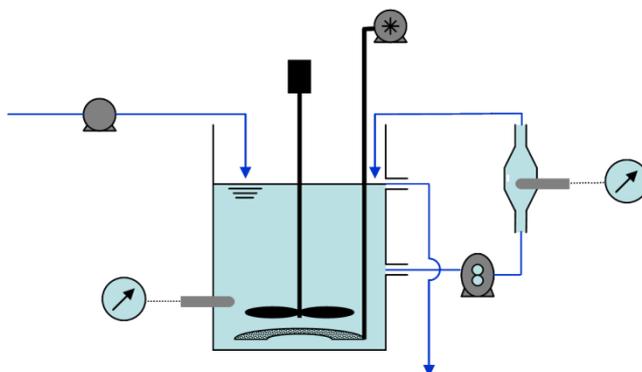




INSTITUTO SUPERIOR TÉCNICO
Universidade Técnica de Lisboa



Automação de um Sistema de Respirometria

Gonçalo André Furtado Ramos de Deus

Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em
Engenharia Electrotécnica e de Computadores

Júri

Presidente: Prof. Carlos Filipe Gomes Bispo
Orientador: Prof. Paulo Jorge Coelho Ramalho Oliveira
Co-orientador: Prof^a Filipa Maria Santos Ferreira
Vogais: Prof^a Helena Maria Rodrigues Vasconcelos Pinheiro
Prof. João Rogério Caldas Pinto

Abril de 2012

Agradecimentos

“My old grandmother always used to say, Summer friends will melt away like summer snows, but Winter friends are friends forever.”

GEORGE R.R. MARTIN

Gostaria de deixar registado o meu mais sincero agradecimento a todos aqueles que directa ou indirectamente contribuíram para a realização desta dissertação, nomeadamente:

Ao meu orientador, Professor Paulo Oliveira, por todo o seu apoio e ensinamentos, indicando sempre a direcção a ser tomada nos momentos de maior dificuldade.

À Professora Filipa Ferreira, por todo o material técnico que facultou. Agradeço a dedicação e paciência que sempre revelou, disponibilizando-se constantemente para ajudar.

À Professora Helena Pinheiro, muito obrigado pela partilha de conhecimentos essenciais na execução desta dissertação e por todo o apoio, amizade e presença nas alturas mais importantes.

Agradeço ainda, aos professores, a análise rigorosa de cada capítulo, as sugestões, os esclarecimentos e os comentários sempre oportunos e que espero ter sabido aproveitar.

Ao Eng. Manuel Rufino, por todos os conselhos e ensinamentos que se revelaram decisivos no projecto da caixa de comando.

À excelente comunidade de suporte presente nos fóruns da National Instruments, que esclareceu todas as minhas dúvidas e cujas dicas foram cruciais para a conclusão desta tese.

À minha colega Tiba, pela paciência e apoio dedicado na fase inicial desta dissertação.

Aos meus amigos e colegas do IST, pois esta dissertação tem um pouco de todos eles.

Aos meus pais, por todo o seu incessante apoio, incentivo e pela paciência que sempre tiveram comigo, sobretudo naquelas alturas mais difíceis. Um Muito Obrigado!

“O conhecimento é finito, o desconhecido infinito; intelectualmente, estamos numa ilha no meio de um oceano ilimitado de inexplicabilidade. O nosso dever em cada geração é recuperar um pouco mais de terra.”

T. H. HUXLEY

“The best model of a cat is another (cat) or, better, the cat itself.”

N. WIENER

“We never know the worth of water till the well is dry.”

T. FULLER

Resumo

A modelação dinâmica do comportamento das estações de tratamento de águas residuais (ETAR), como instrumento de análise do seu desempenho e/ou de controlo operacional, compreende a especificação de grande número de componentes e interacções. No caso de ETAR por biomassa suspensa, são frequentemente aplicados os modelos matriciais de lamas activadas da IWA (*International Water Association*), designados por *Activated Sludge Models* (modelos ASM), que incluem uma abordagem baseada no fraccionamento da matéria orgânica afluente, atendendo à biodegradabilidade, passível de ser quantificada por testes de respirometria. Os testes de respirometria permitem a obtenção de respirogramas com medidas da quantidade de oxigénio consumido por unidade de tempo e de volume do reactor biológico (denominada taxa volumétrica de consumo de oxigénio ou taxa de respiração). Adicionalmente, estes testes permitem determinar as constantes de crescimento e de decaimento para as fracções heterotrófica e autotrófica da biomassa, bem como o valor da constante de hidrólise de substrato particulado, possibilitando a calibração dos modelos ASM.

No âmbito da presente dissertação procedeu-se ao desenvolvimento, implementação e automação de um sistema de respirometria na variante LSS (*Liquid-phase principle: Static gas, Static liquid*), mais conhecida como “respirometria fechada”. O sistema de respirometria automatizado foi desenvolvido de raiz em ambiente laboratorial, com o intuito de obter leituras em tempo real e traçar curvas respirométricas para diferentes águas residuais e com biomassas de origens diversas. O sistema é constituído essencialmente por um tanque de arejamento e agitação, onde é introduzida a amostra, e uma célula de medida separada, onde são realizadas as leituras de oxigénio dissolvido. Os actuadores do sistema encontram-se ligados a um autómato controlado por *software* implementado em ambiente LabVIEW. Em simultâneo, o mesmo *software* disponibilizará ao utilizador as leituras obtidas e estimará a taxa de respiração por diferentes métodos, entre os quais se destaca a filtragem de Kalman. No final da actividade experimental será criado um ficheiro Excel *standard* com o registo de todos os dados adquiridos.

Palavras chave

Respirometria; Lamas Activadas; Modelos ASM; Oxigénio Dissolvido; Instrumentação e Automação; Monitorização; Estimação; Filtro de Kalman; Identificação.

Abstract

Dynamic modelling of the behaviour of wastewater treatment plants (WWTP) is used as a means to analyse its performance and/or operational control, and it features the specs of a great number of components and interactions. Regarding WWTP per suspended biomass, IWA (International Water Association) Activated Sludge Models (ASM) are frequently applied, that include an approach based on the fractioning of floating organic matter that, according to biodegradation, can be quantified by respirometry tests. By using these tests, respirograms measuring the quantity of oxygen consumed per time unit and biological reactor volume (called volumetric oxygen consumption rate or respiration rate) can be obtained. Furthermore, these tests can determine the growth and decay constants for the heterotrophic and autotrophic biomass fractions, as well as the particle substrate hydrolysis constant value, allowing the calibration of ASM models.

Regarding the current project, a respirometry system based on the LSS variant (Liquid-phase principle: Static gas, Static liquid) was developed, implemented and automated, more commonly known as “closed respirometry”. The automated respirometry system was developed from scratch in a laboratory environment, with the aim of obtaining real time data reads and to draw respirometric curves for different types of residual water and biomass from different origins. The system is essentially composed of an airtight and mixing tank, where the sample is introduced, and a separate measurement cell where the dissolved oxygen readings take place. The system’s actuators are connected to a software managed controller (programmable logic controller – PLC), implemented in LabVIEW environment. The same software will give the user all the obtained readings and will estimate the respiration rate using different methods, the most notable being the Kalman filter. After the experiment is over, a standard Excel file is created, registering all the acquired data.

Keywords

Respirometry; Activated Sludge; ASM Models; Dissolved Oxygen; Instrumentation and Automation; Monitoring; Estimation; Kalman Filter; Identification.

Índice

1.	Introdução	1
1.1.	Motivação e justificação	2
1.2.	Organização da dissertação	4

2.	Lamas activadas e respirometria	5
2.1.	Uma estação de tratamento	6
2.2.	Tratamento aeróbio – Lamas activadas	7
2.3.	Respirometria	8
2.3.1.	Respirómetro	9
2.3.2.	Modelo	10
2.4.	Modelo ASM1	12
2.4.1.	Variáveis, coeficientes e parâmetros	12
2.4.2.	Equações diferenciais	15
2.4.3.	Restrições do modelo	17
2.4.4.	Valores típicos dos coeficientes e parâmetros	17

3.	Sistema respirométrico	19
3.1.	Parte operativa	20
3.1.1.	Sensores	21
3.1.1.1.	Sensor de pH	22
3.1.1.2.	Sensor de OD	23
3.1.1.2.1.	Características do sensor	23
3.1.1.2.2.	Dinâmica do sensor	23
3.1.2.	Equações de balanço mássico	25
3.2.	Parte de comando	25
3.3.	Esquema integral	28

4.	Procedimento respirométrico – <i>Software</i>	31
4.1.	Apresentação	32
4.1.	Modo de operação manual	33
4.2.	Modo de operação automático	34

5.	Estratégias de cálculo da taxa de respiração	39
5.1.	Declive do sinal medido	40
5.2.	Filtragem de Kalman	41
5.2.1.	Introdução	41
5.2.2.	Formulação do problema respirométrico	43
5.2.3.	Parâmetros do filtro e afinação	45
5.2.4.	Resultados obtidos – exemplo	46
5.3.	Filtro suavizador de atraso	47
5.3.1.	Introdução	47
5.3.2.	Identificação do modelo do sensor de OD	49
5.3.3.	Cálculo do filtro	50

6.	Estimativas de coeficientes e parâmetros do ASM1	55
6.1.	Aspectos práticos	56
6.2.	Rendimento celular da biomassa heterotrófica	58
6.3.	Fracção da biomassa que origina produtos particulados	61
6.4.	Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica	61
6.5.	Taxa máxima específica do crescimento da biomassa heterotrófica	62
6.6.	Coefficiente de meia-saturação para a biomassa heterotrófica	63

7.	Análise e discussão de resultados	65
7.1.	Estratégias de cálculo da taxa de respiração	66
7.2.	Estimativas do ASM1 determinadas	67

8.	Conclusão	69
8.1.	Trabalho realizado	70
8.2.	Trabalho futuro	71

Referências		73
-------------	--	----

Lista de Figuras

1.1	População servida por sistemas de tratamento de águas residuais	3
<hr/>		
2.1	Esquema típico de uma estação de tratamento de águas residuais (ETAR)	6
2.2	Relação entre a respiração, consumo de substrato e crescimento de biomassa	8
2.3	Esquema da respiração aeróbia praticada por biomassa heterotrófica	8
2.4	Modelo morte-regeneração de matéria carbonácea	11
2.5	Modelo morte-regeneração dos compostos de azoto	11
2.6	Esquemático das interações que ocorrem entre as diversas variáveis	15
<hr/>		
3.1	Esquema simplificado do sistema de respirometria	20
3.2	Sistema de respirometria construído	21
3.3	Sensor de pH (a) e sensor de OD (b)	22
3.4	Exemplo de falhas de medição por parte do sensor de OD	22
3.5	Sistema de primeira ordem	23
3.6	Ensaio realizado para estimação da constante de tempo do sensor de OD	24
3.7	Visualização do exterior da caixa de comando	26
3.8	Interior da caixa de comando	27
3.9	Módulo I/O do PLC	27
3.10	Linha de código LADDER referente ao compressor	28
3.11	Esquema integral das ligações do sistema respirométrico	29
<hr/>		
4.1	Interface gráfica inicial apresentada ao operador	33
4.2	Interface gráfica apresentada ao operador no modo manual	34
4.3	Interface gráfica apresentada ao operador no modo automático	35
4.4	Interface gráfica do programa, em execução automática, apresentada ao operador	37
<hr/>		
5.1	Leituras de OD adquiridas pelo sensor (verde) e sinal filtrado (azul)	41
5.2	Sinal do sensor de OD e estimativas obtidas por filtragem de Kalman	46
5.3	Diagrama de blocos do modelo de entrada, do sensor de OD e do filtro a calcular	48
5.4	Experiência para identificação da dinâmica do sensor	49
5.5	Relação entre a exactidão do modelo e o grau dos polinómios	50
5.6	Filtragem do sinal do sensor de OD pelo filtro calculado (a) com ampliação de uma secção em (b) de modo a facilitar a visualização dos resultados	52
<hr/>		
6.1	ETAR de Beirolas	57
6.2	Nesta situação é bem visível a maior concentração de biomassa na célula de medida (A) face ao tanque de arejamento (B)	58
6.3	Respirogramas dos ensaios realizados com o objectivo de calcular o parâmetro Y_H	60
6.4	Relação linear entre o oxigénio consumido e o substrato adicionado	60
6.5	Logaritmo natural das estimativas de r_0 obtidas durante um período de 7 dias	62
6.6	Logaritmo natural das estimativas de r_0 obtidas para determinar $\hat{\mu}_H$	63
6.7	Relação entre a taxa específica de crescimento relativa ($\mu_H/\hat{\mu}_H$) e a concentração de substrato	64
<hr/>		

7.1	Medidas de OD adquiridas durante a fase endógena
-----	--

66

Lista de Tabelas

1.1	Volume de águas residuais tratadas em Portugal	3
<hr/>		
2.1	Vantagens e desvantagens dos diferentes tipos de respirómetros	10
2.2	Variáveis de estado consideradas e respectivos processos contidos no ASM1	13
2.3	Coefficientes estequiométricos incluídos no ASM1	13
2.4	Parâmetros cinéticos abrangidos pelo ASM1	14
2.5	Valores característicos para os parâmetros cinéticos e coeficientes estequiométricos incluídos no modelo ASM1, para as águas residuais domésticas a pH neutro	18
<hr/>		
3.1	Endereços de saída e <i>bits</i> de memória usados no programa PL7 implementado	28
<hr/>		
5.1	Taxas de respiração calculadas referentes às amostragens da Figura 5.1	40
5.2	Taxas de respiração estimadas referentes às amostragens ilustradas na Figura 5.2	47
5.3	Valor das taxas de respiração estimadas, a partir do declive do sinal, para o sinal com e sem filtragem do filtro calculado	53
<hr/>		
6.1	Dados da experiência realizada para o cálculo do Y_H	59
6.2	Dados da experiência realizada para o cálculo do K_S	64
<hr/>		
7.1	Dados relativos às experiências realizadas e valores típicos do AMS1	68

Nomenclatura

Símbolos

b_A	Taxa de decaimento da biomassa autotrófica
b_H	Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica
b'_H	Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica na notação tradicional
C	Carbono
f_p	Fracção da biomassa que origina produtos particulados
f'_p	Fracção da biomassa inerte
H	Hidrogénio
i_{XB}	Massa de azoto/massa de carência química de oxigénio na biomassa
i_{XP}	Massa de azoto/massa de carência química de oxigénio nos produtos da biomassa
k_a	Taxa específica de amonificação
k_h	Taxa máxima específica de hidrólise
K_{La}	Coefficiente global volumétrico de transferência de massa de oxigénio
K_{OA}	Coefficiente de meia-saturação em oxigénio para a biomassa autotrófica
K_{OH}	Coefficiente de meia-saturação em oxigénio para a biomassa heterotrófica
K_{NO}	Coefficiente de meia-saturação em azoto para a biomassa heterotrófica
K_{NH}	Coefficiente de meia-saturação em azoto amoniacal para a biomassa autotrófica
K_S	Coefficiente de meia-saturação para a biomassa heterotrófica
K_X	Coefficiente de meia-saturação para a hidrólise de substrato lentamente biodegradável
N	Azoto
O	Oxigénio
r_o	Taxa de respiração
$r_{o_{end}}$	Taxa de respiração endógena
$r_{o_{ex}}$	Taxa de respiração exógena
S	Concentração de matéria solúvel
S_{ND}	Azoto orgânico solúvel biodegradável
S_{NH}	Azoto sob a forma de NH_4^+ (ião amónio) e NH_3 (amónia)
S_{NO}	Azoto sob a forma de nitritos e nitratos
S_O	Oxigénio dissolvido
S_O^*	Concentração de saturação de oxigénio dissolvido
S_O^s	Medidas de oxigénio dissolvido provenientes do sensor
S_S	Substrato solúvel rapidamente biodegradável
X	Matéria particulada
X_A	Biomassa autotrófica
X_H	Biomassa heterotrófica
X_{H_0}	Biomassa heterotrófica inicial
X_{ND}	Azoto orgânico particulado biodegradável
X_S	Substrato lentamente biodegradável
Y_A	Rendimento celular da biomassa autotrófica
Y_H	Rendimento celular da biomassa heterotrófica
η_g	Factor de correcção do crescimento anóxico da biomassa heterotrófica
η_h	Factor de correcção da hidrólise em condições anóxicas
μ_A	Taxa específica do crescimento da biomassa autotrófica
$\hat{\mu}_A$	Taxa máxima específica do crescimento da biomassa autotrófica
μ_H	Taxa específica do crescimento da biomassa heterotrófica
$\hat{\mu}_H$	Taxa máxima específica do crescimento da biomassa heterotrófica

σ^2	Variância
τ	Constante de tempo
Δt	Intervalo de amostragem
q^{-1}	Operador de atraso
Z	Letra maiúscula a negrito \Rightarrow matiz
z	Letra minúscula a negrito \Rightarrow vector
\dot{z}	Notação de Newton \Rightarrow derivada temporal de primeira ordem

Abreviaturas, siglas e acrónimos

AC	<i>Alternating Current</i>
AdP	Águas de Portugal
AIC	<i>Akaike's Information Criterion</i>
ARX	Modelo autorregressivo com entradas externas (<i>AutoRegressive model with exogenous inputs</i>)
ASM1	<i>Activated Sludge Model Number 1</i>
ASM2	<i>Activated Sludge Model Number 2</i>
ASM2d	<i>Activated Sludge Model Number 2 extension</i>
ASM3	<i>Activated Sludge Model Number 3</i>
ATP	Adenosina Trifosfato
ATU	Alitioureia
CQO	Carência Química de Oxigénio
DC	<i>Direct Current</i>
DO	<i>Dissolved Oxygen</i> (Oxigénio Dissolvido)
ETAR	Estação de Tratamento de Águas Residuais
IAWPRC	<i>International Association on Water Pollution Research and Control</i>
IAWQ	<i>International Association on Water Quality</i>
IIR	Filtro digital com resposta ao impulso de duração infinita (<i>infite impulse response</i>)
INSAAR	Inventário Nacional de Sistemas de Abastecimento de Água e de Águas Residuais
IWA	<i>International Water Association</i>
I/O	Entradas (<i>input</i>) e saídas (<i>output</i>)
LFS	Respirómetro de medição de oxigénio na fase líquida com fluxo de gás e líquido estático
LQE	Estimador quadrático linear (<i>linear quadratic estimation</i>)
LSF	Respirómetro de medição de oxigénio na fase líquida com fluxo de líquido e gás estático
LSS	Respirómetro de medição de oxigénio na fase líquida com gás e líquido estático
MDL	<i>Minimum Description Length</i>
MLVSS	Sólidos suspensos fluídos (<i>Mixed liquor volatile suspended solids</i>)
OC	Oxigénio Consumido
OD	Oxigénio Dissolvido
PEAASAR	Plano Estratégico de Abastecimento de Água e de Saneamento de Águas Residuais
pH	Potencial Hidrogeniónico
PLC	<i>Programmable Logic Controller</i>
PRAA	Plano Regional da Água dos Açores
PRAM	Plano Regional da Água da Madeira
RS	<i>Recommended Standard</i>
ZOH	Retentor de amostras de ordem zero (<i>zero-order hold</i>)

1

Introdução

Conteúdo

1.1. Motivação e justificação

2

1.2. Organização da dissertação

4

1.1. Motivação e justificação

No mundo, tal como o conhecemos, jamais houve algo tão único e precioso como a água. Qualquer forma de vida conhecida – animais, plantas, microrganismos – é composta essencialmente por água. Esta simples substância cobre mais de 70% da superfície terrestre, mas só uma reduzida parte se encontra em devidas condições para consumo e utilização em aplicações agrícolas (aproximadamente 0,5% da água mundial). Esta pequena fracção tem diminuído drasticamente devido ao excessivo uso e poluição gerada por parte dos aglomerados urbanos, agrícolas e industriais. Nos nossos dias, cada vez mais aparece na primeira linha das preocupações de uma economia mundial globalizada a sustentação da vida com a necessária preservação dos recursos naturais essenciais. Assim, há que assegurar a continuidade dos ciclos naturais da água e limitar o impacto humano, com o intuito de evitar calamidades futuras.

Fundamental para isso é o tratamento adequado das águas residuais, podendo-se ainda devolver ao solo, em determinadas circunstâncias, os nutrientes presentes nas lamas geradas durante o procedimento. Devido às directivas aplicadas pela Comunidade Europeia, o tratamento de águas residuais tem sido introduzido em larga escala nas últimas décadas. Dados dos anos 90 apontam para o tratamento diário de $40 \times 10^6 \text{ m}^3$ de água na Europa Ocidental, sendo considerado, presentemente, como o maior processo industrial em termos de matéria-prima tratada e com clara tendência de crescimento [39].

Em Portugal, antes de 1993, o serviço de abastecimento público de água e saneamento de águas residuais era bastante deficiente e apresentava dificuldades em responder aos novos desafios impostos pela União Europeia. Actualmente, Portugal possui serviços de abastecimento de água, de drenagem e tratamento de águas residuais em geral modernos, fiáveis e com garantia de qualidade de serviço aceitável. Segundo o INSAAR [44], em 2009, a taxa de cobertura nacional para o serviço de tratamento de águas residuais era de 72%. A Figura 1.1 apresenta os índices de tratamento para os três anos anteriores e as respectivas metas traçadas por diversos planos nacionais, que não seriam atingidas dentro do prazo estipulado. Por outro lado, na Tabela 1.1 estão indicados os valores, em milhões de m^3 , de águas residuais tratadas, conforme os números disponibilizados pelo grupo AdP [43].

Na etapa de tratamento de águas residuais, por biomassa suspensa, a respirometria surge como uma variável robusta de caracterização, monitorização e controlo. Actualmente, a técnica respirométrica é empregada com regularidade, especialmente como instrumento de auxílio à implementação de diferentes modelos, relativos aos processos bioquímicos em ocorrência no tratamento de águas residuais, e de métodos de controlo dos mesmos. No entanto, existem diversas categorias de respirómetros (de medida de oxigénio na fase líquida ou gasosa e com ou sem transferência de matéria) e metodologias para o cálculo dos valores pretendidos.

Assim, pretende-se desenvolver nesta dissertação um sistema de automação que permita a caracterização robusta de uma série de variáveis relevantes no processo respirométrico e identificar parâmetros dos sistemas dinâmicos que descrevem a evolução dos compostos intervenientes. Pretende recorrer-se a técnicas lineares óptimas de estimação (filtragem de Kalman) e outros métodos, para estimação das variáveis de estado, onde se funde a informação dos sensores disponíveis. A implementação das estratégias sintetizadas será validada no ambiente LabVIEW e recorrendo a PLCs da Schneider Electric.

No que se refere ao sistema construído e às estratégias de cálculo aplicadas, constatarem-se apenas semelhanças pontuais em comparação com outros projectos desenvolvidos e foram seguidas sugestões e técnicas recomendadas, cujas referências literárias serão enunciadas ao longo deste documento.

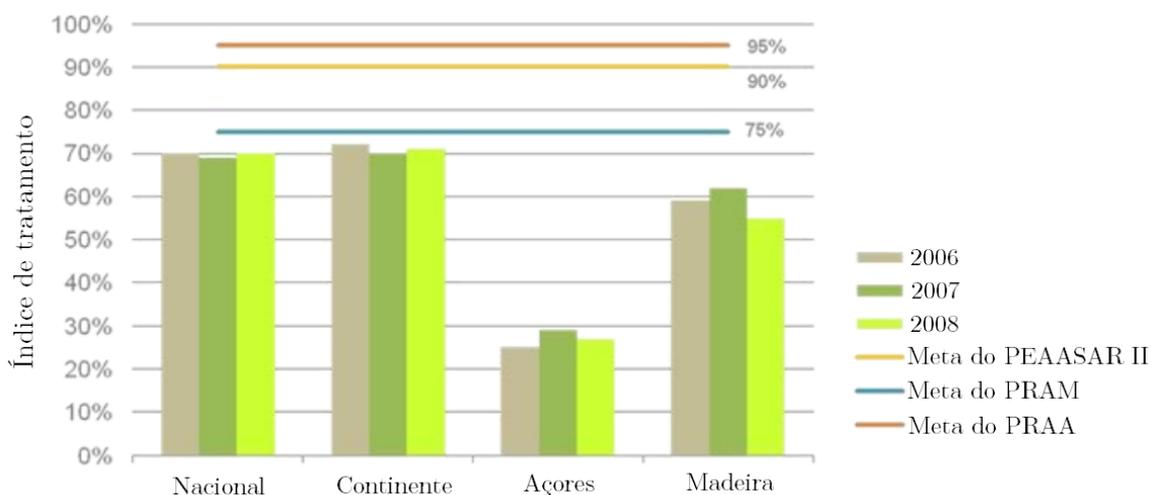


Figura 1.1: População servida por sistemas de tratamento de águas residuais [44].

