2	Coeficiente de meia saturação para heterotróficos	K_S	g DQO.m ⁻³	20	5 – 225 ^c
3	Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa heterotrófica	K_{OH}	g O ₂ .m ⁻³	0,2	0,01 – 0,2 ^c
4	Coeficiente de meia saturação de nitrato para biomassa heterotrófica denitrificante	K_{NO}	g NO ₃ -N.m ⁻³	0,5	0,1 – 0,5 ^c
5	Coeficiente de decaimento endógeno de biomassa heterotrófica	b_H	d ⁻¹	0,62	0,05 – 1,6 ^c
6	Crescimento autotrófico	μ_A	d ⁻¹	0,8	0,2 – 1,0 ^c
7	Coeficiente de meia saturação de amônia para biomassa autotrófica	K_{NH}	g NH ₃ -N.m ⁻³	1,0	0,75 – 1,0 ^b
8	Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa autotrófica	K_{OA}	g O ₂ .m ⁻³	0,4	0,4 – 2,0 ^c
9	Coeficiente de decaimento endógeno autotrófico	b_A	d ⁻¹	0,15	0,05 – 0,15 ^a
10	Fator de correção para crescimento anóxico de heterotróficas	η_g	-	0,8	0,6 – 1,0 ^c
11	Taxa de amonificação	K_A	m ³ .DQO.(g.dia) ⁻¹	0,08	0,07 – 0,08 ^b
12	Taxa específica máxima de hidrólise	K_h	g DQO lentamente biodegradável (g DQO.dia) ⁻¹	3	2,2 – 3 ^b
13	Coeficiente de meia saturação para hidrólise de substrato lentamente biodegradável	K_X	g DQO lentamente biodegradável (g DQO) ⁻¹	0,03	-
14	Fator de correção para taxa de hidrólise sob condições anóxicas	η_h	-	0,4	0,4 – 0,5 ^b

Fonte: (a) Henze et al. (1987); (b) Hauduc et al. (2011); (c) Ahn et al. (2014).

Na otimização do sistema de tratamento de lodos ativados, a condução de uma análise de sensibilidade antes da calibração do modelo ASM é importante para avaliar a relevância de cada parâmetro na previsão dos resultados pelo modelo. Os parâmetros que se mostrarem sensíveis representam possíveis mudanças em uma variável de saída, que são causadas pela modificação em uma variável de entrada (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 616; ZHOU et al., 2013).

Em outras palavras, a análise de sensibilidade busca identificar quais parâmetros do modelo – frações do esgoto afluente, parâmetros cinéticos, estequiométricos e operacionais por exemplo, influenciam significativamente as concentrações de variáveis-chave do sistema de tratamento, como DQO, SST e NH_3 no efluente ou SST no lodo de excesso, por exemplo.

Na análise de sensibilidade Global, são procedidas medidas das flutuações das respostas do modelo que são dependentes do tempo, a partir do efeito gerado por perturbações nos parâmetros desse mesmo modelo (FORTELA et al., 2019). Em aplicações matemáticas foi apresentado que as variáveis dependentes do tempo podem ser transformadas usando algumas funções base, visando obter representações independentes do tempo para as respostas do modelo e, assim, melhorar os resultados da análise de sensibilidade (SUMMER; SHEPHARD; BOGLE, 2012).

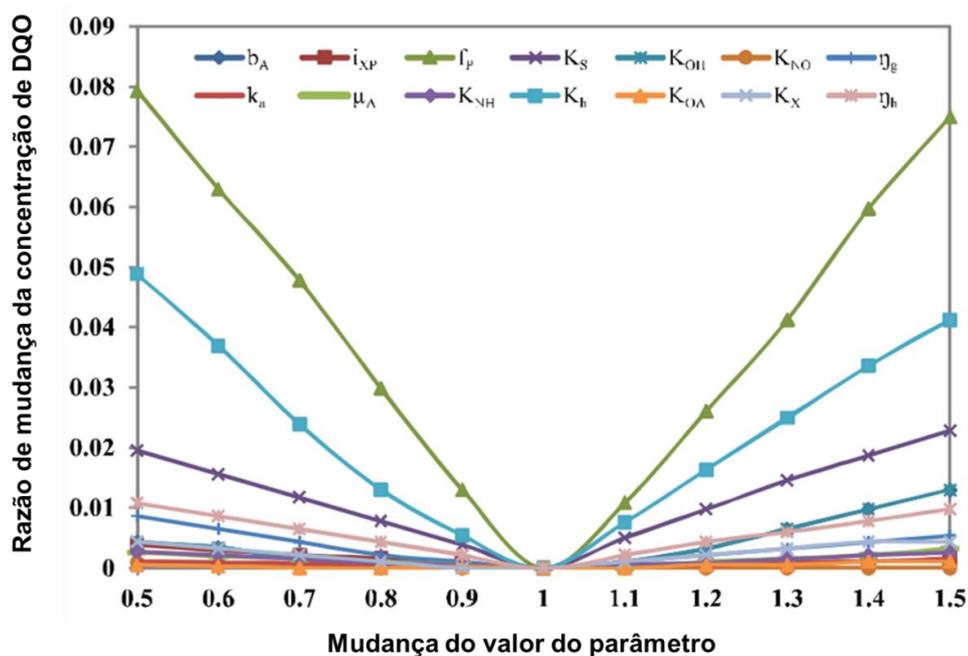
Para o tratamento de efluente, análises de sensibilidade têm focado na natureza local e na utilização de análises diferenciais das saídas do modelo em relação aos parâmetros (SIN et al., 2011). Outra alternativa consiste na análise de sensibilidade ligada à análise de incerteza e, portanto, à análise de variância. Neste caso, as saídas do modelo podem ser decompostas em frações, que são atribuídas às entradas únicas do modelo. Isto auxilia a indicar quais entradas constituem as maiores causas de incerteza nas saídas (HELTON; DAVIS, 2003).

Em um estudo foi aplicada uma análise de sensibilidade chamada “RVM”, em que todos os parâmetros dos modelos ASM1 e ASM3 foram modificados aleatoriamente dentro de uma mesma faixa, a partir do método de geração de número aleatório subtrativo. Nessa análise, foram testados 2.000 conjuntos de parâmetros para ambos os modelos (KIM et al., 2006).

Outros exemplos envolvendo análise de sensibilidade global incluem o Coeficiente de Regressão Padrão, o método de triagem de Morris e o Teste *Extended-FAST* (FORTELA et al., 2019).

Alguns estudos optam pela análise de sensibilidade que envolva a variação sequencial de cada parâmetro enquanto os demais são mantidos constantes (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012). Essa variação modifica os valores dos parâmetros em intervalos de 10%, dentro de uma faixa de 50 até 150%, considerando como 100% o valor padrão associado ao modelo. Os resultados são geralmente apresentados de forma gráfica, representando a mudança na concentração de determinada variável-chave (DQO efluente por exemplo) em função da alteração de cada parâmetro (Figura 4-3).

Figura 4-3 – Resultado da análise de sensibilidade para determinação dos principais parâmetros do modelo ASM1 em relação à DQO efluente.



Fonte: Adaptado de Ahn et al. (2014).

Os parâmetros sensíveis podem ser então distinguidos pela inclinação da reta que representa sua função no gráfico. No entanto, exemplificando a prática, para apenas cinco parâmetros diferentes seriam necessárias pelo menos (não considerando réplicas) 55 simulações do modelo, o que exige mais tempo para o desenvolvimento da calibração.

Apesar da metodologia anterior ser de grande valia, outros autores adotam uma forma diferente para identificar os parâmetros sensíveis em um modelo

matemático. O procedimento da técnica é o mesmo: variar cada parâmetro individualmente, mantendo o restante com seus valores fixos. Contudo, é adotada apenas uma alteração correspondente a 10% do valor, seja superior ou inferior ao valor padrão, dependendo da faixa teórica aceita na literatura. São adotadas diferentes definições para esta metodologia, como “perturbação de parâmetro” (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 619), “função de sensibilidade” (ZHOU et al., 2013), “coeficiente de sensibilidade normalizado” (ANDRAKA et al., 2018; LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011) e “cálculo da sensibilidade” (CHEN et al., 2020). Existem ainda autores que alteraram os parâmetros com aumentos de apenas 1% (PETERSEN et al., 2002).

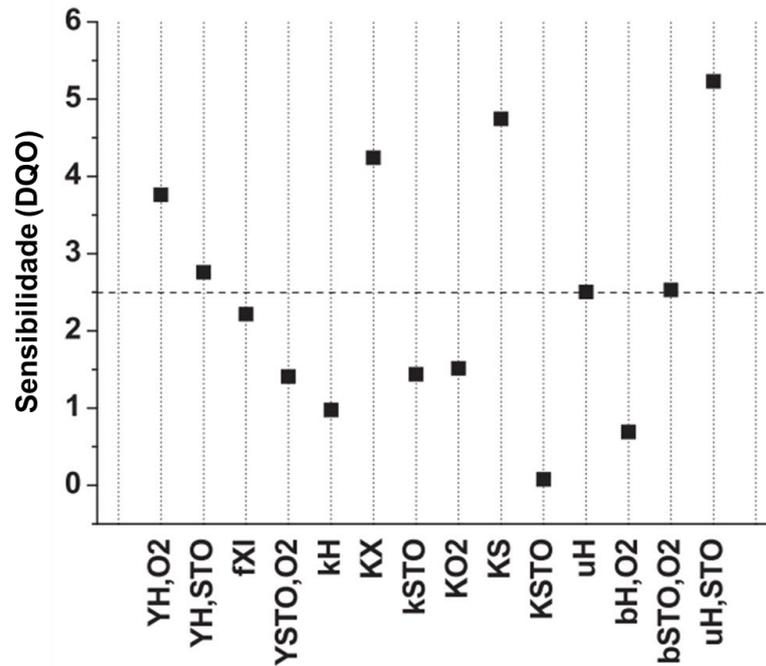
A abrangência dessa análise com apenas uma variação do valor do parâmetro (+/- 10% ou 1%) pode aparentar ser menor em comparação com as metodologias descritas anteriormente, uma vez que diminui a quantidade de intervalos de alteração testados para cada parâmetro. Por outro lado, a verificação da sensibilidade de cada parâmetro pode ser calculada com a Equação 4-3, utilizada no estudo de Zhou et al. (2013).

$$S_j^i = \frac{\frac{Y_{i1} - Y_{i0}}{Y_{i0}}}{\frac{P_{j1} - P_{j0}}{P_{j0}}} = \frac{\frac{\Delta Y_i}{Y_{i0}}}{\frac{\Delta P_j}{P_{j0}}} \quad \text{Equação 4-3}$$

O termo S_j^i representa o coeficiente indicativo da sensibilidade do parâmetro, Y_i é a variável de saída da modelagem (variável alvo do estudo), P_j é o parâmetro (cinético ou estequiométrico) que foi alterado no modelo, e os números zero (0) e um (1) se referem aos valores padrão e alterado, respectivamente.

Considerando a alteração de 10% em um parâmetro do modelo, a Equação 4-3 resulta na proporção da mudança percentual na variável de saída para uma modificação de 10% no parâmetro do modelo (ANDRAKA et al., 2018; LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011). Os coeficientes de sensibilidade calculados podem ser apresentados em tabela ou gráfico, sendo que o último pode facilitar a interpretação dos resultados (Figura 4-4).

Figura 4-4 – Coeficientes de sensibilidade de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM3 para resultados de DQO gerados pelo modelo.



Fonte: Adaptado de Zhou et al. (2013).

Por fim, um parâmetro é determinado como influente ou sensível em relação ao resultado de uma variável alvo gerado pelo modelo, quando seu coeficiente de sensibilidade é igual ou maior que 0,25 (LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011; PETERSEN et al., 2002).

Os parâmetros sensíveis, por sua vez, podem ser otimizados e usados para posterior calibração do modelo. Técnicas estatísticas para este aperfeiçoamento serão apresentadas na próxima seção.

4.3.4. Metodologia de Superfície de Resposta (MSR)

Esta metodologia é voltada para a avaliação de possíveis efeitos de variáveis independentes (X) (explicativas) e suas interações sobre variáveis dependentes (Y) (respostas). Modelos matemáticos, calculados a partir de dados gerados por experimentos delineados, definem as relações existentes entre os fatores (X) e as respostas (Y) (KIM; RAO; YOO, 2009).

Na revisão elaborada por Nair, Makwana e Ahammed (2014) podem ser encontrados diversos exemplos de aplicação da MSR em estudos compreendendo o tratamento de água e esgoto: coagulação-floculação, adsorção e biosorção, processos de oxidação avançados, tratamento eletroquímico, entre outros. Os mesmos autores elencam as etapas para realização da MSR:

1. Seleção das variáveis independentes e suas respectivas faixas experimentais;
2. Delineamento experimental e realização dos experimentos;
3. Geração da equação do modelo de regressão linear com base nos resultados dos experimentos;
4. Verificação da adequação do modelo;
5. Representação gráfica do modelo e obtenção das condições ótimas.

Alternativamente, na modelagem do processo de lodos ativados a primeira etapa descrita anteriormente pode envolver diferentes parâmetros do ASM: cinéticos e estequiométricos (LIM et al., 2012), operacionais ligados à estação de tratamento (AHN et al., 2014) e/ou frações da composição do esgoto afluente (ANDRAKA et al., 2018). Esses parâmetros podem ser selecionados a partir da análise de sensibilidade, para posterior otimização com uso da MSR.

A segunda etapa, por sua vez, pode ser realizada com simulações computacionais utilizando o ASM1, por exemplo, e os resultados dessas simulações podem ser empregados no desenvolvimento do modelo de regressão (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012).

Essas simulações são realizadas atendendo às combinações de fatores determinadas por um delineamento experimental. Para isso, podem ser adotados diferentes delineamentos experimentais, que variam de acordo com sua seleção de pontos experimentais e número de ensaios. Nair, Makwana e Ahammed (2014) destacam três opções de delineamento comumente adotadas: (1) delineamento fatorial de três níveis completo, (2) delineamento de *Box-Behnken* (*BBD* em inglês) e (3) delineamento composto central (*CCD* em inglês).

O número de ensaios é um fator determinante na escolha do melhor delineamento experimental, uma vez que esta escolha envolve a disponibilidade de recursos e tempo para o desenvolvimento dos experimentos, mesmo que sejam simulações computacionais.

No primeiro tipo de delineamento citado anteriormente, o número de ensaios é igual a 3^k , onde k corresponde ao número de variáveis independentes (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014). No *BBD* se pode calcular o número de ensaios (N) com a expressão $N = 2k(k-1) + c_p$ onde c_p é o número de réplicas no ponto central. Neste segundo delineamento experimental todos os fatores (X) devem ser ajustados

apenas em três níveis (-1,0, +1) e espaçados em intervalos iguais entre estes níveis (BEZERRA et al., 2008). No terceiro delineamento, *CCD*, o número de ensaios é calculado com a expressão $2k + 2k + c_p$. O *CCD* pode ser aplicado para otimização abrangendo muitos fatores, desde que todos os ensaios não precisem ser realizados sequencialmente, mas possam ser realizados em paralelo, ou seja, ao mesmo tempo (MASSART et al., 1998).

Como exemplo, o delineamento experimental utilizando *CCD* para três fatores (variáveis independentes) e três diferentes níveis de teste (codificados como: -1; 0; e +1) resulta em 20 ensaios, enquanto com o delineamento fatorial de três níveis completo seriam necessários 27 ensaios (ou simulações). O número de ensaios será proporcional ao número de fatores da análise (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014).

Em seguida, o modelo de regressão pode ser selecionado, sendo que o mesmo consiste em uma aproximação viável entre os fatores e as respostas. Para esse propósito, geralmente são utilizadas funções polinomiais, uma vez que uma equação linear não é capaz de descrever o efeito da interação entre diferentes parâmetros e nem determinar o ponto crítico. A equação quadrática de segunda ordem com termos de interação é comumente adotada na MSR (Equação 4-4).

$$y = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \beta_{ij} x_i x_j + \varepsilon \quad \text{Equação 4-4}$$

Os coeficientes de regressão β_0 , β_i , β_{ii} e β_{ij} correspondem ao intercepto, linear, quadrático e coeficientes de interação, respectivamente, x_i e x_j são variáveis independentes codificadas e ε representa os resíduos (erros) associados aos experimentos (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014).

Na quarta etapa da MSR a precisão do modelo de regressão selecionado precisa ser verificada. Neste sentido, podem ser calculados:

1. Coeficiente de determinação (R^2);
2. R^2_{ajustado} ;
3. Soma do erro de previsão do quadrado (*PRESS* em inglês);
4. R^2_{previsto} ;
5. Significância da regressão (F_0); e
6. Teste da falta de ajuste (*LOF* em inglês) (F_{LOF}).

Um modelo adequado apresenta os dois primeiros termos próximos a uma unidade, um pequeno valor para PRESS e o R^2_{previsto} com diferença menor ou igual a 0,2 em relação ao R^2_{ajustado} . Para os dois últimos termos, F_0 e F_{LOF} , a relação deve ser maior e menor que o valor de F tabulado, respectivamente (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014).

A raiz do quadrado médio do erro (*RMSE* em inglês) é outra medida de precisão. Ela é definida como a raiz quadrada da média do quadrado de todos os erros e é considerada como uma excelente métrica de erros para previsões numéricas. Esta métrica depende da escala, portanto, é restrita à comparação de erros previstos por diferentes modelos ou configurações de modelos para uma variável específica e não entre variáveis (BORZOOEI et al., 2019; NEILL; HASHEMI, 2018).

A *RMSE* pode ser usada para verificar a precisão do modelo de regressão em relação aos resultados de uma simulação computacional (Equação 4-5).

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (X_i - Y_i)^2}{n-1}} \quad \text{Equação 4-5}$$

X_i é o valor experimental (ou resultado da simulação), Y_i é o valor previsto pelo modelo de regressão (MSR) e n número de ensaios disponíveis para a análise. A precisão da equação de regressão é maior quando o *RMSE* é próximo de zero (AHN et al., 2014; LIM et al., 2012).

Existem ainda outros métodos que podem ser usados para inferir a qualidade de adequação de um modelo, os quais envolvem o cálculo do erro relativo, bem como alternativas de interpretação gráfica que relacionam os valores simulados no ASM1 com os valores previstos por um modelo MSR, por exemplo, ou ainda os valores observados no monitoramento com os valores previstos pelo ASM1 (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 605).

Por fim, os resultados do modelo de regressão podem então ser visualizados em gráficos de superfície de resposta, os quais podem indicar pontos máximos e mínimos da variável resposta dentro de uma região experimental, pontos intermediários, entre outros cenários. Além disso, condições ótimas, ou seja, valores ideais das variáveis independentes avaliadas, podem ser obtidos para atender a um determinado objetivo a respeito da variável resposta. Um exemplo é buscar pela

maior eficiência de remoção de determinado contaminante (NAIR; AHAMMED, 2015; NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014). Outro objetivo consiste em reduzir ao máximo o erro de previsão existente entre as previsões de uma simulação e os dados medidos em uma ETE real.

Em estudos em que o objetivo de análise e otimização envolva mais de uma variável resposta pode ser adotada a chamada MSR “Múltipla” (MSRM). Com este método é possível otimizar o modelo para diversas variáveis respostas simultaneamente (DQO, SST, NH₃...). Na MSRM são utilizadas “funções de desejabilidade” que levam à redução de respostas múltiplas para uma medida agregada única, solucionando a equação de regressão como uma otimização de objetivo único. Se o resultado da função é igual a uma unidade, a resposta é satisfatória e exatamente igual ao valor alvo; para resultados nulos a resposta se encontra fora da região aceitável, sendo completamente inaceitável (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009). A desejabilidade geral pode ser expressa pela média geométrica das desejabilidades calculadas, podendo ser usada para avaliação da otimização da MSRM (LI et al., 2007).

No Quadro 4-1 estão descritas vantagens e limitações da MSR que podem ser úteis na aplicação desta metodologia para otimização da modelagem matemática e simulação computacional do processo de lodos ativados.

Para a uso da MSR na modelagem com ASM, a determinação dos níveis dos fatores estudados e a explicação dos mecanismos envolvidos nos resultados simulados e previstos pelo modelo de regressão certamente exigirão conhecimento teórico/experiência prática do modelador (RIEGER et al., 2013).

Em contrapartida, diante das diversas vantagens de aplicação da MSR, se destaca o estabelecimento dos níveis dos fatores que proporcionem uma determinada resposta otimizada. Isso é particularmente relevante para o setor de tratamento de água e esgoto, o qual lida frequentemente com resoluções impondo limites específicos ao tratamento. Inobstante, ainda são necessárias mais avaliações considerando a aplicação da MSR em situações reais, como em estudos envolvendo estações de tratamento em funcionamento, e a associação da MSR com outras técnicas de modelagem, como a análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo ASM1 (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014).

Quadro 4-1 – Vantagens e limitações da Metodologia de Superfície de Resposta.

Vantagens	Limitações
❖ Geração de bastante informação a partir de poucos ensaios experimentais.	❖ Número de ensaios aumenta com o número de variáveis independentes.
❖ Principais efeitos das variáveis e efeitos da interação entre variáveis sobre a resposta podem ser estudados.	❖ Baixa capacidade de previsão fora do domínio experimental.
❖ Modelos de regressão podem ser construídos para auxiliar na previsão de variáveis respondidas.	❖ Adequação dos dados apenas em equações polinomiais de primeira e segunda ordem.
❖ Ilustrações gráficas facilitam a interpretação visual das relações funcionais entre as variáveis de estudo.	❖ Os fatores envolvidos devem variar continuamente ao longo do domínio experimental.
❖ Determinação dos níveis dos fatores que proporcionam resposta otimizada.	❖ O modelo pode dizer o que acontece em diferentes condições, mas não consegue explicar os mecanismos do processo.
❖ Respostas múltiplas podem ser analisadas e as condições ótimas envolvendo todas as respostas podem ser determinadas.	
❖ Com experimentos bem planejados, a duração do projeto pode ser estimada.	
❖ A sensibilidade da variável resposta aos fatores de interesse pode ser analisada.	

Fonte: adaptado de Nair, Makwana e Ahammed (2014).

4.4. Estudos de referência

O processo de lodos ativados de ETE de grande porte foi modelado a partir do uso de dados de monitoramento padrão, sendo possível promover simulações estáticas para avaliação do desempenho do tratamento biológico (ANDRAKA et al., 2018). Particularmente, o modelo matemático ASM1 e o simulador STOAT© foram empregados também com dados de monitoramento para prever o tratamento de ETEs de grande porte (BAPTISTA, 2020; DEBIASI, 2012). Os estudos modelaram os sistemas de tratamento voltados para a remoção de SST, DQO e compostos de nitrogênio. Os autores reforçaram a importância da modelagem do sistema de tratamento de esgoto para treinamento de operadores, desenvolvimento de estratégias de controle operacional e auxílio na otimização da gestão das estações. Contudo, a qualidade do monitoramento dos dados está diretamente relacionada à validação e confiabilidade do modelo.

Com a análise de sensibilidade e simulações com o ASM1, alguns estudos buscaram identificar parâmetros cinéticos, estequiométricos e de sedimentação

sensíveis em relação a algumas variáveis de controle do processo de lodos ativados (AHN et al., 2014; LIM et al., 2012; PETERSEN et al., 2002) (Tabela 4-8). As variáveis envolvem DQO, SST e compostos de nitrogênio medidas no tanque de aeração, decantador secundário e efluente do processo de lodos ativados.

Dos parâmetros estequiométricos (5) e cinéticos (14) do ASM1 (HENZE et al., 1987; Tabela 4-7), apenas quatro não foram identificados como sensíveis (Tabela 4-8): o rendimento autotrófico (Y_A), a massa de nitrogênio por massa de DQO em produtos da biomassa (i_{XP}) (esteq.), o coeficiente de meia saturação de nitrato para biomassa heterotrófica denitrificante (K_{NO}) e o coeficiente de meia saturação para hidrólise de substrato lentamente biodegradável (K_X) (cinét.).

Por outro lado, a sensibilidade do rendimento heterotrófico (Y_H) é observada com maior frequência para as variáveis avaliadas – SST, DQO, nitrogênio – e nas diversas etapas do processo de lodos ativados – aeração, sedimentação e efluente.

Amônia (7 parâmetros) e DQO (6 parâmetros) no efluente, e SST no decantador secundário (5 parâmetros) foram as variáveis mais afetadas por parâmetros estequiométricos e cinéticos do modelo ASM1. E somente a última variável sofreu modificação com variações nos parâmetros do sedimentador secundário.

De modo geral, com os resultados apresentados na Tabela 4-8 se nota que a sensibilidade de um parâmetro em relação a uma mesma variável pode diferir entre os estudos considerados. Alguns fatores que podem explicar essa variação são a especificidade metodológica de cada estudo (inclusão/exclusão de determinados parâmetros na análise de sensibilidade, por exemplo), condições de modelagem (estática, dinâmica), a configuração e etapa do processo de lodos ativados considerada (aeração, sedimentação e efluente) e características do esgoto afluente (fracionamento de matéria orgânica e sólidos).

Outro fator que merece atenção consiste na origem do esgoto afluente. Os estudos usaram dados de diferentes afluentes: pecuária (AHN et al., 2014), doméstico (LIM et al., 2012) e mistura de industrial com doméstico (PETERSEN et al., 2002). Portanto, o tipo de esgoto afluente (relacionado à composição do esgoto) pode condicionar a sensibilidade dos parâmetros do modelo ASM1.

Tabela 4-8 – Parâmetros sensíveis do modelo ASM1 identificados com análise de sensibilidade em relação as variáveis de controle do processo de lodos ativados. Variáveis iguais identificadas com cores, independente da etapa de tratamento: azul (SST), laranja (DQO) e amarelo (compostos de nitrogênio).

Parâmetro sensível	Símbolo	Variáveis avaliadas								
		Tanque de aeração			Tanq. sedim.	Efluente				
		SST ^a	DQO ^a	NTK ^a	SST ^a	DQO ^b	N total ^b	DQO (solúvel rapidamente biodegradável) ^c	N (nitrito + nitrato) ^c	N-NH ₃ ^c
Estequiométrico										
Rendimento heterotrófico	Y_H	X	X		X			X	X	X
Fração de biomassa produzindo particulados	f_P					X				
Massa de nitrogênio por massa de DQO na biomassa	i_{XB}	X			X					
Cinético										
Crescimento heterotrófico	μ_H		X		X			X		
Crescimento autotrófico	μ_A				X				X	X
Taxa de decaimento endógeno de biomassa heterotrófica	b_H			X	X			X		
Coeficiente de decaimento endógeno autotrófico	b_A								X	X
Coeficiente de saturação para heterotróficos	K_S		X			X		X		
Coeficiente de meia saturação de amônia para biomassa autotrófica	K_{NH}								X	X
Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa heterotrófica	K_{OH}						X			X
Coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa autotrófica	K_{OA}								X	X
Taxa específica máxima de hidrólise	K_h					X	X	X		X
Taxa de amonificação	K_A			X						
Fator de correção para crescimento anóxico de heterotróficas	η_g						X			
Fator de correção para taxa de hidrólise sob condições anóxicas	η_h						X			
Tanque de sedimentação										
Parâmetro de sedimentação em baixa concentração	r_P				X					
Velocidade de sedimentação teórica máxima	V_0				X					

Fonte: elaborado pelo autor a partir dos resultados de (a) Lim et al. (2012), (b) Ahn et al. (2014) e (c) Petersen et al. (2002).

Além do tipo de afluente, a temperatura ambiente também pode influenciar as reações bioquímicas do tratamento biológico, o que pode afetar as previsões de um modelo para um processo de tratamento de esgoto sanitário dependendo da região geográfica (clima) (SARKAR et al., 2010).

Todos os comentários traçados sobre os resultados da Tabela 4-8 ressaltam a importância da análise de sensibilidade de parâmetros do modelo ASM1 em práticas de modelagem e simulação do processo de lodos ativados. Inobstante, destaca-se que especificidades do afluente e a localização geográfica do processo de tratamento de esgoto a ser modelado podem constituir fatores condicionantes das previsões do modelo. A calibração com análise de sensibilidade pode proporcionar, por sua vez, adequação do modelo ASM1 às características de determinado afluente e processo de tratamento (AHN et al., 2014).

É válido ressaltar duas questões para finalizar as considerações sobre a análise de sensibilidade na modelagem do processo de lodos ativados. Primeiramente, o coeficiente de sensibilidade calculado para os parâmetros do modelo ASM é amplamente adotado como métrica de precisão da sensibilidade dos parâmetros (ANDRAKA et al., 2018; CHEN et al., 2020; LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011; PETERSEN et al., 2002; ZHOU et al., 2013). Uma análise de sensibilidade sem critérios de verificação de tal precisão pode induzir à calibração de parâmetros irrelevantes e a previsões incertas pelo modelo ASM (AHN et al., 2014).

A segunda questão se refere aos parâmetros sensíveis identificados em processo de calibração a partir de simulações em estado estático, os quais certamente podem ser usados na calibração com simulação dinâmica (LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011). Isto é uma vantagem quando a calibração é feita com dados de monitoramento padrão, os quais normalmente não subsidiam simulações dinâmicas (requer registros de hora em hora), porque geralmente se originam de registros de menor frequência (semanal, mensal). Em contrapartida, é importante ressaltar que já foram identificados parâmetros mais relevantes para ambas as condições de simulação dos lodos ativados – estática: Y_H , f_p , b_H , e $X_{I,afluente}$; e dinâmica: μ_H , μ_A , η_g , η_h , K_S , K_{NH} , K_{OH} , K_{OA} (PETERSEN et al., 2003).

A Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) é uma ferramenta estatística adotada na determinação de valores ótimos dos parâmetros sensíveis de um modelo ASM. Essa determinação já foi realizada para parâmetros estequiométricos e

cinéticos do ASM1 (AHN et al., 2014; LIM et al., 2012) e também para parâmetros operacionais de processos de tratamento de efluentes (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009).

A partir de um planejamento experimental, diferentes combinações de valores (pré-estabelecidos) dos parâmetros sensíveis são rodadas no modelo ASM. Os resultados destas simulações são submetidos à análise de regressão linear múltipla. Lim et al. (2012) utilizaram uma função objetiva de variáveis resposta que calcula os erros do modelo, os quais são empregados como dados de entrada na análise de regressão. Estes erros correspondem a diferença entre o resultado previsto pelo modelo ASM e o valor observado/medido em campo.

O método proposto por Lim et al. (2012) pode ser apropriado para estabelecer valores ótimos de parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1, de modo que as previsões do modelo sejam bem próximas da realidade do processo de tratamento. O estudo de caso realizado pelos autores confirmou essa suposição, em que a diferença entre os dados reais e os resultados de simulações sempre foi menor quando foram utilizados os valores de parâmetros otimizados para calibração do ASM1 com MSR baseada nos erros do modelo (Tabela 4-9).

Tabela 4-9 – Dados observados na ETE e resultados de simulações com ASM1 utilizando parâmetros cinéticos e estequiométricos com valores padrão do modelo e com valores otimizados pela MSR.

Variável de saída	Dado real	Simulação com parâmetros cinéticos e estequiométricos	
		Padrão	Otimizado
SST (mg/l)	13	14,5	13
DQO (mg/l)	43	46	43
NTK (mg/l)	1,6	2,5	2

Fonte: adaptado de Lim et al. (2012).

Os resultados de Ahn et al. (2014), que não adotaram a função dos “erros do modelo” como dado de entrada para a análise de regressão linear, levaram à diferenças maiores entre os dados reais e os previstos pelo modelo ASM1. Na otimização dos parâmetros, os autores usaram a diferença entre os resultados previstos pelo modelo ASM e os resultados previstos pelo modelo de regressão linear, gerado pela MSR. Mesmo assim, os autores ainda obtiveram saídas do ASM1 bem mais próximas dos dados reais quando optaram por parâmetros calibrados com MSR ($RMSE_{DQO} = 6,2$), em comparação ao uso de valores padrão do modelo de lodos ativados ($RMSE_{DQO} = 35,78$) (a precisão do modelo ASM é maior para $RMSE$ próximo a zero).

Para a determinação dos valores ótimos dos parâmetros operacionais do processo de lodos ativados, a mesma sequência de métodos pode ser usada – análise de sensibilidade, planejamento experimental, simulações, otimização dos parâmetros com MSR e verificação de precisão dos modelos matemáticos e de regressão.

Ahn et al. (2014) ainda usaram o modelo calibrado, conforme descrito anteriormente, para atender à legislação ambiental avaliando a possibilidade de aumentar a qualidade do efluente de um processo avançado de tratamento de efluente de pecuária (*Bardenpho* de quatro etapas modificado). Para isso, os pesquisadores otimizaram parâmetros operacionais do processo – concentração de oxigênio dissolvido (OD), taxa de retorno interna (TRI) e taxa de retorno do lodo (TRL) – visando a maximização da remoção de DQO e NT. A otimização desses parâmetros também foi realizada com análise de regressão linear múltipla, baseada na minimização da diferença entre as concentrações simuladas com ASM1 e as previstas pela regressão. Com as condições ótimas determinadas, os resultados de DQO e NT diminuíram cerca de 72% e 44%, respectivamente, comparados aos resultados simulados com valores padrão das condições operacionais.

Os autores ainda compararam as previsões da simulação com resultados reais de operação em escala piloto, obtendo diferenças de 30 mg/l para DQO e 6 mg/l para NT. Justificativas para tal diferença correspondem à falta de critério para determinação dos parâmetros sensíveis na análise de sensibilidade (os autores não adotaram o coeficiente de sensibilidade), altos valores de *RMSE* para o modelo de regressão (6,2 e 2,1 para DQO e NT, respectivamente) e a composição do afluente.

De qualquer maneira, os autores consideraram as diferenças entre os resultados da simulação computacional e da planta em escala piloto não significativas e recomendaram que podem diminuir com o uso de critérios mais específicos na metodologia de otimização dos parâmetros operacionais. Portanto, as condições operacionais ótimas calculadas podem ser adotadas para o atendimento das exigências de qualidade da água no contexto daquele estudo.

A metodologia empregada no estudo anterior é similar à usada por Kim, Rao e Yoo (2009), porém neste último estudo o foco foi na maximização da remoção de nutrientes (nitrogênio – N e fósforo – P) em um processo A₂O. Os autores otimizaram os valores: do ponto de ajuste do OD; e das concentrações do retorno

interno para remoção de nitrato e do descarte de lodo. A otimização dos valores na simulação computacional do processo aumentou simultaneamente a nitrificação e denitrificação, e obteve remoções de 78% e 80% de N e P, respectivamente. Na comparação com um processo real de tratamento as remoções foram quase iguais às da simulação para as duas variáveis. Sendo assim, a otimização dos parâmetros operacionais do tratamento com a análise de regressão maximizou as remoções de nutrientes do processo, principalmente para o P (valores anteriores de 76% - N; 69,4% - P). Pelo seu caráter sistemático, o método de otimização proposto por Kim, Rao e Yoo (2009) é recomendado pelos autores para outros processos de tratamento.

