UNIVERSIDADE FEDERAL DO MARANHÃO CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE ELETRICIDADE

ESTIMAÇÃO DA TAXA DE CONSUMO DE OXIGÊNIO EM SISTEMAS DE LODO ATIVADO USANDO FILTRO DE KALMAN E CONTROLE PWM DA CONCENTRAÇÃO DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO

FRANCISCO JADILSON DOS SANTOS SILVA

São Luís 2011

ESTIMAÇÃO DA TAXA DE CONSUMO DE OXIGÊNIO EM SISTEMAS DE LODO ATIVADO USANDO FILTRO DE KALMAN E CONTROLE PWM DA CONCENTRAÇÃO DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO

FRANCISCO JADILSON DOS SANTOS SILVA

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia de Eletricidade da Universidade Federal do Maranhão, para obtenção do Título de Mestre em Ciência no domínio da Engenharia de Eletricidade, área de concentração em Automação e Controle.

Prof° Sebastian Yuri Cavalcanti Catunda (Orientador) Doutor em Engenharia Elétrica Universidade Federal do Rio Grande do Norte

Prof^o João Viana da Fonseca Neto (Co-orientador) Doutor em Engenharia Elétrica Universidade Federal do Maranhão

São Luís 2011

Silva, Francisco Jadilson dos Santos

Estimação da taxa de consumo de oxigênio em sistemas de lodo ativado usando filtro de Kalman e controle PWM da concentração de oxigênio dissolvido / Francisco Jadilson dos Santos Silva. _ 2011.

78f.

Impresso por computador (fotocópia)

Orientador: Sebastian Yuri Cavalcanti Catunda

Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Maranhão, Mestrado em Engenharia de Eletricidade, 2011.

1. Instrumentação eletrônica 2. Oxigênio – Taxa de consumo 3. Lodo ativado 4. Oxigênio dissolvido 5. Filtro de Kalman I. Título

CDU 621.38

ESTIMAÇÃO DA TAXA DE CONSUMO DE OXIGÊNIO EM SISTEMAS DE LODO ATIVADO USANDO FILTRO DE KALMAN E CONTROLE PWM DA CONCENTRAÇÃO DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO

Francisco Jadilson dos Santos Silva

Dissertação aprovada em 29 de julho de 2011.

Prof. Sebastian Yuri Cavalcanti Catunda, Dr. (Orientador)

Prof. João Viana da Fonseca Neto, Dr. (Co-orientador)

A. Bhaya.

Prof. Amit Bhaya, Dr. (Membro da Banca Examinadora)

Prof. Ginalber Luiz de Oliveira Serra, Dr. (Membro da Banca Examinadora)

DEDICATÓRIA

Aos meus pais, Cicero e Isabel, e minhas irmãs, Yara e Maiara, pelo apoio durante toda minha jornada acadêmica.

"O primeiro dever da inteligência é desconfiar dela mesma."

Albert Einstein.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador o professor Dr. Sebastian Yuri Cavalcanti Catunda pela orientação e ensinamentos transferidos durante o período de execução deste e de outros trabalhos.

Agradeço também ao meu co-orientador o professor Dr. João Viana da Fonseca Neto pelo aprendizado e debates em sala de aula e nos laboratórios de pesquisa.

Aos professores do Departamento de Engenharia Elétrica que contribuíram com a minha formação científica durante o período do Mestrado.

Aos amigos que fiz no Laboratório de Instrumentação Eletrônica e Automação: Shirlen, Freud, Thiago, Pedro, Rafael, Adelman, Igor e Evandro, pelo apoio e momentos de descontração.

Ao CNPq pelo apoio financeiro, o que me permitiu dedicar exclusivamente aos estudos.

RESUMO

A medição e a utilização da taxa de consumo de oxigênio (TCO), ou taxa de respiração, é muito importante para os processos biológicos de tratamento de águas residuais. A TCO fornece informações a respeito da atividade biológica e pode indicar a presença de elementos tóxicos capazes de comprometer a unidade de tratamento. Devido à carência de sensores confiáveis e em tempo real para a medição da taxa de respiração, programas de computador, baseados em técnicas de estimação, têm sido aplicados no desenvolvimento de sensores por software como uma alternativa para superar tais dificuldades. Neste trabalho um sensor por software, utilizando um algoritmo de Filtro de Kalman, é desenvolvido para estimar a TCO em um reator aeróbio no qual a concentração de oxigênio dissolvido é controlada por meio aeradores do tipo liga-desliga acionados por modulação por largura de pulsos. Simulações e resultados experimentais, obtidos em um reator de lodo ativado em escala de bancada, são comparados. Conclui-se, a partir da análise dos resultados, que o método proposto é capaz de estimar a TCO de forma confiável e em tempo real.

Palavras-chave: Taxa de consumo de oxigênio; Lodo ativado; Oxigênio dissolvido; Estimação; Medição; Filtro de Kalman; PWM; Tratamento de águas residuais.

ABSTRACT

The measurement and utilization of the oxygen uptake rate (OUR), or respiration rate, is very important in biological wastewater treatment process. The OUR provides information about the biological activity and may indicate the presence of the toxic elements capable of corrupting the system. Due to the lack of reliable real time sensors for measurement of the respiration rate, computer codes, based on estimation techniques, have been used to develop software sensors to overcome such difficulties. In this work a software sensor, using a Kalman Filter algorithm, is developed to estimate the OUR in an aerobic reactor, in which the dissolved oxygen concentration is controlled by aerators of on-off type triggered by pulse width modulation. Simulations and experimental results performed in a bench-scale activated sludge reactor are compared. It follows from the analysis of results, that the proposed method is able to estimate the OUR reliably and in real time.

Keywords: Oxygen uptake rate; Activated sludge; Dissolved oxygen; Estimation; Measurement; Kalman Filter; PWM; Wastewater treatment.

SUMÁRIO

<u>1</u>	INTRODUÇÃO	16
1.1	R EVISÃO BIBLIOGRÁFICA	17
1.2	ΜΟΤΙVΑÇÃO	18
1.3	Contribuições	19
1.4	OBJETIVO GERAL	19
1.5	Objetivos Específicos	19
1.6	TRABALHOS PUBLICADOS	20
1.7	O RGANIZAÇÃO DO TRABALHO	20
<u>2</u>	PROCESSO DE LODO ATIVADO	22
2.1	REATOR BIOLÓGICO	24
2.2	DINÂMICA DO OXIGÊNIO DISSOLVIDO	26
2.2.	1 MODELO CONTÍNUO	27
2.2.	2 MODELO DISCRETO	28
2.3	DINÂMICA DO SENSOR DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO	30
2.4	TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO	32
2.5	TAXA DE CONSUMO DE OXIGÊNIO	34
<u>3</u>	ESTIMAÇÃO DA TCO	36
3.1	Perspectivas na estimação da TCO	37
3.2	METODOLOGIA DE ESTIMAÇÃO	39
3.2.	1 Determinação dos parâmetros relacionados à TTO	39
3.2.	2 Medicão da TCO em tempo real	41
3.3	SISTEMA DE CONTROLE E ESTIMAÇÃO	41
3.4	FILTRO DE KALMAN	44
3.4.	1 EQUAÇÕES DO FILTRO DE KALMAN	45
3.4.	2 APLICAÇÃO DO FILTRO DE KALMAN NO MODELO DO SISTEMA	47
<u>4</u>	RESULTADOS	50
4.1	RESULTADOS DE SIMULAÇÃO	50
4.2	RESULTADOS EXPERIMENTAIS	54
4.2.	1 VERIFICAÇÃO DA LINEARIDADE DE K_LA COM O CICLO DE TRABALHO DO SINAL PWM	56
4.2.	2 ESTIMAÇÃO DA TCO NO REATOR DE BANCADA	57
5	CONCLUSÕES	66

5.1 PERSPECTIVAS FUTURAS		66
REFERÊNCIAS		68
<u>APÊNDICE A: SOLUÇÃO DA EQUAÇÂ</u>	ÃO DINÂMICA DO OD	70
APÊNDICE B: SOLUÇÃO DA EQUAÇÂ	O DINÂMICA DO SENSOR DE OD	71
<u>APÊNDICE C: REGRESSÃO NÃO LIN</u>	EAR	73

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Diferentes modelos	para a função transferência de oxigênio	33
Tubble 2.1 Differences modelos	ara a ranção transferencia de oxigenito	55

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquema básico de um processo de lodo ativado 23
Figura 2.2 – Etapas de um sistema de tratamento por lodo ativado operando na forma de
bateladas 24
Figura 2.3 - Relação entre consumo de oxigênio dissolvido, consumo de substrato e
crescimento de biomassa25
Figura 2.4 – Diagrama simplificado do sensor OD polarográfico com circuito de polarização
[13]
Figura 2.5 – Forma típica da curva do coeficiente de transferência de massa volumétrico em
função do fluxo de ar 32
Figura 2.6 – Sinal PWM para o acionamento dos aeradores [3] 34
Figura 3.1 – Experimento na forma de batelada 38
Figura 3.2 – Diagrama de blocos do sistema de controle da concentração de OD e estimação
da TCO 43
Figura 4.1 – Concentrações de oxigênio dissolvido simulada e estimada 51
Figura 4.2 – Taxas de respiração simulada e estimada 52
Figura 4.3 – Concentrações de OD simulada e estimada por meio do algoritmo de regressão
não linear54
Figura 4.4 – Reator de lodo ativado de pequena escala e sistema de controle e aquisição de
dados 55
Figura 4.5 – Relação entre o ciclo de trabalho do sinal PWM e os valores dos coeficientes de
transferência de oxigênio determinados experimentalmente 57
Figura 4.6 – Concentrações de oxigênio dissolvido medida e estimada pelo Filtro de Kalman.
58
Figura 4.7 – TCO estimada pelo Filtro de Kalman 58
Figura 4.8 – Concentrações de oxigênio dissolvido medida e estimada pelo Filtro de Kalman.
61
Figura 4.9 – Taxas de consumo de oxigênio estimadas pelo Filtro de Kalman e por Regressão
Linear61
Figura 4.10 – Concentrações de oxigênio dissolvido simulada e estimada pelo Filtro de
Kalman 65

Figura 4.11 – Taxas de consumo de oxigênio dissolvido simulada e estimada pelo Filtro de Kalman. ______ 65

LISTA DE ACRÔNIMOS

DBO	Demanda Bioquímica de Oxigênio;
FK	Filtro de Kalman;
OD	Oxigênio Dissolvido;
PWM	Pulse Width Modulation (Modulação por Largura de Pulsos);
TCO	Taxa de Consumo de Oxigênio;
TTO	Taxa de Transferência de Oxigênio.

LISTA DE SÍMBOLOS

β	Conjunto de parâmetros estimados por regressão não linear;	
В	Matriz de ligação entre o ruído branco e os estados;	
С	Concentração de oxigênio dissolvido no licor misto;	
Cin	Concentração de oxigênio dissolvido no afluente;	
C _{sat}	Concentração de saturação do oxigênio dissolvido;	
D	Ciclo de trabalho do sinal PWM;	
е	Erro de regime;	
e_R	Ruído branco de média zero;	
F	Matriz de transição de estados;	
G	Matriz que relaciona a entrada de controle com os estados;	
h	Período de amostragem;	
Н	Matriz que relaciona os estados com as observações;	
K	Vetor de ganhos do Filtro de Kalman;	
$K_L a$	Função transferência de oxigênio;	
K_m	Valor médio da função transferência de oxigênio;	
<i>K</i> _{max}	Valor de $K_L a$ correspondente a q_{max} ;	
kp	Ganho do controlador proporcional;	
Р	Matriz de covariância da incerteza de estimação;	
q	Fluxo de ar gerado pelo sistema de aeração;	
$q_{ m max}$	Fluxo de ar quando o aerador está ligado;	
Q	Matriz de covariância do ruído processo;	
Q_{in}	Fluxo do afluente;	
Q_{out}	Fluxo do efluente;	
r	Variância do erro de medição;	
R	Taxa de respiração;	
τ	Intervalo de tempo no qual o aerador permanece ligado;	
$ au_k$	Constante de tempo da função transferência de oxigênio;	
$ au_y$	Constante de tempo do sensor de OD eletroquímico;	
Т	Período do ciclo de aeração;	
и	Variável de controle;	

*u*_{pwm} Sinal PWM;

- v Ruído de medição;
- *V* Volume do licor misto no reator;
- w Ruído do processo;
- **x** Vetor de estados;
- y Sinal de medição.

1 INTRODUÇÃO

Processos de lodo ativado¹ são processos biológicos amplamente utilizados em estações de tratamento de águas residuais para remover a matéria orgânica em suspensão no esgoto por meio da ação de bactérias e outros microorganismos. Tal remoção deve garantir uma baixa concentração de matéria biodegradável no efluente, com um gasto mínimo de energia e uma baixa produção de lodo.

Para que tudo isso possa ser obtido é necessária a aplicação de boas estratégias de controle, as quais só são possíveis mediante a medição precisa das variáveis do processo. Uma vez que a remoção da matéria orgânica e o crescimento do lodo estão relacionados ao consumo de oxigênio pelos microorganismos, a taxa de respiração, ou taxa de consumo de oxigênio (TCO), tem sido considerada a variável chave nos processos de lodo ativado.

A TCO representa a massa de oxigênio consumida pelos microorganismos durante suas atividades metabólicas e tem sido comumente utilizada para monitorar o processo de lodo ativado, para analisar as características do afluente (composição e concentração) e para indicar a presença de elementos tóxicos que possam afetar, de forma adversa a unidade de tratamento. Outros usos da TCO podem ser encontrados na obtenção de variáveis importantes que não podem ser facilmente medidas (como por exemplo, a demanda bioquímica de oxigênio – DBO^2) e na obtenção de parâmetros cinéticos em modelos de biodegradação aeróbia. A medição e a aplicação da TCO em condições experimentais bem definidas formam a base da Respirometria.

Respirômetros³ encontram-se comercialmente disponíveis para a medição da taxa de respiração. Eles são geralmente reatores, separados do tanque de lodo ativado, onde experimentos podem ser realizados com uma amostra de esgoto para avaliar a TCO. Entretanto, o custo e a necessidade de manutenções constantes têm prevenido o uso generalizado de tais respirômetros e encorajado a aplicação de programas de computador como sensores por software para a estimação das atividades respirométricas.

¹ Biomassa composta principalmente de bactérias e outras microfauna e flora.

² Quantidade de oxigênio dissolvido necessária para a oxidação bioquímica das substâncias orgânicas presentes no esgoto durante um certo período de tempo.

³ Instrumentos que empregam procedimentos e técnicas de estimação para avaliar a taxa na qual os microorganismos consomem o oxigênio dissolvido.

Sensores por software podem ser considerados associações entre sensores (hardware) e estimadores (software). Os sensores realizam medições em tempo real de variáveis do processo, enquanto os estimadores inferem as informações significativas a partir dos dados fornecidos por estes sensores.

É possível aplicar um algoritmo de Filtro de Kalman e um sensor de oxigênio dissolvido no desenvolvimento de um sensor por software para a estimação da TCO em tempo real. O Filtro de Kalman utiliza as equações dinâmicas, representando o balanço de massa de oxigênio no sistema, e as medições provenientes do sensor, juntamente com suas respectivas incertezas, para obter a melhor estimativa da taxa de respiração [1].