Tabela 1.1: Volume de águas residuais tratadas em Portugal.

Ano	2006	2007	2008	2009	2010
Volume [10^6 m^3]	310,1	312,9	357,0	392,8	500,2

1.2. Organização da dissertação

Os capítulos seguintes, que incorporam esta dissertação, estão organizados conforme a seguinte estrutura:

- ⇒ Capítulo 2: Introduz o conceito de lamas activadas e o processo respirométrico, referindo em que consiste esta técnica, os meios de medição e os modelos formulados, dando especial atenção ao modelo adoptado neste trabalho.
- ⇒ Capítulo 3: Descreve o sistema respirométrico construído, diferenciando a parte de comando e a parte de operação e evidenciando, os sensores utilizados, em especial o de oxigénio dissolvido. Expõe as equações diferenciais de balanço mássico que modelam o processo.
- ⇒ Capítulo 4: Apresenta a estrutura e as etapas do *software* criado em ambiente LabVIEW para monitorização do processo respirométrico.
- ⇒ Capítulo 5: Descreve as estratégias desenvolvidas para estimação da taxa de respiração, apresentando alguns resultados exemplificativos.
- ⇒ Capítulo 6: Apresenta os métodos de estimação de alguns dos parâmetros do modelo matemático respirométrico e os resultados respectivos.
- ⇒ Capítulo 7: Analisa e avalia os resultados obtidos através das diferentes estratégias de cálculo da taxa de respiração. Discute o valor das estimativas obtidas no capítulo precedente.
- ⇒ Capítulo 8: Apresenta as conclusões a respeito dos resultados alcançados, bem como as perspectivas de trabalho futuro.

2

Lamas activadas e respirometria

Conteúdo

2.1. Uma estação de tratamento	6
2.2. Tratamento aeróbio – Lamas activadas	7
2.3. Respirometria	8
2.3.1. Respirómetro	9
2.3.2. Modelo	10
2.4. Modelo ASM1	12
2.4.1. Variáveis, coeficientes e parâmetros	12
2.4.2. Equações diferenciais	15
2.4.3. Restrições do modelo	17
2.4.4. Valores típicos dos coeficientes e parâmetros	17

2.1. Uma estação de tratamento

Numa estação de tratamento de águas residuais (ETAR) moderna o processo é geralmente executado em diversas fases até a água tratada ser descarregada. Na Figura 2.1 pode observar-se o esquema típico de uma ETAR, onde os blocos representam as diferentes fases do procedimento [19].

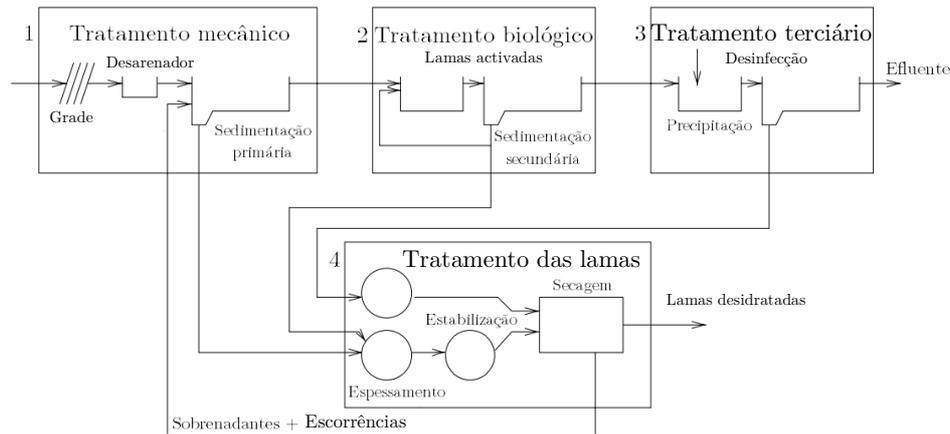


Figura 2.1: Esquema típico de uma estação de tratamento de águas residuais (adaptado de [19]).

Em primeiro lugar, a água é submetida a processos físicos. Aqui são removidos objectos de maiores dimensões na gradagem e as partículas de maior densidade no desarenador. Estes detritos são normalmente conduzidos a aterros sanitários. Por seu lado, a sedimentação primária promove a remoção de sólidos dissolvidos. Esta fase pode ainda incluir uma etapa prévia de homogeneização que permite equalizar o afluente, do ponto de vista quantitativo e qualitativo, e aumentar a eficiência dos diversos tratamentos exercidos.

O segundo bloco trata-se usualmente de um processo biológico, em que microrganismos transformam a matéria orgânica presente nos afluentes em materiais inorgânicos e biológicos sedimentáveis. Existem diversos processos, no entanto, o método de lamas activadas¹ (tratamento aeróbio) distingue-se como o mais praticado em estações de maiores dimensões. Considerando a configuração básica, este método é constituído por um tanque de arejamento (reactor biológico), um tanque de sedimentação (decantador) e uma estação elevatória destinada a recirculação das lamas. No reactor biológico os microrganismos desenvolvem-se lentamente. De maneira a manter o seu número populacional, as lamas do decantador secundário são devolvidas ao tanque de arejamento, enquanto o excesso é removido (purga das lamas). O âmbito desta tese foca-se somente nesta fase do processo, pelo que será apresentada informação adicional na secção seguinte.

¹ Termo directamente traduzido do inglês *activated sludge*. Esta denominação foi atribuída por dois engenheiros britânicos: Edward Ardern e William Lockett em 1913 [42].

Durante o tratamento químico (etapa 3 da Figura 2.1) podem ser elaborados uma série de processos destinados a melhorar a qualidade dos efluentes provenientes dos tratamentos anteriores, tais como a eliminação de sólidos em suspensão, carga orgânica residual, micropoluentes, sais minerais, metais tóxicos ou nutrientes como o nitrogénio e o fósforo. Todavia, para estes últimos, pode ser aplicada uma configuração de tratamento de carácter biológico, sem que haja necessidade de recorrer a químicos, em simultaneidade com o tratamento supracitado (etapa 2) [19][36]. Por último, a água é usualmente submetida à desinfecção, em regra por radiação ultravioleta, antes do seu lançamento no meio receptor.

As lamas resultantes dos processos anteriores são encaminhadas e processadas no quarto bloco. As lamas podem ser tratadas em digestores anaeróbios onde são reduzidos os odores, as bactérias patogénicas e os microrganismos remanescentes. Concluída esta etapa, o material é seco, visto que é constituído por cerca de 95% de água e, consoante as suas características, utilizado como fertilizante ou condicionador de solo. Durante a digestão de lamas, há a possibilidade de produção de energia (térmica e/ou eléctrica) [4][19].

2.2. Tratamento aeróbio – Lamas activadas

Tal como já foi mencionado, as lamas activadas são um processo biológico que faz uso essencialmente de microrganismos aeróbios, na presença de oxigénio, para oxigenar e mineralizar a matéria orgânica realizando duas actividades metabólicas básicas: produção de energia e síntese de material celular libertando no meio dióxido de carbono (CO_2), água (H_2O) e outros produtos metabólicos, dependendo da reacção. O processo é controlado pela quantidade de oxigénio injectada no tanque de arejamento e pela recirculação de lamas, de forma a manter um equilíbrio entre biomassa e matéria orgânica disponível.

Ao longo do processo é fundamental que o afluente a tratar não possua outros componentes que prejudiquem a actividade dos microrganismos, nomeadamente compostos tóxicos. Da mesma forma, os níveis de concentração de oxigénio dissolvido (OD), pH, temperatura, pressão barométrica, nutrientes e velocidade da água são essenciais para o perfeito funcionamento do processo, de modo a que os padrões do efluente sejam conseguidos enquanto se mantém a produção de lamas e a energia consumida no menor nível possível. Um problema inerente a este procedimento encontra-se na componente altamente dinâmica do mesmo. Para lidar com esta situação a implementação de técnicas de controlo tem ganho cada vez maior importância e, neste contexto, é crucial que diferentes variáveis do processo sejam adquiridas em tempo real. A taxa de respiração trata-se da variável que tem gerado grande interesse para aplicação no controlo do processo de lamas activadas, dado que o consumo de oxigénio está directamente associado com o crescimento de biomassa e a remoção de substrato (Figura 2.2).

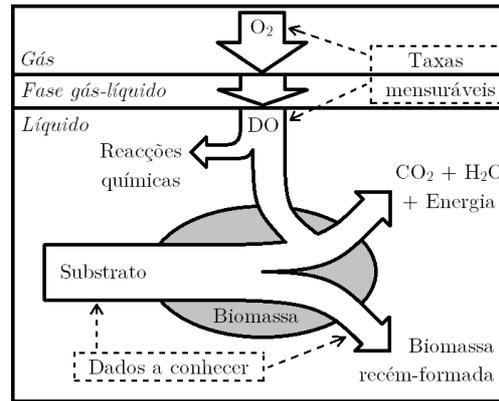


Figura 2.2: Relação entre a respiração, consumo de substrato e crescimento de biomassa (adaptado de [34]).

2.3. Respirometria

A respirometria consiste numa técnica que permite medir e interpretar a taxa de consumo biológico de oxigénio, sob condições experimentais bem definidas, indicando alterações metabólicas mediante o contacto com poluentes diversos. Biologicamente falando, trata-se de um processo de formação metabólica de ATP (molécula acumuladora de energia), em que compostos orgânicos ou inorgânicos actuam como dadores de electrões e, em contrapartida, no caso da respiração aeróbia, o oxigénio comporta-se como o aceitador final de electrões. Encontra-se esquematicamente retratado na Figura 2.3 o processo de respiração aeróbia da biomassa heterotrófica. A percentagem do substrato consumido, constituído por matéria carbonácea, que é reorganizado em nova matéria celular designa-se por rendimento biomassa/substrato (Y_H). O restante substrato ($1 - Y_H$) é transformado em energia e outros elementos químicos. Tipicamente cerca de metade do substrato (em termos de massa) é convertido em nova biomassa [34].

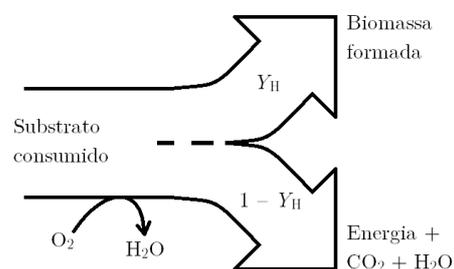


Figura 2.3: Esquema da respiração aeróbia praticada por biomassa heterotrófica (adaptado de [38]).

Contudo, este não é o único processo de consumo de oxigénio a decorrer, tal como ilustrado na Figura 2.2, sendo a oxidação de compostos inorgânicos, por bactérias nitrificantes autotróficas, um outro processo importante, para além de outras reacções químicas. Todos eles contribuem para a taxa de respiração total da biomassa, mas a respirometria é usualmente destinada a analisar apenas o consumo biológico do oxigénio e, por vezes, tentando fazer a distinção entre processos biológicos diferentes, como a remoção heterotrófica de substrato e a nitrificação. Ambos os processos são revistos em maior detalhe na Secção 2.3.2..

A técnica respirométrica implica, em alguns casos, que a biomassa seja privada de alimentação de nova matéria biodegradável contida nos afluentes. Nesta situação, a taxa de respiração (r_0) irá diminuir gradualmente até que toda a biomassa fique inactiva. Durante esta fase, a taxa de respiração é referida como taxa de respiração endógena. Esta taxa é praticamente independente da concentração do substrato e é por isso indicativa da concentração de biomassa activa presente na mistura.

2.3.1. Respirómetro

A respirometria é avaliada através de um aparelho designado como respirómetro. Todos estes aparelhos têm como base uma técnica de medida da taxa a que a biomassa consome o OD presente no líquido. Hoje em dia, o respirómetro representa uma das principais ferramentas para optimização de processos biológicos e avaliação da tratabilidade de efluentes orgânicos. A informação obtida, em tempo real, das características do afluente permite reduzir gastos de energia eléctrica com o arejamento e identificar, com antecedência, possíveis reduções de desempenho no processo, podendo associá-los a afluências tóxicas. Algumas das suas vantagens são listadas de seguida:

- ⇒ Identificar o grau de toxicidade de poluentes no processo de tratamento biológico;
- ⇒ Avaliar a biodegradabilidade do afluente;
- ⇒ Quantificar a população de bactérias heterotróficas e nitrificantes;
- ⇒ Medir a taxa de nitrificação;
- ⇒ Proporcionar a optimização do processo de arejamento, com redução dos respectivos custos;
- ⇒ Determinar, experimentalmente, o valor das constantes de crescimento e de decaimento da biomassa, entre outros parâmetros necessários à modelação de processos de tratamento por lamas activadas.

Os respirómetros podem ser classificados em oito princípios básicos de medição, de acordo com dois critérios: a fase em que a concentração de oxigénio é medida – gasosa (G) ou líquida (L) – e se há ou não entrada e saída de líquido e gás – com fluxo (F) ou estático (S).

Quando o OD é medido na fase líquida, distinguem-se, essencialmente, os quatro géneros de respirómetro referidos no quadro que se segue (Tabela 2.1). Qualquer uma das técnicas tem os seus méritos, pressupondo que as condições correctas de medição são satisfeitas. Existem dois factores que, dependendo do tipo de respirómetro, são determinantes para o cálculo da taxa de respiração, designadamente o coeficiente volumétrico de transferência de oxigénio ($K_L a$) e a concentração de saturação de OD na fase líquida (S_O^*).

Tabela 2.1: Vantagens e desvantagens dos diferentes tipos de respirómetros [11].

Tipo de respirómetro	Vantagens	Desvantagens
Gás estático – líquido estático (LSS)	Fácil de operar r_O simples de obter	Perigo de limitação extrema de oxigénio Baixa frequência de medição da r_O
Fluxo de gás – líquido estático (LFS)	Alta frequência de medição da r_O	É necessário conhecer o $K_L a$ e a S_O^*
Gás estático – fluxo de líquido (LSF)	Não é necessário conhecer o $K_L a$ e a S_O^*	Baixa frequência de medição da r_O
Híbrido (LFS e LSF)	Não é necessário conhecer o $K_L a$ e a S_O^* Alta frequência de medição da r_O	São necessários dois sensores de OD

2.3.2. Modelo

Um modelo fidedigno é essencial para se conseguir um controlo efectivo do processo, tal como entender os conceitos básicos da respiração. Para a modelação do processo de respiração foi tomada em consideração a hipótese de morte-regeneração formulada por P. Dold em 1980, que é adoptada pela *International Association on Water Quality* (IAWQ) no seu modelo do processo de lamas activadas (ASM1) [23][34], apresentado na Secção 2.4. O modelo contempla o crescimento aeróbio de biomassa heterotrófica e autotrófica, permitindo expressar matematicamente a taxa de respiração em termos de crescimento e decaimento.

No caso dos substratos de carbono, como indicado na Figura 2.4, ocorre o crescimento de biomassa heterotrófica (X_H) mediante a oxidação do substrato rapidamente biodegradável (S_S). Por decaimento a biomassa divide-se em três fracções: matéria inerte (X_P), azoto orgânico particulado (X_{ND}) e substrato particulado lentamente biodegradável (X_S). Finalizando o ciclo, volta-se a obter substrato rapidamente biodegradável pela hidrólise do substrato particulado lentamente biodegradável. Ao longo do processo, a matéria inerte é removida do sistema pela purga das lamas em excesso.

Para os componentes azotados (ver Figura 2.5) o crescimento de biomassa autotrófica (X_A) é gerado a partir do azoto amoniacal (S_{NH}) em condições aeróbias, em conjunto com nitratos e nitritos (S_{NO}). Do decaimento desta matéria obtém-se novamente matéria inerte, substrato

particulado lentamente biodegradável e azoto orgânico particulado. A hidrólise deste último produz azoto orgânico solúvel (S_{ND}) que, por amonificação, se converte em azoto amoniacal, fechando, desta forma, o ciclo morte-regeneração da biomassa nitrificante.

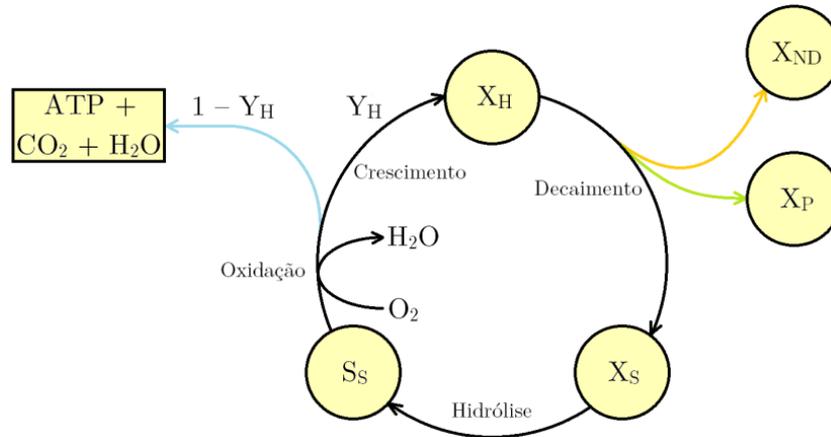


Figura 2.4: Modelo morte-regeneração de matéria carbonácea (baseado em [34]).

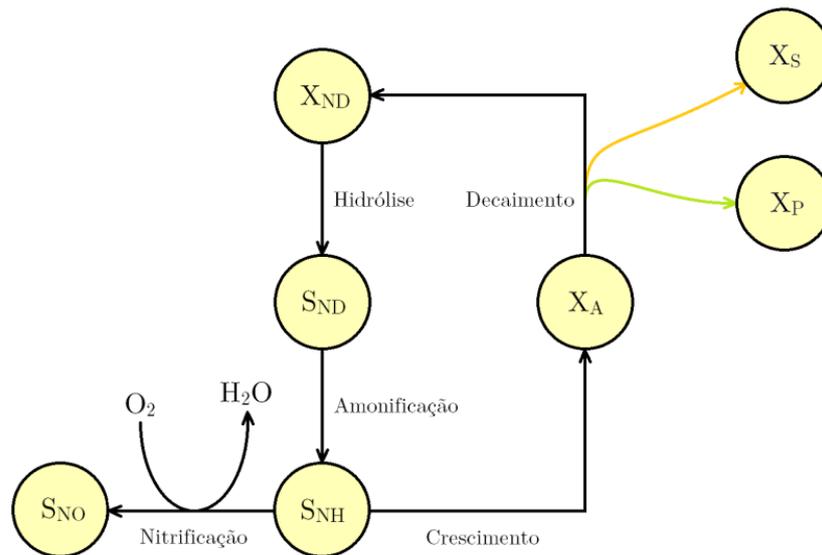


Figura 2.5: Modelo morte-regeneração dos compostos de azoto (baseado em [26]).

Neste encadeamento, apresenta-se a equação (2.1) que expressa a taxa de respiração (r_o), onde μ_H e μ_A simbolizam as taxas específicas de crescimento da biomassa heterotrófica e autotrófica, respectivamente, e Y_A o rendimento celular da biomassa autotrófica.

$$r_o = \frac{1 - Y_H}{Y_H} \cdot \mu_H \cdot X_H + \frac{4,57 - Y_A}{Y_A} \cdot \mu_A \cdot X_A \quad (2.1)$$

Para determinar os valores de μ_H e μ_A utiliza-se, respectivamente, a equação (2.2) e a (2.3). Nestas figuram quatro coeficientes de meia-saturação: heterotrófica para o substrato rapidamente biodegradável (K_S), em oxigénio para a biomassa heterotrófica (K_{OH}), autotrófica

para o azoto amoniacal (K_{NH}) e em oxigénio para a biomassa autotrófica (K_{OA}). Os restantes símbolos traduzem o oxigénio dissolvido disponível na mistura (S_{O}) e as taxas máximas específicas de crescimento da biomassa heterotrófica ($\hat{\mu}_{\text{H}}$) e autotrófica ($\hat{\mu}_{\text{A}}$).

$$\mu_{\text{H}} = \hat{\mu}_{\text{H}} \cdot \frac{S_{\text{S}}}{K_{\text{S}} + S_{\text{S}}} \cdot \frac{S_{\text{O}}}{K_{\text{OH}} + S_{\text{O}}} \quad (2.2)$$

$$\mu_{\text{A}} = \hat{\mu}_{\text{A}} \cdot \frac{S_{\text{NH}}}{K_{\text{NH}} + S_{\text{NH}}} \cdot \frac{S_{\text{O}}}{K_{\text{OA}} + S_{\text{O}}} \quad (2.3)$$

2.4. Modelo ASM1

Em 1983 a *International Association on Water Pollution Research and Control* (IAWPRC, hoje IWA) formou um grupo de trabalho com o intuito de desenvolver e facilitar a aplicação de modelos matemáticos em projectos e para operação de sistemas de tratamento biológico de águas residuais. O resultado final foi apresentado quatro anos mais tarde por Henze *et al.* como o *Activated Sludge Model No. 1*, conforme citado em [14]. No entanto, dado o acréscimo de conhecimentos inerentes ao processo, este tem sido alvo de modificações, desde então, que permitem conhecer os processos a decorrer com maior precisão e alargando horizontes sobre novos procedimentos de tratamento e métodos de observação. Na actualidade, o modelo original é, provavelmente, o mais amplamente utilizado para descrever o processo de tratamento de águas residuais, constituindo um padrão aceite internacionalmente, quando a remoção biológica de fósforo não é relevante. Nesse sentido, surgiram novos modelos matemáticos, nomeadamente, o ASM2, o ASM2d e o ASM3 [3][23], que não serão contemplados no presente documento.

2.4.1. Variáveis, coeficientes e parâmetros

O ASM1 envolve 13 variáveis de caracterização do afluente, modela 8 processos biológicos distintos e reúne 5 coeficientes estequiométricos e 14 parâmetros cinéticos, que descrevem, de forma realista, os vários comportamentos biológicos envolvidos no tratamento por lamas activadas, designadamente, a oxidação carbonácea, a nitrificação e a desnitrificação. As 13 variáveis de estado apresentam-se divididas em 8 componentes solúveis (S) e 5 componentes particuladas (X).

No âmbito do presente trabalho, foram consideradas algumas excepções face às variáveis analisadas no modelo. Deste modo, 4 variáveis são vistas como desnecessárias nesta etapa do estudo. As restantes 9 variáveis estão listadas na Tabela 2.2 e os coeficientes e parâmetros utilizados no modelo matemático, nas Tabela 2.3 e Tabela 2.4, respectivamente.

Na Figura 2.6 está representado um esquema simplificado das interações existentes entre as diferentes variáveis em condições aeróbias e anóxicas, ou seja, em ausência de oxigénio. No esquema a matéria orgânica inerte não se encontra representada, uma vez que não interage com

os restantes componentes. Por seu lado, o OD desempenha um papel fundamental na maioria das reacções envolvidas no processo, porém foi preterido para maior perceptibilidade. No mesmo esquema surgem os quatro processos principais, designadamente:

- ⇒ Crescimento de biomassa heterotrófica e autotrófica;
- ⇒ Decaimento de biomassa heterotrófica e autotrófica;
- ⇒ Amonificação do azoto orgânico;
- ⇒ Hidrólise da matéria orgânica particulada.

Tabela 2.2: Variáveis de estado consideradas e respectivos processos contidos no ASM1.

Variável	Símbolo	Unidade	Formação	Remoção
Substrato solúvel rapidamente biodegradável	S_S	mg/L em CQO ²	Hidrólise do X_S	Crescimento da X_H
Substrato particulado lentamente biodegradável	X_S	mg/L em CQO	Decaimento da X_H ou X_A	Hidrólise a S_S
Biomassa heterotrófica	X_H	mg/L em CQO	Crescimento	Decaimento
Biomassa autotrófica	X_A	mg/L em CQO	Crescimento	Decaimento
Azoto sob a forma de nitritos e nitratos	S_{NO}	mg/L em N	Nitrificação	Crescimento de X_H ou desnitrificação
Azoto sob a forma de $NH_4^+ + NH_3$	S_{NH}	mg/L em N	Amonificação do S_{ND}	Crescimento de X_A ou nitrificação
Azoto orgânico solúvel biodegradável	S_{ND}	mg/L em N	Hidrólise do X_{ND}	Amonificação a S_{NH}
Azoto orgânico particulado biodegradável	X_{ND}	mg/L em N	Decaimento	Hidrólise a S_{ND}
Matéria orgânica particulada inerte	X_P	mg/L em CQO	Decaimento da X_H ou X_A	–

Tabela 2.3: Coeficientes estequiométricos incluídos no ASM1.