Lim et al. (2012) e Ahn et al. (2014) utilizaram o ASM1 e MSR para otimização de parâmetros dos modelos de lodos ativados e decantador secundário. O primeiro estudo avaliou o efeito dos parâmetros apenas sobre SST no efluente tratado, enquanto o segundo trabalho considerou DQO e NT da saída de um processo avançado de tratamento de efluente de pecuária. Sendo assim, ainda há a necessidade de avaliar a sensibilidade dos parâmetros com otimização de seus valores para variáveis de controle do processo de tratamento de esgoto doméstico (DQO, DBO, SST e NH_3 do efluente tratado).

Muitos são os exemplos de pesquisa que justificam o desenvolvimento do processo de calibração sistemática do ASM1, envolvendo análise de sensibilidade e MSR. Esta metodologia é apropriada para avaliar e otimizar parâmetros cinéticos e estequiométricos para calibração do ASM1, visando a modelagem de ETE de grande porte a partir de dados de monitoramento padrão. Esse método de calibração ainda pode auxiliar principalmente na melhoria de precisão das previsões do ASM1 em relação a dados reais medidos no processo de lodos ativados, voltados para o controle das concentrações efluentes de DQO, SST e NH_3 .

No entanto, grande parte das pesquisas envolvendo a otimização de parâmetros do ASM1 foram realizadas na Europa, América do Norte e Ásia (HAUDUC et al., 2011), sendo necessário ampliar para outras regiões, uma vez que os parâmetros de um modelo podem variar conforme a composição do esgoto considerando fatores como o espaço e o tempo (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 600).

Não obstante, a ampliação geográfica desse tipo de pesquisa ainda contribui para que sejam exploradas aplicações de simulações com STOAT e ASM1 na modelagem de ETEs de grande porte situadas em regiões de clima diferente do temperado, onde o STOAT tem sido amplamente validado. A variação climática, por sua vez, ainda possibilita incorporar a influência da temperatura do esgoto em processo de tratamento na otimização dos parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 (SARKAR et al., 2010).

Especificamente na região de clima subtropical no Sul do Brasil, alguns autores relacionaram o STOAT e o ASM1 para modelagem de esgoto doméstico (BAPTISTA, 2020; PISTORELLO, 2018). Em contrapartida, não foram encontrados estudos que associaram dados de monitoramento padrão de lodos ativados com análise de sensibilidade e MSR para realizar a calibração sistemática do ASM1, visando propor uma configuração de parâmetros cinéticos e estequiométricos ótimos do modelo que sejam representativos de esgoto doméstico do Brasil e de região de clima subtropical.

5. METODOLOGIA

5.1. ETE de estudo

Na modelagem foi adotada a ETE São João Navegantes (ETE-SJNV), localizada na cidade de Porto Alegre, Rio Grande do Sul (29°59'29"S 51°11'43,5"O), região de clima subtropical. A ETE-SJNV é considerada de grande porte, porque atende cerca de 150 mil habitantes e possui vazão nominal de 444 l/s (RIO GRANDE DO SUL, 2018; VON SPERLING, 2016). O destino final do esgoto tratado pela ETE é o coletor geral pluvial do bairro Humaitá, em Porto Alegre. O corpo receptor do efluente é o Saco do Cabral, situado no Delta do Jacuí, próximo à foz do rio Gravataí (PREFEITURA MUNICIPAL DE PORTO ALEGRE, 2015).

O sistema utilizado na ETE é composto por tratamento preliminar (gradeamento e caixa de areia), tratamento biológico (lodos ativados) e tratamento do lodo biológico (centrífugas e digestores anaeróbios). Após o tratamento preliminar, o esgoto afluente se divide em dois módulos, em que cada módulo possui duas linhas de fluxo, onde se inicia o processo de tratamento com lodos ativados. Este é composto por tanque de aeração com ar difuso, decantadores secundários e bombas de recirculação de lodo ativado (Figura 5-1). As dimensões das unidades de tratamento foram detalhadas nos resultados deste estudo.

Pela inexistência de decantador primário o processo de lodos ativados empregado na ETE-SJNV se aproxima da condição de aeração prolongada. Vale ressaltar também que o sobrenadante do tratamento do lodo biológico é retornado ao início da linha de tratamento, antes da caixa de areia. A vazão da estação é monitorada no ponto entre a caixa de areia e o tanque de aeração, ou seja, já contempla a contribuição do sobrenadante do tratamento do lodo biológico.

5.2. Calibração sistemática do modelo ASM1

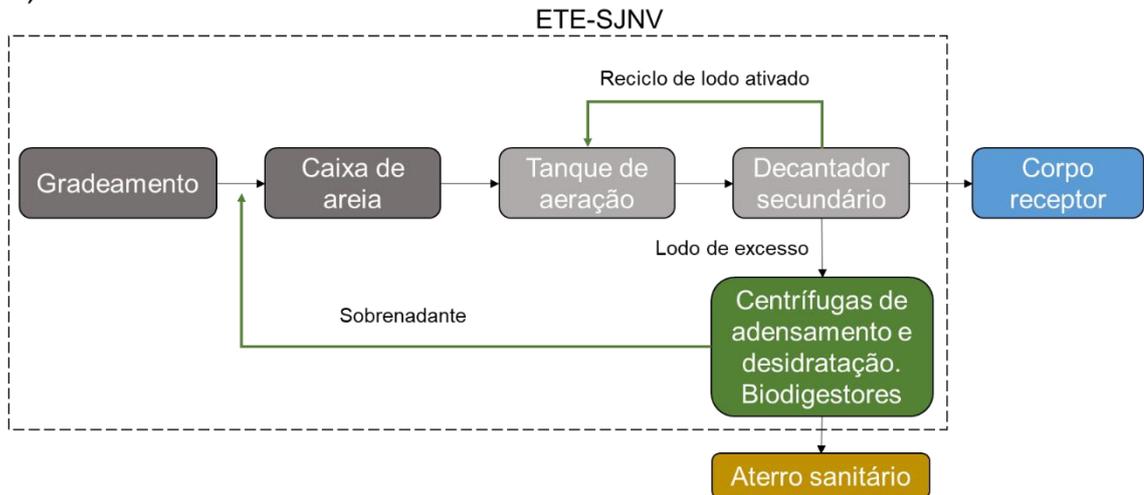
Na Figura 5-2 estão apresentadas as etapas para a calibração sistemática e otimização de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1, empregadas neste estudo para modelagem matemática e simulação computacional do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

A partir do fluxograma apresentado é possível visualizar a relação de cada etapa do trabalho com as principais características do estudo: (1) ETE de estudo, (2)

modelagem matemática e simulação computacional do processo de tratamento de esgoto e (3) modelagem estatística para avaliação e otimização de parâmetros do ASM1. O principal objetivo de cada etapa também é destacado em **negrito**. Adiante serão descritas as tarefas vinculadas a cada etapa.

Figura 5-1 – (a) Esquema e (b) vista aérea do sistema de tratamento da ETE-SJNV.

a) Sistema de tratamento

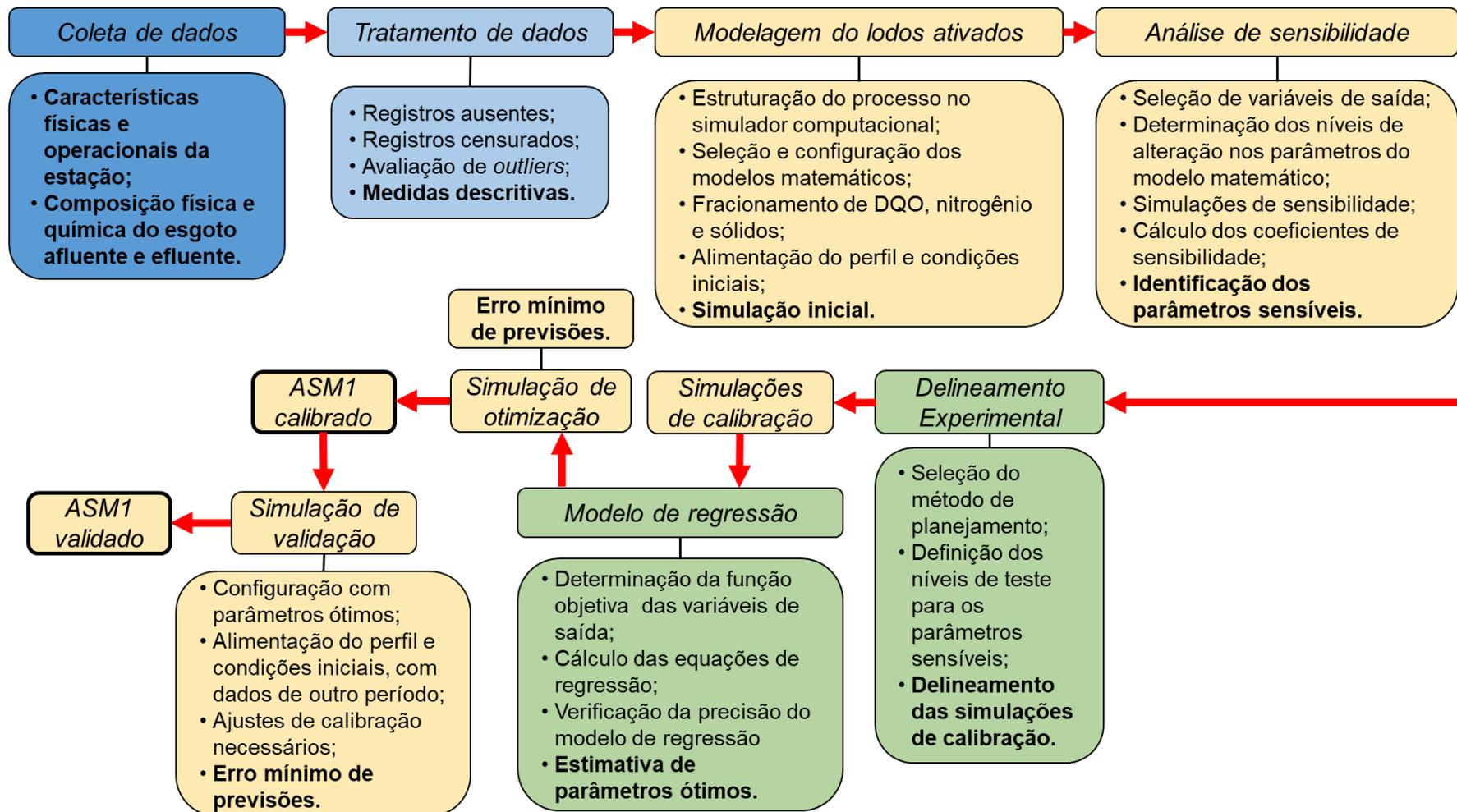


b) Vista aérea



Fonte: Google Earth.

Figura 5-2 – Etapas da calibração sistemática e otimização de parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1, aplicadas à modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. As cores representam a relação das etapas do trabalho com: a ETE de estudo (azul), a modelagem matemática e simulação computacional do processo de tratamento (amarelo) e a modelagem estatística (verde). Os principais objetivos das etapas estão em negrito.



Fonte: autor.

5.2.1. Coleta de dados

Esta etapa foi realizada juntamente com a gerência da ETE-SJNV, em que foram levantadas as características físicas do processo de tratamento, como dimensões do tanque de aeração e decantadores secundários, bem como dados operacionais ligados ao controle do processo.

Estes últimos se referem à concentração de oxigênio dissolvido no tanque de aeração; concentração de sólidos do liquor misto; idade do lodo; vazão de retorno do lodo ativado; vazão, período e intervalo de descarte do lodo de excesso.

Também foram discutidas algumas especificidades do processo e da operação que poderiam ser consideradas para explicar problemas ocorrentes ou para implementação na modelagem. Dados específicos da fase de tratamento do lodo biológico não foram levantados por não serem contemplados nos objetivos da modelagem do processo de lodos ativados do presente estudo.

Outra tarefa da etapa de coleta de dados consiste na aquisição das medidas da composição física e química do esgoto sanitário afluente e efluente do sistema de tratamento da ETE-SJNV. Assim, foram acessados registros de monitoramento padrão da ETE dos anos de 2018 e 2019. Estes dados envolvem amostras pontuais, e não compostas, realizadas na estação.

Foram levantados os valores para os parâmetros de interesse da modelagem, sendo eles:

- Parâmetros físicos: vazão, temperatura do esgoto e SST;
- Parâmetros químicos: DBO₅, DQO, NH₃ e pH.

5.2.2. Tratamento dos dados

Medidas estatísticas precisas para os dados podem diferir de acordo com o período considerado (um ou dois anos). Sendo assim, o tratamento dos dados foi feito de forma separada para cada ano (2018 e 2019), uma vez que assim serão usados, separadamente: dados de 2018 e 2019 para calibração e validação do modelo ASM1, respectivamente.

O *software Microsoft Excel* foi usado para o tratamento dos dados. O programa *Minitab® Statistical Software* (MINITAB, 2021) foi adotado para o cálculo das medidas descritivas e as análises estatísticas.

Ausência de registros

É comum que existam valores em branco para certas variáveis quando se trabalha com dados secundários, que é o caso de registros de monitoramento padrão. Por isso, após a estruturação dos dados para os anos de 2018 e 2019, os registros ausentes foram identificados para as amostras de cada variável e foi realizada uma avaliação do impacto deles em toda a amostra (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 117).

Registros censurados

Diferentemente da ausência de dados, também existem os dados censurados, que ocorrem geralmente com as medidas de concentração de variáveis, quando não são obtidos valores quantificáveis nas análises laboratoriais de um parâmetro. As concentrações de determinada variável do tratamento de esgoto podem ser muito baixas e, portanto, inferiores ao limite de detecção dos métodos analíticos (LDM).

Dessa forma, para a concentração de cada variável de controle e em cada ano, nas amostras de registros cujos dados censurados representam menos de 20% da população amostral, foi adotado o método de substituição do valor censurado pela fração de $\frac{1}{2}$ do LDM: 50% do intervalo entre zero e o LDM (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 119).

Avaliação de *outliers*

A determinação de *outliers* consiste em identificar valores que se encontram fora da faixa usual de observações de uma variável. A exclusão dos *outliers* pode ser importante, uma vez que valores provenientes de erros de coleta, de registro ou de análises laboratoriais podem distorcer as medidas estatísticas que descrevem o comportamento da variável. Por outro lado, o descarte de um *outlier* da base dados deve ser cuidadoso, dado que as vezes um valor não usual representa modificações reais em determinada variável, como um pico de vazão em decorrência de tempestades (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 123).

Inicialmente, para cada amostra de afluente e efluente das concentrações das variáveis avaliadas, foram identificados registros que gerassem valores negativos de eficiência de remoção (efluente > afluente). Eficiências negativas podem representar os mesmos erros que levam aos *outliers* ou ainda problemas durante o processo de

tratamento que não são comuns, portanto, dispensáveis. No presente estudo, os registros relacionados às eficiências negativas foram excluídos. Igualmente, para registros de afluente e de efluente, valores de DBO superiores a DQO registrados na mesma data foram descartados.

Em seguida, os *outliers* das amostras de afluente e efluente para cada variável, incluindo vazão de esgoto tratado, e de cada ano, foram identificados utilizando análise gráfica dos dados (gráfico de caixa). Depois, os *outliers* de DBO, DQO, NH₃ e SST foram avaliados em conjunto, mas separadamente para afluente e efluente em cada ano. Os *outliers* do pH e temperatura foram avaliados considerando a variação desse parâmetro, dada pela diferença entre o registro efluente e afluente em um mesmo dia. *Outliers* ligados a altas variações no pH e temperatura foram descartados. A vazão e seus *outliers* também foram avaliados graficamente ao longo do período de monitoramento, em que foram determinados os limites inferior e superior das amostras para identificação de *outliers*.

Na avaliação dos *outliers* foram considerados somente os registros remanescentes das análises anteriores, ou seja, sem registros ausentes, censurados, de eficiência de remoção negativa ou de DBO maior que DQO. As avaliações considerando todas as variáveis e o período de monitoramento visaram auxiliar à detecção de tendências nos comportamentos das variáveis e à busca por justificativas para exclusão ou permanência de determinado *outlier*.

Determinação das medidas descritivas dos registros

Depois da avaliação dos *outliers*, procedeu-se o cálculo das medidas de estatística descritiva das variáveis avaliadas. Para cada amostra, afluente e efluente, de 2018 e 2019, foram calculados: número de observações (*n*); valor mínimo; média aritmética; mediana; valor máximo; desvio padrão; coeficiente de variação; proporção de *outliers* descartados; eficiência de remoção média para DBO, DQO, amônia e SST; variação média da temperatura do esgoto; e variação média do pH (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020).

Comparação das concentrações com limites da legislação ambiental

É imprescindível que o efluente tratado de uma ETE atenda os valores de concentração estabelecidos pela legislação ambiental. Assim, as medidas de tendência central dos registros de monitoramento podem representar o tratamento

de esgoto em conformidade com os padrões de emissão. Essas medidas, por sua vez, podem ser usadas na calibração do modelo matemático contemplando o desempenho favorável do processo de tratamento. A partir da calibração, o modelo pode ser usado para diversas simulações, inclusive para testar possibilidades de baixo desempenho do tratamento que diminua a qualidade do efluente.

A partir das medidas de tendência central dos registros, foi verificado se as concentrações de DBO, DQO, NH₃ e SST no efluente da ETE-SJNV, em 2018 e 2019, atendem os valores máximos estabelecidos pela Resolução CONSEMA nº355/2017 (RIO GRANDE DO SUL, 2017), que regula a emissão de efluentes líquidos na região de estudo.

Foi investigado se a mediana de cada variável é menor que o limite estabelecido. Considerando que algumas amostras das variáveis avaliadas possam apresentar distribuição não normal e o número de observações maior ou igual a 10 em cada amostra, foi usado teste não paramétrico de sinal ($\alpha=0,05$) (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 253).

5.2.3. Modelagem do processo de lodos ativados

A partir das médias das variáveis de controle do processo de tratamento de esgoto, o processo de lodos ativados foi modelado visando sua simulação inicial (Figura 5-2). Nesta etapa foram consideradas as orientações do guia para modelagem de lodos ativados (RIEGER et al., 2013), em que o simulador computacional adotado consiste no STOAT© (endereço eletrônico para acesso: <https://www.wrcplc.co.uk/ps-stoat>). Considerando linhas de fluxo paralelas no processo de tratamento, optou-se pela modelagem de apenas uma linha (WRC PLC, 1994).

Estruturação do processo de tratamento no simulador computacional

No simulador computacional, criou-se um arquivo de trabalho representando o processo de lodos ativados da ETE-SJNV (Figura 5-1a). Foi implementado o processo de tratamento de crescimento suspenso composto por duas unidades de operação interligadas: (1) tanque de aeração e (2) o decantador secundário. Em seguida, foram adicionados os sub-modelos do processo de tratamento: esgoto bruto afluente à ETE; fluxo de ligação entre tanque de aeração e decantador secundário; esgoto tratado efluente do decantador; fluxo de retorno do lodo ativado

do decantador secundário para o tanque de aeração; e fluxo de descarte do lodo de excesso que deixa o processo de tratamento da fase líquida.

Seleção e configuração dos modelos matemáticos

Foram selecionados os modelos matemáticos para as unidades de operação do tratamento com lodos ativados. Para o tanque de aeração foi selecionado o modelo ASM1 da IWA (“IAWQ#1” no STOAT©) e para o decantador secundário o modelo *Version 3*.

A configuração consistiu no estabelecimento das características de dimensionamento, de operação e de condições iniciais para cada modelo matemático, sendo realizada com os dados coletados na ETE-SJNV para o ano de 2018, escolhido para a calibração dos modelos.

Dimensionamento

Inicialmente para o tanque de aeração foi determinado o volume em m³. Depois o número de estágios (N) (camadas) foi considerado igual a um, que consiste na configuração para um tanque de mistura completa (WRC PLC, 2002a). Nenhum método foi adotado para o descarte de lodo ativado, uma vez que essa atividade acontece no decantador secundário.

No modelo do decantador secundário foram inseridos os dados da área superficial e profundidade útil do tanque e a profundidade de alimentação do decantador. Nesse modelo, o número de camadas verticais (número de estágios) afeta a resolução com a qual é possível acompanhar a manta de lodo. Por isso, foi adotado número de camadas igual a nove, valor médio indicado no STOAT© (WRC PLC, 2002a). O retorno do lodo ativado para o tanque de aeração foi expresso em vazão (m³/h).

O método de descarte do lodo de excesso gerado no decantador secundário consistiu em vazão de descarte fixa e tempo de bombeamento de descarte variável, em que o estágio de medição de sólidos do liquor misto no tanque de aeração foi igual a um. Este método será descrito no item de configuração da operação do decantador secundário.

Operação

A configuração de operação das unidades de tratamento durante a modelagem no STOAT© requer a criação de uma nova “corrida” (*run* em inglês) ou

simulação. Assim, foi criado um novo arquivo para a simulação inicial em que foram inseridos o tempo da simulação e a temperatura do esgoto. O tempo adotado foi suficiente para estabilização do processo, equivalente a três vezes a idade do lodo média do sistema (BORZOOEI et al., 2019), e a temperatura igual a média para o ano de 2018. As outras condições para criação do arquivo foram padrões, uma vez que se tratou da primeira simulação do processo de lodos ativados da ETE de estudo (WRC PLC, 1994).

Para o tanque de aeração não foi necessário configurar a operação. Para o decantador secundário o método de descarte do lodo de excesso considerou o tempo de bombeamento variável. O tempo de bombeamento de descarte do lodo é ajustado automaticamente durante a simulação para manter a concentração de sólidos do liquor misto em um valor especificado. Essa variação do tempo de bombeamento acontece entre zero hora e um tempo máximo, para cada intervalo de descarte, e considera uma vazão de descarte fixa. O intervalo de eventos de descarte do lodo de excesso compreende o tempo desde o começo de um evento até o início do próximo evento. Os valores do tempo máximo de bombeamento e da vazão de descarte fixa, bem como da concentração de sólidos do liquor misto foram determinados de acordo com os dados de operação da ETE-SJNV.

Condições iniciais

No tanque de aeração os valores de concentração (mg DQO/l) dos microrganismos heterotróficos e autotróficos foram especificados, sendo mantidos com os valores padrões recomendados pelo STOAT© (WRC PLC, 2002a): 50 e 1 mg/l, respectivamente. A temperatura do esgoto também foi especificada conforme a média para 2018. Os demais dados de condições iniciais para esta unidade do tratamento foram mantidos nulos para serem calculados na primeira simulação.

No decantador secundário, as condições iniciais foram mantidas iguais às concentrações do esgoto bruto, que serão apresentadas adiante na seção de determinação do perfil do esgoto bruto. Dessa forma, contou-se com a simulação inicial para promover a estabilização das condições corretas do tanque (WRC PLC, 2002a).

Distribuição de fluxo

Para o tanque de aeração podem ser especificados dados da distribuição de fluxo no reator. Esses dados envolvem a fração do volume entre os estágios

existentes no tanque, distribuição de alimentação do afluyente e do lodo ativado recirculado e o controle do oxigênio dissolvido no tanque. Da mesma forma adotada para as condições iniciais, os dados de distribuição de fluxo do tanque de aeração foram mantidos nulos inicialmente e, em seguida, determinados durante a simulação inicial de 60 dias, visando a estabilização do tratamento.

Parâmetros cinéticos, estequiométricos e de sedimentação

A calibração do modelo ASM1 para o tanque de aeração depende do ajuste de cinco parâmetros estequiométricos e 14 parâmetros cinéticos do modelo (Tabela 4-7). Na simulação inicial, os parâmetros foram mantidos iguais aos valores padrões indicados no relatório que descreve o modelo ASM1 (HENZE et al., 1987).

No STOAT®, alguns desses parâmetros estão informados para 15 °C ($P_{15^{\circ}\text{C}}$) com seus respectivos coeficientes de temperatura (θ), que podem ser usados para conversão do valor do parâmetro para 20 °C ($P_{20^{\circ}\text{C}}$) (temperatura dos valores padrão) utilizando a relação adaptada de van't Hoff-Arrhenius (Equação 5-1) (TCHOBANOGLOUS et al., 2016, p. 88).

$$P_{20^{\circ}\text{C}} = P_{15^{\circ}\text{C}} \exp^{\theta(20-15)} \quad \text{Equação 5-1}$$

Para efeito de verificação, esses valores dependentes da temperatura foram convertidos de 15 para 20 °C e comparados com os valores do modelo (HENZE et al., 1987). Considerando a equivalência dos valores, não foi preciso converter os valores padrões para a temperatura do esgoto da ETE-SJNV, uma vez que o STOAT® faz esta conversão automaticamente, utilizando os coeficientes de temperatura dos parâmetros e o valor da temperatura do esgoto do processo informado na criação da simulação.

No modelo *Version 3* do decantador secundário, os valores dos parâmetros de sedimentação foram estabelecidos levando em consideração a característica de aeração prolongada do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Portanto, foi assumido que os parâmetros de sedimentação estão correlacionados com a aeração prolongada e com o valor do denominado Índice Volumétrico do Lodo Agitado (IVLA) (*Stirred Sludge Volume Index* – SSVI em inglês). O IVLA é determinado para uma concentração de sólidos do liquor misto igual a 3.500 mg/l ($\text{IVLA}_{3,5}$), o que uniformiza os valores dos lodos viabilizando comparações.

No presente estudo foi adotado o valor de $IVLA_{3,5}$ igual a 100 ml/g, considerado um valor médio para lodo com “sedimentabilidade justa” (VON SPERLING, 1994). A partir desse valor e da correlação com a característica de aeração prolongada, o STOAT© automaticamente estima os parâmetros de velocidade de sedimentação, velocidade máxima, parâmetro de sedimentação impedida e parâmetro discreto (WRC PLC, 2002a). O parâmetro de início da floculação não afeta as previsões do modelo e foi adotado o valor recomendado igual a 250 mg/l. E para a fração não sedimentável foi adotado valor médio recomendado igual a 0.001 (WRC PLC, 2002a).

Determinação do perfil do esgoto bruto

Depois da configuração dos modelos matemáticos ASM1 e *Version 3*, o processo estruturado no simulador foi alimentado com os dados da composição do esgoto bruto afluente à ETE-SJNV. Para isso, foi gerado um perfil que envolve dados físicos e químicos do mesmo.

Especificamente para o modelo ASM1, os dados necessários para representação do esgoto bruto se referem à vazão, temperatura, pH, sólidos suspensos, matéria orgânica e nutrientes (apenas o nitrogênio, porque o processo não contempla remoção de fósforo). Os três últimos componentes foram adicionados como frações de SST, DQO e nitrogênio, respectivamente.

Os demais componentes do esgoto sanitário bruto não mencionados neste parágrafo, foram mantidos iguais aos valores padrões existentes no STOAT© na edição do perfil do afluente, uma vez que são dispensados de determinação prévia e podem ser estabelecidos durante a simulação inicial do processo de tratamento (WRC PLC, 2002a).

Apesar da variável DBO ter sido determinada nas medidas descritivas do processo de tratamento da ETE-SJNV, ela não foi considerada na modelagem, uma vez que o STOAT© não gera resultados diretos de DBO. O dado mais aproximado gerado pelo simulador consiste na concentração de DQO biodegradável. Esta, por sua vez, poderia ser convertida para DBO através de relação teórica. Contudo, como esta conversão seria indireta, optou-se por adotar apenas resultados diretos da simulação, sendo as concentrações efluentes de SST, DQO e NH_3 .

Fórmula do perfil de esgoto afluyente

Foi adotado o perfil de padrão sinusoidal que simula oscilações da composição do esgoto durante o dia no decorrer da simulação do processo de tratamento. Este padrão é recomendado quando apenas dados médios do tratamento estão disponíveis para a simulação (WRC PLC, 2002a), sendo aplicável ao presente estudo. Adiante, para cada componente (físico e químico) do esgoto afluyente foram informados: valor médio, frequência, fase e amplitude.

O valor médio foi proveniente dos registros de monitoramento da ETE-SJNV. A frequência corresponde ao período de oscilação, que foi diário para todos os componentes, exceto para temperatura que foi anual. O valor da frequência é o resultado de $2*(\pi/X)$, em que X é a quantidade de horas do período desejado. Sendo assim, para temperatura foi adotada frequência de $7,27E-4$ (24h/dia*360dias) e para o restante dos componentes o valor de 0,261799 (24h). A fase foi mantida em seu valor padrão, ou seja, igual a zero. Para amplitude, foram realizadas simulações com alguns valores para avaliar se existe diferença entre as previsões em relação aos dados observados na ETE-SJNV e aos resultados gerados pela simulação utilizando perfil de padrão constante (sem oscilações).

Fracionamento da DQO, SST e nitrogênio

A partir do valor de DQO total médio, originado dos registros de monitoramento da ETE-SJNV, foram estimadas as frações biodegradáveis e não biodegradáveis solúveis e particuladas (Tabela 5-1). As relações teóricas adotadas representam a degradabilidade de esgoto doméstico de concentração média (entre forte e fraca).

As frações de sólidos suspensos voláteis e não voláteis também foram estimadas considerando o valor de SST médio registrado na ETE-SJNV. Neste caso, os coeficientes adotados nas relações teóricas consistem em valores médios das faixas usuais que também representam esgoto doméstico de concentração média, além de ainda terem sido adotados anteriormente em um estudo de modelagem do tratamento da mesma ETE (BAPTISTA, 2020).

Para o nitrogênio, o fracionamento levou em consideração os registros de amônia média realizados pela ETE-SJNV. O ASM1 requer como entrada as frações de nitrogênio orgânico solúvel e particulado, que foram estimadas por relações teóricas em função do nitrogênio total do esgoto afluyente. O valor de nitrogênio total,

por sua vez, foi determinado pela sua relação com a amônia, observada no esgoto bruto da mesma ETE na caracterização realizada por Barroso Júnior (2020).

Tabela 5-1 – Relações teóricas para fracionamento da DQO, sólidos suspensos e nitrogênio aplicadas na modelagem da ETE-SJNV com ASM1.

DQO^a	Relação teórica
DQO não biodegradável solúvel (DQOnbs) (S_u)	$0.04 * DQO_{total}$
DQO biodegradável solúvel (DQObs) (S_s)	$0.36 * DQO_{total}$
DQO biodegradável particulada (DQObp) (X_s)	$0.4 * DQO_{total}$
DQO não biodegradável particulada (DQOnbp) (X_u)	$0.2 * DQO_{total}$
Sólidos suspensos^{a,b}	
Sólidos suspensos voláteis (SSV)	$0.7 * SST$
Sólidos suspensos não voláteis (SSNV)	$0.3 * SST$
Nitrogênio^c	
Nitrogênio total (N_t) ^d	$1,61 * N-NH_3$
Nitrogênio orgânico solúvel (NOs) (biodegradável + não biodegradável)	$0,06 * N_t + 0,03 * N_t$
Nitrogênio orgânico particulado (NOp) (biodegradável + não biodegradável)	$0,06 * N_t + 0,1 * N_t$

Fontes: (a) Henze e Comeau (2008, p. 36). (b) Baptista (2020, p. 49); Volcke et al. (2020, p. 94). (c) Rössle e Pretorius (2001). (d) Barroso Júnior (2020, p.94-95).

As mesmas frações estimadas para SST, DQO e nitrogênio (Tabela 5-1) foram aplicadas como condições iniciais do decantador secundário, para que durante a simulação inicial do processo de tratamento as condições corretas do tanque fossem atingidas. Na inserção dos dados, considerando o uso do modelo ASM1 no tanque de aeração, a DBO solúvel consistiu na DQO biodegradável solúvel e a DBO particulada igual a DQO biodegradável particulada (WRC PLC, 2002a).

5.2.4. Análise de Sensibilidade

Esta análise foi realizada para identificar quais parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 são sensíveis na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. A sensibilidade de determinado parâmetro é detectada quando uma alteração em seu valor provoca modificações nas previsões das variáveis alvo da modelagem. No presente estudo, estas variáveis são as concentrações de SST, DQO e NH_3 no efluente do processo de tratamento.

Nessa etapa as simulações foram realizadas com período equivalente à idade do lodo estimada para a ETE-SJNV. O início dessas simulações consistiu no final da simulação inicial, estágio em que as condições do tratamento se estabilizaram.

A alteração foi feita individualmente para cada parâmetro do ASM1, cujo valor foi elevado em 10%. Em seguida, pela Equação 4-3, foi calculado o coeficiente de sensibilidade de cada parâmetro para cada variável alvo.

$$S_j^i = \frac{\frac{Y_{i1} - Y_{i0}}{Y_{i0}}}{\frac{P_{j1} - P_{j0}}{P_{j0}}} = \frac{\frac{\Delta Y_i}{Y_{i0}}}{\frac{\Delta P_j}{P_{j0}}} \quad \text{Equação 4-3}$$

Os parâmetros sensíveis foram indicados pelo coeficiente de valor igual ou superior a 0,25. Essa metodologia de análise de sensibilidade tem sido adotada em diversos estudos (ANDRAKA et al., 2018; CHEN et al., 2020; LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011; PETERSEN et al., 2002; ZHOU et al., 2013).

5.2.5. Otimização dos parâmetros sensíveis

Na calibração sistemática buscou-se obter valores ótimos para os parâmetros sensíveis do modelo ASM1, de modo a reduzir ao máximo possível o erro das simulações. Este erro consiste na diferença entre o resultado da simulação e a medida observada/registrada na ETE-SJNV (KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012).

A otimização dos parâmetros do ASM1 foi realizada pela aplicação da Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014), contendo as seguintes etapas:

- Determinação do delineamento experimental para as simulações;
- Realização das simulações de calibração;
- Cálculo e verificação dos modelos de regressão para cada variável alvo (SST, DQO e NH₃ efluentes); e
- Otimização dos parâmetros sensíveis para as três variáveis alvo.

As Equações 5-2 e 5-3, semelhantes ao proposto em outro estudo (LIM et al., 2012), apresentam as relações utilizadas para os erros de previsão de cada variável alvo (SST, DQO e NH₃) na aplicação da MSR.

$$e_{ASM1} = Y_O - Y_{ASM1} \quad \text{Equação 5-2}$$

$$e_{MSR} = Y_O - Y_{MSR} \quad \text{Equação 5-3}$$

O termo e representa o erro de previsão, Y é o valor da variável alvo e os subscritos o , $ASM1$ e MSR sinalizam, respectivamente: o valor observado/registrado na ETE-SJNV no período de calibração (2018); a previsão da simulação com $ASM1$; e a previsão do modelo de regressão gerado pela MSR . Como foram utilizados dados médios dos registros da ETE, para as saídas da simulação computacionais também foram adotadas previsões médias.

Para o delineamento experimental e otimização dos parâmetros com MSR foi utilizado o *software* de estatística *Minitab® Statistical Software* (MINITAB, 2021).

Delineamento experimental

O delineamento é elaborado com base nos parâmetros identificados como sensíveis (fatores) anteriormente. Para cada fator são estabelecidos três valores (níveis de teste): mínimo, central e máximo. Em seguida, o delineamento define combinações entre os fatores considerando seus três níveis de teste.

