UNIVERSIDADE POSITIVO

LEANDRO CORREA PYKOSZ

CONFIGURAÇÕES DE REDES NEURAIS NA MODELAGEM DA PREDIÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS EM REATOR ANAERÓBIO DE TRATAMENTO DE ESGOTO SANITÁRIO

CURITIBA

2023

LEANDRO CORREA PYKOSZ

CONFIGURAÇÕES DE REDES NEURAIS NA MODELAGEM DA PREDIÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS EM REATOR ANAERÓBIO DE TRATAMENTO DE ESGOTO SANITÁRIO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Gestão Ambiental, da Universidade Positivo, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Gestão Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Alysson Nunes Diógenes

Coorientadora: Profa. Dra. Maura Harumi Sugai Guerios

Nota: Esta tese foi desenvolvida sob a orientação da Profa. Dra. Patrícia Bilotta de 01/09/2019 a 17/07/2020 e, em razão de seu desligamento do quadro institucional da Universidade Positivo, assumiu como orientador o Prof. Dr. Marco Aurélio da Silva Carvalho Filho, no período de 21/07/2020 a 14/12/2021, quando também houve seu desligamento, tendo então assumido o Prof. Dr. Alysson Nunes Diógenes.

CURITIBA

2023

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Biblioteca Central - Universidade Positivo - Curitiba - PR

C995 Pykosz, Leandro Correa.
Configurações de redes neurais na modelagem da predição da produção de biogás em reator anaeróbio de tratamento de esgoto sanitário / Leandro Correa Pykosz. — Curitiba : Universidade Positivo, 2023.
92 f. ; il.

Tese (Doutorado) – Universidade Positivo, Programa de Pós-Graduação em Gestão Ambiental, 2023.
Orientador: Prof. Dr. Alysson Nunes Diógenes
Coorientadora: Profa. Dra. Maura Harumi Sugai Guerios

1. Rede neural artificial. 2. Modelagem. 3. CNN. 4. Metano. I. Diógenes, Alysson Nunes. III. Guerios, Maura Harumi Sugai. III. Título.

CDU 504

.

LEANDRO CORREA PYKOSZ

CONFIGURAÇÕES DE REDES NEURAIS NA MODELAGEM DA PREDIÇÃO DA PRODUÇÃO DE BIOGÁS EM REATOR ANAERÓBIO DE TRATAMENTO DE ESGOTO SANITÁRIO

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Gestão Ambiental, da Universidade Positivo, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Gestão Ambiental.

COMISSÃO EXAMINADORA

_____

Alysson Nunes Diógenes (Orientador – Presidente – UP)

_____

Julio Cesar Nievola (PUCPR)

_____

Renato de Mello (UDESC)

_____

Cíntia Mara Ribas de Oliveira (UP)

_____

Alexandre Nicoletti Hedlund (UP)

Curitiba, ____ de _____ de 2023

AGRADECIMENTOS

Aos meus orientadores: à Profa. Patrícia Bilotta, por ajudar a modelar esta tese; ao Prof. Marco Aurélio da Silva Carvalho Filho, pelo cuidado que teve ao assumir minha orientação e pela acertada escolha da coorientação, exercida pela Profa. Maura Harumi Sugai Guério; finalmente, ao Prof. Alysson Nunes Diógenes, que sabiamente, respeitando a interdisciplinaridade do processo, levou este trabalho ao ponto em que se encontra.

À UDESC, por ter permitido o meu afastamento para o meu aperfeiçoamento profissional.

Ao meu pai, Geraldo Pykosz (*in memoriam*), que sempre me motivou e me inspirou, sendo um alicerce para a busca do ser e do saber.

Ao Prof. José Pio Martins, magnífico reitor à época, que me abriu as portas do curso, pelo seu apoio, que foi fundamental para que desenvolvesse este trabalho.

Aos professores e colegas da Universidade Positivo e do Programa de Pós-Graduação em Gestão Ambiental, assim como aos que contribuíram direta ou indiretamente para a realização e conclusão desta tese.

Aos colegas que sempre me incentivaram na caminhada e à minha família, pelo apoio.

RESUMO

As cidades têm gerado cada dia mais esgoto, o qual é destinado a Estações de Tratamento de Esgoto (ETEs), onde há rede coletora. Após o tratamento desse esgoto, um dos subprodutos resultantes é o biogás, originado da decomposição da matéria orgânica. Na maioria das ETEs do Brasil, esse biogás é incinerado com queimador ao ar livre do tipo *flare*, um desperdício de um subproduto que poderia ser utilizado. Para que o biogás tenha um elevado poder calorífico, é necessária uma alta concentração de metano, que se forma a partir de um processo químico ideal no reator anaeróbio de esgoto. O biogás, após um processo de purificação, passa a ser denominado biometano, com maior poder calorífico. Dependendo do processo de purificação, sua eficiência pode atingir 99%, alcançando o poder calorífico da gasolina. Este trabalho tem o objetivo geral de desenvolver um protótipo de interface para *website*, usando um modelo computacional com a rede que apresentou melhor desempenho para predizer a vazão do biogás em reator anaeróbio a partir das variáveis físico-químicas: vazão de esgoto, demanda química de oxigênio, sólidos suspensos totais e sólidos suspensos voláteis. A maior eficiência foi alcançada pela rede neural convolucional com oito neurônios, chamada RNA C (8), que obteve um erro quadrático médio de $2{,}08E^{-04}$ e a melhor média de R^2 (0,93). Os resultados indicam que é possível predizer o monitoramento por meio de uma ferramenta computacional, podendo o operador da estação prever a vazão que será gerada, a fim de permitir a tomada de decisão em tempo real para interferir no processo, de modo a sempre produzir um subproduto de qualidade. A pesquisa é classificada como empírica experimental e quantitativa, visando a fornecer subsídios de apoio à decisão e à solução de um problema estratégico das ETEs, a partir da utilização dos dados levantados.

Palavras-chave: Rede neural artificial. Modelagem. CNN. Metano.

ABSTRACT

Cities have generated more and more sewage every day, which is sent to Sewage Treatment Stations (ETEs), where there is a collection network. After treating this sewage, one of the resulting by-products is biogas, originating from the decomposition of organic matter. In most ETEs in Brazil, this biogas is incinerated with an open-air flare-type burner, a waste of a by-product that could be used. For biogas to have a high calorific value, a high concentration of methane is required, which is formed from an ideal chemical process in the anaerobic wastewater reactor. Biogas, after a purification process, is now called biomethane, with greater calorific value. Depending on the purification process, its efficiency can reach 99%, reaching the calorific value of gasoline. This work has the general objective of developing an interface prototype for a website, using a computational model with the network that presented the best performance to predict the flow of biogas in an anaerobic reactor from the physical-chemical variables: sewage flow, chemical demand of oxygen, total suspended solids and volatile suspended solids. The highest efficiency was achieved by the convolutional neural network with eight neurons, called ANN C (8), which obtained a mean squared error of 2.08E-04 and the best mean of R2 (0.93). The results indicate that it is possible to predict the monitoring through a computational tool, the station operator being able to predict the flow that will be generated, in order to allow decision making in real time to interfere in the process, in order to always produce a quality by-product. The research is classified as empirical, experimental and quantitative, aiming to provide subsidies to support the decision and the solution of a strategic problem of the ETEs, based on the use of the collected data.

Keywords: Artificial neural network. Modeling. CNN. Methane.

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 – Esquema de tratamento anaeróbio do tipo UASB (ORTH, 2007).....23
FIGURA 2 – Etapas da digestão anaeróbia de esgoto sanitário (CHERNICHARO, 2016). ...24
FIGURA 3 – Analisador de biogás Multitec® BioControl 2 (SEWERIN, 2018). 28
FIGURA 4 – Arquitetura *feedforward* (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010). 32
FIGURA 5 – Arquitetura recorrente.....33
FIGURA 6 – Saídas encontradas na revisão, por número de trabalhos. 44
FIGURA 7 – Ocorrência das variáveis nos artigos pesquisados, por número de trabalhos. 46
FIGURA 8 – Quantidade de dias monitorados, por número de trabalhos.....49
FIGURA 9 – Dias pesquisados x quantidade de conjuntos de dados disponíveis. 50
FIGURA 10 – Vazão de biogás em função do tempo (PAULA, 2019). 55
FIGURA 11 – Comportamento periódico DQO x biogás (a) e esgoto x biogás (b). 57
FIGURA 12 – Exemplo do treinamento.....62
FIGURA 13 – Topologia da RNA com oito neurônios na camada oculta. 67
FIGURA 14 – Predição de vazão do biogás para $R^2 = 0,87$.....68
FIGURA 15 – Comparação do resultado previsto com os dados reais. 68
FIGURA 16 – Predição de vazão do biogás para $R^2 = 0,93$.....70
FIGURA 17 – Comparação do predito e do real não normalizado. 71
FIGURA 18 – Perda no treinamento e na validação. 72
FIGURA 19 – Predição de vazão do biogás.....73
FIGURA 20 – Comparação dos dados reais e preditos.....74
FIGURA 21 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo de toda a amostra. 76
FIGURA 22 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo dos dados de treinamento. 77
FIGURA 23 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo dos dados de teste. 78
FIGURA 24 – *Layout* da tela da aplicação.....79

LISTA DE QUADROS

QUADRO 1 – Comparativo entre os modelos de IA. 30
QUADRO 2 – Comparação de índices estatísticos (BENNETT *et al*., 2013). 38
QUADRO 3 – Variáveis físico-químicas monitoradas. 55

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – Composição do biogás (PROSAB, 2009).....26
TABELA 2 – Poder calorífico superior e inferior de alguns gases (JOSÉ, 2004). 27
TABELA 3 – Índices estatísticos de magnitude das variáveis de entrada utilizadas (PAULA, 2019).....60
TABELA 4 – Resultados de R e MSE das etapas de teste da RNA T. 67
TABELA 5 – Resultados de R e MSE das etapas de teste da RNA C. 69
TABELA 6 – Resultados de R e MSE das etapas de teste com deslocamento temporal.....73

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 11
1.1 JUSTIFICATIVA 15
1.2 ESTRUTURA DA TESE 16
1.3 OBJETIVOS 17
1.3.1 Objetivo geral 17
1.3.2 Objetivos específicos 17
1.4 HIPÓTESE DE PESQUISA 17
2 REVISÃO DE LITERATURA 18
2.1 TRATAMENTO DE ESGOTO 20
2.1.1 Temperatura 21
2.1.2 Características químicas 22
2.1.3 Demanda bioquímica de oxigênio 22
2.1.4 Demanda química de oxigênio 22
2.1.5 Tratamento anaeróbio 23
2.1.5.1 Reatores de leito fluidizado 25
2.1.6 Produção de biogás em reatores UASB 25
2.1.7 Poder calorífico do biogás 26
2.1.8 Monitoramento da composição do biogás 27
2.2 INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL 28
2.2.1 Redes neurais artificiais 31
2.2.1.1 Arquitetura *feedforward* 32
2.2.1.2 Arquitetura recorrente 33
2.2.2 Treinamento e teste 34
2.2.3 Perceptron de múltiplas camadas 35
2.2.4 Equação de erro e fórmula de avaliação 36
2.2.5 Redes neurais convolucionais 39
3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS 41
3.1 CARACTERIZAÇÃO DO ESTUDO 41
3.1.1 Área do estudo 41
3.2 DELINEAMENTO DA PESQUISA 42
3.2.1 Variáveis de saída 43

3.2.2 Variáveis de entrada 44
3.2.3 Análise dos dados 47
3.2.4 Quantidade de dados e tempo de análise 48
3.2.5 Algoritmos utilizados 50
3.2.6 Inteligência artificial: neurônios, camadas e função de ativação 51
3.2.7 Taxa de aprendizagem e teste 53
3.3 INSTRUMENTAÇÃO 54
3.3.1 Dados coletados 54
4 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO 57
4.1 BASE DE DADOS 57
4.2 DESENVOLVIMENTO DAS REDES NEURAIS 60
4.2.1 RNA T 63
4.2.2 RNA C 63
4.3 TREINO E TESTE 64
5 RESULTADOS 66
6 CONSIDERAÇÕES FINAIS 80
REFERÊNCIAS 83

1 INTRODUÇÃO

Em países da América Latina, devido ao clima e a outras questões econômicas, há uma liderança no uso da tecnologia anaeróbia no tratamento do esgoto doméstico (CHERNICHARO *et al*., 2018; SPERLING, 2016), por exigir menores recursos financeiros que reatores aeróbios para sua implantação e manutenção. Reatores anaeróbios são uma das tecnologias mais utilizadas para a degradação biológica da matéria orgânica em Estações de Tratamento de Esgoto (ETEs), sendo o biogás um dos subprodutos gerados pós-tratamento, constituído majoritariamente de gás metano, um composto inflamável, inodoro e incolor. A produção do biogás depende, sobretudo, da composição do esgoto afluente, da temperatura constante e das características operacionais do reator biológico (CHERNICHARO, 2016).

O novo Marco Legal do Saneamento, aprovado em julho de 2020 (BRASIL, 2020a), estabeleceu, em seu art. 11-B, como uma de suas metas garantir que 90% da população tenha acesso à coleta e tratamento de esgoto até 31 de dezembro de 2033. Tendo em vista que cerca de cem milhões de brasileiros não têm acesso à coleta de esgoto, isso revela uma tendência de aumento da carga que incidirá sobre as ETEs nos próximos anos, indicando o potencial dessas estações na produção de biogás.

O Brasil conta com 1.373 ETEs que utilizam reatores anaeróbios, o que representa o maior parque de reatores anaeróbios do mundo (BRASIL, 2020b), porém elas não foram projetadas para a recuperação do biogás para fins comercias. Atualmente, as ETEs que possuem infraestrutura para coleta do biogás simplesmente queimam o gás para evitar riscos à saúde (ROSA *et al.*, 2016), pois o metano é um gás indutor do efeito estufa, com potencial de aquecimento global 32 vezes maior que o do dióxido de carbono, resultado de sua queima (IPCC, 2023). Por outro lado, estudos mostram que é possível o seu aproveitamento para a geração de energia térmica ou elétrica (BILOTTA; ROSS, 2016; SPERLING, 2016; SILVEIRA FILHO *et al.*, 2018), o que requer pensar na sustentabilidade das ETEs, com vistas ao aproveitamento energético dos subprodutos gerados, de forma que, com investimentos mínimos, seja possível promover a equidade econômica e ambiental dentro da estação, tornando o processo de tratamento sustentável e ecologicamente correto, criando um futuro sustentável.

Após a criação dos Objetivos de Desenvolvimento do Milênio (ODM), sua continuação foi dada pelo estabelecimento dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS), concentrando esforços no sentido de, até 2030, atender aos objetivos globais propostos pela Organização das Nações Unidas. Dentre os 17 objetivos globais a ser cumpridos, esta tese está

alinhada com o atendimento dos seguintes: 6 – Água limpa e saneamento; e 7 – Energia limpa e acessível. Especificamente, em relação ao sexto objetivo, tem aderência com as metas de ampliar a capacitação e cooperação em atividades relacionadas ao tratamento de efluentes e de melhorar a qualidade da água. Já referente ao sétimo, há um alinhamento com as metas de melhoria e modernização tecnológica da eficiência energética usando tecnologias avançadas e mais limpas, além de manter sintonia com outros objetivos, como reduzir o impacto ambiental no que concerne à qualidade do ar.

Universalizar o saneamento e o aproveitamento energético dos subprodutos das ETEs é determinante para a preservação do meio ambiente, além de a implantação de tecnologias nesses processos contribuir para o alcance das metas estabelecidas (ODS), reduzindo o impacto ambiental e corroborando para a sustentabilidade das estações de tratamento e a gestão ambiental. Nesse sentido, tornar o biogás um produto comercialmente viável, eliminar o desperdício de queimá-lo ao ar livre e aproveitar seu poder calorífico na própria estação ou praticando sua comercialização é fundamental para mitigar os impactos ambientais e fomentar a economia circular, pela gestão dos resíduos do processo de tratamento de esgoto.

É fato que o consumo de água sem o devido tratamento está diretamente ligado à mortalidade infantil e a altas taxas de hospitalização da população por diarreias (INSTITUTO TRATA BRASIL, 2022). Nessa questão, é preciso garantir um tratamento de esgoto eficiente, parametrizado e com um bom desempenho, o que está diretamente ligado ao emprego de tecnologia. Isso porque a eficiência total no processo não pode ser alcançada apenas com a coleta e análise periódica das amostras em laboratório, uma vez que, até a conclusão desse processo, muitas vezes o esgoto já sofreu o tratamento e foi desaguado nos corpos receptores. A aplicação de tecnologia permite um controle em tempo real, facilitando a tomada de decisão e os ajustes necessários para maximizar o processo de tratamento, gerando um efluente e subprodutos com maior qualidade, como o biogás e o lodo.

O investimento no esgotamento sanitário, portanto, pode ser considerado uma das principais providências para proteger o meio ambiente e auxiliar no cuidado com as mudanças climáticas, sendo visto como um dos temas de maior importância da próxima década, o que leva a crer que a governança será cada vez mais observada pelo mercado e por toda a população, além de contribuir para a construção de uma economia de baixo carbono, regenerativa, inclusiva e circular no Brasil (INSTITUTO TRATA BRASIL, 2023). Nessa direção, o novo Marco Legal do Saneamento (BRASIL, 2020a) alterou diversos instrumentos legais, incluindo o papel da agência reguladora nacional, levando a grandes expectativas na publicidade de informações e num maior controle para garantir a qualidade no processo. Tais mudanças são acompanhadas

de grandes desafios e oportunidades, como o acesso a energias renováveis. A International Energy Agency (2022), a esse respeito, afirma que, se as empresas de saneamento da América Latina produzissem energia a partir do esgoto, seria possível atender à toda a sua demanda, além de injetar mais 50% na rede.

Com o mundo vivenciando a primeira crise global de energia, desencadeada pela invasão russa na Ucrânia, a União Europeia pretende aumentar sua participação na construção de um sistema de energia "à prova do futuro", investindo em energias renováveis, como o biogás e o hidrogênio. Para tanto, tem procurado formas de reduzir sua dependência energética das importações russas, como também apoiado a expansão de biogases, com uma previsão de crescimento 35% ao ano e estimativa de, até 2050, chegar a uma produção de mais de um bilhão de metros cúbicos de gases de baixa emissão, como hidrogênio, biogases e metano sintético, o que corresponde a quase um terço da demanda total de combustível gasoso consumida (INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, 2022).

Dentre os países da União Europeia, a Alemanha tem liderança no potencial de geração de biogases. Das ETEs que recebem o esgoto da população, aproximadamente 40% aproveitam esse biogás para gerar eletricidade e calor (GERMANY, 2018). O projeto PROBIOGÁS, coordenado pelo Ministério da Integração e do Desenvolvimento Regional, vem ao encontro dessa prática. Trata-se de uma cooperação entre os governos brasileiro e alemão a fim de aprimorar o conhecimento e preencher lacunas existentes, tanto na metodologia de trabalho quanto na documentação delas lacunas, e inserir o biogás na matriz energética nacional, contribuindo para a redução de emissões de gases indutores do efeito estufa (BRASIL, 2005). O modelo a que se refere esta tese foi construído a partir de uma base teórica, obtida de trabalhos que utilizaram equipamentos provenientes desse convênio (PAULA, 2019; HERNANDEZ, 2019).

Também é relevante citar outra iniciativa do governo alemão, em Hamburgo, que permitiu que a ETE, além do tratamento do esgoto, produzisse energia elétrica com um gerador que converte em energia os gases e o lodo do esgoto, além de contar com três turbinas eólicas e um sistema fotovoltaico; esse conjunto produz mais eletricidade do que é necessário para sua operação (MR, 2023). Na mesma linha, no Brasil, o Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Social (BNDES), um dos maiores investidores no setor de infraestrutura nacional, em 2022 lançou um programa de compra de créditos de carbono, enquanto o Banco Mundial anunciou um novo fundo para apoiar projetos de redução de emissões e o Banco Bilbao Vizcaya criou um empréstimo sustentável com uma pegada de carbono no setor hídrico, que envolveu

24 instituições financeiras (INSTITUTO TRATA BRASIL, 2023). Isso demonstra a sintonia do planeta com questões ambientais, e não somente instituições públicas.

De forma relacionada a esse panorama, em seu estudo, Gervasoni e Cantão (2011) constataram discrepância em diferentes metodologias de cálculo de produção de metano (componente do biogás responsável por sua capacidade calorífica) em duas ETEs do Paraná. Além desse, outros trabalhos relatam a contradição entre a quantidade de biogás produzido e o valor estimado por modelos matemáticos (LOBATO, 2011). Portanto, novos modelos mais precisos devem ser desenvolvidos.

Existem vários métodos para o desenvolvimento de soluções inteligentes para ETEs, tais como: sistemas baseados em conhecimento, em casos, em raciocínio, aprendizagem de máquina, mineração de dados, agentes autônomos, inteligência computacional (Redes Neurais Artificiais – RNA, algoritmos genéticos, sistemas neuro-fuzzy, sistemas adaptativos etc.) (CARBUREANU; OPREA, 2013). No entanto, um programa de manipulação de dados só pode fornecer respostas a situações para as quais ele foi programado. Quando se trabalha com variáveis lineares e não independentes, essa é uma tarefa relativamente fácil, mas, quando se pretende obter respostas de situações não previstas, é necessário o conhecimento de especialistas no assunto, o qual possui um grau de incerteza, devendo ser mapeado.

Para representar esse conhecimento por regras lógicas, tem-se a Inteligência Artificial (IA) como uma boa ferramenta para essa abordagem (RUSSEL; NORVIG, 2013). Isso porque a IA sistematiza e automatiza tarefas intelectuais do ser humano, ou seja, pode ser relevante em qualquer esfera de atividade, o que motiva sua aplicação na área de saneamento, de forma a auxiliar o trabalho dos operadores diariamente (HERNÁNDEZ-DEL-OLMO; LLANES; GAUDIOSO, 2012). Dentre as ferramentas de IA, as redes neurais vêm ganhando popularidade na modelagem e nos processos de tratamento de efluentes biológicos (HONGA *et al.*, 2007).

Este trabalho tem ênfase em esgoto doméstico, predizendo a produção de biogás a partir de dados reais obtidos de uma estação de tratamento que utiliza reatores anaeróbios para o tratamento do esgoto doméstico. Assim, permeia a interdisciplinaridade, por trabalhar com ETEs e a utilização de *softwares* relacionados à IA, com o objetivo de desenvolver um protótipo de interface para *website*, usando um modelo computacional com a rede que apresentou melhor desempenho, a fim de predizer a produção de biogás em ETEs mediante técnicas de IA, considerando variáveis físico-químicas de entrada de um reator anaeróbio.

1.1 JUSTIFICATIVA

Além dos problemas ambientais gerados pela queima de combustíveis fosseis, há outros relacionados à estiagem, que influenciam a redução da produção de energia elétrica. A utilização de biogás como matriz energética é tema recorrente no Brasil e no mundo, principalmente na Europa, tendo em vista os conflitos militares lá existentes. Diferentes abordagens foram utilizadas na tentativa de encontrar soluções para essa demanda, a exemplo da IA, utilizando modelos de previsão em sistemas biológicos de produção de biogás.

No Brasil, as estações compostas por reatores anaeróbios conduzem o biogás produzido até queimadores abertos, onde ele é parcialmente destruído (BILOTTA; ROSS, 2016). Esse sistema de queima é pouco eficiente devido às condições atmosféricas e, consequentemente, tem uma eficiência entre 10% e 50% na destruição do metano (KAMINSKI *et al*., 2021), o que faz com que as taxas de emissão de gases do efeito estufa sejam pouco reduzidas.

A utilização desse subproduto, mesmo que de forma incipiente, corrobora com os ODS, mas, mesmo que tal aproveitamento energético já venha acontecendo no país (POSSETTI *et al*., 2019), a Associação Brasileira do Biogás (ABIOGÁS, 2023) estima que o Brasil deixa de aproveitar, por ano, cerca de 44,1 bilhões de metros cúbicos de biogás, considerando a geração da agroindústria, pecuária e saneamento, quantidade que seria suficiente para fornecer 19 GW para a produção de energia elétrica, equivalendo a suprir 34,5% da demanda de energia elétrica. Tal produção, combinada com iniciativas como a da Agência Nacional de Energia Elétrica (Aneel), que, via regulamentação de geração distribuída, está viabilizando conectar aos sistemas uma constelação de pequenos geradores, fomentando o aproveitamento de energias renováveis (BLEY JR., 2015), demonstra a importância desse assunto, visto que, atualmente, apenas 2% do potencial é aproveitado (ABIOGÁS, 2022). Outra iniciativa relevante que demonstra a atualidade do tema é a Chamada Pública CPBIO25 da Companhia Paranaense de Gás para aquisição de biometano, que resultou em 22 propostas.

Atualmente, para controlar a vazão e a composição do biogás, são realizadas anotações dos valores das variáveis físico-químicas do reator, para uma posterior análise e possível tomada de decisão por um especialista humano, ou seja, as decisões são reações a problemas encontrados. Isso porque as ETEs, na maior parte do Brasil, não possuem sensores eletrônicos que medem e monitoram a produção do biogás; esses equipamentos são geralmente importados e de custo elevado, além de requerer aferição e monitoramento frequente.

Levando em consideração a realidade das ETEs, cujos investimentos nem sempre são suficientes para seu aparelhamento com equipamentos eletrônicos de monitoramento, um modelo computacional permitiria um controle maior sobre o biogás gerado, a fim de que ele tenha um elevado poder calorífico, tornando a sua utilização viável. O modelo computacional é uma alternativa que traz a capacidade de predição e otimização para sistemas de digestão anaeróbia (KANA *et al*., 2012), ou seja, com a criação de um modelo computacional com recursos de IA, é possível lançar as informações na ferramenta computacional e prever o resultado da vazão do biogás produzido em tempo real, simulando os resultados antes mesmo de o processo iniciar.

Esta pesquisa busca auxiliar a tornar as ETEs sustentáveis, permitindo um controle proativo do biogás, a fim de que possa ser comercializado ou utilizado na própria estação, gerando, com isso, receita, e não apenas despesas, como é a realidade encontrada (ROSA *et al.*, 2016). Assim, a ferramenta pretende ser uma solução ambiental para contribuir na geração de energia por meio do uso do biogás.

Para tanto, foram empregados os dados coletados por Paula (2019) e Hernandez (2019) de uma estação localizada na cidade de Curitiba, servindo de base de dados para o desenvolvimento do modelo; por ser uma série temporal, possibilita seu uso em uma rede neural temporal, como a rede neural convolucional (CNN), buscando analisar seu desempenho frente a questões biológicas e ambientais. Dessa forma, este estudo complementa as pesquisas empreendidas por esses autores, visando a dois resultados: (i) apresentar um modelo computacional com a capacidade de predizer variáveis resultantes do pós-tratamento do biogás; (ii) criar uma aplicação prática que possibilite ao operador, a partir dos dados de entrada lançados, gerenciar a operação da estação em tempo real.