1.1 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Muitas pesquisas foram realizadas com o objetivo de desenvolver métodos confiáveis para a estimação da taxa de consumo de oxigênio em sistemas de lodo ativado. Dentre tais pesquisas vale destacar os trabalhos desenvolvidos em [2] e [3], nos quais métodos de estimação da TCO são apresentados e comparados. Dentre tais métodos podemos destacar o método clássico, o método direto e o método PWM.

O método clássico consiste em aerar o lodo ativado até que a concentração de oxigênio dissolvido atinja uma certa referência superior. Após atingir este limite, a aeração é interrompida e a diminuição da concentração de OD, devida ao consumo de oxigênio pelos microorganismos, é monitorada. Quando a concentração atinge um certo valor de referência inferior, reinicia-se a aeração, começando assim um novo ciclo. A TCO pode ser calculada como a declividade da curva durante a diminuição da concentração de OD.

No método direto a TCO é estimada a partir de uma equação discreta modificada do sistema de oxigênio dissolvido. A TCO é calculada a partir dos parâmetros da equação modificada, os quais são estimados por meio de um algoritmo de regressão linear. Para que seja possível realizar uma estimação da TCO a cada valor de concentração medido, é necessário utilizar uma janela móvel para armazenar os últimos valores de concentração.

No método PWM a concentração média de oxigênio dissolvido é mantida constante, utilizando um valor de referência predeterminado, podendo ser realizado por um controlador proporcional. A variável de controle utilizada é a taxa de transferência de oxigênio, a qual é ajustada variando-se o valor médio do coeficiente global de transferência de oxigênio por meio de aeradores do tipo liga-desliga, em modulação por largura de pulso (PWM). O período total do sinal PWM é constante e muito mais curto que a constante de tempo associada à transferência de oxigênio. A TCO pode ser calculada como o valor da taxa de transferência de oxigênio, considerando que as variações da concentração de OD ao longo do tempo podem ser desprezadas. Para que este método possa ser aplicado é necessária a determinação prévia do coeficiente global de transferência de oxigênio quando o aerador está ligado.

Os resultados obtidos pelo primeiro método podem ser considerados mais confiáveis com relação aos demais, uma vez que este método não depende da estimação prévia de nenhum parâmetro para a determinação da taxa de consumo de oxigênio. Entretanto, o método clássico apresenta intervalos de amostragem da TCO longos e variáveis, dependentes da própria TCO, o que compromete sua aplicação em sistemas de tempo real.

O método direto apresenta um período de amostragem da TCO constante e igual ao da concentração de OD, e um tempo de resposta dependente do número de amostras utilizadas na estimação. Os resultados da estimação da TCO podem ser comprometidos se a estimação do parâmetro relacionado ao coeficiente global de transferência de oxigênio não for precisa.

O método PWM também apresenta um período de amostragem da TCO constante e igual ao da amostragem da concentração de OD e ao do sinal PWM. O tempo de resposta também é menor que o dos outros métodos, dependendo do ganho do controlador proporcional. Os resultados de estimação da TCO apresentam agum ruído, que pode ser reduzido utilizando-se um filtro digital. E as estimativas da TCO podem ser comprometidas se a estimação prévia do coeficiente global de transferência de oxigênio para o aerador ligado não for precisa.

O método de estimação proposto neste trabalho é baseado no método PWM, sendo dada atenção especial à estimativa prévia do coeficiente global de transferência de oxigênio e aos níveis de ruído, os quais podem ser reduzidos pelo Filtro de Kalman.

1.2 ΜΟΤΙVΑÇÃO

Em sistemas de lodo ativado a disponibilidade de informações em tempo real sobre a atividade metabólica dos microorganismos (representada pela TCO) é de fundamental importância para o monitoramento e o controle do processo. Entretanto, a carência de sensores confiáveis e em tempo real, para medir tal variável, tem se tornado um problema relevante nas plantas de tratamento de águas residuais.

De maneira a superar este incoveniente uma técnica de estimação, sugerida neste trabalho, é aplicada no desenvolvimento de um sensor por software para determinação da TCO em tempo real. O sensor proposto consiste de um sensor de oxigênio dissolvido e um algoritmo de Filtro de Kalman aplicados a um reator de lodo ativado em escala de bancada, no qual a concentração de oxigênio dissolvido é controlada. O Filtro de Kalman estima os valores da TCO por meio das medições de oxigênio dissolvido e das equações dinâmicas que representam o balanço de massa de oxigênio do sistema.

1.3 Contribuições

As principais contribuições deste trabalho são:

- ✓ Fornecer um método confiável para a determinação do coeficiente global de transferência de oxigênio em sistemas de lodo ativado;
- ✓ Fornecer um método confiável para a estimação da taxa de consumo de oxigênio em reatores de lodo ativado, nos quais o sistema de aeração opera baseado em sinais PWM, e que possa ser aplicado em situações de monitoramento em tempo real.

1.4 OBJETIVO GERAL

Desenvolver um sensor por software, baseado em um algoritmo de Filtro de Kalman, para estimar a taxa de consumo de oxigênio em um reator de lodo ativado, no qual a concentração de oxigênio dissolvido é controlada por meio de um aerador acionado por um sinal PWM.

1.5 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- ✓ Estudar a dinâmica do oxigênio dissolvido em reatores de lodo ativado e os principais métodos empregados na determinação de suas grandezas mais importantes;
- ✓ Desenvolver uma maneira confiável de estimar o coeficiente global de transferência de oxigênio em sistemas de lodo ativado;

- ✓ Avaliar o efeito do ciclo de trabalho do sinal PWM na transferência de oxigênio para o sistema e desenvolver uma relação entre tais grandezas que possa ser aplicada em um algoritmo para o controle da concentração de OD e para a estimação da TCO;
- ✓ Desenvolver e aplicar o algoritmo de controle da concentração de oxigênio dissolvido e de estimação da TCO em um reator de lodo ativado em escala de bancada, usando as equações do Filtro de Kalman.

1.6 TRABALHOS PUBLICADOS

As pesquisas originadas desta dissertação de mestrado renderam as seguintes publicações:

- ✓ F. J. S. Silva, S. Y. C. Catunda, J. V. F. Neto, e A. C. van Haandel, "Dissolved oxygen PWM control and oxygen uptake rate estimation using Kalman Filter in activated sludge systems", in 2010 IEEE Instrumentation & Measurement Technology Conference Proceedings, Austin, TX, USA, 2010, p. 579-584;
- ✓ F. S. B. C. Lima, F. J. S. Silva, S. Y. C. Catunda, e J. V. da Fonseca Neto, "Continuous-time identification of a PWM aerated bench scale activated sludge reactor using state-variable filters", in *Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC), 2011 IEEE*, 2011, p. 1-5.

1.7 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

Este trabalho está organizado em 5 capítulos.

No capítulo 2 é apresentado, de forma sucinta o processo de lodo ativado, procurando destacar o papel da dinâmica do oxigênio dissolvido em tais sistemas, bem como as princiapis variáveis envolvidas neste modelo dinâmico.

No capítulo 3 é apresentado o método proposto para a estimação da TCO, procurando destacar o papel do Filtro de Kalman no cálculo da taxa de respiração e o papel do algoritmo de regressão não linear na determinação das quantidades de interesse para as equações do Filtro.

No capítulo 4 são apresentados os resultados de simulação e os resultados experimentais, utilizados para a avaliação do método proposto. Comparações com o método de regressão linear (método clássico) são também realizadas de maneira a validar o método sugerido neste trabalho.

Por fim, no capítulo 5 são apresentadas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

2 PROCESSO DE LODO ATIVADO

O processo de lodo ativado surgiu a partir dos experimentos de Lockett e Arden, que estudavam maneiras mais eficientes de usar os processos biológicos para a remoção do material orgânico. Eles já haviam constatado na época, que a aeração de águas residuais resultava na remoção de matéria orgânica e ao mesmo tempo formava flocos macroscópicos de microorganismos que poderiam ser removidos da fase líquida por meio de decantação, gerando assim uma camada de lodo biológico. Entretanto, os resultados obtidos até então não eram satisfatórios, o processo de remoção orgânica ainda era muito lento [4].

Foi somente em 1914 que Locket e Arden obtiveram resultados significativos, quando descobriram que a adição do lodo biológico a uma batelada de águas residuais era capaz de acelerar o processo de remoção do material orgânico. Essa capacidade do lodo de acelerar o processo fez com que ele fosse chamado de "lodo ativado".

O princípio de funcionamento do processo continua o mesmo desde sua concepção: colocam-se as águas residuais em contato com o lodo ativado e então aera-se a mistura. Os microorganismos então interagem com as substâncias orgânicas, usando-as como fonte de energia (catabolismo) e como fonte material para a síntese de nova massa molecular (anabolismo).

Melhoras significativas no processo foram sendo incorporadas nas décadas seguintes, possibilitando uma maior eficiência na remoção de material orgânico e uma maior estabilidade operacional do sistema.

Atualmente há inúmeras variantes no processo de lodos ativados, indo desde os sistemas de pequeno porte, tais como os sistemas que operam na forma de bateladas, até sistemas de grande porte, que é o caso dos sistemas de aeração prolongada, onde as dimensões dos reatores são bem maiores. Tais sistemas podem ser agrupados, de acordo com o fluxo de afluente dentro do reator, em duas classes: sistemas de fluxo contínuo e sistemas de fluxo intermitente (batelada) [5].

Nos sistemas de fluxo contínuo as águas residuais entram e saem continuamente do reator. Estes sistemas são constituídos essencialmente por (ver Figura 2.1): tanque de aeração (reator), tanque de sedimentação, recirculação de lodo e retirada do lodo excedente.



Figura 2.1 – Esquema básico de um processo de lodo ativado.

No reator ocorrem as reações bioquímicas de remoção de material orgânico e, em determinadas condições, de nitrogênio e fósforo. Nele, os microorganismos utilizam o substrato e o oxigênio disponíveis para se multiplicarem. No tanque de sedimentação a biomassa (lodo) é decantada, permitindo que o efluente final saia clarificado. Parte do lodo decantado é recirculado para o reator, para garantir uma elevada concentração de biomassa no mesmo, a qual é responsável pela eficiência do sistema. A outra parte é retirada como lodo excedente para não sobrecarregar o reator (o que poderia dificultar a transferência de oxigênio para todos os microorganismos) e o tanque de sedimentação (o que poderia causar a saída de parte da biomassa junto com o efluente final, deteriorando, consequentemente, sua qualidade).

Por sua vez, nos sistemas de batelada a entrada de afluente ocorre de forma descontínua no reator. Em tais sistemas, todas as etapas de tratamento ocorrem em um único tanque e, desta maneira, elas passam a ser simplesmente sequências no tempo, e não unidades separadas, como ocorre nos sistemas de fluxo contínuo. Na Figura 2.2 tem-se um esquema simplificado das estapas que geralmente ocorrem em sistemas de tratamento deste tipo. Estas etapas podem ser caracterizadas como:

- ✓ Enchimento: entrada do afluente no reator;
- ✓ Reação: aeração e/ou mistura do afluente e lodo ativado no reator;
- ✓ Sedimentação: separação do lodo biológico do efluente tratado;
- ✓ Descarte do efluente tratado: retirada do efluente do reator;
- ✓ Repouso: ajuste dos ciclos e retirada do lodo excedente.



Figura 2.2 – Etapas de um sistema de tratamento por lodo ativado operando na forma de bateladas.

A duração de cada etapa depende basicamente das variações da carga afluente, dos objetivos operacionais do tratamento e das características da biomassa no sistema.

Como o objetivo deste trabalho é medir a taxa de consumo de oxigênio, somente os componentes ou os ciclos de operação do sistema relacionados às reações de oxidação orgânica serão considerados nesta pesquisa, e ela limita-se a estudar a dinâmica do oxigênio dissolvido dentro do reator biológico, que é a principal fonte de informação para a determinação da TCO em tempo real.

2.1 **REATOR BIOLÓGICO**

Reatores biológicos se caracterizam como locais nos quais reações bioquímicas convertem substrato em produtos. No caso dos reatores aeróbios utilizados em sistemas de lodo ativado, três importantes reações bioquímicas ocorrem simultaneamente [6]:

- Oxidação: responsável pela remoção da matéria orgânica, na qual as bactérias convertem os compostos biodegradáveis, na presença de oxigênio, em energia e outros produtos finais;
- Biossíntese: responsável pela multiplicação dos microorganismos, onde a matéria orgânica é utilizada na formação de novas células;
- ✓ Auto-oxidação: reação na qual as bactérias utilizam a própria massa celular para a obteção da energia de que necessitam para se manterem vivas.

Estas reações descrevem o metabolismo dos microorganismos dentro do reator de lodo ativado: as bactérias utilizam a matéria orgânica e o oxigênio dissolvido para obter energia (catabolismo) e produzir novas células (anabolismo), e liberam dióxido de carbono e água como produtos das reações. Na Figura 2.3 tem-se uma representação de tais relações [7].

Informações a respeito de tais reações biológicas, caracterizadas pela taxa de consumo do substrato (matéria orgânica) e pela taxa de crescimento do lodo ativado (microorganismos), são úteis para o monitoramento do processo e podem ser utilizadas para quantificar o seu desempenho. Entretanto, estas informações não são acessíveis diretamente, sendo necessária a aplicação de procedimentos de medição que possam fornecê-las de forma confiável e em tempo real.



Figura 2.3 - Relação entre consumo de oxigênio dissolvido, consumo de substrato e crescimento de biomassa.

Como o oxigênio dissolvido é uma das poucas variáveis que podem ser confiavelmente medidas, a respirometria⁴ tem sido amplamente empregada como uma ferramenta para a obtenção de tais informações, visto que o consumo de oxigênio pelos microorganismos está diretamente relacionado com suas atividades metabólicas (ver Figura 2.3).

Por esse motivo, a respiração, ou taxa de consumo de oxigênio (TCO), tem sido considerada a mais importante variável nos sistemas de lodo ativado e a sua medição é o enfoque deste trabalho.

2.2 DINÂMICA DO OXIGÊNIO DISSOLVIDO

O oxigênio dissolvido (OD) é uma variável importante para os processos aeróbios de lodo ativado e portanto deve ser controlado. Concentrações de OD abaixo de um certo valor representam um fator limitante na capacidade de tratamento do sistema, uma vez que há uma baixa disponibilidade de oxigênio para as reações de oxidação orgânica. Em contrapartida, concentrações de OD muito altas representam um desperdício de energia, pois aumenta-se desnecessariamente a exigência do sistema de aeração [4].

Entretanto o valor ótimo da concentração de OD não é o aspecto mais relevante nos sistemas de lodo ativado. O comportamento do oxigênio dissolvido ao longo do tempo dentro do reator tem uma relação direta com muitas particularidades do processo, tanto refletindo quanto determinando as cinéticas das reações e, portanto, tal dinâmica representa uma fonte de informação valiosa para a caracterização do processo.