Essas combinações constituem experimentos, que no presente estudo foram simulações no *STOAT®* com o $ASM1$. O delineamento experimental adotado foi o *Central Composite Design* (CCD), utilizado em outros estudos e recomendado para uso associado à MSR (AHN et al., 2014; LIM et al., 2012; NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014). Os níveis de teste para cada fator foram determinados a partir de simulações de teste visando previsões com menor diferença possível em relação aos dados observados em 2018 na ETE-SJNV.

Igualmente ao adotado na análise de sensibilidade, as simulações dessa etapa iniciaram a partir do final da simulação inicial (para estabilização do processo de tratamento) e foram realizadas com tempo equivalente à idade do lodo estimada para a ETE-SJNV.

Modelos de regressão

A partir dos resultados das simulações de calibração baseadas no delineamento experimental, foram calculados os erros de previsão da simulação (Equação 5-2). Estes erros foram utilizados como dados de entrada na MSR para gerar os modelos de regressão de cada variável alvo.

Para cada modelo de regressão foi avaliada a influência dos seguintes aspectos: relações lineares, relações quadráticas e interações entre os parâmetros sensíveis (fatores da equação de regressão). Descartaram-se as relações ou

interações não significativas visando simplificar os modelos de regressão calculados. Os efeitos padronizados dos parâmetros considerados nos modelos finais simplificados foram representados de forma gráfica.

Os modelos de regressão foram apresentados por meio das equações de regressão. A adequação dos modelos foi verificada pelos seguintes métodos:

- Coeficientes de determinação (R^2);
- Análise de Variância (ANOVA);
- Teste de falta de ajuste; e
- Correlação entre valores simulados no STOAT© e valores previstos pelo modelo de regressão.

Foi realizada uma comparação entre os modelos a partir dos seus valores de R^2 , $R^2_{ajustado}$ e RMSE (Equação 4-5).

Otimização

Os valores dos parâmetros sensíveis do ASM1 foram otimizados de forma conjunta para as três variáveis alvo avaliadas. A função utilizada para a otimização consistiu na obtenção do erro mínimo, ou seja, da menor diferença entre as previsões de simulação e os dados observados na ETE-SJNV. Para cada variável alvo foi estabelecido um intervalo de erro aceitável (inferior e superior) baseado nas recomendações do guia para modelagem de lodos ativados, de acordo com o objetivo da modelagem (RIEGER et al., 2013): para SST e DQO, ± 5 ; e para NH_3 ± 1 .

A função de *desirability* (d) é o método mais aplicado na otimização composta da MSR (mais de uma variável alvo). Esta função reduz as respostas múltiplas da análise a uma medida agregada única e resolve a equação com um objetivo único de otimização. No presente estudo, o objetivo foi obter erros de previsão nulos para as três variáveis resposta (SST, DQO e NH_3). O valor da referida função (d) situa-se entre 0 e 1, sendo que quanto mais próxima de uma unidade, mais favorável é o balanço entre as propriedades da otimização. Por outro lado, d igual a 0 indica que o produto da otimização é inaceitável (KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012).

Os valores ótimos estimados foram então aplicados em uma simulação de otimização no STOAT© para verificar se os erros das previsões de cada variável alvo se aproximaram de zero, ou seja, obtenção do mínimo erro possível.

5.3. Validação do modelo ASM1

Para a validação do ASM1 é necessário refazer a simulação com as mesmas condições, porém adotando dados do esgoto afluente correspondentes a um período diferente (RIEGER et al., 2013). Sendo assim, no presente estudo o modelo ASM1 foi validado pela aplicação dos valores ótimos dos parâmetros sensíveis estimados na etapa anterior. Os dados de esgoto afluente foram originados das observações realizadas na ETE-SJNV para o período de 2019.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

6.1. Medidas descritivas do processo de tratamento da ETE de estudo

6.1.1. Dados coletados

As características físicas do processo de lodos ativados envolvem as dimensões do tanque de aeração e do decantador secundário (Tabela 6-1).

Tabela 6-1 – Características físicas da ETE-SJNV.

Parâmetro	Valor	unidade
Tanque de Aeração (1 linha de fluxo)		
Volume	2070	m ³
Comprimento	30	m
Largura	15	m
Profundidade útil	4,6	m
Concentração de oxigênio dissolvido ^a	1 – 1,5	mg/l
Concentração de SST no liquor misto ^a	3.000 – 5.000	mg/l
Decantador secundário (1 linha de fluxo)		
Área superficial (15x48)	720	m ²
Profundidade do tanque	3,5	m
Profundidade de alimentação ^b	1,75	m
Lodo ativado (LA) (4 linhas de fluxo)		
Vazão de retorno do LA ^c	600	l/s
Vazão de descarte LA ^c	6,1	l/s
Período de descarte LA ^c	8	h
Intervalo de descarte LA	24	h
Concentração de SST ^a	10.000	mg/l
Idade do lodo ^d	19	dia

Fonte: ETE-SJNV. (a) Valor médio aproximado informado pela gerência da ETE. (b) Considerado ½ da profundidade do tanque, conforme projeto da ETE. (c) Valor médio, mas com controle associado à qualidade do efluente e à capacidade de tratamento do lodo. (d) Valor calculado.

A concentração de oxigênio dissolvido e de sólidos do liquor misto no tanque de aeração não são registradas com periodicidade na estação. Portanto, foram considerados valores médios relatados pela gerência da ETE-SJNV. Da mesma forma, valores médios relacionados ao lodo ativado que é recirculado e descartado do processo foram relatados pela gerência da ETE. Não foi possível obter dados da composição química do lodo ativado, apenas concentração de SST média aproximada, conforme observação da gerência da estação.

A idade do lodo pode variar e seu valor específico não é rigorosamente controlado pela ETE-SJNV. Portanto, para subsidiar a modelagem inicial do processo de tratamento, cujo período se baseia na idade do lodo, foi considerado que a concentração de sólidos no efluente do decantador secundário é baixa e a

idade do lodo foi calculada com a Equação 6-1 (TCHOBANOGLIOUS et al., 2016, p. 699), utilizando os dados da Tabela 6-1.

$$TRS \approx \frac{VX}{Q_W X_R} \quad \text{Equação 6-1}$$

TRS é o tempo de retenção de sólidos ou idade de lodo, *V* o volume do tanque de aeração (4x2070 m³ para as quatro linhas de fluxo), *X* a concentração de SST no liquor misto (adotada a média de 4.000 mg/l), *Q_W* a vazão de descarte do lodo ativado (considerando 8 horas de descarte por dia) e *X_R* a concentração de sólidos no lodo de descarte que deixa o processo de lodos ativados. O resultado foi 19 dias, valor coerente com o tipo de processo e aceitável para modelagem com ASM1 (HENZE et al., 1987).

Destacam-se algumas especificidades do processo e da operação que foram relatadas pela gerência da ETE-SJNV e merecem atenção. Variações significativas na vazão associadas ao consumo da população não são notadas no afluente do processo de tratamento, porque a ETE conta com um poço de acumulação capaz de amortecer estes possíveis efeitos.

Em contrapartida, a composição principalmente química do esgoto afluente pode sofrer alterações mediante despejo de fossa séptica que ocorre frequentemente na estação. Entretanto, estes efeitos são momentâneos e diminuem durante o processo de tratamento, não afetando a qualidade do efluente por longos períodos.

No tocante aos dados de composição do esgoto, o monitoramento da estação contém diversos parâmetros físicos e químicos registrados em diversos intervalos de tempo (quinzenal, semanal, mensal). Para o presente estudo foram considerados dados do período de 2018 a 2019.

A maior parte das amostras dos parâmetros levantados possui registros de afluente e efluente para um mesmo dia, sendo registradas no período da manhã (apenas uma a tarde) e com intervalo de menos de uma hora entre o registro do valor afluente e efluente.

De modo geral, o ano de 2019 apresentou maior quantidade de registros que 2018 (Tabela 6-2). Além disso, o número de registros diferiu ao longo do tempo, sendo que em 2018, a distribuição da quantidade de registros foi mais homogênea, sendo dois registros por mês para a maior parte das variáveis. Em 2019, os meses

de novembro e dezembro apresentaram apenas um registro mensal, enquanto os demais meses do ano variaram; foram obtidos dois registros mensais em janeiro, fevereiro, março, maio e julho; três em junho, agosto setembro e outubro; e oito em abril. A vazão também foi obtida do banco de dados, para a qual existem registros de produção diária de esgoto tratado.

Tabela 6-2 – Quantidade de registros das variáveis avaliadas no banco de dados do monitoramento padrão da ETE-SJNV.

Variável	Afluente		Efluente	
	2018	2019	2018	2019
DBO	24	32	24	31
DQO	24	32	22	32
N-NH ₃	24	32	24	32
pH	24	26	24	26
SST	12	27	24	32
Temperatura do esgoto	24	28	24	28
Vazão de esgoto tratado	-	-	365	365

Fonte: elaborado pelo autor a partir dos dados da ETE-SJNV.

6.1.2. Registros ausentes

O parâmetro SST apresentou falta de registros de sua concentração afluente para uma em cada duas amostras mensais registradas em 2018, obtendo maior número de amostras de concentração efluente. Evitando influenciar uma distorção nas medidas estatísticas descritivas, para o SST foram adotados os registros de pares completos, ou seja, amostras mensais em que existiam ambos registros, afluente e efluente. Foi possível obter uma amostra desse tipo para cada mês, totalizando 12 amostras de SST (afluente e efluente) em 2018. Para o ano de 2019, foi feito o mesmo tratamento, contudo, apenas cinco das 32 amostras foram desconsideradas, restando 27 amostras para SST em 2019.

O mesmo raciocínio adotado para SST também foi empregado para outros parâmetros. Em 2018, registros de afluente de DQO foram desconsiderados diante da ausência de registro do efluente para o mesmo dia. Da mesma forma, em 2019, foi preciso desconsiderar apenas um registro de afluente de DBO, pela ausência de registro da concentração efluente. A exclusão desses valores não impactou de forma significativa a população amostral, uma vez que ainda restaram pelo menos um par de registros completo (afluente e efluente) para cada mês de cada ano.

O pH apresentou seis amostras (afluente e efluente) com falhas, todas em abril de 2019. Como este mês obteve a maior quantidade de registros de afluente e efluente (8) de 2019, ainda restavam dois registros desse parâmetro, de afluente e

efluente, para o mesmo mês. Portanto, foi considerado que tal ausência de dados também não impactaria a população amostral dos registros de pH como um todo, dado que o restante dos meses de 2019 também apresentaram pelo menos duas amostras por mês.

Os registros de temperatura não apresentaram ausência de valores. Foram considerados os registros de temperatura existentes para as mesmas datas nas quais também existam registros para as demais variáveis.

Para a vazão de esgoto tratado também não existiam registros ausentes, embora em alguns dias do mesmo mês os registros se igualaram. Isso aconteceu em 2018 nos meses de janeiro (registros do dia 9 até 30 do mês iguais) e fevereiro (todos os dias com registros iguais). Nestes casos, como valores repetidos para tantos dias seguidos não é comum no restante dos dados, para o cálculo de *outliers* e das estatísticas descritivas da vazão de 2018, foi considerado apenas um registro de todos os repetidos para o mesmo mês, evitando fortes distorções nas medidas de tendência central.

6.1.3. Registros censurados

No banco de dados de monitoramento da ETE-SJNV, o valor da concentração das variáveis com registros censurados é informado como: menor que o LDM (limite de detecção do método analítico).

Apenas dois parâmetros apresentaram dados censurados: SST e DBO. O SST efluente de 2018 obteve 17% de suas amostras com valores censurados (indicado como < 10 mg/l); em 2019, a proporção para o mesmo parâmetro foi de 15%. Como estes dados censurados representam menos de 20% da população amostral de registros do efluente de SST em cada ano, os valores censurados foram substituídos pela fração de $\frac{1}{2}$ do LDM (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 119). A partir deste método os valores censurados de SST foram considerados como 5 mg/l. O mesmo foi feito para duas amostras de DBO efluente em 2019 (6,5% da população amostral), em que o valor substituído consistiu em 4 mg/l, ou seja, metade do LDM de 8 mg/l.

6.1.4. Avaliação de *outliers*

A quantidade de registros que apresentaram eficiência de remoção negativa (efluente>afluente), bem como o número de *outliers* identificados e descartados

estão apresentados na Tabela 6-3. Os *outliers* identificados para cada variável em 2018 e 2019 estão apresentados no **Apêndice 1**.

Tabela 6-3 – Número de registros de concentrações com valor de efluente maior que afluente (eficiência de remoção negativa) e *outliers* identificados e descartados para cada variável em 2018 e 2019.

Variável	Efluente > Afluente		<i>Outliers identificados</i>				<i>Outliers descartados</i>			
	2018	2019	Afluente		Efluente		Afluente		Efluente	
			2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019
DBO	1	0	1	1	1	4	0	1	0	4
DQO	1	2	2	2	1	4	0	2	1	4
Amônia	0	3	6	4	1	4	0	4	1	4
SST	1	6	0	3	0	3	0	2	0	3
Temperatura	-	-	0	0	0	0	0	0	0	0
pH	-	-	0	3	3	2	0	2	1	0
Vazão	-	-	-	-	8	6	-	-	8	6

Fonte: autor.

Foram encontrados 14 registros em que a eficiência de remoção foi negativa, sendo três em 2018 para DBO, DQO e SST e 11 em 2019 para DQO (2), amônia (3) e SST (6). Enquanto em 2018 não foram observados valores de DBO maiores que DQO, em 2019 foram encontrados dois, em um registro de afluente em janeiro e de efluente em fevereiro.

Esses resultados podem ser comparados com os achados de outro estudo, que utilizou dados de monitoramento padrão da mesma ETE para as mesmas variáveis, mas para o período de 2006 até 2012 (BAPTISTA, 2020). A autora observou 11 registros com eficiência negativa, envolvendo DBO, DQO e SST, e 30 de DBO superior à DQO. A distinção entre os valores encontrados pode estar associada ao tamanho do período adotado (seis anos de monitoramento). Já a semelhança entre as variáveis com eficiência negativa pode indicar que possíveis erros de coleta, de registro ou de análises laboratoriais são comuns para as variáveis no monitoramento padrão da ETE-SJNV.

O total de *outliers* identificados no afluente (22) e no efluente (23) no presente estudo foram semelhantes em relação às variáveis (Tabela 6-3), mas menores que a quantidade encontrada por Baptista (2020). A autora encontrou mais *outliers* para DBO e SST afluentes e menos para amônia afluente. DQO e pH afluente apresentaram semelhança na quantidade de *outliers*. No efluente, a autora registrou menos *outliers* para a maior parte das variáveis (DQO, amônia e pH), mas 22 *outliers* para DBO efluente, sendo a maior quantidade de *outliers* do estudo. Para a temperatura, a identificação de *outliers* foi semelhante aos resultados da autora,

sendo que ela encontrou apenas um *outlier* nos registros de temperatura referentes ao período utilizado para a calibração do modelo.

Diferentemente de Baptista (2020), que descartou todos os *outliers* identificados, no presente estudo alguns foram mantidos com base em avaliações envolvendo os *outliers* de todas as variáveis. Os resultados dessas avaliações serão apresentados para 2018 e 2019 a seguir.

Registros de 2018

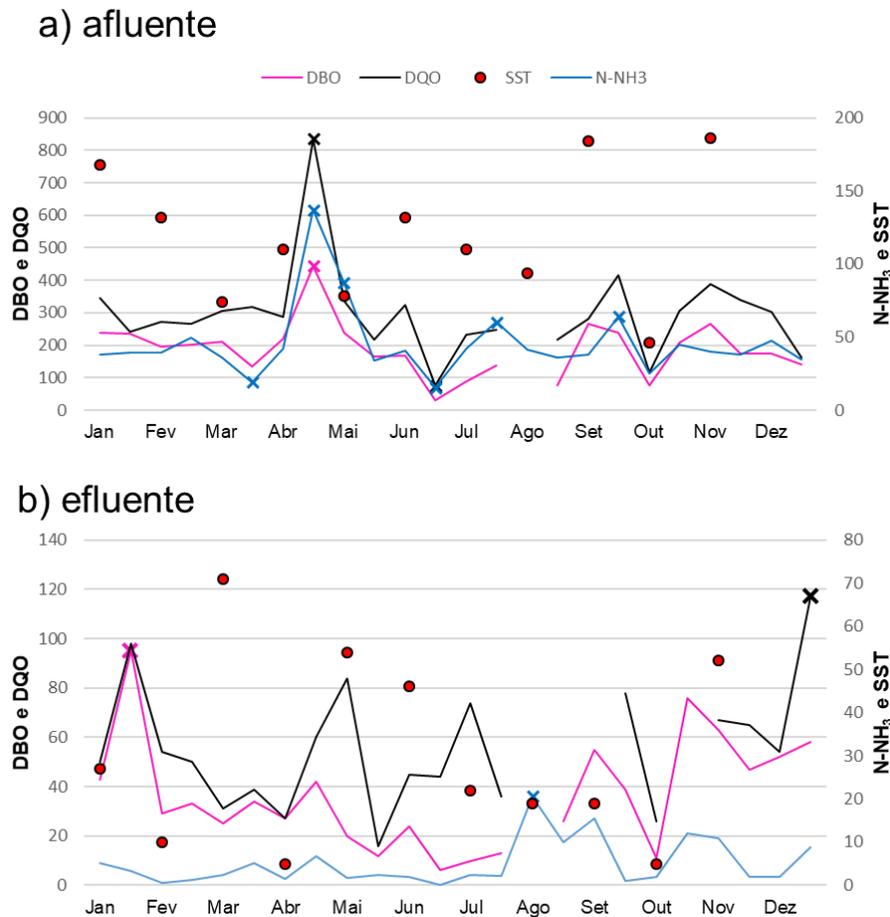
Foram identificados nove *outliers* nos registros do afluente em 2018 (Tabela 6-3). Apesar do SST não apresentar *outlier* no afluente, seus registros variaram ao longo do ano. Em contrapartida, embora o pH também não apresentou *outliers* no afluente de 2018, a variação de seus valores foi menor, sendo próxima a uma unidade, acima ou abaixo, em situações específicas que se relacionam com as demais variáveis e são discutidas posteriormente.

A partir da avaliação conjunta dos *outliers* do afluente em 2018 (Figura 6-1a), optou-se pelo não descarte dos *outliers* identificados, considerando as seguintes observações. Na segunda metade de março de 2018, junto ao baixo valor de amônia (N-NH₃), também foi observada redução de DBO. O mesmo aconteceu em junho, incluindo também a DQO. Por outro lado, na segunda metade de abril, um grande aumento foi observado nas concentrações afluentes de DBO, DQO e N-NH₃. Em julho, a mesma situação de aumento das três variáveis foi identificada, mesmo que com menor intensidade. Por fim, na segunda metade de setembro, NH₃ aumentou a um nível aproximado ao de julho, acompanhada pelo aumento de DQO.

Essa tendência de redução ou aumento simultâneo de DBO, DQO e amônia representa possíveis alterações na composição do esgoto afluente, o que justifica manter os *outliers* na análise. Retirá-los poderia gerar medidas de tendência central que não representam a variação real que aconteceu no ano.

A variação do pH reforça essa tendência, sendo que no afluente o menor valor de pH (6,2) foi obtido em março e os maiores valores (8,1 e 8,0) em abril e setembro. Vale ainda ressaltar que todos os *outliers* identificados nesses dados correspondem a registros feitos sempre na segunda metade do mês, o que poderia estar ligado a algum fator operacional da estação. Contudo, a gerência da ETE-SJNV relatou não haver manutenções ou problemas no processo de tratamento que sejam recorrentes na segunda metade dos meses de 2018.

Figura 6-1 – Registros (mg/l) de (a) afluente e (b) efluente de parâmetros monitorados pela ETE-SJNV em 2018, referentes ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. *Outliers* identificados com o símbolo “X”. A descontinuação da linha representa ausência de registros da variável em determinada data.



Fonte: Elaboração própria.

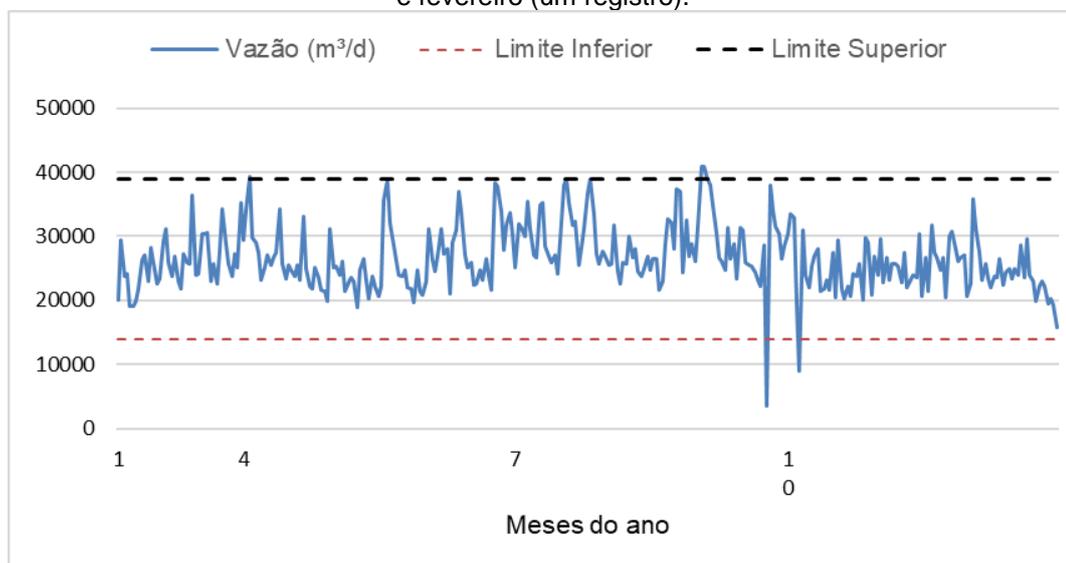
Para os registros de concentração no efluente de 2018, foram identificados apenas um *outlier* para DBO, DQO e amônia (Tabela 6-3). O *outlier* da DBO em janeiro está associado a um aumento na DQO e a uma aproximação entre as duas concentrações, embora o valor de DQO ainda tenha sido maior (Figura 6-1b). Portanto, optou-se por não excluir o *outlier* da DBO. Os demais *outliers* de amônia e DQO, em agosto e dezembro, respectivamente, foram descartados por não haver alguma relação com as demais variáveis nos mesmos registros.

Para os registros de vazão em 2018, foram observados picos anormais. Um deles ocorreu no final do mês de setembro, equivalente a 2.571,64 l/s, valor superior a cinco vezes a capacidade da ETE estudada (444 l/s). Um pico maior ainda aconteceu no final de novembro. Estes dois picos consistem nos maiores *outliers* para vazão em 2018.

Uma justificativa para picos de vazão pode estar relacionada aos registros de altos valores de SST no afluente nos mesmos meses (Figura 6-1a), porém esses valores não constituem *outliers* do SST, ou seja, não representam anormalidade na concentração do parâmetro em 2018. Outra explicação para os altos picos de vazão pode ser a ocorrência de chuvas que foram registradas pela ETE na segunda metade de setembro. Contudo, em novembro não teve registro de chuva nas coletas realizadas. Inobstante, é bem provável que o efeito de chuvas na região não seja tão forte sobre o esgoto afluente à ETE, conforme relatado pela equipe de operação da estação. Isso se deve ao fato da estação possuir um grande poço de acumulação no início do sistema, fazendo com que esse tipo de efeito seja amortecido antes da medição de vazão e do tratamento biológico. Com base nessas evidências, optou-se pela exclusão desses picos de vazão.

Em seguida, foram determinados os *outliers* de vazão para o restante dos dados de 2018, sendo obtido oito *outliers* (Tabela 6-3). Os registros de vazão de esgoto tratado em 2018, sem os dois altos picos de setembro e novembro, estão apresentados na Figura 6-2. Os *outliers* desses registros consistem nos valores abaixo do limite inferior (13.893 m³/d) e acima do limite superior (38.861 m³/d), os quais representaram cerca de 0,6% e 2,5% do total de registros, respectivamente. Dada as baixas proporções, optou-se também por desconsiderá-los na análise estatística, de modo a evitar maiores distorções nas medidas de descrição da vazão em 2018.

Figura 6-2 – Vazão de esgoto tratado monitorada pela ETE-SJNV em 2018, referente ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. Registros diários de vazão, exceto para janeiro (10 registros) e fevereiro (um registro).

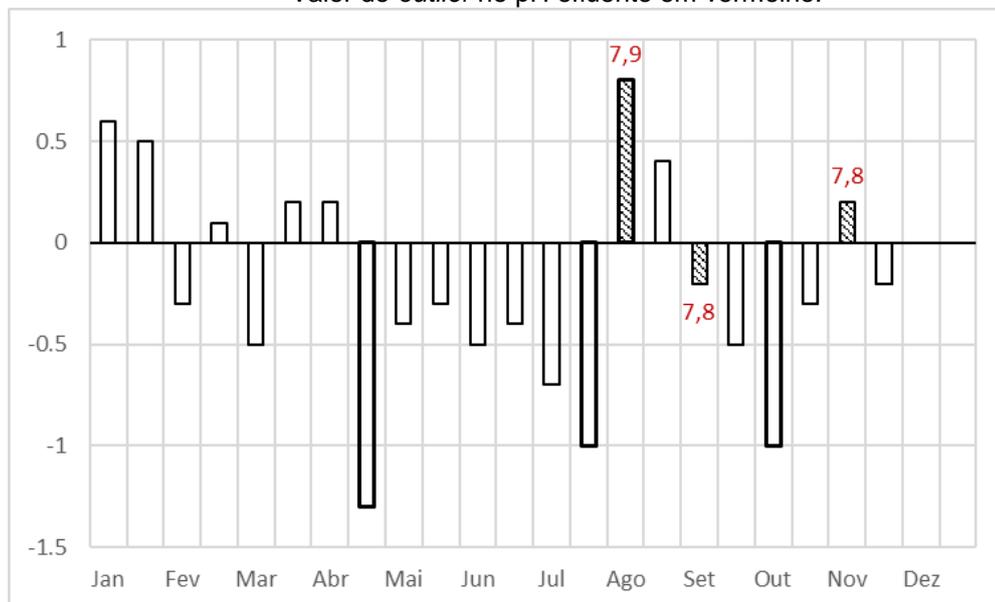


Fonte: Elaboração própria.

Os registros de pH afluente não apresentaram *outliers*, mas foram identificados três *outliers* para pH efluente em 2018 (Tabela 6-3). A avaliação do descarte dos mesmos foi baseada na variação do pH ao longo do ano (Figura 6-3); sendo positiva quando o pH aumenta no efluente, negativa quando diminui e nula quando não há variação. Apenas os registros de dezembro não mostraram variação de pH. Na Figura 6-3 ainda estão indicados os *outliers* identificados nos registros dos meses de agosto (7,9), setembro (7,8) e novembro (7,8).

Das 24 amostras, apenas quatro se destacaram em relação à variação do pH, em que a maior variação foi negativa e igual 1,3 (Figura 6-3). Com base nessas informações, optou-se por descartar apenas o *outlier* correspondente a uma alta variação de pH (+0,8), relativo ao registro de agosto de 2018 (pH = 7,9), sendo ainda o maior valor de pH efluente observado no ano. Os outros dois *outliers* (setembro e novembro) foram mantidos, uma vez que nessas amostras a variação do pH no processo de tratamento não superou meia unidade. E como seus valores são iguais (7,8), sua exclusão provocaria alta distorção nas medidas estatísticas para esta variável.

Figura 6-3 – Variação do pH (efluente - afluente) no tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV ao longo de 2018. *Outlier* identificado nos meses com caixa cheia. Valor do *outlier* no pH efluente em vermelho.



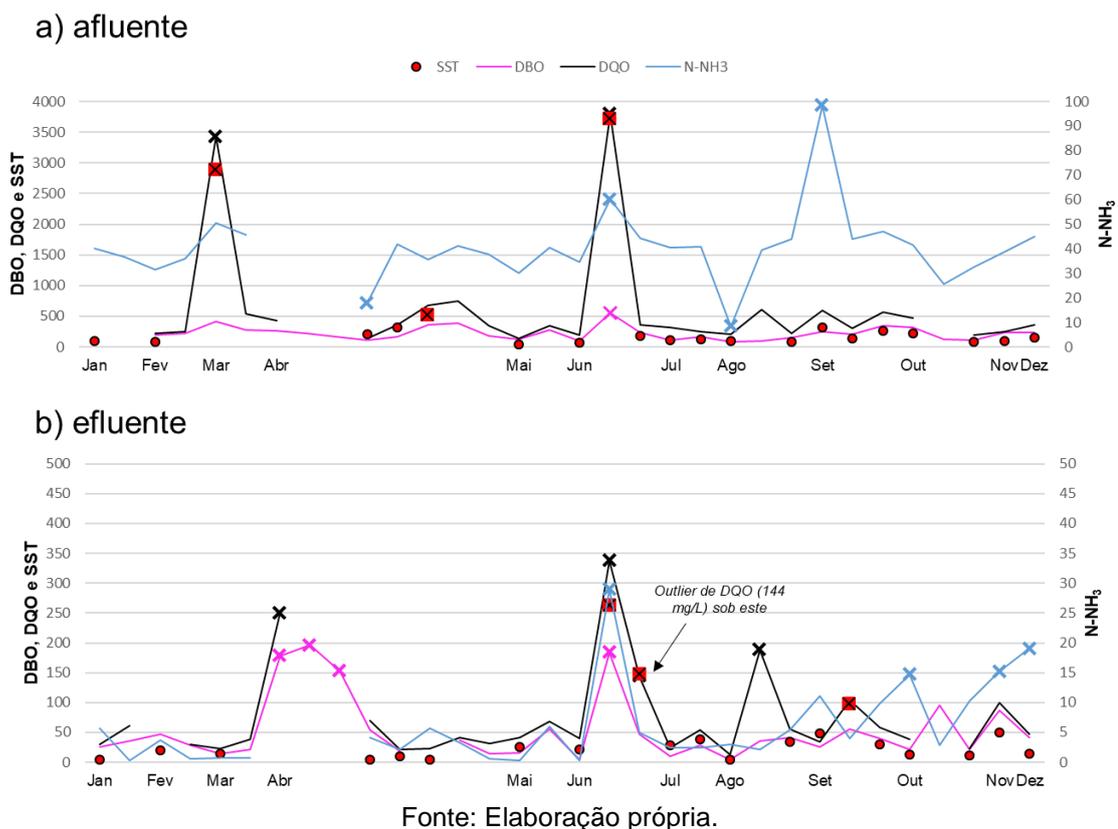
Fonte: Elaboração própria.

Registros de 2019

Foram identificados 13 *outliers* nos registros do afluente em 2019, envolvendo todas as variáveis (exceto vazão que é analisada como efluente) (Tabela 6-3).

Em março e junho, ocorreu aumento simultâneo de DBO, DQO, amônia e SST (Figura 6-4a). Contudo, os valores de DQO e SST para estes casos foram extremamente altos: 3.430 mg/l e 2.890 mg/l (março) e 3.793 mg/l e 3.713 mg/l (junho), respectivamente. Estes *outliers* foram descartados por estarem fortemente isolados da faixa usual de concentração das referidas variáveis. Considerar estes *outliers* influenciaria de forma significativa as medidas de tendência central dos registros, o que não aparenta ser a melhor alternativa, visto que são apenas dois registros em 28 para DQO e em 21 para SST.

Figura 6-4 – Registros (mg/l) de (a) afluente e (b) efluente de parâmetros monitorados pela ETE-SJNV em 2019, referentes ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. *Outliers* identificados com o símbolo "X". A descontinuação da linha representa ausência de registros da variável em determinada data.



Fonte: Elaboração própria.

Ainda em junho, amônia e DBO afluente também aumentaram e constituíram *outliers* (Amônia 60,15 mg/l; DBO 557 mg/l) (Figura 6-4a). Estes valores também foram descartados do banco de dados, em concordância com a exclusão dos

outliers de DQO e SST do mesmo mês. O *outlier* de DBO também é o único para a variável em todo o ano.

Amônia teve outro aumento em setembro, indicando seu maior *outlier* em 2019 (98,34 mg/l) (Figura 6-4a), que também foi excluído pela sua distinção de valor, evitando grandes distorções da tendência central do composto químico nos registros de 2019. Registros de amônia ainda compõem os menores *outliers* do afluente do ano, sendo detectados em abril (17,98 mg/l) e agosto (8,46 mg/l). Estes dois pequenos valores foram descartados, uma vez que não foi notada relação dessas reduções com o comportamento das outras variáveis que justificasse mantê-los. De qualquer forma, ainda restaram quatro registros de amônia em abril e dois em agosto, sendo suficiente para representar os meses na distribuição anual.

Por fim, optou-se por manter o menor valor de *outlier* de SST, que foi registrado no final de abril (520 mg/l) (Figura 6-4a). Este valor indica um aumento de SST acompanhado de aumento com intensidade semelhante nas concentrações de DQO, DBO e amônia, o que justifica mantê-lo.

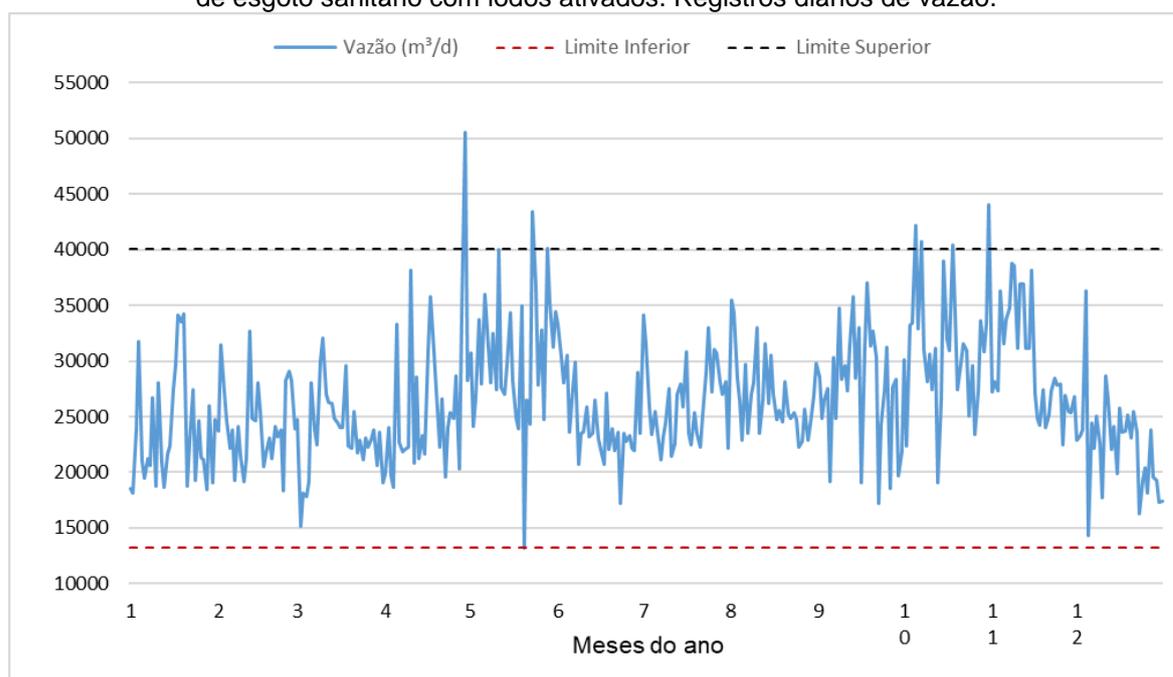
Tratando-se dos registros de concentração no efluente do tratamento de esgoto durante o ano de 2019, foram determinados 15 *outliers* (Figura 6-4b). A maior parte dos registros de DBO, DQO e SST situaram-se em torno de 100 mg/l ou inferior. Optou-se por descartar os três *outliers* de DBO e um de DQO em abril, porque não existem registros de SST e amônia nas mesmas datas para interpretar possíveis aumentos simultâneos das variáveis. No afluente em abril também não houve aumento de DBO e DQO, que explicasse o conseqüente aumento da concentração efluente dessas variáveis.