1.2 ESTRUTURA DA TESE

A tese está organizada em seis capítulos, sendo o primeiro dedicado à introdução; o segundo, à revisão de literatura, que envolve a discussão sobre saneamento e IA; o terceiro, aos procedimentos metodológicos, mostrando a forma como o trabalho foi desenvolvido. No quarto capítulo, é apresentado como o modelo foi implementado, enquanto os resultados estão presentes no quinto capítulo, finalizando com as considerações finais.

1.3 OBJETIVOS

1.3.1 Objetivo geral

O objetivo da tese é desenvolver um protótipo de interface para *website*, usando um modelo computacional com a rede que apresentou melhor desempenho, para predizer a produção de biogás em ETEs utilizando técnicas de IA, a partir de variáveis físico-químicas de entrada de um reator anaeróbio em uma ETE doméstico.

1.3.2 Objetivos específicos

a) Avaliar a topologia de RNA e de sua variante, a CNN.
b) Selecionar a rede que apresenta melhor desempenho para aplicá-la a um protótipo de interface *web* que permita tomada de decisão operacional.

1.4 HIPÓTESE DE PESQUISA

É possível utilizar RNA na tomada de decisão operacional em ETEs. Tal presunção está fundamentada no entendimento de que é possível o emprego de RNA com o objetivo de predizer a produção de biogás, informação que pode auxiliar na tomada das decisões operacionais.

2 REVISÃO DE LITERATURA

A fim de verificar as publicações sobre o tema de interesse desta pesquisa, realizou-se uma análise bibliométrica nas principais plataformas de consulta a publicações, com o objetivo da construção do estado da arte. Assim, a revisão sistemática buscou investigar os artigos científicos sobre a adoção de redes neurais em estações de tratamento para predição de subprodutos, usando dados reais, a partir de palavras-chave relevantes ao tema, sem delimitação de ano de publicação e filtrando apenas por artigos, nas seguintes plataformas: Web of Science, ScienceDirect, Scopus, Scientific Electronic Library Online (SciELO) e Portal de Periódicos da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

Para garantir uma pesquisa de artigos com maior aderência aos objetivos deste trabalho, foram definidas as *strings* de pesquisa, consistindo em três termos separados e combinados com operadores lógicos, cada termo se concentrando em um aspecto da modelagem. No primeiro grupo de palavras-chave de busca, "biogás" e seus sinônimos foram utilizados por representar artigos que utilizam reatores anaeróbios, na seguinte combinação: (biogas ou *biomethane** ou *methane**). Na segunda combinação, foi utilizado o termo "*perceptron*", que está presente em aplicações com IA que, mais especificamente, respondem às questões deste estudo; trata-se de redes constituídas por neurônios artificiais em várias camadas. Adotando apenas as duas combinações, mais de 50 mil registros foram exibidos. Então, foi aplicado o terceiro e último filtro, que serviu para o refinamento esperado, incluindo a palavra-chave "*wastewater*", a fim de focar o tratamento de esgoto.

Após a leitura dos títulos e resumos dos trabalhos retornados, dentre os artigos mais aderentes ao tema de pesquisa, foram selecionados 18, os quais ampararam a maior parte do trabalho. Embora a quantidade de artigos das plataformas pareça baixa, trata-se de uma área interdisciplinar, sendo importante informar que muitos artigos foram rejeitados por não focar o saneamento e estações de tratamento. O artigo mais antigo identificado era datado de 2001; depois de 2015, houve publicações em todos os anos e, após 2020, elas aumentaram em relação aos anos anteriores. Muitos dos artigos rejeitados concentravam-se em biodigestores, em propriedades rurais e tratamento químico de empresas privadas.

A predição aplicada a estações de tratamento é um assunto que tem se tornado cada vez mais útil, pois desempenha um papel importante na gestão ambiental, na redução dos gases do efeito estufa e na sustentabilidade das estações de tratamento. Esse tema é comumente abordado no meio científico, sendo que várias metodologias não lineares já foram estudadas, como nos

trabalhos de Hamed, Khalafallah e Hassanien (2004), Canete *et al.* (2016), Choi e Park (2001), Mjalli, Al-Asheh e Alfadala (2007), entre outras apresentadas no texto. Dentre elas, destaca-se, com os melhores resultados (HOLUBAR *et al*., 2002; KANAT; SARAL, 2009; SAKIEWICZ *et al*., 2020), a utilização de RNA, as quais têm sido abordadas como alternativas viáveis para essa tarefa, desempenhando um papel importante na transição de tecnologia.

Várias arquiteturas de RNA já foram utilizadas para a previsão de vazões, como o Perceptron de Múltiplas Camadas (MLP) (KUSIAK; WEI, 2012), a rede neural com função de ativação de base radial (RBF) (SAKIEWICZ *et al*, 2020) e a rede neuro-fuzzy (ASADI; GUO; MCPHEDRAN, 2020), servindo de base para demonstrar a aplicabilidade de técnicas de IA em ambiente de saneamento.

O conhecimento usado em sistemas inteligentes é de base heurística, não algorítmica. Segundo Wan *et al*. (2011), esse conhecimento eleva o raciocínio a um nível de especialista (perito), como redes neurais e sistemas *fuzzy*, capazes de modelar sistemas não lineares (BHAT; MCAVOY, 1990). A vantagem da adoção de sistemas inteligentes é que não é necessário criar um modelo matemático, podendo ser usado um modelo baseado em regras, o que elimina deficiências do controle tradicional que dependem de modelos matemáticos (WAN *et al*., 2011). Assim, o uso de IA na avaliação do desempenho de estações de tratamento é uma maneira eficiente para determinar dependências complexas e estratégias assertivas para resolver problemas operacionais (CINAR, 2005; ERDIRENCELEBI; YALPIR, 2011; CORTES *et al*., 2000).

Também é possível encontrar publicações com redes temporais *Long Short-Term Memory* (LSTN) aplicadas a processos de digestão anaeróbia, como observado em McCormick e Villa (2019), o que demonstra a viabilidade da utilização da tecnologia das redes temporais no âmbito desta pesquisa.

Portanto, a partir da pesquisa bibliométrica realizada, pode-se concluir, até o momento, o ineditismo desta tese, que se insere em uma linha voltada ao uso de técnicas de redes neurais como ferramenta de apoio à tomada de decisão no tratamento do esgoto doméstico em ETEs que utilizam reatores anaeróbios, além de contemplar o emprego de redes neurais temporais do tipo CNN ao tratamento de esgoto doméstico em reatores anaeróbios.

Com a finalidade de fundamentar os conceitos aplicados no desenvolvimento da tese, são apresentadas, nas próximas seções, definições necessárias para a compreensão dos assuntos pertinentes ao desenvolvimento do modelo computacional proposto.

2.1 TRATAMENTO DE ESGOTO

Antes de iniciar o assunto de tratamento de esgoto, é necessário especificar que a literatura classifica esgoto em dois grupos: os esgotos sanitários e os esgotos industriais, com características distintas e bem definidas (JORDÃO; PESSOA, 2011). O foco deste trabalho, em sua íntegra, é o esgoto sanitário, ou seja, o esgoto doméstico.

As ETEs são projetadas para remover compostos orgânicos e inorgânicos, em suspensão e dissolvidos, nutrientes, microrganismos, entre outros, de modo a atender aos parâmetros e limites de qualidade do efluente para o seu descarte em corpos hídricos, porém a variação da vazão de esgoto afluente afeta a qualidade do tratamento (JORDÃO; PESSOA, 2011). Os principais fatores que têm impacto nessa variação são: tipo de esgoto coletado (doméstico ou misto), condições climáticas, regime de escoamento (por gravidade ou sob pressão), entre outros aspectos construtivos da estação. Portanto, não basta o controle metabólico dos microrganismos, mas também o controle das variáveis ambientais que envolvem o processo de tratamento.

O tratamento mais encontrado no país faz uso da tecnologia anaeróbia (BRASIL, 2017), a qual é também encontrada na estação em que os dados foram coletados (PAULA, 2019); portanto, este estudo não tratará de reatores aeróbios, mas exclusivamente dos anaeróbios, cujo método de tratamento envolve a biodigestão ocorrida na ausência de oxigênio, um processo biológico e natural que tem por objetivo promover a transformação de compostos orgânicos complexos em compostos mais simples, originando principalmente o biogás e o dióxido de carbono (PROSAB, 1999). Contudo, se não houver o controle do processo de biodigestão, será improvável usufruir dos subprodutos gerados.

A utilização desses subprodutos possui importância econômica e ambiental, havendo vários trabalhos que relatam os benefícios para a viabilidade econômica do uso do biogás (DENG *et al*., 2014; ALMEIDA; ARRUDA, 2014). Para tanto, é necessária uma composição controlada, com o maior índice possível de gás metano, a fim de apresentar um considerável poder calorífico. Como exemplo desse uso, a Companhia de Saneamento Básico do Estado de São Paulo (SABESP), em seu relatório de sustentabilidade anual (SÃO PAULO, 2022), demonstrou que aproveita parte do biogás oriundo do tratamento de esgoto na ETE de França para o abastecimento de 38 veículos leves, adaptados para gás natural veicular, além de utilizar o biogás como recurso energético.

Dentro do escopo deste trabalho, nas próximas seções, serão tratados os pontos relevantes do tratamento de esgoto para a análise.

2.1.1 Temperatura

A estabilidade da temperatura dentro dos reatores é um fator significativo na digestão anaeróbia, pois, além de influenciar o progresso do metabolismo bacteriano, dá condições para a estabilidade iônica da solubilidade dos substratos (PROSAB, 1999).

Cada tipo de bactéria presente no esgoto tem um intervalo de temperatura ideal para o seu desenvolvimento e, com base nesse fator, elas podem ser divididas em grupos, a saber: psicrofílicas (0 a 20 °C), mesofílicas (20 a 42 °C) e termofílicas (42 a 75 °C). Qualquer redução nessas temperaturas de forma drástica e não controlada diminui a velocidade de decomposição, por isso é tão importante a estabilidade da temperatura no reator, e não apenas sua elevação ou redução (RAJESHWARI *et al.*, 2000; PAULA, 2019).

O esgoto possui uma temperatura superior à do ar e da água tratada, devido ao despejo de águas aquecidas no descarte do esgoto domésticos, na faixa de 20 a 25 °C (JORDÃO; PESSOA, 2011), o que favorece a digestão anaeróbia convencional, que ocorre na faixa de temperatura mesofílica (KIM *et al*., 2006); a elevação da temperatura dentro dessa faixa de valores contribui para um aumento da *performance* do reator (VINDIS *et al*., 2009).

Dada a ligação estabelecida entre a temperatura e o processo biológico na atividade das bactérias presentes no sistema de tratamento biológico, tem-se como consequência um impacto na composição do biogás gerado no fim do processo. Assim, manter a estabilidade da temperatura nos reatores torna-se importante e garante um equilíbrio da atividade bacteriana, além de permitir um tratamento do esgoto mais eficiente, pois temperaturas muito frias reduzem a velocidade do crescimento das bactérias e temperaturas muito elevadas reduzem a produção de biogás, em virtude da queda dos substratos disponíveis com a mudança de estado para a fase gasosa.

2.1.2 Características químicas

Baseando-se nas características químicas do esgoto, pode-se classificá-lo em dois grandes grupos: matéria inorgânica e matéria orgânica. Aproximadamente 70% dos sólidos contidos no esgoto doméstico são orgânicos, constituídos por uma mistura de carbono, hidrogênio e, na maioria dos casos, nitrogênio (JORDÃO; PESSOA, 2011). A disponibilidade desses compostos é crucial para todos os processos biológicos (PROSAB, 1999).

A constituição do esgoto doméstico e do esgoto industrial é distinta, pois suas composições químicas são diferentes, o que tem uma influência direta na composição do biogás gerado.

2.1.3 Demanda bioquímica de oxigênio

A matéria orgânica é o principal componente do esgoto doméstico, portanto esse indicador precisa ser monitorado. A forma mais usual de medir a fração de matéria orgânica presente é por meio da indicação da Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO). A parcela de matéria orgânica presente, sinalizada pela DBO, indica o grau de poluição do afluente – quanto maior for o grau de poluição orgânica, maior será a DBO; consequentemente, assim que a matéria orgânica se estabiliza, decresce a DBO (JORDÃO; PESSOA, 2011).

Análises de DBO, Demanda Química de Oxigênio (DQO) e Sólidos Suspensos Totais (SST) determinam a eficiência de determinados tipos de reator (ANDREOLI; SPERLING; FERNANDES, 2014).

2.1.4 Demanda química de oxigênio

A DQO, também encontrada na literatura como *Chemical Oxigen Demand* (COD), representa a quantidade de oxigênio necessária para oxidar a parcela orgânica de uma amostra por meio da ação de um agente químico (BEM *et al*., 2013), ou seja, ela avalia o oxigênio dissolvido consumido que leva à degradação de matéria orgânica, sendo o carbono, durante o processo de oxidação química, convertido em gás carbônico e água.

Tanto a DQO quanto a DBO são indicadores usados para análise do esgoto e devem ser empregados como parâmetro de monitoramento da eficiência de degradação da matéria orgânica no tratamento biológico.

2.1.5 Tratamento anaeróbio

Todo tratamento de esgoto anaeróbio em uma estação de tratamento pode ser dividido em etapas, iniciando com o tratamento preliminar, que é constituído pelo gradeamento e desarenador, com o intuito de remover sólidos grosseiros e areia. Na sequência, a ETE conta com reatores de cobertura de lodo anaeróbio de fluxo ascendente (UASB)/biodigestor e lagoas aeradas, que representam o tratamento secundário que acontece antes de desaguar no corpo receptor, conforme pode ser observado na Figura 1.

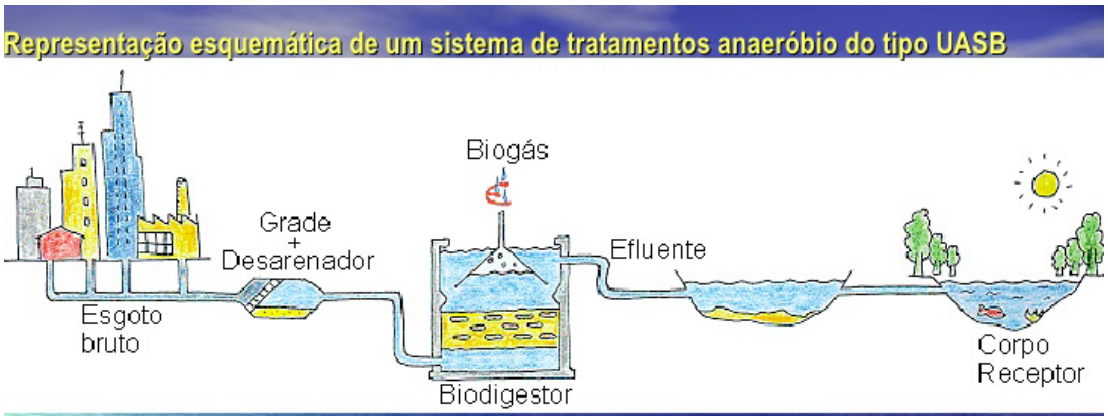

FIGURA 1 – Esquema de tratamento anaeróbio do tipo UASB (ORTH, 2007).

Durante o tratamento secundário, nos reatores UASB, acontece o tratamento anaeróbio, no qual o esgoto é tratado com microrganismos, que se alimentam da matéria orgânica. Nessa etapa, ocorre uma simbiose entre os vários tipos de bactéria ativa no tratamento anaeróbio, com o intuito de remover a matéria orgânica (LETTING, 1991).

Dentre os sistemas de tratamento anaeróbio disponíveis, reatores UASB são os mais utilizados, porém existem variações, principalmente em relação às características construtivas (SPERLING, 2016). Nesse sentido, o enfoque deste estudo são os Reatores Anaeróbio de Lodo Fluidizado (RALF), amplamente utilizados pela Companhia de Saneamento do Paraná.

De toda forma, o método de digestão anaeróbia é distribuído em cinco etapas: hidrólise, acidogênese, acetogênese, metanogênese e sulfetogênese, como pode ser observado na Figura

2. Essas cinco fases são processadas pela ação de microrganismos, que se dividem em três grupos principais: bactérias fermentativas, bactérias sintróficas e arqueas metanogênicas (MCCARTY, 1964).

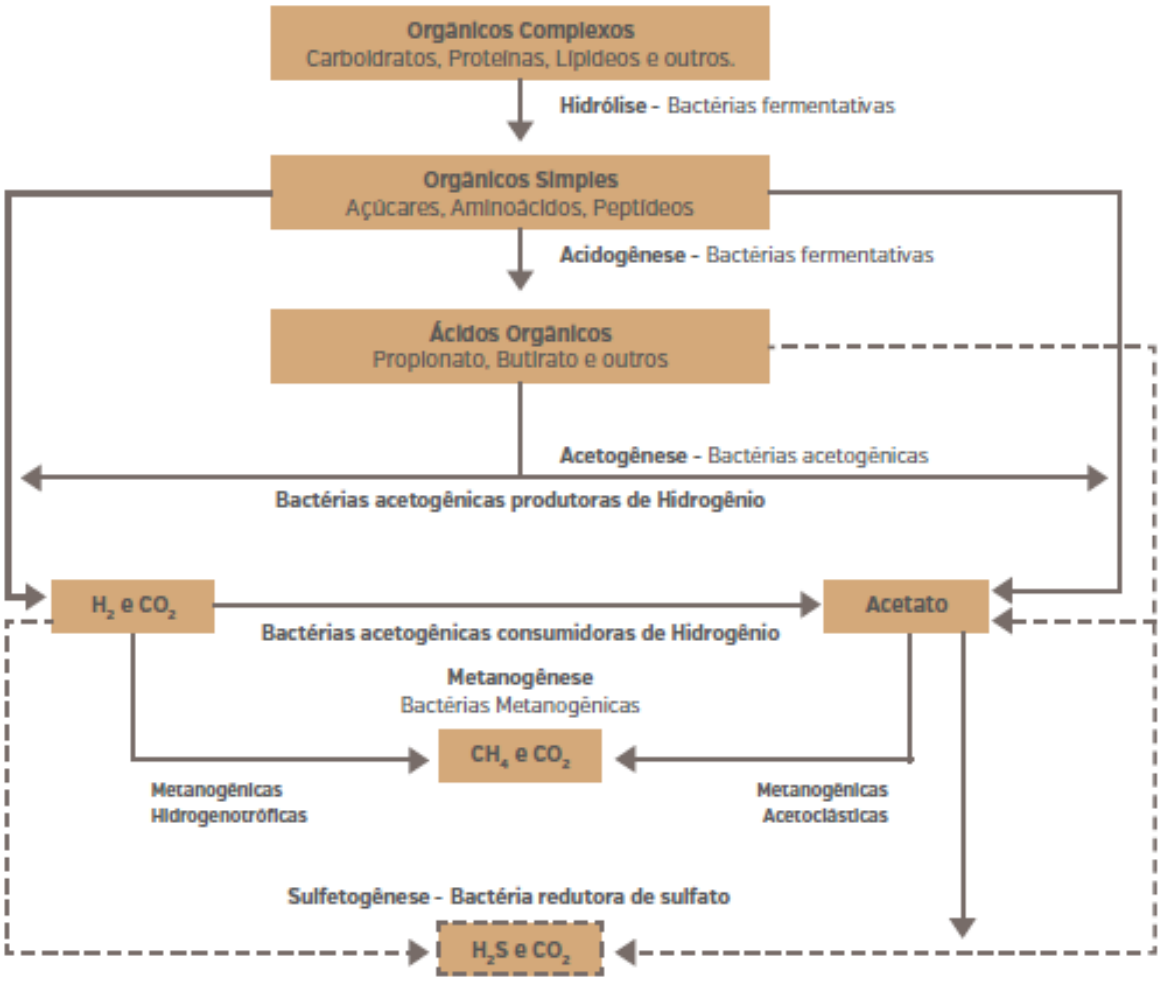

FIGURA 2 – Etapas da digestão anaeróbia de esgoto sanitário (CHERNICHARO, 2016).

Na fase da metanogênese, é formado o gás metano, resultante da atuação das arqueas metanogênicas anaeróbias, as quais convertem o dióxido de carbono, o hidrogênio e o ácido acético em metano e dióxido de carbono (HAANDEL; LETTINGA, 1994). O desempenho dessa etapa garante a eficiência na produção de metano, mantém o digestor estabilizado e, em condições propícias, assegura que os metanogênicos regulem e neutralizem o pH e realizem a conversão dos ácidos graxos voláteis em metano e outros gases.

2.1.5.1 Reatores de leito fluidizado

O reator UASB foi desenvolvido na década de 1970 e, no Brasil, foi aperfeiçoado com a inclusão de um sistema de polimento via lagoas aeradas para tratamento do efluente líquido. Além do tratamento do lodo, foi incluído um sistema composto por adensador por gravidade, secagem mecânica e centrífugas, passando a inertização do lodo desidratado a ser realizada com cal (SCHILLING; JAYME; CAEDOSO, 2014). Essas técnicas aplicadas ao reator ganharam a denominação RALF.

Os reatores UASB encontram-se em operação no Brasil há mais de 20 anos, sendo aplicados ao tratamento de esgoto, e o estado do Paraná foi um dos pioneiros em sua utilização. Os RALF são bem semelhantes, com a diferença básica estando no grau de expansão do lodo, ou seja, no grau de fluidificação. Este é a condição hidrodinâmica do reator, que, na prática, significa a relação linear entre a perda de carga e a velocidade ascensional do líquido no reator (PROSAB, 2009). O biogás produzido segue, então, por tubulações para queima ou um possível aproveitamento, podendo seu formato e dimensões variar.

A principal vantagem deste tipo de reator é o baixo custo de implantação e operação, além de não necessitar de um vasto espaço e de sua eficiência no tratamento do esgoto doméstico. Por outro lado, apresenta como desvantagem emanar maus odores e, por ter seu funcionamento baseado em material biológico, eventuais cargas tóxicas podem afetar seu desempenho (CHERNICHARO, 2016).

2.1.6 Produção de biogás em reatores UASB

Biogás é uma mistura gasosa classificada como biocombustível, que recebe esse nome por ser uma fonte de energia renovável, a qual resulta da digestão anaeróbia da matéria orgânica presente em esgotos sanitários. O gás produzido por meio da decomposição da biomassa, também denominada matéria orgânica presente no esgoto, no reator é na ordem de 400 a 700 l/kg de matéria orgânica introduzida, de acordo com as características da digestão do reator e da temperatura (JORDÃO; PESSOA, 2011).

A concentração e a composição da matéria orgânica presente no esgoto e a temperatura dentro do reator em que o processo está sendo mantido são fatores determinantes da composição

do biogás, em geral constituído majoritariamente por gás metano e gás carbônico (CO_2), com pequenas quantidades de gás sulfídrico e demais componentes, como pode ser observado na Tabela 1.

TABELA 1 – Composição do biogás (PROSAB, 2009).

Composto	**%**
Metano (CH_4)	50 a 75
Dióxido de carbono (CO_2)	25 a 40
Hidrogênio (H_2)	1 a 3
Nitrogênio (N_2)	0,5 a 2,5
Oxigênio (O_2)	0,1 a 1
Gás sulfídrico (H_2S)	0,1 a 0,5
Amônio (NH_3)	0,1 a 0,5
Monóxido de carbono (CO)	0 a 0,1
Água (H_20)	Variável

2.1.7 Poder calorífico do biogás

A capacidade calorífica do biogás depende do gás metano contido nele, que é produzido durante a degradação biológica da matéria orgânica, processo em que são gerados os demais componentes apresentados na Tabela 2, cujas quantidades variam de acordo com o tipo de tratamento biológico e o substrato utilizado (BILOTTA; ROSS, 2016). O biogás pode ser utilizado como biocombustível, produzindo calor, e a energia térmica gerada pode ser convertida em energia elétrica (TOLMASQUIM, 2003); para isso, é recomendado que sua concentração disponha de um grande percentual de metano, o que implica a maior eficiência possível no tratamento biológico.

Além da quantidade de metano, outros fatores podem interferir no poder calorífico do biogás, como quantidade de vapor de água e dióxido de carbono, qualidade do esgoto doméstico, temperatura ambiente e pH (FARIA, 2012). Em combustíveis gasosos compostos por monóxido de carbono, hidrogênio gasoso, metano, acetileno ou etino e etileno ou eteno, calcula-se o poder calorífico pelo percentual de compostos (volumétrico, mássico ou molar), conforme Tabela 2 (JOSÉ, 2004).

TABELA 2 – Poder calorífico superior e inferior de alguns gases (JOSÉ, 2004).

Composto	PCS ($kcal.kg^{-1}$)	PCI ($kcal.kg^{-1}$)
Hidrogênio (H_2)	34.400	29.000
Monóxido de carbono (CO)	2.440	2.440
Metano (CH_4)	13.250	11.900
Etileno (C_2H_4)	12.000	11.230
Acetileno (C_2H_2)	12.000	11.600

O biogás, após um processo de purificação, passa a ser denominado biometano, com maior poder calorífico, a depender do processo de purificação, que consiste em retirar todo o ácido sulfídrico, dióxido de carbono e vapor de água. A eficiência pode atingir 99%, alcançando o poder calorífico da gasolina, por exemplo (WELLINGER; MURPHY; BAXTER, 2013), fato que abre perspectivas para o futuro. Em países como Suíça e Suécia, ônibus e caminhões já utilizam o biometano como combustível (EDER, 2012), reduzindo, assim, as emissões de metano e mitigando o efeito estufa.

2.1.8 Monitoramento da composição do biogás

Uma das formas de monitorar a composição do biogás é por equipamentos eletrônicos e sensores, existindo vários disponíveis no mercado; os próprios para esse fim, em sua maioria, são importados (HERNANDEZ, 2019).

Na ETE em estudo, o equipamento disponível para monitoramento da composição do biogás é o analisador de biogás Multitec® BioControl 2, da Sewerin (Figura 3), um sistema de medição desenvolvido para estações de tratamento, que monitora e registra automaticamente os dados da qualidade do gás de forma contínua (HERNANDEZ, 2019).

FIGURA 3 – Analisador de biogás Multitec® BioControl 2 (SEWERIN, 2018).