Coeficiente	Símbolo	Unidade
Rendimento celular da biomassa heterotrófica	Y_H	g biomassa CQO formada/g CQO oxidado
Fracção da biomassa que origina produtos particulados	f_P	–

² Carência Química de Oxigénio – algumas das variáveis são medidas como parcelas da CQO total.

Coeficiente	Símbolo	Unidade
Massa de azoto/massa de CQO na biomassa	i_{XB}	g N/g CQO na biomassa
Massa de azoto/massa de CQO nos produtos da biomassa	i_{XP}	g N/g CQO nos produtos da biomassa na massa endógena
Rendimento celular da biomassa autotrófica	Y_A	g biomassa CQO formada/g N oxidado

Tabela 2.4: Parâmetros cinéticos abrangidos pelo ASM1.

Parâmetro	Símbolo	Unidade
Taxa específica máxima do crescimento da biomassa heterotrófica	$\hat{\mu}_H$	dia ⁻¹
Taxa máxima específica de hidrólise	k_h	g CQO lentamente biodegradável/ (g CQO celular · dia)
Coeficiente de meia-saturação para a biomassa heterotrófica	K_S	g CQO/m ³
Coeficiente de meia-saturação para a hidrólise de substrato lentamente biodegradável	K_X	g CQO lentamente biodegradável/g CQO celular
Coeficiente de meia-saturação em oxigénio para a biomassa heterotrófica	K_{OH}	g O ₂ /m ³
Taxa específica máxima do crescimento da biomassa autotrófica	$\hat{\mu}_A$	dia ⁻¹
Coeficiente de meia-saturação em azoto para a desnitrificação da biomassa heterotrófica	K_{NO}	g N-NO ₃ ⁻ /m ³
Coeficiente de meia-saturação em azoto amoniacal para a biomassa autotrófica	K_{NH}	g N-NH ₄ ⁺ /m ³
Coeficiente de meia-saturação em oxigénio para a biomassa autotrófica	K_{OA}	g O ₂ /m ³
Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica	b_H	dia ⁻¹
Taxa de decaimento da biomassa autotrófica	b_A	dia ⁻¹
Factor de correcção para μ_H em condições anóxicas	η_g	–
Factor de correcção da hidrólise em condições anóxicas	η_h	–
Taxa de amonificação	k_a	m ³ CQO/(g · dia)

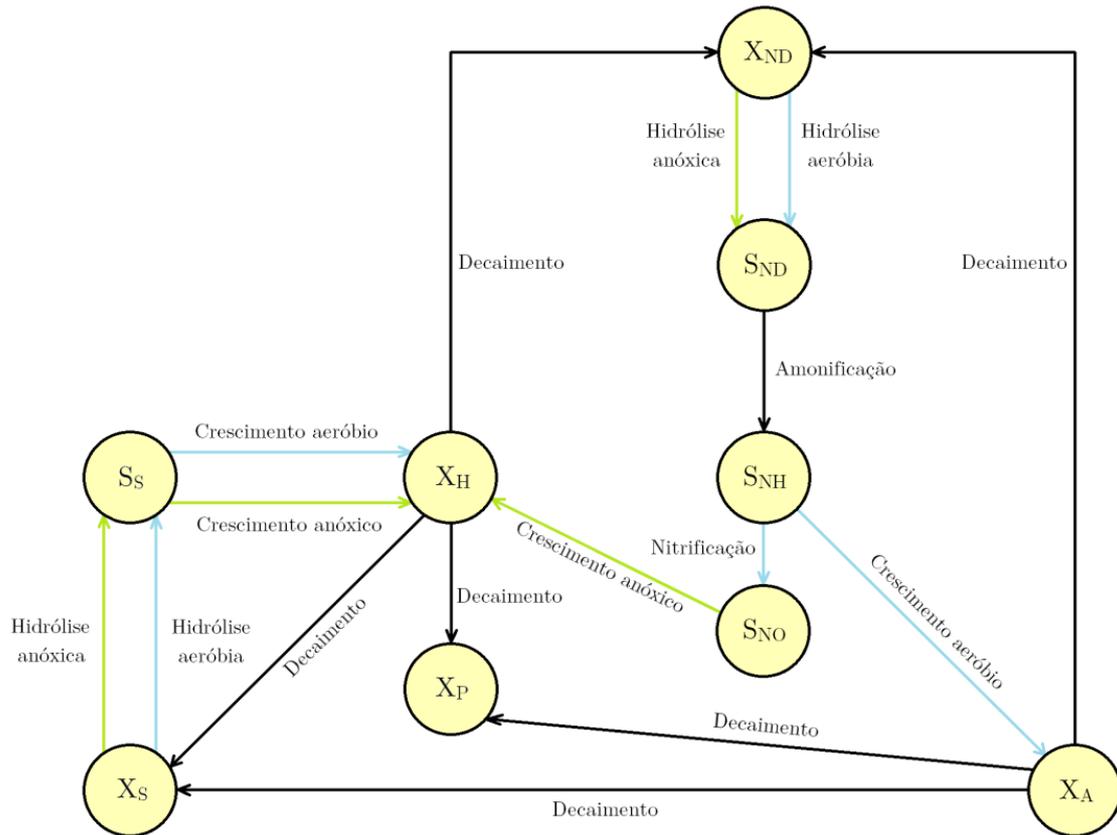


Figura 2.6: Esquemático das interações que ocorrem entre as diversas variáveis (adaptado de [8]).

2.4.2. Equações diferenciais

O modelo ASM1 pode ser formulado através de um conjunto complexo de equações diferenciais ordinárias. De acordo com vários autores, o modelo será simplificado pela redução do número de variáveis de estado apresentadas [17][27]. Uma das simplificações comumente efectuada consiste na modelação de um sistema reduzido de 9 equações diferenciais ordinárias, onde se considera que as restantes 4 variáveis podem ser dissociadas das componentes em estudo, não alterando, portanto, a dinâmica do sistema. A relação do OD com a r_o , que contabiliza a intensidade dos processos, depende da arquitectura do sistema físico e será revista na Secção 3.1.2..

De modo a facilitar a apresentação das expressões matemáticas, convém notar que:

$$\Psi = \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_o} \cdot \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \quad (2.4)$$

$$\Omega = \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \cdot \frac{S_o}{K_{OA} + S_o} \quad (2.5)$$

Nestas circunstâncias, o sistema reduzido pode ser exprimido pelas seguintes equações:

⇒ Substrato solúvel facilmente biodegradável (S_S)

$$\begin{aligned} \frac{dS_S}{dt} = & -\frac{\hat{\mu}_H}{Y_H} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_g \cdot \Psi \right) \cdot X_H \\ & + \frac{k_h \cdot X_S}{X_H \cdot K_X + X_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_h \cdot \Psi \right) \cdot X_H \end{aligned} \quad (2.6)$$

⇒ Substrato particulado lentamente biodegradável (X_S)

$$\frac{dX_S}{dt} = (1 - f_p) \cdot (b_H \cdot X_H + b_A \cdot X_A) - \frac{k_h \cdot X_S}{X_H \cdot K_X + X_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_h \cdot \Psi \right) \cdot X_H \quad (2.7)$$

⇒ Biomassa heterotrófica (X_H)

$$\frac{dX_H}{dt} = \left[\hat{\mu}_H \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_g \cdot \Psi \right) - b_H \right] \cdot X_H \quad (2.8)$$

⇒ Biomassa autotrófica (X_A)

$$\frac{dX_A}{dt} = (\hat{\mu}_A \cdot \Omega - b_A) \cdot X_A \quad (2.9)$$

⇒ Azoto solúvel sob a forma de nitritos e nitratos (S_{NO})

$$\frac{dS_{NO}}{dt} = -\hat{\mu}_H \cdot \frac{1 - Y_H}{2,86 \cdot Y_H} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot \eta_g \cdot \Psi \cdot X_H + \frac{\hat{\mu}_A}{Y_A} \cdot \Omega \cdot X_A \quad (2.10)$$

⇒ Azoto solúvel sob a forma de amónia e iões amónio (S_{NH})

$$\begin{aligned} \frac{dS_{NH}}{dt} = & \left[-\hat{\mu}_H \cdot i_{XB} \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_g \cdot \Psi \right) + k_a \cdot S_{ND} \right] \cdot X_H \\ & - \hat{\mu}_A \cdot \left(i_{XB} + \frac{1}{Y_A} \right) \cdot \Omega \cdot X_A \end{aligned} \quad (2.11)$$

⇒ Azoto orgânico solúvel biodegradável (S_{ND})

$$\frac{dS_{ND}}{dt} = \left[-k_a \cdot S_{ND} + \frac{k_h \cdot X_{ND}}{X_H \cdot K_X + X_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_h \cdot \Psi \right) \right] \cdot X_H \quad (2.12)$$

⇒ Azoto orgânico particulado biodegradável (X_{ND})

$$\begin{aligned} \frac{dX_{ND}}{dt} = & (i_{XB} - f_p \cdot i_{XP}) \cdot (b_H \cdot X_H + b_A \cdot X_A) \\ & - \frac{k_h \cdot X_{ND}}{X_H \cdot K_X + X_S} \cdot \left(\frac{S_O}{K_{OH} + S_O} + \eta_h \cdot \Psi \right) \cdot X_H \end{aligned} \quad (2.13)$$

⇒ Matéria orgânica particulada inerte (X_P)

$$\frac{dX_P}{dt} = f_p \cdot b_H \cdot X_H + f_p \cdot b_A \cdot X_A \quad (2.14)$$

2.4.3. Restrições do modelo

Um certo número de simplificações e suposições devem ser efectuadas a fim de o modelo ASM1 atingir resultados práticos. Alguns desses passos estão associados ao sistema físico em si, enquanto outros dizem respeito ao modelo matemático. As principais restrições a ter em conta são as seguintes (conforme relatado em [14]):

- ⇒ O sistema deve funcionar a uma temperatura relativamente constante;
- ⇒ O pH da mistura deverá ser constante e aproximadamente neutro;
- ⇒ Os parâmetros associados às expressões que descrevem as taxas do processo são considerados constantes ao longo do tempo;
- ⇒ Admite-se que os factores de correcção para a desnitrificação (η_g e η_h) são fixos e constantes para um dado efluente;
- ⇒ O modelo assume que os parâmetros de nitrificação são igualmente constantes;
- ⇒ A biomassa heterotrófica é dada como homogénea e com comportamento constante ao longo do tempo;
- ⇒ O aprisionamento de matéria orgânica particulada na biomassa é considerado instantâneo;
- ⇒ A hidrólise da matéria orgânica e do azoto orgânico ocorre em paralelo e com taxas iguais;
- ⇒ O tipo de receptor de electrões não perturba a perda de biomassa activa por decaimento nem o coeficiente do rendimento dos microrganismos heterotróficos;
- ⇒ O ASM1 é aplicável à simulação dos processos biológicos a ocorrer em águas residuais domésticas. A sua aplicação em água com elevada contribuição industrial deverá ser evitada ou revendo o modelo e adaptando-o às características da mesma.

2.4.4. Valores típicos dos coeficientes e parâmetros

Na tabela seguinte (Tabela 2.5) são apresentados os valores sugeridos pelo grupo de trabalho da IAWQ para os parâmetros e coeficientes incluídos no modelo ASM1. Note-se que a maioria dos valores são fortemente influenciados por condições ambientais e devem ser considerados como valores médios, indicando uma ordem de grandeza razoável. A título de

comparação, é apresentado o intervalo de valores comumente encontrados na literatura da especialidade [14].

Tabela 2.5: Valores característicos para os parâmetros cinéticos e coeficientes estequiométricos incluídos no modelo ASM1, para as águas residuais domésticas a pH neutro [23]. As unidades são as das Tabela 2.3 e Tabela 2.4.

Símbolo	Valores		
	20 °C	10 °C	Literatura [14]
<i>Coefficientes estequiométricos</i>			
Y_H	0,67	0,67	0,38 – 0,75
Y_A	0,24	0,24	0,07 – 0,28
f_P	0,08	0,08	–
i_{XB}	0,086	0,086	–
i_{XP}	0,06	0,06	–
<i>Parâmetros cinéticos</i>			
$\hat{\mu}_H$	6,0	3,0	0,6 – 13,2
b_H	0,62	0,20	0,05 – 1,60
K_S	20	20	5 – 225
K_{OH}	0,20	0,20	0,01 – 0,20
K_{NO}	0,50	0,50	0,10 – 0,50
$\hat{\mu}_A$	0,80	0,30	0,20 – 1,0
b_A	0,20	0,10	0,05 – 0,20
K_{OA}	0,40	0,40	0,40 – 2,0
K_{NH}	1,0	1,0	–
η_g	0,80	0,80	0,60 – 1,0
k_a	0,08	0,04	–
k_h	3,0	1,0	–
K_X	0,03	0,01	–
η_h	0,40	0,40	–

3

Sistema respirométrico

Conteúdo

3.1. Parte operativa	20
3.1.1. Sensores	21
3.1.1.1. Sensor de pH	22
3.1.1.2. Sensor de OD	23
3.1.1.2.1. Características do sensor	23
3.1.1.2.2. Dinâmica do sensor	23
3.1.2. Equações de balanço mássico	25
3.2. Parte de comando	25
3.3. Esquema integral	28

No âmbito do presente trabalho foi construído de raiz um sistema de respirometria para ser utilizado em ambiente laboratorial. Este fornecerá medições das taxas de consumo de oxigénio dissolvido em amostras de redes de drenagem de águas residuais ou de unidades de tratamento destas. Para além disso, é possível quantificar-se, neste tipo de amostras, o conteúdo de substâncias biodegradáveis, que constituem, em regra, mais de 90% da carga poluente que lhe está associada.

O sistema é composto por duas partes distintas: parte operativa e parte de comando, analisadas em pormenor na Secção 3.1 e Secção 3.2, respectivamente.

3.1. Parte operativa

A parte operativa engloba o tanque de arejamento e a célula de medida, que, na capacidade limite, contém aproximadamente 3,7 L de mistura, em conjunto com os actuadores – compressor, agitador, bombas hidráulicas – e os sensores de OD e pH que monitorizam, adicionalmente, a temperatura (ver esquema e foto expostos na Figura 3.1 e na Figura 3.2, respectivamente).

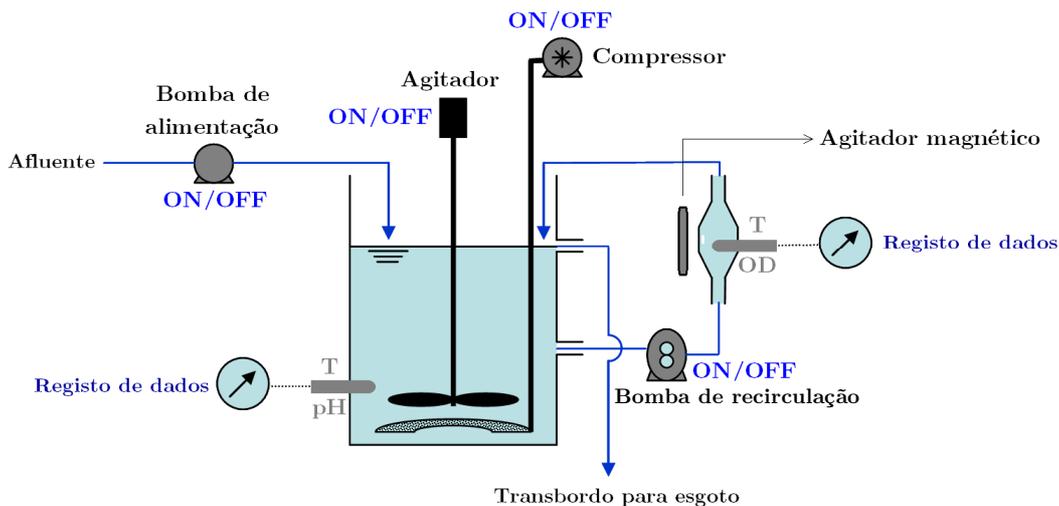


Figura 3.1: Esquema simplificado do sistema de respirometria.

Os actuadores efectuam operações em consequência das ordens recebidas pela parte de comando, ou seja todos os dispositivos actuantes agem após ordem directa dessa mesma parte. Por seu lado, os sensores têm como papel informar a parte de comando do estado das operações em curso e comunicam com um computador por protocolo Modbus³. A informação remetida será então processada nos programas de controlo criados em ambientes LabVIEW e PL7 que, consoante os dados, farão a parte de comando operar.

³ Um dos mais antigos protocolos de comunicação de dados utilizado em sistemas de automação (*master/slave*), criado em 1979 pela Modicon (actual grupo Schneider Electric). Presentemente o seu desenvolvimento está a cargo de uma organização independente [45].

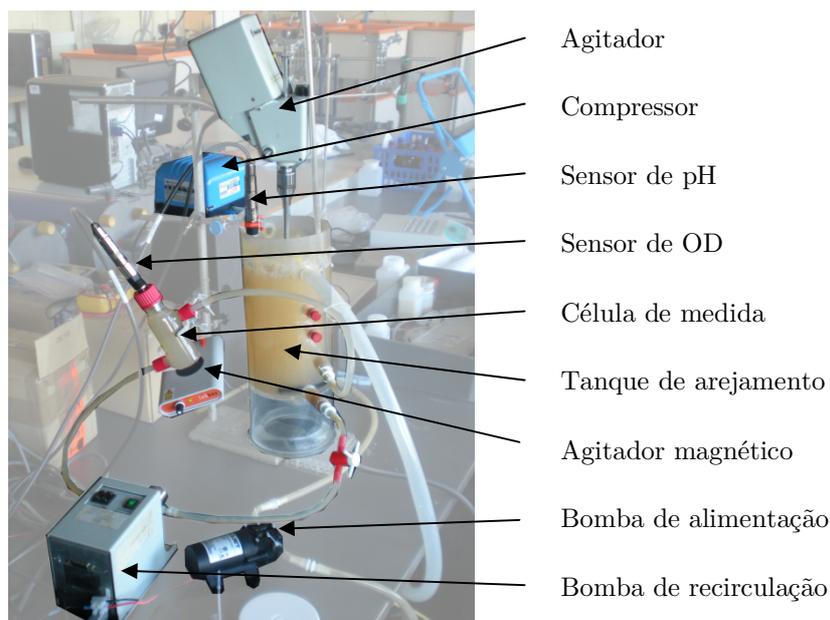


Figura 3.2: Sistema de respirometria construído.

A lista de todos os componentes utilizados é a seguinte:

- ⇒ Bomba de alimentação: Flojet RLF122002, com fluxo máximo de saída de 3,8 L/min;
- ⇒ Agitador: Heidolph RZR 1;
- ⇒ Compressor: Hailea V-20, com fluxo de ar de 20 L/min;
- ⇒ Bomba de recirculação: Ismatec Reglo-Z;
- ⇒ Agitador magnético: labbox;
- ⇒ Sensor OD e temperatura: Hamilton Visiferm DO ARC 120;
- ⇒ Sensor pH e temperatura: Hamilton Easyferm Food ARC 120;
- ⇒ Conversor USB – Modbus RS-485.

3.1.1. Sensores

Os sensores são instrumentos de medida que transformam a informação da grandeza física a medir num sinal eléctrico que lhe é proporcional e que se encontra adaptado às características de entrada do condicionador de sinal. Geralmente, do ponto de vista funcional, podem ser definidas três etapas centrais: sensoriamento, condicionamento de sinal e, por fim, transmissão de sinal. O tempo de amostragem terá de ser decidido por forma a considerar o tempo de resposta do sensor, isto é, o tempo de conclusão das etapas supramencionadas.

Os testes realizados com ambos os sensores, que se representam na Figura 3.3, serviram de suporte à definição do tempo de amostragem (Δt) dito ideal, ou seja, o menor tempo para o qual

a relação número de leituras úteis/ número de falhas de leitura (resposta de valor nulo por parte do sensor – exemplo exposto na Figura 3.4) fosse razoável. Nessa conformidade, o tempo de amostragem mínimo determinado é de 1,5 segundos, que equivale a aproximadamente 7% de leituras erróneas. Naturalmente, quanto maior for o intervalo entre cada medição menor será a percentagem de erro, todavia, o número de aquisições representativas do processo será menor e este trata-se de um factor capital na estimação da taxa de respiração realizada nos próximos capítulos.

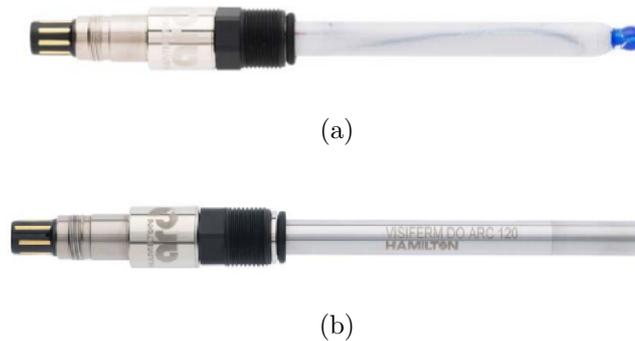


Figura 3.3: Sensor de pH (a) e sensor de OD (b).

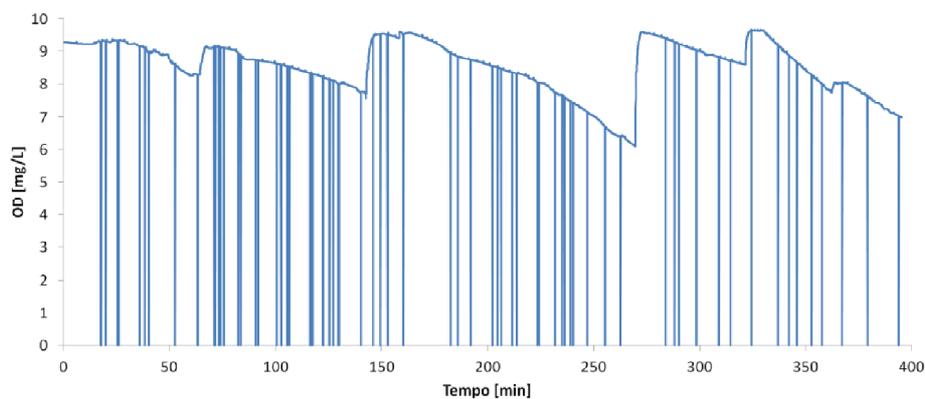


Figura 3.4: Exemplo de falhas de medição por parte do sensor de OD. Neste teste fizeram-se leituras a cada 3 segundos. No total obtiveram-se 7908 leituras, das quais 75 foram nulas.

3.1.1.1. Sensor de pH

O Hamilton Visiferm Food ARC 120 (Figura 3.3 (a)) é um sensor electroquímico de pH com electrónica integrada. As medições de pH são obtidas através de um eléctrodo de vidro sensível e incluem compensação de temperatura, que será decerto uma característica, na perspectiva de cálculo interno, interferente no tempo de resposta do sensor. O sensor comunicará com o restante sistema por interface digital Modbus, mas também suporta o padrão analógico *standard* (4 – 20 mA).

3.1.1.2. Sensor de OD

3.1.1.2.1. Características do sensor

O Hamilton Visiferm DO ARC 120 (Figura 3.3 (b)) é um sensor de oxigénio óptico integrado com optoelectrónica. Este tipo de sensor requer menos manutenção que os sensores clássicos, visto que não possui uma membrana mecanicamente sensível ou um electrólito corrosivo. Contudo, o seu tempo de resposta pode ser consideravelmente superior face aos últimos, porém consegue-se uma pequena redução desse valor agitando a mistura na área de acção do sensor. O método de medição baseia-se na propriedade de fluorescência do oxigénio, ou seja, este é excitado com radiação de baixo comprimento de onda, que conseqüentemente emite radiação cuja intensidade de fluorescência está relacionada com a concentração de oxigénio na mistura. Tal como foi referido para o sensor de pH, a medida final deste sensor contempla compensação de temperatura e permite comunicação por padrão analógico.

3.1.1.2.2. Dinâmica do sensor

Os sensores clássicos de OD são, de forma geral, modelados por sistemas de primeira ordem lineares e invariantes no tempo [18][28][32]. O sensor óptico Hamilton pode ser modelizado recorrendo a um sistema da mesma ordem, mas a constante de tempo associada será seguramente superior, em comparação com os anteriores. De resto, o comportamento característico de um sistema de primeira ordem foi claramente observado no sinal transmitido pelo sensor nos inúmeros testes executados.