Os *outliers* de junho também foram excluídos, em concordância com a exclusão de *outliers* realizada nos registros de afluente do mesmo mês (Figura 6-4a). O *outlier* de DQO em agosto também foi descartado, levando em consideração a baixa eficiência de remoção obtida (69%) neste dia para DQO. Embora o *outlier* de SST em setembro representa um aumento da variável junto com DQO e DBO e o valor do *outlier* está abaixo de 100 mg/l, a eficiência de remoção desse registro foi de apenas 31%, bem abaixo do normal. Entende-se que esta baixa eficiência não é comum, portanto, este *outlier* foi descartado. Da mesma forma, para os *outliers* de amônia em outubro (14,71 mg/l), novembro (15,23 mg/l) e dezembro

(19,03 mg/l), as eficiências de remoção dos registros são em torno de 60%, valor abaixo do normal também. Estes *outliers* foram descartados.

A maior parte dos registros de vazão em 2019 está compreendida entre 13.230 m³/d e 40.080 m³/d , sendo que nenhum valor foi menor que o primeiro (Figura 6-5). Em contrapartida, um registro no final de abril supera o limite superior da faixa usual de observações, indicando a maior vazão do ano (50.576 m³/d). Chuvas foram registradas pela estação uma semana antes e depois da data deste pico de vazão, mas não exatamente no mesmo dia. Além disso, os valores dos demais *outliers* de vazão identificados em 2019 não foram tão diferentes da faixa usual. Assim como em 2018, todos os *outliers* representam uma pequena parte dos dados, cerca de 1,6% dos 365 registros diários de vazão no referido ano. Por essas razões, optou-se por descartar todos os seis *outliers* identificados nos registros de vazão em 2019.

Figura 6-5 – Vazão de esgoto tratado monitorada pela ETE-SJNV em 2019, referente ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados. Registros diários de vazão.

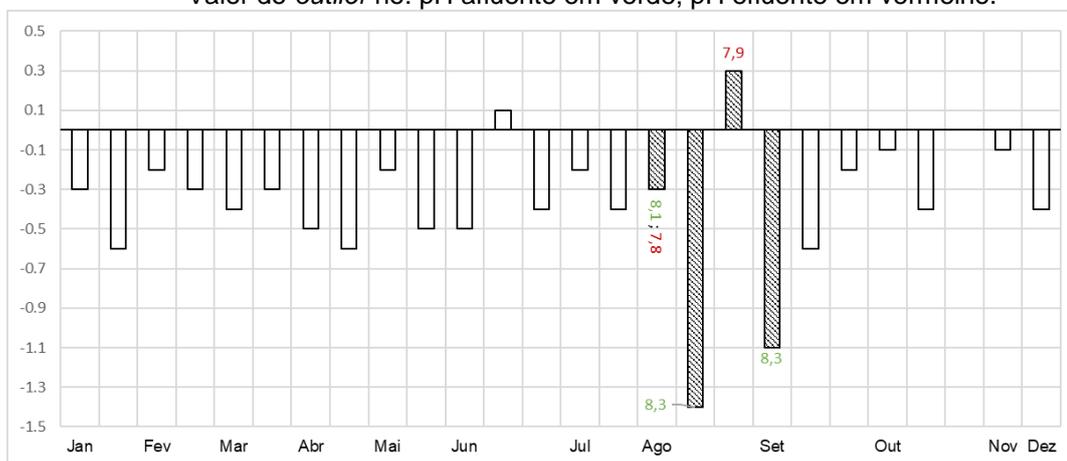


Fonte: Elaboração própria.

Os *outliers* identificados no pH resultaram em um número um pouco maior para 2019 (5), em relação a 2018 (3). Em 2019, entretanto, foram obtidos *outliers* nas duas fases do esgoto, afluente (3) e efluente (2). Outra diferença mais interessante consiste no fato de que em 2018 as ocorrências de *outliers* no pH, além de serem apenas em amostras do efluente, foram mais espaçadas entre as

amostras do ano. Já em 2019, os *outliers* se concentraram nas amostras coletadas em agosto e setembro (Figura 6-6).

Figura 6-6 – Variação do pH (efluente - afluente) no tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV ao longo de 2019. *Outlier* identificado nos meses com caixa cheia. Valor do *outlier* no: pH afluente em verde; pH efluente em vermelho.



Fonte: Elaboração própria.

Da mesma forma que foi feito para os registros de pH em 2018, optou-se por descartar os *outliers* identificados em amostras com as maiores variações no pH (-1,4 e -1,1), correspondente aos *outliers* do pH afluente (pH = 8,3) de agosto e setembro de 2019 (Figura 6-6). Estes valores são ainda os maiores *outliers* do monitoramento do pH em 2019 e se originam das únicas amostras com variação superior a uma unidade de pH.

6.1.5. Estatísticas descritivas dos registros

A Tabela 6-4 apresenta as estatísticas que descrevem as concentrações de DBO, DQO, amônia e SST e os valores de pH, temperatura do esgoto e vazão de esgoto tratado.

O número de observações foi igual para 2018 e 2019 apenas nas amostras de pH afluente. No restante, as amostras de 2019 apresentaram mais registros que 2018, destacando-se as amostras de SST em 2019 que apresentaram no afluente oito registros a mais que 2018, e no efluente sete. Da mesma forma, foram obtidos mais registros de vazão em 2019, embora o número de observações soma mais de 300 registros nos dois anos. Por outro lado, as amostras de SST foram as menores de todas as amostras consideradas.

Tabela 6-4 – Estatísticas descritivas dos registros das variáveis avaliadas referentes ao tratamento de esgoto sanitário com lodos ativados na ETE-SJNV em 2018 e 2019. CV: coeficiente de variação. Dados de 2018 para calibração e de 2019 para validação do modelo ASM1.

Afluente	DBO (mg/l)		DQO (mg/l)		N-NH ₃ (mg/l)		SST (mg/l)		pH		Temperatura (°C)		Vazão ^c (m ³ /d)	
	2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019
<i>n</i>	23	29	21	26	24	25	11	19	24	24	24	28	-	-
Mínimo	31	85	76	133	15,3	25,7	46	49	6,2	7	16	19	-	-
Média	189	206	297	359	45,5	39,5	119	170	7,2	7,2	22,6	23,8	-	-
Mediana	196	199	288	329	39,9	40,6	110	124	7,2	7,2	22,8	23,3	-	-
Máximo	444	415	835	743	137,2	50,6	186	520	8,1	8,1	27,5	28,5	-	-
Desvio padrão	85	88	149	171	24,2	5,7	46	118	0,5	0,3	3,7	3	-	-
CV (%)	45	43	50	48	53,2	14,4	39	69	6,4	3,7	16,4	12,6	-	-
<i>Outliers</i> (%) ^a	0	3,3	0	7,1	0	13,8	0	9,5	0	7,7	0	0	-	-
Efluente														
<i>n</i>	23	26	20	24	23	25	11	18	23	26	24	28	307	359
Mínimo	6	4	16	13	0,2	0,3	5	5	6,3	6,4	17	19	15.882	13.230
Média	37	34	52	45	4,4	3,7	30	21	6,9	7	22,9	24,1	26.479	26.147
Mediana	33	29	50	40	2,3	3	22	17	6,9	6,9	22,5	24	25.800	25.382
Máximo	95	96	98	104	15,5	11,1	71	50	7,8	7,9	28,5	29	38.786	40.080
Desvio padrão	23	22	21	23	4,3	3,1	22	15	0,4	0,3	4,1	3,1	4.390	5.017
CV (%)	62	66	41	52	96,8	84,2	74	69	5,8	4,9	17,9	12,8	17	19
<i>Outliers</i> (%) ^a	0	13,3	4,8	14,3	4,2	13,8	0	14,3	4,2	0	0	0	3,2	1,6
Remoção média (%)	80	84	83	88	90,3	90,6	75	88	-0,3 ^b	-0,2 ^b	0,3 ^b	0,3 ^b	-	-

Fonte: elaborado pelos autores a partir dos dados da ETE-SJNV. (a) Proporção de *outliers* descartados em relação ao total de registros da avaliação de *outliers*. (b) Variação média (efluente - afluente). (c) Valores para as quatro linhas de fluxo da ETE, embora tenha sido modelado apenas uma linha.

Em relação à variação dos dados (CV), de forma geral, o pH foi a variável que menos sofreu variação em seus valores ($CV < 6,5\%$). Os registros de temperatura em 2019 foram os que apresentaram a segunda menor variação tanto no afluente ($CV = 12,6\%$) como no efluente ($CV = 12,8\%$). A temperatura em 2018 e a vazão nos dois anos mostraram variação entre 16 e 19%. Na outra ponta se encontram as amostras de amônia efluente, as quais apresentaram maior variação de registros nos dois anos ($CV > 80\%$)

Comparando a variação das amostras de cada variável entre os anos, no afluente, DBO e DQO apresentaram variação semelhante nos dois anos, enquanto amônia e SST diferiram em mais de 30% entre 2018 e 2019. No efluente, as diferenças entre os anos para cada variável foram mais baixas, sendo que as maiores distinções ocorreram para as amostras de amônia (13%) e DQO (11%) entre 2018 e 2019 (Tabela 6-4). Essas variações podem ajudar a explicar as previsões das simulações computacionais do processo de lodos ativados da ETE.

Alguns autores relatam que a composição típica de esgoto doméstico bruto considerado fraco e com pequenas contribuições de efluente industrial pode apresentar as seguintes concentrações (VOLCKE et al., 2020): DQO de 500 mg/l, DBO de 230 mg/l, amônia de 20 mg/l e SST de 250 mg/l. A composição do esgoto afluente à ETE-SJNV é inferior a estes valores para DQO, DBO e SST nos dois anos de monitoramento adotados no presente estudo (Tabela 6-4). Apenas a variável amônia apresentou concentração superior (2018: 45 mg/l; 2019: 39 mg/l), se aproximando da condição de esgoto considerado médio pelos autores (45 mg/l).

As médias das concentrações no afluente registradas em 2019 foram superiores aos registros de 2018, com exceção da variável amônia. As maiores diferenças no afluente entre os dois anos aconteceu para DQO (62 mg/l) e SST (51 mg/l). Nos registros do efluente foi observado o contrário, sendo que todas as quatro variáveis de controle apresentaram concentrações maiores em 2018. As diferenças no efluente entre os anos não ultrapassaram 10 mg/l para as variáveis.

As médias obtidas no presente estudo podem ser comparadas com resultados encontrados por outros autores que também realizaram o tratamento de dados de monitoramento do processo de lodos ativados da ETE-SJNV para outros períodos (BAPTISTA, 2020; BARROSO JÚNIOR, 2020; DE SOUZA, 2021) (Figura 6-7 e Figura 6-8).

Figura 6-7 – Registros médios do afluente (mg/l) das variáveis de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Comparação entre registros obtidos no presente estudo para os anos de 2018 e 2019, e registros de outros períodos apresentados na literatura.



Fonte: 2018 e 2019 (do autor); 2006-2012 (BAPTISTA, 2020); 2015-2018 (BARROSO JÚNIOR, 2020); e 2020 (DE SOUZA, 2021).

Figura 6-8 – Registros médios do efluente (mg/l) das variáveis de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Comparação entre registros obtidos no presente estudo para os anos de 2018 e 2019, e registros de outros períodos apresentados na literatura.



Fonte: 2018 e 2019 (do autor); 2006-2012 (BAPTISTA, 2020); e 2020 (DE SOUZA, 2021).

Para DBO afluente existe uma proximidade entre as médias do presente estudo e os resultados referentes ao período de 2006-2012 (Figura 6-7a). Para DQO, o registro médio de 2020 situou-se entre as médias de 2018 e 2019. Os demais registros de DQO para os períodos desde 2006 até 2018 foram superiores aos encontrados no presente estudo (Figura 6-7b). Em contrapartida, as médias de 2018 e 2019 de amônia foram maiores que os valores relatados por outros autores (Figura 6-7c). Esta distinção da variação de NH_3 no período de 2018 e 2019 pode certamente afetar as previsões da modelagem no presente estudo. Para SST, enquanto a média de 2018 foi semelhante ao registro de 2020, a de 2019 foi maior que estas duas e menor que as médias obtidas nos seis anos iniciais encontrados em outros estudos (2006-2012) (Figura 6-7d).

No efluente, as médias de 2018 e 2019 calculadas para SST e DBO foram superiores aos registros encontrados na literatura (Figura 6-8a;d). DBO e DQO, por sua vez, apresentaram uma diminuição desde 2006 até 2020, sendo que apenas a média de DQO para o período de 2006-2010 se aproximou dos registros obtidos no presente estudo (Figura 6-8a-b). Em relação à amônia, o menor registro foi do ano de 2020 (0,7 mg/l). O registro médio dessa mesma variável no intervalo de 2011-2012 foi intermediário entre as médias do presente estudo, não apresentando diferença superior a 0,5 mg/l (Figura 6-8c).

Esse comparativo (Figura 6-7 e Figura 6-8) é um indicativo de como a composição do esgoto bruto e o desempenho do processo de tratamento de esgoto sanitário podem variar ao longo do tempo. Um monitoramento de qualidade das variáveis de controle (DBO, DQO, NH_3 e SST) é fundamental para subsidiar a modelagem do processo de lodos ativados em uma ETE. Analisar a variação na composição do esgoto afluente e efluente do processo de tratamento para diferentes períodos ainda auxilia a explicar possíveis diferenças nas previsões das simulações.

Inobstante, os dados de monitoramento que geralmente são médias quinzenais ou mensais podem ser usados na modelagem estática e auxiliar na calibração para melhorar a previsão do modelo para um determinado período de simulação. Dados adicionais, entretanto, podem contribuir para aumentar a confiabilidade da modelagem nessas condições (ANDRAKA et al., 2018).

6.1.6. Conformidade com a legislação ambiental

As medianas do efluente de cada variável de controle do tratamento de esgoto da ETE-SJNV foram comparadas com os limites máximos estabelecidos na legislação (RIO GRANDE DO SUL, 2017), considerando a vazão mediana superior a 10.000 m³/d em 2018 e 2019 (Tabela 4-4 e Tabela 6-4).

Os melhores resultados foram das amostras de DQO e amônia, que nos dois anos não apresentaram registros superiores aos limites máximos de 150 mg/l e 20 mg/l, respectivamente (Tabela 6-5).

Tabela 6-5 – Comparação entre os valores (mg/l) do limite máximo da legislação e a mediana do efluente de cada variável de controle do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. $\alpha=0,05$. Vazão de esgoto tratado > 10.000 m³/d.

	DBO		DQO		N-NH ₃		SST	
	2018	2019	2018	2019	2018	2019	2018	2019
<i>n</i>	23	26	20	24	23	25	11	18
Mediana	33	29	50	40	2.33	3	22	17
Limite da legislação ^a	40		150		20		50	
Valores > limite	9	8	0	0	0	0	3	0
<i>p</i> (mediana < limite)	2E-01	5E-02	0	0	0	0	1E-01	0

Fonte: autor. (a) Rio Grande do Sul (2017).

As amostras de DBO efluente não atenderam ao limite máximo de 40 mg/l, imposto pela resolução de controle ambiental (Tabela 6-5). Este resultado está relacionado ao maior número de valores registrados acima do limite máximo (39% das observações em 2018 e 31% em 2019). Em 2018, estes valores correspondem a registros realizados em janeiro, abril e no final do ano (set.-dez.). Já em 2019, os valores são de registros feitos a partir de abril até dezembro, exceto em julho. Esses resultados constituem um alerta para o monitoramento da remoção de DBO no controle do processo, com destaque para 2019, ano no qual a remoção de DBO do esgoto afluente pode não ter sido suficiente.

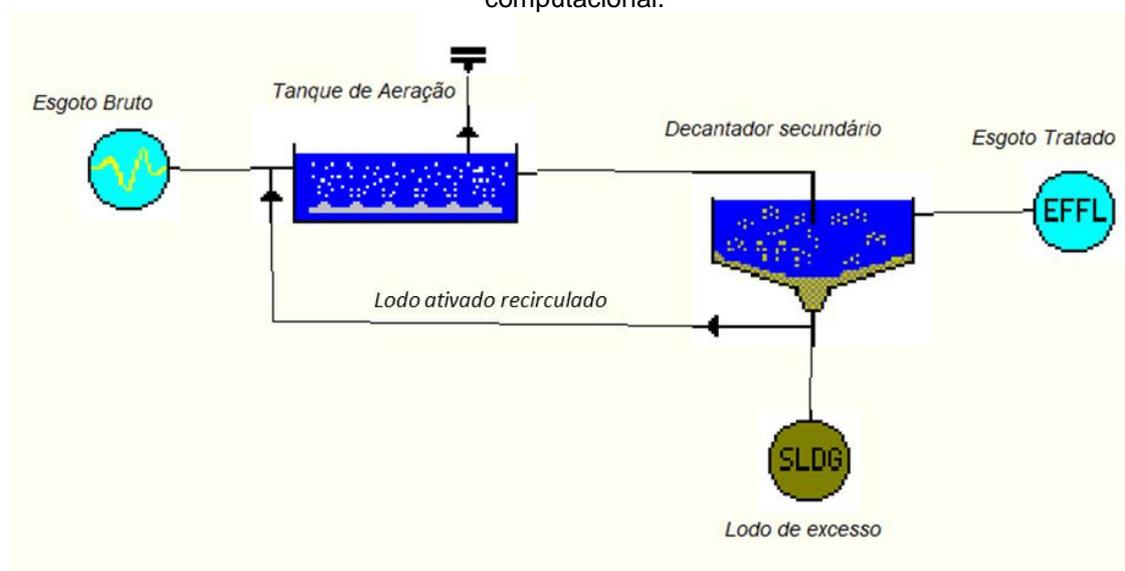
Em 2019, SST efluente atendeu ao limite máximo da legislação, equivalente a 50 mg/l (Tabela 6-5). Em contrapartida, em 2018 este parâmetro não foi satisfatório. Uma das razões para explicar este resultado desfavorável consiste no tamanho da amostra de SST em 2018 (11 observações) (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 257), sendo a menor amostra de efluente. Dessa forma, apenas três registros acima do limite foram suficientes para gerar a conclusão de desconformidade com a legislação.

Contudo, vale ressaltar que, dos três registros, dois foram próximos do limite, 54 e 52 mg/l, constatados em maio e novembro, respectivamente. Nesse sentido, um maior número de observações poderia ser aplicado para realização de uma avaliação estatística mais abrangente do referido ano. Portanto, a comparação indica que a variável SST efluente também merece atenção no controle do processo, seja pela sua baixa qualidade ou pela escassez de registros.

6.2. Simulação inicial do processo de lodos ativados

A configuração do processo de lodos ativados elaborada no STOAT© está apresentada na Figura 6-9, que consiste na representação básica do processo de tratamento empregado na ETE-SJNV. As características de dimensionamento do tanque de aeração e do decantador secundário consistem nos dados coletados na ETE (Tabela 6-1). A vazão de retorno do lodo ativado foi considerada para apenas uma linha de tratamento, correspondendo a 540 m³/h.

Figura 6-9 – Estrutura do processo de tratamento de esgoto com lodos ativados no simulador computacional.



Fonte: autor.

Os dados de descarte do lodo de excesso gerado no decantador secundário que deixa o processo de tratamento, também foram informados pela ETE-SJNV (Tabela 6-1), sendo considerados apenas para uma linha de tratamento na modelagem.

No presente estudo foi adotado um método específico de descarte do lodo de excesso: visando manter um valor estabelecido para a concentração de sólidos do

liquor misto, a vazão de descarte foi fixada enquanto o tempo de bombeamento de descarte variou de zero horas até um tempo máximo determinado (Tabela 6-6). O intervalo de descarte, por sua vez, corresponde ao período de início de um evento de descarte até o começo do próximo evento.

Tabela 6-6 – Parâmetros adotados para descarte de lodo de excesso na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

Vazão de descarte (m ³ /h)	5,49
Tempo máximo de bombeamento de descarte (h)	8
Intervalo de descarte (h)	24
Concentração de SST no liquor misto (mg/l)	3000

Fonte: autor.

Baseando-se no limite mínimo da relação A/M igual a 0,07, recomendado para lodos ativados com aeração prolongada (Tabela 4-2), e no valor de DBO afluente (A) de 189 mg/l, utilizado na simulação inicial e calibração dos modelos (ano de 2018) (Tabela 6-4), a concentração de sólidos no liquor misto (M) resulta em 2.700 mg/l. Este valor se aproxima do mínimo relatado pela ETE-SJNV (Tabela 6-1) e, por isso, foi adotado o valor de 3000 mg/l fornecido pela ETE (Tabela 6-6).

6.2.1. Verificação dos parâmetros dos modelos matemáticos

Na simulação inicial foram utilizados valores padrão dos parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1. Na verificação dos valores dos parâmetros dependentes de temperatura, foi constatado que todos os parâmetros informados no STOAT® para 15 °C correspondem aos valores padrões em 20 °C do modelo ASM1. Os resultados da conversão estão apresentados na parte superior da Tabela 6-7, sendo que a verificação foi feita comparando os valores convertidos para 20 °C com os originais da descrição do modelo ASM1 (Tabela 4-7). Dessa forma, não foi preciso alterar nenhum parâmetro do ASM1 para realizar a simulação inicial do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

Para o modelo do decantador secundário, Version 3, os parâmetros de sedimentação foram correlacionados com a condição de aeração prolongada do processo de lodos ativados. Esta condição está relacionada com a estrutura do processo existente na ETE-SJNV, a qual não conta com um decantador primário, e com a idade do lodo calculada (19 dias) com base nos dados coletados na ETE (Tabela 6-1; Tabela 4-2). Considerando o processo com aeração prolongada e um lodo com “sedimentabilidade justa” no decantador, a maior parte dos parâmetros de

sedimentação do *Version 3* foram automaticamente estimados pelo STOAT®, sendo assumidos apenas os parâmetros de início da floculação e da fração não sedimentável (Tabela 6-7).

Tabela 6-7 – Parâmetros de calibração dos modelos matemáticos para simulação inicial. (1) Verificação de parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo ASM1 que são dependentes da temperatura. (2) Parâmetros de sedimentação estimados pelo STOAT para o modelo *Version 3*, com base no IVLA_{3,5}.

Parâmetro				
(1) Modelo ASM1 ^a	15°C ^c (h ⁻¹)	Coef. temperatura ^c (°C ⁻¹)	15°C (d ⁻¹)	20 °C ^d (d ⁻¹)
Crescimento heterotrófico (μ_H)	0,1768	0,0693	4,2432	6
Crescimento autotrófico (μ_A)	0,0207	0,1006	0,4968	0,8
Coeficiente de decaimento heterotrófica (b_H)	0,0147	0,1131	0,3528	0,62
Coeficiente de decaimento autotrófico (b_A)	0,0036	0,1099	0,0864	0,15
Taxa de amonificação (K_A)	0,0024	0,0693	0,0576	0,08
Taxa específica máxima de hidrólise (K_H)	0,0722	0,1099	1,7328	3
Coeficiente de meia saturação para hidrólise de substrato lentamente biodegradável (K_X)	0,0173	0,1099	-	0,03
(2) Modelo <i>Version 3</i> ^b	Valor ^e	Obs		
IVLA _{3,5} (ml/g) ^f	100	Valor médio para lodo com sedimentabilidade justa		
Velocidade de sedimentação (m/h)	6,14	Estimado com base no IVLA.		
Velocidade de sedimentação máxima (m/h)	6,14	Igual à <i>Velocidade de sedimentação</i> na ausência de dados.		
Parâmetro de sedimentação impedida (l/mg)	0,0002956	Estimado com base no IVLA.		
Parâmetro discreto (l/mg)	0,01478	10-100 vezes o <i>Parâmetro de sedimentação impedida</i> . Na ausência de dados foi estimado como a média (50 vezes).		
Início da floculação (mg/l)	250	Pode ser estimado, mas normalmente em torno de 250 não afeta as previsões do modelo.		
Fração não sedimentável	0,001	Pode ser estimado, mas deve ter valor entre 0 e 2E-3. Na ausência de dados foi adotado a média.		

Fonte: autor. (a) Tanque de aeração. (b) Decantador secundário. (c) Valor padrão existente no STOAT (WRC PLC, 2002a). (d) Resultado da conversão com a Equação 5-1. (e) Estimativa automática do STOAT (WRC PLC, 2002a). (f) Valor adotado para o Índice Volumétrico do Lodo Agitado para liquor misto com concentração de 3,5 g/l (VON SPERLING, 1994).

6.2.2. Perfil do esgoto bruto

Na simulação inicial foi criado um perfil de esgoto bruto com período de simulação igual a 60 dias (3 vezes a idade do lodo – Tabela 6-1). A composição do esgoto afluente está apresentada na Tabela 6-8, para o período adotado na calibração (2018) e validação (2019) do ASM1. As características físicas e químicas consistem nas médias para uma linha de fluxo do processo de lodos ativados da

ETE-SJNV, estabelecidas a partir dos registros de monitoramento do tratamento. As frações de matéria orgânica (DQO), sólidos suspensos e nitrogênio foram estimadas por meio de relações teóricas.

Os valores das frações de DQO, SST e N também foram empregados como condições iniciais do decantador secundário para a simulação inicial.

Tabela 6-8 – Composição física e química do esgoto afluyente para calibração (2018) e validação (2019) do ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV, a partir de valores médios dos registros de monitoramento do processo de tratamento.

Componente	2018	2019
Vazão (m ³ /h) (1 linha de fluxo de tratamento)	276	272
Temperatura (°C)	22,6	23,8
pH	7,2	7,2
Estimativas teóricas (mg/l)^a		
DQO não-biodegradável solúvel (DQOnbs) (SU)	11,9	14,4
DQO biodegradável solúvel (DQObs) (SS)	106,9	129,2
DQO biodegradável particulada (DQObp) (XS)	118,8	143,6
DQO não-biodegradável particulada (DQOnbp) (XU)	59,4	71,8
Sólidos suspensos voláteis (SSV)	83,3	119
Sólidos suspensos não-voláteis (SSNV)	35,7	51
Amônia ^b	45,49	39,45
Nitrogênio total (Nt)	73,24	63,51
Nitrogênio orgânico solúvel (NOs) ^c	6,59	5,72
Nitrogênio orgânico particulado (NOp) ^c	11,72	10,16

Fonte: (a) Relações teóricas (Tabela 5-1) e registros médios do monitoramento da ETE-SJNV (Tabela 6-4). (b) Valor absoluto médio registrado na ETE. (c) Biodegradável e não biodegradável.

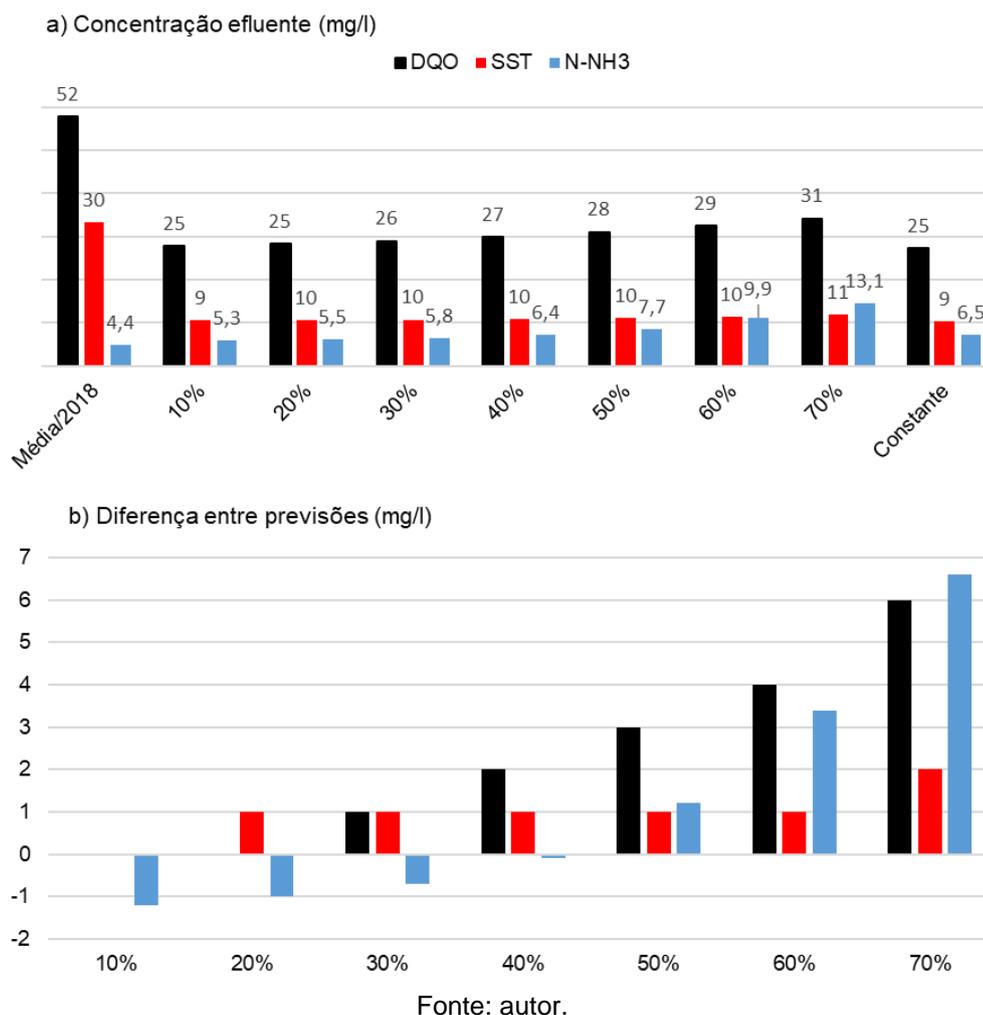
Avaliação da amplitude

A amplitude é uma característica da simulação quando se utiliza o padrão sinusoidal no STOAT®, a qual está relacionada com as oscilações que podem ocorrer durante o dia para cada variável de controle do processo de tratamento. O presente estudo adotou valores médios para as simulações, sendo que as referidas oscilações não são conhecidas. Portanto, foram realizadas simulações com diferentes valores de amplitude para avaliar a relação entre os resultados com os dados medidos no efluente da ETE-SJNV (média de 2018) e com as previsões utilizando padrão constante (simulação estática sem oscilações).

Ao final das simulações iniciais com padrões sinusoidal e constante, as previsões das médias do efluente foram menores que a média dos registros de 2018 para DQO e SST e maiores para amônia (Figura 6-10a). Independentemente do

padrão de simulação, esses resultados evidenciam a necessidade de calibração do modelo ASM1 para diminuir o erro entre as previsões da simulação e os valores medidos na ETE-SJNV.

Figura 6-10 – Previsões do efluente da ETE-SJVN gerados pela simulação inicial. (a) Comparação de diferentes amplitudes (10-70%) adotadas na simulação utilizando o padrão sinusoidal com os valores médios registrados na ETE e com os resultados da simulação com padrão constante. (b) Diferença entre as previsões da simulação sinusoidal e as previsões da simulação constante, para diferentes valores de amplitude no padrão sinusoidal.



O aumento da amplitude no perfil do esgoto afluente (10-70%) resultou em um leve incremento na previsão da concentração de DQO (25-31 mg/l), com maior efeito sobre amônia (5,3-13,1 mg/l). Inclusive, para amplitude de 70% amônia superou SST. Este, por sua vez, não apresentou alteração significativa, mantendo-se relativamente constante para as simulações com diferentes amplitudes (Figura 6-10a).

Foi verificado que os resultados da simulação sinusoidal não diferiram expressivamente da simulação constante, uma vez que ambos os padrões utilizam

dados médios como entrada na modelagem, embora o padrão constante não simule as oscilações. Quando os valores de amplitude adotados na simulação sinusoidal geram resultados próximos às previsões da simulação constante, é um indício de que a amplitude escolhida para simular possíveis oscilações das variáveis não influencia os resultados da simulação utilizando dados médios como entrada.

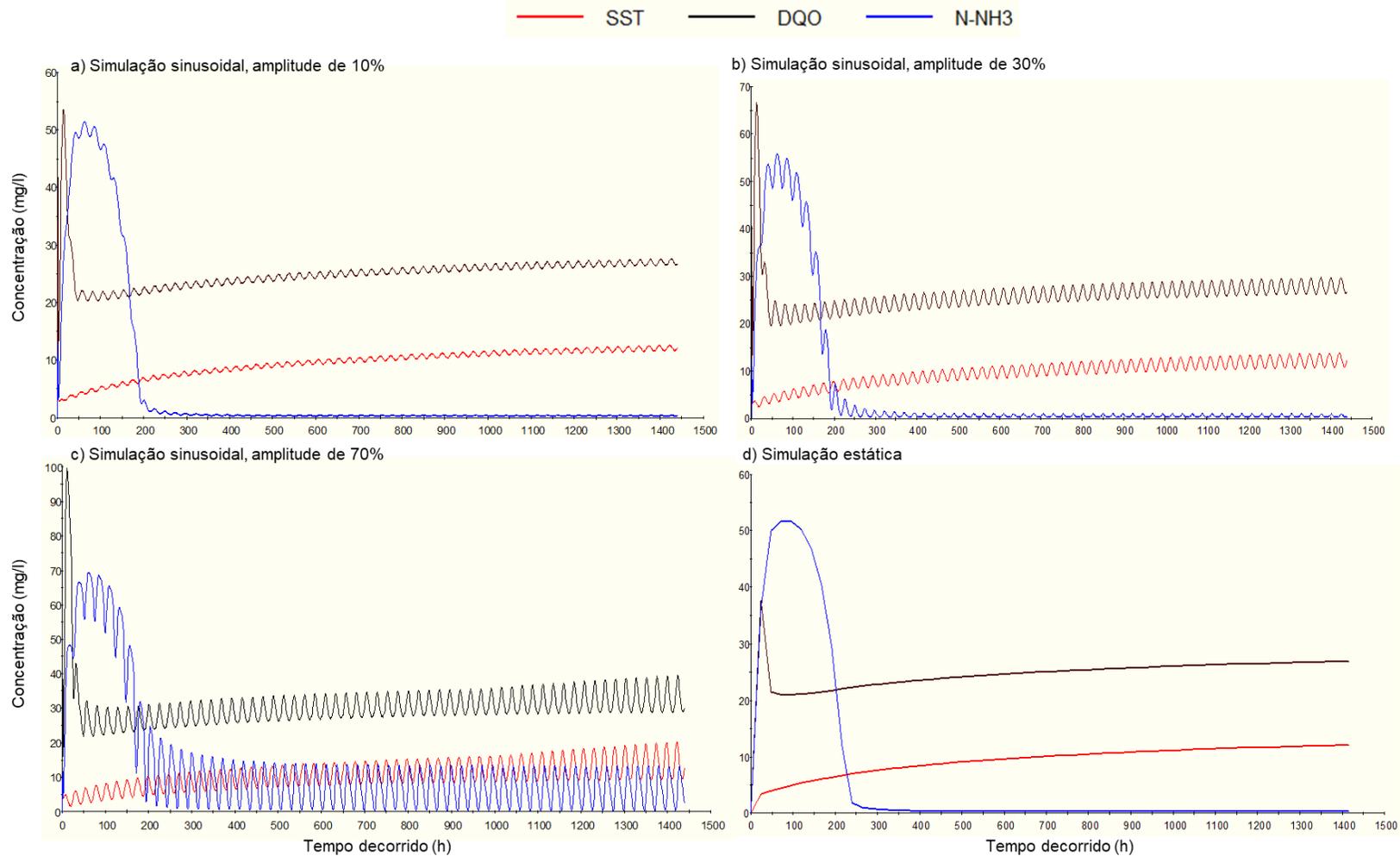
Nesse sentido, foi observado que os resultados gerados adotando até 30% de amplitude na simulação sinusoidal com dados médios da ETE-SJNV, apresentaram menor diferença em relação às previsões da simulação com padrão constante (Figura 6-10b). Inobstante, o valor de amplitude igual a 30% mostrou diferenças menores e semelhantes para as três variáveis analisadas.