2.2 INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

O termo “inteligência artificial” surgiu em 1956 e, por ser um tema muito amplo, há várias definições, sempre de acordo com a área ou campo de atuação. Em uma definição geral, seria um ramo da computação que estuda automação e comportamento inteligente (LUGER, 2013), ou seja, a IA estuda como as pessoas resolvem problemas e como as máquinas podem se assemelhar a esse comportamento humano, algo como fazer máquinas possuírem características da inteligência humana (SIMÕES; SHAW, 2011), mas indo além, pois, ao copiar as funções do cérebro humano, elas são capazes de compreender relações complexas e padrões existentes nos dados analisados.

A IA envolve competências como identificar padrões e imagens, reconhecer linguagem escrita e falada, perceber relações, construir algoritmos para tomada de decisão usando conhecimento de especialistas, entre outras. O diferencial é sua capacidade de aprender, e não apenas processar dados, adquirindo “raciocínios”, integrando novas experiências e, assim, gerando conhecimento para a solução de problemas ou a realização de tarefas (HAYKIN, 2001).

Algumas vantagens no uso de IA incluem (HERNÁNDEZ-DEL-OLMO; LLANES; GAUDIOSO, 2012):

a) A aprendizagem do sistema surge de forma natural, a partir da interação com o ambiente, o que traz um conhecimento mais real e robusto do que algo cognitivo, com apenas entradas e saídas.

b) O conhecimento emerge diretamente da observação e da interação com o ambiente, o que permite detectar situações não percebidas pelos seres humanos.
c) O sistema aprende continuamente, o que significa uma resposta melhor ante mudanças rápidas em seu ambiente.
d) A autonomia do sistema é diferente das abordagens convencionais.

Pôde-se perceber, pela bibliografia estudada, que a área de IA é ampla, sendo importante uma análise mais profunda, a fim de situar a RNA escolhida, a ser discutida nas próximas seções a partir dos artigos encontrados que utilizam essa tecnologia na área de saneamento com sucesso. Assim, o Quadro 1 sintetiza os principais modelos de IA, além de trazer exemplos práticos.

QUADRO 1 – Comparativo entre os modelos de IA.

Identificação	Filosofia	Características	Exemplos
Sistema especialista	Reproduz o conhecimento de um especialista, adquirido ao longo de anos de trabalho.	Permite a construção de regras. Tomada de decisão na ausência de informações.	Jogos (BARBOSA; VEIGA; CARVALHO, 2015), sistemas especialistas de manejo ambiental e diagnósticos (PIVELLO, 1991) na agricultura.
Raciocínio baseado em casos	Busca solução para uma situação atual pela comparação com uma experiência passada semelhante.	Busca a experiência mais semelhante na memória e aplica o conhecimento no problema atual.	Sistema *web* de *help desk* (PILGER; HUGO, 2012) e predição de questões ambientais (SCHOENINGER *et al*., 2008).
RNA	Semelhante à mente humana, usa neurônios artificiais, buscando imitar as habilidades computacionais do nosso cérebro.	Sua característica mais importante é a capacidade de aprender e, com isso, melhorar seu desempenho, aprendendo por exemplos.	Reconhecimento de caracteres, robótica e processamento de voz (RUFINER; MILONE, 2004).
Agente inteligente	O foco não está na representação do conhecimento individual, mas, sim, na interação e no comportamento social.	Resolução distribuída de problemas.	Pesquisa automática na internet (BOHÓRQUEZ; TÉLLEZ; RODRÍGUEZ, 2012), controle de tráfego aéreo e ambientes inteligentes de aprendizagem.
Algoritmo genético	Método adaptativo que pode ser usado para resolver problemas de busca e otimização.	Técnica robusta que permite a manipulação com êxito de uma variedade de problemas provenientes das mais diferentes áreas. Não garante soluções ótimas, mas encontra soluções aceitáveis em um tempo razoável. Seu campo de aplicação se encontra na tentativa de solução de problemas para os quais não existem bons algoritmos.	Identificação de aptidões agrícolas do solo (FERREIRA NETO *et al*., 2011).
Mineração de dados	Técnica de descoberta automática de informações.	Procura por padrões em bases de dados. Utilizada para revelar informações estratégicas em grande volume de dados.	Reconhecimento de veredas em parques estaduais (SALA, 2009).

2.2.1 Redes neurais artificiais

A RNA, ferramenta poderosa da IA destinada ao controle inteligente, emula tarefas biológicas do ser humano para resolver tarefas de controle, tendo a capacidade de aprender a controlar um sistema, mediante exemplos numéricos, enquanto a técnica *fuzzy* aprende via exemplos semânticos (SIMÕES; SHAW, 2011).

Inspiradas no sistema nervoso central dos organismos superiores, cujo princípio de funcionamento traz a capacidade de reconhecer padrões de dados mediante seu treinamento, aprendendo a realizar generalizações baseadas no conhecimento adquirido (HAYKIN, 2001), as RNA têm sido frequentemente utilizadas para predição na área ambiental. Sua estrutura pode ser dividida em três partes: camada de entrada, camada intermediária ou oculta e camada de saída, correspondendo a primeira às variáveis de entrada do sistema, enquanto a última representa a variável de saída esperada, estando no intervalo entre elas as camadas ocultas (LAUWERS *et al*., 2013). Quando a rede possui uma ou mais camadas ocultas entre a camada de entrada e a de saída, é considerada um MLP.

As redes neurais são compostas por neurônios artificiais capazes de executar funções matemáticas que, na maioria dos casos, são não lineares, apropriados para modelar, de forma adequada, processos biológicos, caso do tratamento de esgoto, devido à sua complexidade e comportamento não linear. Silva, Spatti e Flauzino (2010) definem neurônio artificial como um modelo simplificado dos neurônios biológicos, sendo geralmente não lineares, com a função de coletar os valores das suas entradas e produzir uma resposta, levando em consideração sua função de ativação.

A função de ativação é necessária para introduzir a não linearidade da rede; sem ela, as camadas ocultas não se tornam tão poderosas. Nos trabalhos abordados neste estudo, a maioria dos autores usou a função de ativação sigmoide, em geral preferida às funções de ativação de limiar. Isso porque as funções de limite são difíceis de treinar, tendo em vista que o gradiente não existe ou é zero, o que torna impossível o uso da técnica de retropropagação ou métodos mais eficientes (KUSIAK; WEI, 2012).

Os melhores resultados de função de ativação da camada oculta, ou seja, com menores erros de validação, foram da função sigmoide, como indicado por Haykin (2009) e Beltramo, Ranzan e Hinrichs (2016), que, quando aplicada à camada oculta, proporciona uma flexibilidade computacional em relação aos métodos de regressão linear, com um desempenho e uma previsão mais apurados sobre a variável desejada.

Camadas ocultas, intermediárias ou mesmo escondidas possuem neurônios, que podem ser muitos ou nenhum, sendo responsáveis pela extração das características e pelo processamento a ser inserido na rede. Assim, a escolha da rede neural não se deu ao acaso, sendo vastamente encontrada na bibliografia sua aplicação a bioprocessos não lineares multivariados e processos ambientais, como reatores anaeróbios, sendo, assim, uma poderosa ferramenta para predição e otimização de processos biológicos (WAEWSAK; NOPHARATANA; CHAIPRASERT, 2010; GARLAPATI; BANERJEE, 2010).

2.2.1.1 Arquitetura *feedforward*

A arquitetura *feedforward* representa o sentido em que a rede trabalha suas informações; de maneira mais específica, ela segue o fluxo-padrão, com origem na camada de entrada e finalizando na camada de saída, conforme Figura 4.

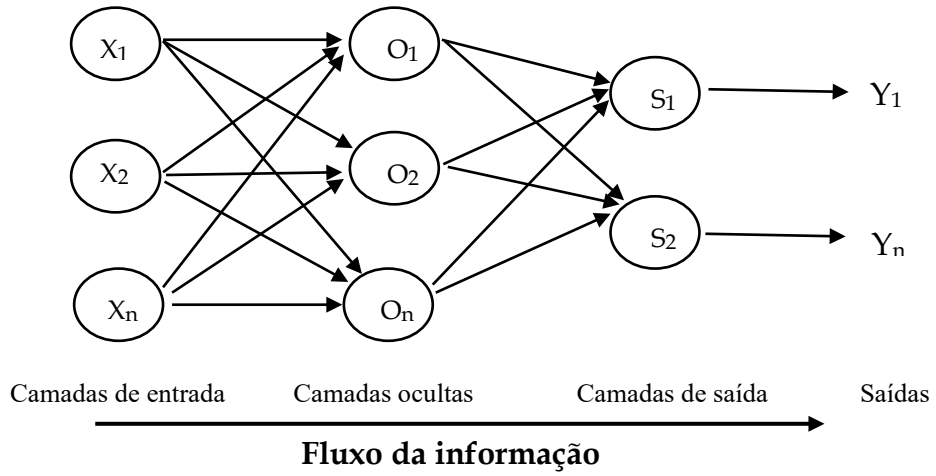

FIGURA 4 – Arquitetura *feedforward* (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010).

Na Figura 4, as camadas de entrada são representadas por X_1, X_2 e X_n; as camadas ocultas, por O_1, O_2 e O_n; e as camadas de saída, por S_1, S_2 e S_n. Independentemente dessa configuração da rede, por pertencer à arquitetura *feedforward,* as ligações entre os neurônios são direcionadas sempre para o mesmo sentido.

2.2.1.2 Arquitetura recorrente

A arquitetura recorrente é multidirecional, pois permite mais de um sentido de propagação entre os neurônios, por isso ela também é chamada realimentada, tendo funcionamento distinto da *feedforward*. Para ser denominada recorrente, é necessário que ao menos a saída de um neurônio sirva como entrada para outro neurônio de uma camada anterior ou da mesma camada (BRAGA; LUDERMIR; CARVALHO, 2011).

As redes recorrentes apresentam características que trazem bons resultados quando aplicadas a problemas com relação ao tempo e previsões de séries temporais (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010).

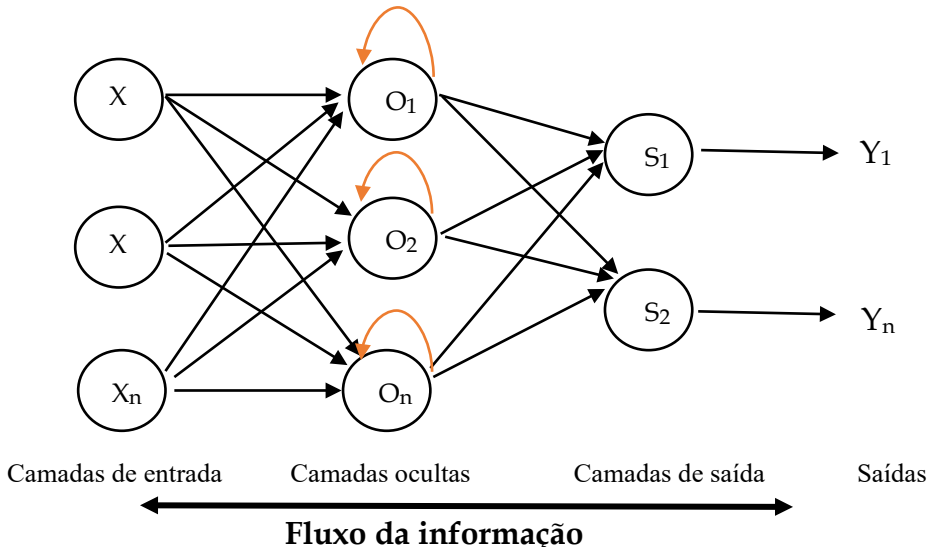

FIGURA 5 – Arquitetura recorrente.

A Figura 5 apresenta um modelo didático de rede recorrente, no qual a saída dos neurônios (O_1, O_2 a O_n) é usada como informações de entrada pelos mesmos neurônios na camada oculta, formando um processo recorrente de alimentação. Dessa forma, a informação não segue um sentido só da camada de entrada para a camada de saída, pois, ao chegar à camada oculta, retorna e realimenta a rede.

2.2.2 Treinamento e teste

Uma etapa importante da criação de um modelo baseado em redes neurais é identificar se os dados disponíveis são suficientes e como eles podem ser divididos entre calibração e avaliação de desempenho. Para tal tarefa, os dados existentes precisam ser subdivididos em conjuntos de dados de treinamento e dados de teste, sendo, ainda, possível criar um terceiro grupo, chamado validação (SAKIEWICZ *et al*., 2020), porém a maioria dos artigos abordados neste estudo criou apenas os dois grupos principais, fazendo a validação com o teste. Na etapa de treinamento, os dados do subconjunto são usados para realizar o aprendizado e ajustar os pesos da rede; para tal ajuste, a retropropagação é a técnica de treinamento mais usada.

Na modelagem espacial, o conceito de divisão de dados pode ocorrer usando uma subdivisão temporal ou espacial. Maier *et al*. (2010), por exemplo, propuseram uma abordagem de modelagem com 168 pontos de dados sendo divididos em subconjuntos de treinamento e teste para cada um dos modelos.

A abordagem de divisão de dados utilizada no método de aprendizado supervisionado, também chamada tentativa e erro, é comum nos experimentos com IA, pois não há uma forma exata de identificar o melhor modelo ou a taxa de treinamento ideal sem aplicar um modelo e testar sua taxa de erro, comparando com os demais, a fim de verificar os melhores resultados. Dentre os artigos estudados, mais da metade utilizou essa técnica em algum momento do trabalho (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004; CANETE *et al*., 2016; MJALLI; AL-ASHEH; ALFADALA, 2007; ASADI; GUO; MCPHEDRAN, 2020; ALSULAILI; REFAIE, 2021; NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018; HEJABI *et al*., 2021).

Outra tarefa necessária é definir o conjunto dos dados que fará parte de cada grupo e como sua seleção será feita (de forma aleatória ou baseada em alguma abordagem). Não há um consenso sobre quais percentuais devem ser adotados, apenas que devem estar inclusas nos conjuntos de testes condições relevantes, como períodos com pouca e bastante chuva, por exemplo (BENNETT *et al*., 2013). Para selecionar de forma correta, quando observada uma diferença discrepante entre as amostras de calibração e teste, deve-se analisá-la a fim de identificar as distorções e verificar a possível solução, até que, por tentativa e erro, seja possível determinar um modelo aceitável.

Bennett *et al*. (2013), em seu estudo focado na área ambiental, apresentam várias técnicas de divisão de dados, incluindo uma seleção baseada em eventos que ocorreram no período, a classificação prévia dos estados climáticos, a média temporal, métricas, porém

afirmam que, para avaliar os modelos, é quase impossível uma correspondência exata entre o modelo e os dados, não sendo desejável que isso ocorra, pois se deve procurar entender o grau de erro inerente aos dados para, então, avaliar os critérios de desempenho do modelo. Isso corrobora o identificado durante a revisão de literatura, tendo em vista que a abordagem comum é o uso da técnica de tentativa e erro, na qual se criam grupos dentro dos conjuntos, que são testados e cujos resultados são validados, a fim de identificar os melhores desempenhos (HAMED; KHALA|FALLAH; HASSANIEN, 2004; HEJABI *et al*., 2021).

Posto isso, é preciso destacar que, neste estudo, não foram coletados dados referentes ao estado climático nos dias de coleta, o que não permitiu incluir as variáveis climáticas no treinamento. Obter dados de estações de tratamento não traria a assertividade necessária, pois a temperatura do reator não corresponde à temperatura ambiente. Para que a coleta fosse ideal, deveriam ter sido identificadas as variáveis climáticas durante a obtenção dos dados das variáveis de entrada.

Nas abordagens com apenas grupos de treinamento e teste, o percentual de dados de treinamento inicia em 60% e 40% para testes, variando até 90% para treinamento e 10% para testes (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004), sendo encontradas as mais diversas combinações dentro dessa faixa de percentuais.

De forma geral, a análise para definir os grupos de teste e treinamento deve realmente representar os dois grupos, podendo a rede perder todo seu sucesso se a utilização das amostras não representar, de forma significativa, o problema a ser mapeado. Uma técnica que auxilia a minimizar esse problema é a validação cruzada, baseada em submeter a rede a diversos conjuntos de treinamento ao final de cada etapa, sendo calculado, por fim, o erro médio (HAYKIN, 2009).

2.2.3 Perceptron de múltiplas camadas

A rede MLP é constituída por neurônios artificiais em várias camadas, de modo que o sinal de entrada se propaga camada por camada, desde a camada de entrada até a de saída, independentemente do número de camadas ocultas disponíveis (KAYKIN, 2001).

O treinamento é um processo interativo, com o peso das conexões sendo ajustado sempre para fornecer um erro mínimo entre a saída real e a saída prevista. Uma vez que a rede esteja devidamente treinada, uma nova entrada leva a uma nova saída, semelhante à saída

correta; por esse motivo, as redes MLP são consideradas uma das mais versáteis arquiteturas, sendo usadas em praticamente todas as áreas do conhecimento e para as mais diversas funções, como reconhecimento de padrões, previsão de séries temporais, otimização de sistemas e identificação e controle de processos (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010).

Para aplicação da rede MLP, é necessário um método de treinamento aplicado sobre ela, sendo a técnica mais conhecida empregada o algoritmo de retropropagação ou *backpropagation*, devido ao seu rápido aprendizado e precisão de desempenho. Esse algoritmo é utilizado para treinamento supervisionado, pois minimiza o erro entre a saída observada e a prevista, trabalhando com duas fases, a primeira chamada fase de avanço e a segunda, de retrocesso. Nesse processo, ocorrem modificações de intensidade nas conexões baseadas nas diferenças dos sinais previstos e observados no neurônio de saída (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004).

Dentre os diferentes tipos de rede disponíveis, a rede de propagação *feedforward-back* é a favorita entre os autores que trabalham com saneamento em reatores UASB, por ser a mais adequada para modelar a digestão anaeróbia (HOLUBAR *et* al., 2002).

A equação de ativação de uma rede MLP é representada na Equação 1.

$$z\frac{l}{j} = \sum_{k=1}^{N}\left(\omega\frac{l}{jk}\cdot a\frac{l-1}{k}\right) + b\frac{l}{j} \qquad (1)$$

$$a\frac{l}{j} = \varphi(z\frac{1}{j})$$

Em que: N é o número de entradas do neurônio; $\omega\frac{l}{jk}$ representa o peso vindo do neurônio k da camada $l-1$ para o neurônio j da camada l; $a\frac{l}{k}$, $b\frac{l}{j}$ e $z\frac{l}{k}$ correspondem, respectivamente, à ativação, bias e peso ponderado do neurônio k da camada l (SOUZA, 2019).

2.2.4 Equação de erro e fórmula de avaliação

A aplicação de redes neurais é ampla na literatura, mas é fundamental estabelecer uma forma de confiar nos resultados da pesquisa, por isso é tão importante avaliar e determinar a melhor métrica de desempenho para determinado modelo, evitando possíveis inconsistências decorrentes do julgamento humano.

Em seu trabalho, Bennett *et al*. (2013) apresentam um resumo de 11 métodos de comparação de modelos, no qual estão presentes os mais tradicionais encontrados na bibliografia: gráficos de dispersão, média, moda, mediana e variância. Eles ressaltam que o gráfico de dispersão é o método mais simples, além de ser um modelo ideal e imparcial, que serve para comparar modelos de todas as magnitudes, tendo como única desvantagem a indexação de tempo dos dados, que é perdida. No caso de um modelo perfeito, este apresenta apenas pontos na diagonal principal; os que destoam desse grupo significam falhas ou alarmes falsos, que contribuem para identificar sub e superestimação do modelo.

Outra técnica usual de estatística multivariada é a análise de componentes principais (PCA), que investiga a correlação estatística, sendo frequentemente aplicada para determinar relações exclusivamente lineares entre variáveis de entrada e, assim, permitindo a redução de dados de entrada, eliminando informações redundantes (JOLLIFFE, 2005). Com ela, é possível medir o grau de sensibilidade de cada variável e entender melhor o grau de correlação entre elas.

Conforme citado por Bennett *et al*. (2013) e demonstrado no Quadro 2, dos muitos cálculos possíveis utilizados nos modelos estudados, o mais comum é o erro quadrático médio (MSE), porém, se o modelo em que o cálculo é aplicado inclina-se a sub ou superestimar os dados medidos, erros positivos e negativos tendem a se anular. Para resolver tal situação, são usados a raiz do erro quadrático médio (RMSE) e o erro médio absoluto (MAE). No entanto, esses cálculos também têm suas particularidades e, para definir qual usar, devem ser analisados os conjuntos de dados disponíveis. Um modelo com RMSE e MAE tendendo a zero é o preferido, com coeficiente de determinação (R^2) num intervalo de [0, 1] uma medida estatística de quão perto as previsões estão dos dados reais (BENNETT *et al*., 2013). Ressalta-se que a RMSE demonstra a diferença entre os valores observados e estimados, variando entre [0, 1]; quanto menor for o valor, melhor será o ajuste. No caso da IA, ela avalia a discrepância aditiva e relativa nas médias e variâncias observadas e simuladas; no entanto, deve-se notar que a IA é excessivamente sensível a valores extremos devido às diferenças quadradas. Ademais, para modelos baseados em estatística, é apropriado calcular a correlação com a qual é possível indicar como a variação de uma variável é explicada por uma segunda variável. Nesse sentido, a correlação de Pearson é usada para calcular a correlação entre duas séries de dados, enquanto o R^2 é uma versão quadrada do Pearson, comumente usada para medir a eficiência dos modelos.

QUADRO 2 – Comparação de índices estatísticos (BENNETT *et al*., 2013).

Nome	Fórmula	Intervalo	Valor ideal	Observações
MSE	$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2$	(-∞, +∞)	0	Calcula um erro médio (em unidades de dados ao quadrado). Quadrar os dados pode causar perspectiva para grandes eventos.
RMSE	$\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2}$	(0, ∞)	0	Raiz do MSE, cujo resultado é retornado nas mesmas unidades do modelo, o que é útil para interpretação.
MAE	$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\lvert y_i - \hat{y}_i\rvert$	(0, ∞)	0	Semelhante à RMSE, exceto pelo valor absoluto ser usado. Isso reduz o viés para grandes eventos; no entanto, também produz um operador não suave quando usado na otimização.
Erro máximo absoluto (AME)	$max\lvert y_i - \hat{y}_i\rvert$	-	-	Registra o erro absoluto máximo.

A avaliação do desempenho é apenas uma parte do desenvolvimento da rede. A partir dos resultados obtidos, pode ser necessário um maior aprimoramento; se o desempenho está aquém do esperado, talvez seja preciso fazer uma revisão dos dados ou adotar um modelo diferente e, no caso de o desempenho estar dentro do esperado ou superar as expectativas, pode-se trabalhar na sua otimização, simplificando o modelo ou aplicando outros ajustes. Uma das formas de avaliar esse desempenho é pela detecção de padrões; os gráficos de dispersão corroboram para essa aptidão, permitindo identificar se os valores previstos se aproximam dos valores reais.

Conforme observado por Bennett *et al.* (2013), usar RMSE ou R^2 para o início das métricas pode trazer bons resultados. A correlação R representa o grau de relacionamento de duas variáveis, no caso, a comparação entre os dados reais e os dados preditos pela aplicação, valor que oscila de zero a um, positiva ou negativamente. A despeito disso, o que define a melhor técnica é o propósito do modelo, seus objetivos específicos (JAKEMAN; LITTLEWOOD; WHITEHEAD, 1990); quando isso não é possível, podem ser usadas simultaneamente várias métricas, a fim de estabelecer qual cumprirá melhor a função de avaliar o modelo. Esses diversos testes garantem que a métrica escolhida seja adequada.

2.2.5 Redes neurais convolucionais

Em 1998, foi desenvolvido um novo tipo de rede, que, no futuro, seria formalizada como CNN, uma arquitetura usando *backpropagation* e uma rede *feedforward* com muitas camadas ocultas, apresentando excelentes resultados no tratamento de imagens (DATA SCIENCE ACADEMY, 2022).

O então chamado aprendizado profundo tornou-se conhecido mundialmente por experimentos de visão computacional populares, como carros autônomos, robótica, *drones*, diagnósticos médicos, entre outras atividades populares. As CNN são redes neurais profundas, ou seja, possuem várias camadas ocultas, com neurônios interligados, sendo muito utilizadas no reconhecimento de imagens e em aspectos visuais, além de ser empregadas na análise de textos e demais atividades (DATA SCIENCE ACADEMY, 2022). Por serem redes totalmente conectadas entre camadas, apresentam resultados de treinamento satisfatórios e usam critérios de hierarquia no seu treinamento, explorando as características observadas (LECUN *et al*., 1998).

Séries temporais são coleções de observações ocorridas ao longo do tempo, que implicam a relação de pelo menos um dado da série com os seus anteriores, ou seja, há uma relação temporal, de modo que um elemento tem relação com seus elementos anteriores. Redes neurais com atraso de tempo (TDNN) também são conhecidas como CNN unidimensionais (POVEY *et al*., 2018). A definição da quantidade de atrasos, ou seja, quantos dados anteriores têm impacto naquele dado atual, é livre e deve ser ajustada conforme cada conjunto de dados. Assim, nesses sistemas, os dados deixam de ser um conjunto de amostras independentes e passam a ser funções de tempo.

Uma vez entendido o funcionamento das séries temporais, é importante compreender que, com base nessas informações, é possível modelar diversos fenômenos da natureza, com o objetivo de prever comportamentos futuros e entender o funcionamento de tais processos (MORETTIN; TOLOI, 2006). Segundo Haykin (1998), colocar o tempo em uma rede neural é possível a partir de uma representação implícita; por exemplo, o sinal de entrada é expresso do mesmo modo e a sequência dos pesos de cada neurônio conectado à camada de entrada é convolucionada com uma sequência diferente de entrada, de forma que a série temporal do sinal fica empregada na estrutura da rede.

Outro ponto relevante é a questão dos fenômenos sazonais, que são aqueles que ocorrem de forma regular em determinados períodos. Em estações de tratamento, esse fenômeno está

intimamente relacionado com o comportamento da população, como, por exemplo, o horário de banho, ou seja, os costumes e horários que as pessoas tendem a liberar material na rede coletora de esgoto e o tempo que esse material leva para chegar até a ETE, além da configuração e estrutura das tubulações e redes (HERNANDEZ, 2019).

Para a utilização de redes temporais, é necessário considerar a informação temporal de passado disponível como parte dos dados de entrada, o que é chamado memória. Ao fazer isso, a rede passa a ser dinâmica, pois utiliza os dados de saída do neurônio como informação de entrada, isto é, a saída da rede passa a ser uma função temporal. Nessa lógica, a arquitetura de uma TDNN seria algo como uma sequência finita dada por: $\{x(t), x(t-\Delta), x(t-2\Delta), \ldots, x(t-m\Delta)\}$, com uma saída única y (HASSOUN, 1995).