Um sistema de primeira ordem satisfaz a seguinte equação diferencial [25]:

$$\tau \cdot \frac{dy(t)}{dt} + y(t) = G_0 \cdot u(t) \quad (3.1)$$

em que $u(t)$ descreve o *input* do sistema; $y(t)$ descreve o *output* do sistema; τ é a constante de tempo do sistema; e G_0 toma o valor do ganho estático do sistema. No diagrama de blocos, exibido na Figura 3.5, encontra-se expressa a função de transferência do sistema no domínio de Laplace.

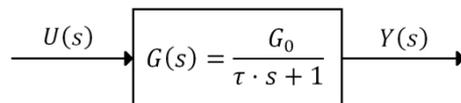


Figura 3.5: Sistema de primeira ordem.

No caso do sensor em questão, espera-se um ganho unitário e a constante de tempo é calculada impondo à entrada do sensor um sinal do tipo função escalão ou degrau. O valor desta constante equivale à velocidade com que o sistema se move em direcção ao estado estacionário e é definida quando a resposta do sistema à função escalão atinge $1 - e^{-1} \approx 63\%$ do valor (assimptótico) final.

Foram realizados quatro ensaios, em circunstâncias diferentes, de modo a determinar um valor médio aproximado desta constante, sendo que, em dois deles se efectuou a transição de um meio privado de OD para um com concentração de OD máxima (Figura 3.6, casos (a) e (b)), ao passo que, nos restantes ensaios, se realizou a operação inversa (Figura 3.6, casos (c) e (d)), em que o valor da constante de tempo corresponde agora ao instante de tempo em que a resposta do sistema é cerca de 37% do valor inicial.

Nos resultados obtidos nota-se uma ligeira variação no valor da constante de tempo, chegando ao valor médio, entre os quatro ensaios, de $\tau \approx 59,6$ s. Este trata-se de um valor excessivamente elevado, daí que se torne impossível negligenciar este termo e as suas implicações no processo de cálculo da taxa de respiração. Por fim, pode-se escrever a função de transferência associada ao sensor Hamilton, que será dada por:

$$G(s) = \frac{1}{59,6 \cdot s + 1} \quad (3.2)$$

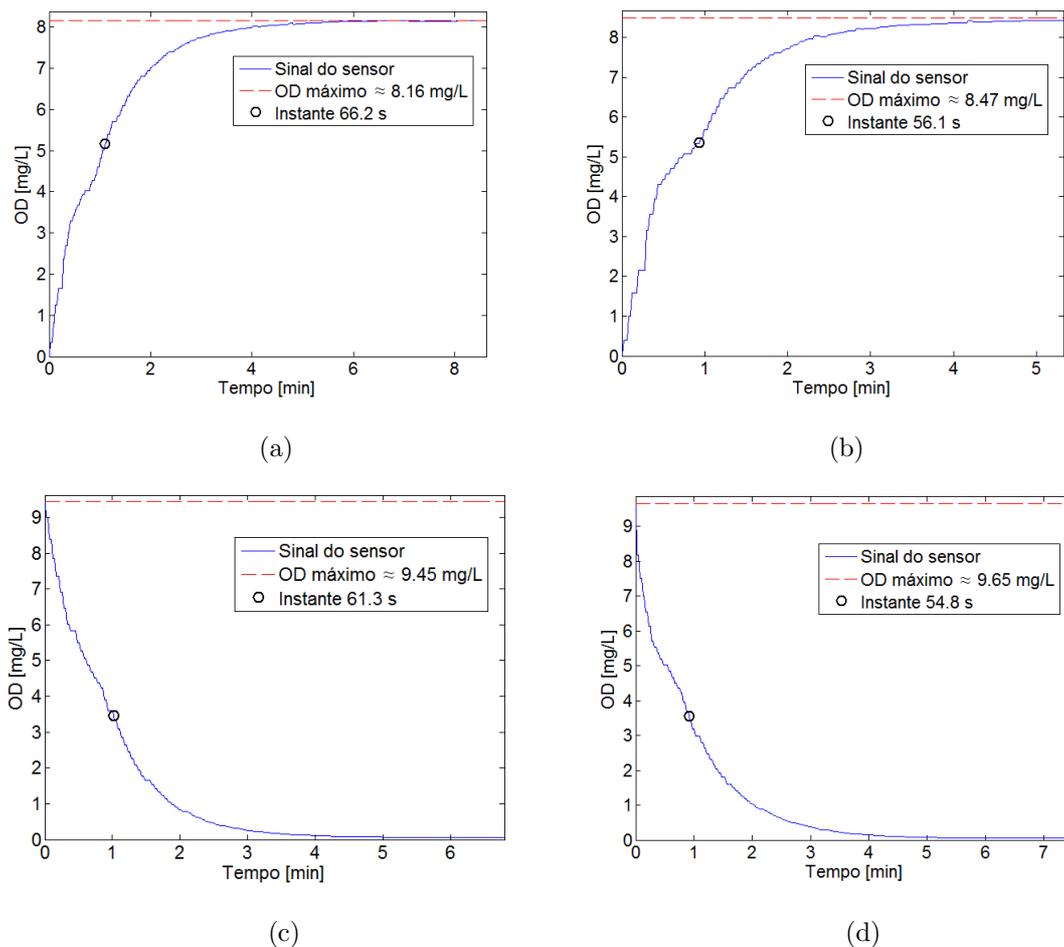


Figura 3.6: Ensaios realizados para estimação da constante de tempo do sensor de OD.

3.1.2. Equações de balanço mássico

No sistema de respirometria referido previamente, pode-se distinguir dois métodos distintos de cálculo da taxa de respiração, tendo em atenção a Figura 3.1, são eles: partindo da leitura do OD na amostra recolhida na célula de amostragem, ou em alternativa, através da leitura do OD em toda a mistura circulante no sistema respirométrico.

No caso do cálculo da taxa de respiração recorrendo exclusivamente à célula de recolha de amostra, este pretende-se que seja efectuado sem que haja ligação ao reactor biológico. Desta forma, a taxa de respiração vê-se limitada pelas concentrações de OD e substrato presentes na amostra, que, em baixas quantidades, conduzirá à respiração endógena [9][10][30]. Por outras palavras, trata-se de um respirómetro do tipo LSS. Com o tempo assistir-se-á a um decréscimo, previsto como constante, da concentração de OD e a taxa de respiração será descrita pela seguinte expressão:

$$\frac{dS_0}{dt} = -r_0 \quad (3.3)$$

Este será o método empregue para fornecer medidas para as estratégias de estimação da r_0 .

Como a informação de OD, na mistura, é recolhida apenas na célula de amostragem, há a necessidade de a fazer circular entre os dois compartimentos e de forma homogénea, de modo a se poder aplicar o segundo método de cálculo da taxa de respiração. Perante a situação anterior, a diferença prende-se com o facto de a mistura usufruir agora de uma fonte de oxigénio (arejamento a decorrer no reactor), ou seja, introdução de fluxo de gás (LFS), dissipando-se o limite de OD imposto. Para contabilizar esta mudança é adicionado um novo termo à equação de balanço de massa:

$$\frac{dS_0}{dt} = K_L a \cdot (S_0^* - S_0) - r_0 \quad (3.4)$$

Este método não será contemplado no presente documento.

3.2. Parte de comando

O autómato programável, elemento principal desta parte, é responsável por dar ordens de saída em função do seu programa e da informação recebida do processo bioquímico em causa. Neste caso, o autómato trata-se de um controlador lógico programável (PLC) da fabricante Schneider Electric. Os PLC podem ser considerados como pertencentes à “família” dos computadores. A utilização de circuitos integrados, em vez de dispositivos electromecânicos, para implementar funções de controlo exibem vantagens que advêm da sua capacidade de guardar informação, temporizar, contar, manipular, efectuar operações aritméticas e comunicar

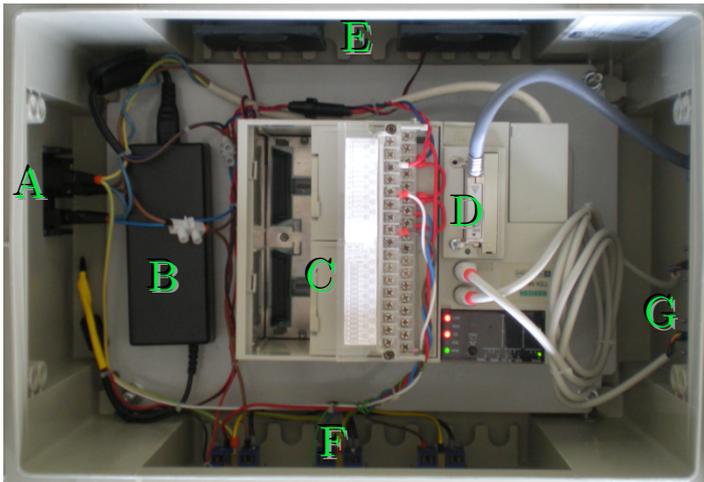
para controlo e manobra do processo. Em geral, há ainda que referir que a arquitectura dos PLC é modular e bastante flexível [24].

Na situação presente, o PLC encontra-se a operar no interior de um armário electrónico (Figura 3.7), onde também se conectam todos os componentes da parte operativa para alimentação eléctrica e controlo de actuação. Um esquemático pode ser observado na Figura 3.8. Os constituintes essenciais da caixa de comando são os seguintes:

- ⇒ PLC Modicon TSX Micro 37-22 – ligado a um computador por portas série acessíveis em fichas do formato mini-DIN de 8 pinos;
- ⇒ Placa PCMCIA TSX SCP 111 – possibilita a comunicação entre o PLC e os *softwares* LabVIEW e PL7 em simultâneo. Conecta-se a um computador pelo padrão RS-232;
- ⇒ Tomadas Schucko – alimentação eléctrica dos dispositivos da parte operativa com interruptor de corrente controlado pelo PLC;
- ⇒ Adaptador AC/DC – disponibiliza na sua saída uma tensão de 12V DC;
- ⇒ Outros conectores de alimentação e envio de sinal.



Figura 3.7: Visualização do exterior da caixa de comando.



- A – Alimentação exterior
- B – Transformador AC/DC
- C – PLC
- D – Carta PCMCIA
- E – Ventilação
- F – Tomadas de alimentação dos actuadores
- G – Conectores mini-DIN

Figura 3.8: Interior da caixa de comando.

No módulo I/O do PLC (Figura 3.9) encontram-se ligados os actuadores. Estes serão alimentados consoante a decisão regida pelo *software* PL7 implementado. As saídas a activar para alimentação eléctrica dos actuadores encontram-se tabeladas no quadro seguinte (Tabela 3.1). Adicionalmente encontram-se listados os *bits* de memória associados a cada actuador e que fazem de elo de correspondência entre os programas PL7 e LabVIEW desenvolvidos. Na Figura 3.10 está representado um exemplo do código em linguagem lógica LADDER (criado no *software* PL7), concernente ao compressor, onde, consoante a escrita do *bit* de memória %M1, por parte do LabVIEW, se acionará ou não o dispositivo em causa pela saída %Q2.0 do módulo I/O do PLC. Em nota final, convém referir que a entrada %I1.0 representa o sinal de sobrecarga da bomba peristáltica, mas este não chegou a ser considerado no restante trabalho.

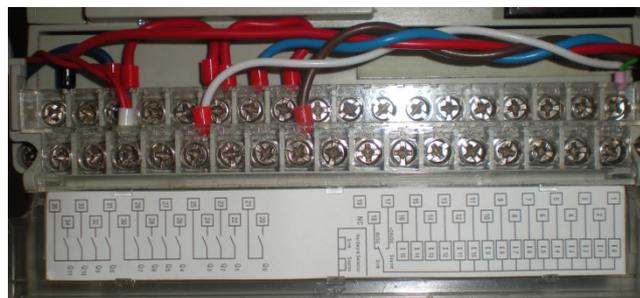


Figura 3.9: Módulo I/O do PLC.

Tabela 3.1: Endereços de saída e *bits* de memória usados no programa PL7 implementado.

	Identificador da saída	Identificador do <i>bit</i> de memória
Bomba de alimentação	%Q2.4	%M4
Agitador	%Q2.8	%M3
Compressor	%Q2.0	%M1
Bomba peristáltica	%Q2.2	%M2

**Figura 3.10:** Linha de código LADDER referente ao compressor.

3.3. Esquema integral

Nesta secção apresenta-se um esquema global das ligações efectuadas e, em especial, a interligação entre as partes enunciadas nas secções precedentes, como se pode observar na Figura 3.10.

Segundo a formulação *master/slave*, vulgarmente utilizada em sistemas autómatos programáveis, pode-se tratar o computador de serviço como o *master* do sistema, visto ser ele que coordena todas as operações e solicita informação aos *slaves*. Neste último grupo figuram ambos os sensores (OD (3) e pH (5)), a carta PCMCIA (20) e o próprio PLC (22). Um sistema pode abranger até 32 endereços de *slaves* exteriores. Entre parênteses estão representados os números de endereço de acesso declarados para cada dispositivo.

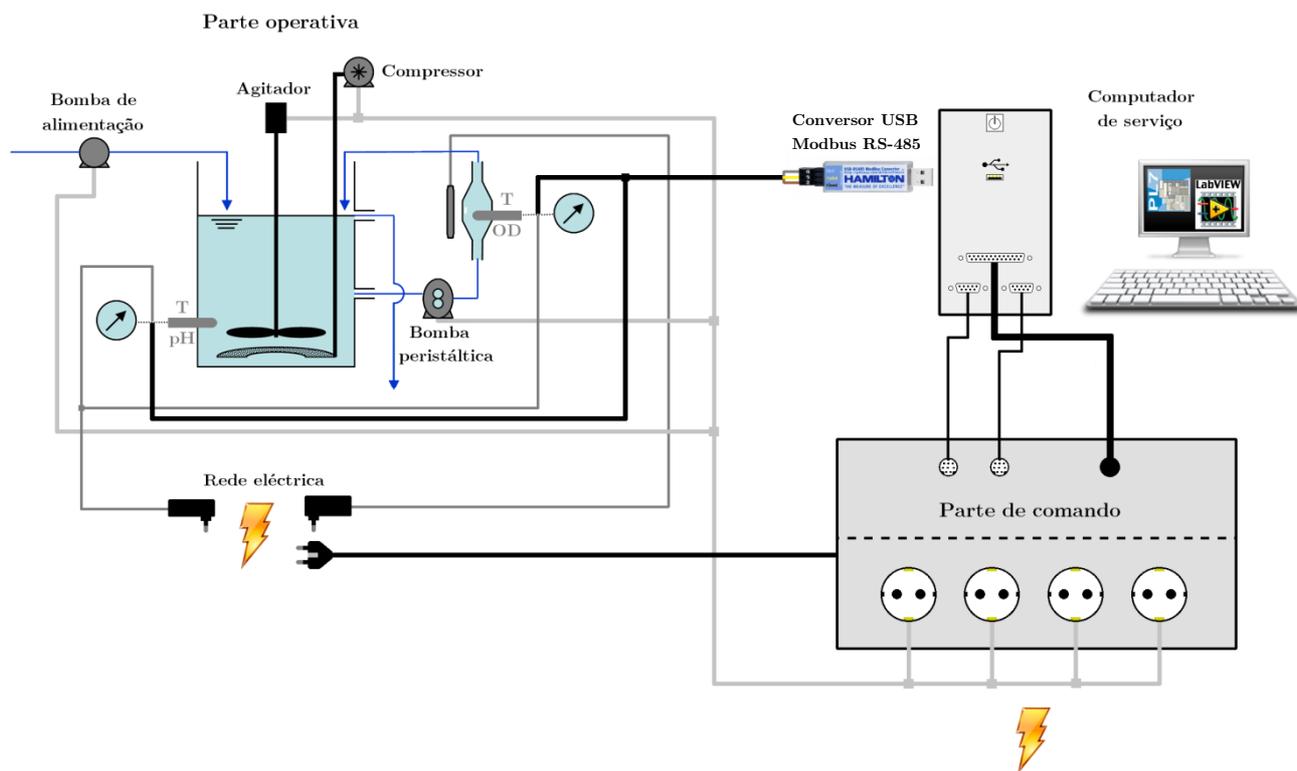


Figura 3.11: Esquema integral das ligações do sistema respirométrico.

4

Procedimento respirométrico *Software*

Conteúdo

4.1. Apresentação	32
4.2. Modo de operação manual	33
4.3. Modo de operação automático	34

4.1. Apresentação

A implementação do programa a operar em combinação com o sistema de respirometria foi desenvolvida recorrendo ao software da National Instruments – LabVIEW, versão 8.6. O conteúdo principal incide sobre a aquisição da informação proveniente dos sensores, na conversão e verificação da informação em medidas proíficas, na interface criada, apresentada ao operador, para monitorização e controlo de todo o processo e, por fim, na elaboração de um relatório que incorpora todos os valores de OD, temperatura, pH e taxa de respiração obtidos em tabelas, bem como gráficos que expressam visualmente a evolução de cada uma destas grandezas ao longo do processo e ainda as especificações introduzidas pelo operador. Estas especificações diferem consoante o modo de operação escolhido pelo operador: modo manual ou modo automático, referidos em detalhe nas secções seguintes. Na Figura 4.1 encontra-se a interface base apresentada ao utilizador, onde é possível distinguir os campos para identificação do operador e do local em que o processo é realizado, definição da frequência de aquisição de dados, selecção do modo de operação e um espaço final que permite ao operador anotar comentários que ache pertinente acrescentar.

Tal como foi mencionado na Secção 3.1.1., as leituras transmitidas pelos sensores são susceptíveis à ocorrência de falhas, pelo que, em caso de envio de informação nula, por parte dos sensores, o *software* implementado encarregar-se-á de associar a essa aquisição o valor da leitura anterior.

O pedido para a aquisição das medidas, na interface Modbus, é efectuado através de uma trama hexadecimal constituída pelo código da função a executar (1 *byte*), neste caso a leitura dos registos que contêm a informação pretendida; o endereço do registo de início de leitura (2 *bytes*); e a quantidade de registos a ler (2 *bytes*). A resposta será igualmente uma trama hexadecimal contendo 2 *bytes* por cada registo lido. O *software* desenvolvido converte essa trama num valor binário correspondente a um valor real, em vírgula flutuante de 32 *bits*, e este, por sua vez, é utilizado para o cálculo do valor decimal, pela equação (4.1), correspondente à medida realizada.

$$D = (-1)^S \cdot (1 + M \cdot 2^{-23}) \cdot 2^{E-127} \quad (4.1)$$

onde, D toma o valor decimal final; S trata-se do *bit* de sinal do número a calcular; M (mantissa) parte da vírgula flutuante formada pelos 23 *bits* menos significativos que contêm os dígitos significantes; e E (expoente) é composto pelos restantes 8 *bits*.

A comunicação com o PLC é efectuada de forma semelhante, dado que se trata do mesmo protocolo. No entanto, o código da função a executar, incluída nas tramas enviadas, é agora de escrita, a qual será executada em endereços de memória indicados pelo *software*, de modo a permitir o controlo de estado dos diversos actuadores.

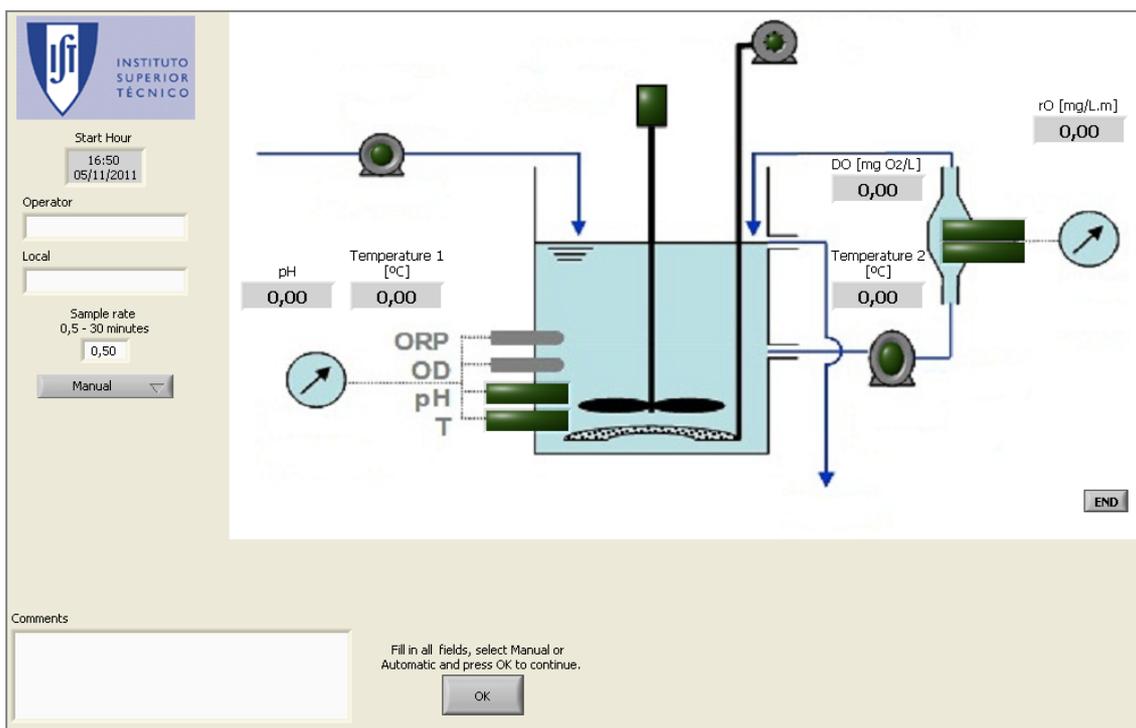


Figura 4.1: Interface gráfica inicial apresentada ao operador.

4.2. Modo de operação manual

No modo manual o operador tem total controlo (*on/off*), a qualquer instante, sobre os diferentes actuadores (bombas, agitador e compressor) do processo. A interface permite ainda visualizar ou ocultar os gráficos com a evolução temporal das medidas adquiridas pelos sensores. Na Figura 4.2 é possível visualizar os gráficos de pH da mistura e da temperatura sentida na célula de amostragem (canal *Temperature 2*), bem como as últimas medidas provenientes dos sensores e concluir, de momento, que a bomba de alimentação é o único actuador que se encontra em funcionamento. O início da aquisição e registo dos valores de OD é comandado pelo operador através do botão “Start DO readings”, aquando da estabilização dos valores registados pelos sensores. Este ponto é totalmente dependente do utilizador e, portanto, compete a este definir qual a situação ideal pretendida para iniciar o processo. Finalmente, assim que o operador pressione o botão “END”, todas as aquisições são suspensas e é dada a possibilidade de elaboração de um relatório em formato Excel. O relatório será constituído por três folhas de cálculo: a primeira contém as especificações inseridas pelo operador; a segunda agrupa os gráficos referentes a cada grandeza medida durante o procedimento; e na última folha encontram-se todos os valores adquiridos dispostos em tabelas.

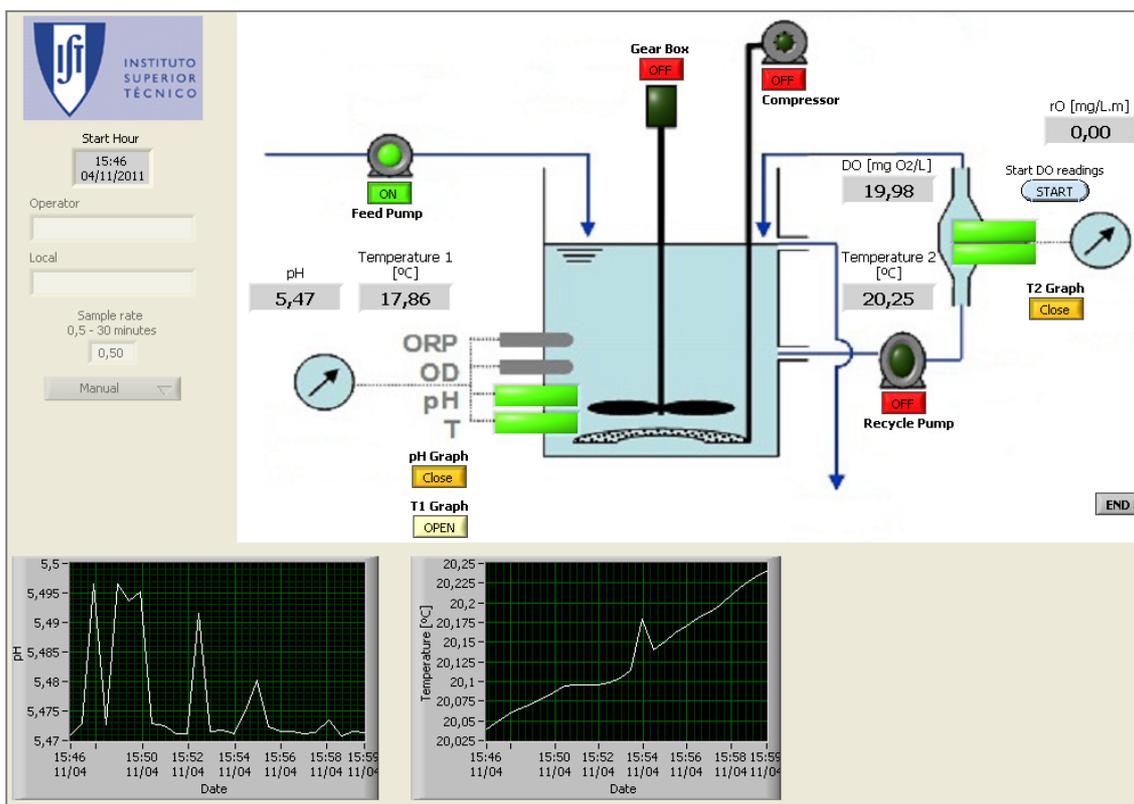


Figura 4.2: Interface gráfica apresentada ao operador no modo manual.