Além disso, a dinâmica de OD pode ser observada de forma relativamente simples, por meio de sensores de OD disponíveis no mercado, e com relativamente baixo ruído de medição. Ela também pode ser facilmente manipulada, de acordo com as necessidades do processo, por meio de sistemas de aeração mecânicos ou de ar difuso [8]. Por estes motivos, a dinâmica de oxigênio dissolvido tem sido um assunto bastante estudado sob as perspectivas de modelagem e estimação de estados em tempo real.

⁴ Respirometria é a medição e interpretação da taxa de consumo de oxigênio pelos microorganismos sob condições experimentais bem definidas.

Basicamente, a dinâmica de OD descreve o balanço entre a entrada de oxigênio no licor misto⁵ e o seu consumo pelos microorganismos. Nesta seção serão abordados tanto o modelo em tempo contínuo quanto o seu correspondente em tempo discreto.

2.2.1 MODELO CONTÍNUO

A dinâmica de oxigênio dissolvido é afetada por uma série de fatores, tais como: concentrações de substrato e biomassa, concentração de oxigênio de saturação, concentração de oxigênio do esgoto afluente, transferência de oxigênio da fase gasosa para a fase líquida, idade do lodo, entre outras.

Entretanto, um modelo de ordem reduzida proposto primeiramente em [9] tem sido adotado em muitas pesquisas para descrever a concentração de oxigênio dissolvido em um tanque de aeração completamente misturado:

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{Q_{in}(t)}{V(t)}c_{in}(t) - \frac{Q_{out}(t)}{V(t)}c(t) + K_L a(q(t))(c_{sat} - c(t)) - R(t), \qquad (2.1)$$

em que:

c(t)	é a concentração de OD no licor misto;
$c_{in}(t)$	é a concentração de OD no afluente;
C _{sat}	é a concentração de saturação do OD;
$Q_{in}(t)$	é o fluxo do afluente;
$Q_{out}(t)$	é o fluxo do efluente
V(t)	é o volume do licor misto no reator;
$K_L a(q(t))$	é a função transferência de oxigênio;
q(t)	é o fluxo de ar gerado pelo sistema de aeração;
R(t)	é a TCO.

Matematicamente, a expressão (2.1) descreve a taxa de variação da concentração de oxigênio dissolvido no reator de lodo ativado. O primeiro e o segundo termo do lado direito caracterizam as contribuições positivas e negativas para a concentração de OD devido ao afluente e efluente, respectivamente. Na maioria dos sistemas, Q_{in} e Q_{out} são iguais, o que

⁵ O licor misto é um jargão usado para representar a mistura de águas residuais e lodo ativado.

mantém o volume do licor misto constante. O terceiro termo descreve a taxa de transferência de oxigênio (TTO) para o licor misto devido ao sistema de aeração. E o último termo caracteriza o consumo de oxigênio pelos microorganismos.

Em reatores operando em regime de bateladas, como não há entrada e saída de esgoto durante o ciclo de reação ($Q_{in}(t) = Q_{out}(t) = 0$), a expressão (2.1) pode ser simplificada para:

$$\frac{dc(t)}{dt} = K_L a(q(t))(c_{sat} - c(t)) - R(t).$$
(2.2)

Para obter R(t) usando a expressão (2.2) tanto o termo diferencial quanto o termo relacionado à transferência de oxigênio devem ser determinados. Isto será detalhado no capítulo seguinte.

2.2.2 MODELO DISCRETO

Modelos discretos são aqueles nos quais uma ou mais variáveis podem mudar de valor somente em instantes discretos de tempo, e têm sido amplamente utilizados em sistemas digitais⁶ para representar os sistemas dinâmicos [10]. Como a estimação da TCO, neste trabalho, é realizada por meio de um algoritmo executado em um computador, torna-se necessário desenvolver um modelo em tempo discreto para representar a dinâmica do oxigênio dissolvido.

Existem várias maneiras de se obter um modelo discreto a partir de seu modelo equivalente em tempo contínuo. Neste trabalho um extrapolador de ordem zero é empregado, conforme descrito em [11], para discretizar o modelo representado pela expressão (2.2).

Primeiramente, a expressão (2.2) pode ser reescrita como

$$\frac{dc(t)}{dt} = A(t) \cdot c(t) + B(t), \qquad (2.3)$$

em que:

$$A(t) = -K_L a(q(t)),$$

$$B(t) = K_L a(q(t)) \cdot c_{sat} - R(t).$$

⁶ Computadores, microcontroladores e outros dispositivos usados para o processamento de sinais digitais.

Para discretizar (2.3) é necessário determinar a relação entre as variáveis do sistema nos instantes de amostragem. Desse modo, dada a concentração de OD em um instante de amostragem t_k e assumindo-se que A(t) e B(t) são constantes dentro de cada período de amostragem, é possível calcular o valor da concentração em um determinado instante de tempo t, onde $t_k < t < t_{k+1}$, resolvendo-se (2.3), o que resulta em:

$$c(t) = e^{A(t_k) \cdot (t-t_k)} \cdot c(t_k) + \int_0^{t-t_k} e^{A(t_k) \cdot s} ds \cdot B(t_k)$$

= $\Phi(t, t_k) \cdot c(t_k) + \Gamma(t, t_k).$ (2.4)

Considerando somente os instantes de amostragem e uma amostragem periódica de período *h*, onde $t_k = k \cdot h$, é possível reecrever (2.4) como

$$c(kh+h) = e^{A(kh)\cdot h}c(kh) + \int_0^h e^{A(kh)\cdot s} ds \cdot B(kh).$$
(2.5)

Resolvendo a integral em (2.5) e subtraindo ambos os termos por c(kh) obtém-se

$$c(kh+h) - c(kh) = e^{A(kh) \cdot h} \cdot c(kh) + \frac{B(kh)}{A(kh)} \left(e^{A(kh) \cdot h} - 1 \right) - c(kh).$$
(2.6)

Simplificando (2.6) é possível obter

$$c(kh+h) = c(kh) + h^{*} (A(kh) \cdot c(kh) + B(kh)), \qquad (2.7)$$

em que

$$h^* = \frac{1}{A(kh)} \Big(e^{A(kh) \cdot h} - 1 \Big).$$
(2.8)

Para pequenos valores de h, (2.8) pode ser aproximada por $h^* = h$, o que conduz à aproximação por diferenças finitas da derivada em (2.3). Usando esta aproximação, inserindo os respectivos valores de A e B e simplificando a notação em (2.7), obtém-se

$$c(k+1) = c(k) + h \cdot \left[K_L a(q(k)) \cdot (c_{sat} - c(k)) - R(k) \right] + w(k).$$
(2.9)

A expressão (2.9) descreve o modelo equivalente em tempo discreto da expressão (2.2). O termo w(k) foi inserido para caracterizar as incertezas do modelo e os erros devido ao processo de amostragem.

2.3 DINÂMICA DO SENSOR DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO

A medição de oxigênio dissolvido, mais precisamente a medição da taxa de variação do oxigênio dissolvido, é a base da respirometria, a qual deve empregar algum elemento sensor para esta finalidade. Há basicamente dois tipos de tecnologia de medição disponíveis para os sensores de oxigênio dissolvido: a baseada em métodos ópticos e a baseada em métodos eletroquímicos. Como o sensor empregado neste trabalho é do tipo eletroquímico e o foco da pesquisa está na estimação da TCO e não na análise dos tipos de sensores de OD existentes, somente uma breve descrição da estrutura e funcionamento do sensor eletroquímico será apresentada nesta seção.

Os sensores baseados em métodos eletroquímicos são os mais utilizados para a medição de oxigênio dissolvido em corpos d'água devido ao seu custo relativamente baixo e à sua resposta linear. O princípio de medição deles é baseado na redução eletroquímica de oxigênio em uma célula amperométrica [12].

Tais sensores consistem de dois eletrodos de metal, dentro de uma câmara preenchida com uma solução eletrolítica e separada do meio por uma membrana seletiva. Para compor o catodo são utilizados metais nobres (por exemplo: Pt, Au ou Ag). Para o anodo pode-se utilizar metais como Zn, Cd, Al e Pb, nos quais uma diferença de potencial surgirá espontaneamente (sonda galvânica). Ou, no caso de sensores onde se faz necessária a polarização externa (sonda polarográfica), os anodos mais utilizados são constituídos por prata (Ag). Neste trabalho utiliza-se um sensor de OD polarográfico constituído por anodo de prata (Ag) e catodo de ouro (Au), o qual é polarizado com uma tensão negativa de cerca de - 0,8 V com relação ao anodo (eletrodo de referência). Na Figura 2.4 está representado um diagrama simplificado do sensor de OD polarográfico usado neste trabalho.



Figura 2.4 – Diagrama simplificado do sensor OD polarográfico com circuito de polarização [13].

Quando os sensores são colocados em um meio aquoso que contém oxigênio dissolvido, as moléculas de oxigênio atravessam a membrana e entram em contato com a solução eletrolítica que cerca os dois eletrodos. A membrana é semipermeável: permite que as moléculas de oxigênio passem através dela, mas bloqueia a passagem da maioria das moléculas que possam interferir nas reações químicas nos eletrodos. Quando as moléculas de oxigênio, dentro da solução eletrolítica, alcançam a superfície do catodo, o excesso de cargas negativas do catodo induz a reação de redução destas moléculas, formando íons OH⁻:

$$O_2 + 2H_2O + 4e^- \rightarrow 4OH^-$$

Simultaneamente à reação de redução do oxigênio no catodo, haverá a reação de oxidação da prata na superfície do anodo:

$$4Ag + 4Cl^{-} \rightarrow 4AgCl + 4e^{-}$$

Isto irá gerar uma corrente proporcional à quantidade moléculas de oxigênio atravessando a membrana.

O efeito combinado da difusão das moléculas de oxigênio através da membrana e das reações de oxidação e redução, produzem um comportamento semelhante a um sistema dinâmico de primeira ordem, o que resulta em um sinal de medição seguindo a taxa de variação da concentração de oxigênio dissolvido com um certo atraso [14].

Desse modo, o sinal de medição do sensor de oxigênio dissolvido pode ser modelado por [15]:

$$\tau_{y} \frac{dy(t)}{dt} = -y(t) + c(t), \qquad (2.10)$$

em que y(t) representa o sinal de medição do sensor de OD e τ_y a constante de tempo do sensor.

Uma representação em modelo discreto da expressão (2.10) pode ser obtida aplicando o mesmo procedimento descrito na seção anterior, o que resulta em:

$$y(k+1) = \left(1 - \frac{h}{\tau_y}\right) y(k) + \left(\frac{h}{\tau_y}\right) c(k).$$
(2.11)

2.4 TAXA DE TRANSFERÊNCIA DE OXIGÊNIO

Na maioria dos processos biológicos aerados, a taxa de transferência de oxigênio é diretamente proporcional ao gradiente de concentração de oxigênio, gerado pela diferença entre o valor de saturação (c_{sat}) e o valor atual de concentração de OD (c(t)) no líquido, com a constante de proporcionalidade sendo definida pelo coeficiente de transferência de massa volumétrico K_La [16]. Ela é representada pela seguinte expressão descrevendo a transferência de oxigênio da fase gasosa para a fase líquida, ou taxa de aeração:

$$TTO = K_L a(q(t)) \cdot (c_{sat} - c(t)).$$
(2.12)

O coeficiente de transferência de massa volumétrico K_La é também comumente conhecido como função tranferência de oxigênio (nomenclatura adotada para este trabalho). Tal nome é escolhido para destacar que ele depende de outras variáveis, tais como: temperatura, composição do afluente, parâmetros geométricos do reator e dos aeradores, fluxo de ar, etc. Mas como, sob condições de operação regular, a variável que mais afeta a função K_La é o fluxo de ar, ela pode ser suficientemente bem representada levando em consideração somente esta variável (motivo pelo qual somente o fluxo de ar aparece caracterizando a função K_La nas expressões). Esta dependência com o fluxo de ar é tipicamente não linear, conforme retratada na Figura 2.5.



Figura 2.5 - Forma típica da curva do coeficiente de transferência de massa volumétrico em função do fluxo de

Uma variedade de modelos físicos têm sido sugeridos em [17] para representar o comportamento da função K_La , com relação ao fluxo de ar, em sistemas de lodo ativado. Alguns destes modelos estão sumarizados na Tabela 2.1.

Modelo	Equação
Degrau	$K_L a = [0, k_I]$
Linear A	$K_L a = k_I . q$
Linear B	$K_L a = k_1 \cdot q + k_2$
Arco tangente	$K_L a = k_1 \cdot \tan^{-1}(k_2 \cdot q)$
Exponencial	$K_L a = k_1 \cdot (1 - \exp(-k_2 \cdot q))$
Piecewise	$K_L a = (k_1 + k_2.t).q$
Spline cúbico	$K_L a = f(q)$

Tabela 2.1 - Diferentes modelos para a função transferência de oxigênio

Em sistemas de tratamento em escala reduzida operando com aeradores pequenos do tipo liga/desliga (ex: bombas de aquário), podemos considerar que a função K_La assume somente dois valores: K_{max} quando os aeradores estão ligados e zero quando estão desligados [2]. Isso só é admissível se considerarmos que os parâmetros da função K_La variam de forma relativamente lenta e que a transferência de oxigênio do ar atmosférico para o licor misto possa ser negligenciada. Tais considerações têm se mostrado verdadeiras na maioria das aplicações [18].

Utilizando uma estratégia de controle baseada em modulação por largura de pulsos (PWM – *Pulse-Width Modulation*) para acionar os aeradores, é possível aproximar a função K_La por um valor médio efetivo durante o ciclo de aeração (intervalo de tempo entre aerações sucessivas, ver Figura 2.6). Isto é factível desde que o ciclo de aeração tenha um período total constante muito menor que a constante de tempo associada com a transferência de oxigênio para o sistema.

Supondo que as considerações no parágrafo anterior sejam verdadeiras, a função K_La pode ser matematicamente expressa por [3]:

$$K_m(k) = \frac{\tau(k)}{T} K_L a(q_{\max}) = \frac{\tau(k)}{T} K_{\max}, \qquad (2.13)$$

em que:

 $K_m(k)$ é o valor médio da função transferência de oxigênio durante o k-ésimo período; q_{max} é o fluxo de ar quando o aerador está ligado;

 $\tau(k)$ é o intervalo de tempo no qual o aerador permanece ligado;

é o período do ciclo de aeração;

Т

 K_{max} é o valor de $K_L a$ correspondente à q_{max} .



Figura 2.6 - Sinal PWM para o acionamento dos aeradores [3].

Para que a expressão (2.13) possa ser possa ser aplicada em estratégias de controle e na estimação da TCO dos sistemas que operam com aeração baseada em PWM, é necessário que se determine primeiramente o valor da função K_La quando os aeradores estão ligados (K_{max}). Uma estratégia para a estimação de K_{max} será apresentada no capítulo 3.

2.5 TAXA DE CONSUMO DE OXIGÊNIO

Conforme mencionado na seção 2.1, a TCO é considerada a variável mais importante para os sistemas de lodo ativado, uma vez que ela está intimamente relacionada com o crescimento do lodo biológico e com a biodegradação da matéria orgânica.

Com relação à caracterização das águas residuais, diversos parâmetros tais como constantes cinéticas, tempo de alimentação, tempo de detenção e relação alimento/microorganismos tendem a ser mais facilmente determinados com o auxílio de medidas respirométricas [19].