De acordo com Haykin (1998), uma forma de implementar essa estrutura com memórias de forma simples é estruturar a rede com a utilização de atrasos temporais (*time delays*). Uma das primeiras topologias de rede criadas com esse princípio foram as *Time-Lagged Feedforward Networks* (TLFN). A TDNN é um tipo especifico de TLFN, no qual as camadas intermediárias e de saída são duplicadas ao longo do tempo, contando com uma arquitetura *feedforward* e uma rede MLP, cuja primeira camada substituída por uma linha de atraso temporal.

Aplicações com CNN datam de 1990, porém elas ficaram muitos anos “esquecidas”, quando, em 2012, ressurgiram na competição de fotografias Imagem-net, trazendo resultados espetaculares. Esse sucesso causou uma revolução na área de visão computacional, que pode ser observada até os dias atuais e que foi uma das motivações deste trabalho, no sentido de testar essa tecnologia na predição dos comportamentos não lineares do reator biológico, pois, além dos padrões temporais relativos à sazonalidade do processo, há o tempo de detenção hidráulica dentro do reator, características que podem gerar resultados positivos em sua aplicação.

A escolha de CNN se deve ao fato de o comportamento periódico da DQO e a vazão do esgoto apresentarem características temporais, além de ela ser uma evolução da rede MLP, que tem sido usada com sucesso em várias aplicações de IA, com implementação consolidada nas plataformas de desenvolvimento, o que garante facilidade de suporte ao código.

3 PROCEDIMENTOS METODOLÓGICOS

Conforme apresentado na revisão de literatura, fica clara a dificuldade da avaliação do potencial energético do biogás e do volume de produção durante a digestão dentro do reator simplesmente se baseando em análises laboratoriais, variáveis que necessitam de controle para sua utilização em larga escala. Diante disso, o embasamento para o desenvolvimento da tese é descrito neste capítulo, abordando a metodologia, delimitações da pesquisa e procedimentos adotados, os quais abrangem as fases de levantamento e coleta de dados, seleção das variáveis e definição do método de modelagem dos dados. Nesse sentido, Neiva e Silva (2016) trazem uma abordagem específica e prática para realizar uma revisão sistemática da literatura na área de computação, a qual foi empregada nesta etapa.

3.1 CARACTERIZAÇÃO DO ESTUDO

Este trabalho consiste em uma pesquisa empírica experimental e quantitativa, que visa a fornecer subsídios de apoio à solução de um problema estratégico em ETEs, utilizando uma abordagem combinada de coleta e modelagem dos dados. Além disso, trata-se de uma pesquisa explicativa, tendo como objetivo identificar e analisar os fatores que determinam ou contribuem para a ocorrência de certos fenômenos (GIL, 2002).

O desenvolvimento deste estudo, inicialmente, se deu pela pesquisa bibliográfica, direcionada ao delineamento da pesquisa, para obtenção de todas as informações relevantes ao desenvolvimento da tese, sendo seguida da implementação do modelo, finalizando com a apresentação dos resultados obtidos.

3.1.1 Área do estudo

Para delimitar o estudo, buscou-se uma base de dados de estação de tratamento que contivesse os parâmetros necessários para o desenvolvimento do trabalho. Dentre as possibilidades encontradas, a melhor opção, devido à qualidade e quantidade de equipamentos para coleta de dados, foi a ETE Padilha Sul (PAULA, 2019; HERNANDEZ, 2019).

Na sub-bacia do Ribeirão dos Padilhas, encontra-se a referida ETE, administrada pela Companhia de Saneamento do Paraná, que trata os efluentes provenientes dessa bacia. A ETE localiza-se no município de Curitiba, Paraná, no bairro Ganchinho, e está em operação desde 2002. Atualmente, opera com uma vazão de 319 l/s, possuindo sistema completo de tratamento, contendo seis reatores UASB (ROSS, 2015). Cerca de 235 mil pessoas são atendidas pela estação, que é capaz de processar 440 l/s de esgoto. Os efluentes (esgoto já tratado) são lançados no próprio ribeirão, na confluência com o rio Iguaçu.

Quanto aos reatores anaeróbios, o sistema da ETE Padilha Sul é formado por seis RALF, com capacidade nominal de 70 l/s cada, e um pós-tratamento com duas lagoas aeradas de 271,5 x 81,0 x 4,26 m cada. Seu sistema anaeróbio contém as seguintes etapas: gradeamento, desarenador e RALF aperfeiçoado por um sistema de polimento via lagoas aeradas para tratamento do efluente líquido. O tratamento do lodo resultante dos RALF conta com um sistema composto de um adensador por gravidade, secagem mecânica por centrífugas e inertização do lodo desidratado com cal (SCHILLING; JAYME; CARDOSO, 2014).

Um dos subprodutos do tratamento que ocorre na ETE Padilha Sul é o biogás, que atualmente é queimado com queimador do tipo *flare*, porém, antes da queima, esse biogás tem seu comportamento analisado por sensores eletrônicos.

3.2 DELINEAMENTO DA PESQUISA

Seguindo a abordagem de Neiva e Silva (2016), as 12 etapas propostas foram adaptadas e condensadas em oito, tendo em vista o propósito da tese. São elas:

a) **Definição das questões de pesquisa:** tais questões referem-se ao propósito, à motivação e às respostas que se pretende encontrar. Nesta etapa, foi considerado o tipo de ETE com reatores anaeróbios, devido à liderança dessa tecnologia na América Latina, em conjunto com as mais diversas técnicas de IA.

b) **Definição das palavras-chave:** nesta etapa, a partir das questões de pesquisa, foram definidas as palavras-chave e seus sinônimos. Somente o tratamento anaeróbio foi considerado para a pesquisa, sendo o biogás gerado como subproduto. Também foi observada, entre as áreas da IA, a que atenderia ao desafio do modelo. Após essa distinção, foi adotada a RNA com arquitetura MLP, discutida na fundamentação teórica desta tese.

c) **Definição e refinamento das *strings* de pesquisa:** na fundamentação teórica, procurou-se entender as características da ETE e as variáveis envolvidas no processo, bem como o impacto delas na composição do biogás, por meio de obras internacionais e nacionais versando sobre esgoto doméstico, esgoto sanitário, reatores anaeróbios e suas variantes, composição do biogás, reatores UASB e IA, selecionadas mediante as seguintes *strings*: (biogas ou biomethane* ou methane*), concatenado com (perceptron), refinando por (wastewater).
d) **Definição e execução da pesquisa das *strings* nos motores de busca:** a escolha dos motores de busca visou a representar toda a literatura relevante sobre o assunto, tendo sido utilizadas as seguintes bases: Web of Science, ScienceDirect, Scopus, SciELO e Portal de Periódicos da CAPES.
e) **Coleta dos resultados da pesquisa:** os resultados da pesquisa foram armazenados para leitura e avaliação.
f) **Definição dos critérios de inclusão e exclusão:** nesta etapa, filtros foram aplicados para identificar os artigos relevantes, baseando-se em estações de tratamento que aplicaram técnicas de IA. Após a leitura dos resumos, a seleção dos trabalhos foi realizada para leitura completa.
g) **Definição dos modelos e das variáveis relevantes:** foram identificados os modelos e as variáveis físico-químicas que obtiveram sucesso nos artigos selecionados, afim de compreender o sucesso de cada método.
h) **Desenvolvimento do modelo:** aplicou-se a técnica de regressão de IA selecionada, a partir dos conhecimentos adquiridos durante a revisão bibliográfica.

3.2.1 Variáveis de saída

O processo de tratamento de esgoto é um problema complexo que envolve muitos aspectos, uma vez que há dezenas de variáveis presentes; portanto, é necessário concentrar-se em um aspecto particular, que atenda ao propósito da modelagem, de maneira que o foco deste estudo foi o biogás, ignorando lodo e outras eventuais variáveis.

No levantamento realizado na revisão de literatura, verificou-se que é comum entre os autores predizer variáveis relacionadas ao biogás (ASADI; GUO; MCPHEDRAN, 2020; AKBAS; BILGEN; TURHAN, 2015; KUSIAK; WEI, 2012; SAKIEWICZ *et al*., 2020;

KANAT; SARAL, 2009; HOLUBAR *et al.*, 2002), DBO (ALSULAILI; REFAIE, 2021; HEJABI *et al*., 2021; HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004), DQO (NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018; CANETE *et al.*, 2016) e sólidos (MJALLI; AL-ASHEH; ALFADALA, 2007). Por outro lado, considerando as possibilidades e variáveis de entrada observadas nos mesmos trabalhos, ficou difícil de estabelecer essa tendência.

Dentre todas as variáveis utilizadas como saída dos modelos, quatro delas apresentaram destaque, a saber: DBO, DQO, SST e volume de biogás produzido em metros cúbicos. Além delas, foi possível encontrar nitrogênio e composição do biogás em mais de um trabalho e, em apenas um estudo, pH, saídas do fluxo de efluente de tratamento secundário e ácidos graxos.

Interessa observar que, apenas em um estudo cada, a DBO (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004) e a DQO (CANETE *et al.*, 2016) foram associadas com outras variáveis como combinação de variável de saída; nos demais, todos os modelos usavam como saída DBO e DQO conjuntamente (MJALLI; AL-ASHEH; ALFADALA, 2007; ALSULAILI; REFAE, 2021; NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018; HEJABI *et al.*, 2021).

A distribuição dessas variáveis pode ser observada na Figura 6.

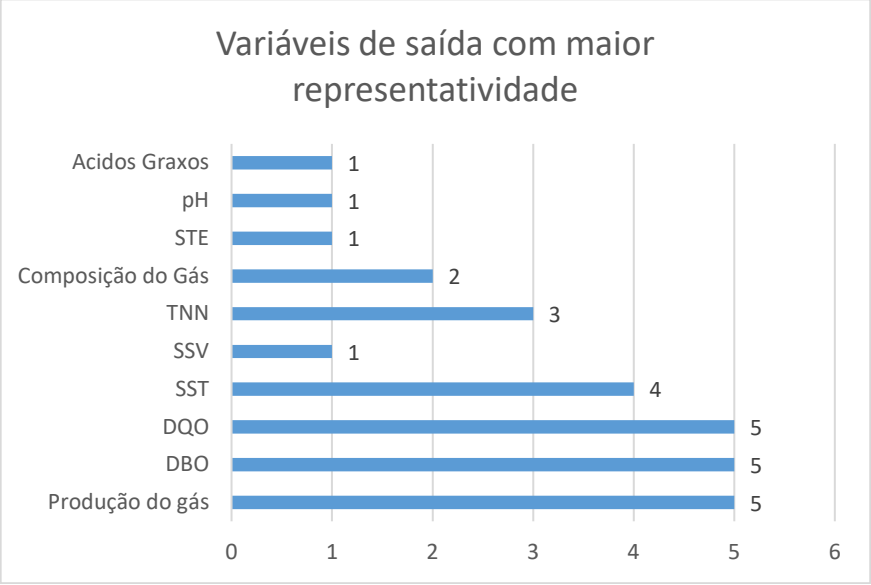

FIGURA 6 – Saídas encontradas na revisão, por número de trabalhos.

3.2.2 Variáveis de entrada

Kana *et al.* (2012) destacam a importância do controle das variáveis de entrada em um sistema de biodigestão, visto a produção do biogás estar intimamente ligada com essa

supervisão, ou seja, quando a combinação das variáveis de entrada é correta, é possível potencializar a produção de biogás.

Como já informado, o tratamento biológico é um problema complexo que envolve muitos aspectos, portanto os modelos não tentam representar todos os aspectos do problema. Nesse sentido, na seção anterior, observou-se um número pequeno de variáveis de saída, pois o universo de opções é bem menor em comparação com as variáveis de entrada, o que pode justificar a tendência observada. Já as variáveis de entrada, que servem de base para a previsão desses dados, são as mais diversas possíveis.

Igoni *et al.* (2008), discutindo sobre as variáveis que influenciam a produção de metano, informam que a concentração de sólidos totais, por exemplo, tem um impacto na eficácia dos microrganismos no processo de decomposição. Durante a digestão anaeróbia, identificou-se que a produção de metano aumentou quando a porcentagem de sólidos totais aumentou. Após a análise estatística, indicou-se que o primeiro era uma função de potência do segundo e que havia um ponto em que não se obteria mais aumento na produção de metano, à medida que a porcentagem de sólidos totais continuasse ampliando.

Ainda, em condições ideais de funcionamento do reator, mesmo que as comunidades de microrganismos anaeróbios possam suportar determinadas variações, elas prosperam melhor em determinadas condições. Para aumentar a produção de metano, o digestor deve ser mantido a uma temperatura constante, pois mudanças rápidas têm impacto nas atividades bacterianas. Essa é também a razão pela qual a maioria dos digestores anaeróbios requer algum nível de isolamento ou aquecimento, que geralmente aumenta a produção de metano nas estações frias do ano.

As variáveis dos reatores influenciam seu desempenho, sendo necessário manter seu controle, porém é difícil medir algumas que são dominantes, a exemplo da DBO. Para concluir sua análise, são necessários cinco dias de incubação da amostra (KIM *et al.*, 2006), o que dificulta a tomada de decisão de interferir ou não no tratamento em tempo real, pois, ao receber o resultado do material analisado, ele não se encontra mais na estação e o biogás já foi produzido, impossibilitando a interferência naquele produto já gerado com atitudes como alterar o pH, a temperatura ou até a quantidade de matéria orgânica. Como resultado, o gestor não pode avaliar com precisão se o subproduto que será produzido, como, por exemplo, o biogás, terá uma composição ideal, com alta concentração de metano.

A DBO tem um papel importante no desempenho do reator, pois sua alta concentração requer maior tempo de aeração e fornecimento de mais oxigênio, por isso o uso de ferramentas de predição é fundamental para o apoio na tomada de decisão e a gestão da estação, com vistas

a identificar o comportamento do reator, sem a necessidade da coleta e análise em laboratório dessas amostras.

Ademais, a obtenção de dados das variáveis é um problema complexo devido ao ambiente hostil das estações, por conterem vários gases e ácidos, que causam danos aos equipamentos eletrônicos e a necessidade de análises laboratoriais que, em determinadas situações, não têm seu resultado obtido no mesmo dia da coleta. Diante disso, a maioria dos modelos não tenta modelar todos os aspectos, sendo seu propósito definido de acordo com as variáveis obtidas.

Dentre as variáveis de entrada usadas na literatura abordada neste trabalho, encontraram-se mais de 30 distintas, algumas comuns em diversos estudos. De acordo com a Figura 7, as três mais citadas foram SST, alcalinidade (pH) e DQO, seguidas de Sólidos Suspensos Voláteis (SSV), DBO e temperatura; as demais encontradas nas publicações não possuem tanta representatividade.

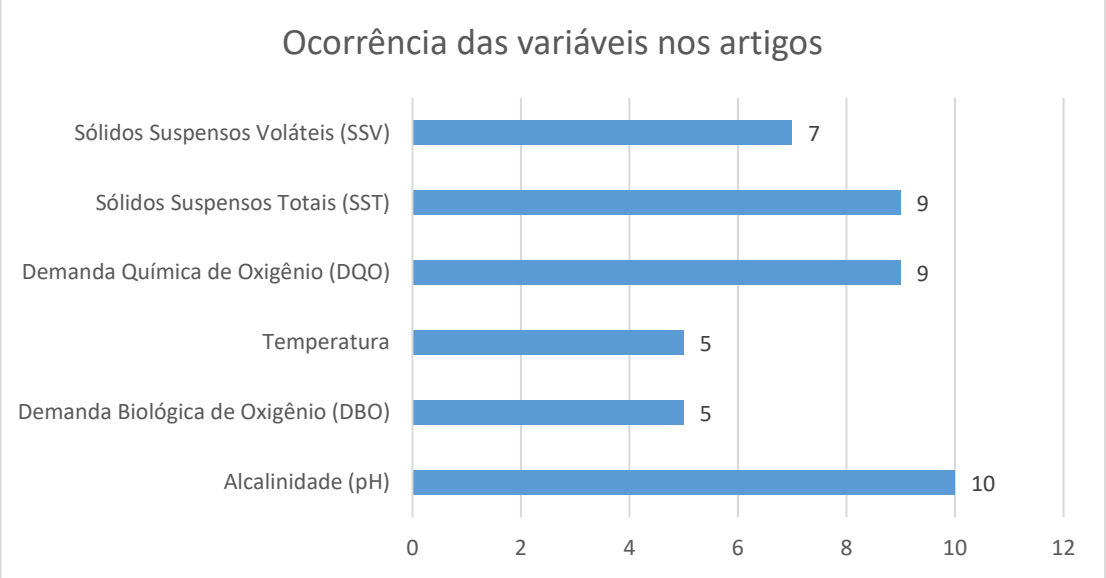

FIGURA 7 – Ocorrência das variáveis nos artigos pesquisados, por número de trabalhos.

De acordo com Alsulaili e Refaie (2021), a maior parte da literatura abordada em seu estudo utilizou SST, DQO e DBO para prever o desempenho de estações de tratamento usando modelos com redes neurais. Tal afirmação advém de esses indicadores serem considerados os parâmetros de controle da qualidade do efluente (ABBA; ELKIRAN, 2017). Pode-se justificar o elevado uso da DQO, percebido na Figura 7, por ser uma alternativa quando comparado ao emprego da DBO, que requer um teste mais demorado (ABBA; ELKIRAN, 2017).

Por outro lado, observou-se que o nitrogênio como variável de entrada ou de saída não é representativo – Canete *et al.* (2016) e Nourani, Elkiran e Abba (2018) utilizaram como

variável de entrada e saída o total e a concentração nitrogênio nos tanques; Sakiewicz *et al.* (2020) o empregaram como variável de entrada, enquanto Choi e Park (2001), como uma das variáveis de saída.

Ainda, Canete *et al.* (2016) relataram a importância das ferramentas que utilizam redes neurais para os operadores de plantas de estações de tratamento. Na mesma linha, Alsulaili e Refaie (2021) e Abba e Elkiran (2017) testaram, em suas pesquisas, vários modelos de RNA e concluíram que, para predizer o desempenho de estações de tratamento com modelos baseados em IA, é recomendado o uso de dados de SST, DBO e DQO para a criação do protótipo. Isso foi justificado pelo desenvolvimento de várias estruturas para obter a RNA com o melhor desempenho, tendo sido avaliadas redes com 27 combinações de entradas diferentes. A mais adequada para predição da DBO efluente foi com a combinação de DBO do afluente, pH e temperatura; já quando se trata da DQO, as variáveis que melhor predisseram foram temperatura, pH e condutividade. O SST do efluente foi melhor previsto pela temperatura, DBO do afluente e SST. Posto isso, para o desenvolvimento da tese, foram adotadas as variáveis: vazão do esgoto, DQO, SST e SSV.

3.2.3 Análise dos dados

Dados de estações de tratamento não são muito comuns, tendo em vista a complexidade em sua obtenção, tanto pelo ambiente hostil a sensores eletrônicos, devido à presença de gases e ácidos nocivos a esses equipamentos (HERNANDEZ, 2019), quanto pelo processo manual de coleta, além da necessidade de análises laboratoriais, que normalmente demandam um tempo longo para os resultados. Essa realidade dificulta ao pesquisador fazer análises e aplicar modelagens matemáticas ou computacionais com as variáveis ideais, pois nem sempre é possível obtê-las, havendo também a dificuldade econômica, pelos custos laboratoriais.

Na bibliografia, as pesquisas não utilizam dados obtidos após uma análise criteriosa de quais variáveis monitorar e, sim, contam com os dados disponíveis e publicados, o que faz com que os modelos desenvolvidos levem em consideração apenas algumas das características físico-químicas presentes no processo de biodigestão. Ademais, é comum o uso de técnicas estatísticas para identificar os elementos que têm mais significância para aplicação nos modelos. Nesse sentido, durante a revisão bibliográfica, as técnicas mais empregadas foram a análise de correlação e a PCA, com o objetivo de identificar a significância de cada variável e

o seu grau de correlação com as demais existentes nas pesquisas. Com isso, é possível deixar o modelo mais simples, reduzindo o número de variáveis e incluindo apenas as altamente correlacionadas.

Asadi, Guo e McPhedran (2020) criaram três cenários em sua pesquisa: no cenário 1, foi aplicado o teste de correlação e as variáveis altamente correlacionadas foram usadas, o que resultou na redução de dez para oito parâmetros; no cenário 2, as variáveis menos correlacionadas foram usadas, o que resultou em uma redução adicional para apenas três parâmetros; no cenário 3, a PCA foi aplicada, com o objetivo de identificar as relações lineares entre as variáveis, de forma a eliminar informações redundantes, o que levou a um total de cinco parâmetros de entrada. O cenário 3, assim, foi identificado como o que apresentou melhores resultados, com estimativas mais precisas se comparadas com as dos outros. Mas, em todos os casos, os resultados foram satisfatórios.

Por sua vez, Choi e Park (2001) empregaram o que denominaram técnica de RNA híbrida, combinando a PCA com redes neurais. Inicialmente, analisaram a correlação entre os parâmetros e, em seguida, todas as variáveis foram convertidas em componentes principais para a PCA. Além desse método, foram testadas a regressão multivariada e a regressão de componente principal (PCR), ambas com sucesso.

Por fim, Dogan *et al.* (2015) sinalizam que variáveis insignificantes devem ser evitadas para melhorar o desempenho da RNA, enquanto Abba e Elkiran (2017) alertam que, quanto menor for o número de variáveis de entrada, menor será o desempenho do modelo, ou seja, é necessário um criterioso trabalho de escolha das variáveis que devem ser aplicadas.

3.2.4 Quantidade de dados e tempo de análise

Na literatura, observou-se que não há um tempo-padrão para a coleta das medições, com os trabalhos fazendo uso das bases de dados disponibilizadas pelas estações. De forma geral, trabalhos com 40 dias ou mais de leitura de dados já apresentam casos de sucesso no uso de ferramentas de IA em estações de tratamento. A Figura 8 apresenta a diversidade dos lapsos temporais em que as pesquisas se basearam, tendo o período de 730 dias sido o único a se repetir.

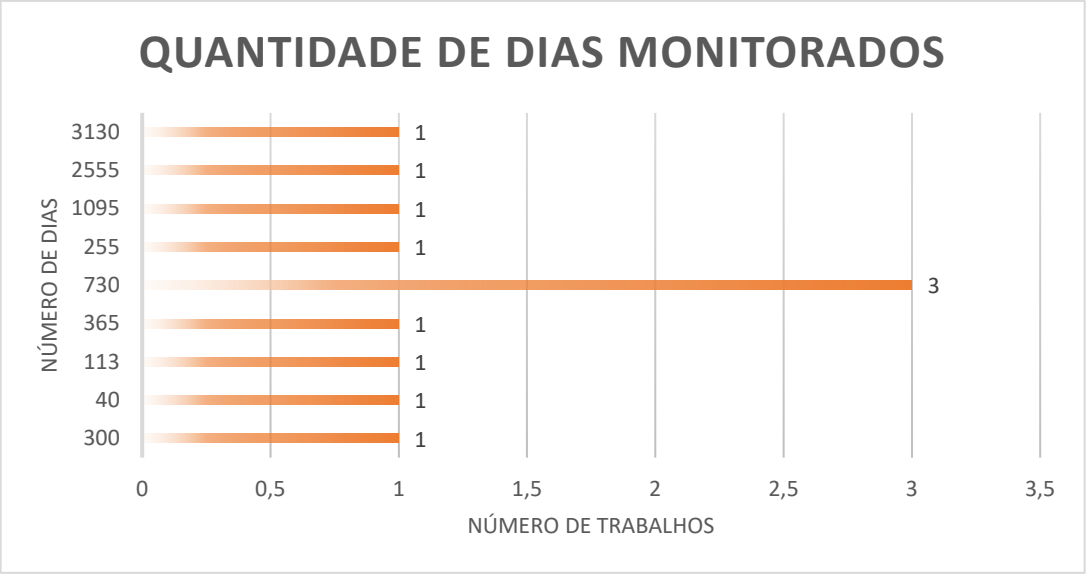

FIGURA 8 – Quantidade de dias monitorados, por número de trabalhos.

Já pela Figura 9, é possível verificar outra relação interessante, qual seja, entre a quantidade de dias em que foram coletados os dados e a quantidade de dados úteis aplicados aos estudos com técnicas de IA. O estudo que mais apresentou dados foi justamente o que teve uma coleta de apenas 40 dias. Por outro lado, a pesquisa que fez o acompanhamento por aproximadamente três anos (cerca de 1.095 dias) apresentou apenas 168 dados úteis. Em parte, isso se deve à complexidade da coleta de dados, tendo em vista que algumas variáveis dominantes requerem muito tempo de análise – a DBO, por exemplo, requer cinco dias de incubação (KIM *et al.*, 2006). Além disso, alguns equipamentos importados instalados nas estações de tratamento não foram calibrados para a variabilidade da matriz do afluente brasileiro, o que exige muito do profissional, por não haver, no Brasil, normas e guias técnicos adaptados à realidade nacional (HERNANDEZ, 2019).

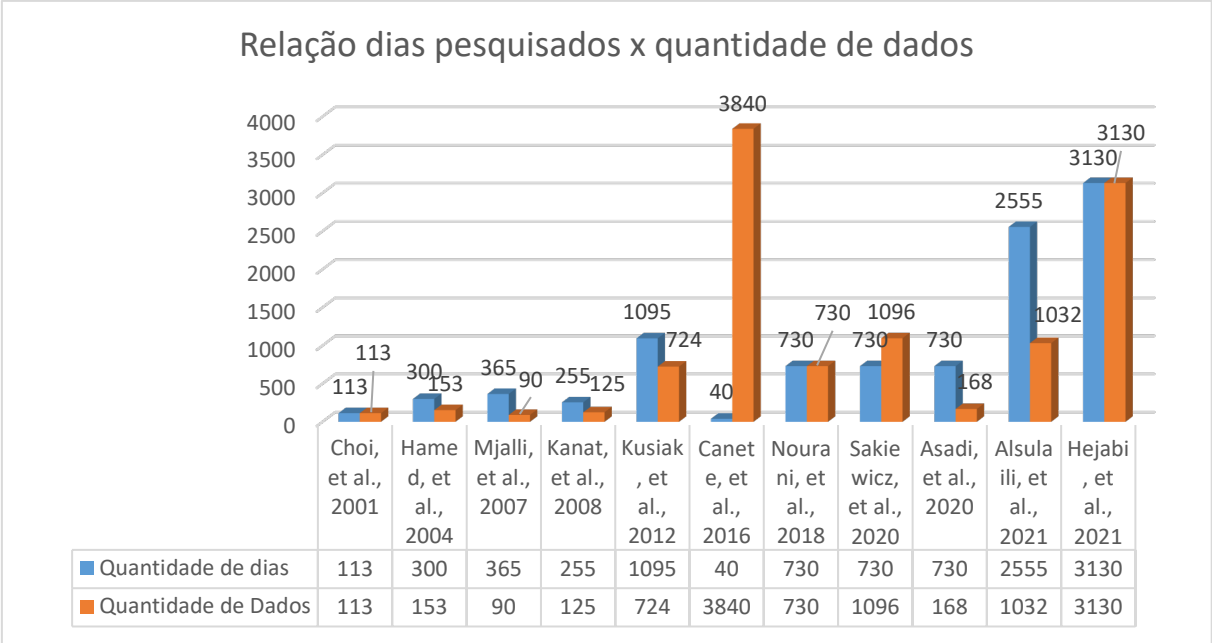

FIGURA 9 – Dias pesquisados x quantidade de conjuntos de dados disponíveis.