4.3. Modo de operação automático

Após o operador seleccionar o modo de operação automático, é inquirido sobre o número de ciclos de amostragem a executar, o tempo de pausa entre cada amostragem, o número de medições da taxa de respiração (“réplicas”) em cada amostragem, os tempos de funcionamento das bombas e o tempo de aquisição dos valores de OD contido na célula de amostragem em paralelo com o valor mínimo de OD, que, em caso de se obter uma medição inferior, pretende-se suspender de imediato o processo. De forma idêntica, o valor máximo de OD pode ser definido de modo a interromper a circulação de mistura, antes do tempo estipulado, se a medida lida for superior ao limite imposto. Em adição a estes dados, o utilizador pode ainda definir um intervalo de tempo de estabilização, ao fim do qual se dará início ao ciclo de amostragens (ver Figura 4.3). Todavia, se o utilizador não definir este tempo ou verificar uma mistura homogénea e com medições pouco oscilantes, sem que este período finalize, terá a opção de iniciar de pronto a aquisição de informação utilizando o botão “Sensors readings stabilized. Start data acquisition?”.

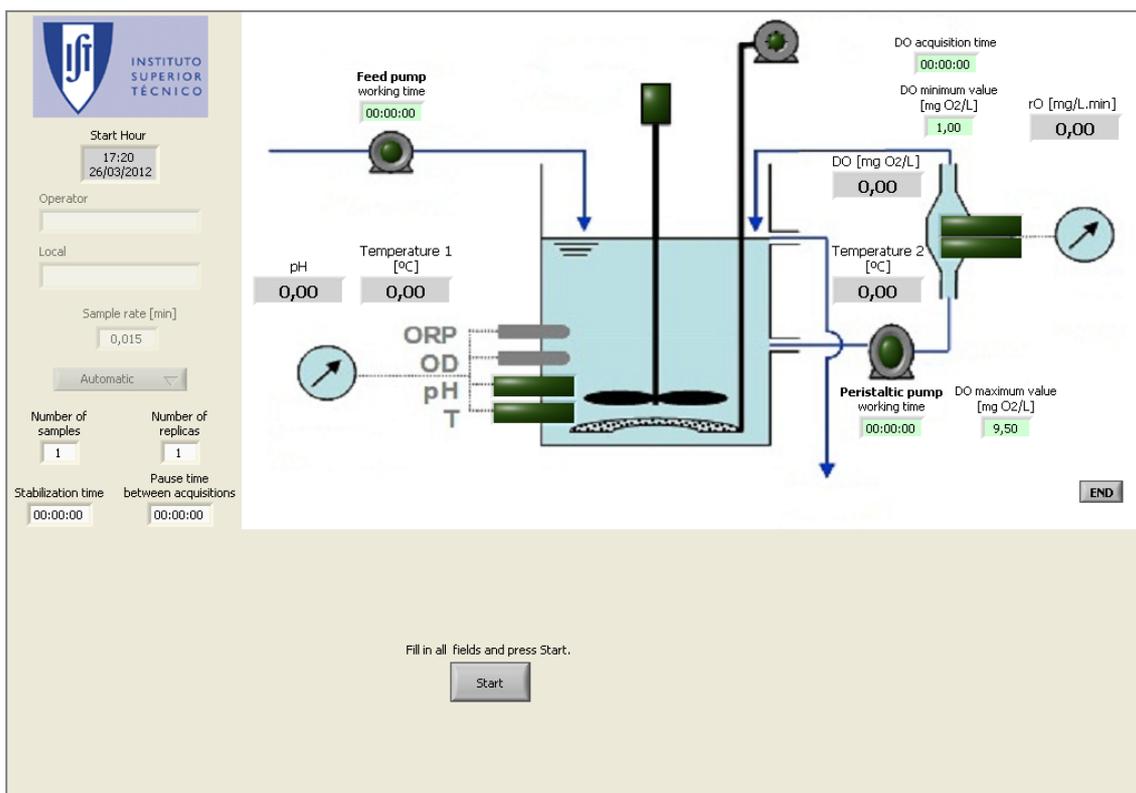


Figura 4.3: Interface gráfica apresentada ao operador no modo automático.

Logo que o utilizador introduza os dados e prima o botão “Start”, dá-se início ao processo de medição automática de acordo com os seguintes passos:

1 – Alimentação da amostra ao tanque de arejamento, por intermédio da respectiva bomba, durante o intervalo de tempo determinado, de modo a expulsar a amostra do ciclo anterior, caso esteja presente. Esta é agitada por uma turbina mecânica durante esse período. O excesso de amostra é devolvido à conduta original por transbordo;

2 – Agitação e arejamento da amostra, por um período de tempo determinado, até que os valores medidos nas sondas estabilizem. Estas condições podem ser mantidas no tanque de arejamento até ao final da medida ou interrompidas pelo operador, se assim o pretender, pelos respectivos botões de “ON” e “OFF”. De resto, o compressor e o agitador são os únicos actuadores cujo controlo manual é possível no modo de operação automático;

3 – Alimentação da amostra do tanque de arejamento à célula de medida, por intermédio da bomba de recirculação, durante um intervalo de tempo definido ou até que o valor máximo de OD seja alcançado. Pretende-se, neste intervalo de tempo, que a amostra de medida anterior seja totalmente expulsa, caso exista, com recirculação ao tanque de arejamento. Este momento é assinalado nos gráficos através de uma recta vertical encarnada e durante esta etapa a taxa de respiração é modelada pela expressão (3.4);

4 – Interrupção do funcionamento da bomba recirculação e aquisição dos valores de OD presente na célula de medida durante um período de tempo definido ou até que este atinja um determinado valor mínimo definido pelo operador. Durante esta etapa o operador pode visualizar uma aproximação da taxa de respiração por minuto obtida pela expressão (3.3). Este momento é marcado nas representações gráficas por uma recta vertical amarela;

5 – Repetição dos passos 3 e 4, para obtenção de réplicas, até que se efectuem na sua totalidade o número destas, definido pelo utilizador;

6 – Pausa do sistema até à amostragem seguinte. A actividade dos sistemas de agitação e arejamento é interrompida para paragens superiores a 10 minutos. Elaboração de um relatório intermédio, referente ao ensaio finalizado, com a estrutura referida no ponto 8;

7 – Recomeço do processo no passo 3. Quando o número de amostragens é atingido, bem como as respectivas medições associadas a cada amostragem, dá-se por concluído o ciclo de aquisição;

8 – Elaboração de um relatório em formato Excel. As primeiras três folhas de cálculo têm a mesma estrutura que foi definida e mencionada na secção anterior, à excepção da primeira folha, que reunirá, adicionalmente, os tempos e valores iniciais introduzidos pelo operador. Além destas, serão criadas três folhas extra com a seguinte informação: tempos das rectas verticais; valores dos declives associados a cada ciclo de amostragem; valores do OD e da taxa de respiração estimados pela filtragem de Kalman. Convém ainda referir que, para cada amostragem, existirá agora um grupo independente de gráficos e tabelas das grandezas medidas durante esse ciclo.

Neste sentido, o botão “END” afigura-se somente como um meio de paragem de emergência, visto que, considerando uma sequência de eventos normal e sem incidências, não haverá a necessidade de o utilizador lhe dar uso. Quanto à elaboração do relatório, esta inicia-se de forma automática, em contraste com o modo manual, não sendo necessária a presença de um operador para dar o consentimento e permitindo o curso contínuo do programa.

Um exemplo da interface gráfica apresentada ao operador, enquanto o programa se encontra em exercício no modo automático, pode ser observado na Figura 4.4. Da figura depreende-se que o respirómetro está a finalizar a sétima medição de aquisição (etapa 4), referente à primeira das três amostras.

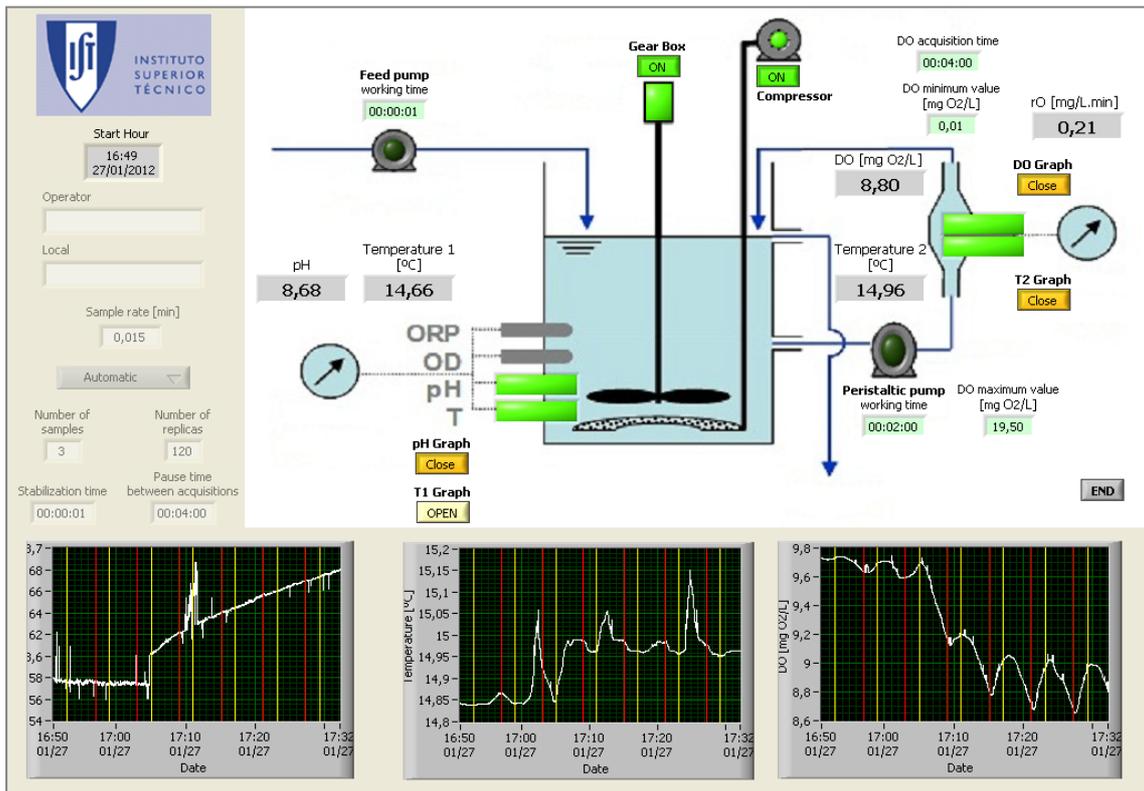


Figura 4.4: Interface gráfica do programa, em execução automática, apresentada ao operador.

5

Estratégias de cálculo da taxa de respiração

Conteúdo

5.1. Declive do sinal medido	40
5.2. Filtragem de Kalman	41
5.2.1. Introdução	41
5.2.2. Formulação do problema respirométrico	43
5.2.3. Parâmetros do filtro e afinação	45
5.2.4. Resultados obtidos – exemplo	46
5.3. Filtro suavizador de atraso	47
5.3.1. Introdução	47
5.3.2. Identificação do modelo do sensor de OD	49
5.3.3. Cálculo do filtro	50
5.3.4. Resultados obtidos – exemplo	51

A taxa de respiração nem sempre é uma variável fácil de estimar. Tudo depende do tipo de respirómetro empregue e dos métodos de cálculo utilizados. O respirómetro projectado, em conjunto com o *software* implementado, permite calcular a taxa de respiração para cada ciclo de amostragem, ou mesmo, estimar o seu valor em cada instante de aquisição. Tal pressupõe, porém, o recurso a estratégias de cálculo distintas, apresentadas neste capítulo. Estas vão desde o passo mais básico, obtendo o declive do sinal adquirido; a estratégias mais complexas, que permitem estimar a taxa de respiração considerando a dinâmica introduzida pelos sensores.

5.1. Declive do sinal medido

Este será o método de cálculo mais trivial. Tendo como base a expressão (3.3), o valor da taxa de respiração é definido pela derivada negada da concentração de OD na mistura, sendo possível, portanto, ajustar uma recta aos dados adquiridos pelo sensor de OD e obter o seu declive. Convém, todavia, minimizar alguns dos efeitos desfavoráveis introduzidos pelo sensor, como o ruído de medição ou a ocorrência de *outliers* e o atraso de resposta. Para reduzir o ruído e *outliers*, possivelmente presentes no sinal, optou-se por aplicar um filtro de mediana. Esta filtragem trata-se de uma técnica digital não linear, do tipo passa-baixo, que atribui a cada ponto visitado o valor mediano de entre os pontos vizinhos, em que o número de pontos a apreciar é denominado por janela. Na estratégia presente foi definida uma vizinhança de 12 aquisições. Quanto ao atraso de resposta, por parte do sensor, contornou-se o problema analisando somente 70% do sinal adquirido, evitando, desta forma, a curva de transição entre as etapas 3 e 4 definidas na Secção 4.3..

Um exemplo de três réplicas, com os valores associados registados na Tabela 5.1, encontra-se representado na Figura 5.1. As zonas demarcadas a cinzento traduzem os 70% do sinal adquirido, durante a etapa 4, a partir do qual é calculado o declive da recta ajustada. Para este exemplo foi escolhido um intervalo de 4 minutos para aquisição na célula de medida e de 2 minutos para recirculação da mistura, pelo que se obtém um valor da r_O a cada 6 minutos, uma vez que o cálculo só é realizado após terminado o ciclo de amostragem (na presença de todas as leituras adquiridas).

Tabela 5.1: Taxas de respiração calculadas referentes às amostragens da Figura 5.1.

Amostra [min]	6	12	18
r_O [mg/Lh]	7,680	8,179	8,466
Resíduo (R^2)	0,992	0,992	0,984

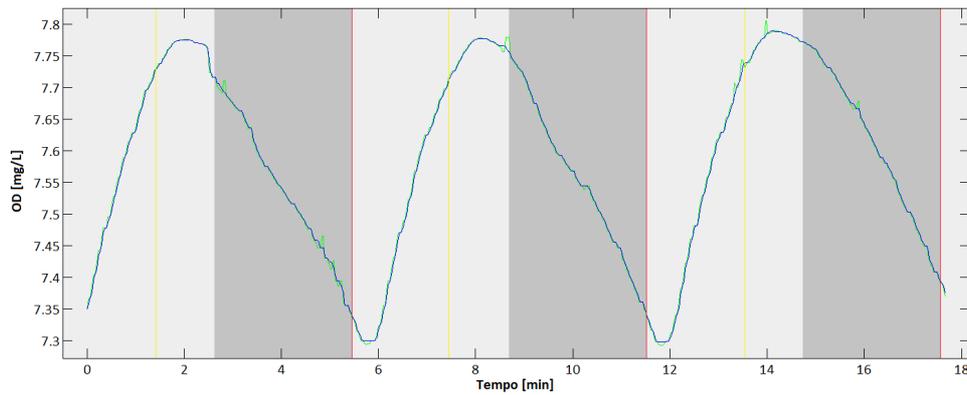


Figura 5.1: Leituras de OD adquiridas pelo sensor (verde) e sinal filtrado (azul).

5.2. Filtragem de Kalman

5.2.1. Introdução

Em 1960, R. E. Kalman publicou o seu célebre artigo descrevendo uma solução recursiva para a filtragem linear em tempo discreto. A solução, denominada por filtro de Kalman, trata-se de um conjunto de equações matemáticas que proporciona uma via computacional eficiente para obter uma estimativa óptima do estado de um processo partindo de observações possivelmente incertas e imprecisas. A estimativa final será óptima no sentido em que, se o ruído presente for Gaussiano, a filtragem realizada minimizará o erro quadrático médio dos parâmetros estimados – estimador quadrático linear (LQE). A limitação da filtragem de Kalman prende-se com o facto de as perturbações e o carácter do ruído terem de ser bem conhecidos. Em contrapartida, quanto às qualidades do filtro, motivo da sua popularidade, pode-se afirmar que [16][40]:

- ⇒ Apresenta bons resultados, devido à optimização e estrutura;
- ⇒ É conveniente para processamento em tempo real;
- ⇒ É fácil de formular e implementar, dado um entendimento básico do processo;
- ⇒ As equações de medição não necessitam de ser invertidas;
- ⇒ Suporta estimativas do passado e presente;
- ⇒ A natureza precisa, do sistema modelado, pode ser desconhecida.

Para formular um problema de filtragem de Kalman é necessário um sistema dinâmico linear discretizado no domínio do tempo definido de acordo com a equação de diferenças estocástica seguinte:

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{F} \cdot \mathbf{x}_{k-1} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}_{k-1} + \mathbf{w}_k \quad (5.1)$$

Com a observação, ou mediação, do estado actual dada por:

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{H} \cdot \mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k \quad (5.2)$$

onde

\mathbf{x}_k representa o vector de estado, no instante k , do sistema dinâmico determinístico;

\mathbf{F} é a matriz que modela a transição entre estados;

\mathbf{B} relaciona a entrada de controlo opcional \mathbf{u} com o estado;

\mathbf{z}_k é vector de observações;

\mathbf{H} é o modelo de observação;

\mathbf{w}_k e \mathbf{v}_k representam o ruído branco do processo e de medição, respectivamente. São assumidos como sendo amostrados de uma distribuição normal de média nula e covariância \mathbf{Q}_k e \mathbf{R}_k , respectivamente – $\mathbf{w}_k \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{Q}_k)$ e $\mathbf{v}_k \sim \mathcal{N}(0, \mathbf{R}_k)$. Ambos os ruídos assumem-se como mutuamente independentes, sem perda de generalidade.

O algoritmo propriamente dito pode ser dividido em três fases recursivas que englobam as cinco equações principais do filtro, nomeadamente as seguintes:

1 – Predição de estado e covariância a partir do modelo

Esta trata-se de uma fase *a priori* em que não são consideradas as observações do estado actual. O cálculo preditivo é expresso por:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} = \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{x}}_{k-1|k-1} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{u}_k \quad (5.3)$$

$$\mathbf{P}_{k|k-1} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{P}_{k-1|k-1} \cdot \mathbf{F}^T + \mathbf{Q}_k \quad (5.4)$$

Da resolução da expressão (5.3) resulta uma estimativa das variáveis de estado no instante k dadas as observações até ao instante $k-1$, inclusive. Por seu lado, (5.4) possibilita a determinação de uma estimativa *a priori* da matriz de covariância do erro \mathbf{P} (medida da exactidão estimada da estimativa do estado).

2 – Cálculo do ganho óptimo de Kalman

A matriz \mathbf{K} , denominada por ganho óptimo de Kalman, é determinada de modo a minimizar a covariância do erro *a posteriori*. Uma configuração da matriz \mathbf{K} que a minimiza é obtida por:

$$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_{k|k-1} \cdot \mathbf{H}^T \cdot [\mathbf{H} \cdot \mathbf{P}_{k|k-1} \cdot \mathbf{H}^T + \mathbf{R}_k]^{-1} \quad (5.5)$$

3 – Actualização/correção das estimativas

Nesta fase a predição *a priori* é combinada com a observação actual de modo a aperfeiçoar a estimativa do estado. Obtém-se, por fim, as estimativas designadas *a posteriori*, dadas por:

$$\hat{\mathbf{x}}_{k|k} = \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1} + \mathbf{K}_k \cdot (\mathbf{z}_k - \mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}) \quad (5.6)$$

$$\mathbf{P}_{k|k} = [\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \cdot \mathbf{H}] \cdot \mathbf{P}_{k|k-1} \quad (5.7)$$

em que \mathbf{I} representa a matriz identidade, de dimensões apropriadas.

Estes três passos serão repetidos continuamente para cada observação adquirida. Ao longo do processo as estimativas apresentam-se cada vez mais precisas e a matriz de covariância do erro reunirá valores menores a cada iteração. À medida que a estimativa *a priori* da matriz de covariância do erro se aproxima de zero a confiança nas observações actuais (\mathbf{z}_k) será menor, ao passo que a medida estimada ($\mathbf{H} \cdot \hat{\mathbf{x}}_{k|k-1}$) terá maior preponderância.

5.2.2. Formulação do problema respirométrico

Considerando o respirómetro construído do tipo LSS, a estimação da taxa de respiração será realizada com base na equação de balanço de massa (3.3). O modelo discretizado pode ser adquirido usando um retentor de amostras de ordem zero (ZOH). A aplicação de um amostrador deste tipo na dinâmica de concentração de OD foi anteriormente usada [5][15][29][32][41] e pode ser aplicada em (3.3), com um intervalo de amostragem Δt , resultando:

$$S_0[k+1] = S_0[k] - \Delta t \cdot r_0[k] + w[k] \quad (5.8)$$

A taxa de respiração poderia ser considerada constante, mas, com o objectivo de obter melhores resultados, foi modelada segundo um modelo de passeio aleatório, resultando:

$$r_0[k] = r_0[k-1] + e_w[k] \quad (5.9)$$

onde e_w se trata de ruído branco de média nula no instante k .

Na situação presente não existirá entrada de controlo no sistema e ambos os ruídos (do processo e de medição) são assumidos como constantes. Nestes termos, e segundo a estrutura do filtro de Kalman, tem-se:

$$\mathbf{x}_k = \begin{bmatrix} S_0 \\ r_{0k} \end{bmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} 1 & -\Delta t \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{H} = [1 \quad 0],$$

$$\mathbf{Q} = E[\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{w}_k'] = \begin{bmatrix} \Delta t^2/2 \\ \Delta t \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta t^2/2 \\ \Delta t \end{bmatrix}^T \cdot \sigma_w^2 \text{ e } r = \sigma_v^2 \quad (5.10)$$

A formulação indicada em (5.10) seria adequada ao sistema respirométrico desenvolvido, contudo não foi considerada a dinâmica do sensor de onde são provenientes as observações de OD. Os resultados obtidos neste contexto seriam de certa forma tendenciosos, dado o carácter dinâmico do sensor estudado na Secção 3.1.1.2.2.. A aproximação correcta passa por incluir a dinâmica dada pela expressão (3.2) na estrutura do filtro de Kalman. A relação que modela a dinâmica será dada por:

$$\dot{S}_0^s(t) = (S_0(t) - S_0^s(t)) \cdot \tau^{-1} \quad (5.11)$$

sabendo que $S_0^s(t)$ representa o sinal enviado pelo sensor de OD, $S_0(t)$ traduz o valor real de OD na mistura e que τ é a constante de tempo associada ao sensor, estimada anteriormente.

O modelo contínuo de espaços de estados que se segue descreve a nova solução:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \begin{bmatrix} \dot{S}_0(t) \\ \dot{r}_0(t) \\ \dot{S}_0^s(t) \end{bmatrix} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}(t) + \mathbf{w}(t) \quad (5.12)$$

em que a matriz \mathbf{A} é preenchida com recurso às expressões (3.3) e (5.11), resultando:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1/\tau & 0 & -1/\tau \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

Do resultado anterior discretizado surge a nova formulação do filtro de Kalman:

$$\mathbf{x}_k = \begin{bmatrix} S_0 \\ r_0 \\ S_0^s \end{bmatrix}_k, \mathbf{F} = \mathbf{A}_d = e^{\mathbf{A} \cdot \Delta t} = \mathcal{L}^{-1}\{(s \cdot \mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\}_{t=\Delta t}, \mathbf{H} = [0 \quad 0 \quad 1],$$

$$\mathbf{Q} = E[\mathbf{w}_k \cdot \mathbf{w}_k^T] = \begin{bmatrix} \Delta t^2/2 \\ \Delta t \\ 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta t^2/2 \\ \Delta t \\ 0 \end{bmatrix}^T \cdot \sigma_w^2 \text{ e } r = \sigma_v^2 \quad (5.14)$$

A matriz discretizada \mathbf{A}_d é obtida por cálculo computacional, realizado directamente no programa LabVIEW desenvolvido, e, portanto, não é aqui pormenorizada.