Tratando-se da estabilização do processo de tratamento durante as simulações iniciais, foi observado que, apesar do aumento da concentração, os desempenhos das variáveis de controle do processo no efluente (DQO, SST e amônia) durante os 60 dias de simulação sinusoidal não foram diferentes em relação ao valor de amplitude adotado (Figura 6-11a-c).

Além disso, o desempenho das variáveis durante a simulação constante (Figura 6-11d) foi semelhante ao da simulação sinusoidal, principalmente para amônia nas amplitudes menores (10 e 30%), cujo pico foi semelhante ao obtido na simulação constante. Esta semelhança entre os picos dos dois tipos de simulação certamente se relaciona com a menor diferença entre as previsões médias identificadas nas simulações com amplitudes até 30% (Figura 6-10b).

Em todos os cenários analisados, a DQO passou por um pico no início da simulação e com aproximadamente dois dias se estabilizou, apresentando em seguida um leve aumento até o final da simulação (Figura 6-11). Amônia também sofreu um pico no início da simulação, necessitando de mais tempo, entre oito e 10 dias, para se estabilizar gradualmente. A concentração de SST, por sua vez, embora não tenha apresentado um pico distinto, aumentou em proporção semelhante à da DQO total.

Figura 6-11 – Previsões das médias das variáveis alvo no efluente geradas pelas simulações iniciais do processo de lodos ativados da ETE-SJNV: (a-c) perfil do esgoto afluyente utilizando padrão sinusoidal (oscilações durante o processo de tratamento) com diferentes amplitudes e (d) perfil do esgoto afluyente utilizando padrão constante.



Fonte: autor.

O mesmo desempenho de DQO, amônia e SST nas primeiras horas da simulação inicial foi observado por Baptista (2020). A autora também modelou o processo da ETE-SJNV com ASM1, porém adotou simulação constante e dados de outro período (2006-2010). Ao final da simulação inicial de dois meses realizada pela autora, as variáveis se estabilizaram com um aumento na concentração em relação às primeiras horas de simulação. Esta elevação na concentração pode estar relacionada às características do afluente do período, que apresentaram concentrações diferentes das de 2018 (deste estudo).

As condições mencionadas apontam que modelar o processo de lodos ativados usando dados médios e o perfil sinusoidal de simulação, para prever possíveis oscilações das variáveis durante o tratamento, não afeta as previsões das variáveis alvo, desde que sejam adotados valores adequados para amplitude. Sendo assim, optou-se pelo término da simulação inicial com padrão sinusoidal e amplitude de 30% como ponto de partida para as simulações seguintes do processo de calibração sistemática do modelo ASM1. O valor de amplitude de 30% também foi recomendado pelo desenvolvedor do STOAT© em testes iniciais.

6.3. Identificação dos parâmetros sensíveis do ASM1

Na primeira simulação da análise de sensibilidade os parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 foram mantidos com valores padrão. As previsões dessa simulação foram menores para todas as variáveis, em relação aos valores registrados pela ETE-SJNV, com destaque para a previsão de amônia que apresentou variação de quase 90% (Tabela 6-9). A elevada variação pode estar relacionada ao alto CV obtido para NH₃ efluente do processo da ETE (Tabela 6-4).

Tabela 6-9 – Concentrações (mg/l) das variáveis alvo da modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV aplicando valores padrão de parâmetros do ASM1.

Variável alvo	SST	DQO	Amônia
Média efluente 2018 (ETE-SJNV)	30	52	4,39
Simulação de sensibilidade com parâmetros padrões do ASM1	13	28	0,50
Variação (%)	-57,47	-45,52	-88,61

Fonte: autor.

O resultado da previsão de amônia ainda é aproximado ao encontrado por Baptista (2020), enquanto que para SST e DQO, a autora obteve previsões maiores que os valores medidos na ETE, com variações superando 150% das concentrações

reais do efluente do tratamento. Inobstante, os resultados reforçam a necessidade de calibração do modelo para simulação do processo da ETE-SJNV.

Parâmetros sensíveis

Os resultados das simulações de sensibilidade e os valores dos parâmetros do ASM1 adotados nessa análise estão descritos no **Apêndice 2**.

Foram identificados seis parâmetros sensíveis do modelo ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. A DQO não apresentou parâmetros sensíveis, enquanto a amônia foi a variável mais afetada pela alteração dos parâmetros do ASM1 (Figura 6-12).

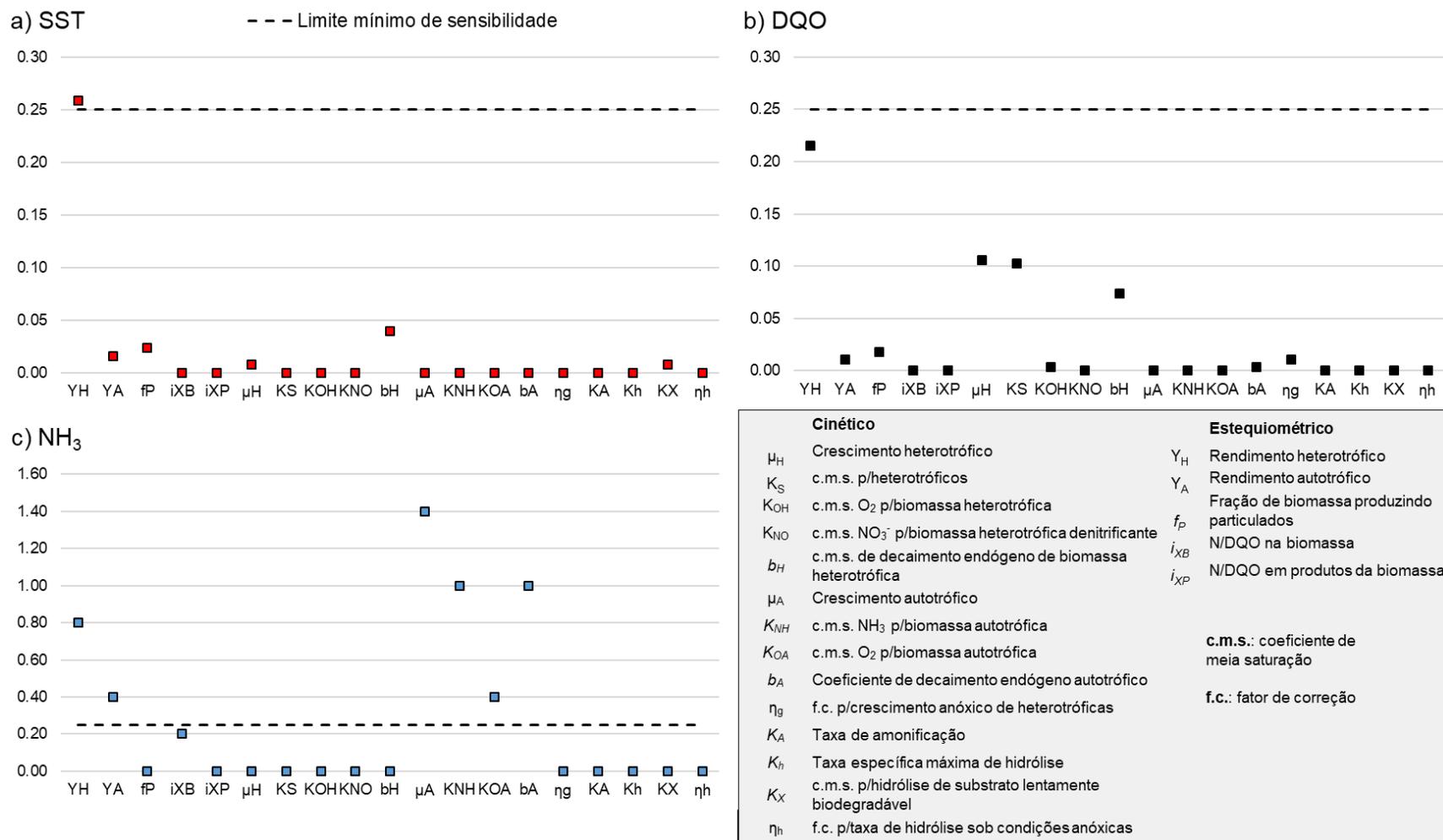
O rendimento heterotrófico (Y_H) foi sensível às respostas de SST e amônia no efluente (Figura 6-12a;c). Apesar de não ser considerado sensível para DQO, o mesmo parâmetro apresentou coeficiente de 0,22, indicando efeito sobre esta variável (Figura 6-12b). Lim et al. (2012) também observaram o mesmo resultado, apontando que a relação de Y_H com SST e DQO está ligada à produção de lodo.

O rendimento heterotrófico depende do substrato e da população de microrganismos que realizam a degradação da matéria orgânica. Tratando-se de um parâmetro específico, Y_H deve ser determinado para cada tipo de esgoto (HENZE et al., 1987).

Os demais parâmetros identificados como sensíveis afetaram apenas a amônia, sendo eles: Y_A , μ_A , K_{NH} , K_{OA} e b_A . Os coeficientes de sensibilidade do crescimento autotrófico (μ_A), do coeficiente de meia saturação da amônia para biomassa autotrófica (K_{NH}) e do coeficiente de decaimento endógeno autotrófico (b_A) apresentaram altos valores ($\geq 1,0$), representando forte efeito sobre as previsões de concentração da amônia efluente do processo de lodos ativados da ETE-SJNV (Figura 6-12c).

A alta sensibilidade de μ_A (1,4) pode estar relacionada à altas cargas de amônia e à falta de nitrificação completa no padrão de simulação (LEVY, 2007). O alto valor de concentração (46 mg/l) e a acentuada variação no registro de amônia afluente em 2018 (CV>50% - Tabela 6-4) se relacionam com a média aplicada na modelagem. Esta média e a grande diferença da previsão da amônia obtida na simulação inicial de sensibilidade (-88,61% - Tabela 6-9) podem justificar o forte efeito da modificação de μ_A sobre a concentração de NH_3 efluente.

Figura 6-12 – Coeficientes de sensibilidade de parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1 identificados na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.



Fonte: autor.

Diferentemente do observado no presente estudo, μ_A também pode afetar a concentração de SST efluente se tornando um parâmetro sensível para esta variável (LIM et al., 2012).

Os parâmetros cinéticos b_A e K_{NH} apresentaram o mesmo efeito sobre amônia efluente, o que também foi observado em outro estudo (LEVY, 2007). Enquanto o coeficiente de decaimento endógeno autotrófico (b_A) é considerado de difícil mensuração, podendo ser assumido, é recomendado que o valor do coeficiente de meia saturação da amônia para biomassa autotrófica (K_{NH}) seja avaliado para cada tipo de esgoto (HENZE et al., 1987).

O parâmetro estequiométrico Y_A é um valor composto para o crescimento combinado de *Nitrosomonas* sp e *Nitrobacter* sp. O valor desse parâmetro está relacionado principalmente às diferenças nas condições ambientais (HENZE et al., 1987). Juntos, o rendimento autotrófico (Y_A) e o coeficiente de meia saturação de oxigênio para biomassa autotrófica (K_{OA}) apresentaram efeito de igual intensidade (0,40) sobre amônia efluente (Figura 6-12c). Os valores desses parâmetros também podem ser assumidos e foram diretamente proporcionais à concentração de amônia efluente na modelagem da ETE-SJNV.

Metade dos seis parâmetros identificados como sensíveis no presente estudo também incluem parâmetros considerados como sujeitos à modificações, conforme levantamento realizado a partir de resultados de modelagem com ASM1 de 18 ETEs na Europa, três na Ásia e uma na América do Norte (HAUDUC et al., 2011). Esses parâmetros correspondem ao Y_H , μ_A e b_A .

Em outro estudo, foi confirmada a relevância dos parâmetros Y_H , μ_A , K_{NH} , e K_{OA} para ambas as condições de simulação dos lodos ativados – estática e dinâmica (PETERSEN et al., 2003). Vale ressaltar que parâmetros sensíveis identificados na calibração a partir de simulações em estado estático podem ser usados na calibração com simulação dinâmica (LIWARSKA-BIZUKOJC et al., 2011).

Os parâmetros Y_A e b_A também foram modificados em estudo que avaliou a simulação do co-tratamento de resíduo de tanque séptico em ETE teórica operando com lodos ativados (PISTORELLO, 2018). Baptista (2020), que também modelou a ETE-SJNV com ASM1, optou pela calibração por tentativa e erro (sem análise de sensibilidade) e modificou apenas os parâmetros Y_H e b_A .

Embora parâmetros como I_{XB} , μ_H , k_s e b_H , afetaram as variáveis amônia e DQO, eles não foram considerados sensíveis e, portanto, não foram incluídos na etapa de otimização. Essa decisão também visou simplificar o desenvolvimento da Metodologia de Superfície de Resposta (MSR), uma vez que quanto maior o número de fatores independentes (parâmetros sensíveis), maior a complexidade de geração dos modelos de regressão (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014).

6.4. Simulações de calibração do ASM1

Para a realização das simulações de calibração foi preciso determinar os níveis de teste de cada fator (parâmetro sensível). Essa determinação considerou a limitação da MSR referente à baixa capacidade de previsão desta metodologia fora do domínio experimental, sendo importante que os fatores testados variem continuamente dentro desse mesmo domínio (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014). Portanto, é primordial estabelecer uma faixa experimental adequada para os fatores que serão analisados.

As faixas usuais adotadas para cada parâmetro estequiométrico e cinético do ASM1 estão dispostas na Tabela 4-7. Para definição das faixas experimentais foram realizadas 33 simulações variando os valores padrões dos parâmetros sensíveis, com o intuito de obter a menor diferença possível entre as previsões do modelo e os valores das variáveis medidos na ETE-SJNV (SST, DQO e NH_3 efluentes). Em seguida, os níveis de teste foram estabelecidos para cada fator/parâmetro sensível (Tabela 6-10).

Tabela 6-10 – Faixa experimental aplicada no *Central Composite Design* para simulações de calibração do ASM1.

Fatores	Níveis de teste		
	-1	0	+1
Y_H	0,98	1	1,02
Y_A	0,2	0,24	0,28
$\mu_A (15^\circ\text{C} - \text{h}^{-1})^a$	0,0101	0,0126	0,0151
K_{NH}	1	1,25	1,5
$b_A (15^\circ\text{C} - \text{h}^{-1})^a$	0,0048	0,006	0,0072
K_{OA}	0,4	0,5	0,6

Fonte: autor. (a) Unidade padrão no STOAT^(C).

A faixa experimental dos parâmetros Y_A , K_{NH} e K_{OA} situaram-se próximas dos valores padrão (0,24; 1; 0,4 respectivamente), enquanto para Y_H , μ_A e b_A foram alcançadas faixas fora dos valores padrão (0,67; 0,0207; 0,0036 respectivamente).

As faixas experimentais definidas condizem com constatações relatadas por outros autores. Embora a modificação do parâmetro Y_A não seja comum, os parâmetros Y_H , μ_A e b_A apresentam grande variabilidade de valores que podem ser adotados na modelagem. Os coeficientes de meia saturação (K_{NH} e K_{OA}), por sua vez, podem depender de condições ambientais, o que nem sempre requer grandes modificações em seus valores padrão (HAUDUC et al., 2011).

A partir das faixas experimentais, o delineamento experimental com *Central Composite Design* gerou o total de 90 simulações: 64 pontos do cubo, 14 pontos centrais no cubo e 12 pontos axiais. As combinações de fatores do delineamento e os resultados das simulações de calibração estão apresentados no **Apêndice 3**.

O ASM1 consiste em modelo matemático determinístico, ou seja, repetições das simulações em um mesmo ponto (combinação de parâmetros sensíveis) produzem sempre o mesmo valor de saída. Esta foi uma limitação para a aplicação da MSR no presente estudo, uma vez que esta metodologia corresponde a um modelo estatístico, sendo necessário representar a variabilidade de experimentos reais.

Para contornar tal situação, foi procedida a variação de outros parâmetros do modelo ASM1 que também apresentaram efeito nas respostas das variáveis, embora não foram considerados sensíveis pelo limite de 0,25. Estes parâmetros foram: i_{XB} , b_H , μ_H e K_S . O primeiro afetou amônia (Figura 6-12c), o segundo SST (Figura 6-12a) e DQO (Figura 6-12b) e os dois últimos afetaram principalmente as previsões de DQO. As alterações desses parâmetros foram aleatórias e realizadas durante as simulações no ponto central (simulações de 78-90 – **Apêndice 3**). Os valores adotados para os parâmetros alternativos atenderam ao disposto na Tabela 6-11.

6.5. Modelos de regressão individuais

A partir dos resultados das simulações de calibração foram calculados os “erros de previsão da simulação” (Equação 5-2 – termos descritos na metodologia), os quais foram empregados na MSR para geração dos modelos de regressão de cada variável alvo do estudo: SST, DQO e NH_3 efluentes.

Tabela 6-11 – Valores adotados para parâmetros alternativos nas simulações no ponto central do delineamento experimental.

Simulação ^a	i_{XB}	b_H^b	μ_H^b	K_S
78	0,0825	Padrão	Padrão	40
79	0,075	Padrão	Padrão	Padrão
80	0,075	Padrão	0,1179	40
81	0,09	Padrão	0,1179	Padrão
82	0,09	Padrão	Padrão	60
83	0,085	Padrão	0,1179	Padrão
84	0,0825	0,0237	Padrão	Padrão
85	0,075	0,0237	Padrão	Padrão
86	0,08	Padrão	Padrão	Padrão
87	0,08	Padrão	0,1179	40
88	0,0825	Padrão	0,1179	60
89	0,09	Padrão	0,1179	60
90	0,085	Padrão	0,1179	40

Fonte: autor. (a) **Apêndice 3**. (b) Condições adotadas no STOAT^(c) para 15°C (h⁻¹). Valores padrão: $b_H=0,0147$; $\mu_H=0,1768$; $K_S=20$.

$$e_{ASM1} = Y_O - Y_{ASM1}$$

Equação 5-2

Os modelos de regressão, por sua vez, geraram como resultado os “erros de previsão da regressão”. O valor da concentração de cada variável alvo previsto pela regressão pode ser obtido pela Equação 5-3, considerando os dados observados na ETE-SJNV. Contudo, considerando o foco em reduzir ao máximo o erro de simulação, a otimização dos valores dos parâmetros sensíveis considerou apenas os erros de previsão, os quais estão relacionados às previsões das concentrações efluentes de SST, DQO e NH₃ (Equações 5-2 e 5-3). Dessa forma, nas seções seguintes foi adotado o termo “previsão” que se refere diretamente ao erro de previsão e indiretamente ao valor previsto da concentração de cada variável alvo.

Sólidos Suspensos Totais (SST) e Demanda Química de Oxigênio (DQO)

Os modelos de regressão gerados para as variáveis SST e DQO apresentaram resultados semelhantes na ANOVA (Tabela 6-12). Foi observado que as interações com dois fatores não foram significativas, ou seja, a relação entre os parâmetros sensíveis analisados não influencia a previsão matemática de SST e DQO no efluente do processo de lodos ativados modelado via ASM1.

Os parâmetros K_{NH} e k_{OA} não foram significativos em ambos os modelos de regressão. Estes parâmetros correspondem, respectivamente, a coeficientes de

meia saturação de amônia e de oxigênio para biomassa autotrófica, portanto, apresentam pouca influência sobre os microrganismos heterotróficos. Inclusive, na análise de sensibilidade esses parâmetros apresentaram efeito nulo sobre SST e DQO (Figura 6-12a-b).

Tabela 6-12 – Resultados da ANOVA para os modelos de regressão de previsão das variáveis SST e DQO efluentes na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).

Fonte	GL	SST				DQO			
		SQ (Aj.)	QM (Aj.)	Valor F	Valor-P	SQ (Aj.)	QM (Aj.)	Valor F	Valor-P
Modelo	12	8384,66	698,72	646,83	<0,001	11738,6	978,2	1022,14	<0,001
Linear	6	8153,48	1358,91	1257,99	<0,001	11544,6	1924,1	2010,5	<0,001
Y_H	1	8098,83	8098,83	7497,37	<0,001	11467,6	11467,6	11982,51	<0,001
Y_A	1	39,52	39,52	36,58	<0,001	55,8	55,8	58,28	<0,001
μ_A	1	9,34	9,34	8,65	0,004	13,1	13,1	13,72	0,004
K_{NH}	1	0,24	0,24	0,22	0,639	0,3	0,3	0,36	0,552
b_A	1	5,24	5,24	4,85	0,031	7,3	7,3	7,68	0,007
k_{OA}	1	0,3	0,3	0,28	0,598	0,4	0,4	0,45	0,505
Quadrado	6	231,19	38,53	35,67	<0,001	194	32,3	33,79	<0,001
$Y_H Y_H$	1	213,45	213,45	197,60	<0,001	104,4	104,4	109,12	<0,001
$Y_A Y_A$	1	12,22	12,22	11,31	0,001	12,5	12,5	13,03	0,001
$\mu_A \mu_A$	1	4,57	4,57	4,23	0,043	26,6	26,6	27,77	<0,001
$K_{NH} K_{NH}$	1	12,70	12,70	11,75	0,001	11,9	11,9	12,48	0,001
$b_A b_A$	1	9,37	9,37	8,67	0,004	16,4	16,4	17,12	<0,001
$k_{OA} k_{OA}$	1	12,41	12,41	11,49	0,001	12,3	12,3	12,83	0,001
Erro	77	83,18	1,08	-	-	73,7	1,0	-	-
Falta de ajuste	64	18,58	0,29	0,06	1,000	26,6	0,4	0,11	1,000
Erro puro	13	64,59	4,97	-	-	47,1	3,6	-	-
Total	89	8467,84	-	-	-	11812,3	-	-	-

Fonte: autor.

Os modelos de regressão apresentaram ajuste adequado (Falta de ajuste: $p=1,0$), indicando sua precisão em prever respostas das concentrações efluentes de SST e DQO. As Equações 6-2 e 6-3 representam os modelos de regressão quadráticos para as previsões de SST (y_{SSTe}) e DQO (y_{DQOe}), respectivamente.

$$y_{SSTe} = 2896 - 6217Y_H - 78,9Y_A - 656\mu_A - 13,33K_{NH} - 2560b_A - 33,02K_{OA} + 3360Y_H Y_H + 201Y_A Y_A + 31452\mu_A \mu_A + 5,25K_{NH} K_{NH} + 195539b_A b_A + 32,41K_{OA} K_{OA}$$

Equação 6-2

$$y_{DQOe} = 1704 - 4102Y_H + 118,3Y_A + 2074\mu_A + 12,46K_{NH} + 2850b_A + 31,50K_{OA} + 2350Y_H Y_H - 203Y_A Y_A - 75877\mu_A \mu_A - 5,09K_{NH} K_{NH} - 258581b_A b_A - 32,24K_{OA} K_{OA}$$

Equação 6-3

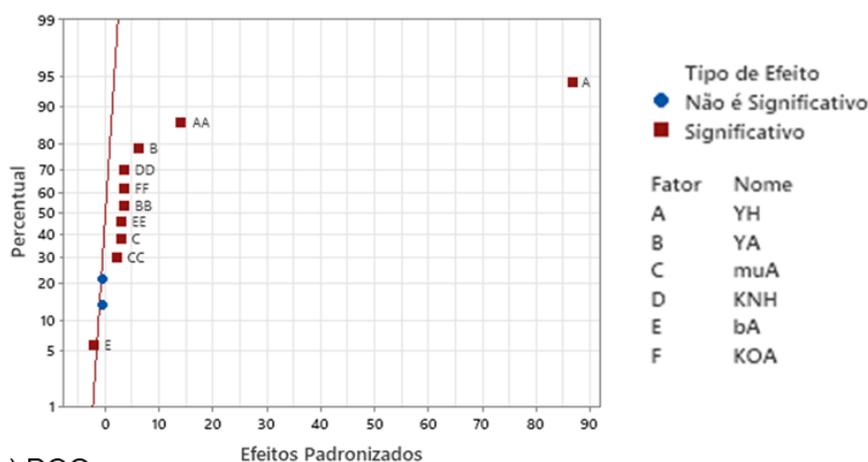
Nestas equações foram considerados apenas as relações lineares e quadráticas dos fatores (parâmetros sensíveis do ASM1), as quais foram

estatisticamente significativas na ANOVA. Dessa forma, os modelos adotados são considerados adequados para previsões matemáticas de SST e DQO efluentes.

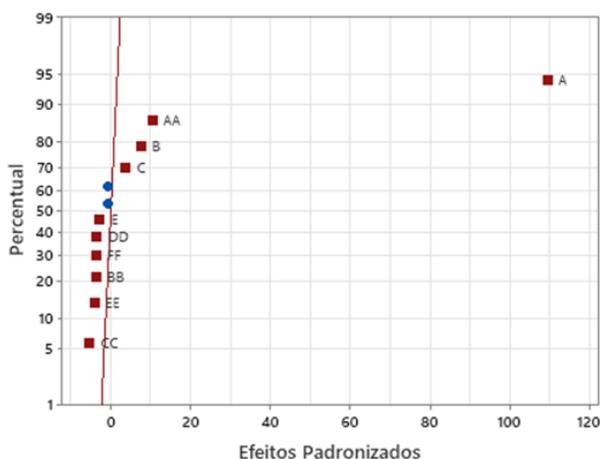
A Figura 6-13 apresenta os efeitos padronizados de cada parâmetro considerado no cálculo dos modelos de regressão para SST e DQO efluentes. O parâmetro mais proeminente para essas variáveis alvo foi o rendimento heterotrófico (Y_H), especialmente no que tange sua relação linear no modelo de regressão (A: SST=86,59%; DQO=109,47%). Apesar de significativas, as relações linear e quadrática dos demais parâmetros apresentaram efeito menor que 15% sobre as previsões de SST e DQO.

Figura 6-13 – Efeitos Padronizados dos fatores (parâmetros sensíveis do ASM1) dos modelos de regressão gerados para SST e DQO efluentes na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).

a) SST



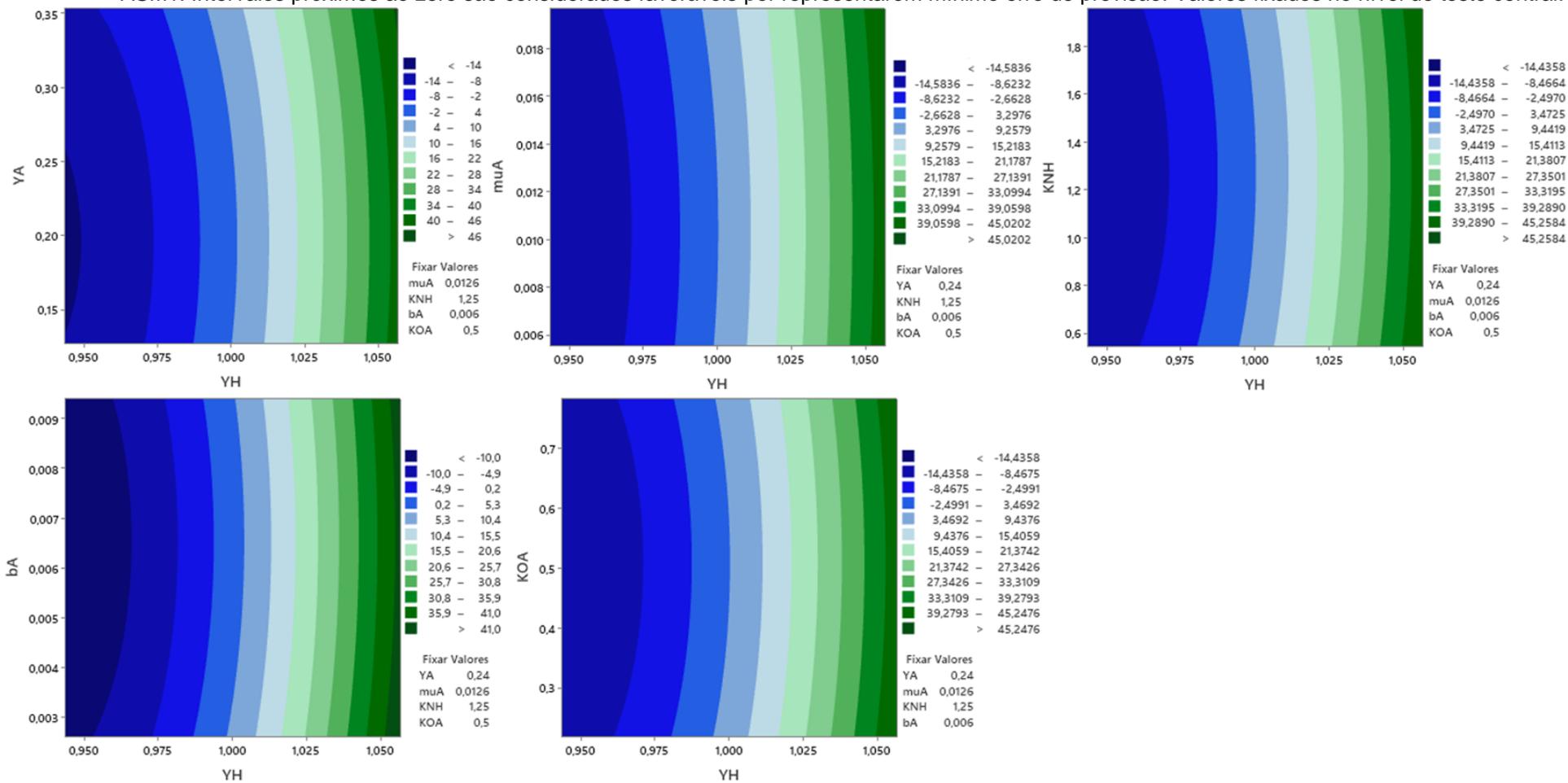
b) DQO



Fonte: autor.

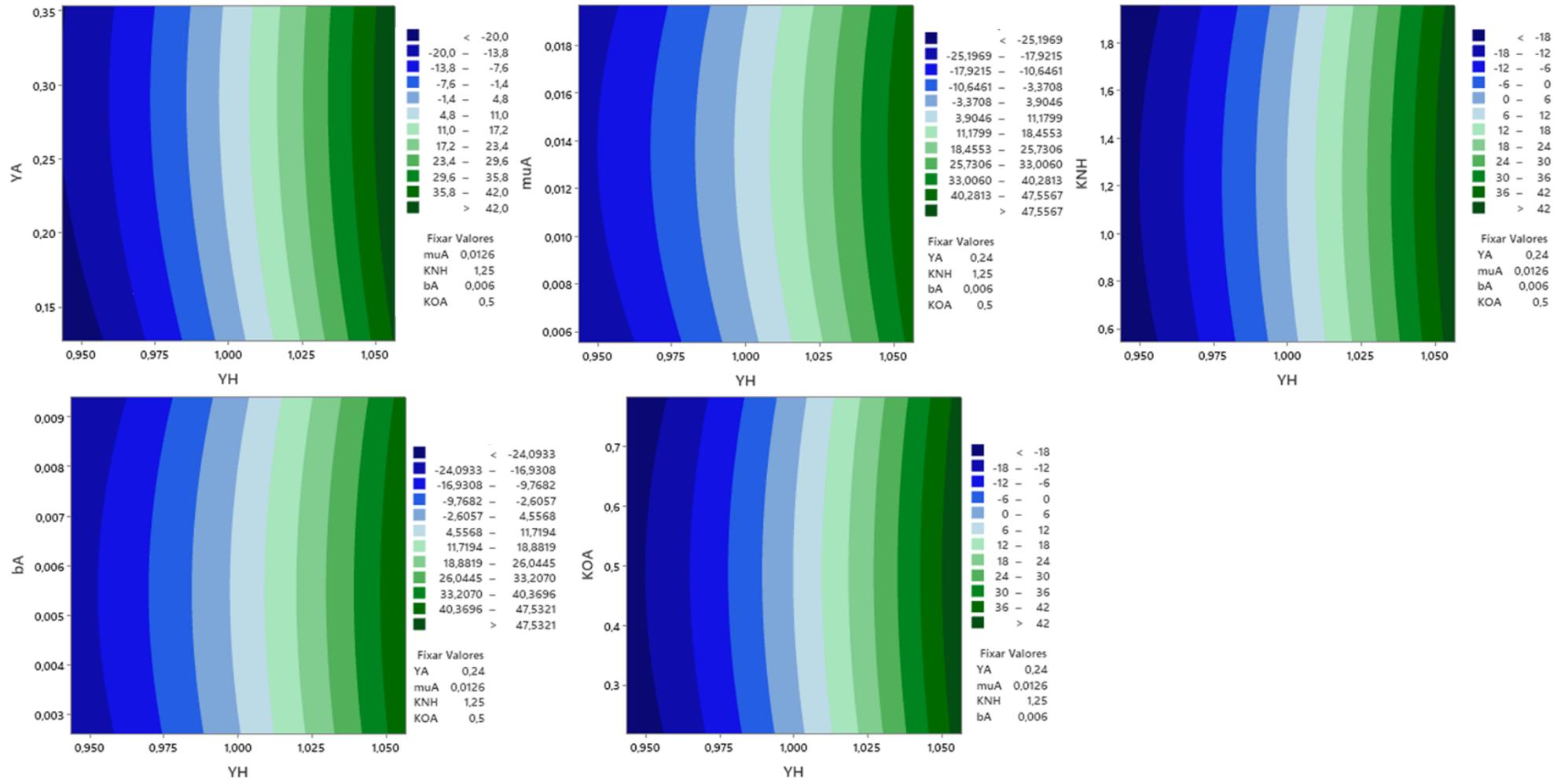
Na Figura 6-14 e Figura 6-15 é possível observar o efeito da variação de Y_H sobre a previsão de SST e DQO efluentes, respectivamente, em relação aos demais parâmetros considerados sensíveis no ASM1.