Em muitos casos, a quantidade de dados é até suficiente, mas, devido a problemas de medição, os dados não são completos ou calibrados, o que faz com que sejam eliminados por não representarem a situação fática. Assim, o benefício na redução de dados para modelagem é a capacidade de modelagem mais eficiente e aprimorada. Em todos os estudos apresentados, independentemente da quantidade de dados disponíveis, para modelagem com ferramentas de IA, as previsões foram realizadas com sucesso e os resultados foram satisfatórios.

Cabe informar que um problema recorrente no monitoramento das estações de tratamento são os dados ausentes ou as diferentes alternativas que podem ser utilizadas como parâmetros de entrada dos modelos. Por exemplo, no caso de vários dados ausentes, métodos apropriados podem ser usados para preenchê-los, empregando os dados sintéticos na modelagem; no entanto, eles podem incluir uma quantidade maior de erro, o que pode não levar a resultados apropriados (NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018).

3.2.5 Algoritmos utilizados

Ferramentas tecnológicas são poderosas para analisar dados em aplicações científicas, de engenharia, bioinformática, entre outras. Algoritmos de computação são amplamente utilizados para resolver problemas de otimização complexos, lineares e não lineares, tendo sido relatadas aplicações bem-sucedidas, com ótimos exemplos em que se indicou que a produção

de metano pode ser melhorada em 5,5% (KUSIAK; WEI, 2012). O aumento da produção de metano, nesse caso, se deve à otimização das configurações controláveis com base no modelo de previsão.

No caso do algoritmo de *backpropagation*, ele é empregado para treinamento supervisionado, minimizando o MSE entre a saída observada e a prevista, trabalhando com duas fases, a primeira chamada fase de avanço e a segunda, de retrocesso. Nesse processo, ocorrem modificações de intensidade nas conexões, baseadas nas diferenças dos sinais previstos e observados no neurônio de saída (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004). Já em relação às principais arquiteturas de redes neurais, a literatura aponta as *feedforward* e redes recorrentes. Em sua pesquisa, Holubar *et al.* (2002), após analisar diferentes tipos de rede disponíveis, concluíram que a rede de propagação *feedforward-back* era a mais adequada para modelar a digestão anaeróbia.

Em todos os trabalhos pesquisados, a arquitetura MLP de RNA foi usada com o algoritmo de treinamento de *backpropagation*, que adota um processo interativo, no qual o peso das conexões é ajustado para fornecer um erro mínimo entre a saída real e a prevista. Estando a rede devidamente treinada, uma nova entrada leva a uma nova saída, semelhante à saída correta. Ainda, o algoritmo de Levenberg-Marquardt foi escolhido pela maioria dos estudos como o algoritmo de treinamento de *backpropagation*, devido ao seu rápido aprendizado, precisão e desempenho. Trata-se de um aprimoramento do algoritmo de *backpropagation*, dando a ele uma maior aceleração da sua convergência.

Interessa informar que Hamed, Khalafallah e Hassanien (2004) aplicaram vários métodos de treinamento, incluindo Fletcher-Reeves, BFGS quasi-Newton e Levenberg-Marquardt, enquanto Ozkaya, Demir e Bilgili (2007) testaram dez diferentes algoritmos, indicando o de Levenberg-Marquardt como o que apresentou desempenho superior, além do menor número de interações necessárias, tendo sido avaliados o coeficiente de correlação e o MSE.

3.2.6 Inteligência artificial: neurônios, camadas e função de ativação

Uma prática comum adotada na maioria dos artigos da revisão é o uso da técnica de tentativa e erro para identificar o número ideal de neurônios ocultos (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANEIN, 2004; CANETE *et al.*, 2016; ALSULAILI; REFAE, 2021;

NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018). No entanto, um número inadequado de neurônios ocultos limita a capacidade da rede neural de modelar o processo, enquanto um número excessivo pode fornecer liberdade redundante para o ajuste do peso e resultar na propagação do ruído presente no banco de dados para o modelo (LINKO; ZHU; LINKO, 1999). Por isso, nada melhor que a aplicação de vários modelos, com diversas configurações de neurônios ocultos, para posteriormente realizar uma criteriosa análise de erro do modelo, a fim de identificar qual deles melhor prediz a variável mensurada, observando a maior aproximação e a menor taxa de erro.

Não há como determinar o melhor número de unidades ocultas sem treinar várias redes e estimar o erro de generalização de cada uma (MJALLI; AL-ASHEH; ALFADALA, 2007). Em seu trabalho, Akbas, Bilgen e Turhan (2015) escolheram o número de neurônios ocultos de forma aleatória entre cinco e 30, porém, normalmente, o número de camadas ocultas é proporcional à complexidade do sistema a ser modelado (ALSULAILI; REFAIE, 2021). De qualquer forma, o princípio de funcionamento da RNA é basicamente o mesmo para os vários tipos de rede: o elemento de processamento básico, o neurônio, recebe os sinais de entrada, os processa por meio de uma função de ativação e fornece um sinal de saída. A função de ativação é necessária para introduzir a não linearidade da rede e, sem ela, as camadas ocultas não se tornam tão poderosas.

Como já exposto, nos trabalhos abordados neste estudo, a maioria usou a função de ativação sigmoide, que geralmente é preferida às funções de ativação de limiar, tendo em vista que funções de limite são difíceis de treinar, porque o gradiente não existe ou é zero, o que torna impossível o uso da retropropagação ou métodos mais eficientes. Kusiak e Wei (2012) utilizaram múltiplas funções de ativação e os melhores resultados de função de ativação da camada oculta, ou seja, com menores erros de validação, foram da função sigmoide. Isso é ratificado por Haykin (2009), assim como por Beltramo, Ranzan e Hinrichs (2016), que afirmaram que a função sigmoide, quando aplicada na camada oculta, proporciona uma flexibilidade computacional em relação aos métodos de regressão linear, resultando em um desempenho e uma previsão mais apurados sobre a variável desejada.

3.2.7 Taxa de aprendizagem e teste

Conforme discutido anteriormente, uma etapa importante da criação de um modelo é identificar se os dados disponíveis são suficientes e como eles podem ser divididos entre calibração e avaliação de desempenho. Para tal tarefa, os dados existentes precisam ser subdivididos em conjuntos de dados de treinamento e dados de teste, sendo possível criar um terceiro grupo, de validação (SAKIEWICZ *et al.*, 2020).

Na etapa de treinamento, os dados do subconjunto são usados para realizar o aprendizado e ajustar os pesos da rede, sendo aplicada, para tal ajuste, a retropropagação. Ademais, a abordagem de tentativa e erro é muito comum nos experimentos com IA, pois não há uma forma exata de identificar o melhor modelo ou a taxa de treinamento ideal sem aplicar um modelo e testar sua taxa de erro, comparando com os demais, a fim de identificar os melhores resultados.

Outra etapa necessária é definir o conjunto dos dados que fará parte de cada grupo e como sua seleção será feita (de forma aleatória ou baseada em alguma abordagem), não havendo um consenso sobre os percentuais a ser adotados. Então, como ter certeza se a seleção foi feita de forma correta? Quando uma diferença significativa entre as amostras de calibração e testes é detectada, é necessária uma análise para identificar as distorções e verificar a possível solução, até que, por tentativa e erro, seja possível determinar um modelo aceitável.

Em seu estudo, Bennett *et al.* (2013), após empregar várias técnicas de divisão de dados, concluíram que, para avaliar os modelos, é quase impossível uma correspondência exata entre o modelo e os dados; aliás, não é desejável que isso ocorra, devendo-se entender o grau de erro inerente aos dados para, então, avaliar os critérios de desempenho do modelo. Diante disso, a abordagem comum nas pesquisas analisadas foi a técnica de tentativa e erro, com a criação de grupos dentro dos conjuntos, para testar e validar os resultados, buscando os melhores desempenhos (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004; HEJABI *et al.*, 2021).

Reforça-se que, nas abordagens com grupos de treinamento e teste apenas, o percentual de dados de treinamento inicia em 60% e 40% para testes, variando até 90% para treinamento e 10% para testes (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004), sendo encontradas as mais diversas combinações dentro dessa faixa de percentuais.

3.3 INSTRUMENTAÇÃO

Os dados obtidos foram coletados na ETE Padilha Sul, devido aos equipamentos necessários para análise do biogás e suas variáveis físico-químicas de controle. Esses equipamentos seguem as determinações da Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT, 2011).

Como passo metodológico, os dados obtidos foram distribuídos graficamente para verificar possíveis comportamentos adversos e entender a distribuição dos dados, tendo sido identificados eventos e valores discrepantes decorrentes de um período chuvoso, que constitui um evento individual que destoa do restante das distribuições; outra ocorrência verificada foi um período de vazamento, citado por Paula (2019). Durante o desenvolvimento do modelo, o objetivo foi replicar o comportamento agregado, e não eventos individuais ou de pouca representatividade, por isso esses dados foram suprimidos, de forma a garantir ao modelo mais confiança.

A análise de dados em um trabalho científico acontece a partir da coleta dos dados, que precisam ser separados e organizados, a fim de que possam ser utilizados para responder às perguntas do trabalho. Assim, iniciou-se com as seguintes atividades:

a) Coleta de dados da composição do biogás presentes nos trabalhos de Paula (2019) e Hernandez (2019).
b) Estruturação de uma proposta de modelo computacional, com a saída em função das variáveis físico-químicas de controle de entrada do reator.
c) Definição do *software* a ser utilizado para aplicação do modelo.
d) Estudo do *software* selecionado e levantamento de como devem ser programadas suas entradas, entendendo como a linguagem de programação funciona, para posteriormente escrever o modelo desenvolvido para execução do *software*.

3.3.1 Dados coletados

A fase de implementação iniciou com a formatação do banco de dados, inserindo os dados, baseados na pesquisa de Paula (2019), que realizou a tabulação em laboratório sob

condições controladas, analisando as correlações estatísticas, e de Hernandez (2019), que coletou os dados oriundos de sensores eletrônicos em cenário real na estação de tratamento.

O banco de dados foi formatado e normalizado para permitir que a linguagem de programação capturasse as informações, de forma que os dados obedecessem a um intervalo ajustado das ordens de grandeza, tornando todos os valores entre zero e um, possibilitando treinar a rede neural para posteriormente validar e testar os resultados obtidos.

Ao tabular os dados e plotar nos gráficos, constatou-se o vazamento nas tubulações, conforme representado na Figura 10. Em novembro, as vazões obtidas foram superiores quando comparadas com as dos meses anteriores, que provavelmente apresentaram valores subestimados, inviabilizando a utilização dos meses com vazamento para o desenvolvimento do modelo computacional.

Resultado mês a mês

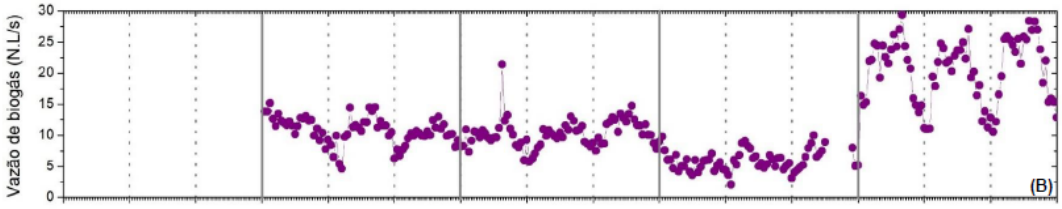

FIGURA 10 – Vazão de biogás em função do tempo (PAULA, 2019).

Para as variáveis obtidas, descritas no Quadro 3, foram coletados dados do afluente e do efluente na fase líquida do processo de tratamento e da fase gasosa, na etapa final do processo de tratamento anaeróbio. Os dados da fase líquida do afluente e da fase gasosa foram medidos por equipamentos eletrônicos, devidamente calibrados e com as análises de incerteza estudadas no trabalho de Hernandez (2019), que, de hora em hora, obteve 24 amostras por dia, durante três dias consecutivos, em cada mês dos cinco analisados. Já para os dados do efluente, foram realizadas análises laboratoriais, três vezes ao dia: às 8h, 12h e 16h, pelos mesmos três dias consecutivos nos cinco meses pesquisados.

QUADRO 3 – Variáveis físico-químicas monitoradas.

Fase líquida (afluente)	**Fase líquida (efluente)**	**Fase gasosa**
Vazão de esgoto	DBO	Vazão de biogás
SST	Temperatura	Metano (CH_4)
SSV	pH	Dióxido de carbono (CO_2)
DQO	Nitrogênio	Oxigênio (O_2)
Carga orgânica (calculada)	Fósforo	Sulfeto de hidrogênio (H_2S)
	Sulfeto	
	Sulfato	
	Metano dissolvido (CH_4)	

A quantidade de dados coletados não representou limitação à aplicação de modelos computacionais, como pode ser observado nos casos de sucesso representados na Figura 11. Em muitos deles, a quantidade de dados foi até grande, mas, devido a problemas de medição, os dados não foram completos ou calibrados, levando à sua eliminação, por não representarem a situação fática. O benefício na redução de dados para modelagem é a capacidade de modelagem mais eficiente e aprimorada.

De fato, um problema no monitoramento das estações de tratamento são os dados ausentes ou inválidos (NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018). Por isso, diferentes alternativas podem ser utilizadas como parâmetros de entrada dos modelos. Por exemplo, no caso de vários dados ausentes, métodos estatísticos apropriados, como interpolação e extrapolação de dados, podem preencher os dados ausentes, fornecendo dados sintéticos para aplicar à modelagem, que, no entanto, podem levar a uma quantidade maior de erro e a resultados não apropriados (NOURANI; ELKIRAN; ABBA, 2018). Essas técnicas estatísticas poderiam permitir a obtenção dos dados faltantes, ou seja, as 21 amostras faltantes, porém a geração dos dados a partir de apenas três amostras diárias não traria a confiança esperada ao modelo, o que resultou na exclusão de informações do efluente do desenvolvimento do modelo computacional baseado em redes neurais.

Bennett *et al.* (2013) relataram que a transformação de dados em diferentes domínios é outra técnica possível. A conversão, muitas vezes, pode destacar aspectos do comportamento de um modelo que não estavam claros no domínio original do tempo ou espaço. A transformação de Fourier, a mais comum e conhecida, converte os dados no domínio da frequência e pode fornecer *insights* sobre o desempenho do modelo que podem não ser óbvios em dados não transformados, por exemplo. Cabe informa que, no grupo de pesquisa que envolve este trabalho, há um estudo em paralelo que visa a estabelecer um modelo de transformação discreta de Fourier para fornecer mais dados e alimentar o modelo computacional aqui desenvolvido.

Dentre as variáveis do afluente, a carga orgânica não foi medida e, sim, calculada, pelo produto entre vazão de esgoto e DQO. Pelos princípios da álgebra, não se devem colocar como variável de entrada duas variáveis dependentes quando uma está em função da outra, portanto a carga orgânica foi desprezada como variável de entrada. Outra questão pertinente foi referente ao comportamento periódico existente nos dados observados. Conforme observado na Figura 12a, a vazão do biogás possui comportamento similar à DQO, com aproximadamente três horas

de atraso, fator que também foi observado quando comparada a vazão do esgoto com a vazão do biogás, revelando comportamento periódico de uma hora, como indicado na Figura 12b.

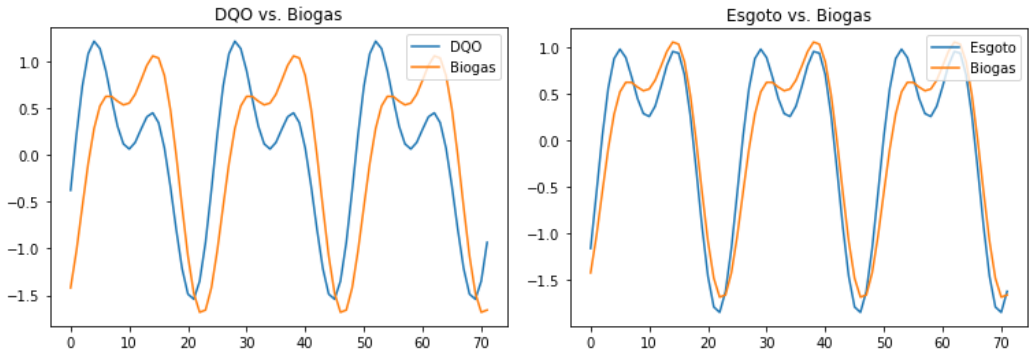

FIGURA 11 – Comportamento periódico DQO x biogás (a) e esgoto x biogás (b).

O comportamento periódico presente nas relações demonstradas motivou os estudos das redes neurais temporais, apresentadas no referencial teórico.

4 IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO

Fundamentado no referencial teórico e nos dados disponíveis, o modelo contemplou o uso de algoritmos baseados em RNA com capacidade de predizer resultados sobre um sistema biológico, utilizando como variáveis de entrada os parâmetros físico-químicos: vazão do esgoto (l/s), DQO (mg/l), SST (mg/l) e SSV (mg/l). A partir de em tais parâmetros, diversas simulações foram realizadas, apresentadas no capítulo 5, a fim de predizer a vazão de biogás (Nm^3/h), pois o controle dessa variável de saída garante uma boa produção e um adequado potencial energético.

4.1 BASE DE DADOS

Como pré-requisito para a implementação do modelo, foi necessário o ajuste dos dados disponíveis, uma vez que são baseados em um projeto experimental de coleta de informações de diferentes formas, por análises laboratoriais e por sensores eletrônicos.

A base de dados contempla os dados obtidos por Paula (2019) e Hernandez (2019), no período de 01/07/2018 a 29/11/2018, tendo sido as análises laboratoriais coletadas três vezes ao dia (8h, 12h e 16h) e os dados coletados por sensores eletrônicos de hora em hora. A coleta

ocorreu por três dias seguidos em cada um dos meses observados, gerando um total de 45 análises laboratoriais das seguintes variáveis do afluente: pH, temperatura, DBO, DQO filtrada, carga orgânica filtrada, acidez, alcalinidade, sólidos sedimentados, nitrogênio total, nitrogênio amoniacal, fósforo total, sulfeto e sulfato. Referente ao efluente, foram coletadas as seguintes variáveis: pH, temperatura, DBO, sólidos sedimentáveis, nitrogênio total, nitrogênio amoniacal, fósforo total, sulfeto, sulfato e metano dissolvido.

Referente aos dados obtidos com sensores eletrônicos, no melhor dos casos, não ocorreu nenhum problema de leitura e foram coletados 72 dados por mês (24h x três dias), totalizando 360 dados durante os cinco meses, das seguintes variáveis do afluente: data, hora, vazão do esgoto, DQO, carga orgânica, SST, Sólidos Suspensos Fixos (SSF) e SSV, e, em relação ao efluente: data, hora, vazão de esgoto, DQO, carga orgânica, DQO filtrada, carga orgânica filtrada, acidez, alcalinidade, SST, SSF e SSV, além dos dados referentes ao biogás produzido: data, hora, percentual de CH_4, CO_2, O_2 e H_2S.

Paula (2019), ao analisar os dados, observou que o mês de novembro apresentou valores significativamente superior aos dos demais meses, relativos a um vazamento nas tubulações da estação, o que gerou dados que não condiziam com a realidade da estação. Os dados dos meses com vazamento, portanto, não foram aplicados à simulação, restando apenas o mês de novembro para alimentar o modelo. Frisa-se que aplicar o treinamento com dados imprecisos geraria um sistema que não seria útil, com informações falsas e inviável para aplicação plena e para a tomada de decisão, contrariando o princípio deste trabalho de construir uma ferramenta útil a ser aplicada em estações de tratamento.

Considerando apenas o mês sem vazamento, os dados demonstraram duas frequências de coletas: periódica, de hora em hora, e amostral, três vezes ao dia. Para a utilização dos dados amostrais, seria necessário produzir os dados faltantes utilizando métodos estatísticos, como a interpolação ou extrapolação de dados, porém não seria viável produzir 21 dados a partir de três, considerando ainda que foram períodos distintos do dia, com condições climáticas diferentes em muitas oportunidades, não trazendo o recorte temporal adequado. Assim, eles foram eliminados.

O mesmo se deu com a variável físico-química “carga orgânica”, obtida pelo produto entre a vazão e a DQO afluente; por ser calculada a partir de outras variáveis de entrada, e não medida, poderia induzir a um erro, de modo que foi descartada. Igualmente, os dados do efluente no atual contexto não eram úteis, ante o intento de, a partir das variáveis de entrada (afluente) do sistema, predizer a vazão ou composição do biogás; esses dados podem servir para eventuais comparações, mas não foram aplicados ao modelo.

Paula (2019) aplicou a análise de correlação de Spearman e tau de Kendall para verificar a relação entre as variáveis da fase líquida do afluente e da fase gasosa (produção do biogás), com o objetivo de avaliar a relação entre o biogás produzido e os parâmetros físico-químicos de entrada do sistema, tendo constatado que, entre os sólidos, o SSV possui correlação positiva forte, o SST apresenta correlação moderada e o SSF apresenta correlação fraca ou muito fraca, fato que descaracteriza a utilização deste para predizer a produção e a composição do biogás, além de representar a fração inerte do esgoto doméstico, o que não é relevante como substrato durante o processo de digestão anaeróbia.

Posto isso, as variáveis de entrada selecionadas para o modelo constam na Tabela 3, incluindo o seu grau de correlação com a vazão e composição do biogás.

TABELA 3 – Índices estatísticos de magnitude das variáveis de entrada utilizadas (PAULA, 2019).

Variável físico-química	Magnitude	Interpretação da correlação de Spearman
Vazão de esgoto (l/s)	0,29	Correlação fraca
DQO (mg/l)	0,59	Correlação positiva moderada
SST (mg/l)	0,57	Correlação moderada
SSV (mg/l)	0,62	Correlação positiva forte

Outros parâmetros de entrada do modelo possivelmente consolidariam melhor sua funcionalidade, porém ou não foram mensurados ou não se teve acesso a essa informação, portanto não foram usados. A despeito disso, com base no referencial teórico, fica claro que as variáveis empregadas são suficientes para a predição esperada.

No processo de digestão anaeróbia, as variáveis físico-químicas chegam ao reator em um instante *t*, mas o subproduto gerado dessa combinação só é concebido horas depois, tempo denominado Tempo de Detenção Hidráulica (TDH), que fornece o comportamento periódico que motivou o uso de CNN sobre essa base de dados. Buscando compreender o TDH, foi feito o deslocamento temporal das variáveis de entrada e aplicado o mesmo modelo em todos os deslocamentos, podendo os resultados ser observados no próximo capítulo.

É fundamental, quando se trabalha com redes neurais, que, após o ajuste das variáveis que vão pertencer ao conjunto de dados, este seja normalizado para garantir as mesmas características de escala ao conjunto de dados, permitindo o funcionamento adequado das funções de ativação da rede neural.

4.2 DESENVOLVIMENTO DAS REDES NEURAIS

Consolidado o banco de dados, o próximo passo foi o desenvolvimento do algoritmo de processamento, cuja implementação ocorreu usando a linguagem Python, adotada a partir dos cenários de desenvolvimento com o Google Colaboratory e o PyCharm, os quais são ambientes de desenvolvimento integrados para programação em Python. Nesses ambientes, se deram a programação e o treinamento das RNA.

O desenvolvimento do algoritmo atendeu às etapas metodológicas a seguir:

a) Desenvolvimento de algoritmos com diferentes números de camadas ocultas, mas mantendo as mesmas variáveis de entrada e saída.
b) Ajuste dos parâmetros de treinamento, como número de épocas e critério de parada.
c) Aprendizado supervisionado por meio de treinamentos sucessivos, sempre analisando os valores médios de R^2 e MSE.

d) Seleção dos melhores resultados para transcrever na tese.

O aprendizado supervisionado nada mais é do que estabelecer os parâmetros, neste caso: condição de parada, número de neurônios e camadas, além do número de épocas (ciclos), observando os resultados e taxa de erro. Em caso de não ser satisfatório, remodela-se a arquitetura do projeto até a obtenção de resultados melhores (ARTERO, 2009).

As simulações aplicando técnicas de regressão tiveram como ponto de partida resultados bem-sucedidos obtidos na revisão de literatura, como os do estudo de Waewsak, Nopharatana e Chaiprasert (2010), que indicaram que a RNA é a ferramenta apropriada para modelagem multivariada em processos biológicos e, em especial, em sistemas de tratamento baseados em digestão anaeróbia. Os modelos bem-sucedidos observados na revisão bibliográfica permitiram identificar, dentre os diversos tipos de rede disponíveis, a rede *feedforward-back* como a mais adequada para modelar a digestão anaeróbia (HOLUBAR *et al.*, 2002). Ela foi aplicada em conjunto com a rede MLP, devido ao seu rápido aprendizado, precisão e desempenho (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004).

O algoritmo de Levenberg-Marquardt foi utilizado por estar presente na maioria dos artigos revisados, assim como o algoritmo de treinamento de *backpropagation*, visto seus bons resultados (HAMED; KHALAFALLAH; HASSANIEN, 2004; OZKAYA; DEMIR; BILGILI, 2007). O propósito do *backpropagation*, por meio do seu algoritmo de reconhecimento de padrões, é aprimorar os pesos atribuídos aos neurônios e, com isso, estruturar da melhor forma possível a rede. O algoritmo realiza o cálculo e obtém o valor de saída, em seguida calculando a função de perda na camada de saída recursivamente, etapa chamada retropropagação (DATA SCIENCE ACADEMY, 2022).

A Figura 13 traz a interface da linguagem de programação PyCharm, extraída ao realizar um treinamento, demonstrando a obtenção da média de R^2 de dez interações do treinamento, o maior e o menor valor de R^2, além do MSE, que são os principais referenciais comparativos da tese. Os resultados apontados na figura foram plotados em gráficos, demonstrados no capítulo seguinte.