5.2.3. Parâmetros do filtro e afinação – escolha de $\hat{\mathbf{x}}_{0|0}$, $\mathbf{P}_{0|0}$, \mathbf{Q} e \mathbf{r}

Os parâmetros $\hat{\mathbf{x}}_{0|0}$ e $\mathbf{P}_{0|0}$ são utilizados aquando da primeira estimativa *a priori*. Neste caso, como a filtragem de Kalman é exclusivamente aplicada durante a medição na célula de amostragem (etapa 4 definida na Secção 4.3), há a possibilidade de usar os valores finais observados na fase de recirculação da mistura (etapa 3). Assim, $\widehat{\mathcal{S}}_{0|0}$ e $\widehat{\mathcal{S}}_{0|0}^s$ adoptam o valor da última leitura adquirida e $\widehat{r}_{0|0}$ é aproximada pelo cálculo da derivada entre as duas últimas aquisições. Como é lógico, estes valores são bons indicadores iniciais mas, enquanto medidas do sensor, estão expostos ao ruído e à dinâmica introduzida pelo mesmo, pelo que a matriz $\mathbf{P}_{0|0}$ foi definida como:

$$\mathbf{P}_{0|0} = \begin{bmatrix} 10^3 & 0 & 0 \\ 0 & 10^3 & 0 \\ 0 & 0 & 10^2 \end{bmatrix} \quad (5.15)$$

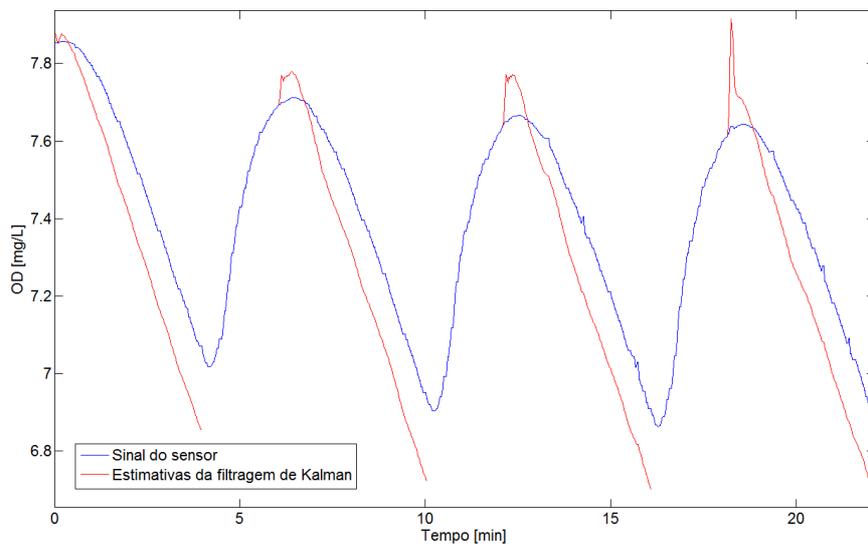
O valor mais próximo da realidade será a medição do sensor (\mathcal{S}_0^s) e, por isso, é-lhe atribuído um valor de covariância do erro menor. Estes valores foram fixados por intuição e com apoio de testes elaborados. Na generalidade, a escolha de $\mathbf{P}_{0|0}$ não é crítica, porque, desde que os termos da sua diagonal sejam diferentes de zero, o filtro resultante é estável e o erro de estimação acabará por convergir para um valor estacionário finito. No entanto, alguma prudência é recomendada para períodos de amostragem demasiadamente curtos (baixo número de aquisições), em que o filtro pode não ter informação suficiente para convergir.

A afinação dos parâmetros \mathbf{Q} e \mathbf{r} conduz a um desempenho superior do filtro, em termos estocásticos. A covariância do ruído de medição \mathbf{r} é usualmente medida antes da operação do filtro e a sua determinação é menos complexa, em comparação com a covariância \mathbf{Q} , visto que é independente do processo e está unicamente associada ao instrumento observador (sensor). Para valores de variância de medição elevados, o filtro será mais “lento” a confiar nas observações adquiridas. Contrariamente, o filtro revela-se mais “lesto” a acreditar nas observações para valores menores de variância de medida. A determinação da matriz \mathbf{Q} é geralmente um passo de maior dificuldade, já que, tipicamente, não há a possibilidade de observar directamente o processo que se está a estimar. Nesta situação, o método de tentativa e erro do valor de σ_w^2 revelar-se-á o mais eficiente. A variação das estimativas do processo é reflectida por este termo. Um valor muito pequeno pode resultar em estimativas tendenciosas, uma vez que o filtro será mais “lento” a reagir a variações, enquanto um valor elevado conduz a estimativas ricas em variações desnecessárias devido ao ruído de medida.

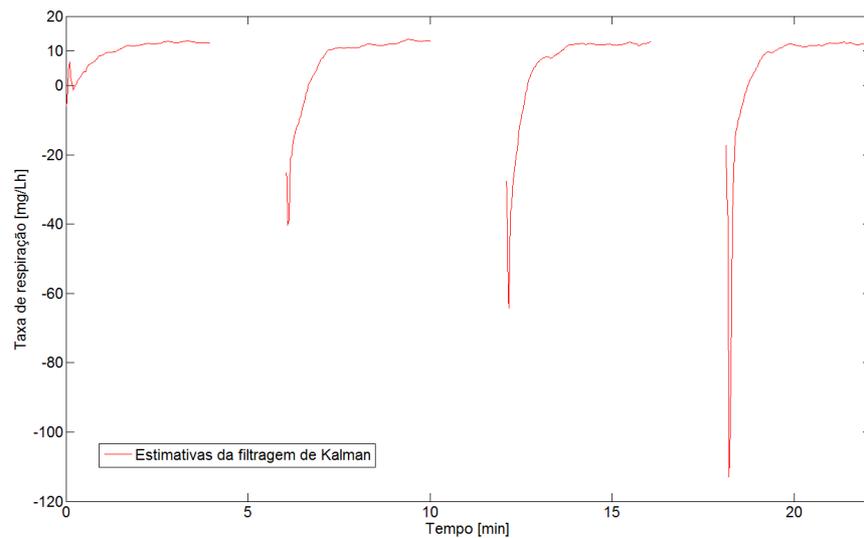
Durante a fase de aquisição (etapa 4) é de esperar que a taxa de respiração não varie substancialmente nesse período, mantendo-se praticamente constante. Escolhendo $\sigma_w = 0,001 / \Delta t$ as estimativas resultantes mostraram-se coerentes com o processo. Quanto à covariância do ruído de medição foi fixado um valor de $\mathbf{r} = \sigma_v^2 = 0,01$.

5.2.4. Resultados obtidos – exemplo

Na Figura 5.2 encontram-se ilustradas quatro amostragens exemplificativas com as respectivas estimativas de OD em (a) e da taxa de respiração em (b). Cada observação adquirida durante a etapa 4 contribui para uma nova iteração da filtragem de Kalman, ou seja, um novo ponto de estimação. No sinal filtrado verifica-se uma primeira fase de adaptação do filtro e sequente estabilização e seguimento do processo. Na Tabela 5.2 encontram-se registados os valores dos declives calculados nas quatro amostragens, bem como os valores médios de convergência do filtro de Kalman.



(a)



(b)

Figura 5.2: Sinal do sensor de OD e estimativas obtidas por filtragem de Kalman.

Tabela 5.2: Taxas de respiração estimadas referentes às amostragens ilustradas na Figura 5.2.

Amostra [min]	6	12	18	24
r_O [mg/Lh] – declive	15,282	14,845	14,725	14,625
r_O [mg/Lh] – filtragem de Kalman	12,457	12,448	11,925	12,052

5.3. Filtro suavizador de atraso

5.3.1. Introdução

Um método alternativo à inclusão da dinâmica do sensor na filtragem de Kalman será proceder à filtragem do sinal antes de se proceder à estimação da taxa de respiração. Neste encadeamento, será aplicado um filtro desenvolvido por Ahlén e Sternad, em 1989 [1], que visa reduzir a influência da dinâmica do sensor de OD e que já foi aplicado neste tipo de sensores em ETARs [19]. O algoritmo proposto pode ser encarado como um método simples para construção de filtros de Wiener realizáveis de tempo discreto. Segundo os autores, os resultados obtidos demonstram ser equivalentes à filtragem estacionária de Kalman e comparando com a formulação desta, em espaço de estados, os cálculos denotam ser menos complexos.

Pretende-se desenvolver um filtro que, baseado nas medidas do sensor (S_O^s), consiga exprimir o OD actual (S_O) presente na mistura. O problema será, portanto, encontrar um filtro que minimize o erro quadrático médio entre o OD real e o sinal filtrado, ou seja, minimizar:

$$E[S_O(t) - \hat{S}_O(t|t-m)]^2 \quad (5.16)$$

em que $\hat{S}_O(t|t-m)$ indica uma predição de $S_O(t)$ com base em dados obtidos até ao instante $t-m$. O filtro suavizador que se pretende realizar pressupõe que m seja negativo. Quanto mais negativo for o seu valor, menor será o erro final. Contudo, não há melhoramentos significativos a partir de um determinado valor de m .

De modo a alcançar uma solução óptima do filtro, é necessário um modelo de *input* e um modelo representativo do sensor, como se encontra representado no diagrama de blocos seguinte. Um modelo de entrada simples, que gera um sinal de deriva, será:

$$S_O(t) = \frac{1}{\Delta(q^{-1})} \cdot e(t) \quad (5.17)$$

onde $e(t)$ representa ruído branco de média nula e $\Delta(q^{-1}) = 1 - q^{-1}$ é um polinómio definido no operador de atraso q^{-1} .

Da análise do diagrama de blocos, apresentado na Figura 5.3, é possível descrever o modelo do sensor de OD pela equação:

$$S_0^s(t) = q^{-k} \cdot \frac{B(q^{-1})}{A(q^{-1})} \cdot S_0(t) + w(t) \quad (5.18)$$

em que k representa o número de períodos de atraso, $A(q^{-1})$ e $B(q^{-1})$ são polinómios e $w(t)$ é ruído branco de medição com média nula.

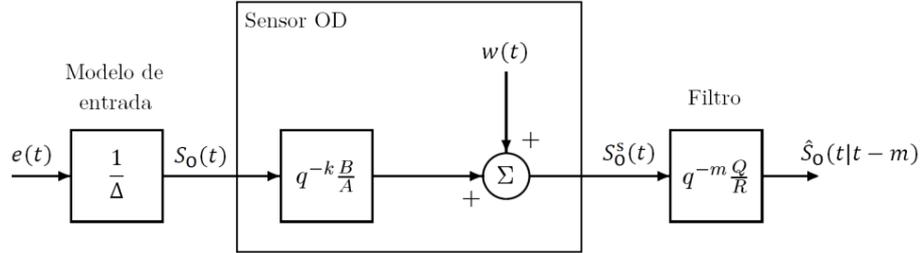


Figura 5.3: Diagrama de blocos do modelo de entrada, do sensor de OD e do filtro a calcular (adaptado de [1]).

Por seu lado, o filtro IIR (filtro digital com resposta ao impulso de duração infinita) que minimiza (5.16) é dado por:

$$\hat{S}_0(t|t-m) = q^{-m} \cdot \frac{Q(q^{-1})}{R(q^{-1})} \cdot S_0^s(t) \quad (5.19)$$

onde os polinómios $Q(q^{-1})$ e $R(q^{-1})$ são determinados através das equações de projecto definidas por Ahlén e Sternad:

$$r \cdot \beta \cdot \beta_* = B \cdot B_* + \rho \cdot A \cdot \Delta \cdot A_* \cdot \Delta_* \quad (5.20)$$

$$q^{m+k} \cdot B_* = r \cdot \beta_* \cdot Q_1 + q \cdot \Delta \cdot L_* \quad (5.21)$$

$$Q = Q_1 \cdot A \quad (5.22)$$

$$R = \beta \quad (5.23)$$

Nas expressões (5.20) a (5.23) o argumento (q^{-1}) foi omitido de modo a simplificar a escrita e compreensão das mesmas. Na equação (5.20) e (5.21) são utilizados alguns polinómios conjugados (assinalados com $*$). Considerando o caso geral $P = p_0 + p_1 \cdot q^{-1} + \dots + p_{n_P} \cdot q^{-n_P}$, o seu polinómio conjugado será então $P_* \triangleq p_0 + p_1 \cdot q + \dots + p_{n_P} \cdot q^{n_P}$.

A equação (5.20) é denominada por factorização espectral, onde β se trata de um polinómio estável (as suas raízes encontram-se no interior do círculo unitário) e mónico (o primeiro coeficiente do polinómio é igual a 1), r é um escalar e ρ traduz a relação sinal-ruído, que é normalmente um parâmetro projectado pelo utilizador. Na expressão (5.21) L trata-se de um polinómio auxiliar de cálculo.

Os graus dos polinómios presentes nas equações de projecto são dados por:

$$n\beta = \max\{nB, nA + 1\} \quad (5.24)$$

$$nQ_1 = \max\{-m - k, 0\} \quad (5.25)$$

$$nL = \max\{nB + m + k, n\beta\} - 1 \quad (5.26)$$

em que a notação nP representa o grau do polinómio P .

5.3.2. Identificação do modelo do sensor de OD

O cálculo do filtro não é realizado sem antes conhecer o modelo do sensor definido em (5.18). A dinâmica estudada nesta secção corresponde ao sensor Hamilton Visiferm DO ARC 120. Para a identificação do sistema foi escolhido um sinal de entrada do tipo binário aleatório, o que equivale a deslocar o sensor entre duas soluções com concentrações de OD diferentes durante intervalos de tempo arbitrários. As soluções representam o valor máximo (água arejada agitada) e mínimo (água arejada com sulfato de cobre e sulfito de sódio) de oxigénio presente no líquido. A sequência de transição do sensor entre as soluções e as leituras (adquiridas a cada 1,5 segundos) daí resultantes podem ser visualizadas na Figura 5.4, onde é evidente o comportamento típico de um sistema de primeira ordem. Na experiência realizada foi registado um ligeiro decremento do valor de OD na água arejada e o tempo de transferência do sensor entre as soluções (4 a 7 segundos) foi contabilizado.

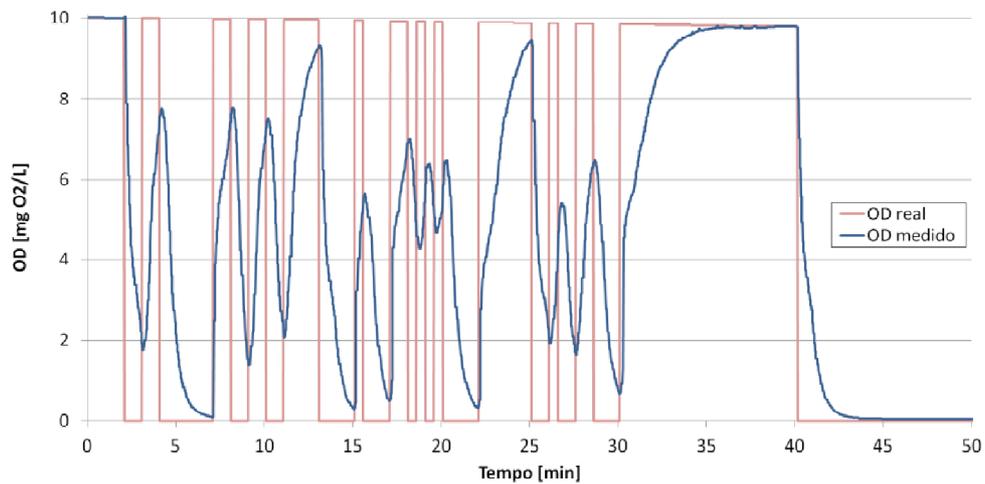


Figura 5.4: Experiência para identificação da dinâmica do sensor.

Ambos os sinais foram introduzidos na *toolbox* de identificação de sistemas do MATLAB, a fim de determinar um modelo linear paramétrico ARX do sensor pelo critério dos mínimos quadrados [31]. Como se pode observar na Figura 5.5, há uma melhoria ténue da representatividade do modelo determinado com o aumento do número de parâmetros a

considerar nos polinómios de A e B . Ainda assim, a escolha recaiu sobre o modelo de menor ordem, uma vez que se pretende calcular o filtro analiticamente, o que só acontece para $n\beta < 3$. Portanto, os seguintes parâmetros foram identificados:

$$A = A_0 + A_1q^{-1} = 1 - 0,96630q^{-1} \quad B = B_0 = 0,03202 \quad k = 4 \quad (5.27)$$

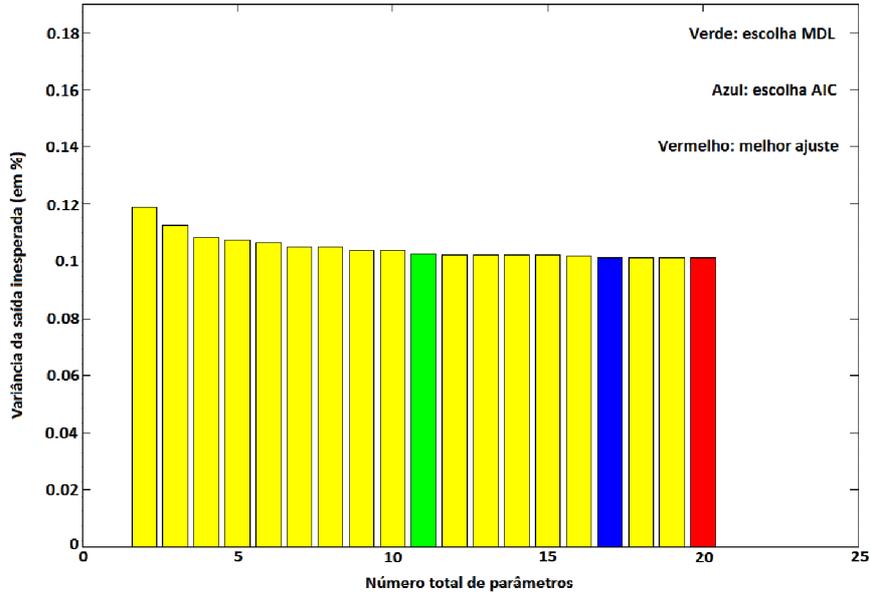


Figura 5.5: Relação entre a exactidão do modelo e o grau dos polinómios.

5.3.3. Cálculo do filtro

De acordo com as expressões (5.24) a (5.26) e escolhendo $m = -7$, o grau relativo a cada polinómio presente nas equações de projecto será: $n\beta = 2$, $nQ_1 = 3$ e $nL = 1$. Logo, é possível definir cada um deles como:

$$\beta = \beta_0 + \beta_1 \cdot q^{-1} + \beta_2 \cdot q^{-2} \quad (5.28)$$

$$Q_1 = Q_{10} + Q_{11} \cdot q^{-1} + Q_{12} \cdot q^{-2} + Q_{13} \cdot q^{-3} \quad (5.29)$$

$$L = L_0 + L_1 \cdot q^{-1} \quad (5.30)$$

em que $\beta_0 = 1$, em virtude de este ser um polinómio mónico.

Introduzindo os polinómios (5.27) na equação de factorização espectral, chega-se ao seguinte conjunto de equações:

$$\begin{aligned} &1: r \cdot (1 + \beta_1^2 + \beta_2^2) = B_0^2 + (1 - A_1 + A_1^2) \cdot 2 \cdot \rho \\ (q + q^{-1}): &\begin{cases} r \cdot (\beta_1 + \beta_1 \cdot \beta_2) = (A_1 - 1) \cdot (1 - A_1) \cdot \rho \\ r \cdot \beta_2 = -A_1 \cdot \rho \end{cases} \end{aligned} \quad (5.31)$$

Da resolução deste conjunto de equações, em ordem a qualquer um dos coeficientes, obtém-se duas soluções válidas, mas só uma delas garante que o polinómio β seja estável.

O parâmetro ρ foi afinado por tentativa e erro, sabendo que, para um ρ pequeno os resultados tendem a ser mais ruidosos, ao passo que para um ρ elevado a resposta tende a ser mais lenta a reagir a alterações de OD. Com a escolha de um $\rho = 10$ obtém-se então: $\beta_1 \approx -1,85319$, $\beta_2 \approx 0,86275$ e $r \approx 11,20017$.

Conhecendo o polinómio β , reúnem-se as condições para resolver a equação (5.21), obtendo o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} &1: \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &q^{-1}: \begin{bmatrix} \delta & \lambda & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \\ &q^{-2}: \begin{bmatrix} r & \delta & \lambda & 0 & -1 & 0 \end{bmatrix} \\ &q^{-3}: \begin{bmatrix} 0 & r & \delta & \lambda & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &q^{-4}: \begin{bmatrix} 0 & 0 & r & \delta & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &q^{-5}: \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & r & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \cdot \begin{bmatrix} Q_{10} \\ Q_{11} \\ Q_{12} \\ Q_{13} \\ L_0 \\ L_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ B_0 \end{bmatrix} \quad (5.32)$$

onde $\lambda = r \cdot \beta_2$ e $\delta = r \cdot \beta_1$. Deste sistema retiram-se os polinómios Q_1 e L :

$$Q_1 = 0,28330 + 0,00735 \cdot q^{-1} + 0,00530 \cdot q^{-2} + 0,00286 \cdot q^{-3} \quad (5.33)$$

$$L = 3,07157 - 2,73749 \cdot q^{-1} \quad (5.34)$$

Finalmente, o filtro será traduzido pela expressão seguinte:

$$\hat{S}_0(t|t+7) = q^7 \cdot \frac{Q_1 \cdot A}{1 - 1,85319 \cdot q^{-1} + 0,86275 \cdot q^{-2}} \cdot S_0^s(t) \quad (5.35)$$

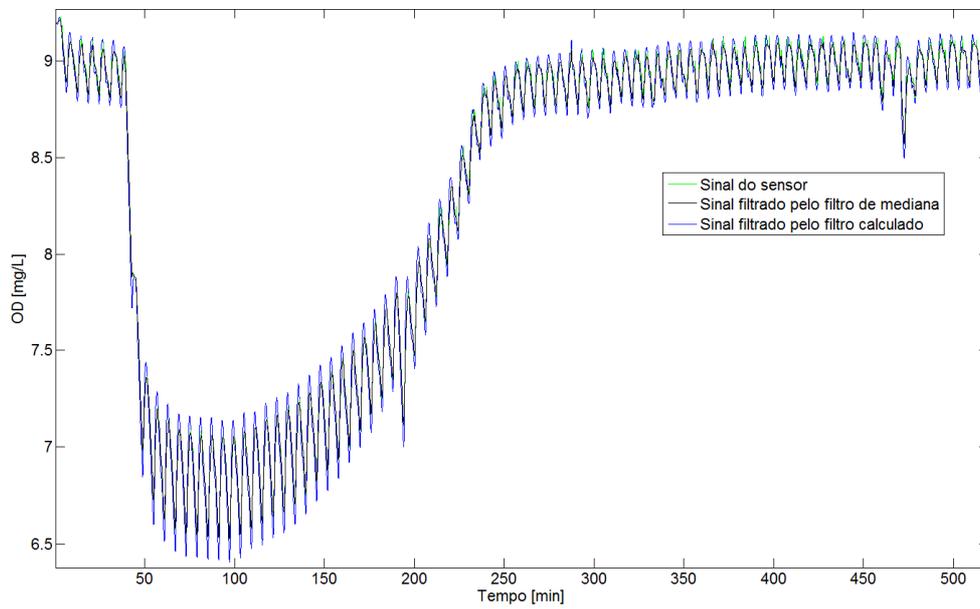
em que o numerador pode ser rescrito como:

$$Q_1 \cdot A = 0,28330 - 0,26640 \cdot q^{-1} - 0,00180 \cdot q^{-2} - 0,00226 \cdot q^{-3} - 0,00276 \cdot q^{-4} \quad (5.36)$$

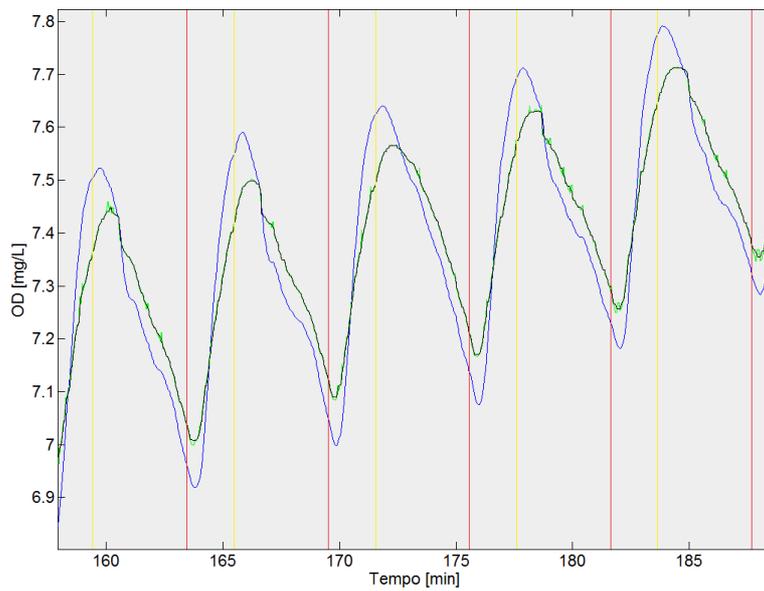
5.3.4. Resultados obtidos – exemplo

Um exemplo representativo do sinal filtrado, de cinco amostragens, pode ser observado em escala pormenorizada na Figura 5.6 (b). Em (a) foram omitidas as rectas verticais de delimitação de fases para facilitar a visualização. Ao sinal resultante da filtragem pode ser aplicado o método do declive, já descrito precedentemente, ou a filtragem de Kalman formulada

em (5.9). Na tabela em baixo figuram os valores da taxa de respiração estimados, pelo método do declive, com e sem recurso ao filtro (5.35).