Figura 6-14 – Superfícies de Resposta [do erro de] da previsão de SST efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Relações entre variações nos valores do rendimento heterotrófico (Y_H) e dos demais parâmetros sensíveis do ASM1. Intervalos próximos ao zero são considerados favoráveis por representarem mínimo erro de previsão. Valores fixados no nível de teste central.



Fonte: autor.

Figura 6-15 – Superfícies de Resposta da [erro de] previsão de DQO efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Relações entre variações nos valores do rendimento heterotrófico (Y_H) e dos demais parâmetros sensíveis do ASM1. Intervalos próximos ao zero são considerados favoráveis por representarem mínimo erro de previsão. Valores fixados no nível de teste central.



Fonte: autor.

Para as características da modelagem da ETE-SJNV com o ASM1, o aumento e a diminuição do valor do rendimento heterotrófico resultam em previsões maiores e menores, respectivamente, que os dados registrados na ETE, tanto para SST (Figura 6-14) como para DQO (Figura 6-15). Esse efeito não depende dos outros parâmetros sensíveis avaliados no trabalho, uma vez que não foi notada interação significativa do Y_H com outros fatores na ANOVA (Tabela 6-12). Os valores previstos para SST, no entanto, foram sempre inferiores aos de DQO, o que condiz com as observações da ETE-SJNV (Tabela 6-4).

Foi notada relação inversa dos parâmetros relacionados aos microrganismos autotróficos e ao nitrogênio (Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA}) entre SST e DQO (Figura 6-14 e Figura 6-15), indicando possíveis efeitos contrários desses parâmetros sobre as duas variáveis alvo. As equações quadráticas dos modelos (Equações 6-2 e 6-3) também denotam essa situação. Enquanto os sinais dos termos linear e quadrático de Y_H mantiveram-se inalterados nas duas equações, os termos dos parâmetros Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA} apresentaram sinais inversos.

Para valores de Y_H menores e próximos a uma unidade, os erros de previsão de SST e DQO foram relativamente nulos (Figura 6-14 e Figura 6-15). Portanto, esse intervalo de ajuste para o rendimento heterotrófico indica uma região favorável para calibração deste parâmetro no ASM1 para modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

A faixa experimental adotada para Y_H na MSR supera os valores padrão do ASM1. Nas regiões favoráveis ao mínimo erro de previsão para SST e DQO, o aumento do parâmetro foi de 0,67 para aproximadamente 1 g DQO formada.(g DQO oxidada)⁻¹. Esta alteração representa aprimoramento da eficiência de transformação da DQO orgânica em organismos de DQO (CHEN et al., 2020).

Em outras palavras, o Y_H consiste na fração de substrato que foi convertida em biomassa heterotrófica, sendo um parâmetro de grande efeito sobre as taxas de crescimento microbiano. A concentração de lodo é significativamente afetada pelo rendimento heterotrófico (PETERSEN et al., 2002) e este parâmetro é fundamental para o projeto do sistema, uma vez que determina a concentração de biomassa no reator (LEVY, 2007).

Amônia (NH₃)

Diferentemente dos modelos anteriores, amônia foi a única variável alvo para a qual foi notado efeito significativo da interação com dois fatores no modelo de regressão (Tabela 6-13). Estas interações foram entre parâmetros sensíveis do ASM1 relacionados aos microrganismos autotróficos e ao conteúdo de nitrogênio no processo de lodos ativados, sendo: $Y_A \mu_A$, $\mu_A b_A$, $\mu_A k_{OA}$ e $b_A k_{OA}$.

Tabela 6-13 – Resultados da ANOVA para o modelo de regressão de previsão da variável NH₃ efluente na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).

Fonte	GL	SQ (Aj.)	QM (Aj.)	Valor F	Valor-P
Modelo	12	1614,26	134,521	272,35	<0,001
Linear	6	1344,39	224,064	453,63	<0,001
Y _H	1	0,83	0,835	1,69	0,198
Y _A	1	21,64	21,64	43,81	<0,001
μ_A	1	797,84	797,838	1615,27	<0,001
K _{NH}	1	19,47	19,466	39,41	<0,001
b _A	1	478,17	478,17	968,08	<0,001
k _{OA}	1	26,44	26,436	53,52	<0,001
Quadrado	2	161,94	80,972	163,93	<0,001
$\mu_A \mu_A$	1	149,80	149,796	303,27	<0,001
b _A b _A	1	17,63	17,634	35,70	<0,001
Interação c/2 fatores	4	107,93	26,982	54,63	<0,001
Y _A μ_A	1	5,65	5,647	11,43	0,001
μ_A b _A	1	93,44	93,436	189,17	<0,001
μ_A k _{OA}	1	4,98	4,978	10,08	0,002
b _A k _{OA}	1	3,87	3,866	7,83	0,006
Erro	77	38,03	0,494	-	-
Falta de ajuste	64	37,54	0,587	15,51	<0,001
Erro puro	13	0,49	0,038	-	-
Total	89	1652,29	-	-	-

Fonte: autor.

Embora o parâmetro estequiométrico Y_H tenha apresentado coeficiente de sensibilidade para NH₃ efluente igual a 0,8 (Figura 6-12c), não apresentou efeito significativo para as previsões no modelo de regressão da mesma variável alvo (Tabela 6-13). O rendimento heterotrófico apresenta efeito desprezível sobre a concentração máxima de amônia alcançada durante o tratamento com lodo ativado. Entretanto, já foi observado que o mesmo parâmetro pode influenciar a amônia efluente, uma vez que a biomassa heterotrófica formada incorpora amônia existente no meio no decorrer da síntese de células (LEVY, 2007).

O modelo de regressão de amônia não apresentou ajuste adequado (Falta de ajuste: p=0,0). Como tentativa para corrigir a falta de ajuste, foi utilizada a variável de interesse original das simulações (previsão da concentração de amônia em detrimento do erro de previsão). Assim, esperou-se obter apenas valores positivos que podem ser aplicados para transformações visando melhorar o ajuste do modelo

de regressão. No entanto, não foi alcançado sucesso e optou-se por manter o modelo de regressão inicialmente gerado.

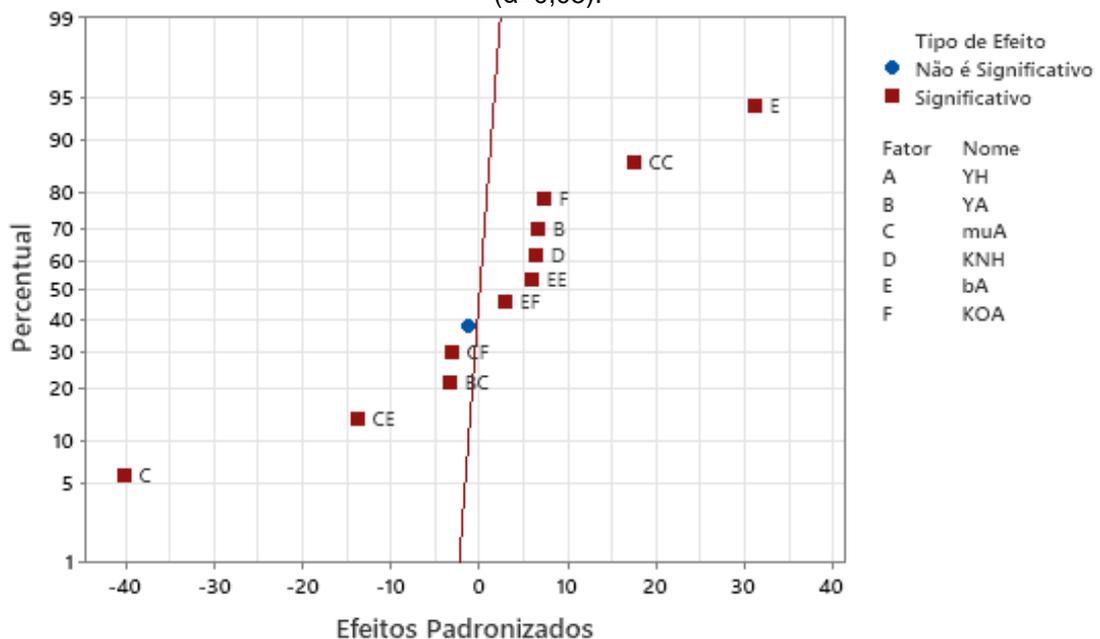
Sendo assim, para amônia a equação de regressão apresenta além dos termos lineares e quadráticos, os termos de interação entre parâmetros que foram estatisticamente significativos (Equação 6-4).

$$y_{NH_3} = -2,13 - 5,11Y_H + 50,4Y_A - 2072\mu_A + 1,973K_{NH} + 2900b_A + 7,52K_{OA} + 178414\mu_A\mu_A + 265686b_Ab_A - 2970Y_A\mu_A - 402760\mu_Ab_A - 1116\mu_AK_{OA} + 2048b_AK_{OA}$$

Equação 6-4

Os parâmetros que mais afetaram as respostas das previsões de amônia no modelo de regressão foram μ_A (C=-40%) e b_A (E=31%), seguidos de K_{OA} , Y_A e K_{NH} (Figura 6-16). Contudo, esses efeitos foram menores comparados aos efeitos de Y_H nos modelos de regressão de SST e DQO (>80%), reforçando a influência do rendimento heterotrófico na calibração do ASM1 para modelagem do processo de lodos ativados (LEVY, 2007; LIM et al., 2012; PETERSEN et al., 2002).

Figura 6-16 – Efeitos Padronizados dos fatores (parâmetros sensíveis do ASM1) do modelo de regressão gerado para NH_3 efluente na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. ($\alpha=0,05$).



Fonte: autor.

O crescimento autotrófico (μ_A) é a variável mais importante para as concentrações efluentes de amônia e nitrato (PETERSEN et al., 2002). O sistema de

tratamento pode ser avaliado em função de μ_A , que representa o consumo de amônia associado ao crescimento de biomassa autotrófica (LEVY, 2007).

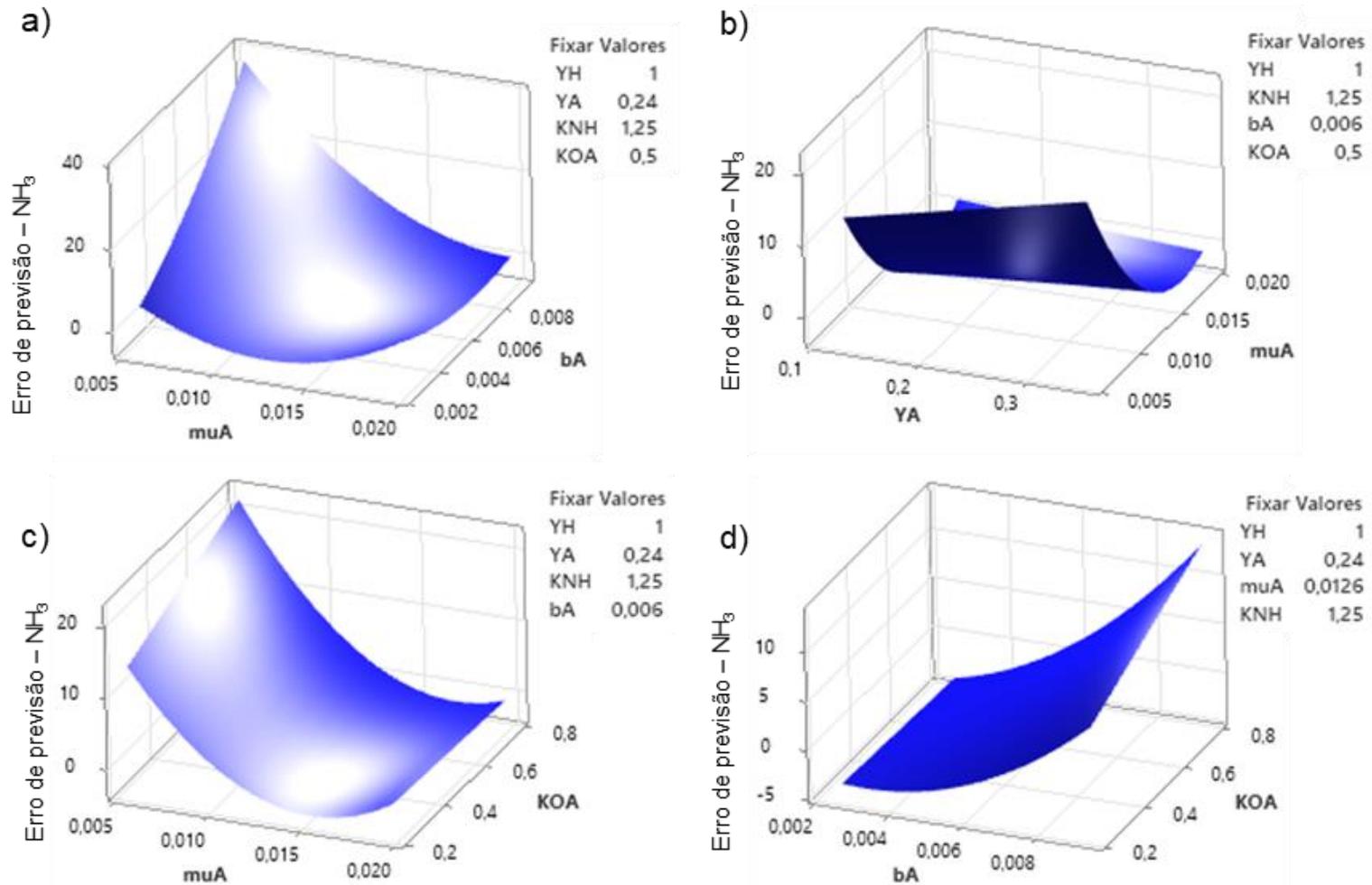
Os resultados do presente estudo indicaram a relação de μ_A com Y_A , b_A e k_{OA} (Tabela 6-13). A interação entre os parâmetros μ_A e b_A foi a mais significativa do modelo de regressão gerado para amônia efluente. A superfície de resposta da relação entre esses dois parâmetros indica as diversas combinações que podem ser testadas de modo a obter erro de previsão de NH_3 efluente em torno de zero, ou seja, aproximado ao registro da ETE-SJNV (Figura 6-17a). A variabilidade dos valores que podem ser adotados para os parâmetros μ_A , b_A e Y_H foi destacada por outros autores (HAUDUC et al., 2011).

A superfície de μ_A e b_A também evidencia que a faixa experimental adotada para esses dois parâmetros foi adequada para a previsão da concentração de amônia efluente similar aos registros da ETE-SJNV. A relação observada entre esses parâmetros é geralmente inversamente proporcional, sendo que a diminuição de μ_A e b_A eleva e diminui, respectivamente, a concentração de amônia efluente. O aumento de b_A pode comprometer o crescimento celular e repor nutrientes no sistema, elevando a concentração de nitrogênio amoniacal. Contudo, o efeito de b_A pode ser irrisório para controlar NH_3 efluente (LEVY, 2007).

Na relação de μ_A com Y_A (Figura 6-17b) e com k_{OA} (Figura 6-17c), o erro de previsão de amônia efluente gerado pelo modelo de regressão é nulo para os maiores valores testados de μ_A . A variação de Y_A e k_{OA} na interação não mostrou grande efeito sobre a previsão de amônia efluente, corroborando resultados de outros autores (PETERSEN et al., 2002).

A interação entre b_A e k_{OA} foi menos significativa ($p=0,006$) (Tabela 6-13). A região favorável para obter previsões de amônia efluente próximas aos registros da ETE-SJNV condiz com toda a faixa experimental adotada para k_{OA} , mas apenas com menores valores testados para b_A (Figura 6-17d).

Figura 6-17 – Superfícies de Resposta [do erro de] da previsão de amônia efluente geradas pelo modelo de regressão quadrático a partir de simulações do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Interações entre fatores significativas conforme ANOVA. Erro de previsão próximo ao zero é considerado favorável por representar previsão aproximada ao observado na ETE. Valores fixados no nível de teste central.



Fonte: autor.

6.6. Adequação dos modelos de regressão

A precisão de um modelo de regressão é dada pelo seu coeficiente de determinação (R^2). O $R^2_{ajustado}$ auxilia na comparação entre modelos e o valor de *RMSE* indica o erro entre as previsões originadas da simulação (ASM1) e da regressão (MSR) (BORZOOEI et al., 2019; NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014; NEILL; HASHEMI, 2018). A Tabela 6-14 apresenta essas medidas para os modelos de regressão gerados para as previsões de SST, DQO e NH_3 no efluente da modelagem de lodos ativados da ETE-SJNV.

Tabela 6-14 – Medidas de precisão e de erro dos modelos de regressão gerados para as variáveis alvo em relação às previsões da simulação.

	SST	DQO	NH_3
R^2	0,9902	0,9938	0,977
$R^2_{ajustado}$	0,9886	0,9928	0,9734
<i>RMSE</i>	0,97	0,91	0,65

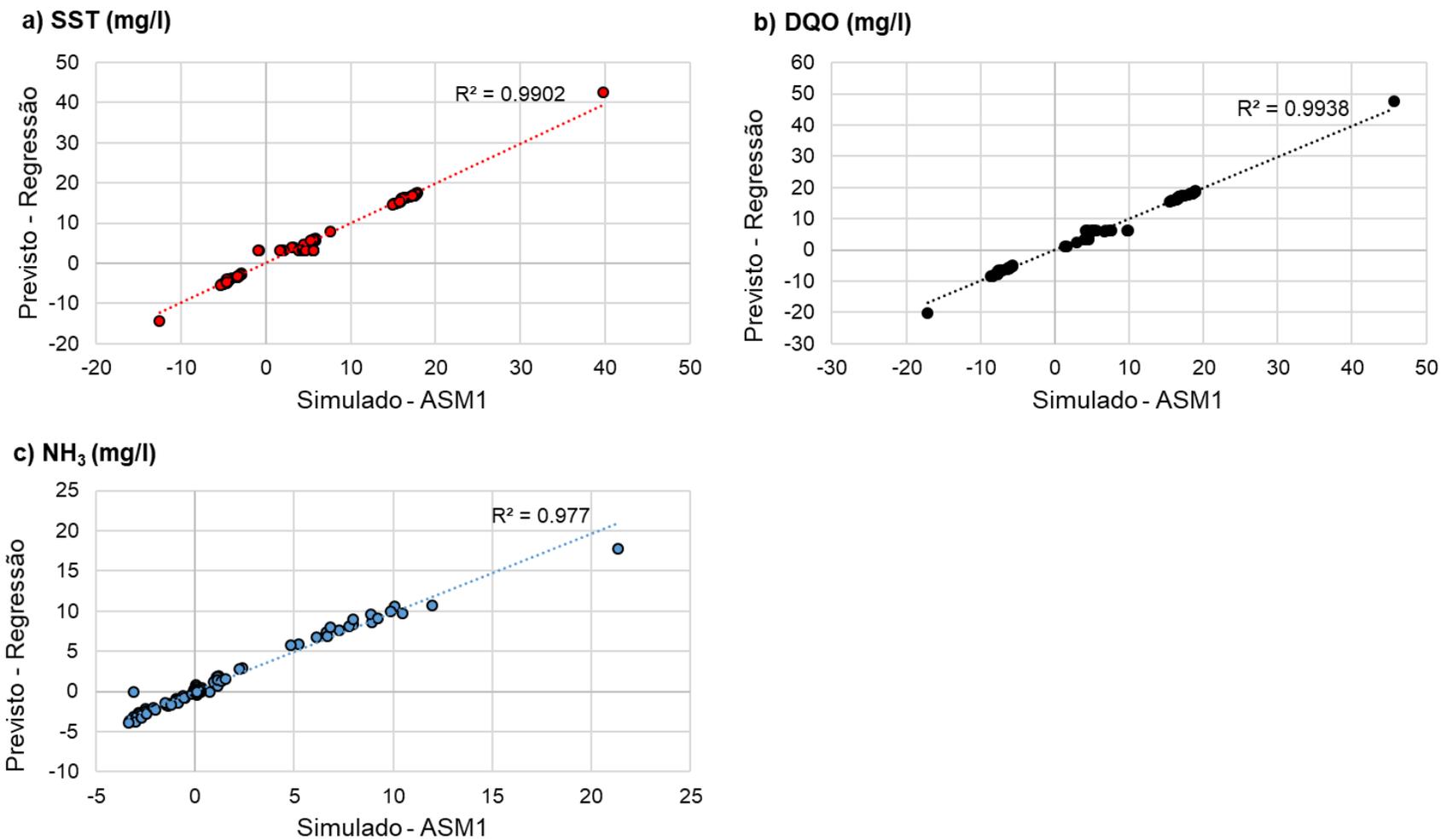
Fonte: autor.

Os três modelos de regressão gerados apresentaram alta precisão, sendo que eles explicam pelo menos 97% da variação nas previsões de SST, DQO e NH_3 efluentes ($R^2 > 0,97$). A diferença entre os modelos não foi superior a 2% ($R^2_{ajustado}$). Os altos coeficientes de determinação também representam, para as três variáveis alvo, a forte correlação existente entre os erros de previsão gerados pela MSR e pela simulação com ASM1 (Figura 6-18).

Especificamente para amônia, apesar da falta de ajuste do modelo de regressão (Tabela 6-13), o erro calculado via *RMSE* foi próximo de zero e o menor entre as três variáveis (0,65) (Tabela 6-14). Quanto menor o valor da medida *RMSE*, maior a precisão do modelo de regressão em relação aos resultados da simulação com o ASM1 (AHN et al., 2014; BORZOOEI et al., 2019; KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012; NEILL; HASHEMI, 2018).

Portanto, os modelos de regressão gerados para as três variáveis alvo podem ser adotados na estimativa de valores ótimos para calibração dos parâmetros sensíveis do ASM1, aplicados à modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

Figura 6-18 – Erros de previsão da concentração efluente das variáveis alvo. Correlação entre erros estimados pelo modelo de regressão e pela simulação com o ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.



Fonte: autor.

6.7. Estimativa de parâmetros ótimos do ASM1

A partir dos modelos de regressão gerados para cada variável alvo, foi procedida a otimização dos valores dos parâmetros sensíveis do ASM1. A otimização na MSR adotou como alvo o valor zero. Em outras palavras, foram estimados valores ótimos para os parâmetros que, quando aplicados na simulação do processo de lodos ativados da ETE-SJNV, resultarão nos menores erros de previsão possíveis para SST, DQO e NH_3 efluentes, em relação aos registros da estação de tratamento.

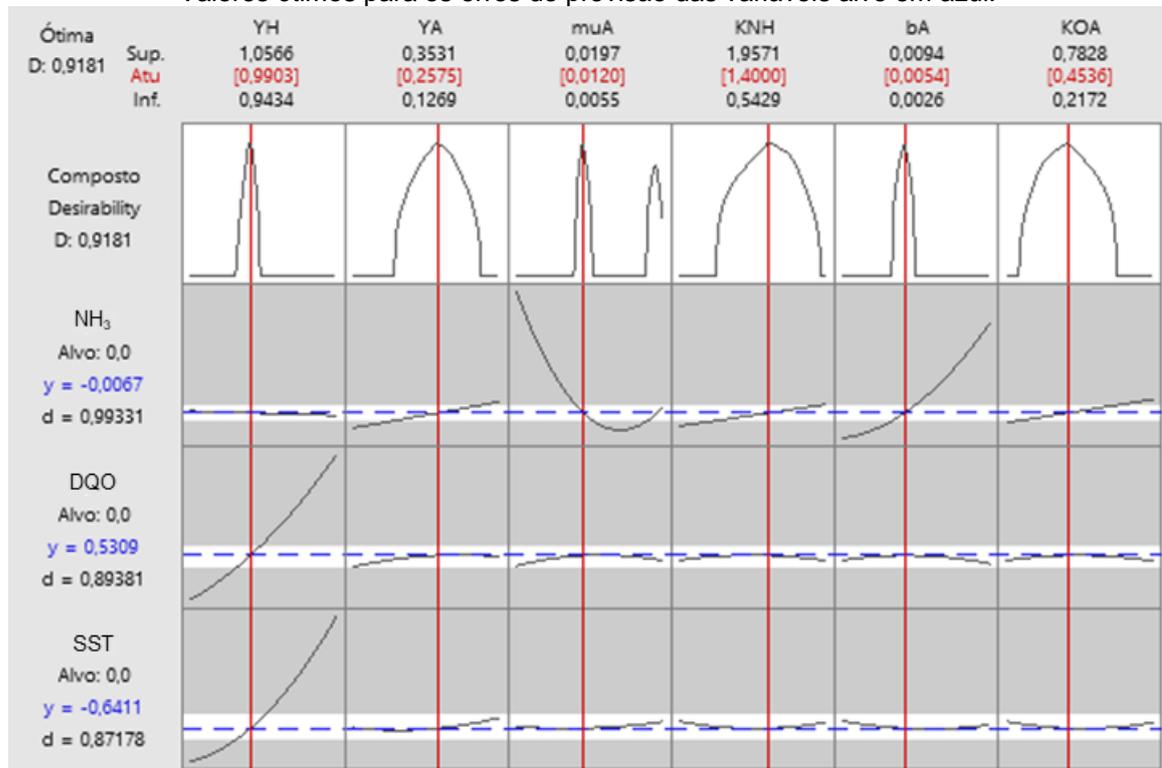
Para cada variável alvo também foi estipulado um limite inferior e um superior, conforme recomendação do guia de modelagem de lodos ativados (RIEGER et al., 2013). Os valores ótimos determinados para os parâmetros sensíveis devem gerar erro de previsão de ± 5 mg/l para SST e DQO e de ± 1 mg/l para NH_3 . Todas as variáveis alvo foram consideradas com peso igual a um na análise de otimização.

A solução da otimização realizada na MSR apresenta os valores ótimos calculados para cada parâmetro sensível do ASM1 (em vermelho) e os valores ótimos calculados para o erro de previsão de cada variável alvo considerada no estudo (em azul) (Figura 6-19). As relações dos parâmetros sensíveis com as variáveis alvo e com a otimização geral (composto *desirability*) também são expostas graficamente na solução de otimização. As linhas verticais vermelhas representam a posição do valor ótimo estimado para o parâmetro sensível em relação à faixa experimental adotada no delineamento das simulações (entre os níveis de teste mínimo e máximo) (Tabela 6-10).

Como analisado nas seções anteriores que descreveram os modelos de regressão para cada variável alvo, as previsões de SST e DQO são afetadas de forma significativa pelo parâmetro estequiométrico de rendimento heterotrófico (Y_H).

O valor ótimo estimado para este parâmetro foi de 0,9903 g DQO formada.(g DQO oxidada)⁻¹, situado entre os níveis de teste mínimo e central adotados (0,98 e 1 - Tabela 6-10) . O valor obtido é maior que o valor superior padrão do ASM1 (0,67) (HENZE et al., 1987) e que valores otimizados em outros estudos, em que o máximo observado foi 0,67 (HAUDUC et al., 2011).

Figura 6-19 – Solução da otimização dos parâmetros sensíveis do ASM1 para a modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Valores ótimos para parâmetros sensíveis em vermelho. Valores ótimos para os erros de previsão das variáveis alvo em azul.



Fonte: autor.

Baptista (2020) adotou valor de 0,45 para Y_H na modelagem do processo de lodos ativados da mesma ETE de estudo. Contudo, o período considerado pela autora (2006-2010) apresentou valores menores no efluente para DQO (43 mg/l) e SST (15 mg/l), comparados às médias obtidas no presente estudo (DQO: 52 mg/l e SST: 30 mg/l) (Tabela 6-4). Essa diferença justifica o ajuste realizado pela autora, que calibrou o ASM1 com um valor de rendimento heterotrófico diferente e inferior ao padrão.

O rendimento heterotrófico é modificado em muitas aplicações de modelagem de lodos ativados e deve ser avaliado para cada tipo de esgoto (HENZE et al., 1987). Portanto, é provável que as características físicas e químicas do esgoto sanitário, incluindo a temperatura, tenham influenciado a previsão inicial de SST e DQO efluente, que resultaram menores que os registros da ETE-SJNV (Tabela 6-9). Logo, o aumento do valor de Y_H pode ter contribuído para a adequação do modelo ASM1 às condições do esgoto no período de calibração (2018) e do processo de tratamento empregado na ETE de estudo.

Inobstante, o valor ótimo calculado no presente estudo para Y_H é relativamente próximo ao valor de 0,9380 definido na otimização realizada por Lim et

al. (2012). Os autores também modelaram um processo de lodos ativados com ASM1, porém com condições físicas (vazão, descarte de lodo e reciclo de lodo) inferiores às registradas na ETE-SJNV, o que explica a definição de um valor ótimo inferior. A faixa experimental testada pelos autores também foi menor, sendo que o valor ótimo determinado no referido estudo correspondeu ao nível de teste superior estabelecido para Y_H pelos autores. Esses resultados reforçam a variabilidade de Y_H e sua relação intrínseca com as características do esgoto afluyente (HAUDUC et al., 2011; HENZE et al., 1987).

De modo geral, tanto para SST como para DQO, maiores valores de Y_H geraram maiores erros positivos, ou seja, previsões das concentrações de SST e DQO maiores que os registros da ETE-SJNV. Menores valores do parâmetro estequiométrico, por sua vez, conduzem à situação contrária (Figura 6-19).

Os demais parâmetros sensíveis do ASM1 avaliados na análise da MSR estão relacionados com as previsões de amônia, com destaque para μ_A e b_A , cujas variações afetaram notavelmente as previsões de NH_3 (Figura 6-19). Os valores ótimos determinados para esses parâmetros foram $0,0120 \text{ h}^{-1}$ (15° C) e $0,0054 \text{ h}^{-1}$ (15° C), respectivamente.

Os valores ótimos estimados para μ_A e b_A convertidos para a unidade padrão do ASM1 são: $0,5 \text{ d}^{-1}$ (20° C) e $0,22 \text{ d}^{-1}$ (20° C). Tratando-se da faixa usual descrita na literatura (Tabela 4-7), o valor ótimo definido para μ_A manteve-se dentro do intervalo comumente usado (0,2-1) e o de b_A foi maior que o valor superior (0,05-0,15).

Os valores ótimos de Y_A ($0,2575 \text{ g DQO formada. (g N oxidada)}^{-1}$) e k_{OA} ($0,4536 \text{ g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$) foram semelhantes aos valores padrão adotados para estes parâmetros no ASM1: 0,24 e 0,4, respectivamente. K_{NH} ($1,4 \text{ g NH}_3\text{-N} \cdot \text{m}^{-3}$), por outro lado, também apresentou valor maior que o superior do intervalo usual (0,75-1) (Tabela 4-7).

Na otimização dos valores (composto *desirability*), o crescimento autotrófico (μ_A) apresentou dois pontos de ótimo: um na região central e outro na região superior da faixa experimental empregada para este parâmetro cinético na análise da MSR (Figura 6-19). O valor obtido no ponto central, contudo, se mostrou mais proeminente e, por isso, foi adotado como ótimo na solução composta. Essa situação está relacionada com a grande importância do μ_A para as previsões de

amônia (PETERSEN et al., 2002) e sua variação e interação significativa com os demais parâmetros ligados aos microrganismos autotróficos (Figura 6-17).

O resultado da função *desirability* composta (D) foi favorável por corresponder a um valor próximo de uma unidade (0,9181). Esse resultado é um indício de que existe um balanço adequado entre as propriedades da otimização. Esse balanço influencia o cálculo dos valores ótimos para os parâmetros sensíveis e a resposta esperada para cada variável alvo (AHN et al., 2014; KIM; RAO; YOO, 2009; LIM et al., 2012).

Particularmente para a amônia, a falta de ajuste do modelo de regressão desta variável (Tabela 6-13) é compensada pelo seu baixo *RMSE* (0,65 - Tabela 6-14) e pelo alto valor da sua função *desirability* ($d=0,9933$ - Figura 6-19). Este resultado aponta que, a combinação dos valores ótimos estabelecidos para os parâmetros sensíveis pode levar à obtenção de um erro de previsão quase nulo para amônia efluente na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV. Especificamente, o erro de previsão de NH_3 é estimado em $-0,0067$ mg/l, sendo o menor estimado entre as três variáveis alvo.

SST e DQO apresentaram valores menores para suas funções *desirability*, em torno de 0,90. Igualmente, consiste em um resultado oportuno para que com a aplicação dos parâmetros sensíveis otimizados seja possível prever concentrações de SST e DQO efluentes aproximadas aos registros da ETE-SJNV. Os erros de previsão estimados para essas variáveis são, respectivamente: $-0,6411$ mg/l e $0,5309$ mg/l.

Os resultados das funções *desirability* de SST, DQO e NH_3 também podem estar relacionados com os limites inferior e superior estabelecidos para cada variável na otimização dos parâmetros sensíveis (RIEGER et al., 2013): ± 5 mg/l para SST e DQO e ± 1 mg/l para NH_3 . Logo, quanto maior o intervalo dos limites (SST e DQO) maior foi o erro estimado, embora satisfatoriamente os erros previstos para as três variáveis se situaram entre ± 1 .

Verificação da otimização

Foi obtido sucesso na verificação da otimização gerada pela MSR. Os valores ótimos dos parâmetros sensíveis foram aplicados em uma simulação de otimização no STOAT© e apresentaram erros de previsão diferentes dos previstos para a MSR

(Figura 6-19), porém dentro dos limites estabelecidos para as três variáveis alvo do estudo (Tabela 6-15).

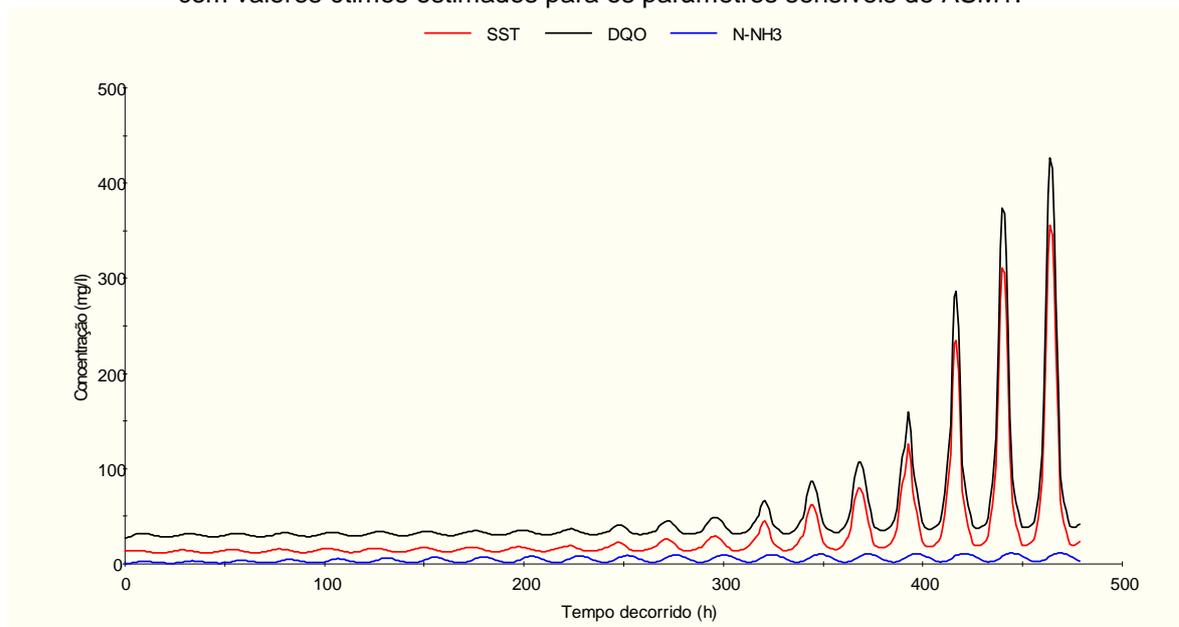
Tabela 6-15 – Erros de previsão (mg/l) obtidos na simulação do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores otimizados para os parâmetros sensíveis do ASM1.