A TCO também é frequentemente utilizada como a variável de maior sensibilidade na modelagem do processo de lodos ativados. Um exemplo disto pode ser visto em [20], no qual ela é empregada para avaliar o efeito de substâncias tóxicas nos parâmetros e na estrutura do modelo de biodegradação de uma planta de tratamento de esgoto.

A taxa de respiração também pode ser utilizada para determinar a disponibilidade de substrato. Quando a colônia de bactérias tem removido completamente o carbono orgânico biodegradável do esgoto, a TCO cai para um nível baixo. Esta baixa respiração é chamada respiração endógena e representa o consumo de oxigênio necessário apenas para manter as
bactérias vivas. Já quando este lodo ativado no estado endógeno entra em contato novamente com o substrato presente no esgoto, a TCO sobe rapidamente até atingir um nível mais elevado. Este nível mais elevado representa a máxima taxa de respiração e ocorre devido a alta taxa com que as bactérias metabolizam as moléculas prontamente biodegradáveis⁷ do esgoto e se multiplicam, exigindo consequentemente um consumo maior de oxigênio dissolvido para tal finalidade. Por sua vez, quando os compostos orgânicos prontamente biodegradáveis têm se esgotado, a TCO irá diminuir, mas para um nível intermediário entre a respiração endógena e a máxima. Esta taxa de respiração é chamada taxa de respiração real e é limitada pela taxa na qual as bactérias quebram os compostos orgânicos maiores presentes no esgoto, em moléculas menores que podem ser metabolizadas pelos microorganismos. O conhecimento prévio destas taxas de biodegração pode ser utilizado para otimizar o controle do processo [15].

Uma outra aplicação comum da respirometria diz respeito ao gerenciamento de toxicidade, onde uma queda brusca na taxa de respiração em um respirômetro localizado na entrada de uma unidade de tratamento de águas residuais, pode ser utilizada para indicar a presença de compostos tóxicos. Este indicativo é então utilizado para acionar estratégias de controle com o objetivo de manter a integridade do sistema, uma vez que tais elementos tóxicos são nocivos aos microorganismos e podem comprometer, consequentemente, a unidade de tratamento.

Para que tais aplicações possam ser empregadas com sucesso é necessário desenvolver respirômetros e métodos de estimação confiáveis e em tempo real para a medição da TCO.

O método de estimação proposto neste trabalho necessita de um modelo que represente a taxa de respiração. Modelos do tipo caminho aleatório têm sido amplamente utilizados nos sistemas de lodo ativado para modelar a taxa de consumo de oxigênio, conforme pode ser observado em [1], [17], [18] e [21], entre outros. Esta abordagem tem se mostrado razoável para a representação desta variável em virtude da natureza variante no tempo da TCO e da indisponibilidade de informação sobre seu estado. Desse modo, o modelo caminho aleatório será usado neste trabalho para representar a taxa de respiração,

$$R(k) = R(k-1) + e_R(k), \qquad (2.14)$$

em que $e_R(k)$ é um ruído branco de média zero.

⁷ Moléculas menores capazes de atravessar facilmente a parede celular dos microorganismos.

3 ESTIMAÇÃO DA TCO

Uma característica comum aos processos de lodo ativado é a dificuldade de obter informações confiáveis sobre o estado atual das reações bioquímicas. Esta dificuldade está associada à um conjunto de fatores, dentre os quais vale destacar a natureza não linear das interações entre os microorganismos e o substrato e a grande variabilidade das condições de operacionais do sistema (fruto principalmente de mudanças imprevisíveis no fluxo e na concentração da carga orgânica do esgoto afluente).

Consequentemente, estimar a TCO em tais sistemas por meio do balanço de massa de oxigênio não é uma tarefa trivial. Além da natureza variável no tempo da taxa de consumo de oxigênio, outras complicações encontradas na estimação da TCO podem se originar do comportamento não linear da função transferência de oxigênio e de valores relevantes da constante de tempo do sensor [18].

A primeira dificuldade, referente ao comportamento variante no tempo da TCO, pode ser superada utilizando-se um algoritmo de Filtro de Kalman, uma vez que ele é capaz de acompanhar os estados das variáveis de um sistema.

Em sistemas de lodo ativado que operam com aeradores do tipo liga-desliga, o comportamento não linear da função transferência de oxigênio pode ser desprezado, supondose que não há variação no fluxo de ar, além daquela proveniente dos estados ligado e desligado dos equipamentos de aeração, e que a função K_La pode ser suficientemente bem descrita pela variação do ciclo de trabalho de um sinal PWM, conforme descrito na seção 2.4.

Por último, se considerarmos um ambiente com a concentração de oxigênio dissolvido controlada, a dinâmica do sensor de OD não terá qualquer efeito significativo, uma vez que não haverá variações expressivas nos níveis de concentração de oxigênio no licor misto. Uma outra alternativa poderia considerar a inclusão da dinâmica do sensor no balanço de massa de oxigênio e a posterior utilização desta expressão dinâmica de ordem mais elevada no algoritmo de Filtro de Kalman.

3.1 PERSPECTIVAS NA ESTIMAÇÃO DA TCO

Tentar estimar a taxa de consumo de oxigênio (R) a partir da expressão (2.2) pode se tornar uma tarefa relativamente simples se a função transferência de oxigênio ($K_La(q)$) e a concentração de saturação de oxigênio dissolvido (c_{sat}) são conhecidas com antecedência. Entretanto, na maioria das situações práticas, as variáveis e os parâmetros de um sistema de lodo ativado são totalmente desconhecidos *a priori*.

Em razão disto, um conjunto de estratégias para a determinação da função K_La e da TCO têm sido desenvolvidas, geralmente baseadas em medições da concentração de OD e do fluxo de ar e no conhecimento prévio da concentração de saturação c_{sat} .

Estratégias de estimação simultânea da função K_La e da TCO podem ser encontradas em [22] e [23], nas quais modelos aproximados para representar função K_La foram propostos (ver Tabela 2.1) e seus parâmetros foram estimados simultaneamente com a TCO por meio de um algoritmo de estimação recursivo.

Tais estratégias provaram ser pouco aplicáveis em situações reais, uma vez que o processo de lodo ativado não fornece dinâmica suficiente para uma boa estimação de todos os parâmetros da função K_La , durante condições normais de operação. Além disso, se somente as medições do fluxo de ar estão disponíveis, deverá ser impraticável rastrear qualquer efeito da função K_La e da TCO na concentração de OD, uma vez que ambas aparecem na mesma equação dinâmica do oxigênio dissolvido.

A estimação da TCO e da função K_La separadamente, tem mostrado ser factível por meio de experimentos na forma de bateladas. Tais experimentos consistem em, a partir de um estado de baixa concentração de oxigênio dissolvido, ligar a aeração em um instante de tempo t = 0 e desligar em $t = t_{off}$. Isto está representado na Figura 3.1 e resulta em dois conjuntos diferentes de equações, obtidas resolvendo-se a expressão (2.2) para os intervalos de presença e ausência de aeração [23]:

✓ Para $0 \le t \le t_{off} \implies K_L a = K_{max}$, uma solução aproximada de (2.2) resulta em

$$c(t) = c_{sat} \left(1 - e^{-K_{\max} \cdot t} \right) + c(0) - \frac{R}{K_{\max}}.$$
(3.1)

✓ Para $t > t_{off} \Rightarrow K_L a = 0$, a solução de (2.2) resulta em

$$c(t) = c(t_{off}) - R(t - t_{off}),$$
 (3.2)



em que $c(t_{off})$ é o valor de concentração de OD em $t = t_{off}$.

Figura 3.1 - Experimento na forma de batelada.

A taxa de respiração R e a função K_La (K_{max}) são consideradas constantes durante todo o período de teste: um valor constante para R pode ser confirmado pela linearidade na queda da concentração de OD na Figura 3.1, para $t > t_{off}$; e têm sido constatado que os parâmetros da função K_La variam de forma relativamente lenta na maioria das aplicações.

A partir de (3.2) a taxa de respiração *R* pode ser determinada e, uma vez de posse desta quantidade, basta substituí-la na expressão (3.1) para calcular o valor de K_{max} , assumindo que o valor de c_{sat} é conhecido.

Diante disto, pode-se concluir que a melhor estratégia é estimar a TCO e a função K_La de forma isolada, o que é geralmente realizado empregando-se um pequeno reator separado do tanque de aeração e uma amostra do licor misto. Deste modo, a amostra poderá ser submetida a certas variações em suas condições operacionais, para a determinação das quantidades de interesse, sem que isto afete as condições do processo.

Este trabalho também segue uma estratégia de estimação baseada em um experimento na forma de batelada:

- ✓ Numa primeira etapa os parâmetros referentes à taxa de transferência de oxigênio de oxigênio, nomeadamente o coeficiente de transferência de massa K_{La} (K_{max}) e a concentração de saturação c_{sat} , são determinados a partir de um algoritmo de regressão não linear e um conjunto de dados de concentração de oxigênio dissolvido obtidos com a aeração ligada;
- ✓ Já na segunda etapa, os valores de K_{max} e c_{sat} , obtidos anteriormente, são utilizados em um algoritmo de Filtro de Kalman para calcular a TCO em tempo real em um reator aeróbio com concentração de oxigênio dissolvido controlada.

3.2 METODOLOGIA DE ESTIMAÇÃO

Conforme mencionado na seção anterior, a melhor estratégia para a determinação da TCO é aplicando métodos para a estimação isolada da taxa de respiração e dos parâmetros relacionados à transferência de oxigênio.

Por conta disto, o método de estimação desenvolvido neste trabalho utiliza um procedimento inicial para a determinação dos parâmetros relacionados a taxa de transferência de oxigênio e em seguida realiza um outro procedimento para a determinação da TCO.

3.2.1 DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS RELACIONADOS À TTO

Há uma diversidade de técnicas empregadas para a estimação do coeficiente de transferência de massa volumétrico (K_La) e da concentração de saturação de oxigênio dissolvido, sendo as baseadas na medição da concentração de OD, as mais utilizadas em reatores de lodo ativado.

Uma dessas alternativas pode ser encontrada em [1]. Ela utiliza valores de concentração de oxigênio dissolvido, obtidos enquanto o aerador permanece ligado, e um algoritmo de regressão não linear para encontrar os parâmetros de uma função não linear que melhor se ajuste aos dados observados.

Esta função não linear pode ser obtida resolvendo-se a equação diferencial (2.2) para o período em que a aeração está ligada (a descrição deste procedimento matemático encontra-se disponível no Apêndice A), o que resulta em

$$c(t) = c_{sat} \left(1 - e^{-K_{\max} \cdot t} \right) + c(0) \cdot e^{-K_{\max} \cdot t} + \frac{R}{K_{\max}} \left(e^{-K_{\max} \cdot t} - 1 \right),$$
(3.3)

em que c(0) é o valor inicial da concentração de OD. A parte não linear desta função está representada pelos termos exponenciais.

Deve-se reassaltar que as medições de oxigênio dissolvido são realizadas por um sensor eletroquímico, o qual não responde instantaneamente a uma variação na concentração devido ao efeito de sua própria dinâmica. Por conta disto, o uso da expressão (3.3) pode conduzir a estimativas incorretas a respeito dos valores de K_{max} e c_{sat} .

É necessário portanto desenvolver uma expressão que leve em consideração a dinâmica do sensor na observação, sendo portanto, mais apropriada para a estimação das quantidades relacionadas à transferência de oxigênio. Esta expressão pode ser obtida resolvendo-se a equação diferencial (2.10), o que resulta em:

$$f(t,\beta) = y(t) = \frac{c(0)}{(1-\tau_{y}\cdot K_{\max})} \left(e^{-K_{\max}\cdot t} - e^{-t/\tau_{y}} \right) + c_{sat} \left(1 - e^{-t/\tau_{y}} \right) + \frac{c_{sat}}{(\tau_{y}\cdot K_{\max} - 1)} \left(e^{-K_{\max}\cdot t} - e^{-t/\tau_{y}} \right) + \frac{R}{K_{\max}} \left(e^{-t/\tau_{y}} - 1 \right) + \frac{R}{K_{\max} \left(1 - \tau_{y}\cdot K_{\max} \right)} \left(e^{-K_{\max}\cdot t} - e^{-t/\tau_{y}} \right) + y(0) \cdot e^{-t/\tau_{y}},$$
(3.4)

em que y(0) é o valor inicial da medição e beta representa o conjunto de parâmetros. Os procedimentos matemáticos empregados na obtenção da expressão (3.4) estão descritos no Apendice B.

O método de regressão não linear juntamente com a expressão (3.4), foram escolhidos para a determinação dos parâmetros em questão, pois apresentam uma forma direta de acesso aos parâmetros (sem qualquer transformação intermediária), relacionam variáveis acessíveis facilmente (as medições de concentração de OD y e os instantes de tempo t em que elas são realizadas) e renderam bons resultados de simulação.

Para que a expressão (3.4) possa ser usada no algoritmo de regressão não linear devese assumir que K_{max} , $c_{\text{sat}} \in R$ não variem significativamente durante o período em que as observações são realizadas. Isto pode ser garantido na prática, uma vez que a função K_{La} e a temperatura⁸ variam lentamente sob operação regular e também, a TCO pode ser mantida em sua fase endógena, durante a qual é verificada não variar de forma significativa.

De posse dos dados de concentração de OD, um algoritmo de regressão não linear pode então ser utilizado para ajustar o modelo, representado pela expressão (3.4), aos dados previamente coletados, de maneira a obter o melhor conjunto de parâmetros, nomeadamente

⁸ O valor de c_{sat} é dependente da temperatura.

 K_{max} , c_{sat} , R e τ_y . Para uma boa conversão do algoritmo, uma inicialização adequada dos parâmetros é requerida.

O melhor ajuste do modelo para um conjunto de dados de observação, e consequentemente, a melhor combinação de parâmetros, é obtida encontrando-se o menor valor possível para a soma dos quadrados dos resíduos (diferença entre a curva ajustada, ou modelo, e os dados) [24]. O algoritmo responsável por esta tarefa é o *nlinfit* presente no software MATLAB.

Maiores detalhes sobre regressão não linear e métodos computacionais empregados na estimação de parâmetros podem ser encontrados no Apêndice C e nas referências [25] e [26].

3.2.2 MEDIÇÃO DA TCO EM TEMPO REAL

Após a etapa inicial de determinação das grandezas referentes à taxa de transferência de oxigênio, nomeadamente K_{max} e c_{sat} , e da constante de tempo do sensor τ_y , segue-se a etapa de determinação da TCO em tempo real.

Durante esta etapa, um algoritmo de Filtro de Kalman é utilizado para o cálculo da TCO e a concentração de oxigênio dissolvido é controlada em torno de um certo valor de referência.

A TCO é determinada com base nos modelos previamente definidos para a dinâmica de OD e para a taxa de respiração, e em valores de concentração de oxigênio dissolvido. Os modelos são adequadamente inseridos nas equações de um algoritmo de Filtro de Kalman e incorporam os mesmos parâmetros obtidos durante o procedimento anterior, enquanto os valores de OD são obtidos por meio de um sensor eletroquímico instalado no reator.