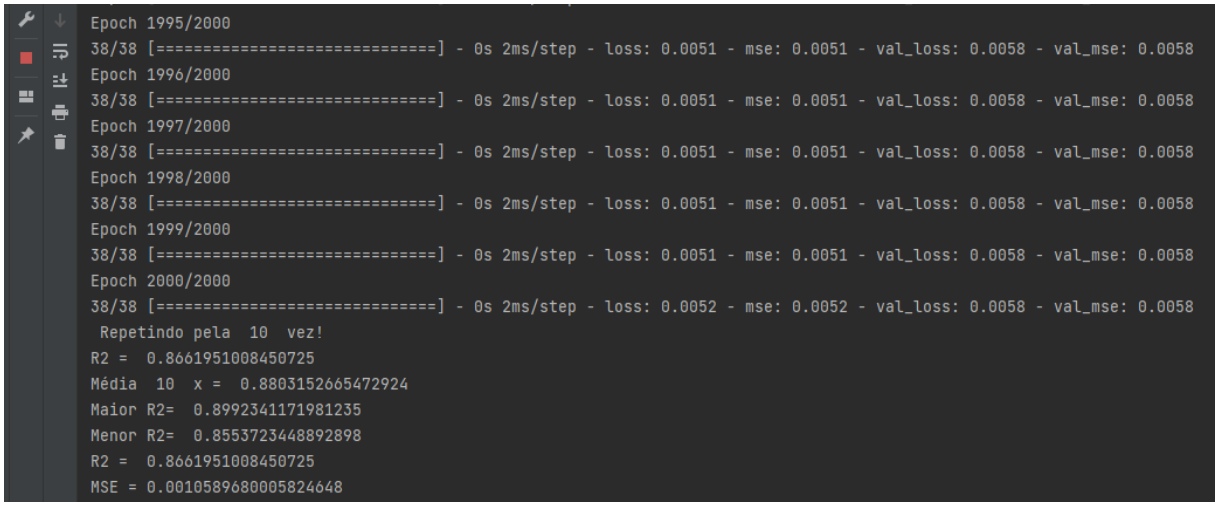

FIGURA 12 – Exemplo do treinamento.

Na simulação apresentada na Figura 13, foi fixada em 2000 a época de treinamento, apenas com fins didáticos, mas, durante as simulações apresentadas nos resultados, a fim de evitar sobreajuste (*overfitting*) ou subajuste (*underfitting*), ou seja, ajustes excessivos e inapropriados, foi aplicada a técnica de parada antecipada (*earlystop*), que tem como critério, ao final de cada época, calcular a precisão da classificação dos dados de validação; caso não se observe melhora nos dados, o treinamento se encerra. No entanto, devido à utilização do critério de parada antecipada, que apresentou tempos de treinamento distintos e um número de épocas em cada simulação, não é possível informar o tempo exato de cada treinamento e teste.

Para facilitar a avaliação e compreensão da tese, por possuir duas topologias, a rede MLP foi denominada RNA T, enquanto a CCN, RNA C. Ademais, em todas as simulações, independentemente da topologia, a rede apresentou os melhores resultados com 80% dos dados para treinamento e 20% para teste, padronização adotada para discussão nas próximas seções. Já a seleção dos dados de treinamento e teste ocorreu de forma aleatória e automática pelo algoritmo de treinamento contido no PyCharm. Independentemente da topologia, ficou estabelecido como critério de parada o número de tentativas (épocas) estipulado no código ou até atingir a melhor *performance*, conforme armazenamento no algoritmo; identificado que não há mais melhoria possível, encerrou-se a execução, garantindo a melhor convergência da RNA.

O treinamento foi desenvolvido integralmente em um *notebook* com processador Intel® Core™ i5-8250U, CPU de 1.60 GHz, com 8 Gb de memória RAM. A versão do PyCharm foi a 2022.2.3.

A primeira etapa da implementação de cada algoritmo foi dada pela leitura e gravação dos dados em matrizes na memória. Posteriormente, ocorreu a normalização dos dados, trabalhando com os dados alocados na memória, quando, então, se deu o comando de

treinamento da rede com os parâmetros necessários, incluindo a função de perda (*loss*), para otimização. Para todas as topologias, foi estabelecida a função MSE, que representa o erro quadrático médio.

4.2.1 RNA T

A topologia MLP, denominada RNA T, faz referência à rede tradicional e serviu de base para as simulações e comparações desenvolvidas, buscando predizer a vazão de biogás e mensurar seu desempenho com a arquitetura-padrão encontrada na revisão bibliográfica.

A RNA T contou, na camada de entrada, com quatro entradas, a saber: vazão de esgoto, DQO, SST e SSV; uma camada oculta, que variou o número de neurônios de dois a 16 na etapa de teste; e uma camada de saída, referente à vazão de esgoto.

O objetivo das simulações foi encontrar o modelo com maior convergência e um erro tendendo a zero, o que representa a possibilidade de estimar valores próximos aos dados reais. Em todas as etapas, os critérios foram os mesmos, independentemente da quantidade de neurônios. Os cálculos foram tabelados e os resultados são encontrados no capítulo 5.

Destaca-se que se verificaram péssimos resultados com poucos neurônios, o que pode ter sido caracterizado por um subajuste (*underfitting*); o oposto também foi percebido quando um número excessivo de neurônios foi aplicado.

4.2.2 RNA C

Devido à questão temporal existente no processo biológico do tratamento do esgoto, demonstrada na Figura 12, na qual foi possível observar um comportamento periódico dos dados, optou-se pela aplicação de um modelo de rede neural com a capacidade de tratar esse tipo de situação, o que motivou os testes com o modelo RNA C, usando CNN.

Até o momento, não se observou o uso das CNN para predição em estações de tratamento, porém é uma das redes que vêm crescendo por adotar técnicas mais aprimoradas, principalmente no tratamento de comportamentos periódicos e de imagens, o que justificou sua aplicação e comparação dos resultados.

A RNA C, da mesma forma que a anterior, para fins de comparação, teve o número de neurônios da camada de entrada definido em quatro, a saber: vazão de esgoto, DQO, SST e SSV, além da variável "hora", que foi incluída em algumas simulações. O número de neurônios e a quantidade de camadas ocultas foram determinados a partir de técnicas de aprendizado supervisionado; houve um incremento gradual na quantidade de neurônios e no número de camadas, a fim de encontrar o modelo que apresentava os melhores resultados de predição com os menores erros. O número de parâmetros de saída foi um – em algumas simulações, foi obtida a vazão e, em outras, o percentual de metano. Ressalta-se que a inclusão da variável "hora" nas simulações trouxe apenas resultados piores, pois a rede entende como um número sequencial, fato que justifica a não apresentação desses resultados na tese.

Na etapa de teste, foi alterada a quantidade de neurônios da camada oculta, iniciando em dois e elevando de forma exponencial até 16 neurônios, tendo sido verificados péssimos resultados, muito mais acentuados que na RNA T, tanto com poucos neurônios, o que pode ter sido caracterizado por um subajuste (*underfitting*), quanto com um número excessivo, o sobreajuste (*overfitting*).

Igualmente, o objetivo das simulações foi encontrar o modelo com maior convergência e um erro tendendo a zero, o que representa a possibilidade de estimar valores próximos aos dados reais. Em todas as etapas do teste, os critérios foram os mesmos, independentemente da quantidade de neurônios.

Houve a comparação entre as redes testadas. O primeiro modelo testado (RNA T) gerou um desempenho aceitável; então, foi aplicado o novo modelo (RNA C), com o intuito de comparar e avaliar se traria resultados melhores. Para tanto, a avaliação em ambos os modelos ocorreu pelo cálculo do R^2 e do MSE. Além do teste, foi disponibilizada uma ferramenta via *website* que utiliza o treinamento gerado para uma consulta *on-line* do operador.

4.3 TREINO E TESTE

A fim de garantir uma avaliação adequada dos modelos testados, é fundamental obedecer ou até mesmo definir algumas premissas que devem ser seguidas no processo de treinamento e teste, a fim de evitar vícios ou até mesmo julgamento inapropriado dos resultados. Assim, o objetivo desta seção é definir como os métodos e as arquiteturas empregados foram avaliados.

A RNA, para ser considerada eficiente, deve apresentar valores de correlação R próximos de um, pois, quanto mais próximo desse valor, maior é a assertividade da predição. Como premissa deste trabalho, resultados superiores a 0,8 foram considerados ótimos.

A correlação R representa o grau de relacionamento de duas variáveis, no caso, a comparação entre os dados reais e os dados preditos pela aplicação. Esse valor oscila de zero a um, positiva ou negativamente, sendo o cálculo feito pela Equação 2, ou seja, a relação dos desvios-padrão e da covariância existente entre as duas variáveis.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y})^2}{\sum(y_i - \hat{y})^2} \tag{2}$$

Além dessa métrica, focando na análise da *performance*, foi adotada a avaliação do MSE, que se trata do erro quadrático médio, ou seja, refere-se a um valor estimado da diferença entre a saída predita e o objetivo – quanto mais próximo de zero o resultado, melhor é a avaliação. Seu cálculo é baseado na soma dos erros de predição elevada ao quadrado e dividida pelo número de erros, conforme Equação 3.

$$MSE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{3}$$

Ademais, para teste e validação da rede, foram usados os 20% dos dados restantes não utilizados no treinamento, separados automaticamente pela ferramenta de desenvolvimento em dados de treinamento e de teste. Uma vez que o resultado da predição tenha um alto índice de correlação por meio do R^2 e um nível de erro tendendo a zero, obtido pelo MSE, já é possível replicar a aplicação para um modelo que produzirá um resultado satisfatório ao gestor da planta.

5 RESULTADOS

A partir da metodologia proposta e do referencial teórico apresentado, este capítulo discute os resultados obtidos na implementação das redes neurais (RNA T e RNA C), além de compará-los.

Como variável de saída da rede neural, nos primeiros testes foram selecionadas aquelas que mais preocupam os operadores das estações de tratamento, pois estão ligadas ao desempenho do reator e à qualidade do biogás, quais sejam: vazão do biogás (N^3/h) e percentual de metano (CH_4). Ambas obtiveram sucesso e resultados similares na predição com valores de R^2 e MSE, por isso é trazido apenas o resultado da vazão, com o objetivo de não tornar tão repetitiva a apresentação dos gráficos e resultados.

Conforme demonstrado na Figura 10, houve uma variação considerável do biogás devido ao vazamento constatado na tubulação, portanto os dados aplicados para geração dos resultados preliminares referem-se, exclusivamente, ao mês de novembro de 2018, quando o problema foi corrigido.

Como informado, a RNA T possui uma camada de entrada com quatro parâmetros, uma camada oculta que alternou de dois a 16 neurônios e uma camada de saída. No teste, a variação dos neurônios da camada oculta deu-se de forma exponencial, ou seja, foram modificados para dois, quatro, oito e 16 neurônios, respectivamente. Conforme sugere Heaton (2008), o número de neurônios ocultos deve ser algo próximo do tamanho da camada de entrada e de saída, além de recomendar que esse número seja menor que o dobro do tamanho da camada de entrada, critério que foi adotado por boa parte dos artigos revisados.

Durante os testes, foi observado que mudar o número de neurônios de maneira unitária gerava resultados muito próximos, sendo necessário um intervalo maior, a fim de identificar o momento em que o número de neurônios faz com que a rede tenha sua melhor *performance* e, depois, entre em declínio

Como mostrado na revisão da literatura, cada modelo tem um objetivo, uma solução e um problema único, não existindo um modelo específico que seja superior aos outros em todos os casos, visto o desempenho dos diferentes modelos poder variar de acordo com a condição de cada estação. Assim, na Figura 14, consta a topologia da RNA aplicada na simulação com oito neurônios na camada oculta.

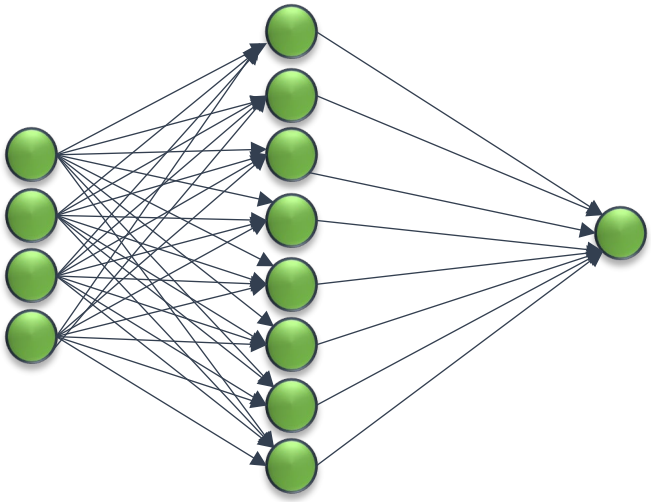

FIGURA 13 – Topologia da RNA com oito neurônios na camada oculta.

Aplicando uma rede MLP, que, conforme já descrito, foi considerada ideal para aplicação neste trabalho, com apenas uma camada oculta com até 16 neurônios, a taxa de aprendizagem dos dados foi de 80% e de 20% para os testes, ressaltando que, em todos os testes, o treinamento usou os mesmos critérios e parâmetros, inclusive o mesmo critério de parada.

Tendo em vista que, a cada treinamento, o conjunto de dados de entrada foi aleatório, os resultados de saída também o foram. Para evitar vícios, os resultados demonstrados na Tabela 4, relativos às etapas de treinamento variando o número de neurônios, referem-se a uma média de dez execuções, conferindo maior confiabilidade às taxas apresentadas.

TABELA 4 – Resultados de R e MSE das etapas de teste da RNA T.

	RNA T (2)	**RNA T (4)**	**RNA T (8)**	**RNA T (16)**
MSE	$2{,}26E^{-04}$	$3{,}11E^{-05}$	$4{,}88E^{-04}$	$1{,}41E^{-04}$
Média R^2	0,31	0,61	0,90	0,78

Poucos neurônios na camada oculta podem gerar *underfitting*, ou seja, um ajuste abaixo do esperado, enquanto o excesso deles pode causar o *overfitting*, que se trata da adequação excessiva, gerando predições imprecisas. Observa-se, na Tabela 4, que o ajuste ideal ficou com oito neurônios, o dobro de elementos da camada de entrada.

Considerando os desempenhos obtidos variando o número de neurônios na camada oculta, a RNA T com oito neurônios foi a topologia com índices mais satisfatórios, indicando um alto índice de correlação, variando de 0,61 a 0,92, com média de 0,90, como um valor tendendo a zero de $4{,}88E^{-04}$, exibido no gráfico de dispersão da Figura 15, que apresenta pontos próximos da reta, retratando a aproximação dos dados preditos dos dados reais. Esses resultados

são adequados para uma rede neural, caracterizando o sucesso da aplicação, o que pode ser visualizado também na Figura 16, que demonstra ponto a ponto os dados reais e os previstos.

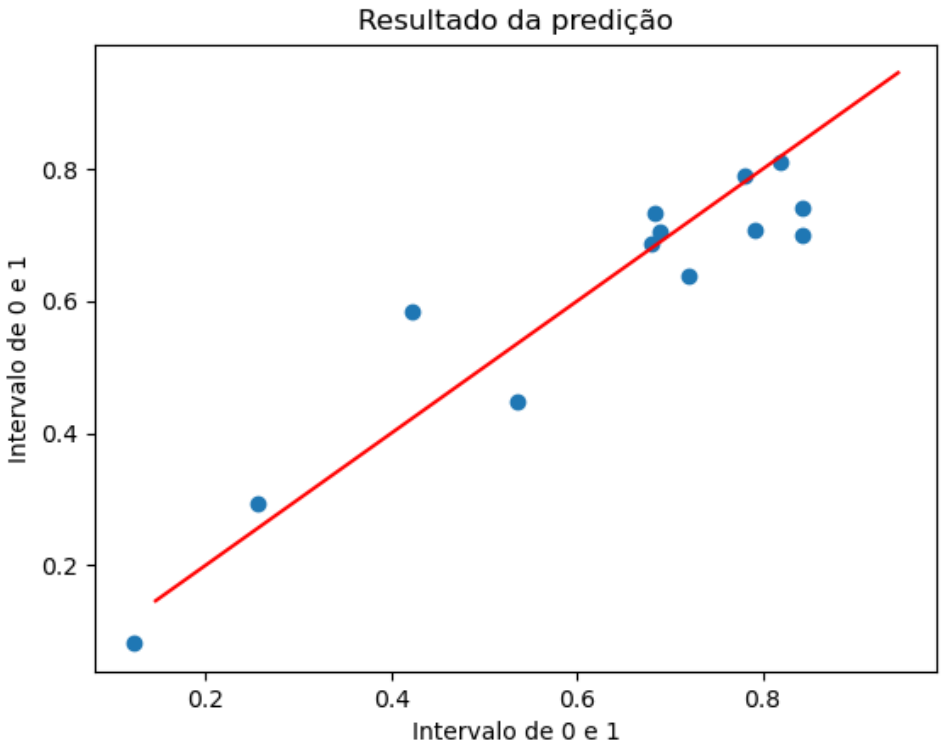

FIGURA 14 – Predição de vazão do biogás para R^2 = 0,87.

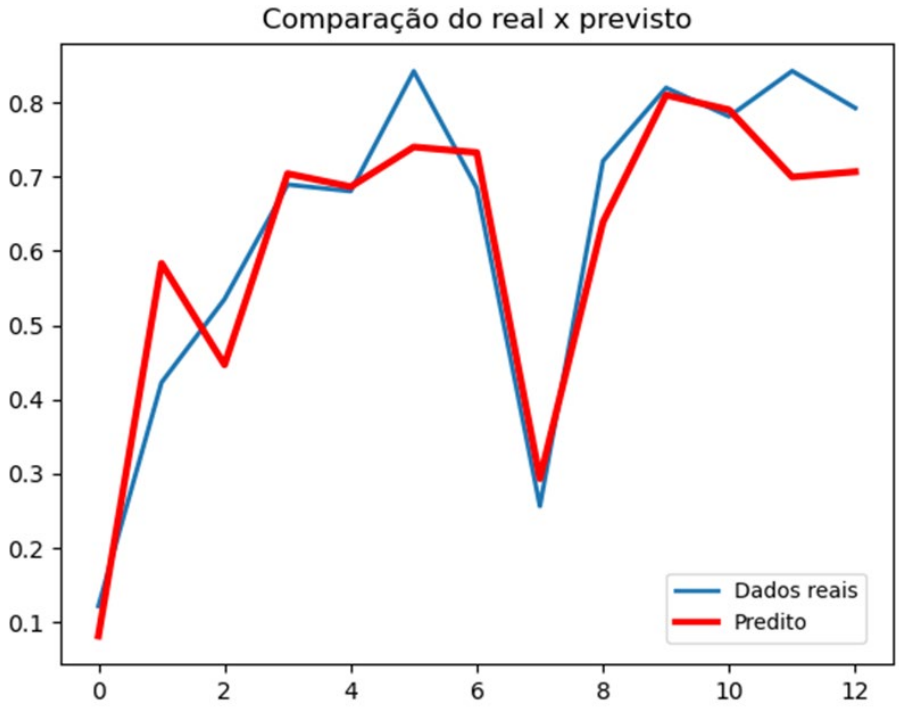

FIGURA 15 – Comparação do resultado previsto com os dados reais.

Ao observar o melhor resultado do R^2 com oito neurônios, com o objetivo de confirmá-lo, foi treinada a rede com sete e com nove neurônios, visando a identificar o ponto exato com a melhor relação. O resultado da média com sete neurônios foi $R^2 = 0,62$ e MSE = $4,88E^{-04}$, enquanto a de nove neurônios obteve $R^2 = 0,86$ e MSE = $1,59E^{-04}$, mantendo a superioridade da configuração com oito neurônios.

Sendo o desenvolvimento de um modelo um processo interativo de avaliação gradual e recorrente, mesmo levando em consideração a complexidade e os desafios da modelagem, é possível sugerir técnicas que podem auxiliar no processo. No decorrer do trabalho, pretendeu-se configurar uma arquitetura de CNN, avaliando os resultados e comparando os desempenhos, a fim de compreender se seu uso poderia gerar um resultado melhor para a previsão em ETE do tipo anaeróbio.

Dando sequência à implementação, a RNA C foi processada, tendo sido aplicada a mesma topologia, ou seja, quatro entradas e apenas uma saída, variando o número de neurônios na camada oculta. Os resultados são apresentados na Tabela 5, na qual se pode observar que a menor taxa de erro e o maior grau de correlação se deram no teste com oito neurônios na camada oculta.

TABELA 5 – Resultados de R e MSE das etapas de teste da RNA C.

	RNA C (2)	**RNA C (4)**	**RNA C (8)**	**RNA C (16)**
MSE	$8,21E^{-04}$	$1,54E^{-03}$	$2,08E^{-04}$	$8,06E^{-06}$
Média R^2	0,77	0,82	0,93	0,32

Os resultados aplicando CNN foram superiores ao uso de MLP. A Figura 17 apresenta o gráfico de dispersão da RNA C com oito neurônios na camada oculta, que, dentre as simulações efetuadas, apresentou melhor resultado, obtendo um R^2 de 0,96, além de uma série de excelentes resultados. Os pontos próximos da reta indicam a aproximação dos dados preditos dos dados reais, resultados adequados para uma rede neural, revelando o sucesso da aplicação.

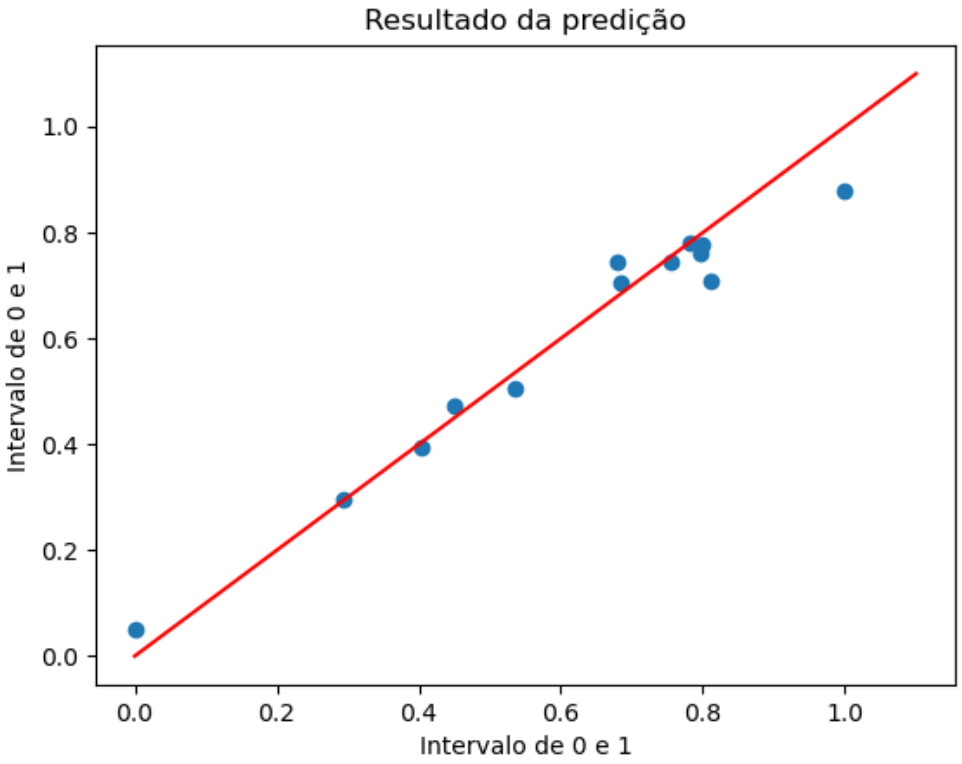

FIGURA 16 – Predição de vazão do biogás para $R^2 = 0,93$.

Na Figura 18, é possível verificar a proximidade das linhas no gráfico entre os dados preditos e os dados reais. Os valores foram plotados de forma não normalizada, a fim de facilitar a identificação dos valores reais que tiveram maior disparidade – na plotagem normalizada, os valores são modificados para ficar em escala. Identificando os pontos que destoaram, procurou-se nos dados identificar algum comportamento anormal para justificar a menor assertividade da predição.

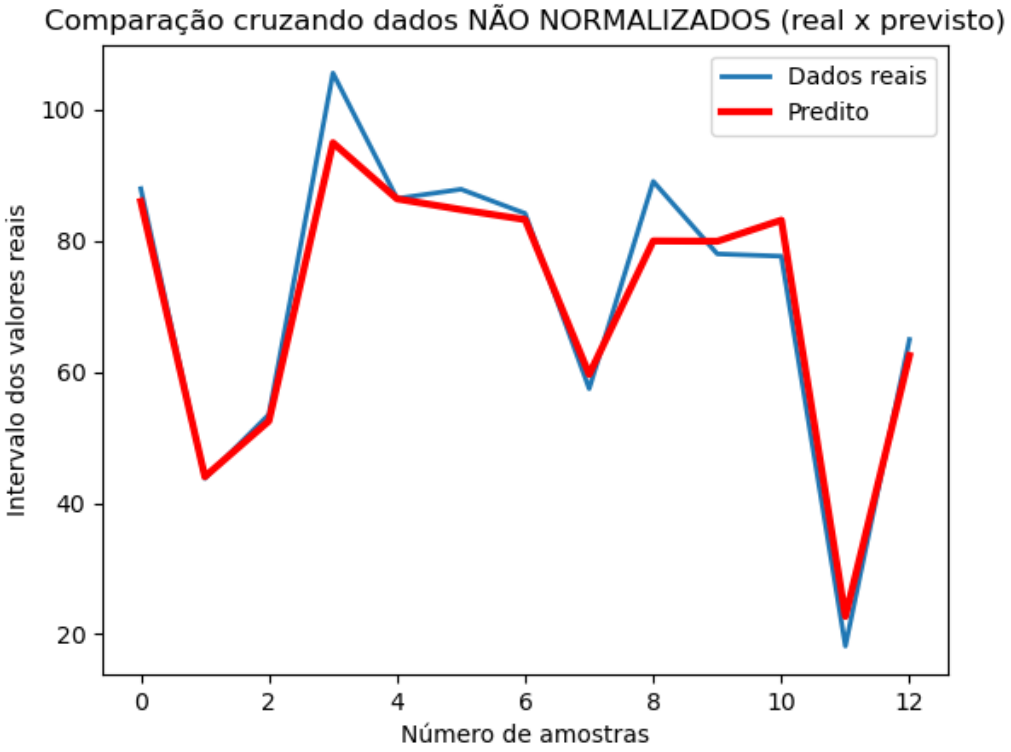

FIGURA 17 – Comparação do predito e do real não normalizado.