	SST	DQO	NH ₃
Erro de previsão simulação	1,00 (20%)	-1,14 (23%)	-0,14 (3%)
Erro de previsão MSR ^a	-0,64 (13%)	0,53 (11%)	0 (0%)
Limite de erro ^b	±5	±5	±1

Fonte: autor. (a) Figura 6-19. (b) Conforme Rieger et al. (2013). (Percentual em relação aos limites de erro).

Apesar dos baixos erros de previsão, foram observadas altas oscilações de SST e DQO efluentes no final do período de 20 dias da simulação de otimização. Essas oscilações acontecem sobre a concentração máxima atingida por estas variáveis (Figura 6-20).

Figura 6-20 – Resultado da simulação de calibração do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores ótimos estimados para os parâmetros sensíveis do ASM1.



Fonte: autor.

Esse efeito no final da simulação de otimização também foi observado durante as simulações de calibração (**Apêndice 3**), quando foi adotado o nível de teste superior para Y_H (1,02). Portanto, o valor ótimo calculado para este parâmetro (0,9903) certamente aumentaria o erro de previsão das variáveis SST e DQO em simulações com período superior a 20 dias.

As altas oscilações podem ser explicadas pela grande influência que Y_H exerce sobre a concentração de biomassa no processo de tratamento. Valores menores para esse parâmetro seriam ideais para representar pequeno crescimento

de microrganismos no tanque de aeração e alto gasto de energia no seu metabolismo. Essas condições levariam a uma redução nas concentrações de SST e DQO efluentes (LEVY, 2007). Contudo, o valor padrão de Y_H (0,67) gerou altos erros de previsão negativos para SST (-17 mg/l) e DQO (-24 mg/l) na modelagem da ETE-SJNV (Tabela 6-9).

Dessa forma, outros fatores podem justificar as altas oscilações no final da simulação de otimização. Por exemplo, as condições operacionais adotadas para reciclo e descarte do lodo ativado, bem como a idade do lodo estimada. Essas condições foram calculadas considerando os dados médios observados pela ETE-SJNV (Tabela 6-1 e Equação 6-1).

Em um estudo que aplicou a modelagem na ETE-SJNV foi observado estabilização das variáveis SST, DQO e NH_3 durante as simulações estáticas (BAPTISTA, 2020). No presente estudo, as condições de simulação estática e simulação com amplitude de 30% não se mostraram diferentes (Figura 6-11). Então, outras especificidades adotadas por Baptista (2020) podem explicar a diferença em relação aos resultados encontrados neste estudo. A autora adotou a metade do período de simulação (10 dias) e condições diferentes de descarte do lodo ativado (método de descarte constante com vazão inferior – 3,7 m³/h menor).

Na presente pesquisa também foi observado que durante 10 dias de simulação as concentrações efluentes de SST, DQO e NH_3 mantiveram-se estáveis (240 h - Figura 6-20). Logo, o método de descarte de lodo ativado empregado na modelagem pode ter afetado as previsões a partir dos 10 dias iniciais de simulação.

O referido método visa manter um valor estabelecido para a concentração de sólidos do liquor misto (3.000 mg/l). Nesse sentido, a vazão de descarte foi fixada (5,49 m³/h), enquanto o tempo de bombeamento de descarte variou de zero horas até oito horas (Tabela 6-6). Todos esses dados – sólidos no liquor misto, vazão de descarte e tempo de bombeamento – consistem em médias observadas pela equipe de operação da ETE-SJNV.

Portanto, ajustes no método de descarte do lodo ativado poderiam contribuir para regular as oscilações de SST e DQO efluentes no final da simulação, visando a estabilização das previsões para simulações com período superior a 10 dias. Trabalhos futuros podem avaliar a influência do tempo de simulação adotado na modelagem sobre a variação nas previsões das variáveis alvo.

Não obstante, tratando-se das médias como medidas das variáveis alvo consideradas na modelagem, o modelo ASM1 pode ser considerado calibrado, a partir dos valores ótimos determinados para os parâmetros sensíveis, e apto para previsões de SST, DQO e NH₃ efluentes, com ressalvas para o período adotado na simulação.

6.8. Validação do modelo ASM1

A validação consiste na simulação do processo de lodos ativados adotando os mesmos valores dos parâmetros dos modelos (ASM1 e *Version 3*), porém com dados de esgoto afluente de um período diferente. No presente estudo, para a validação foram usados os dados médios de caracterização do esgoto referentes aos registros realizados em 2019 na ETE-SJNV (Tabela 6-8).

A etapa de validação pode ser requerida dependendo dos objetivos da modelagem do processo de tratamento de esgoto. Por exemplo, para testar diferentes condições climáticas e realizações de simulações dinâmicas (RIEGER et al., 2013). A validação realizada nesse trabalho, por sua vez, teve o intuito de testar o efeito dos valores ótimos estimados para os parâmetros sensíveis identificados para o ASM1, sobre esgoto com características de outro período, portanto, com relativa diferença em termos de concentração de SST, DQO e NH₃ afluente.

Os resultados da simulação de validação com parâmetros ótimos apresentaram erro quase nulo para as previsões de amônia efluente, mas grande diferença nas previsões das outras duas variáveis alvo da modelagem: SST=+93 mg/l de erro e DQO=+96 mg/l de erro. Os resultados gerais das simulações deste estudo estão apresentados na Tabela 6-16.

Tabela 6-16 – Concentrações (mg/l) reais e simuladas médias das variáveis alvo da modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

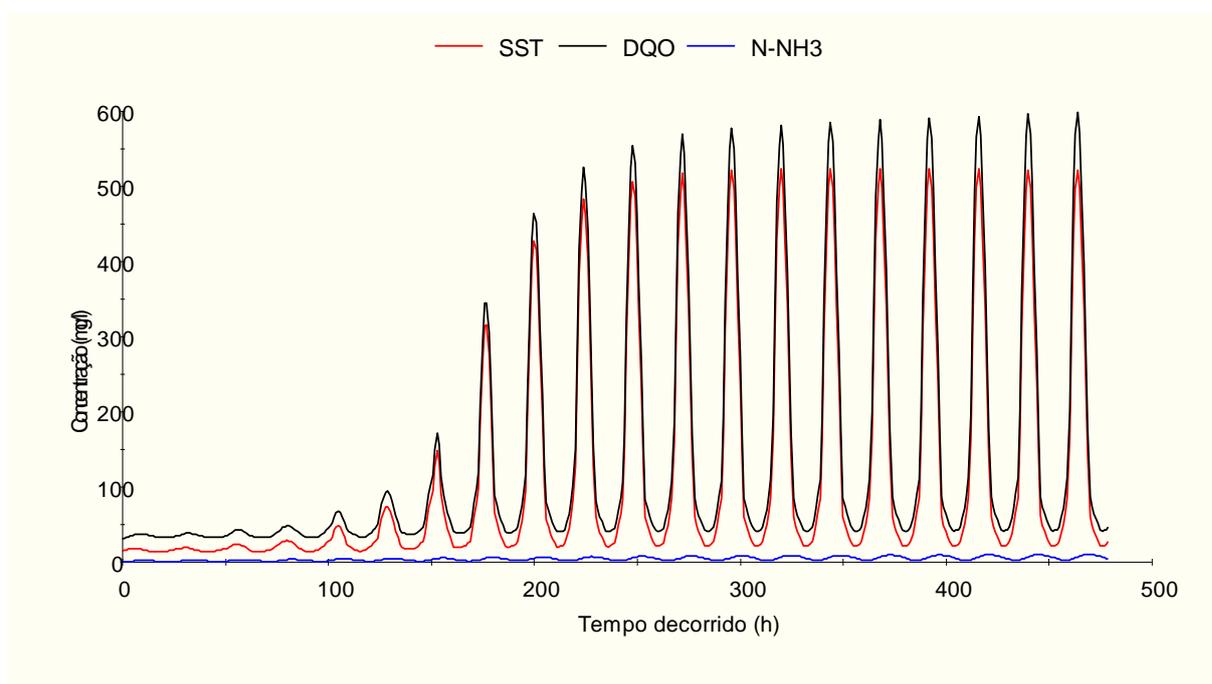
	SST	DQO	NH ₃
Registrado/real (2018) ^a	30	52	4,39
Simulação padrão ^b	13	28	0,5
Simulação de calibração (parâmetros otimizados)	31	51	4,25
Registrado/real (2019) ^a	21	45	3,7
Simulação de validação (parâmetros otimizados)	114	141	3,8

Fonte: autor. (a) Tabela 6-4. (b) Adotados valores padrões para os parâmetros do ASM1 (Tabela 4-7).

Não obstante, na validação também foi observado o mesmo efeito de altas oscilações sobre as concentrações efluentes máximas de SST e DQO durante a simulação (Figura 6-21). Nesta simulação, no entanto, os picos iniciam-se em torno

de quatro dias de simulação e assumem um comportamento estável até o final de 20 dias de simulação. Dado que na validação foram alteradas apenas as características do esgoto afluente, entende-se que os mesmos fatores abordados na etapa de verificação da otimização, relacionados ao método de descarte do lodo ativado e tempo de simulação, podem explicar as altas oscilações.

Figura 6-21 – Resultado da simulação de validação do processo de lodos ativados da ETE-SJNV com valores ótimos estimados para os parâmetros sensíveis do ASM1.



Fonte: autor.

Esses resultados corroboram outros estudos, reforçando a aplicabilidade de dados de monitoramento padrão de ETEs à modelagem em padrão estático e à calibração do ASM1 voltados à simulação do processo de lodos ativados (ANDRAKA et al., 2018; BAPTISTA, 2020; DEBIASI, 2012).

É válido ressaltar que na simulação padrão, em que foram adotados os valores originais dos parâmetros estequiométricos e cinéticos do ASM1, amônia foi a variável que apresentou previsão com a maior diferença em relação aos dados reais da ETE (em torno de 89% menor).

Na análise de sensibilidade, cinco dos seis parâmetros identificados como sensíveis apresentaram efeito sobre NH_3 : Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA} . Estes constituem parâmetros relacionados aos microrganismos autotróficos, conteúdo de nitrogênio e especificamente à amônia (K_{NH}). Os valores ótimos estimados para esses cinco

parâmetros foram aplicáveis tanto para a calibração como para a validação do ASM1, resultando em previsões de amônia com erros inferiores a 1 mg/l, os menores erros obtidos no estudo.

Por outro lado, os grandes erros obtidos nas previsões de SST e DQO efluentes na simulação de validação estão ligados ao aumento do rendimento heterotrófico (Y_H) pela otimização com MSR, em relação a valor padrão do parâmetro.

Uma explicação para a não adequação do valor ótimo estimado para Y_H na validação do ASM1 pode estar relacionada à faixa experimental de teste adotada para este parâmetro (Tabela 6-10). Ela pode não ter contemplado o domínio experimental desse fator (NAIR; MAKWANA; AHAMMED, 2014), embora os modelos de regressão para SST e DQO tenham indicado região de mínimo erro de previsão para as referidas variáveis para o valor de Y_H próximo à unidade (Figura 6-14 e Figura 6-15). De qualquer forma, nova faixa experimental pode ser avaliada em combinação com as faixas estabelecidas para os demais parâmetros identificados como sensíveis.

Outra explicação para a discrepância gerada em função do aumento de Y_H , consiste nas diferenças obtidas para as concentrações efluentes de SST e DQO, entre os anos de 2018 (calibração) e 2019 (validação). O primeiro ano apresentou valores de concentração maiores para SST e DQO (9 e 7 mg/l maiores, respectivamente) (Tabela 6-4 e Figura 6-8), requerendo incremento no rendimento heterotrófico, de modo a reduzir os erros de previsão dessas duas variáveis. A concentração de amônia efluente também foi maior em 2018, porém com menor diferença em relação a 2019 (0,7 mg/l maior).

O aumento no valor de Y_H eleva a eficiência de transformação da DQO, determinando a concentração de biomassa no reator e afetando de forma substancial as taxas de crescimento microbiano, portanto, a produção de lodo (CHEN et al., 2020; LEVY, 2007; PETERSEN et al., 2002). Sendo assim, ajustes no método de descarte de lodo podem ser os principais fatores a auxiliar na obtenção de um valor ótimo para o rendimento heterotrófico, que seja adequado para calibração e validação do modelo ASM1, reduzindo os erros de previsão de SST e DQO nas condições de modelagem do presente estudo.

Finalmente, ressalta-se que a sensibilidade de Y_H é destacada em muitas pesquisas de otimização de parâmetros do ASM1 (HAUDUC et al., 2011), sendo importante definir seu valor para cada tipo de esgoto (HENZE et al., 1987). Os resultados de validação do ASM1 no presente estudo, por conseguinte, reforçam a atenção que deve ser direcionada à calibração deste parâmetro.

Não obstante, a diferença entre os resultados da simulação padrão e simulação com parâmetros otimizados é alta e reforça que a maior parte dos coeficientes de um modelo, especialmente cinéticos, variam de acordo com as características do esgoto afluente em relação ao espaço e ao tempo (VON SPERLING; VERBYLA; OLIVEIRA, 2020, p. 600).

Cada estação de tratamento deve ser modelada assumindo condições específicas e relacionadas a sua realidade e aos seus desafios (BORZOOEI et al., 2019). Particularmente no Brasil e em região de clima subtropical, aplicações de calibração e otimização de parâmetros do modelo ASM1 na simulação com STOAT são necessárias, uma vez que a maior parte desse tipo de prática foi feito na Europa, América do Norte e Ásia (HAUDUC et al., 2011) e o STOAT é amplamente usado em clima temperado (SARKAR et al., 2010).

Dessa forma, os parâmetros otimizados no presente estudo, principalmente Y_A , μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA} cujos valores ótimos foram adequados na calibração e validação do ASM1 para previsão de NH_3 efluente, são base para explorar aplicações do ASM1 na modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

O objetivo geral do presente estudo consistiu em oferecer uma configuração de parâmetros cinéticos e estequiométricos ótimos do modelo ASM1 para a modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical.

O tratamento de registros ausentes, censurados e *outliers* do monitoramento padrão de ETE contribui para o cálculo de medidas representativas do processo de tratamento existente na estação. O comparativo das medidas obtidas no presente estudo com as de outras pesquisas confirmou a variação que pode ocorrer na composição do esgoto bruto e no desempenho do processo de lodos ativados ao longo do tempo. Em decorrência disso, notou-se a importância de ampliar a quantidade de registros para SST e reforçar o monitoramento deste parâmetro e de DBO na ETE de estudo. Estas variáveis apresentaram concentrações superiores aos limites da legislação ambiental para o período de monitoramento analisado.

Nesse sentido, recomenda-se diretamente à ETE-SJNV a adoção do monitoramento com amostradores automáticos, visando a coleta de amostras compostas do afluente e efluente. Essa intervenção contribuiria para aumentar a qualidade das amostras de dados que podem ser aplicados na modelagem da estação.

A partir da utilização do modelo ASM1, do simulador STOAT© e de dados médios de monitoramento padrão foi possível modelar o processo de lodos ativados de ETE de grande porte existente em região de clima subtropical no Brasil.

As relações teóricas de fracionamento de DQO, SST e nitrogênio e o padrão sinusoidal com amplitude de 30% adotados no perfil do esgoto afluente podem ser suficientes para alimentação do modelo ASM1. Esse valor de amplitude pode gerar previsões aproximadas aos resultados adotando padrão de simulação constante.

Foram obtidos altos erros de previsão para as variáveis alvo na simulação inicial do estudo: SST= -57,47% de variação; DQO= -45,52%; e NH₃= -88,61%. Essas diferenças podem estar relacionadas com a qualidade do monitoramento do processo de lodos ativados, bem como com a região de estudo e, portanto, a temperatura do esgoto. Tudo isso ressalta a importância da calibração do ASM1 para a modelagem de cada estação, reconhecendo sua realidade específica.

Para a calibração sistemática do ASM1, os parâmetros cinéticos e estequiométricos do modelo foram avaliados e otimizados com a aplicação da análise de sensibilidade e da Metodologia de Superfície de Resposta (MSR).

A análise de sensibilidade do ASM1 requereu 20 simulações, sendo considerada rápida e eficaz para identificar parâmetros cinéticos e estequiométricos sensíveis para calibração do modelo. Essa técnica é, portanto, uma alternativa à calibração de modelos ASM pelo método conhecido como “tentativa e erro”.

Foram identificados seis parâmetros sensíveis para o modelo ASM1. Dois parâmetros estequiométricos – Y_H , Y_A , – e quatro cinéticos – μ_A , K_{NH} , b_A e k_{OA} . As concentrações efluentes de SST e DQO foram afetadas principalmente por Y_H , enquanto os demais parâmetros sensíveis afetaram as previsões de NH_3 efluente.

A MSR, por sua vez, pode indicar com maior precisão os efeitos das variações e interações dos parâmetros sensíveis do modelo ASM1 sobre as previsões das variáveis alvo. As previsões dos modelos de regressão gerados pela MSR estavam fortemente correlacionadas com as previsões da simulação no STOAT© ($R^2 > 97\%$). Os valores ótimos estimados pelos modelos de regressão para os parâmetros cinéticos e estequiométricos sensíveis foram: $Y_H = 0,9903$; $Y_A = 0,2575$; $\mu_A = 0,012$ ($h^{-1} - 15^\circ C$); $K_{NH} = 1,4$; $b_A = 0,0054$ ($h^{-1} - 15^\circ C$); e $k_{OA} = 0,4536$.

Os parâmetros otimizados foram aplicados na calibração do ASM1 e geraram previsões de concentração efluente média com erros quase nulos para SST, DQO e NH_3 , em relação aos dados registrados na ETE de estudo. Na validação foi obtido erro praticamente nulo para previsão de NH_3 , mas grande diferença para as previsões de SST e DQO efluentes. Os altos erros de previsão de SST e DQO estão relacionados ao aumento de Y_H pela otimização dos parâmetros sensíveis. Portanto, ressalta-se a sensibilidade de Y_H na modelagem com ASM1.

Os resultados da calibração realizada no presente estudo oferecem uma configuração de parâmetros cinéticos e estequiométricos ótimos do ASM1, que constituem base para a modelagem utilizando dados de monitoramento padrão de ETE de grande porte situada no Brasil em região de clima subtropical.

Limitações e recomendações

A quantidade e qualidade do monitoramento realizado pela ETE, bem como as relações teóricas adotadas no fracionamento do afluente restringem a aplicação

dos parâmetros otimizados. Inobstante, fatores como o padrão de simulação (sinusoidal, constante), características da modelagem (amplitude e método de descarte do lodo ativado) e período de simulação merecem atenção.

O valor otimizado para Y_H precisa ser reavaliado levando em consideração testes com uma nova faixa experimental para este parâmetro e/ou ajustes no método de descarte do lodo.

O modelo ASM1 pode ser submetido a mesma calibração sistemática, considerando o fracionamento da composição do esgoto afluente a partir de análises laboratoriais. Os resultados dessas análises ainda podem ser úteis na avaliação das relações teóricas para fracionamento existentes na literatura.

É proposto também o mesmo método de calibração sistemática no sentido inverso: dados médios usados na validação (2019) para calibração e na calibração (2018) para validação.

Simulações de possíveis cenários do processo de lodos ativados da ETE de estudo adotando os parâmetros otimizados podem ser realizadas pelo próprio corpo técnico da estação, visando gerar prognósticos e diagnósticos do processo de tratamento e promover a formação e capacitação dos operadores.

Os parâmetros ótimos e os mesmos critérios de calibração do ASM1 ainda podem ser experimentados na modelagem do processo de lodos ativados de outras ETEs, com características e composição de esgoto afluente similares às da ETE da presente pesquisa. Pode-se, inclusive, testar a simulação com padrão dinâmico utilizando os parâmetros otimizados.

Recomenda-se pesquisas sobre o efeito do tempo de simulação (> 10 dias) na modelagem do processo de lodos ativados da ETE de estudo, adotando os valores ótimos estimados para os parâmetros cinéticos e estequiométricos do ASM1. O mesmo efeito pode ser avaliado na modelagem de outras ETEs com os parâmetros ótimos estimados e características de simulação similares.

Associado ao efeito do tempo de simulação, é igualmente importante testar o efeito de diferentes métodos de reciclo e descarte de lodo ativado na modelagem da ETE-SJNV adotando os parâmetros otimizados. Além disso, uma avaliação e otimização de parâmetros do modelo *Version 3* e demais parâmetros operacionais do processo de lodos ativados podem contribuir para verificar o efeito desses parâmetros sobre a previsão e a remoção de SST, DQO e NH_3 .

REFERÊNCIAS

AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS. **Situação da Coleta e do tratamento de esgotos**. Atlas Esgotos – Despoluição das Bacias Hidrográficas. 2017. Disponível em: <<http://atlasesgotos.ana.gov.br/>>. Acesso em: 31 mai. 2021.

_____. **Atlas Esgotos** - Atualização da Base de Dados de Estações de Tratamento de Esgotos no Brasil. Brasília. 2020. Disponível em: <https://www.snirh.gov.br/portal/centrais-de-conteudos/central-de-publicacoes/encarteatlasesgotos_etes.pdf/view>. Acesso em: 31 mai. 2021.

AHN, J. Y.; CHU, K. H.; YOO, S. S.; MANG, J. S.; SUNG, B. W.; KO, K. B. Determination of optimal operating factors via modeling for livestock wastewater treatment: Comparison of simulated and experimental data. **International Biodeterioration and Biodegradation**, v. 95, n. PA, p. 46–54, 2014. <https://doi.org/10.1016/j.ibiod.2014.04.014>

ANDRAKA, D.; PISZCZATOWSKA, I. K.; DAWIDOWICZ, J.; KRUSZYNSKI, W. Calibration of activated sludge model with scarce data sets. **Journal of Ecological Engineering**, v. 19, n. 6, p. 182–190, 2018. <https://doi.org/10.12911/22998993/93793>

ANDREOLI, C. V.; VON SPERLING, M.; FERNANDES, F. Sludge Treatment and Disposal. *In*: **Biological Wastewater Treatment**. Londres: IWA Publishing, 2007. vol. 6.

BAPTISTA, M. T. **Avaliação dos modelos matemáticos ASM1 e ASM3 calibrados com dados de monitoramento padrão de um sistema de lodos ativados**. 2020. Dissertação (Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental) – Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2020. 96 f.

BARROSO JÚNIOR, J. C. A. **Avaliação de lagoas de tratamento com presença de macrófitas flutuantes e microalgas aplicadas ao pós-tratamento de esgoto sanitário em condições de clima subtropical**. 2020. Tese (Doutorado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental) – Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2020. 165 f.

BEZERRA, M. A.; SANTELLI, R. E.; OLIVEIRA, E. P.; VILLAR, L. S.; ESCALEIRA, L. A. Response surface methodology (RSM) as a tool for optimization in analytical chemistry. **Talanta**, v. 76, n. 5, p. 965–977, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2008.05.019>

BORZOOEI, S.; AMERLINCK, Y.; ABOLFATHI, S.; PANEPINTO, D.; NOPENS, I.; LORENZI, E.; MEUCCI, L.; ZANETTI, M. C. Data scarcity in modelling and simulation of a large-scale WWTP: Stop sign or a challenge. **Journal of Water Process Engineering**, v. 28, p. 10–20, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2018.12.010>

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Resolução CONAMA N° 430/2011**. Dispõe

sobre condições e padrões de lançamento de efluentes, complementa e altera a Resolução no 357, de 17 de março de 2005, do Conselho Nacional do Meio Ambiente - CONAMA. Brasília, Ministério do Meio Ambiente, 2011. Disponível em: <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=646>>. Acesso em: 25 fev. 2021.

CHEN, W.; DAI, H.; HAN, T.; WANG, X.; LU, X.; YAO, C. Mathematical modeling and modification of a cycle operating activated sludge process via the multi-objective optimization method. **Journal of Environmental Chemical Engineering**, v. 8, n. 6, p. 104470, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104470>

DE SOUZA, C. C. **Simulação da operação de uma Estação de Tratamento de Esgotos por lodos ativados com o modelo IWA-ASM3 (Activated Sludge Model N.3) a partir de dados de monitoramento**. 2021. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo, 2021. 235 f.

DEBIASI, R. **Aplicação do modelo ASM1 em uma ETE de lodos ativados**. 2012. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental) – Centro Tecnológico, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2012. 113 f.

DUDLEY, J. W. O.; BRYAN, D. A.; CHAMBERS, B. **STOAT - Development and application of a fully dynamic sewage treatment works model**. WRc plc: Swindon, UK. 1994. 17 f.

EKAMA, G. A.; TAKÁCS, I. Modelling. *In*: JENKINS, D.; WANNER, J. (Eds.). **Activated Sludge: - 100 years and counting**. Londres: IWA Publishing, 2014. cap. 14, p. 271–291.

EPA - UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. **Data Quality Assessment: Statistical Methods for Practitioners**. Washington, DC: U.S. Environmental Protection Agency, 2006. 190 p.

FORTELA, D. L. B.; FARMER, K.; ZAPPI, A.; SHARP, W. W.; REVELLAME, E.; GANG, D.; ZAPPI, M. A Methodology for Global Sensitivity Analysis of Activated Sludge Models: Case Study with Activated Sludge Model No. 3 (ASM 3). **Water Environment Research**, v. 91, p. 865-876, 2019. <https://doi.org/10.1002/wer.1127>

GERNAEY, K. V.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M.; HENZE, M.; LIND, M.; JØRGENSEN, S. B. Activated sludge wastewater treatment plant modelling and simulation: State of the art. **Environmental Modelling and Software**, v. 19, n. 9, p. 763–783, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2003.03.005>

HAUDUC, H.; RIEGER, L.; OEHMEN, A.; VAN LOOSDRECHT, M.C.M.; COMEAU, Y.; HÉDUIT, A.; VANROLLEGHEM, P.A.; GILLOT, S. Critical review of activated sludge modeling: State of process knowledge, modeling concepts, and limitations. **Biotechnology and Bioengineering**, v. 110, n. 1, p. 24–46, 2013. <https://doi.org/10.1002/bit.24624>

HAUDUC, H.; RIEGER, L.; OHTSUKI, T.; SHAW, A.; TAKÁCS, I.; WINKLER, S.; HÉDUIT, A.; VANROLLEGHEM, P. A.; GILLOT, S. Activated sludge modelling: Development and potential use of a practical applications database. **Water Science and Technology**, v. 63, n. 10, p. 2164–2182, 2011. <https://doi.org/10.2166/wst.2011.368>

HELTON, J.C.; DAVIS, F.J. Latin hypercube sampling and the propagation of uncertainty in analyses of complex systems. **Reliability Engineering & System Safety**, v. 81, n. 1, p. 23-69, 2003. [https://doi.org/10.1016/S0951-8320\(03\)00058-9](https://doi.org/10.1016/S0951-8320(03)00058-9)

HENZE, C.; GRADY Jr, C. P. L.; GUJER, W.; MARAIS, G. V. R.; MATSUO, T. **Activated Sludge Model No1**. Londres: International Association on Water Pollution Research and Control, 1987. 33 f.

HENZE, M.; COMEAU, Y. Wastewater Characterisation. *In*: HENZE, M.; VAN LOOSDRECHT, M.C.M.; EKAMA, G.A.; BRDJANOVIC, D. (Eds.). **Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design**. Londres: IWA Publishing, 2008. v. 7, cap. 3, p. 33–52.

HERNEBRING, C.; MARK, O.; OHLSSON, L. Dynamic Pollutant Modelling in Halmstad Sewer System as an Input to a WWTP model and CSO Regulation. *In*: 3RD DHI SOFTWARE CONFERENCE 1999, 8 p. Dinamarca. **Anais...** Dinamarca.

HULSBEEK, J. J. W.; KRUIT, J.; ROELEVELD, P. J.; VAN LOOSDRECHT, M. C.M. A practical protocol for dynamic modelling of activated sludge systems. **Water Science and Technology**, v. 45, n. 6, p. 127–136, 2002. <https://doi.org/10.2166/wst.2002.0100>

JENKINS, D.; WANNER, J. **Activated Sludge: 100 years and counting**. Londres: IWA Publishing, 2014. 424p.

JORDÃO, E. P.; PESSÔA, C. A. **Tratamento de Esgotos Domésticos**. 8a ed. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental, 2017. 916p.

KIM, J. R.; KO, J. H.; LEE, J. J.; KIM, S. H.; PARK, T. J.; KIM, C. W.; WOO, H. J. Parameter sensitivity analysis for activated sludge models No. 1 and 3 combined with one-dimensional settling model. **Water Science and Technology**, v. 53, n. 1, p. 129–138, 2006. <https://doi.org/10.2166/wst.2006.015>

KIM, M.; RAO, A. S.; YOO, C. Dual optimization strategy for n and p removal in a biological wastewater treatment plant. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 48, n. 13, p. 6363–6371, 2009. <https://doi.org/10.1021/ie801689t>

LANGERGRABER, G.; RIEGER, L.; WINKLER, S.; ALEX, J.; WIESE, J.; OWERDIECK, C.; AHNERT, M.; SIMON, J.; MAURER, M. A guideline for simulation studies of wastewater treatment plants. **Water Science and Technology**, v. 50, n. 7, p. 131–138, 2004. <https://doi.org/10.2166/wst.2004.0436>

LEVY, A. L. L. **Modelagem e análise de sensibilidade do processo de tratamento de lodo ativado com reciclo**. 2007. Dissertação (Mestrado em Ciências em

Engenharia Química), Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007. 140 f.

LI, J.; MA, C.; MA, Y.; LI, Y.; ZHOU, W.; XU, P. Medium optimization by combination of response surface methodology and desirability function: An application in glutamine production. **Applied Microbiology and Biotechnology**, v. 74, n. 3, p. 563–571, 2007. <https://doi.org/10.1007/s00253-006-0699-5>

LIM, J. J.; KIM, M. H.; KIM, M. J.; OH, T. S.; KANG, O. Y.; MIN, B.; RAO, A. S.; YOO, C. K. A systematic model calibration methodology based on multiple errors minimization method for the optimal parameter estimation of ASM1. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 29, n. 3, p. 291–303, 2012. <https://doi.org/10.1007/s11814-011-0178-2>

LIWARSKA-BIZUKOJC, E.; OLEJNIK, D.; BIERNACKI, R.; LEDAKOWICZ, S. Calibration of a complex activated sludge model for the full-scale wastewater treatment plant. **Bioprocess and Biosystems Engineering**, v. 34, n. 6, p. 659–670, 2011. <https://doi.org/10.1007/s00449-011-0515-1>

LOFRANO, G.; BROWN, J. Wastewater management through the ages: A history of mankind. **Science of the Total Environment**, v. 408, n. 22, p. 5254–5264, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2010.07.062>

MASSART, D. L.; VANDEGINSTE, B. G. M.; BUYDENS, L. M. C.; DE JONG, S.; LEWI, P. J.; SMEYERS-VERBEKE, J. Handbook of chemometrics and qualimetrics: part A. *In: Data Handling in Science and Technology*. Holanda: Elsevier, 1998. ed. 20A, p. 1–867.

MELCER, H. **Methods for wastewater characterization in activated sludge modelling**. Londres: IWA Publishing, 2004.

MINITAB, LLC. **Minitab® Statistical Software**. Versão 20.2. State College, 2021.

MU'AZU, N. D.; ALAGHA, O.; ANIL, I. Systematic Modeling of Municipal Wastewater Activated Sludge Process and Treatment Plant Capacity Analysis Using GPS-X. **Sustainability**, v. 12, n. 8182, 2020. <http://dx.doi.org/10.3390/su12198182>

NAIR, A. T.; AHAMMED, M. M. The reuse of water treatment sludge as a coagulant for post-treatment of UASB reactor treating urban wastewater. **Journal of Cleaner Production**, v. 96, p. 272–281, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2013.12.037>

NAIR, A. T.; MAKWANA, A. R.; AHAMMED, M. M. The use of response surface methodology for modelling and analysis of water and wastewater treatment processes: a review. **Water Science and Technology**, v. 69, n. 3, p. 464–478, 2014. <https://doi.org/10.2166/wst.2013.733>

NEILL, S. P.; HASHEMI, M. R. Ocean Modelling for Resource Characterization. *In: Fundamentals of Ocean Renewable Energy*. Elsevier, 2018. cap. 8, p. 193–235.

OLSSON, G.; YUAN, Z.; KIM, C. Automation and control. *In: JENKINS, D.;*

WANNER, J. (Eds.). **Activated Sludge**: - 100 years and counting. Londres: IWA Publishing, 2014. cap. 13, p. 245–269.

PETERSEN, B.; GERNAEY, K.; HENZE, M.; VANROLLEGHEM, P. A. Calibration of Activated Sludge Models: A Critical Review of Experimental Designs. *In*: AGATHOS, S. N.; REINEKE, W. (Eds.). **Biotechnology for the Environment**: Wastewater Treatment and Modeling, Waste Gas Handling. Dordrecht: Springer, 2003. ed. 3C, p. 101–186. https://doi.org/10.1007/978-94-017-0932-3_5

_____. Evaluation of an ASM1 model calibration procedure on a municipal-industrial wastewater treatment plant. **Journal of Hydroinformatics**, v. 4, n. 1, p. 15–38, 2002. <https://doi.org/10.2166/hydro.2002.0003>

PISTORELLO, J. **Simulação do co-tratamento de resíduo de tanque séptico em Estação de Tratamento de Esgoto Doméstico**. 2018. Dissertação (Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental) – Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2018. 123f.

PREFEITURA MUNICIPAL DE PORTO ALEGRE. **Plano Municipal de Saneamento Básico**: Volume 1 – Diagnóstico. Porto Alegre: Prefeitura Municipal de Porto Alegre, 2015. Disponível em: http://lproweb.procempa.com.br/pmpa/prefpoa/dmae/usu_doc/01_pmsb_diagnostico_web.pdf>. Acesso em 10 fev. 2020.