A concentração de oxigênio dissolvido, por sua vez, é mantida em torno de um certo valor de referência utilizando-se bombas de aquário que são acionadas por um sinal PWM. O intervalo de tempo em que o aerador deve permanecer ligado depende da diferença entre o valor de referência e o valor atual da concentração de oxigênio dissolvido, conforme será melhor descrito na próxima seção.

3.3 SISTEMA DE CONTROLE E ESTIMAÇÃO

A implementação de estratégias para o controle da concentração de oxigênio dissolvido em sistemas de lodo ativado é justificada por uma série série razões, sendo as mais comuns relacionadas ao processo e à interesses econômicos.

Por se tratar de um processo aeróbio, é interessante manter a concentração de OD alta o suficiente para garantir um fornecimento adequado de oxigênio aos microorganismos, e com isto, manter um ambiente adequado para a reação de oxidação orgânica. Entretanto, uma concentração excessivamente alta pode causar um alto consumo de energia e ainda deteriorar a qualidade do lodo. Portanto há a necessidade de manter a concentração de OD dentro de certos limites.

Neste trabalho, o controle da concentração de OD além de satisfazer as razões descritas no parágrafo anterior, possui um benefício adicional importante relacionado com a estimação da TCO: ele permite o uso de um modelo linear para a função K_La , conforme foi descrito na seção 2.4, tornando possível o uso de um Filtro de Kalman padrão na estimação da taxa de consumo de oxigênio.

Uma vez que um sinal PWM é usado para controlar os aeradores, a expressão (2.9), representando a dinâmica do oxigênio dissolvido dentro do reator, pode ser reescrita como:

$$c(k+1) = c(k) + h \left[K_m(k) (c_{sat} - c(k)) - R(k) \right] + w(k).$$
(3.5)

A variável de controle utilizada é a taxa de aeração, a qual deverá ser ajustada de acordo com o ciclo de trabalho do sinal PWM. Para tal estratégia de controle esta variável pode ser definida como:

$$u(k) = K_m(k) (c_{sat} - \hat{c}(k)),$$
 (3.6)

em que $\hat{c}(k)$ é a concentração de oxigênio dissolvido estimada pelo Filtro de Kalman.

Um controlador proporcional é implementado com o objetivo de manter a concentração de oxigênio dissolvido em torno de um certo valor de referência. Embora este tipo de controlador apresente um erro de estado permanente, ele satisfaz plenamente as necessidades deste trabalho, uma vez que o enfoque principal está na determinação da TCO e não no controle preciso do nível de concentração de oxigênio dissolvido no reator.

Com esse controlador proporcional é possível determinar o valor da taxa de aeração por:

$$u(k) = kp \cdot e(k) = kp \cdot \left(c_{ref} - \hat{c}(k)\right), \qquad (3.7)$$

em que c_{ref} é o valor de referência para a concentração de OD e kp é o ganho do controlador proporcional. Na expressão acima foi utilizado o valor estimado $\hat{c}(k)$ ao invés do valor medido y(k), em virtude do primeiro apresentar menos ruído, produzindo portanto, melhores resultados no controle da concentração de oxigênio dissolvido e na estimação da TCO.

Combinando-se as expressões (2.13), (3.6) e (3.7) é possível determinar o intervalo de tempo $\tau(k)$, no qual as bombas deverão permanecer ligadas durante o *k*-ésimo período de aeração:

$$\tau(k) = \frac{kp \cdot e(k) \cdot T}{K_{\max} \left(c_{sat} - \hat{c}(k) \right)}.$$
(3.8)

Um diagrama do sistema de controle do oxigênio dissolvido e estimação da TCO pode ser visualizado na Figura 3.2.



Figura 3.2 – Diagrama de blocos do sistema de controle da concentração de OD e estimação da TCO.

Para este sistema as entradas são o valor de referência da concentração de OD (c_{ref}) e a TCO (R). A primeira estabelece um valor para concentração de oxigênio dissolvido, podendo ser alterada de acordo com as necessidades do processo, já a segunda caracteriza-se por uma entrada aleatória representando o metabolismo dos microorganismos no reator.

As saídas do sistema são representadas pela concentração de OD estimada (\hat{c}) e pela TCO estimada (\hat{R}). A primeira é utilizada para fins de controle, enquanto a segunda constitui o principal objetivo deste trabalho.

O bloco kp representa o ganho do controlador proporcional e o bloco PWM é o responsável pela determinação do intervalo de tempo τ a cada ciclo de aeração. Este intervalo de tempo constitui a variável manipulada do sistema.

O bloco **Reator** representa o modelo dinâmico do reator de lodo ativado, o qual é descrito pela expressão (3.5). A dinâmica das observações está representada pelo bloco **Sensor** e é descrita pela expressão (2.11).

O bloco **Filtro de Kalman** é o responsável pela estimação da concentração de oxigênio dissolvido e da taxa de respiração. Ele possui como entradas a taxa de aeração no instante de tempo anterior u(k-1), e a observação atual da concentração de OD y(k). A primeira é utilizada em um primeiro momento para a determinação das estimativas *a priori*, enquanto a segunda é utilizada em um segundo momento para a correção das primeiras estimativas, fornecendo portanto, estimativas *a posteriori*. O funcionamento deste bloco será melhor descrito na próxima seção.

3.4 FILTRO DE KALMAN

O Filtro de Kalman (FK) pode ser considerado uma ferramenta matemática capaz de fornecer uma forma computacional recursiva de estimar os estados de um sistema dinâmico linear, perturbado por ruído branco gaussiano, utilizando medições linearmente relacionadas com os estados, mas também corrompidas por ruído branco gaussiano [27].

O FK é uma ferramenta matemática no sentido em que ele é construído a partir de modelos matemáticos, ou seja, um conjunto de equações que descrevem um determinado sistema dinâmico. Uma vez que os modelos são aproximações dos sistemas reais, eles introduzem um grau de incerteza nos valores inferidos para os estados do sistema, assim como as medições. Tais incertezas podem ser descritas usando probabilidade.

O que o Filtro de Kalman faz é inferir os valores para os estados baseado no modelo do sistema e nas medições, levando em consideração as distribuições de probabilidade de cada um.

De forma simplificada o FK funciona da seguinte forma [28]:

Inicialmente, uma predição dos estados é realizada baseada no modelo do sistema.
 Uma medida das incertezas desta predição (covariância) é também calculada utilizando as distribuições de probabilidade de cada estado;

- ✓ Em seguida, pesos são calculados para cada estado a ser estimado com base nas incertezas da predição e da observação. Estes pesos serão utilizados para corrigir as estimativas da predição, de modo a garantir que os valores com uma incerteza menor sejam considerados mais "verdadeiros";
- ✓ Posteriormente, ocorre a correção das estimativas preditas. A equação responsável por esta correção aplica os pesos calculados anteriormente ao erro entre o valor atual da medição e o valor atual da estimativa da medição (observação), e então adiciona este resultado à estimativa predita;
- ✓ Por fim, é calculada uma medida das incertezas (covariância) dos estados após a correção, utilizando as incertezas da predição e os pesos.

Todo este processo se repete a cada nova observação, produzindo estimativas estatisticamente ótimas sob o ponto de vista das distribuições de probabilidade dos estados e da observação.

3.4.1 EQUAÇÕES DO FILTRO DE KALMAN

Conforme descrito na seção anterior, o Filtro de Kalman estima os estados de um sistema em um dado momento e então melhora esta estimativa incorporando informações da observação.

Desta forma, as equações do Filtro podem ser separadas em dois grupos: equações de predição e equações de correção. As equações de predição são responsáveis por predizer o valor atual dos estados e da covariância antes que o valor da medição esteja disponível, obtendo assim estimativas *a priori*. Já as equações de correção são responsáveis por incorporar um novo valor de medição na estimativa *a priori* para obter uma estimativa *a posteriori* melhorada [29].

As equações utilizadas na predição estão representadas abaixo:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k}(-) = \mathbf{F}\hat{\mathbf{x}}_{k-1}(+) + \mathbf{G}u_{k-1};$$
(3.9)

$$\mathbf{P}_{k}(-) = \mathbf{F}\mathbf{P}_{k-1}(+)\mathbf{F}^{\mathrm{T}} + \mathbf{Q}.$$
(3.10)

As expressões (3.9) e (3.10) são responsáveis pela predição das estimativas dos estados e covariância, respectivamente, no instante de tempo *k*. O sinal menos entre parênteses é usado para enfatizar que tais equações produzem estimativas *a priori*.

A matriz $\hat{\mathbf{x}}$ representa as estimativas dos estados; a matriz \mathbf{F} representa a matriz de transição de estados do sistema e relaciona os estados no instante de tempo *k*-1 com os estados no instante de tempo *k*; e a matriz \mathbf{G} relaciona a entrada de controle *u* com os estados. As matrizes $\mathbf{F} \in \mathbf{G}$ são determinadas de acordo com o modelo do sistema dinâmico linear em questão.

A matriz **P** representa a matriz de covariância da incerteza de estimação e a matriz **Q** representa a matriz de covariância do ruído do processo. O valor de **Q** é cálculado com base nas incertezas do modelo dinâmico.

Já as equações utilizadas na correção estão listadas abaixo:

$$\mathbf{K}_{k} = \mathbf{P}_{k}(-)\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \left[\mathbf{H}\mathbf{P}_{k}(-)\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + r\right]^{-1}; \qquad (3.11)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_{k}(+) = \hat{\mathbf{x}}_{k}(-) + \mathbf{K}_{k} \left(y_{k} - \mathbf{H}\mathbf{x}_{k}(-) \right);$$
(3.12)

$$\mathbf{P}_{k}(+) = \left(\mathbf{I} - \mathbf{K}_{k}\mathbf{H}\right)\mathbf{P}_{k}(-).$$
(3.13)

O primeiro passo durante a correção é determinar os pesos, os quais são representados pelo vetor de ganhos de Kalman \mathbf{K}_k e obtidos pela expressão (3.11). Este vetor \mathbf{K}_k representa o conjunto de ganhos que minimizam a covariância do erro *a posteriori*. A matriz **H** é a matriz que define a relação linear entre os estados do sistema dinâmico e as medições e *r* representa a variância do erro de medição. A matriz **H** é determinada de acordo com o modelo de observação definido para o sistema.

O próximo passo é realizar a medição para obter y_k e então incorporá-la na equação de correção para produzir as estimativas *a posteriori*, conforme descrito em (3.12). Esta estimativa a posteriori é uma combinação linear da estimativa *a priori* $\hat{\mathbf{x}}_k(-)$ e da diferença ponderada entre a medição atual y_k e a predição da medição $\mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}_k(-)$. Esta diferença $(y_k - \mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}_k(-))$ é conhecida como inovação da medição ou resíduo.

O passo final é obter uma estimativa da covariância do erro *a posteriori*, conforme está representado em (3.13). O sinal de mais entre parênteses indica as equações que produzem estimativas *a posteriori*.

Após realizar cada par predição-correção, o processo é repetido e as estimativas *a posteriori*, anteriormente calculadas, serão usadas na predição das novas estimativas *a priori*.

Esta natureza recursiva é um dos principais atrativos do Filtro de Kalman para implementações práticas.

3.4.2 APLICAÇÃO DO FILTRO DE KALMAN NO MODELO DO SISTEMA

Para que o Filtro de Kalman possa ser aplicado ao sistema de lodo ativado em questão, é necessário primeiramente descrever tal sistema na forma de espaço de estados. Desta forma, considerando os estados como a concentração de OD e a TCO e utilizando as expressões (2.14) e (3.5), a dinâmica do sistema pode ser representada por:

$$\mathbf{x}_{k} = \mathbf{F}\mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{G}\boldsymbol{u}_{k-1} + \mathbf{B}\boldsymbol{w}_{k}, \qquad (3.14)$$

com

$$\mathbf{x}_{k} = \begin{bmatrix} c \\ R \end{bmatrix}_{k}; u_{k-1} = K_{m}(k-1) \cdot (c_{sat} - c(k-1)); \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ 0 & 1 \end{bmatrix}; \mathbf{G} = \begin{bmatrix} h \\ 0 \end{bmatrix}; w = N(0, \sigma_{w}^{2}).$$

A variável w_k representa de um ruído branco do processo, o qual é descrito por uma distribuição normal com média zero e variância σ_w^2 . Ela é usada, juntamente com a matriz **B** (matriz de ligação entre o ruído branco e os estados do sistema), para descrever as incertezas do modelo de oxigênio dissolvido e o comportamento aleatório da taxa de respiração.

Neste trabalho a matriz \mathbf{B} foi determinada por tentativa e erro de maneira a encontrar os valores que melhor representassem o comportamento observado no sistema de lodo ativado em escala de bancada:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} h^2/2 \\ h \end{bmatrix}.$$

A outra parte do modelo em espaço de estados representando as observações é representada por:

$$y_k = \mathbf{H}\mathbf{x}_k + v_k, \tag{3.15}$$

com

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}; v = N(0, \sigma_v^2).$$

A expressão (3.15) é usada para simular as medições de concentração de oxigênio dissolvido.

A matriz **H** define a relação linear entre os estados do sistema dinâmico e as medições e v_k descreve o ruído de medição, aqui representado por uma distribuição normal de média zero e variância σ_v^2 . A variância do ruído de medição deve ser escolhida de maneira a representar de forma satisfatória o sensor eletroquímico utilizado no reator.

Após a descrição do sistema na forma e espaço de estados, podemos aplicar as equações do Filtro de Kalman para estimar os estados, o que resulta em:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k}(-) = \mathbf{F}\hat{\mathbf{x}}_{k-1}(+) + \mathbf{G}\boldsymbol{u}_{k-1}; \qquad (3.16)$$

$$\mathbf{P}_{k}(-) = \mathbf{F}\mathbf{P}_{k-1}(+)\mathbf{F}^{\mathrm{T}} + \mathbf{Q}; \qquad (3.17)$$

$$\mathbf{K}_{k} = \mathbf{P}_{k}(-)\mathbf{H}^{\mathrm{T}} \left[\mathbf{H}\mathbf{P}_{k}(-)\mathbf{H}^{\mathrm{T}} + r\right]^{-1}; \qquad (3.18)$$

$$\hat{\mathbf{x}}_{k}(+) = \hat{\mathbf{x}}_{k}(-) + \mathbf{K}_{k} \left(y_{k} - \mathbf{H}\hat{\mathbf{x}}_{k}(-) \right);$$
(3.19)

$$\mathbf{P}_{k}(+) = \left(\mathbf{I} - \mathbf{K}_{k}\mathbf{H}\right)\mathbf{P}_{k}(-).$$
(3.20)

A variável de controle *u* é determinada pela expressão (3.7).

Os valores da matriz de covariância de ruído processo \mathbf{Q} são normalmente desconhecidos, entretanto podem ser determinados por tentativa e erro. Esta escolha deve considerar um compromisso entre entre sensibilidade à variações no tempo e rejeição aos efeitos do ruído. Neste trabalho os valores da matriz \mathbf{Q} são calculados pela expressão:

$$\mathbf{Q} = \operatorname{cov}(\mathbf{B}w) = \sigma_w^2 \mathbf{B} \mathbf{B}^{\mathrm{T}}.$$
(3.21)

A variância da medição é definida por $r = \sigma_v^2$.