(a)



(b)

Figura 5.6: Filtragem do sinal do sensor de OD pelo filtro calculado (a) com ampliação de uma secção em (b) de modo a facilitar a visualização dos resultados.

Tabela 5.3: Valor das taxas de respiração estimadas, a partir do declive do sinal, para o sinal com e sem filtragem do filtro calculado.

Amostra [min]	162	168	174	180	186
r_O [mg/Lh]	7,219	6,503	7,755	6,125	6,043
r_O [mg/Lh] com filtragem do sinal de OD adquirido com o filtro calculado	8,779	8,112	7,899	7,613	7,603

6

Estimativas de coeficientes e parâmetros do ASM1

Conteúdo

6.1. Aspectos práticos	56
6.2. Rendimento celular da biomassa heterotrófica	58
6.3. Fração da biomassa que origina produtos particulados	61
6.4. Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica	61
6.5. Taxa máxima específica do crescimento da biomassa heterotrófica	62
6.6. Coeficiente de meia-saturação para a biomassa heterotrófica	63

6.1. Aspectos práticos

Como já foi enunciado anteriormente, a escolha de um bom modelo é essencial para a caracterização fidedigna de um dado processo. No Secção 2.4 apresentou-se o AMS1 como um modelo acreditado pela comunidade internacional, conhecido pela sua sensibilidade, robustez e capacidade de descrição precisa dos processos biológicos compreendidos no tratamento de águas residuais. Contudo, essas características assentam, sobretudo, na escolha adequada dos valores dos parâmetros e coeficientes presentes nos modelos ASM. No quotidiano, o processo dificilmente se encontra nas condições ideais definidas, de modo a aplicar os valores presentes na Tabela 2.5, pelo que, a calibração dos modelos ASM se afigura de enorme importância, tendo em vista a obtenção de resultados mais exactos. A própria natureza biológica dos processos implica que as suas características sejam constantemente determinadas, dada a variabilidade destes termos, dependendo da composição, concentração, idade e histórico da mistura, da temperatura e do pH a que os processos ocorrem, das condições atmosféricas envolventes, da arquitectura do sistema, entre outros.

Na última década, a respirometria tornou-se rapidamente numa ferramenta popular para calibração dos modelos ASM. Isto deve-se essencialmente à sua sensibilidade, aptidão para monitorizar, a altas frequências (dependendo do tipo de respirómetro), amostras sem pré-tratamento e à relação (directa ou indirecta) de todos os componentes característicos dos processos com o balanço de oxigénio. Neste contexto, foram estimados alguns coeficientes e parâmetros do ASM1 com o intuito de testar e validar o respirómetro desenvolvido, bem como os métodos de cálculo aplicados.

Utilizaram-se, nos ensaios, amostras de biomassa proveniente da linha de recirculação da ETAR de Beirolas, que foi diluída em proporções distintas, consoante as experiências. A ETAR de Beirolas (ver Figura 6.1) situada na zona oriental do município de Lisboa, dentro do Parque das Nações, está preparada para recepcionar as águas residuais urbanas provenientes da zona oriental de Lisboa (Santa Maria dos Olivais, Marvila e Parque das Nações) e do concelho de Loures (Moscavide, Portela, Prior Velho, Unhos, Apelação, Camarate e Sacavém). Tem a capacidade para tratar um caudal médio de 54.500 m³/dia, que corresponde a uma população equivalente de cerca de 213.500 habitantes. Esta ETAR, da responsabilidade da SIMTEJO, S. A., entrou em funcionamento em Dezembro de 1989 com um tratamento de nível secundário por lamas activadas. Entre 1998 e 1999, foi submetida a obras de melhoramento que englobam o complemento das linhas de tratamento das fases líquida e sólida ficando dotada com um tratamento de nível terciário com desinfecção final. A intervenção contemplou ainda a instalação de um sistema de desodorização e de um processo de digestão anaeróbia de lamas e consequentemente aproveitamento energético do biogás aí produzido através da produção de

electricidade/energia eléctrica e energia térmica. A produção expectável de biogás diária ronda os 2800 m³, com conteúdo médio em CH₄ de 70%.



Figura 6.1: ETAR de Beirolas (fonte: Águas de Portugal [43]).

Previamente à descrição dos métodos experimentais executados convém salientar que:

⇒ Por limitação associada à distância da ETAR, e uma vez que se tratava de um exemplo académico, foram utilizadas somente duas amostras de biomassa para a realização de todas as experiências, ou seja, houve sempre um reaproveitamento da biomassa para a realização de duas ou mais experiências. O procedimento recomendado passaria por utilizar, pelo menos, uma amostra nova por experiência. Cada uma delas poderia ainda ser repetida duas ou três vezes, recorrendo a amostras renovadas de biomassa, para verificação de resultados;

⇒ Dependendo da actividade experimental, a combinação inicial de substrato/biomassa (S/X) pode ser crucial para a obtenção de estimativas fiáveis dos parâmetros. Nas experiências realizadas, não foi tomado especial cuidado com as concentrações utilizadas, porém, para os casos em que a biomassa foi reutilizada, houve a preocupação de realizar ensaios cujos fundamentos se afiguram menos dependes de valores precisos;

⇒ A componente referente à nitrificação foi desprezada, mesmo sem adição de inibidores, como o ATU, à mistura. Esta escolha permite diminuir o tempo necessário para as medições, reutilizar as lamas activadas e evitar o risco de inibição dos processos heterotróficos ou a adaptação para nitrificação [33];

⇒ Durante a realização dos ensaios respirométricos, os valores de temperatura e pH devem ser mantidos constantes, de modo a obter resultados mais rigorosos. Para tal, os valores destas grandezas devem ser monitorizados em contínuo e, caso se detectem variações, estes devem ser corrigidos (por exemplo, arrefecendo ou aquecendo a sala em que o ensaio se realiza ou o próprio tanque de arejamento). O instrumento desenvolvido no âmbito da presente dissertação não incorpora este tipo de controlo, apenas a monitorização destas grandezas;

⇒ Foi utilizado um substrato orgânico completamente biodegradável (acetato de sódio) em vez de águas residuais. Há evidências que levam a crer que a biomassa apresente um comportamento distinto perante este substrato. É possível que este substrato seja armazenado nas células e, neste caso, a carência de oxigénio representa apenas as necessidades de transporte do substrato e incorporação no material de armazenamento da célula e não a conversão completa em novas células [37]. Algumas das estimativas, consoante o parâmetro ou coeficiente, podem ser afectadas nestas circunstâncias;

⇒ Verificou-se, em certas ocasiões, a acumulação de biomassa na célula de medida (Figura 6.1). A partir desse momento, o grau de representatividade da amostra face à mistura presente no tanque de aeração diminui, pelo que os resultados daí resultantes serão igualmente menos representativos.

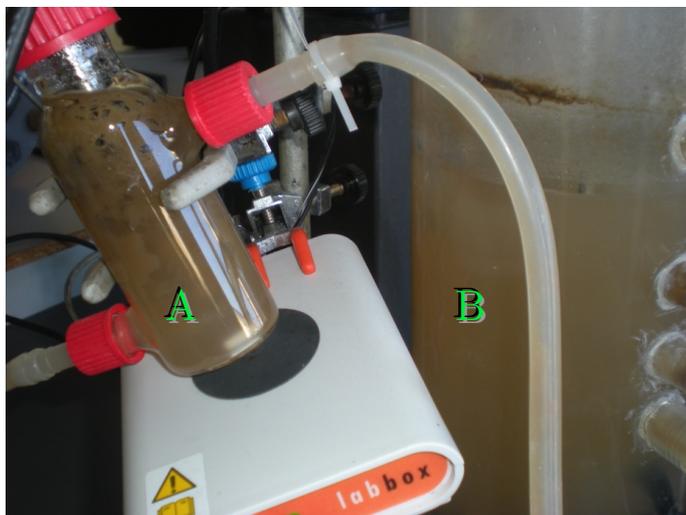


Figura 6.2: Nesta situação é bem visível a maior concentração de biomassa na célula de medida (A) face ao tanque de arejamento (B).

6.2. Rendimento celular da biomassa heterotrófica (Y_H)

O Y_H trata-se do parâmetro estequiométrico de maior importância, já que influencia não só a estimativa de produção de lamas e carência de oxigénio, bem como outros parâmetros cuja determinação requer o seu valor. Consequentemente, a obtenção de um valor preciso é de grande importância [37].

O cálculo deste parâmetro baseia-se na relação linear entre o substrato (S_S) adicionado e o oxigénio consumido (OC), como se mostra na seguinte expressão [28]:

$$OC = (1 - Y_H) \cdot S_S \quad (6.1)$$

Neste seguimento, foram adicionadas 4 quantidades diferentes, em ensaios intervalados, de acetato de sódio à amostra de biomassa, conforme se encontra listado na Tabela 6.1. A biomassa encontrava-se claramente no estado endógeno após ter sido usada anteriormente para o cálculo do parâmetro b_H (ver Secção 6.4). Os ensaios são constituídos por ciclos de amostragem com 4 minutos de aquisição e 2 minutos de recirculação da mistura entre a célula de medição e o tanque de arejamento, o que se traduz em um valor de declive, associado à taxa de respiração, a cada 6 minutos.

Tabela 6.1: Dados da experiência realizada para o cálculo do Y_H , num volume de trabalho de aproximadamente 3,7 L.

	Quantidade de substrato [g]	Concentração de CQO [mg/L]	Oxigénio consumido [mg/L]	
1º ensaio	0,474	64	23,92	Figura 6.2 a
2º ensaio	1,332	180	86,73	Figura 6.2 b
3º ensaio	4,44	600	229,97	Figura 6.2 c
4º ensaio	7,40	1000	325,42	Figura 6.2 d

Chega-se ao valor de oxigénio consumido através do cálculo aproximado da área total diferenciada a cinzento (respiração exógena e endógena) nos gráficos que figuram na Figura 6.2. Essa área é delimitada pelos polinómios ajustados e representa o oxigénio consumido enquanto há substrato para consumo na mistura. A biomassa volta à fase endógena assim que este finda. No caso (d), o tempo de aquisição não foi suficiente para visualizar o consumo completo do substrato, visto que os valores da taxa de respiração não atingiram o patamar endógeno. Optou-se por ajustar uma recta (representada a tracejado) às últimas aquisições obtidas de modo a projectar os dados em falta. Pode-se ainda distinguir facilmente, nos instantes iniciais dos casos (a), (b) e (c), o momento de adição de substrato ao reactor, que corresponde à mudança abrupta dos valores da taxa de respiração.

Registou-se um aumento linear do oxigénio consumido à medida que a quantia de substrato introduzida no sistema aumentava, como se pode verificar na Figura 6.3. O declive da recta, obtida por regressão linear, representa o valor de $(1 - Y_H)$ e portanto a estimativa final é $Y_H \approx 0,66$ mg CQO/mg CQO.

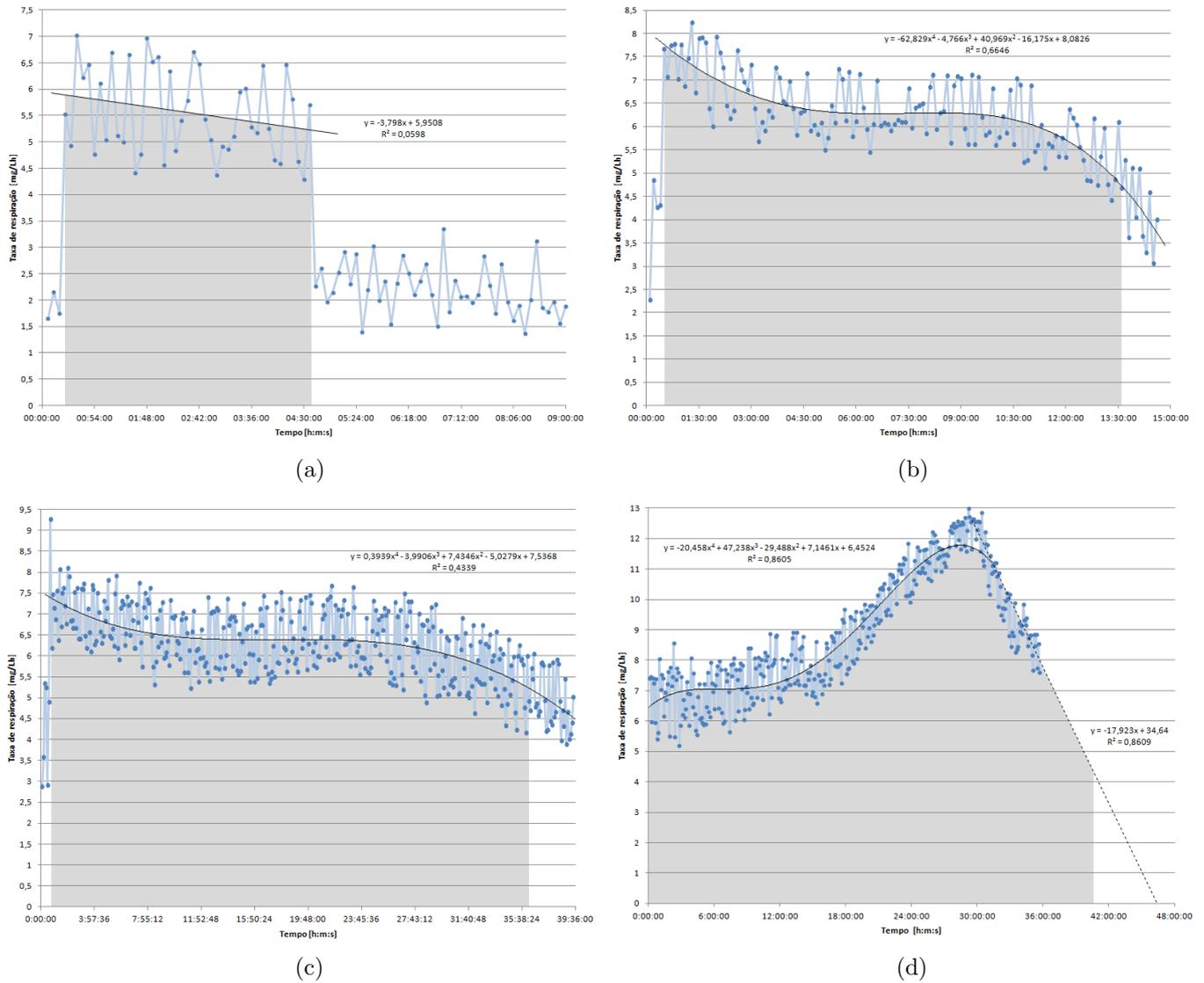


Figura 6.3: Respirogramas dos ensaios realizados com o objetivo de calcular o parâmetro Y_H .

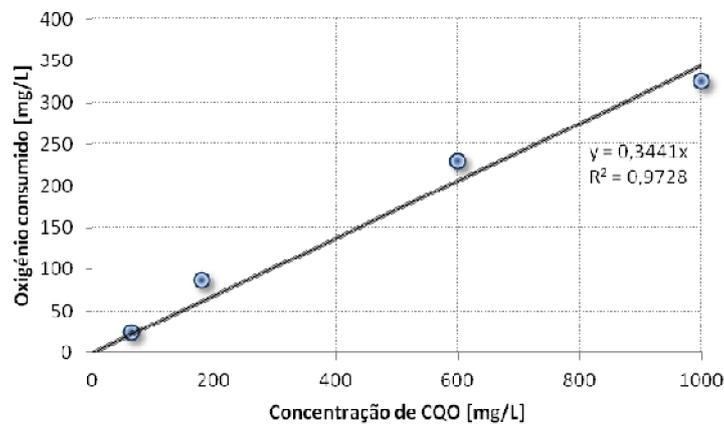


Figura 6.4: Relação linear entre o oxigênio consumido e o substrato adicionado.

6.3. Fracção da biomassa que origina produtos particulados (f_p)

Uma fracção da biomassa em decaimento é transformada em produtos particulados inertes. Tipicamente 20% da biomassa consiste de material inerte. Esta fracção biológica inerte é designada por f'_p . Contudo, nos modelos ASM, usa-se o coeficiente f_p calculado através da equação implícita seguinte [37]:

$$f_p = \frac{f'_p \cdot (1 - Y_H)}{1 - f'_p \cdot Y_H} \quad (6.2)$$

Utilizando o valor do Y_H , obtido no ponto anterior, tem-se $f_p \approx 0,078$.

6.4. Taxa de decaimento da biomassa heterotrófica (b_H)

O conceito morte-regeneração, adoptado nos modelos ASM, implica que os métodos clássicos para determinação do decaimento da biomassa não possam ser usados directamente. Semelhantemente ao f_p , este coeficiente tem de ser convertido da noção tradicional para o conceito de morte-regeneração [37]. A seguinte equação permite fazer essa conversão:

$$b_H = \frac{b'_H}{1 - Y_H \cdot (1 - f_p)} \quad (6.3)$$

O método respirométrico para a determinação da b'_H , proposto por Spanjers e Vanrolleghem (1995) [33], consiste na introdução de uma amostra de biomassa num reactor com arejamento contínuo e sem adição de substrato. A taxa de respiração (endógena) é medida várias vezes ao longo de um período de alguns dias. Para o presente trabalho, foi utilizada uma amostra de biomassa – MLVSS inicial = 7,5 g/L (valor aferido posteriormente e com rigor nos laboratórios do Instituto Superior Técnico) – diluída de aproximadamente 500 ml oriunda da ETAR de Beirolas (sedimentação secundária), à qual se juntou água arejada até completar o volume de trabalho (cerca de 3,7 L). As leituras da taxa de respiração foram realizadas durante um período de 7 dias. Os tempos de medida e recirculação da mistura variaram entre 8 a 12 minutos e 2 a 3 minutos, respectivamente.

O decaimento dos microrganismos em respiração endógena contidos no tanque de arejamento é expresso pela equação (6.4), cujo integral resulta na equação (6.5). Segundo o ASM1, durante a fase endógena, a taxa de respiração é dada pela igualdade (6.6) [20].

$$\frac{dX_H(t)}{dt} = -b'_H \cdot X_H(t) \quad (6.4)$$

$$X_H(t) = X_{H_0} \cdot e^{-b'_H \cdot t} \quad (6.5)$$

$$r_O = (1 - f'_p) \cdot b'_H \cdot X_H(t) \quad (6.6)$$

Considerando a equação (6.5) e a função logarítmica natural aplicada à igualdade (6.6), obtém-se a equação seguinte:

$$\ln(r_O) = \ln[(1 - f'_p) \cdot b'_H \cdot X_{H_0}] - b'_H \cdot t \quad (6.7)$$

A expressão (6.7) define uma recta de declive $-b'_H$ e ordenada na origem de valor igual a $\ln[(1 - f'_p) \cdot b'_H \cdot X_{H_0}]$. Observando a Figura 6.4, pode-se concluir que $b'_H \approx 0,14 \text{ dia}^{-1}$ e, com o respectivo cálculo, que $X_{H_0} \approx 1250 \text{ mg/L}$. Por fim, pode-se aplicar a equação (6.3) para realizar a conversão do valor para o conceito de morte-regeneração aceite nos modelos ASM, resultando $b_H \approx 0,36 \text{ dia}^{-1}$.

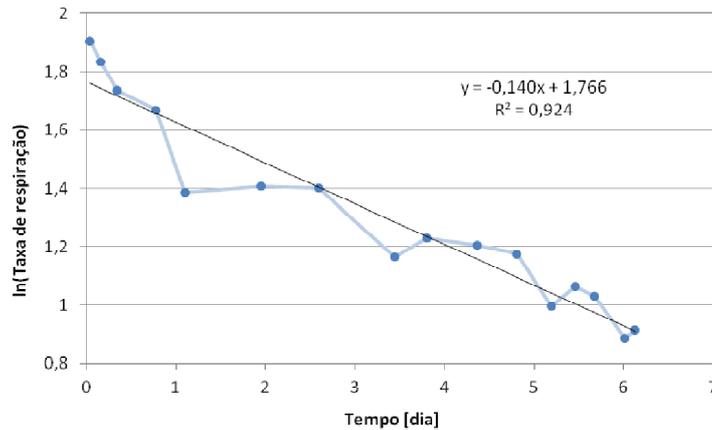


Figura 6.5: Logaritmo natural das estimativas de r_O obtidas durante um período de 7 dias.

6.5. Taxa máxima específica do crescimento da biomassa heterotrófica ($\hat{\mu}_H$)

A $\hat{\mu}_H$, em condições aeróbias, é em conjunto com o K_S , um parâmetro cinético essencial para caracterizar as capacidades de remoção de CQO e de produção de biomassa das lamas activadas sob estudo [28]. Para o cálculo deste parâmetro foi utilizada uma nova amostra de aproximadamente 250 ml de biomassa da ETAR de Beirolas, completando o tanque com água arejada até ao volume de trabalho. À mistura foi adicionado substrato, cerca de 3,7 g, de forma a alcançar um rácio elevado de substrato/biomassa. O ensaio respirométrico foi realizado com aquisições na célula de medida de 8 minutos e intervalos de 2 minutos a recircular a mistura.

Quando há OD e substrato suficientemente em excesso (ou seja, $S_S \gg K_S$), a relação entre o logaritmo neperiano da taxa de respiração e o tempo, no reactor, pode ser expressa como [2][20]:

$$\ln(r_0) = \ln\left(\frac{1 - Y_H}{Y_H} \cdot \hat{\mu}_H \cdot X_{H_0}\right) + (\hat{\mu}_H - b'_H) \cdot t \quad (6.8)$$

Uma vez mais, pode-se definir uma recta da expressão (6.8), em que o declive é dado por $\hat{\mu}_H - b'_H$. Da análise da Figura 6.5 e recorrendo ao valor da b'_H , já calculado, concluiu-se, portanto, que $\hat{\mu}_H \approx 2,30 \text{ dia}^{-1}$. Será de esperar que se consiga determinar um valor semelhante partindo da ordenada na origem, contudo, o valor de X_{H_0} é desconhecido para esta amostra de biomassa e os valores de r_0 adquiridos foram notavelmente baixos. Tendo em conta Y_H e $\hat{\mu}_H$, agora conhecidos, chega-se a $X_{H_0} \approx 43 \text{ mg/L}$, tratando-se, definitivamente, de uma concentração pequena de biomassa inicial.

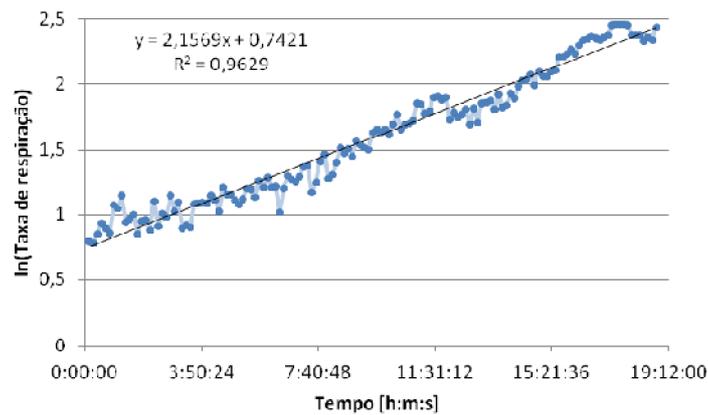


Figura 6.6: Logaritmo natural das estimativas de r_0 obtidas para determinar $\hat{\mu}_H$.