A fim de identificar se oito neurônios eram realmente a melhor opção, novamente foi simulado com sete e nove neurônios. Os resultados obtidos foram, respectivamente: $R^2 = 0,54$ e MSE = $7,32E^{-04}$ e $R^2 = 0,73$ e MSE = $1,49E^{-03}$, o que demonstra que a simulação com oito neurônios apresentou melhor média.

O conjunto de resultados obtidos indica que as CNN têm desempenho melhor que as demais simulações realizadas, permitindo sua indicação como uma ótima topologia e tecnologia para a predição do comportamento biológico de estações de tratamento.

Aprofundando a análise, a Figura 19 apresenta a perda no treinamento dos dados e no conjunto de validação durante as épocas treinadas do modelo.

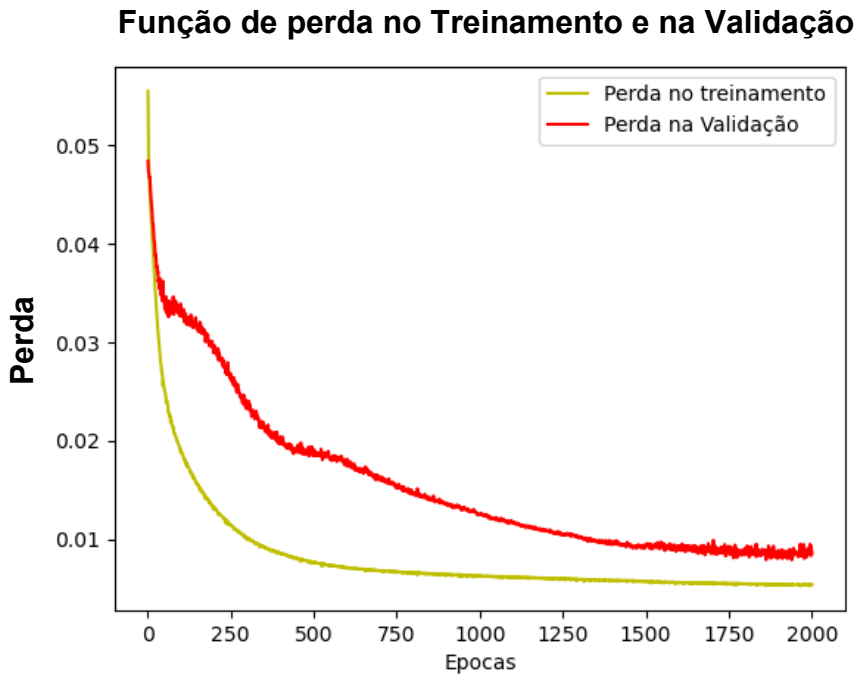

FIGURA 18 – Perda no treinamento e na validação.

Outra preocupação observada nas simulações referiu-se ao comportamento periódico de determinadas variáveis, como demonstrado na Figura 12, tendo sido constatado que a vazão do biogás possui comportamento similar à DQO, com pouco menos de duas horas de atraso, fator também observado quando comparada a vazão do esgoto com a vazão do biogás, que possui comportamento periódico menor que uma hora. Tal comportamento advém do TDH, que é o período entre o momento em que o substrato entra no reator e sua saída, ou seja, é o tempo necessário para os microrganismos presentes no reator fazerem a biodigestão (CHERNICHARO, 2016).

As informações sobre o deslocamento temporal foram obtidas de pesquisas desenvolvidas no grupo de estudo coordenado pelos professores envolvidos na tese, as quais modelaram o deslocamento temporal da DQO pela Equação 4:

$$\gamma(t) = 713.715 + 226.068 \,.\cos\left(\left(\frac{2\pi}{24}\right)t + 1.738\right) + 103.526 \,.\cos\left(\left(\frac{4\pi}{24}\right)t - 0.202\right) \qquad (4)$$

Já para o deslocamento temporal da vazão do esgoto, o cálculo foi realizado com a Equação 5.

$$\gamma(t) = 73.737 + 21.141 \,.\cos(\left(\frac{2\pi}{24}\right)t + 1.323) + 10.370 \,.\cos\left(\left(\frac{4\pi}{24}\right)t - 0.059\right) \qquad (5)$$

A fim de simular o comportamento periódico das variáveis, foram realizadas quatro simulações para testar e tentar replicar o possível atraso encontrado pelas equações nas variáveis presentes no sistema, aplicando CNN e alterando a posição dos dados de entrada na tabela de *input* do modelo computacional, conforme segue:

a) D1: deslocando em duas horas na tabela as entradas de vazão de esgoto e DQO.
b) D2: deslocando em duas horas na tabela as entradas de vazão de esgoto, DQO e SSV e o SST em uma hora.
c) D3: deslocando em duas horas na tabela apenas SST.
d) D4: deslocando em duas horas na tabela as entradas de vazão de esgoto, DQO e SSV.

Após as simulações citadas, obtiveram-se os resultados apresentados na Tabela 6.

TABELA 6 – Resultados de R e MSE das etapas de teste com deslocamento temporal.

	RNA C (D1)	**RNA C (D2)**	**RNA C (D3)**	**RNA C (D4)**
MSE	$5{,}17E^{-04}$	$3{,}56E^{-03}$	$7{,}27E^{-03}$	$3{,}95E^{-01}$
Média do R^2	0,62	0,64	0,73	0,40

As Figuras 20 e 21 representam graficamente os melhores resultados obtidos com a variação temporal, obtidos com a RNA C (D3).

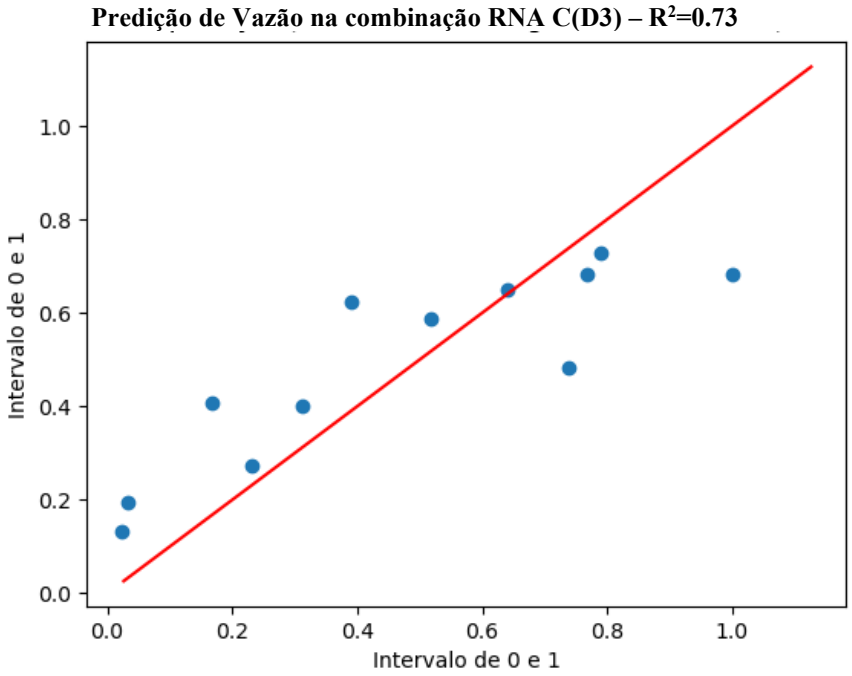

FIGURA 19 – Predição de vazão do biogás.

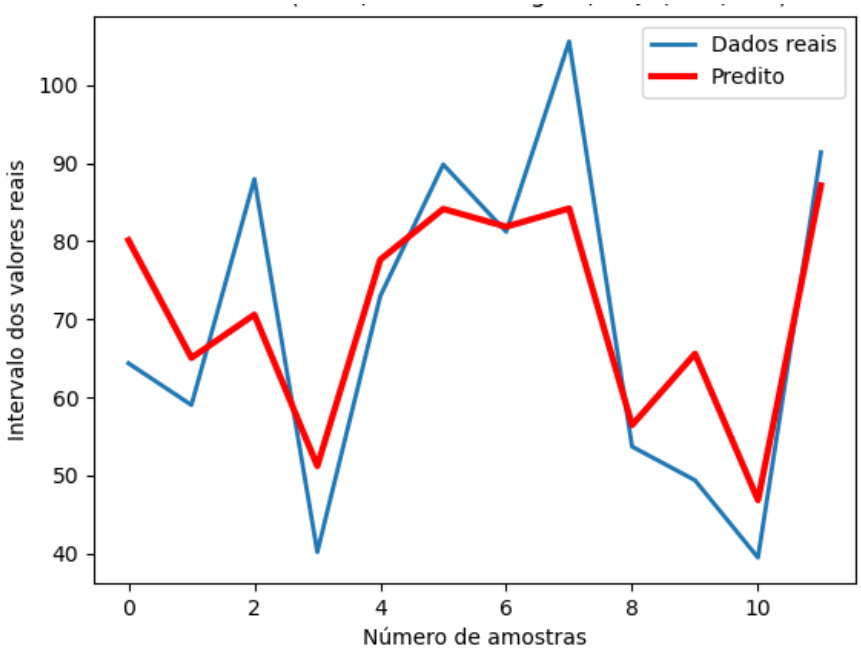

FIGURA 20 – Comparação dos dados reais e preditos.

Observa-se que os resultados com deslocamento temporal foram inferiores aos obtidos com os dados originais. Em sistemas de biodigestão com processo de batelada, nos quais não é necessário decantadores individuais, pois toda a massa biológica permanece no reator durante todos os ciclos, o TDH não causa variações devido à estabilização que ocorre no processo. Isso pode ser um indicativo de que talvez características presentes no tratamento podem estabilizar o processo, o que tem impacto negativo na predição, devendo ser analisado em estudos futuros.

Dentre os resultados apurados nas simulações apresentadas neste capitulo, a maior eficiência foi alcançada pela RNA C com oito neurônios, que obteve MSE de $2{,}08E^{-04}$ e a melhor média de R^2 (0,93), indicando que, para as quatro variáveis físico-químicas de entrada aplicadas, a melhor convergência dos resultados e a melhor predição ocorreram com oito neurônios. É importante salientar que, nas simulações sem CNN, o melhor resultado também foi obtido com oito neurônicos na camada oculta – MSE = $4{,}88E^{-04}$ e $R^2 = 0{,}90$ –, o que permite afirmar que, para o modelo proposto, essa é a quantidade que melhor representa suas abstrações, garantindo que os resultados preditos se aproximem dos resultados reais das amostras. Já os dados com deslocamento de tempo das variáveis não apresentaram resultados tão satisfatórios quanto os dados originais.

Em relação ao avanço dos resultados na RNA T ao aumentar o número de neurônios de forma exponencial, o valor do R^2 dobrou a cada implementação e, após atingir seu limite com oito neurônios, começou a cair. Já na RNA C, o aumento foi mais gradual, próximo de 10% de elevação em cada etapa, até atingir o melhor resultado do R^2 com oito neurônios, quando

começou a cair. Nas redes com deslocamento temporal, os resultados foram próximos, com exceção da última modelagem, cujo resultado foi péssimo. Ainda, pode-se dizer que a alteração unitária do número de neurônios gera pouca diferença no resultado final do experimento, por isso as implementações foram exponenciais.

Na Figura 22, estão presentes todas as amostras usadas no desenvolvimento do trabalho, organizadas por data e horário e não normalizadas, ou seja, os dados reais, de forma a melhor avaliar as diferenças encontradas entre os resultados preditos e os dados reais, separados pelas fases de treinamento e de teste ao longo do tempo, usando CNN. Outro aspecto identificado pelo gráfico diz respeito à existência de comportamento adverso da predição em relação ao turno ou horário do dia.

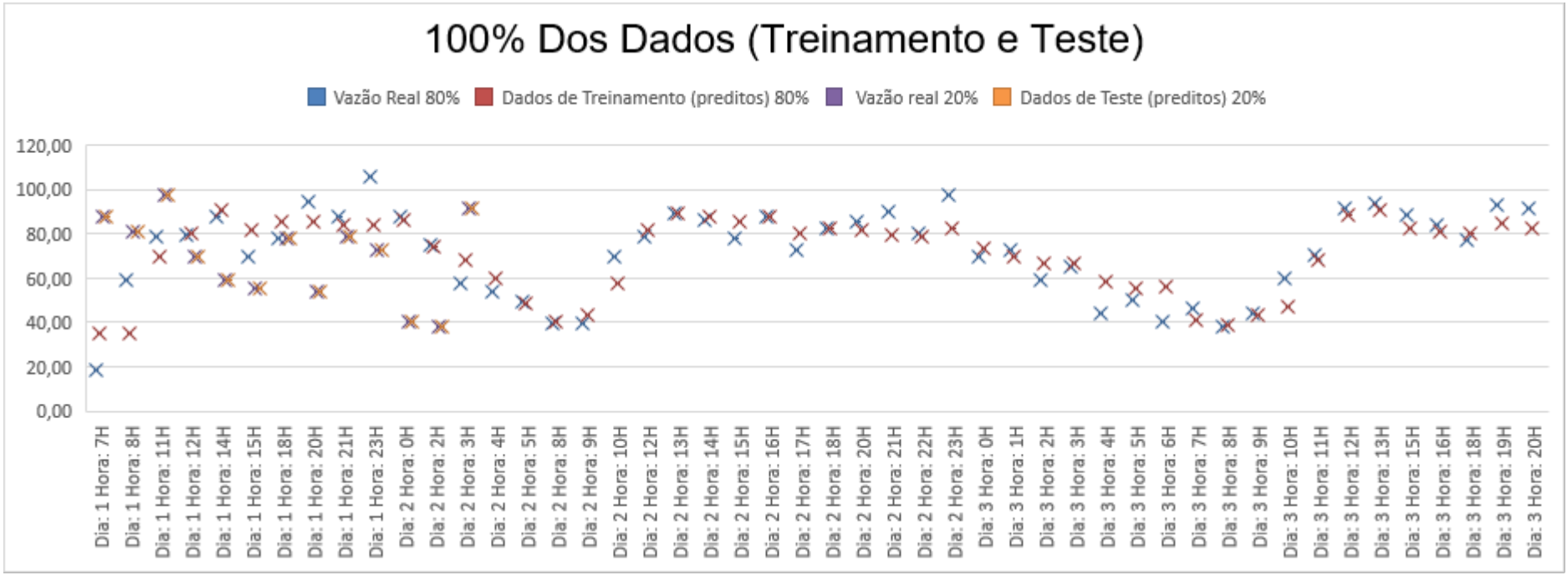

FIGURA 21 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo de toda a amostra.

A Figura 22 serve de referência macro para verificar a aproximação dos pontos e identificar os valores preditos que destoam dos resultados reais em função do tempo, para posteriormente analisar se, nos dados reais, é possível constatar alguma eventual característica sazonal que teria impacto em uma predição não satisfatória, o que poderia estar relacionado a fatores ligados ao tempo ou a questões sazonais da ETE.

Durante a análise, não foram constatadas questões sazonais, apenas se verificou que os maiores erros são justamente nos pontos em que houve pico nos valores reais. Tendo em vista que o modelo trabalha com uma normalidade, quando ocorrem picos de produção, o modelo não tem o resultado tão próximo do real, porém, quando o reator tem seu funcionamento normal, a produção de biogás apresenta um comportamento aceitável, com a maioria dos pontos com resultados que se aproximam dos dados reais, dentro da faixa aproximada de 10%, com menos de 20% de resultados sub ou superestimados.

O excesso de informações da Figura 22 possibilita observar os resultados de forma macro, mas não deixa tão claro quais dados são de teste e de treinamento, além de a ferramenta de edição não permitir identificar as legendas com caracteres distintos. Assim, esses dados foram distribuídos em dois outros gráficos, para minimizar esse problema: a Figura 23 contém os dados de treinamento e a Figura 24, os dados de teste, ambas comparando os resultados com os dados reais levantados.

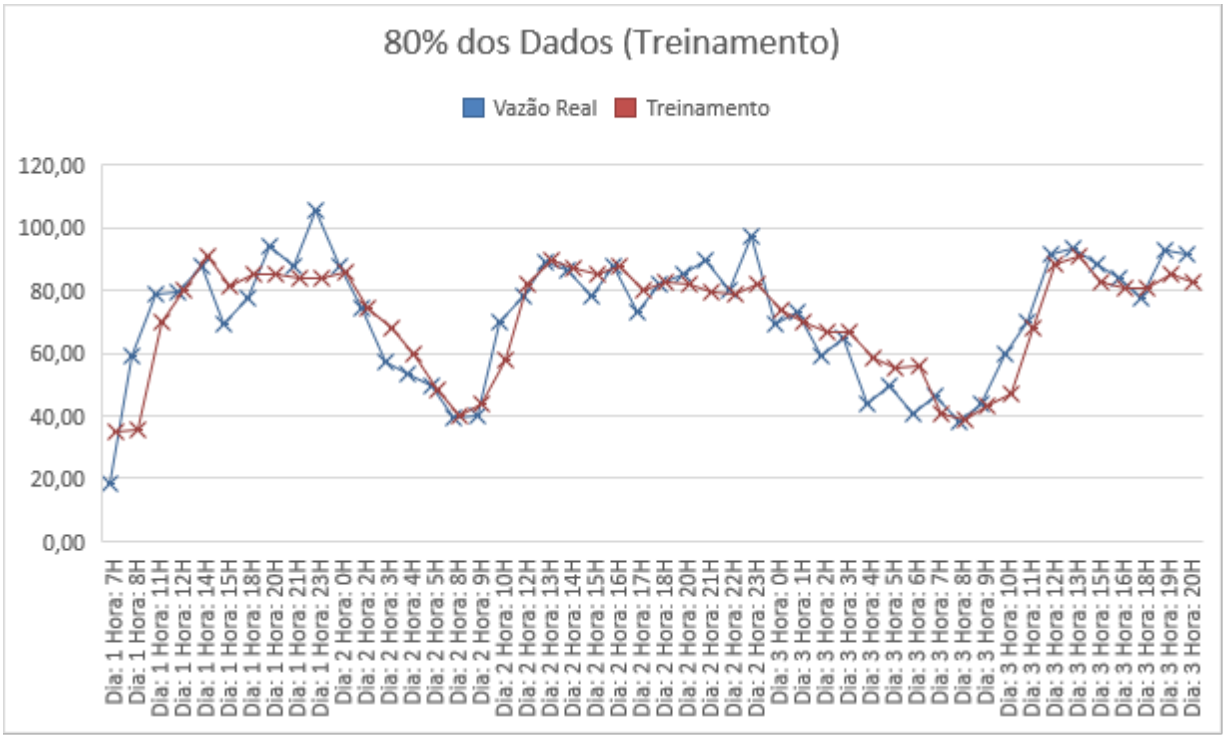

FIGURA 22 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo dos dados de treinamento.

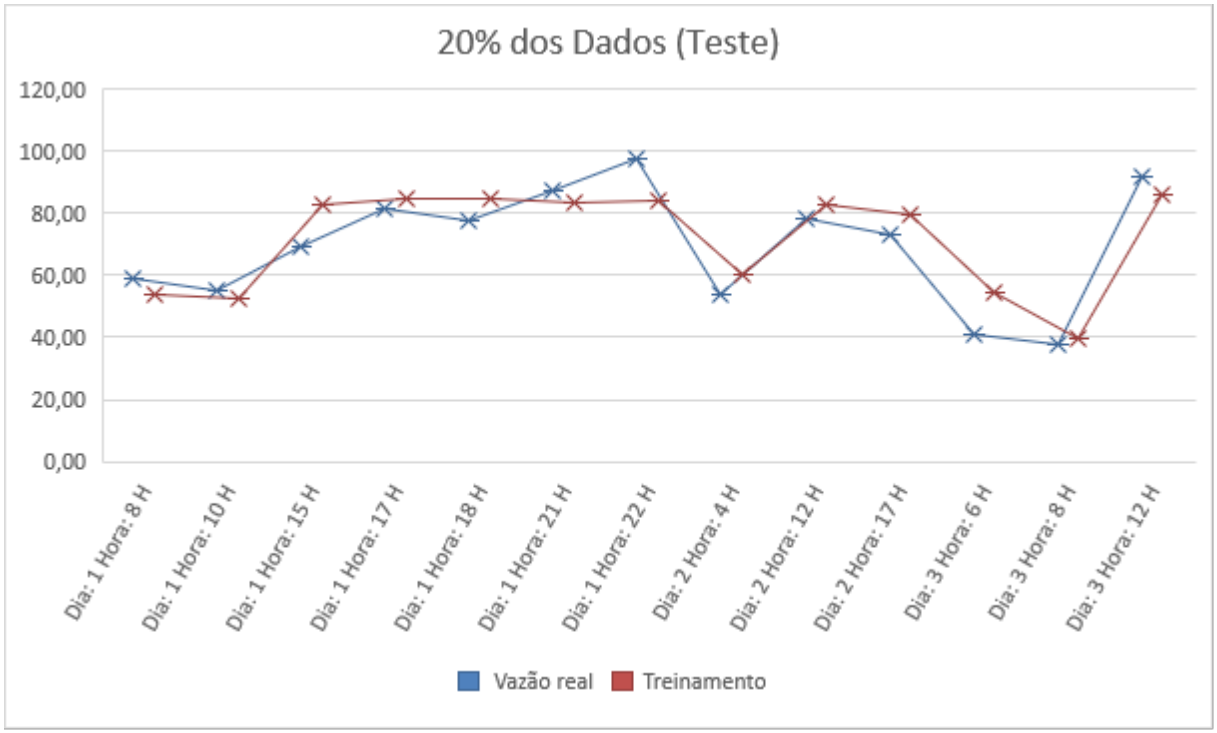

FIGURA 23 – Diferença entre os valores reais e preditos ao longo dos dados de teste.

Entendendo que a parametrização dessa modelagem em uma linguagem com entradas lógicas similares ao pensamento humano de especialista tende a ser uma ferramenta com potencial de utilização, sendo o resultado esperado a vasta utilização da ferramenta nas ETEs, para facilitar e tornar mais didático o uso do modelo, foi desenvolvida uma interface de utilização *web*, ou seja, sem a necessidade de inferir dados sobre linguagens de programação ou algo mais técnico.

A ferramenta pode ser acessada por multiplataformas, por ser uma página *web* na qual o usuário insere os dados de entrada e, em tempo real, obtém a predição do resultado de vazão do biogás pelo modelo pré-configurado aplicado, conforme observado na Figura 25.

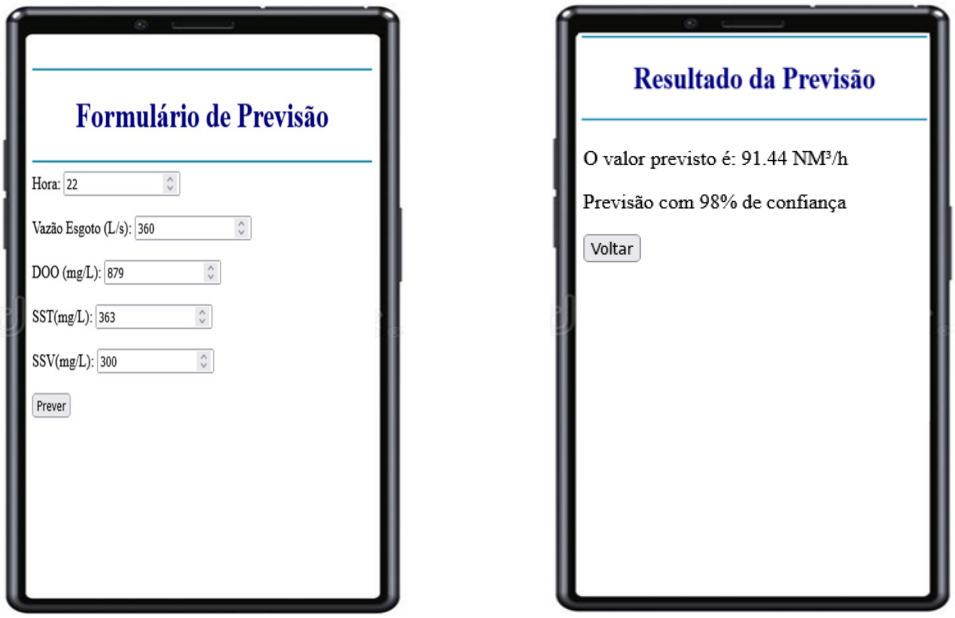

FIGURA 24 – *Layout* da tela da aplicação.

A aplicação está instalada em um servidor *web* local, em plataforma Uvicorn, que executa sobre o Python. O desenvolvimento das páginas e do formulário foi realizado em linguagem de marcação de hipertexto (HTML), com uma aplicação *web* que utiliza o *framework* de desenvolvimento Python para *web* chamado FastAPI, tudo rodando sobre o modelo selecionado e treinado.

O desenvolvimento de aplicações como essa, atrelado à transição tecnológica da coleta automatizada de indicadores nas estações de tratamento, evita o processo de análise posterior de um especialista e a obtenção de informações após o processo de produção, sendo, portanto, uma forma automatizada que conta com sensores eletrônicos das variáveis de entrada e análise computacional pelo modelo computacional devidamente treinado. Assim, traz uma transformação tecnológica na forma como a gerência das estações de tratamento ocorre e no acompanhamento dos indicadores de qualidade esperados.

A principal barreira para adoção dessa tecnologia é a influência do comportamento biológico, que é distinto na América Latina, devido à diferença climática. Portanto, o modelo deve ser calibrado e adaptado ao clima de cada região, o que demanda dados coletados nas estações para alimentar o modelo.

Posto isso, os gestores das estações de tratamento, responsáveis pela tomada de decisão, devem considerar este estudo como um recurso útil sobre o uso de tecnologia no processo de tratamento, visando a uma gestão ambiental correta, à aplicação da economia circular e à contribuição com os ODS para reduzir o impacto ambiental das mudanças climáticas até 2030.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A predição de vazões em estações de tratamento é muito importante, uma vez que o novo Marco Legal do Saneamento foi aprovado e há tendência de que a carga das estações seja ampliada. Nessa direção, neste trabalho, foram realizados testes incipientes para verificar a viabilidade da aplicação de um modelo computacional sobre os dados obtidos, com o objetivo de servir como instrumento de fomento à credibilidade do potencial da geração de energia renovável contida nas estações de tratamento.

O tratamento anaeróbio é um processo biológico complexo e não há o pleno conhecimento das relações existentes entre as diversas variáveis físico-químicas presentes no processo, tampouco do quanto exatamente cada uma contribui na produção do biogás, portanto as redes neurais apresentam-se como um recurso com enorme potencial no entendimento e modelagem desse processo, devido à capacidade de reproduzir as funções do cérebro e, assim, mapear as relações não lineares presentes nos dados, além de distinguir padrões existentes, que são aprendidos durante a etapa de treinamento.