E a matriz I representa a matriz Identidade dada por:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Conforme mencionado anteriormente, o Filtro de Kalman é um algoritmo recursivo, e como tal, ele precisa de valores iniciais para o vetor de estados $\hat{\mathbf{x}}(0)$ e para a matriz de covariância da incerteza de estimação $\mathbf{P}(0)$. A escolha de $\mathbf{P}(0)$ deve refletir a incerteza nas suposições com relação a $\hat{\mathbf{x}}(0)$, e em geral, ela apresenta valores elevados para os elementos de sua diagonal principal.

Neste trabalho o valor inicial do vetor de estados e da matriz de covariância são definidos como:

$$\hat{\mathbf{x}}(0) = \begin{bmatrix} 0\\0 \end{bmatrix};$$
$$\mathbf{P}(0) = \begin{bmatrix} 100 & 0\\0 & 100 \end{bmatrix}.$$

4 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados que ilustram o método proposto para a estimação da TCO. Inicialmente serão apresentados os resultados obtidos por meio de simulação no software MATLAB e, em seguida, os resultados obtidos em um reator de pequena escala.

4.1 **RESULTADOS DE SIMULAÇÃO**

Nas simulações que são apresentadas a seguir utilizou-se as equações descritas no capítulo anterior, as quais foram executadas em ambiente MATLAB, com os parâmetros e variáveis escolhidos de maneira a representar de forma satisfatória o comportamento real do sistema de lodo ativado existente na prática.

As equações usadas para gerar os dados do sistema foram:

$$c(k+1) = c(k) + h \cdot \left[K_m(k) \cdot (c_{sat} - c(k)) - R(k) \right] + w;$$
(4.1)

$$y(k+1) = \left(1 - \frac{h}{\tau_y}\right) y(k) + \left(\frac{h}{\tau_y}\right) c(k) + v.$$
(4.2)

Com:

- ✓ O valor do oxigênio dissolvido saturado dado por $c_{sat} = 8 \text{ mg/l}$;
- ✓ O intervalo de amostragem dado por h = 1/3600 h (1 s);
- ✓ O valor médio da função transferência de oxigênio dado por $K_m(k) = \left(kp \cdot \left(c_{ref} - \hat{c}(k) \right) / \left(c_{sat} - \hat{c}(k) \right) \right);$
- ✓ O ganho do controlador proporcional dado por kp = 100 e o valor de referência da concentração de OD dado por c_{ref} = 2 mg/l;
- ✓ O ruído branco do processo dado por $w = N(0, 0,001^2)$ e o ruído de medição dado por $v = N(0, 0,01^2)$;
- ✓ O valor da taxa de respiração dado por $R(k) = R(k-1) + e_R \operatorname{com} e_R = N(0, 0, 07^2);$

- ✓ A constante de tempo do sensor dada por τ_y = 6/3600 h (6 s);
- ✓ Os valores iniciais das variáveis do sistema foram $c(0) = 1 \text{ mg/l}, y(0) = 1 \text{ mg/l}, R(0) = 5 \text{ mg/l/h e } K_m(0) = 0 \text{ h}^{-1}.$

No algoritmo de estimação os seguintes valores foram utilizados:

- ✓ Os valores corretos de c_{sat} e K_m ;
- ✓ A matriz de covariância de ruído do processo dada por $\mathbf{Q} = (0, 1/h)^2 \mathbf{B} \mathbf{B}^{\mathrm{T}}$ com $\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} h^2/2 & h \end{bmatrix};$
- ✓ A variância do erro de medição dada por $r = 0,1^2$;
- ✓ Os valores iniciais dos estados dados por $\hat{\mathbf{x}}(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$;
- ✓ A matriz de covariância inicial dada por $P(0) = 100 \cdot I$.

A duração da simulação foi escolhida ser 60 minutos, sendo que após os 30 minutos iniciais um aumento abrupto de 10 mg/l/h na taxa de respiração foi forçado no sistema para simular a injeção de uma certa quantidade de substrato prontamente biodegradável⁹ no reator de lodo ativado. Os resultados desta simulação estão ilustrados nas Figuras 4.1 e 4.2.



Figura 4.1 - Concentrações de oxigênio dissolvido simulada e estimada.

⁹ Matéria orgânica solúvel rapidamente metabolizada pelos microorganismos.



Figura 4.2 - Taxas de respiração simulada e estimada.

Na Figura 4.1 estão ilustradas as curvas simulada, representando os valores de medição y, e estimada, representando os valores de concentração \hat{c} estimados pelo Filtro de Kalman. Pode-se perceber em tais curvas a diferença entre o a referência ($c_{ref} = 2 \text{ mg/l}$) e os valores medidos. Conforme mencionado anteriormente este erro é aceitável e ocorre devido ao uso de um controlador proporcional no sistema. Tal erro pode ser minimizado aumentando-se o ganho do controlador ou inserindo-se um integrador no sistema.

Já na Figura 4.2 estão ilustradas as curvas representando a TCO simulada e a TCO estimada pelo Filtro de Kalman. Como pode-se perceber, o Filtro de Kalman foi capaz de seguir as variações na TCO, entretanto ele apresentou um certo atraso com relação à TCO simulada. Este atraso é função dos valores escolhidos para a matriz de covariância de ruído do processo **Q**: valores elevados fornecem um rastreamento mais rápido, entretanto geram mais ruído na estimação. Conforme mencionado no capítulo anterior a escolha dos valores de **Q** devem refletir o compromisso entre sensibilidade à variações no tempo e rejeição de ruído.

Os resultados apresentados acima revelam que o Filtro de Kalman é capaz de fornecer valores confiáveis para a TCO, desde que os valores de K_m e c_{sat} sejam conhecidos, e a relação linear do coeficiente de transferência de oxigênio com o ciclo de trabalho do sinal PWM seja verdadeira.

Portanto, para que seja possível aplicar estas equações do Filtro de Kalman na prática, as grandezas K_{max} e c_{sat} , precisam ser confiavelmente determinadas e a relação linear do coeficiente de transferência de oxigênio com o ciclo de trabalho do sinal PWM precisa ser confirmada.

Uma outra simulação foi usada para verificar se é possível, a partir dos dados de concentração de oxigênio dissolvido, determinar de forma confiável os valores de K_{max} e c_{sat} por meio do algoritmo de regressão não linear previamente apresentado na seção 3.2.1.

As equações usadas para gerar os dados foram as mesmas da simulação anterior, (4.1) e (4.2), com os mesmos valores usados anteriormente para representar c_{sat} , h, τ_y e R e com as mesmas considerações sobre os ruídos de processo e medição.

Nesta simulação os dados de concentração de OD foram gerados com $K_m = K_{\text{max}}$, para representar a situação real na qual a bomba deverá estar ligada durante o tempo necessário para a determinação de K_{max} e c_{sat} pelo algoritmo de regressão. O valor de $K_{\text{max}} = 13,7$ h⁻¹ (valor bem próximo aos encontrados no sistema real) foi usado para gerar os dados de oxigênio dissolvido. O tempo de simulação escolhido foi de 10 minutos, o qual é suficiente para determinar os parâmetros em questão.

De posse dos dados de concentração de OD, o algoritmo de regresssão não linear foi executado, utilizando $\beta(0) = [14, 8, 5, 8/3600]$ como valores iniciais para os parâmetros. O vetor de parâmetros está definido como:

$$\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \hat{K}_{\max} & \hat{c}_{sat} & \hat{R} & \hat{\tau}_{y} \end{bmatrix}.$$

Os valores dos parâmetros estimados pelo algoritmo de regressão não linear foram:

$$\beta = [13,87 \quad 7,95 \quad 5,62 \quad 0,0017].$$

Os resultados estão ilustrados na Figura 4.3, com a curva simulada gerada pelas equações dinâmicas do sistema, e a curva estimada gerada pela expressão (3.4), na qual foram utilizados os valores estimados do vetor β .



Figura 4.3 - Concentrações de OD simulada e estimada por meio do algoritmo de regressão não linear.

Os valores obtidos pelo algoritmo de estimação foram bem próximos aos valores simulados. Isto está visivelmente representado na Figura 4.3, onde as curvas simulada e estimada estão praticamente sobrepostas. Estes resultados comprovam a eficácia do algoritmo na estimação de K_{max} e c_{sat} , o que justifica a aplicação de tais valores nas equações do Filtro de Kalman para a determinação da TCO em tempo real.

4.2 **RESULTADOS EXPERIMENTAIS**

Nesta seção, o método proposto para a estimação da TCO é testado em uma situação real. A planta escolhida para a realização dos testes é um reator aeróbio de pequena escala montado no laboratório.

Este sistema de pequena escala é constituído essencialmente por um reator, um agitador e um aerador do tipo liga-desliga. O reator tem a capacidade de 6 litros, no qual o licor misto é submetido aos testes experimentais. O agitador consiste de um motor CC em cujo eixo está conectado uma hélice capaz de fornecer um movimento circular ao licor, garantindo assim um ambiente homogêneo completamente misturado. O aerador consiste de uma bomba de aquário, à qual está conectado um difusor de ar, cujo objetivo é melhorar a aeração do sistema.

Um microcontrolador foi utilizado para realizar as tarefas de aquisição de dados e controle dos dispositivos externos: bomba de aquário e agitador. Este microcontrolador está conectado, por meio da porta serial, a um computador onde um programa de estimação e controle é executado. Este programa é um *script* escrito no software MATLAB, cuja rotina básica consiste em receber os dados de concentração de oxigênio dissolvido, realizar os cálculos de estimação das quantidades de interesse, K_{max} , c_{sat} e R, calcular o tempo em que a bomba deve permanecer ligada e enviar sinais de controle ao microcontrolador para acionar a bomba e o agitador.

Um sensor eletroquímico de oxigênio dissolvido, de acordo com as descrições apresentadas na seção 2.3, foi utilizado para medir a concentração de OD no licor misto.

Um esquema do sistema utilizado nos testes experimentais pode ser visualizado na Figura 4.4.



Figura 4.4 - Reator de lodo ativado de pequena escala e sistema de controle e aquisição de dados.

O lodo ativado foi obtido naturalmente pela adição de uma certa quantidade de substrato (leite) ao reator sob condição de aeração contínua, sem qualquer inoculação inicial de lodo.

Testes experimentais foram realizados neste sistema para avaliar do método proposto de estimação da TCO em uma situação prática, conforme será apresentado nas próximas seções.

4.2.1 VERIFICAÇÃO DA LINEARIDADE DE KLA COM O CICLO DE TRABALHO DO SINAL PWM

Conforme mencionado anteriormente, para que o método de estimação proposto possa ser aplicado em situações reais, além de uma maneira confiável de se determinar K_{max} e c_{sat} , é necessário ainda confirmar se a relação linear do coeficiente de transferência de oxigênio com o ciclo de trabalho do sinal PWM é verdadeira na prática. O ciclo de trabalho está definido como a razão entre o tempo em que o aerador permanece ligado (τ) e o tempo total do ciclo de aeração (T):

$$D = \frac{\tau}{T} \cdot 100\%. \tag{4.3}$$

Um procedimento experimental foi realizado para verificar se esta relação linear é verdadeira. O procedimento consistiu em coletar uma série de valores de concentração de oxigênio dissolvido, geradas para cada valor do ciclo de trabalho. Foram utilizados dez ciclos de trabalho diferentes numa faixa de 10 a 100 %, a intervalos de 10 %, e o período total do ciclo de aeração foi fixo T = 1 s. Para cada valor de ciclo de trabalho foram realizados cinco testes. O intervalo de amostragem empregado foi h = 1 s e a duração de cada experimento foi de 30 minutos.

De posse de tais dados, o algoritmo de regressão não linear, descrito anteriormente, foi aplicado a cada conjunto de valores de concentração para a determinação do respectivo coeficiente de transferência de oxigênio. Os resultados estão ilustrados na Figura 4.5.

Os resultados obtidos com este experimento confirmam o comportamento linear do coeficiente de transferência de oxigênio com relação ao ciclo de trabalho do sinal PWM, conforme ilustrado pela curva de regressão linear da Figura 4.5. Com isto, um valor médio da função transferência de oxigênio K_m , representado pela expressão (2.13), pode ser aplicado nas equações do Filtro de Kalman para a estimação da TCO.



Figura 4.5 – Relação entre o ciclo de trabalho do sinal PWM e os valores dos coeficientes de transferência de oxigênio determinados experimentalmente.

4.2.2 ESTIMAÇÃO DA TCO NO REATOR DE BANCADA

Uma vez confirmada a relação linear do coeficiente de transferência de oxigênio com o ciclo de trabalho do sinal PWM, e escolhido uma forma confiável de obter as grandezas K_{max} e c_{sat} , resta agora verificar o desempenho do Filtro de Kalman na estimação da taxa de respiração de um sistema real.

Antes de realizar o experimento para a estimação da TCO no reator de pequena escala, as quantidades K_{max} e c_{sat} foram inicialmente determinadas pelo algoritmo de regressão não linear utilizando valores de concentração de OD obtidos com o aerador ligado e durante a fase endógena. Os valores obtidos foram $K_{\text{max}} = 13,3$ h⁻¹ e $c_{sat} = 7,95$ mg/l.

Em seguida aplicou-se o algoritmo de estimação e controle ao sistema real. A variância do erro de medição utilizada nas equações do Filtro de Kalman foi $r = 0,15^2$, enquanto a matriz de covariância do ruído do processo **Q** e os valores iniciais dos estados e da matriz de covariância **P** foram iguais aos usados nas simulações.

Inicialmente a taxa de respiração foi estimada durante a fase endógena e após 30 minutos, uma certa quantidade de substrato prontamente biodegradável foi adicionada ao reator. Os resultados deste experimento estão ilustrados nas Figuras 4.6 e 4.7.



Figura 4.6 - Concentrações de oxigênio dissolvido medida e estimada pelo Filtro de Kalman.



Figura 4.7 – TCO estimada pelo Filtro de Kalman.

Na Figura 4.6, os valores de concentração de OD estimados pelo Filtro de Kalman apresentaram menos ruído, como era de se esperar, o que justifica seu uso na expressão (3.7) para a determinação da taxa de aeração, conforme foi mencionado na seção 3.3.

Na Figura 4.7, após o período inicial de adapação do Filtro de Kalman, ele foi capaz de seguir a uma mudança repentina na TCO, característica importante em sistemas de monitoramento em tempo real.

Os resultados obtidos com o experimento anterior confirmam a resposta rápida do Filtro de Kalman diante de uma mudança brusca na TCO provocada por um evento externo. Entretanto, ele não dá qualquer indicativo a respeito da confiabilidade dos valores obtidos para a taxa de respiração.

Um outro experimento foi realizado para testar a validade dos valores estimados pelo Filtro de Kalman. Este experimento consiste em usar dois métodos para a estimação da TCO: o método proposto e o método de regressão linear.

O método de regressão linear consiste em aerar o licor misto até que a concentração de OD atinja um certo limite superior. Logo após atingir esse limite, a aeração é interrompida e a diminuição da concentração de OD é monitorada. Quando a concentração atinge certo limite inferior, a aeração é reiniciada, começando assim um novo ciclo. A TCO é calculada utilizando-se a regressão linear para encontrar os parâmetros da equação da reta $y = a - R \cdot t$, que melhor se ajuste ao conjunto de valores medidos com a aeração desligada. Este método rende estimativas confiáveis da TCO, uma vez que uma das principais fontes de incerteza, a função K_La , é eliminada. Maiores detalhes sobre este método podem ser encontrados em [2].