RIEGER, L.; GILLOT, S.; LANGERGRABER, G.; OHTSUKI, T.; SHAW, A.; TAKÁCS, I.; WINKLER, S. **Guidelines for Using Activated Sludge Models**. Londres: IWA Publishing, 2013. 281 f. Disponível em: <https://www.iwapublishing.com/books/9781843391746/guidelines-using-activated-sludge-models>>. Acesso em: 25 nov. 2020.

RIO GRANDE DO SUL. Secretaria do Ambiente e Desenvolvimento Sustentável. **Resolução CONSEMA n° 355/2017**. Dispõe sobre os critérios e padrões de emissão de efluentes líquidos para as fontes geradoras que lancem seus efluentes em águas superficiais no Estado do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, RS: SEMA - Conselho Estadual do Meio Ambiente, 2017. Disponível em: <https://www.sema.rs.gov.br/upload/arquivos/201707/19110149-355-2017-criterios-e-padroes-de-emissao-de-efluentes-liquidos.pdf>>. Acesso em: 20 nov. 2019.

_____. **Resolução CONSEMA n° 379/2018**. Altera a Resolução 372/2018 que dispõe sobre os empreendimentos e atividades utilizadores de recursos ambientais, efetiva ou potencialmente poluidores ou capazes, sob qualquer forma, de causar degradação ambiental, passíveis de licenciamento ambiental no Estado do Rio Grande do Sul, destacando os de impacto de âmbito local para o exercício da competência municipal no licenciamento ambiental. Porto Alegre, RS: SEMA - Conselho Estadual do Meio Ambiente, 2018. Disponível em: <https://sema-admin.rs.gov.br/upload/arquivos/201808/22104415-379-2018-altera-a-resolucao-372-2018-codrams-glossario-e-anexo-iii.pdf>>. Acesso em: 22 jun. 2021.

RÖSSLE, W. H.; PRETORIUS, W. A. A review of characterisation requirements for in-line fermenters paper 1: Wastewater characterisation. **Water SA**, v. 27, n. 3, p.

405–412, 2001. <https://doi.org/10.4314/wsa.v27i3.4985>

SALLES, N. A.; DE SOUZA, T. S. O. Aplicabilidade do Activated Sludge Model No. 1 (ASM 1) para simulação do cotratamento de esgoto sanitário e lixiviado de aterro sanitário em lagoas aeradas. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 25, n. 2, p. 293–301, 2020. <https://doi.org/10.1590/S1413-41522020188723>

SARKAR, U.; DASGUPTA, D.; BHATTACHARYA, T.; PAL, S.; CHAKROBORTY, T. Dynamic simulation of activated sludge based wastewater treatment processes: Case studies with Titagarh Sewage Treatment Plant, India. **Desalination**, v. 252, n. 1–3, p. 120–126, 2010. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2009.10.014>

SHINGO, K. Y.; DE OLIVEIRA, R. M. S.; BOLONHESI, I. B. T. M.; DE MORAIS, T. A.; GUELBERT, T. F. Aplicação do software WRc STOAT em Estação de Tratamento de Águas Residuárias de Indústria de Laticínios. *In*: DA ROSA, C. F.; DALLAMUTA, J. (Eds.). **A Interface Essencial da Engenharia de Produção no Mundo Corporativo 3**. Ponta Grossa (PR): Atena Editora, 2019. ed. 3, cap. 13, p. 154–166.

SIN, G.; GERNAEY, K. V.; NEUMANN, M.B.; VAN LOOSDRECHT, M. C. M.; GUJER, W. Global sensitivity analysis in wastewater treatment plant model applications: Prioritizing sources of uncertainty. **Water Research**, v. 45, p. 639–651, 2011. <http://dx.doi.org/10.1016/j.watres.2010.08.025>

SMITH, M.; DUDLEY, J. W. O. Dynamic process modelling of activated sludge plants. *In*: CIWEM INTERNATIONAL CONFERENCE IN “ACTIVATED SLUDGE INTO THE 21ST CENTURY”. 1997, Manchester. **Anais...** Manchester.

STENSEL, H. D.; MAKINIA, J. Activated Sludge process development. *In*: JENKINS, D.; WANNER, Jiri (Eds.). **Activated Sludge: - 100 years and counting**. Londres: IWA Publishing, 2014. cap. 3, p. 33–52.

SUMMER, T.; SHEPHARD, E.; BOGLE, I. D. L. A methodology for global-sensitivity analysis of time-dependent outputs in systems biology modelling. **Journal of the Royal Society Interface**, v. 9, n. 74, p. 2156–2166, 2012. <https://doi.org/10.1098/rsif.2011.0891>

TCHOBANOGLIOUS, G.; STENSEL, H. D.; TSUCHIHASHI, R.; BURTON, F.; ABU-ORF, M.; BOWDEN, G.; PFRANG, W. **Tratamento de Efluentes e Recuperação de Recursos**. Tradução de Ivanildo Hespanhol, José Carlos Mierzwa. Porto Alegre: AMGH, 2016. Ed. 5, 1984 p.

TOMLINSON, E. J.; CHAMBERS, B. **Beneficial uses of model simulation in water and wastewater treatment**. WRc Plc & Thames Water: Swindon, UK. 1996. 5 f.

URBAN, R. C.; ISAAC, R. L.; MORITA, D. M. Uso benéfico de lodo de estações de tratamento de água e de tratamento de esgoto: estado da arte. **Revista DAE**, v. 67, n. 219, p. 128–158, 2019. <https://doi.org/10.4322/dae.2019.050>

VAN LOOSDRECHT, M. C. M.; LOPEZ-VAZQUEZ, C. M.; MEIJER, S. C.F.;

HOOIJMANS, C. M.; BRDJANOVIC, D. Twenty-five years of ASM1: Past, present and future of wastewater treatment modelling. **Journal of Hydroinformatics**, v. 17, n. 5, p. 697–718, 2015. <https://doi.org/10.2166/hydro.2015.006>

VANROLLEGHEM, P. A.; INSEL, G.; PETERSEN, B.; SIN, G.; DE PAUW, D.; NOPEN, I.; DOVERMANN, H.; WEIJERS, S.; GERNAEY, K. A comprehensive model calibration procedure for Activated Sludge Models. **Proceedings of the Water Environment Federation**, n. 9, p. 210–237, 2003. [10.2175/193864703784639615](https://doi.org/10.2175/193864703784639615)

VOLCKE, E. I. P.; SOLON, K.; COMEAU, Y.; HENZE, M. Wastewater characteristics. *In*: CHEN, G.; VAN LOOSDRECHT, M.C.M.; EKAMA, G.A.; BRDJANOVIC, D. (Eds.). **Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design**. Londres: IWA Publishing, 2020. ed. 2, cap. 3, p. 77–110.

VON SPERLING, M. A new unified solids flux-based approach for the design of final clarifiers: Description and comparison with traditional criteria. **Water Science and Technology**, v. 30, n. 4, p. 57–66, 1994. <https://doi.org/10.2166/wst.1994.0157>

_____. Activated Sludge and Aerobic Biofilm Reactors. *In*: **Biological Wastewater Treatment Series**. Londres: IWA Publishing, 2007. vol. 5.

_____. **Urban wastewater treatment in Brazil**. Water and Sanitation Division – Technical Note N° IDB-TN-970. IDB, 2016. Disponível em: <<https://publications.iadb.org/en/urban-wastewater-treatment-brazil>>. Acesso em: 22 jun. 2021.

VON SPERLING, M.; VERBYLA, M. E.; OLIVEIRA, S. M. A. C. **Assessment of Treatment Plant Performance and Water Quality Data: A Guide for Students, Researchers and Practitioners**. Londres: IWA Publishing, 2020. 644p.

WAGNER, M.; STENSTROM, M. K. Aeration and mixing. *In*: JENKINS, D.; WANNER, J. (Eds.). **Activated Sludge: 100 years and counting**. Londres: IWA Publishing, 2014. cap. 8, p. 131–153.

WRC PLC. **Process Model Descriptions**. WRc plc: Swindon, UK. 2002. 138 f.

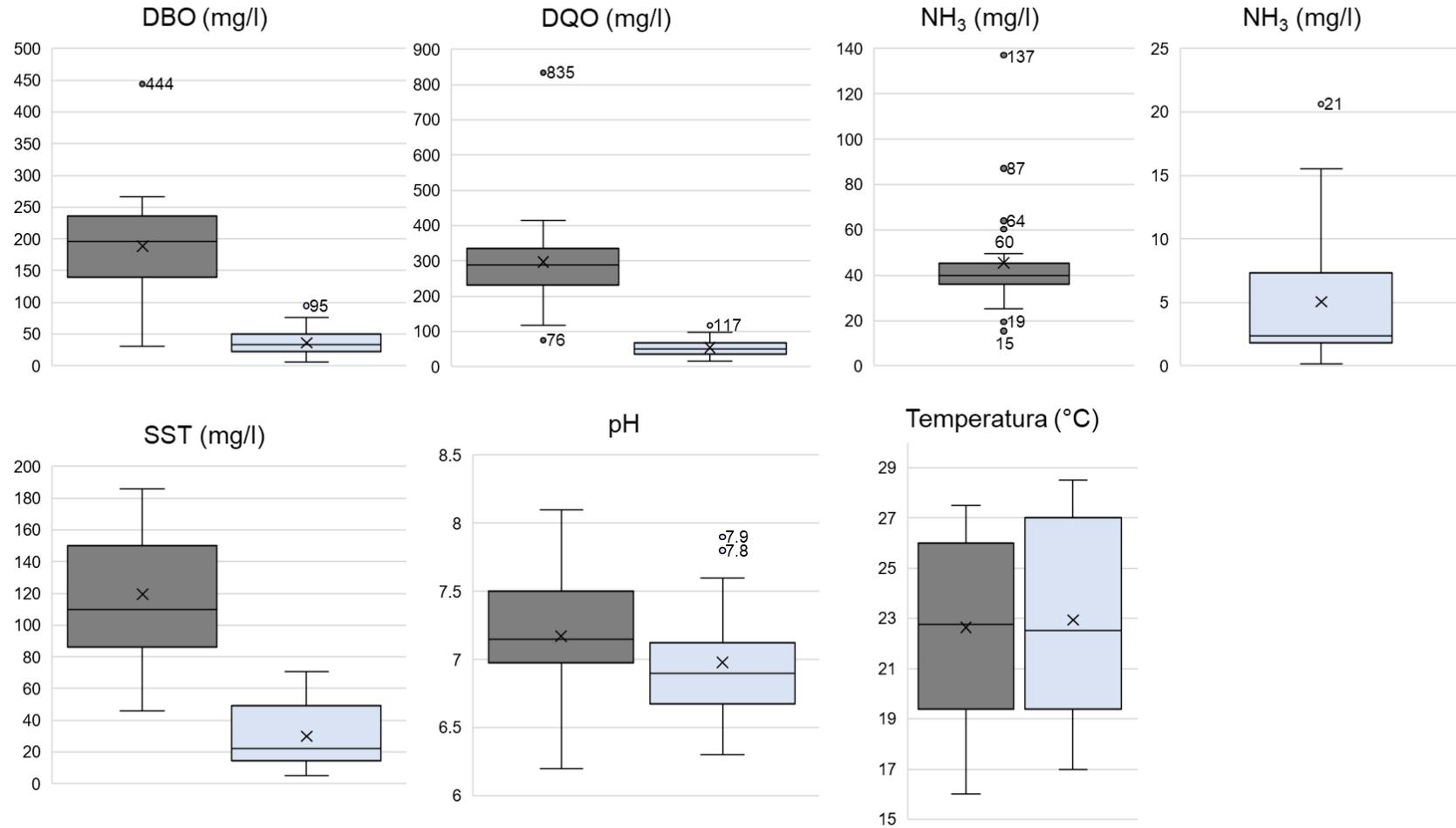
_____. **Unit Process Descriptions**. WRc plc: Swindon, UK. 2002. 312 f.

_____. **WRc STOAT - Tutorials Guide**. WRc plc: Swindon, UK. 1994. 74 f.

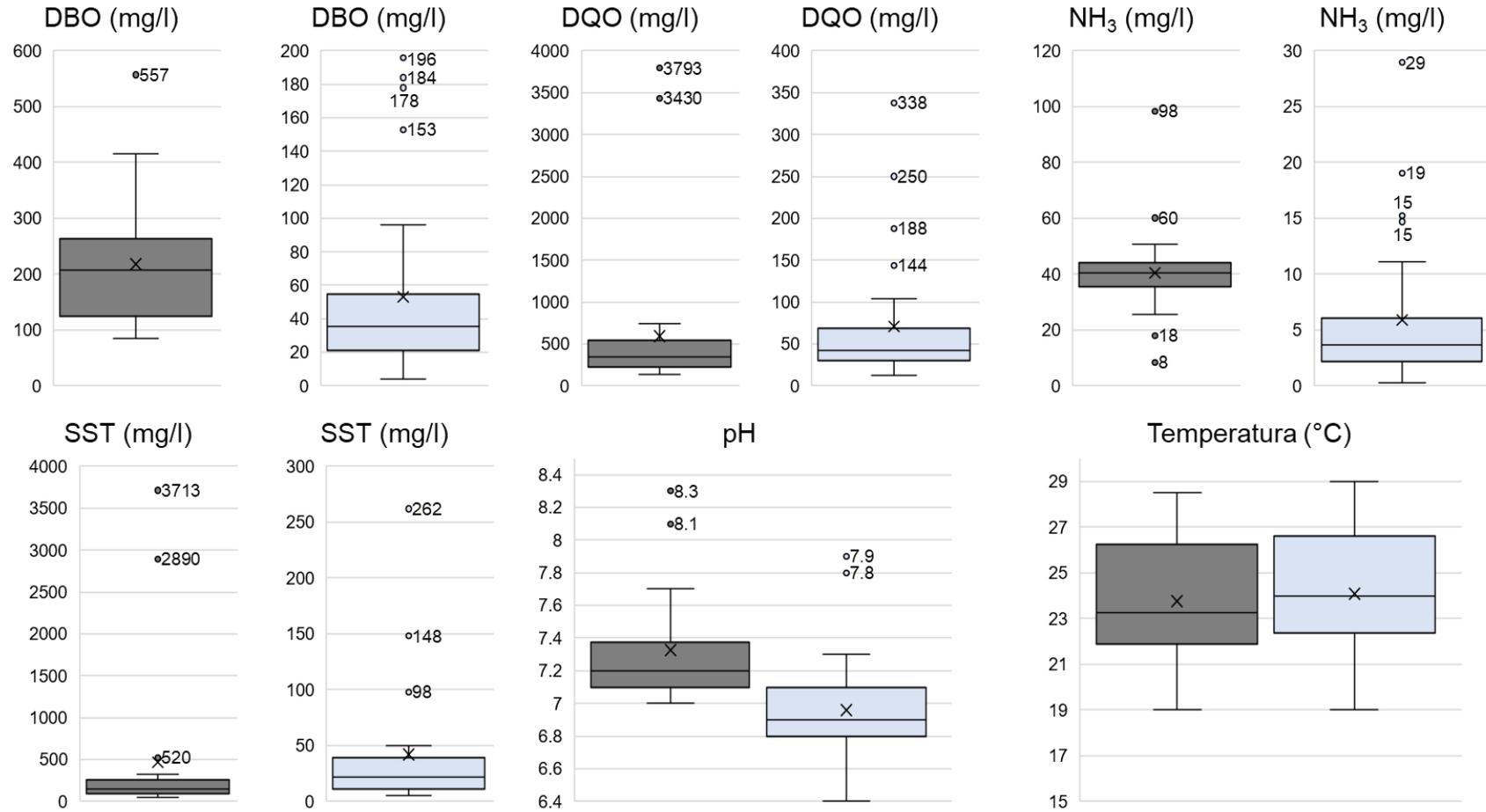
ZHOU, M.; GONG, J.; YANG, C.; PU, W. Simulation of the performance of aerobic granular sludge SBR using modified ASM3 model. **Bioresour Technol**, v. 127, p. 473–481, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2012.09.076>

APÊNDICE 1 – OUTLIERS IDENTIFICADOS

Registros de 2018 Afluente Efluente Outlier



Registros de 2019 Afluente Efluente Outlier



APÊNDICE 2 – ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Previsões (mg/l) das simulações da análise de sensibilidade e coeficientes de sensibilidade calculados (valores em vermelho para parâmetros considerados sensíveis: $\geq 0,25$).

Parâmetro		Média 2018 ^a			SST	DQO	NH ₃	Coeficientes de sensibilidade		
		Padrão (20°C)	Teste (20 °C)	Previsões de sensibilidade	SST	DQO	NH ₃			
				12,76	28,33	0,50				
Estequiométrico	Y _H	0,67	0,737	13,09	28,94	0,46	0,26	0,22	0,80	
	Y _A	0,24	0,264	12,78	28,36	0,52	0,02	0,01	0,40	
	f _P	0,08	0,088	12,79	28,38	0,50	0,02	0,02	0,00	
	i _{XB}	0,086	0,0946	12,76	28,33	0,49	0,00	0,00	0,20	
	i _{XP}	0,06	0,066	12,76	28,33	0,50	0,00	0,00	0,00	
Cinético	μ _H	6	6,6 ^c	12,77	28,03	0,50	0,01	0,11	0,00	
	K _S	20	22	12,76	28,62	0,50	0,00	0,10	0,00	
	K _{OH}	0,2	0,22	12,76	28,34	0,50	0,00	0,00	0,00	
	K _{NO}	0,5	0,55	12,76	28,33	0,50	0,00	0,00	0,00	
	b _H	0,62	0,682 ^c	12,71	28,54	0,50	0,04	0,07	0,00	
	μ _A	0,8	0,88 ^c	12,76	28,33	0,43	0,00	0,00	1,40	
	K _{NH}	1	1,1	12,76	28,33	0,55	0,00	0,00	1,00	
	K _{OA}	0,4	0,44	12,76	28,33	0,52	0,00	0,00	0,40	
	b _A	0,15	0,165 ^c	12,76	28,32	0,55	0,00	0,00	1,00	
	η _g	0,8	0,88	12,76	28,30	0,50	0,00	0,01	0,00	
	K _A	0,08	0,088 ^c	12,76	28,33	0,50	0,00	0,00	0,00	
	K _h	3	3,3 ^c	12,76	28,33	0,50	0,00	0,00	0,00	
	K _X	0,03	0,033 ^c	12,77	28,33	0,50	0,01	0,00	0,00	
	η _h	0,4	0,44	12,76	28,33	0,50	0,00	0,00	0,00	

Notas: (a) Registros da ETE-SJNV. (b) Resultados de simulações sem alteração nos parâmetros do ASM1. (c) No ASM1 foram utilizados valores convertidos para 15 °C.

APÊNDICE 3 – SIMULAÇÕES DE CALIBRAÇÃO

Delineamento experimental com *Central Composite Design* para simulações de calibração do ASM1 na modelagem do processo de lodos ativados da ETE-SJNV.

Ensaio/ simulação	Fatores/Parâmetros sensíveis do ASM1						Variáveis alvo (efluente) (mg/l)					
	Y _H	Y _A	μA	K _{NH}	b _A	K _{OA}	SST	DQO	NH ₃	SST	DQO	NH ₃
	Valores padrão no STOAT®						Méd.2018-ETE-SJNV					
	0,67	0,24	0,0207	1	0,0036	0,4	30	52	4,39	Erro		
Combinação com níveis de teste						Resultado da simulação						(Equação 5-2)
1	0,98	0,2	0,0101	1	0,0048	0,4	25,44	44,32	3,44	-4,56	-7,68	-0,95
2	1,02	0,2	0,0101	1	0,0048	0,4	45,82	68,51	3,48	15,82	16,51	-0,91
3	0,98	0,28	0,0101	1	0,0048	0,4	26,77	45,88	4,42	-3,23	-6,12	0,03
4	1,02	0,28	0,0101	1	0,0048	0,4	47,39	70,4	4,43	17,39	18,4	0,04
5	0,98	0,2	0,0151	1	0,0048	0,4	25,63	44,53	1,07	-4,37	-7,47	-3,32
6	1,02	0,2	0,0151	1	0,0048	0,4	46,04	68,78	1,1	16,04	16,78	-3,29
7	0,98	0,28	0,0151	1	0,0048	0,4	27,12	46,29	1,3	-2,88	-5,71	-3,09
8	1,02	0,28	0,0151	1	0,0048	0,4	47,82	70,91	1,35	17,82	18,91	-3,04
9	0,98	0,2	0,0101	1,5	0,0048	0,4	25,37	44,23	4,37	-4,63	-7,77	-0,02
10	1,02	0,2	0,0101	1,5	0,0048	0,4	45,72	68,4	4,37	15,72	16,4	-0,02
11	0,98	0,28	0,0101	1,5	0,0048	0,4	26,65	45,74	5,5	-3,35	-6,26	1,11
12	1,02	0,28	0,0101	1,5	0,0048	0,4	47,24	70,22	5,46	17,24	18,22	1,07
13	0,98	0,2	0,0151	1,5	0,0048	0,4	25,58	44,48	1,55	-4,42	-7,52	-2,84
14	1,02	0,2	0,0151	1,5	0,0048	0,4	45,99	68,72	1,59	15,99	16,72	-2,8
15	0,98	0,28	0,0151	1,5	0,0048	0,4	27,05	46,21	1,88	-2,95	-5,79	-2,51
16	1,02	0,28	0,0151	1,5	0,0048	0,4	47,73	70,81	1,93	17,73	18,81	-2,46
17	0,98	0,2	0,0101	1	0,0072	0,4	24,95	43,75	9,63	-5,05	-8,25	5,24
18	1,02	0,2	0,0101	1	0,0072	0,4	45,31	67,91	9,22	15,31	15,91	4,83
19	0,98	0,28	0,0101	1	0,0072	0,4	25,94	44,91	11,69	-4,06	-7,09	7,3

Ensaio/ simulação	Fatores/Parâmetros sensíveis do ASM1						Variáveis alvo (efluente) (mg/l)					
	Y _H	Y _A	μ _A	K _{NH}	b _A	K _{OA}	SST	DQO	NH ₃	SST	DQO	NH ₃
	Valores padrão no STOAT©						Méd.2018-ETE-SJNV					
	0,67	0,24	0,0207	1	0,0036	0,4	30	52	4,39	Erro		
Combinação com níveis de teste						Resultado da simulação						(Equação 5-2)
20	1,02	0,28	0,0101	1	0,0072	0,4	46,55	69,4	11,03	16,55	17,4	6,64
21	0,98	0,2	0,0151	1	0,0072	0,4	25,44	44,31	2,95	-4,56	-7,69	-1,44
22	1,02	0,2	0,0151	1	0,0072	0,4	45,91	68,63	3,04	15,91	16,63	-1,35
23	0,98	0,28	0,0151	1	0,0072	0,4	26,82	45,94	3,47	-3,18	-6,06	-0,92
24	1,02	0,28	0,0151	1	0,0072	0,4	47,59	70,64	3,56	17,59	18,64	-0,83
25	0,98	0,2	0,0101	1,5	0,0072	0,4	24,84	43,62	11,07	-5,16	-8,38	6,68
26	1,02	0,2	0,0101	1,5	0,0072	0,4	45,18	67,75	10,5	15,18	15,75	6,11
27	0,98	0,28	0,0101	1,5	0,0072	0,4	25,76	44,69	13,31	-4,24	-7,31	8,92
28	1,02	0,28	0,0101	1,5	0,0072	0,4	46,35	69,15	12,38	16,35	17,15	7,99
29	0,98	0,2	0,0151	1,5	0,0072	0,4	25,37	44,23	3,82	-4,63	-7,77	-0,57
30	1,02	0,2	0,0151	1,5	0,0072	0,4	45,83	68,53	3,88	15,83	16,53	-0,51
31	0,98	0,28	0,0151	1,5	0,0072	0,4	26,71	45,81	4,45	-3,29	-6,19	0,06
32	1,02	0,28	0,0151	1,5	0,0072	0,4	47,45	70,47	4,5	17,45	18,47	0,11
33	0,98	0,2	0,0101	1	0,0048	0,6	25,37	44,24	4,36	-4,63	-7,76	-0,03
34	1,02	0,2	0,0101	1	0,0048	0,6	45,73	68,41	4,34	15,73	16,41	-0,05
35	0,98	0,28	0,0101	1	0,0048	0,6	26,64	45,73	5,6	-3,36	-6,27	1,21
36	1,02	0,28	0,0101	1	0,0048	0,6	47,24	70,22	5,54	17,24	18,22	1,15
37	0,98	0,2	0,0151	1	0,0048	0,6	25,6	44,51	1,32	-4,4	-7,49	-3,07
38	1,02	0,2	0,0151	1	0,0048	0,6	46,02	68,75	1,37	16,02	16,75	-3,02
39	0,98	0,28	0,0151	1	0,0048	0,6	27,08	46,24	1,63	-2,92	-5,76	-2,76
40	1,02	0,28	0,0151	1	0,0048	0,6	47,77	70,85	1,7	17,77	18,85	-2,69
41	0,98	0,2	0,0101	1,5	0,0048	0,6	25,3	44,15	5,38	-4,7	-7,85	0,99
42	1,02	0,2	0,0101	1,5	0,0048	0,6	45,63	68,29	5,31	15,63	16,29	0,92

Ensaio/ simulação	Fatores/Parâmetros sensíveis do ASM1						Variáveis alvo (efluente) (mg/l)					
	Y _H	Y _A	μ _A	K _{NH}	b _A	K _{OA}	SST	DQO	NH ₃	SST	DQO	NH ₃
	Valores padrão no STOAT©						Méd.2018-ETE-SJNV					
	0,67	0,24	0,0207	1	0,0036	0,4	30	52	4,39	Erro (Equação 5-2)		
Combinação com níveis de teste						Resultado da simulação						
43	0,98	0,28	0,0101	1,5	0,0048	0,6	26,52	45,58	6,77	-3,48	-6,42	2,38
44	1,02	0,28	0,0101	1,5	0,0048	0,6	47,08	70,03	6,65	17,08	18,03	2,26
45	0,98	0,2	0,0151	1,5	0,0048	0,6	25,56	44,45	1,89	-4,44	-7,55	-2,5
46	1,02	0,2	0,0151	1,5	0,0048	0,6	45,96	68,68	1,94	15,96	16,68	-2,45
47	0,98	0,28	0,0151	1,5	0,0048	0,6	27	46,15	2,31	-3	-5,85	-2,08
48	1,02	0,28	0,0151	1,5	0,0048	0,6	47,67	70,73	2,37	17,67	18,73	-2,02
49	0,98	0,2	0,0101	1	0,0072	0,6	24,76	43,52	12,19	-5,24	-8,48	7,8
50	1,02	0,2	0,0101	1	0,0072	0,6	45,11	67,66	11,23	15,11	15,66	6,84
51	0,98	0,28	0,0101	1	0,0072	0,6	25,59	44,49	14,84	-4,41	-7,51	10,45
52	1,02	0,28	0,0101	1	0,0072	0,6	46,22	69	13,27	16,22	17	8,88
53	0,98	0,2	0,0151	1	0,0072	0,6	25,37	44,24	3,78	-4,63	-7,76	-0,61
54	1,02	0,2	0,0151	1	0,0072	0,6	45,84	68,54	3,83	15,84	16,54	-0,56
55	0,98	0,28	0,0151	1	0,0072	0,6	26,72	45,82	4,45	-3,28	-6,18	0,06
56	1,02	0,28	0,0151	1	0,0072	0,6	47,46	70,48	4,5	17,46	18,48	0,11
57	0,98	0,2	0,0101	1,5	0,0072	0,6	24,65	43,39	13,62	-5,35	-8,61	9,23
58	1,02	0,2	0,0101	1,5	0,0072	0,6	44,98	67,51	12,39	14,98	15,51	8
59	0,98	0,28	0,0101	1,5	0,0072	0,6	25,41	44,29	16,37	-4,59	-7,71	11,98
60	1,02	0,28	0,0101	1,5	0,0072	0,6	46,05	68,78	14,47	16,05	16,78	10,08
61	0,98	0,2	0,0151	1,5	0,0072	0,6	25,3	44,15	4,74	-4,7	-7,85	0,35
62	1,02	0,2	0,0151	1,5	0,0072	0,6	45,75	68,43	4,75	15,75	16,43	0,36
63	0,98	0,28	0,0151	1,5	0,0072	0,6	26,6	45,68	5,52	-3,4	-6,32	1,13
64	1,02	0,28	0,0151	1,5	0,0072	0,6	47,31	70,31	5,52	17,31	18,31	1,13
65	0,9434	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	17,44	34,87	4,4	-12,56	-17,13	0,01

Ensaio/ simulação	Fatores/Parâmetros sensíveis do ASM1						Variáveis alvo (efluente) (mg/l)					
	Y _H	Y _A	μ _A	K _{NH}	b _A	K _{OA}	SST	DQO	NH ₃	SST	DQO	NH ₃
	Valores padrão no STOAT©						Méd.2018-ETE-SJNV					
	0,67	0,24	0,0207	1	0,0036	0,4	30	52	4,39	Erro (Equação 5-2)		
Combinação com níveis de teste						Resultado da simulação						
66	1,0566	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	69,8	97,62	4,23	39,8	45,62	-0,16
67	1	0,1269	0,0126	1,25	0,006	0,5	33,27	53,55	3,08	3,27	1,55	-1,31
68	1	0,3531	0,0126	1,25	0,006	0,5	37,61	58,7	5,54	7,61	6,7	1,15
69	1	0,24	0,0055	1,25	0,006	0,5	33,06	53,29	25,73	3,06	1,29	21,34
70	1	0,24	0,0197	1,25	0,006	0,5	35,82	56,57	1,31	5,82	4,57	-3,08
71	1	0,24	0,0126	0,5429	0,006	0,5	35,65	56,37	2,88	5,65	4,37	-1,51
72	1	0,24	0,0126	1,9571	0,006	0,5	35,33	55,99	5,72	5,33	3,99	1,33
73	1	0,24	0,0126	1,25	0,0026	0,5	35,84	56,6	1,06	5,84	4,6	-3,33
74	1	0,24	0,0126	1,25	0,0094	0,5	34,4	54,89	14,26	4,4	2,89	9,87
75	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,2171	35,61	56,32	3,17	5,61	4,32	-1,22
76	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,7828	35,31	55,97	5,92	5,31	3,97	1,53
77	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	35,47	56,16	4,45	5,47	4,16	0,06
78	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	33,87	57,63	4,52	3,87	5,63	0,13
79	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	35,63	56,35	5,15	5,63	4,35	0,76
80	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	31,88	59,58	4,66	1,88	7,58	0,27
81	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	34,32	56,96	4,37	4,32	4,96	-0,02
82	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	32,07	58,85	4,38	2,07	6,85	-0,01
83	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	34,41	57,07	4,47	4,41	5,07	0,08
84	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	34,55	57,16	4,51	4,55	5,16	0,12
85	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	34,68	57,3	4,64	4,68	5,3	0,25
86	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	35,58	56,29	4,56	5,58	4,29	0,17
87	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	31,79	59,48	4,57	1,79	7,48	0,18
88	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	29,17	61,85	4,53	-0,83	9,85	0,14

Ensaio/ simulação	Fatores/Parâmetros sensíveis do ASM1						Variáveis alvo (efluente) (mg/l)					
	Y _H	Y _A	μ _A	K _{NH}	b _A	K _{OA}	SST	DQO	NH ₃	SST	DQO	NH ₃
	Valores padrão no STOAT©						Méd.2018-ETE-SJNV					
	Combinação com níveis de teste						Resultado da simulação			Erro (Equação 5-2)		
	0,67	0,24	0,0207	1	0,0036	0,4	30	52	4,39			
89	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	29,05	61,7	4,39	-0,95	9,7	0
90	1	0,24	0,0126	1,25	0,006	0,5	31,7	59,37	4,48	1,7	7,37	0,09

ANEXO 1 – MATRIZ DO ASM1
Componentes do modelo ASM1 (HENZE et al., 1987).

Component →		i													Process Rate, p_i [$ML^{-3} T^{-1}$]	
j	Process ↓	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13		
		S_T	S_B	X_I	X_S	$X_{B,H}$	$X_{B,A}$	X_P	S_O	S_{NO}	S_{NH}	S_{ND}	X_{ND}	S_{ALK}		
1	Aerobic growth of heterotrophs		$\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$		$-i_{XB}$			$-\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H \left(\frac{S_B}{K_B + S_B} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) X_{B,H}$	
2	Anoxic growth of heterotrophs		$\frac{1}{Y_H}$			1			$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$		$-i_{XB}$			$\frac{1-Y_H}{14 \cdot 2.86 Y_H}$ $-\frac{i_{XB}}{14}$	$\mu_H \left(\frac{S_B}{K_B + S_B} \right) \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right)$ $\times \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{B,H}$	
3	Aerobic growth of autotrophs						1		$\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$	$\frac{1}{Y_A}$	$-i_{XB} \frac{1}{Y_A}$			$\frac{i_{XB}}{14} \frac{1}{7 Y_A}$	$\mu_A \left(\frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left(\frac{S_O}{K_{O,A} + S_O} \right) X_{B,A}$	
4	'Decay' of heterotrophs				$1 - f_p$	-1		f_p							$b_H X_{B,H}$	
5	'Decay' of autotrophs				$1 - f_p$	-1		f_p							$b_A X_{B,A}$	
6	Ammonification of soluble organic nitrogen										1	-1		$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{B,H}$	
7	'Hydrolysis' of entrapped organics		1		-1										$k_h \frac{X_S / X_{B,H}}{K_X + (X_S / X_{B,H})} \left[\left(\frac{S_O}{K_{O,H} + S_O} \right) + \eta_h \left(\frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O} \right) \left(\frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{B,H}$	
8	'Hydrolysis' of entrapped organic nitrogen											1	-1		$p_T (X_{ND} / X_B)$	
Observed Conversion Rates [$ML^{-3} T^{-1}$]		$r_i = \sum_j v_{ij} p_j$														
Stoichiometric Parameters: Heterotrophic yield: Y_H Autotrophic yield: Y_A Fraction of biomass yielding particulate products: f_p Mass N/Mass COD in biomass: i_{XB} Mass N/Mass COD in products from biomass: i_{XP}		Soluble inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Readily biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate inert organic matter [$M(COD)L^{-3}$]	Slowly biodegradable substrate [$M(COD)L^{-3}$]	Active heterotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Active autotrophic biomass [$M(COD)L^{-3}$]	Particulate products arising from biomass decay [$M(COD)L^{-3}$]	Oxygen (negative COD) [$M(-COD)L^{-3}$]	Nitrate and nitrite nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	NH_4^+ and nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Soluble biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Particulate biodegradable organic nitrogen [$M(N)L^{-3}$]	Alkalinity—Molar units	Kinetic Parameters: Heterotrophic growth and decay: $\mu_H, K_B, K_{O,H}, K_{NO}, b_H$ Autotrophic growth and decay: $\mu_A, K_{NH}, K_{O,A}, b_A$ Correction factor for anoxic growth of heterotrophs: η_g Ammonification: k_a Hydrolysis: k_h, K_X Correction factor for anoxic hydrolysis: η_h	