Encontrar baixas taxas de erro, tendendo a zero, e taxas de convergência próximas de 100% indica resultados consistentes da modelagem; mesmo com os desvios, pode-se atribuir credibilidade aos resultados obtidos de produção de biogás. Diante disso, uma eventual adoção de um modelo mais assertivo pelas companhias de saneamento traria uma transição, acompanhada de campanhas pontuais para a utilização de um modelo computacional baseado em redes neurais, o que seria uma forma não dispendiosa de os governos e estatais de saneamento tornarem as estações de tratamento sustentáveis.

As redes neurais testadas, do tipo MLP e CNN, produziram resultados satisfatórios, que revelam ser possível ter mais de 90% de confiança nos dados preditos. Dentre os testes efetuados, o uso de CNN apresentou melhor grau de confiança dos dados, chegando a 96% em uma das simulações. Tais índices representam a notável capacidade de elas predizerem valores de vazão do biogás próximos dos valores reais.

Em relação ao deslocamento temporal das variáveis, foi possível perceber que não é pertinente tal abordagem manual e que o próprio sistema do reator é capaz de estabilizar, gerando os valores de predição sem a interferência humana na manipulação das variáveis de entrada – ao fazer tais manipulações nos dados, os resultados de predição foram todos inferiores a 80% e uma das premissas deste trabalho foi considerar ótimos resultados de R^2 superiores a 0,8.

Após a análise empreendida, entende-se como contribuição deste estudo o estímulo à melhoria do processo nos reatores, permitindo uma maior eficiência nas estações de tratamento, por meio do acompanhamento e da possibilidade de tomada de decisão pelo operador da planta, com o uso de modelos na estação e o desenvolvimento de métodos de ajuste das variáveis, sempre que for detectado algum déficit que influencie a produção de um biogás com baixa concentração de metano. Dessa forma, quem sabe, no futuro, se possam automatizar as tomadas de decisão por processos eletrônicos ou mecânicos, de modo a manter a produção de um biogás economicamente viável, com o máximo possível de teor de metano e melhor poder calorífico (cerca de 6 kWh/m^3).

Durante a revisão bibliográfica, foi constatado que há lacunas na pesquisa quanto à padronização dos experimentos, seleção dos dados e análise dos resultados. Como os modelos foram bem-sucedidos, cabe o investimento em pesquisa para a discussão e construção de uma infraestrutura e uma normatização para dar suporte à criação dos modelos computacionais na área de saneamento.

Ademais, este trabalho visou a aplicar modelos computacionais, comparando e analisando os resultados, por compreender que não é possível afirmar que há um padrão bem definido sobre os modelos aplicáveis para a solução do problema em foco, uma vez que os modelos são construídos para vários propósitos e com conjuntos de dados e de variáveis distintos. Assim, técnicas adequadas para uma aplicação podem ser inadequadas para outra, situação evidenciada ao longo do estudo.

Em segundo lugar, objetivou dar visibilidade aos gestores das estações de tratamento de um recurso útil para uma mudança tecnológica que permita a adoção da IA como uma ferramenta de apoio e desenvolvimento da sustentabilidade e gestão ambiental no saneamento, corroborando para os objetivos estabelecidos no Marco Legal do Saneamento no Brasil e auxiliando no desenvolvimento de outras estações por todo o planeta, fomentando, ainda, um modelo de negócio sustentável e ambientalmente correto. Para isso, há a necessidade de agrupar dados experimentais das várias regiões do país e, eventualmente, de outros países, a fim de construir modelos adequados aos respectivos climas e ambientes.

A implantação de modelos de previsão em estações de tratamento pode servir como uma mudança no processo de biodigestão, pois eles auxiliam o gestor na tomada de decisão, podendo interferir em tempo real no processo, aumentando, assim, a eficiência da produção de biogás e, consequentemente, fomentando a utilização desse subproduto na geração de energia em eventuais sistemas de cogeração implantados nas estações, como também sua purificação e comercialização.

Permitir a gestão inteligente da estação de tratamento corrobora inicialmente para os ODS num aspecto mundial, como também para o Marco Legal do Saneamento no Brasil, pois há uma tendência de aumento na carga das estações, o que implica aumento na produção de biogás e na vazão do esgoto, resultando, com uma gestão eficiente, na sustentabilidade da ETE, na economia circular e na gestão ambiental.

Como sugestão de trabalhos futuros, sugere-se analisar combinações de parâmetros do afluente prejudicais à biota, emitindo alertas aos gestores e, assim, permitindo a tomada de decisão em tempo real, a fim de evitar contaminações e a instabilidade do reator. Esses alertas poderiam ser mais amplos, com vistas a melhorar a operação da planta.

REFERÊNCIAS

ABBA, S. I.; ELKIRAN, G. Effluent prediction of chemical oxygen demand from the wastewater treatment plant using artificial neural network application. **Procedia Computer Science**, [s.l.], v. 120, p. 156-163, 2017.

AKBAS, H.; BILGEN, B.; TURHAN, A. M. An integrated prediction and optimization model of biogas production system at a wastewater treatment facility. **Bioresource Technology**, [s.l.], v. 196, p. 566-576, 2015.

ALMEIDA, A. F.; ARRUDA, A. M. B. D. S. Análise da viabilidade de geração de energia elétrica por biogás. *In:* ENCONTRO DE TECNOLOGIA DA UNIUBE, 8., 2014, Uberaba. **Anais [...]**. Uberaba: Uniube, 2014.

ALSULAILI, A.; REFAIE, A. Artificial neural network modeling approach for the prediction of five-day biological oxygen demand and wastewater treatment plant performance. **Water Supply**, [s.l.], v. 5, 2021.

ANDREOLI, C. V.; SPERLING, M. V.; FERNANDES, F. **Lodo de esgotos**: tratamento e disposição final. Belo Horizonte: UFMG, 2014.

ARTERO, A. O. **Inteligência artificial**: teórica e prática. [S.l.]: Livraria da Física, 2009.

ASADI, M.; GUO, H.; MCPHEDRAN, K. Biogas production estimation using data-driven approaches for cold region municipal wastewater anaerobic digestion. **Journal of Environmental Management**, [s.l.], v. 253, 2020.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS (ABNT). **NBR 12209**: elaboração de projetos hidráulicos-sanitários de estações de tratamento de esgotos sanitários. Rio de Janeiro, 2011.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DO BIOGÁS (ABIOGÁS). **Proposta para o setor de biogás e biometano**. São Paulo, 2022.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DO BIOGÁS (ABIOGÁS). **Programa Nacional do Biogás e Biometano**. São Paulo, 2023.

BARBOSA, S. T.; VEIGA, J.; CARVALHO, C. V. D. A. Estudo do uso de técnicas de inteligência artificial em jogos 2D. **Teccen**, Vassouras, v. 5, n. 1, 2015.

BELTRAMO, T.; RANZAN, C.; HINRICHS, J. Artificial neural network prediction of the biogas flow rate optimised with an ant colony algorithm. **Biosystems Engineering**, [s.l.], v. 143, p. 68-78, 2016.

BEM, C. C. *et al*. Características da matéria orgânica: estudo comparativo de padrões de espectrometria de fluorescência e UV-Vis de rio e lago em bacias urbanizadas. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, [s.l.], p. 135-147, 2013.

BENNETT, N. D. *et al*. Characterising performance of environmental models. **Environmental Modelling & Software**, [s.l.], v. 40, p. 1-20, 2013.

BHAT, N.; MCAVOY, T. J. Use of neural nets for dynamic modeling and control of chemical process systems. **Computers and Chemical Engineering**, [s.l.], v. 14, n. 4-5, p. 573-583, 1990.

BILOTTA, P.; ROSS, B. Z. L. Estimativa de geração de energia e emissão evitada de gás de efeito estufa na recuperação de biogás produzido em estação de tratamento de esgotos. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, [s.l.], v. 21, n. 2, p. 275-282, 2016.

BLEY JR., C. **Biogás**: a energia invisível. 2. ed. Foz do Iguaçu: Itaipu, 2015.

BOHÓRQUEZ, Y. E.; TÉLLEZ, M.; RODRÍGUEZ, J. E. Software basado en agentes inteligentes y servicios web para búsqueda de productos en la web. **Tecnura**, Bogotá, v. 16, n. 31, 2012.

BRAGA, A. D. P.; LUDERMIR, T. B.; CARVALHO, A. C. P. D. L. F. **Redes neurais artificiais**: teorias e aplicações. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

BRASIL. Probiogás. **Guia técnico de aproveitamento energético de Biogás em estações de tratamento de Esgoto**. Brasília, DF: Probiogás, 2005.

BRASIL. Agência Nacional de Águas. **Atlas de esgotos**: despoluição de bacias hidrográficas. Brasília, DF: ANA, 2017.

BRASIL. Lei n. 14.026, de 15 de julho de 2020. Atualiza o marco legal do saneamento básico e altera a Lei nº 9.984, de 17 de julho de 2000, para atribuir à Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA) competência para editar normas de referência sobre o serviço de saneamento, a Lei nº 10.768, de 19 de novembro de 2003, para alterar o nome e as atribuições do cargo de Especialista em Recursos Hídricos, a Lei nº 11.107, de 6 de abril de 2005, para vedar a prestação por contrato de programa dos serviços públicos de que trata o art. 175 da Constituição Federal, a Lei nº 11.445, de 5 de janeiro de 2007, para aprimorar as condições estruturais do saneamento básico no País, a Lei nº 12.305, de 2 de agosto de 2010, para tratar dos prazos para a disposição final ambientalmente adequada dos rejeitos, a Lei nº 13.089, de 12 de janeiro de 2015 (Estatuto da Metrópole), para estender seu âmbito de aplicação às microrregiões, e a Lei nº 13.529, de 4 de dezembro de 2017, para autorizar a União a participar de fundo com a finalidade exclusiva de financiar serviços técnicos especializados. **Diário Oficial da União**, Brasília, DF 16 jul. 2020a. Disponível em: http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2019-2022/2020/lei/l14026.htm. Acesso em: 21 jul. 2022.

BRASIL. Secretaria Nacional de Saneamento Ambiental. **Atlas de esgotos**: atualização da base de dados de estações de tratamento de esgotos no Brasil. Brasília, DF: SNS, 2020b.

CANETE, J. F. D. *et al*. Soft-sensing estimation of plant effluent concentrations in a biological wastewater treatment plant using an optimal neural network. **Expert Systems With Applications**, [s.l.], p. 8-19, 2016.

CARBUREANU, M.; OPREA, M. Applying computational intelligence to wastewater treatment performance evaluation in the case of refineries. **IFAC Proceedings Volumes**, Romania, v. 46, n. 6, p. 95-100, 2013.

CHERNICHARO, C. A. D. L. **Reatores anaeróbios**. Belo Horizonte: Editora UFMG, 2016.

CHERNICHARO, C. A. D. L. *et al*. Contribuição para o aprimoramento de projeto, construção e operação de reatores UASB aplicados ao tratamento de esgoto sanitário – parte 1: tópicos de interesse. **DAE**, São Paulo, v. 66, n. 214, p. 5-16, 2018.

CHOI, D. J.; PARK, H. A hybrid artificial neural network as a software sensor for optimal control of a wastewater treatment process. **Water Research**, [s.l.], v. 35, n. 16, p. 3959-3967, 2001.

CINAR, O. New tool for evaluation of performance of wastewater. **Process Biochemistry**, Turkey, v. 40, p. 2980-2984, 2005.

CORTES, U. *et al*. Artificial intelligence and environmental decision support systems. **Applied Intelligence**, [s.l.], v. 13, n. 1, p. 77-91, 2000.

DATA SCIENCE ACADEMY. **Deep learning book**. [S.l.: s.n.], 2022. v. 1.

DENG, Y. *et al*. Biogas as a sustainable energy source in China: regional development strategy application and decision making. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s.l.], v. 35, p. 294-303, 2014.

DOGAN, E. *et al*. Application of artificial neural networks to estimate wastewater treatment plant inlet biochemical oxygen demand. **Wiley InterScience**, [s.l.], v. 27, n. 4, 2015.

EDER, B. **Biogas-praxis**: grundlagen, planung, anlagenbau, beispiele, wirtschaftlichkeit. [S.l.]: Oekobuch Verlag, 2012. v. 5.

ERDIRENCELEBI, D.; YALPIR, S. Adaptive network fuzzy inference system modeling for the input selection and prediction of anaerobic digestion effluent quality. **Applied Mathematical Modelling**, [s.l.], v. 35, n. 8, p. 3821-3832, 2011.

FARIA, R. A. P. **Avaliação do potencial de geração de biogás e de produção de energia a partir da remoção da carga orgânica de uma estação de tratamento de esgoto**: estudo de caso. 2012. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Cascavel, 2012.

FERREIRA NETO, J. A. *et al*. Aptidão agrícola e algoritmos genéticos na organização espacial em projetos de reforma agrária. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, [s.l.], v. 1, p. 255-261, 2011.

GARLAPATI, V. K.; BANERJEE, R. Evolutionary and swarm intelligence-based approaches for optimization of lipase extraction from fermented broth. **Engineering in Life Sciences**, [s.l.], v. 10, n. 3, p. 265-273, 2010.

GERMANY. Federal Ministry for Economic Affairs and Energy. **Development of renewable energy sources in Germany 2017**. [S.l.]: AGEE-Stat., 2018.

GERVASONI, R.; CANTÃO, M. P. Estudo da produção de metano a partir da digestão aneróbia: relação entre teoria e prática. **Espaço e Energia**, [s.l.], n. 15, p. 13-20, 2011.

GIL, A. C. **Como elaborar projetos de pesquisa**. São Paulo: Atlas, 2002.

HAANDEL, C.; LETTINGA, G. F. **Tratamento anaeróbio de esgotos**: um manual para regiões de clima quente. Campina Grande: Epgraf, 1994.

HAMED, M. M.; KHALAFALLAH, M. G.; HASSANIEN, E. A. Prediction of wastewater treatment plant performance using artificial neural networks. **Environmental Modelling & Software**, [s.l.], v. 19, n. 10, p. 919-928, 2004.

HASSOUN, M. H. **Fundamentals of artificial neural networks**. Cambridge: Bradford Books, 1995.

HAYKIN, S. O. **Neural networks**: a comprehensive foundation. [S.l.]: Pearson, 1998.

HAYKIN, S. S. **Redes neurais**: princípios e prática. Porto Alegre: Bookman, 2001.

HAYKIN, S. S. **Neural networks and learning machines**. [S.l.]: Prentice Hall, 2009.

HEATON, J. **Introduction to neural networks for Java**. 2. ed. [S.l.]: Heaton Research, 2008.

HEJABI, N. *et al*. Evaluation of the effluent quality parameters of wastewater treatment plant based on uncertainty analysis and post-processing approaches (case study). **Water Science & Technology**, [s.l.], v. 7, 2021.

HERNANDEZ, O. A. D. **Avaliação de sistemas de medição para controle de processo em tempo real numa estação de tratamento de esgoto sanitário que utiliza reatores UASB**. 2019. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2019.

HERNÁNDEZ-DEL-OLMO, F.; LLANES, F. H.; GAUDIOSO, E. An emergent approach for the control of wastewater treatment plants by means of reinforcement learning techniques. **Expert Systems with Applications**, [s.l.], v. 39, n. 3, p. 2355-2360, 2012.

HOLUBAR, P. *et al*. Advanced controlling of anaerobic digestion by means of hierarchical neural networks. **Water Research**, [s.l.], v. 36, n. 10, p. 2582-2588, 2002.

HONGA, S. H. *et al*. Monitoring of sequencing batch reactor for nitrogen and phosphorus removal using neural networks. **Biochemical Engineering Journal**, [s.l.], v. 35, n. 3, p. 365-370, 2007.

IGONI, A. H. *et al*. Effect of total solids concentration of municipal solid waste on the biogas produced in an anaerobic continuous digester. **Agricultural Engineering International**, [s.l.], v. 10, p. 7-10, 2008.

INSTITUTO TRATA BRASIL. **Benefícios econômicos e sociais da expansão do saneamento no Brasil**. [S.l.], 2022.

INSTITUTO TRATA BRASIL. **ESG e tendências no setor de saneamento do Brasil**. [S.l.], 2023.

INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (IPCC). **AR6 Synthesis Report (SYR)**. [S.l.], 2023.

INTERNATIONAL ENERGY AGENCY. **World energy outlook**. [S.l.], 2022.

JAKEMAN, A. J.; LITTLEWOOD, I. G.; WHITEHEAD, P. G. Computation of the instantaneous unit hydrograph and identifiable component flows with application to two small upland catchments. **Journal of Hydrology**, [s.l.], v. 117, n. 1-4, p. 275-300, 1990.

JOLLIFFE, I. **Principal component analysis**. [S.l.]: Wiley, 2005.

JORDÃO, E. P.; PESSOA, C. A. **Tratamento de esgotos domésticos**. Rio de Janeiro: ABES, 2011.

JOSÉ, H. J. **Combustão e combustíveis**: apostila de Química Tecnológica. Florianópolis, 2004.

KAMINSKI, G. *et al*. Combustão direta de biogás em queimadores. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, [s.l.], v. 1, n. 1, 2021.

KANA, E. B. G. *et al*. Modeling and optimization of biogas production on saw dust and other co-substrates using artificial neural network and genetic algorithm. **Renewable Energy**, [s.l.], v. 46, p. 276-281, 2012.

KANAT, G.; SARAL, A. Estimation of biogas production rate in a thermophilic UASB reactor using artificial neural networks. **Environ Model Assess**, [s.l.], v. 14, p. 607-614, 2009.

KIM, J. R. *et al*. Forecasting influent flow rate and composition with occasional data for supervisory management system by time series model. **Water Science & Technology**, [s.l.], v. 53, n. 4-5, p. 185-192, 2006.

KUSIAK, A.; WEI, X. A data-driven model for maximization of methane production in a wastewater treatment plant. **Water Science & Technology**, [s.l.], v. 65, n. 6, p. 1116-1122, 2012.

LAUWERS, J. *et al*. Mathematical modelling of anaerobic digestion of biomass and waste: power and limitations. **Progress in Energy and Combustion Science**, [s.l.], v. 39, n. 4, p. 383-402, 2013.

LECUN, Y. *et al*. Gradient-based learning applied to document recognition. **Proceedings of the IEEE**, [s.l.], v. 86, p. 2278-2324, 1998.

LETTINGA, G. UASB process design for various types of wastewaters. **Water Science & Technology**, [s.l.], v. 24, n. 8, 1991.

LINKO, S.; ZHU, Y. H.; LINKO, P. Applying neural networks as software sensors for enzyme engineering. **Trends in Biotechnology**, [s.l.], v. 17, n. 4, p. 155-162, 1999.

LOBATO, L. C. D. S. **Aproveitamento energético de biogás gerado em reatores UASB tratando esgoto doméstico**. 2011. Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2011.

LUGER, G. **Inteligência artificial**. 6. ed. São Paulo: Pearson, 2013.

MAIER, H. R. *et al*. Methods used for the development of neural networks for the prediction of water resource variables in river systems: current status and future directions. **Environmental Modelling and Software**, [s.l.], v. 25, n. 8, p. 891-909, 2010.

MASCHINENFABRIK REINHAUSEN (MR). **Waste water generates energy**. Disponível em: https://www.reinhausen.com/impulses/stable-and-cost-effective-power-supply-in-industry/waste-water-generates-energy. Acesso em: 25 Maio 2023.

MCCARTY, P. L. Anaerobic waste treatment fundamentals. **Environmental Requirements and Control**, California, p. 123-126, 1964.

MCCORMICK, M.; VILLA, A. E. P. LSTM and 1-D convolutional neural networks for predictive monitoring of the anaerobic digestion process. *In:* INTERNATIONAL CONFERENCE ON ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS, 2019, Munich. **Proceedings [...]**. [S.l.: s.n.], 2019.

MJALLI, F. S.; AL-ASHEH, S.; ALFADALA, H. E. Use of artificial neural network black-box modeling for the prediction of wastewater treatment plants performance. **Journal of Environmental Management**, [s.l.], v. 83, n. 3, p. 329-338, 2007.

MORETTIN, P. A.; TOLOI, C. **Análise de séries temporais**. São Paulo: Blucher, 2006.

NEIVA, F. W.; SILVA, R. L. D. S. D. **Systematic literature review in computer science-a practical guide**. Juiz de Fora: UFJF, 2016.

NOURANI, V.; ELKIRAN, G.; ABBA, S. I. Wastewater treatment plant performance analysis using artificial intelligence – an ensemble approach. **Water Science & Technology**, v. 10, 2018.

ORTH, F. A. **Tratamento de esgoto**. 2007. Disponível em: https://pt.slideshare.net/Joao256/tratamento-de-esgoto-doado-pela-corsan-ao-municpio-de-montenegro-em-2007. Acesso em: 20 abr. 2018.

OZKAYA, B.; DEMIR, A.; BILGILI, M. S. Neural network prediction model for the methane fraction in biogas from field-scale landfill bioreactors. **Environmental Modelling & Software**, [s.l.], v. 22, n. 6, p. 815-822, 2007.

PAULA, A. C. D. **Avaliação integrada do desempenho de reatores anaeróbios do tipo UASB**. 2019. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2019.

PILGER, D. J.; HUGO, M. Aplicação de raciocínio baseado em casos no suporte a decisão de um sistema web de help desk. **REAVI**, Ibirama, v. 1, n. 2, 2012.

PIVELLO, V. R. Sistemas especialistas e o manejo ambiental. **Ambiente**, [s.l.], v. 5, n. 1, p. 52-57, 1991.

POSSETTI, G. R. C. *et al*. Energy recovery from biogas in UASB reactors treating sewage. *In*: CHERNICHARO, C. A. D. L.; BRESSANI-RIBEIRO, T. **Anaerobic reactors for sewage treatment**: design, construction and operation. [S.l.]: IWA, 2019.

POVEY, D. *et al*. Semi-orthogonal low-rank matrix factorization for deep neural networks. *In:* INTERSPEECH, 2018, [s.l.]. **Proceedings [...]**. [S.l.: s.n.], 2018.

PROGRAMA DE PESQUISA EM SANEAMENTO BÁSICO (PROSAB). **Tratamento de esgotos sanitários por processo anaeróbio e disposição controlada no solo**. Rio de Janeiro: ABES, 1999.

PROGRAMA DE PESQUISA EM SANEAMENTO BÁSICO (PROSAB). Os novos livros do PROSAB. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, [s.l.], v. 14, n. 4, 2009.

RAJESHWARI, K. V. *et al*. State-of-the-art of anaerobic digestion technology for industrial wastewater treatment. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s.l.], v. 4, n. 2, p. 135-156, 2000.

ROSA, A. P. *et al*. Potencial energético e alternativas para o aproveitamento do biogás e lodo de reatores UASB: estudo de caso Estação de Tratamento de Efluentes Laboreaux (Itabira). **Engenharia Sanitária e Ambiental**, [s.l.], v. 21, n. 2, p. 315-328, 2016.

ROSS, B. Z. L. **Escuma de reatores anaeróbios tratando esgotos domésticos em escala real**: produção, caracterização e proposição de parâmetros para seu gerenciamento. 2015. Tese (Doutorado) – Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2015.

RUFINER, H. L.; MILONE, D. H. Sistema de reconocimiento automático del habla. **Ciencia, Docencia y Tecnología**, Concepción del Uruguay, v. 15, p. 151-177, 2004.

RUSSEL, S.; NORVIG, P. **Inteligência artificial**. São Paulo: Elsevier, 2013.

SAKIEWICZ, P. *et al*. Innovative artificial neural network approach for integrated biogas wastewater treatment system modelling: Effect of plant operating parameters on process intensification. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, [s.l.], v. 124, 2020.

SALA, M. **Mineração de dados e análise de multicritérios aplicados no reconhecimento e mapeamento das veredas no Parque Estadual Veredas do Peruaçu (MG)**. 2009. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, 2009.

SÃO PAULO (Estado). Companhia de Saneamento Básico do Estado de São Paulo. **Relatório de sustentabilidade**. São Paulo: SABESP, 2022.

SCHILLING, G. E. M.; JAYME, R. S.; CARDOSO, V. L. Estudo comparativo entre os sistemas aeróbio e anaeróbio no tratamento de esgoto das ETE´s Belém e Padilha Sul no

município de Curitiba-PR. **Revista Eletrônica Multidisciplinar FACEAR**, Curitiba, v. 2, n. 3, 2014.

SCHOENINGER, E. R. *et al*. Uso de redes neurais artificiais como uma alternativa para mapeamento de biomassa e carbono orgânico no componente arbóreo de florestas naturais. **Ambiência**, [s.l.], v. 4, 2008.

SEWERIN. **Multitec BioControl system**: BioControl 2. [S.l.], 2018. Disponível em: https://www.sewerin.com/cms/fileadmin/redakteure/Prospekte/pro_biocontrol_2_en.pdf. Acesso em: 20 abr. 2018.

SILVA, I. N. D.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. **Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas**: curso prático. São Paulo: Artliber, 2010.

SILVEIRA FILHO, A. S. L. *et al*. Dimensionamento de um reator UASB para tratamento de efluentes domésticos e recuperação do biogás para produção energética: um estudo de caso em Pouso Alegre (MG). **Revista Brasileira de Energias Renováveis**, [s.l.], v. 7, 2018.

SIMÕES, M. G.; SHAW, I. S. **Controle e modelagem fuzzy**. 2. ed. São Paulo: Blucher, 2011.

SOUZA, H. A. D. **Treinamento de redes neurais com arquitetura multilayer perceptron em FPGA**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2019.

SPERLING, M. V. **Urban wastewater treatment in Brazil**. [S.l.]: Inter-American Development Bank, 2016.

TOLMASQUIM, M. T. **Fontes renováveis de energia no Brasil**. Rio de Janeiro: Interciência, 2003.

VINDIS, P. *et al*. The impact of mesophilic and thermophilic anaerobic digestion on biogas production. **Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering**, [s.l.], v. 36, n. 2, p. 192-198, 2009.

WAEWSAK, C.; NOPHARATANA, A.; CHAIPRASERT, P. Neural-fuzzy control system application for monitoring process response and control of anaerobic hybrid reactor in wastewater treatment and biogas production. **Journal of Environmental Sciences**, [s.l.], v. 22, n. 12, p. 1883-1890, 2010.

WAN, J. *et al*. Prediction of effluent quality of a paper mill wastewater treatment using an adaptive network-based fuzzy inference system. **Applied Soft Computing**, [s.l.], v. 11, n. 3, p. 3238-3246, 2011.

WELLINGER, A.; MURPHY, J.; BAXTER, D. **The biogas handbook**: science, production and applications. 52. ed. Philadelphia: Elsevier Science, 2013.