O procedimento experimental pode ser descrito pelas seguintes etapas:

- ✓ A partir de um valor baixo de concentração de oxigênio dissolvido (cerca de 1 mg/l), a aeração é ligada e a concentração monitorada até qua a mesma atinja um valor superior a 5 mg/l, fazendo com que a aeração seja interrompida. Os valores de concentração obtidos com a aeração ligada são usados para estimar os valores de K_{max} e c_{sat} utilizando regressão não linear. Estes valores estimados serão posteriormente aplicados nas equações do Filtro de Kalman;
- Após a aeração ser interrompida, a concentração é monitorada até atingir um valor inferior a 1 mg/l. Os valores de concentração obtidos são utilizados para calcular o valor da TCO por regressão linear;
- ✓ A partir deste momento o método de regressão linear tem início e é responsável pela estimação da TCO durante os 30 minutos seguintes. Os limites superior e inferior da concentração de OD utilizados por este método são, respectivamente, 3 mg/l e 2 mg/l;

- ✓ Decorridos os 30 minutos de execução do método de regressão linear, este é interrompido, e é dado início ao método de estimação por Filtro de Kalman, o qual é executado durante os próximos 30 minutos. Terminado o prazo de 30 minutos, este último método é interrompido¹⁰ e o método de regressão linear novamente iniciado. O processo se repete até que cada método tenha sido executado por três vezes. A cada execução do método baseado no Filtro de Kalman, o valor de referência da concentração de oxigênio dissolvido é alterado. Na primeira execução ele é $c_{ref} = 2$ mg/l, na segunda é $c_{ref} = 3$ mg/l, e na terceira é $c_{ref} = 4$ mg/l. Isto foi realizado para verificar se há alguma dependência das estimações da TCO com o valor de referência escolhido;
- Após cada método ter sido executado por três vezes a aeração é interrompida e a concentração de oxigênio dissolvido monitorada até que atinja um valor inferior a 1 mg/l. Estes valores de concentração são utilizados para calcular novamente o valor da TCO por regressão linear;
- ✓ A última etapa do procedimento consiste em aerar o licor misto e monitorar a concentração de OD até a que a mesma supere um valor de 5 mg/l. Estes valores de concentração são utilizados para calcular novamente os parâmetros K_{max} e c_{sat}, de forma a compará-los com os valores obtidos no início do experimento.

Os resultados deste experimento podem ser visualizados nas Figuras 4.8 e 4.9.

Na Figura 4.8 estão ilustradas as curvas de concentração de oxigênio dissolvido que descrevem o método experimental. Durante os minutos iniciais e finais do experimento, os valores de K_{max} e c_{sat} foram estimados, onde foi confirmado estarem de acordo com os valores esperados para ambos. Durante o restante do tempo os métodos clássico e proposto foram executados. A operação do método clássico está caracterizada pela variação do oxigênio dissolvido entre os limites superior, 3 mg/l, e inferior, 2 mg/l. Já a operação do método proposto é caraterizada pela manutenção da concentração de OD em torno de um certo valor de referência constante.

¹⁰ Somente o controle da concentração de OD é interrompido. O Filtro de Kalman continua a gerar estimativas da TCO, mesmo com as variações significativas no nível de oxigênio dissolvido.



Figura 4.8 - Concentrações de oxigênio dissolvido medida e estimada pelo Filtro de Kalman.



Figura 4.9 - Taxas de consumo de oxigênio estimadas pelo Filtro de Kalman e por Regressão Linear.

Na Figura 4.9 estão ilustrados os valores da TCO estimados pelo método de regressão linear e pelo método proposto. O primeiro método utiliza um conjunto de valores, representando a queda na concentração de OD, para calcular uma estimativa da TCO, e necessita reaerar o licor misto repetidas vezes para que possa continuar efetuando estimativas. Esta característica é indesejável sob o ponto de vista de monitoramento em tempo real da taxa de consumo de oxigênio. Já o segundo método estima continuamente a taxa de respiração a cada novo valor obtido de concentração de OD baseado nas equações dinâmicas do sistema. Esta possibilidade de estimação da TCO a cada novo valor de medição da concentração, torna este método aplicável em sistemas de monitoramento em tempo real.

Os valores de TCO obtidos pelo Filtro de Kalman durante os intervalos em que a concentração de oxigênio dissolvido foi mantida em torno de um valor de referência constante ficaram próximos dos valores calculados pelo método de regressão linear durante seu respectivo intervalo de execução. Essa proximidade de valores confirma a validade do método proposto.

Entretanto, quando houve uma variação abrupta no valor de K_La usado no algoritmo do Filtro de Kalman, devido aos instantes de acionamento e desligamento da bomba ocorridos durante o método de regressão linear, o método proposto não rendeu bons resultados: as estimativas da TCO apresentaram grandes variações (ver Figura 4.9).

Este comportamento pode ser explicado pelas duas dinâmicas que não são levadas em consideração nas equações do Filtro de Kalman. A primeira está relacionada com a dinâmica do sensor, a qual não pode ser desprezada quando há variações significativas na concentração de oxigênio dissolvido, tais como as ilustradas na Figura 4.8 durante a execução do método de regressão linear.

A outra dinâmica está relacionada com o sistema de aeração. Quando a bomba de aquário é ligada leva algum tempo até que a concentração de bolhas de ar atinja seu valor máximo, e consequentemente, o coeficiente de transferência de oxigênio atinja K_{max} . Um comportamento similar ocorre quando a bomba é desligada. Uma forma de modelar esse comportamento é por meio de um sistema dinâmico de primeira ordem [30]:

$$\tau_{k} \frac{dK_{m}(t)}{dt} = -K_{m}(t) + K_{\max} u_{pwm}(t), \qquad (4.4)$$

em que τ_k é a constante de tempo da função transferência de oxigênio devido a concentração de bolhas de ar no licor misto e a física da bomba de aquário e do difusor de ar, e $u_{pwm}(t)$ é o sinal PWM. A expressão (4.4) pode ser representada em tempo discreto como:

$$K_m(k+1) = \left(1 - \frac{h}{\tau_k}\right) K_m(k) + \left(\frac{h}{\tau_k}\right) K_{\max} \cdot u_{pwm}(k).$$
(4.5)

Durante a execução do método de regressão linear, no instante em que a bomba é ligada, o Filtro de Kalman utiliza $K_m = K_{max}$ em suas equações, o que não condiz com o comportamento real do sistema, coforme foi descrito nos parágrafos anteriores, e induz a erros de estimação, como os que podem ser visualizados na Figura 4.9. Da mesma maneira quando a bomba é desligada o Filtro de Kalman assume $K_m = 0$ nas equações de estimação, o que também não condiz com a realidade, e conduz a erros.

Já durante a execução do método proposto, o controle da concentração de oxigênio dissolvido em torno de um valor de referência e o chaveamento da bomba de aquário dentro de um ciclo de aeração de 1 s, faz com que a função de transferência de oxigênio estabilize em torno do valor médio da função K_La , o qual pode ser aproximado pela expressão (2.13). Isto permite desprezar a dinâmica de aeração e utilizar o valor médio da função de transferência de oxigênio K_m nas equações do Filtro de Kalman sem prejuízos significativos nas estimativas da TCO.

Para confirmar estas suposições uma simulação foi executada para representar as condições descritas no experimento anterior.

As expressões utilizadas para gerar os dados do sistema foram (4.1), (4.2) e (4.5) com:

- ✓ O valor do oxigênio dissolvido saturado dado por $c_{sat} = 8 \text{ mg/l e o valor máximo}$ da função transferência de oxigênio dado por $K_{max} = 13.7 \text{ h}^{-1}$;
- ✓ O intervalo de amostragem dado por h = 1/3600 h (1 s);
- ✓ O ganho do controlador proporcional dado por kp = 100 e o valor de referência da concentração de OD dado por c_{ref} = 3 mg/l;
- ✓ O ruído branco do processo dado por $w = N(0, 0,001^2)$ e o ruído de medição dado por $v = N(0, 0,01^2)$;
- ✓ O valor da taxa de respiração dado por $R(k) = R(k-1) + e_R \operatorname{com} e_R = N(0, 0.07^2);$
- ✓ A constante de tempo do sensor dada por $\tau_y = 8/3600$ h (8 s), e a constante de tempo da função transferência de oxigênio dada por $\tau_k = 5/3600$ h (5 s);
- ✓ Os valores iniciais das variáveis do sistema foram $c(0) = 1 \text{ mg/l}, y(0) = 1 \text{ mg/l}, R(0) = 20 \text{ mg/l/h e } K_m(0) = 0 \text{ h}^{-1}.$

No algoritmo de estimação os seguintes valores foram utilizados:

- ✓ Os valores estimados de c_{sat} e K_{max} ;
- ✓ A matriz de covariância de ruído do processo dada por $\mathbf{Q} = (0, 1/h)^2 \mathbf{B} \mathbf{B}^{\mathrm{T}}$ com $\mathbf{B}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} h^2/2 & h \end{bmatrix};$
- ✓ A variância do erro de medição dada por $r = 0.15^2$;
- ✓ Os valores iniciais dos estados dados por $\hat{\mathbf{x}}(0) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}$;
- ✓ A matriz de covariância inicial dada por $P(0) = 100 \cdot I$.

Os resultados desta simulação podem ser visualizados nas Figuras 4.10 e 4.11.

Na Figura 4.10 estão ilustradas as curvas representando as concentrações de oxigênio dissolvido simulada e estimada. Também são apresentados os valores de K_{max} e c_{sat} estimados no início e no fim da simulação, onde podemos comprovar estarem conforme o esperado.

Na Figura 4.11 estão ilustradas as curvas da TCO simulada e estimada pelo Filtro de Kalman. Pode-se perceber que as estimações realizadas durante os intervalos de tempo em que a concentração de OD não é constante, apresentam o mesmo padrão das estimativas obtidas anteriormente para o sistema real. Estes resultados indicam que as considerações anteriores a respeito da dinâmica da aeração e do sensor de OD são verdadeiras e que tais dinâmicas têm um efeito nas estimativas da TCO, quando o controle PWM da concentração de OD não é realizado.



Figura 4.10 - Concentrações de oxigênio dissolvido simulada e estimada pelo Filtro de Kalman.



Figura 4.11 - Taxas de consumo de oxigênio dissolvido simulada e estimada pelo Filtro de Kalman.

5 CONCLUSÕES

O método proposto neste trabalho utiliza um conjunto de equações, representando o comportamento dinâmico do sistema de lodo ativado, e medições de oxigênio dissolvido, realizadas em um ambiente de concentração controlada, para estimar a TCO em tempo real com base em um algoritmo de Filtro de Kalman. Simulações e experimentos foram realizados onde avaliou-se a eficácia e o desempenho do método.

Os resultados de simulação e os resultados experimentais indicaram uma resposta rápida do Filtro de Kalman diante de variações repentinas na TCO, o que permite a aplicação do método proposto em aplicações de monitoramento da taxa de respiração em tempo real, tais como no gerenciamento de toxicidade de plantas de lodo ativado.

As estimativas da TCO realizadas pelo método proposto em um reator de pequena escala foram comparadas com as estimativas obtidas pelo método de regressão linear, que é um método bastante confiável para a medição da TCO na prática. Desta comparação concluiu-se que quando a concentração de oxigênio dissolvido é controlada por meio de um sinal PWM, cujo período é bem menor que a constante de tempo associada com a transferência de oxigênio para o sistema, é possível aplicar o método proposto e utilizar um valor médio para a função K_La nas equações do Filtro de Kalman, o que rende bons resultados na estimação da TCO.

Entretanto, para situações em que não for possível utilizar essa aproximação, como as evidenciadas durante a execução do método de regressão linear, o método proposto não rende boas estimativas para a TCO, pelo fato dele não levar em consideração as dinâmicas associadas com o sistema de aeração e com o sensor de OD.

5.1 **PERSPECTIVAS FUTURAS**

Como continuidade para este trabalho, sugere-se o desenvolvimento e a aplicação de um método para a estimação das constantes de tempo relacionadas à dinâmica do sensor e à dinâmica da aeração e também a incorporação de tais constantes de tempo nas equações do Filtro de Kalman para a estimação da taxa de consumo de oxigênio. Com isto espera-se obter um método de capaz de estimar a TCO de forma confiável, tanto em situações nas quais um valor médio aproximado da função $K_L a$ possa ser empregado, quanto nas situações em que não for possível aplicá-lo no algoritmo de estimação.

REFERÊNCIAS

- F. J. S. Silva, S. Y. C. Catunda, J. V. F. Neto, e A. C. van Haandel, "Dissolved oxygen PWM control and oxygen uptake rate estimation using Kalman Filter in activated sludge systems", in 2010 IEEE Instrumentation & Measurement Technology Conference Proceedings, Austin, TX, USA, 2010, p. 579-584.
- [2] S. Y. C. Catunda, G. S. Deep, A. C. van Haandel, e R. C. S. Freire, "Métodos Aternativos para medição da taxa de consumo de oxigênio em sistemas de lodo ativado", *Revista Brasileira de Controle e Automação*, vol. 9, nº. 2, p. 57-64, 1998.
- [3] S. Y. C. Catunda, G. S. Deep, A. C. van Haandel, e R. C. S. Freire, "Feedback control method for estimating the oxygen uptake rate in activated sludge systems", *Instrumentation and Measurement, IEEE Transactions on*, vol. 48, n°. 4, p. 864-869, 1999.
- [4] A. van Haandel e G. Marais, O Comportamento do Sistema de Lodo Ativado: Teoria e Aplicações para Projetos e Operação. Campina Grande: epgraf, 1999.
- [5] M. Von Sperling, *Princípios do tratamento biológico de águas residuárias Lodos Ativados*, vol.
 4. Belo Horizonte: DESA/UFMG, 1997.
- [6] N. F. Gray, *Biology of wastewater treatment*, 2° ed. London: Imperial College Press, 2004.
- [7] P. A. Vanrolleghem, "Principles of Respirometry in Activated Sludge Wastewater Treatment", presented at the Proceedings International Workshop on Recent Development in Respirometry for Wastewater Treatment Plant Monitoring and Control, Taipei, Taiwan, 2002, p. 20.
- [8] M. B. Beck, "Identification, estimation and control of biological waste-water treatment processes", *Control Theory and Applications, IEE Proceedings D*, vol. 133, n°. 5, p. 254-264, 1986.
- [9] G. Bastin, *On-line estimation and adaptive control of bioreactors*. Amsterdam; New York: Elsevier, 1990.
- [10] G. Franklin, *Digital control of dynamic system*, 3° ed. Menlo Park Calif.: Addison-Wesley, 1998.
- [11] K. Åström, Computer controlled systems, 3° ed. Upper Saddle River (N.J.): Prentice-Hall, 1997.
- [12] M. A. C. Ferreira, "Desenvolvimento de sensores de oxigênio dissolvido utilizando métodos eletroquímicos e ópticos para monitoramento em tempo real da qualidade da água", Doutorado, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2007.
- [13] "The Dissolved Oxygen Handbook". YSI, 2009.
- [14] S. M. Libelli e C. Barresi, "Dynamic compensation of dissolved oxygen probes for respirometry", presented at the 1st IWA Conference On Instrumentation, Control and Automation, Malmo, Suécia, 2002, vol. 1, p. 131-138.
- [15] H. Spanjers, "Respirometry in Activated Sludge", Doutorado, Universidade Agrícola de Wageningen, 1993.
- [16] F. Garcia-Ochoa e E. Gomez, "Bioreactor scale-up and oxygen transfer rate in microbial processes: An overview", *Biotechnology Advances*, vol. 27, n°. 2, p. 153-176, 2008.
- [17] O. Sotomayor, "Software sensor for on-line estimation of the microbial activity in activated sludge systems", *ISA transactions : a publication of Instrument Society of America*, vol. 41, n°. 2, p. 127-143, 2002.
- [18] C. F. Lindberg, "Control and Estimation Strategies Applied to the Activated Sludge Process", Doutorado, Universidade Uppsala, 1997.
- [19] E. D. S. Ferreira, "Aplicação da Respirometria na Caracterização de Esgoto Doméstico Afluente a uma ETE por Processo de Lodos Ativados", Mestrado, Universidade de Brasília, 2002.
- [20] P. A. Vanrolleghem, Z. Kong, e F. Coen, "Full-scale on-line assessment of toxic wastewaters causing change in biodegradation model structure and parameters", *Water Science and Technology*, vol. 33, n°. 2, p. 163-175, 1996.
- [21] V. V. Lira, P. R. Barros, J. S. da Rocha Neto, e A. C. van Haandel, "Estimation of dissolved oxygen dynamics for sequencing batch aerobic reactors", in *Instrumentation and Measurement Technology Conference*, 2004. *IMTC 04. Proceedings of the 21st IEEE*, 2004, vol. 1, p. 14-19 Vol.1.

- [22] A. Holmberg, "Microprocessor-based estimation of oxygen utilization in the activated sludge wastewater treatment process", *International Journal of Systems Science*, vol. 12, n°. 6, p. 703-718, 1981.
- [23] S. Marsili-Libelli e A. Vaggi, "Estimation of respirometric activities in bioprocesses", *Journal of Biotechnology*, vol. 52, n°. 3, p. 181-192, 1997.
- [24] G. Seber, Nonlinear regression. Hoboken N.J.: Wiley-Interscience, 2003.
- [25] H. Motulsky, *Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression: a practical guide to curve fitting*. Oxford; New York: Oxford University Press, 2004.
- [26] W. Vetterling, *Numerical recipes example book (C)*, 2° ed. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 1992.
- [27] M. Grewal e A. Andrews, *Kalman Filtering: Theory and Practice Using MATLAB*. Wiley-Interscience, 2001.
- [28] P. S. Maybeck, *Stochastic Models, Estimation and Control*, vol. 1. New York: Academic Press, 1979.
- [29] G. Welch e G. Bishop, "An Introduction to the Kalman Filter", UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA AT CHAPEL HILL, 1995.
- [30] F. S. B. C. Lima, F. J. S. Silva, S. Y. C. Catunda, e J. V. da Fonseca Neto, "Continuous-time identification of a PWM aerated bench scale activated sludge reactor using state-variable filters", in *Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC)*, 2011 IEEE, 2011, p. 1-5.

APÊNDICE A: SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DINÂMICA DO OD

Neste apêndice serão apresentados os passos utilizados para resolver a expressão dinâmica do oxigênio dissolvido. Para o aerador ligado e assumindo que a taxa de respiração possa ser considerada constante, é possível reescrever a expressão (2.2) como:

$$\frac{dc(t)}{dt} = K_{\max} \left(c_{sat} - c(t) \right) - R$$
$$= K_{\max} c_{sat} - K_{\max} c(t) - R$$

Aplicando-se a Transformada de Laplace na expressão acima encontra-se

$$sC(s) - c(0) = \frac{K_{\max}c_{sat}}{s} - K_{\max}C(s) - \frac{R}{s}.$$

$$C(s) = \frac{c(0)}{s + K_{\max}} + \frac{K_{\max}c_{sat}}{s(s + K_{\max})} - \frac{R}{s(s + K_{\max})}.$$

Expandindo-se os termos $\frac{K_{\max}c_{sat}}{s(s+K_{\max})}$ e $\frac{R}{s(s+K_{\max})}$ em fraçõe parciais obtém-se

$$C(s) = \frac{c(0)}{s + K_{\max}} + \frac{c_{sat}}{s} - \frac{c_{sat}}{s + K_{\max}} - \frac{R}{sK_{\max}} + \frac{R}{K_{\max}(s + K_{\max})}.$$

Aplicando-se a Transformada Inversa de Laplace na equação acima encontra-se

$$c(t) = c(0)e^{-K_{\max} \cdot t} + c_{sat} - c_{sat}e^{-K_{\max} \cdot t} - \frac{R}{K_{\max}} + \frac{R}{K_{\max}}e^{-K_{\max} \cdot t}.$$

Simplificando-se a expressão acima obtém-se a seguinte expressão

$$c(t) = c_{sat} \left(1 - e^{-K_{\max} \cdot t} \right) + c(0) e^{-K_{\max} \cdot t} + \frac{R}{K_{\max}} \left(e^{-K_{\max} \cdot t} - 1 \right).$$
APÊNDICE B: SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DINÂMICA DO SENSOR DE OD

Neste apêndide serão apresentados os passos utilizados para resolver a equação dinâmica do sensor de oxigênio dissolvido. A equação dinâmica do sensor de oxigênio dissolvido é representada por

$$t_{y}\frac{dy(t)}{dt} = c(t) - y(t).$$

Aplicando-se a Transformada de Laplace na expressão acima obtém-se

$$t_{y}sY(s) - t_{y}y(0) = C(s) - Y(s).$$

$$Y(s)(t_{y}s+1) = C(s) + t_{y}y(0).$$

Sabe-se do Apêndice A que

$$C(s) = \frac{c(0)}{s + K_{\max}} + \frac{c_{sat}}{s} - \frac{c_{sat}}{s + K_{\max}} - \frac{R}{sK_{\max}} + \frac{R}{K_{\max}(s + K_{\max})}.$$

Substituindo-se este valor de C(s) na expressão de Y(s) obtém-se

$$Y(s)(t_{y}s+1) = \frac{c(0)}{s+K_{\max}} + \frac{c_{sat}}{s} - \frac{c_{sat}}{s+K_{\max}} - \frac{R}{sK_{\max}} + \frac{R}{K_{\max}(s+K_{\max})} + t_{y}y(0).$$

Isolando Y(s)

$$Y(s) = \frac{c(0)}{(s+K_{\max})\cdot(t_{y}s+1)} + \frac{c_{sat}}{s(t_{y}s+1)} - \frac{c_{sat}}{(s+K_{\max})\cdot(t_{y}s+1)} - \frac{R}{sK_{\max}(t_{y}s+1)} + \frac{R}{K_{\max}(s+K_{\max})(t_{y}s+1)} + \frac{t_{y}y(0)}{(t_{y}s+1)}.$$

Expandindo-se

$$\frac{c(0)}{\left(s+K_{\max}\right)\cdot\left(t_{y}s+1\right)}, \frac{c_{sat}}{s\left(t_{y}s+1\right)}, \frac{c_{sat}}{\left(s+K_{\max}\right)\cdot\left(t_{y}s+1\right)}, \frac{R}{sK_{\max}\left(t_{y}s+1\right)} \in \frac{R}{K_{\max}\left(s+K_{\max}\right)\cdot\left(t_{y}s+1\right)}$$

em frações parciais obtém-se

$$\begin{split} Y(s) &= \frac{c(0)}{\left(1 - t_y K_{\max}\right)} \cdot \frac{1}{\left(s + K_{\max}\right)} + \frac{t_y c(0)}{\left(t_y K_{\max} - 1\right)} \cdot \frac{1}{\left(t_y s + 1\right)} + \frac{c_{sat}}{s} - \frac{t_y c_{sat}}{t_y s + 1} + \frac{c_{sat}}{\left(t_y K_{\max} - 1\right)} \cdot \frac{1}{\left(s + K_{\max}\right)} + \\ &+ \frac{t_y c_{sat}}{\left(1 - t_y K_{\max}\right)} \cdot \frac{1}{\left(t_y s + 1\right)} - \frac{R}{K_{\max}} \cdot \frac{1}{s} + \frac{R t_y}{K_{\max}} \cdot \frac{1}{\left(t_y s + 1\right)} + \frac{R}{K_{\max}\left(1 - K_{\max} t_y\right)} \cdot \frac{1}{\left(s + K_{\max}\right)} + \\ &+ \frac{R t_y}{K_{\max}\left(K_{\max} t_y - 1\right)} \cdot \frac{1}{\left(t_y s + 1\right)} + \frac{t_y y(0)}{\left(t_y s + 1\right)}. \end{split}$$

Aplicando-se a Transformada Inversa de Laplace na expressão acima e organizando-se os termos obtém-se a seguinte expressão

$$y(t) = \frac{c(0)}{(1 - t_y \cdot K_{\max})} \left(e^{-K_{\max} \cdot t} - e^{-t/t_y} \right) + c_{sat} \left(1 - e^{-t/t_y} \right) + \frac{c_{sat}}{(t_y \cdot K_{\max} - 1)} \left(e^{-K_{\max} \cdot t} - e^{-t/t_y} \right) + \frac{R}{K_{\max}} \left(e^{-t/t_y} - 1 \right) + \frac{R}{K_{\max}} \left(1 - t_y \cdot K_{\max} \right) \left(e^{-K_{\max} \cdot t} - e^{-t/t_y} \right) + y(0) \cdot e^{-t/t_y}.$$

APÊNDICE C: REGRESSÃO NÃO LINEAR

Regressão é o processo de ajustar modelos a um conjunto de observações. Tal processo depende do modelo.

Se o modelo é paramétrico, o processo de regressão estima os parâmetros a partir dos dados. No caso de o modelo ser uma função linear dos parâmetros, a estimação é baseada em métodos de álgebra linear. Se o modelo é uma função não linear dos parâmetros, a estimação é baseada em métodos de otimização.

Os modelos não lineares, diferentemente dos lineares, tipicamente envolvem os parâmetros em uma interpretação física específica. Eles requerem considerações *a priori* a respeito do processo de geração dos dados e são mais precisos fora do conjunto de dados observados.

A regressão não linear, portanto, ajusta os parâmetros de um modelo não linear aos dados observados. Tal modelo é normalmente descrito como uma relação entre uma variável de resposta e uma ou mais variáveis de predição (preditores) na forma,

$$y = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon},$$

em que:

y é o vetor de observações da variável de resposta;

X é a matriz de preditores;

 β é o vetor de parâmetros desconhecidos a serem estimados;

f é uma função não linear de **X** e β , também chamada equação de regressão;

 ε é o vetor de ruídos aleatórios independentes e normalmente distribuídos.

O algoritmo de regressão não linear utilizado neste trabalho é o *nlinfit* presente no software MATLAB. Ele requer uma estimativa inicial para cada parâmetro da equação de regressão, a partir das quais o algoritmo irá ajustar os valores de cada parâmetro de forma a obter uma combinação que produza o menor valor possível para a soma dos quadrados dos desvios

$$S(\beta) = \sum_{i=1}^{m} \left[y_i - f(x_i, \beta) \right]^2.$$

O método utilizado para obter o menor valor possível da expressão acima é o Levenberg-Marquardt, o qual utiliza o método do gradiente descendente nas primeiras iterações e então gradualmente muda para uma abordagem Gauss-Newton. Isto pode ser explicado pelo fato de que o método do gradiente descendente tende a funcionar bem nas primeiras iterações, mas funciona lentamente quando o melhor ajuste da curva está próximo, enquanto que a abordagem Gauss-Newton funciona mal nas primeiras iterações, mas funciona muito bem nas últimas.

Em cada iteração, o vetor de parâmetros β é substituído por uma nova estimativa, $\beta + \delta$. Para determinar δ , a função $f(x_i, \beta + \delta)$ é aproximada por

$$f(x_i,\beta+\delta) \approx f(x_i,\beta) + J_i\delta,$$

em que

$$J_i = \frac{df\left(x_i,\beta\right)}{d\beta},$$

é o gradiente de f com relação à β .

No ponto de mínimo da função $S(\beta)$, o gradiente de S com relação à δ será zero.

Usando a aproximação definida anteriormente é possível definir

$$S(\beta+\delta) \approx \sum_{i=1}^{m} (y_i - f(x_i,\beta) - J_i\delta)^2.$$

Ou usando uma notação matricial

$$S(\beta+\delta)\approx \|\mathbf{y}-\mathbf{f}(\beta)-\mathbf{J}\delta\|^2.$$

Tomando-se a derivada da expressão acima com relação à δ e igualando-se a zero, resulta em

$$(\mathbf{J}^{\mathrm{T}}\mathbf{J})\delta = \mathbf{J}^{\mathrm{T}}[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)],$$

em que **J** é a matriz Jacobiana, cuja *i*-ésima linha é igual a J_i ; e **f** e **y** são vetores com o *i*ésimo elemento $f(x_i, \beta)$ e y_i , respectivamente. Este é um conjunto de equações lineares, as quais podem ser resolvidas para δ .

A contribuição de Levenberg é substituir a equação acima por uma versão "amortecida",

$$(\mathbf{J}^{\mathrm{T}}\mathbf{J} + \lambda \mathbf{I})\delta = \mathbf{J}^{\mathrm{T}}[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)],$$

Em que **I** é a matriz identidade.

O fator de amortecimento λ é ajustado a cada iteração: se a redução de *S* é rápida, um valor menor pode ser usado, levando o algoritmo mais próximo do método Gauss-Newton; enquanto que se uma iteração promove uma redução insuficiente no resíduo, λ pode ser aumentado, tornando o algoritmo mais próximo do método do gradiente descendente.

Se o tamanho do passo δ , ou a redução da soma dos quadrados do último vetor de parâmetros $\beta + \delta$, cair abaixo de limites predefinidos, a iteração termina e o último vetor de parâmetros β , é considerado como solução.

A desvantagem do algoritmo de Levenberg é que se o valor do fator de amortecimento λ é grande, invertendo $\mathbf{J}^{T}\mathbf{J} + \lambda \mathbf{I}$ o torna sem utilidade. Marquardt desenvolveu a idéia de que é possível ponderar cada componente do gradiente de acordo com a curvatura da função *S*, de forma a fornecer um movimento maior ao longo das direções onde o gradiente é menor. Isto evita uma convergência mais lenta na direção de um gradiente pequeno. Portanto, Marquardt substituiu a matriz identidade por uma matriz diagonal consistindo dos elementos $\mathbf{J}^{T}\mathbf{J}$, resultando no algoritmo Levenberg-Marquardt:

$$(\mathbf{J}^{\mathrm{T}}\mathbf{J} + \lambda \operatorname{diag}(\mathbf{J}^{\mathrm{T}}\mathbf{J}))\delta = \mathbf{J}^{\mathrm{T}}[\mathbf{y} - \mathbf{f}(\beta)].$$