6.6. Coeficiente de meia-saturação para a biomassa heterotrófica (K_S)

A biomassa utilizada para o cálculo do $\hat{\mu}_H$ foi aproveitada para realizar as experiências necessárias à determinação deste parâmetro, que consistiu na introdução de diferentes concentrações de substrato e registo, individual, das taxas de respiração endógena ($r_{0_{end}}$) e taxa de respiração máxima exógena ($r_{0_{ex}}$). O método, descrito por Čech *et al.* em 1984 [6], baseia-se na equação de Monod (6.9) [28], em que K_S toma o valor da concentração de substrato para a qual $2 \cdot \mu_H = \hat{\mu}_H$.

$$\mu_H = \hat{\mu}_H \cdot \frac{S_S}{K_S + S_S} \quad (6.9)$$

As taxas de respiração exógenas ($r_{0_{ex}} = r_0 - r_{0_{end}}$), retiradas do patamar (do respirograma) que se estabelece após adição do substrato, foram divididas pela taxa máxima registada entre todos os ensaios ($\text{MAX}(r_{0_{ex}})$) de maneira a obter a taxa específica de crescimento relativa ($\mu_H/\hat{\mu}_H$), dependendo da concentração do substrato. Os dados referentes a cada ensaio apresentam-se tabelados de seguida (Tabela 6.2).

Tabela 6.2: Dados da experiência realizada para o cálculo do K_S , num volume de trabalho de aproximadamente 3,7 L.

	Quantidade de substrato [g]	r_O exógena máxima [mg/Lh]	$\frac{r_{O_{ex}}}{\text{MAX}(r_{O_{ex}})}$
1º ensaio	0,111	6,312	0,466
2º ensaio (Figura 5.6)	0,222	7,618	0,563
3º ensaio	0,370	8,851	0,654
4º ensaio	2,22	13,540	1

A representação gráfica dos 4 pontos, concernentes a cada ensaio, pode ser observada na Figura 6.6. Aos pontos foi ajustada uma curva logarítmica da qual se extraiu o valor do parâmetro em estudo, especificamente $K_S \approx 19,89$ mg CQO/L.

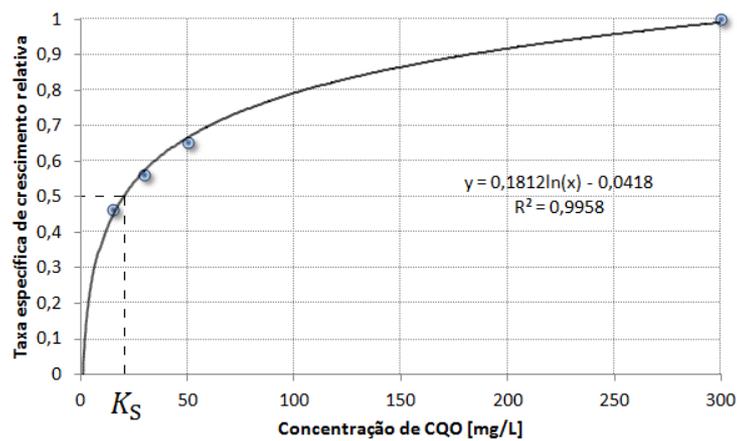


Figura 6.7: Relação entre a taxa específica de crescimento relativa ($\mu_H/\hat{\mu}_H$) e a concentração de substrato.

7

Análise e discussão de resultados

Conteúdo

7.1. Estratégias de cálculo da taxa de respiração	66
7.2. Estimativas do ASM1 determinadas	67

7.1. Estratégias de cálculo da taxa de respiração

O método do declive, sabendo, de antemão, que a r_0 é expressa pela equação (3.3), trata-se da estratégia mais lógica e elementar de aplicação imediata. As estimativas obtidas seguindo esta estratégia são, de forma geral, satisfatórias e confiáveis. A escolha do valor de percentagem do sinal do qual é retirado o declive teve como base a análise diligente de diversos ensaios realizados em condições distintas (relacionadas com a presença ou não de substrato e a concentração da biomassa). Este valor fornece informação suficiente para obter um declive representativo da respiração praticada na mistura e mostrou ser, na maioria dos casos, eficaz para evitar a zona de transição entre as etapas de recirculação e medição. Todavia, quando a taxa de respiração atinge níveis muito baixos, este método apresenta algumas limitações devido à forma que a curva de OD apresenta (Figura 7.1), o que leva a resíduos de ajuste elevados ou, por outras palavras, a um valor da r_0 ambíguo.

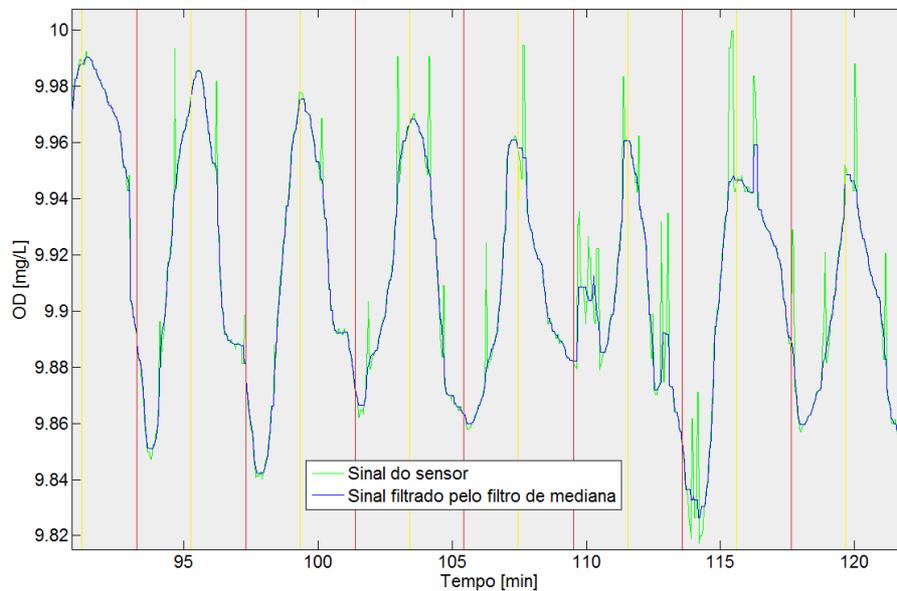


Figura 7.1: Medidas de OD adquiridas durante a fase endógena.

A filtragem de Kalman, por seu lado, apresentou resultados de maior regularidade em todas as situações testadas e com menores variações da r_0 entre medições consecutivas. Em comparação com o método do declive, a filtragem de Kalman tem ainda a vantagem de ser aplicada a cada nova aquisição, o que possibilita a disponibilização de uma estimativa da r_0 em tempo real (essa estimativa pode não ser representativa da realidade se o filtro estiver longe da convergência), ao passo que, na estratégia relativa ao declive do sinal, só se tem acesso à estimativa da taxa de respiração no final da fase de amostragem. Este carácter recursivo garante uma operação satisfatória num ambiente não estacionário, onde o conhecimento das características dos sinais a processar não é completo. Os resultados da filtragem são, no entanto, dependentes da afinação exercida sobre os parâmetros do filtro. A definição destes parâmetros

teve como fundamento os testes realizados. Este trata-se de um procedimento empírico demorado e só não foram realizados testes em maior número devido a limitações de tempo.

No que diz respeito ao filtro de Ahlén e Sternad, a ordem de grandeza das estimativas da taxa de respiração é claramente superior face aos métodos anteriores, o que se explica pelo ligeiro ganho quanto ao atraso de resposta e pela acentuação do declive do sinal de OD. De facto, este tipo de filtro demonstra ser pouco robusto em situações não estacionárias, como se trata da situação presente. Em ambientes não estacionários o algoritmo permite ao filtro a possibilidade de acompanhamento das variações estatísticas dos sinais, desde que sejam suficientemente lentas, requerendo conhecimento *a priori* da estatística dos dados a processar. Uma aproximação expedita, neste caso, poderá consistir na separação do processamento em duas etapas: primeiro estimam-se os parâmetros estatísticos dos sinais e, em segundo lugar, aplicam-se ao cálculo dos parâmetros do filtro. Nas aplicações em tempo real este processo poderá ser muito dispendioso, devido às suas exigências computacionais. Assim como o método do declive do sinal de OD, as estimativas da r_O , resultantes deste tipo de filtragem, só são conhecidas após término da etapa de aquisição. Devido às limitações mencionadas, este filtro não foi programado no *software* LabVIEW desenvolvido, sendo só aplicado às medições obtidas, *a posteriori*, em MATLAB, de modo a visualizar os seus efeitos e resultados. Nestes testes foram introduzidos diferentes valores de m , porém não se verificaram diferenças consideráveis para um valor deste termo menor que -7.

7.2. Estimativas do ASM1 determinadas

Como é evidente pela análise da Tabela 7.1, os valores dos parâmetros e coeficientes resultantes das actividades experimentais realizadas são, no cômputo geral, notavelmente satisfatórios, especialmente tendo em atenção as considerações referidas no início do Capítulo 6.

Os parâmetros cinéticos b_H e $\hat{\mu}_H$ são os que se distanciam mais dos valores definidos como padrão para o ASM1, mas enquadram-se perfeitamente nos intervalos delimitados por Jeppsson em 1996 [14], com base na literatura da especialidade, e assemelham-se a valores citados por outros autores [28]. Todavia, é imperativo deixar claro que estes parâmetros são os únicos (de entre os estudados) que apresentam valores típicos diferentes para as temperaturas de 20 °C e 10 °C. Nas experiências realizadas esta grandeza não foi manipulada e, portanto, as comparações entre os resultados obtidos e os valores padrão do ASM1 são desapropriadas.

No que diz respeito aos ensaios realizados para determinar o coeficiente estequiométrico Y_H , é possível visualizar nos respirogramas respectivos (ver Figura 6.3) que os valores da r_O apresentam oscilações expressivas. Contudo, nota-se que a amplitude destas oscilações tende a diminuir à medida que a taxa de respiração aumenta, como se pode observar na evolução do caso (d). À parte dos aspectos condicionantes relativos aos ensaios, estas oscilações podem estar

relacionadas com o método de estimação aplicado (método do declive do sinal), uma vez que, tal como foi mencionado anteriormente, o resíduo de ajuste é maior para valores baixos da r_0 . Quando a taxa de respiração é baixa, ou seja, o declive do sinal de OD é pouco acentuado, qualquer variação nas medições de OD é mais susceptível de alterar o resultado final. Os polinómios ajustados em cada respirograma têm em conta estas oscilações e fornecem o valor da r_0 médio que se pressupõe ser o mais próximo da realidade. Em nota final, pode ainda verificar-se para o caso (d), que a quantidade de substrato introduzida na mistura (7,4 g de acetato de sódio) aparenta ter sido excessiva e revelou-se mesmo inibidora, visto que a biomassa demorou tempo a responder com o aumento da r_0 . Assim, o valor de OC calculado, para esse caso, pode não ser o correcto, devido ao efeito inibidor, implicando que a estimativa do coeficiente Y_H resultante se afigure por excesso.

Tabela 7.1: Dados relativos às experiências realizadas e valores típicos do AMS1. As unidades são as das Tabela 2.3 e Tabela 2.4.

Símbolo	Estimativas resultantes das experiências respirométricas	Valores característicos		
		20 °C	10 °C	Literatura [14]
<i>Coefficientes estequiométricos</i>				
Y_H	0,660	0,67	0,67	0,38 – 0,75
f_P	0,078	0,08	0,08	–
<i>Parâmetros cinéticos</i>				
$\hat{\mu}_H$	2,30	6,0	3,0	0,6 – 13,2
b_H	0,360	0,62	0,20	0,05 – 1,60
K_S	19,89	20	20	5 – 225

Relativamente à experiência realizada para estimação do parâmetro cinético b_H , pode-se constatar que algumas das estimativas calculadas da taxa de respiração se distanciam em maior valor da recta ajustada (ver Figura 6.5). A origem deste desvio pode estar associada à variação de temperatura e pH da mistura em análise ao longo do tempo, já que estes factores são preponderantes para este estudo. Esta tratou-se da actividade experimental mais prolongada e, consequentemente, a mais lesada por este tipo de condicionantes.

Por fim, no que toca à determinação do parâmetro K_S , convém referir que, em rigor, dever-se-ia analisar uma concentração de CQO final mais elevada (> 300 mg/L), para se saber se a assíntota foi de facto atingida.

8

Conclusão

Conteúdo

8.1. Trabalho realizado	70
8.2. Trabalho futuro	71

8.1. Trabalho realizado

O trabalho aqui apresentado foi iniciado pela construção de raiz de um sistema respirométrico. Esta etapa exigiu mais tempo do que o previsto devido a deficiências detectadas no funcionamento dos sensores. O problema foi resolvido após análise paciente das tramas de comunicação entre o sensor e o computador. O resultado desta análise provou que o conversor USB – Modbus RS-485 era a causa da deficiência e houve necessidade de trocar esta peça. Ainda referente à etapa de construção do sistema físico, o projecto e preparação da caixa de comando revelou-se uma tarefa extensa e minuciosa. Menos complexa, mas igualmente trabalhosa, a montagem da tubagem da parte operativa concluiu esta etapa.

A etapa seguinte consistiu na implementação, em ambiente LabVIEW, de um programa de controlo e monitorização do procedimento respirométrico. A dificuldade aqui sentida residiu na carência de conhecimentos sólidos do *software* em causa, esta, no entanto, foi ultrapassada em virtude de um estudo empenhado e os objectivos traçados foram alcançados na sua totalidade.

No passo seguinte, procedeu-se ao estudo da dinâmica do sensor de OD com auxílio do *software* desenvolvido. Na literatura da especialidade consultada, verificou-se que os projectos respirométricos já desenvolvidos servem-se de sensores clássicos (sensores de membrana) para medição do OD. Desta perspectiva, a utilização do sensor óptico Hamilton (que ultrapassa a limitação inerente ao reduzido tempo de vida útil das membranas) pode ser vista como uma aplicação singular nesta área. O sensor apresentou tempos de resposta consideráveis, em comparação com os sensores clássicos, como já era expectável, com base nas informações do próprio fabricante. As leituras obtidas por este tipo de sensor são aceitáveis mas é necessário tomar as providências necessárias de forma a mitigar os efeitos prejudiciais introduzidos.

Por fim, quando ambas as partes do sistema (parte operativa e de comando) se encontravam a operar de forma correcta, em paralelo com o programa concebido, aplicaram-se diferentes estratégias de estimação da taxa de respiração, com base em diferentes técnicas. Estas técnicas foram implementadas no programa LabVIEW e foram bem sucedidas no processo de estimação. No que diz respeito à validade destas estimativas, efectuaram-se diversas experiências de modo a determinar alguns parâmetros caracterizadores dos processos bioquímicos. Os resultados obtidos são seguramente indicadores positivos do desempenho e funcionamento efectivo do respirómetro, sobretudo considerando os condicionamentos em que as experiências decorreram. Com base nesses mesmos resultados pode-se afirmar que o respirómetro desenvolvido, em conjunto com os métodos de cálculo aplicados, é capaz de produzir estimativas válidas e aptas a serem utilizadas em diferentes aplicações, como na monitorização do processo bioquímico, no estudo das diferentes variáveis incluídas no processo, na calibração dos modelos ASM, entre outras, esperando resultados finais congruentes.

8.2. Trabalho futuro

O respirómetro foi construído com o intuito de ser empregue em diversas aplicações e áreas de estudo, pelo que, neste aspecto se espera o uso continuado do mesmo. No entanto, no campo electrotécnico, este pode ser alvo de diversos aperfeiçoamentos e desenvolvimentos, como:

- ⇒ Considerar um modelo do sensor de OD mais aprofundado do que o apresentado em (3.2), o que implicará novos ensaios, perante situações distintas, com apoio a técnicas descritas em [21];
- ⇒ Ajustagem do filtro de Kalman com auxílio de resultados provenientes de um outro respirómetro calibrado. Pode-se afirmar que os resultados obtidos, durante os ensaios realizados, se afiguram condizentes com o previsto, mas podem não se tratar, rigorosamente, dos valores reais;
- ⇒ Modelação da taxa de respiração recorrendo a um modelo de passeio aleatório filtrado, em vez do modelo (5.9) definido neste trabalho. Segundo o relato de diferentes autores [19][32], este modelo consegue um melhor seguimento do processo. Os parâmetros do filtro de Kalman terão de ser reajustados nestas circunstâncias;
- ⇒ Estimação integral da r_O , por filtragem de Kalman, em ambas as fases – recirculação e aquisição (expressas pelas equações (3.4) e (3.3), respectivamente). Esta metodologia subentende a estimação adicional do parâmetro $K_L a$ e a determinação regular da concentração S_O^* . É necessário algum cuidado nesta aplicação dada a dificuldade inerente de estimação precisa destes termos e à variabilidade dos mesmos;
- ⇒ Testar a resposta do filtro projectado por Ahlén e Sternad para polinómios de maior ordem determinados com ajuda de *softwares* avançados de cálculo e estimar a dinâmica do sensor, combinando a informação recolhida de experiências realizadas com diversos géneros de *input*;
- ⇒ Em caso de falha de aquisição por parte do sensor, estimar o valor da leitura em vez de utilizar o valor da aquisição anterior;
- ⇒ Controlo de temperatura e pH da mistura. Como foi mencionado previamente, o controlo destas duas grandezas é essencial com vista à obtenção de melhores resultados. O ideal, no que respeita ao controlo de temperatura, seria manter toda a mistura a uma temperatura constante, contudo, uma aproximação mais simples consistiria em controlar a temperatura apenas na célula de medição. O controlo de pH poderia ser efectuado através de duas electroválvulas ligadas a soluções aquosas

básicas e ácidas. A dinâmica do sensor de pH teria, eventualmente, de ser considerada nesta aplicação.

No que tange ao sistema físico construído, podem verificar-se os seguintes melhoramentos:

- ⇒ Utilização de uma manta térmica em torno da célula de medição. Outra opção, mais dispendiosa e menos prática, seria a submersão total da parte operativa num banho térmico, como realizado em [28]. Esta aplicação pode ser utilizada em paralelo com o controlo de temperatura;
- ⇒ Rearranjo da estrutura da célula de medição de modo a evitar acumulação de biomassa na mesma (Figura 6.1);
- ⇒ Uso de uma tampa, ou similar, para fecho parcial do tanque de arejamento de maneira a diminuir a quantidade de mistura que evapora. De facto, a evaporação da mistura em estudo foi verificada, em quantias significativas, particularmente em experiências a decorrer durante períodos de tempo prolongados.

Referências

- [1] AHLÉN, A. e STERNAD, M. (1989). Optimal deconvolution based on polynomial methods. IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing, Vol. 37, No. 2, pp. 217–226.
- [2] ANDREOTTOLA, G., OLIVEIRA, E.L., FOLADORI, P., DALLAGO, L., PETERLINI, R. e CADONNA, M. (2005). Método respirométrico para o monitoramento de processos biológicos. Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 10, No. 1, pp. 14–23.
- [3] BERNARDES, R.S. (2000). Respirometria no controle de sistemas de tratamento de águas residuárias e como bioensaio no controle da poluição no meio aquático. Anais do I Simpósio de Recursos Hídricos do Centro-Oeste, Brasília, Distrito Federal, Brasil.
- [4] BRADLEY, J.W., KYOSAI, S., MATTHEWS, P., SATO, K. e WEBBER, M. (1992). Worldwide sludge management practices. Municipal Sewage Sludge Management: Processing, Utilization and Disposal. Technomic publishing company, Inc., Lancaster, USA.
- [5] CARLSSON, B. (1993). On-line estimation of the respiration rate in an activated sludge process. Water, Science and Technology, Vol. 28, No. 11-12, pp. 427–434.
- [6] ČECH, J.S., CHUDOBA, J. e GRAU, P. (1985). Determination of kinetic constants of activated sludge microorganisms. Water, Science and Technology, Vol. 17, Amsterdam, pp. 259–272.
- [7] COPP, J.B., SPANJERS, H., VANROLLEGHEM, P.A., KIM, C.W., BORTONE, P., VON SPERLING, M., NEWELL, B. e OLSSON, G. (2002). Respirometry in Control of the Activated Sludge Process: Benchmarking Control Strategies. Scientific and Technical Report No. 11. IWA Publishing, London, UK.
- [8] DAVID, R., WOUWER, A.V., VASEL, J.L. e QUEINNEC, I. (2009). Robust control of the activated sludge process. Biotechnology Progress, Vol. 25, No. 3, pp. 701–708.
- [9] FERNANDES, J.G.S., VAN HAANDEL, A., CAVALCANTI, P.F.F. e COURA, L.R. (2001). Utilização da respirometria no controle operacional de sistemas aeróbios de tratamento de águas residuárias – a experiência da CETREL. Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 6, No. 3-4, pp. 131–137.
- [10] FERREIRA, E.D.S., SOARES, S.R.A. e BERNARDES, R.S. (2002). Uso da respirometria para a caracterização de esgotos domésticos: aplicação, limites e apresentação de método simplificado. Anais do XXVIII Congresso Interamericano de Ingeniería Sanitaria y Ambiental. Cancun, México.
- [11] GERNAEY, A.K., PETERSEN, B., OTTOY, J. e VANROLLEGHEM, P. (2001). Activated sludge monitoring with combined respirometric–titrimetric measurements. Water Research, Vol. 35, No. 5, pp. 1280–1294.
- [12] HOLMBERG, U., OLSSON, G. e ANDERSSON, B. (1989). Simultaneous DO Control and Respiration Estimation. Water, Science and Technology, Vol. 21, Brighton, pp. 1185–1195.

- [13] JEPPSSON, U. e OLSSON, G. (1993). Reduced order models for on-line parameter identification of the activated sludge process. Water, Science and Technology, Vol. 28, No. 11-12, pp. 173–183.
- [14] JEPPSSON, U. (1996). Modelling aspects of wastewater treatment processes. Ph.D. dissertation, IEA, Lund Institute of Technology, Sweden.
- [15] JOO, D. e PARK, H. (1998). Control of the dissolved oxygen concentration in the activated sludge process. Environmental Engineering Research, Vol. 3, No. 2, pp. 115–121.
- [16] KLEEMAN, L. (1996). Understanding and applying Kalman filtering. Proceedings of the Second Workshop on "Perceptive Systems", Curtin University of Technology, Perth, Western Australia.
- [17] KÖSE, M.B. (2006). Mathematical model applications of activated sludge. Thesis for the Degree of Master, Dokuz Eylül University, İzmir, Turkey.
- [18] LIMA, F.S.B.C., SILVA, F.J.S., CATUNDA, S.Y.C. e NETO, J.V.F. (2011). Continuous-time identification of a PWM aerated bench scale activated sludge reactor using state-variable filters. IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC 2011), Hangzhou, China, pp. 1–5.
- [19] LINDBERG, C.F. (1997). Control and Estimation Strategies Applied to the Activated Sludge Process. Dissertation for the Degree of Doctor of Philosophy, Uppsala University, Sweden.
- [20] MAO, H., ZHAO, J., HUA, L. e HU, B. (2011). Determining parameters in Activated Sludge Model No.1 by respirometric experiments with sodium acetate as substrate. IEEE International Symposium on Water Resource and Environmental Protection (ISWREP 2011), Xi'an, Shaanxi Province, China, Vol. 1, pp. 1660–1663.
- [21] MARSILI-LIBELLI, S. e BARRESI, C. (2001). Dynamic compensation of dissolved oxygen probes for respirometry. IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation, Malmö, Sweden, pp. 131–138.
- [22] MARSILI-LIBELLI, S. e TABANI, F. (2002). Accuracy analysis of a respirometer for activated sludge dynamic modelling. Water Research, Vol. 36, pp. 1181–1192.
- [23] MOGENS, H., GUJER, W., MINO, T. e VAN LOOSDRECHT, M. (2000). Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. IWA Publishing, London, UK.
- [24] OLIVEIRA, P. (2008). Curso de automação industrial. ETEP, Lisboa, Portugal.
- [25] OPPENHEIM, A.V., WILLSKY, A.S. e NAWAB, S.H. (1996). Signals and Systems. Second edition, Prentice Hall International.
- [26] PETERSEN, B., GERNAEY, K., HENZE, M. e VANROLLEGHEM, P.A. (2000). Calibration of activated sludge models: A critical review of experimental designs. Biotechnology for the Environment. Focus on Biotechnology, Vol. 3, Kluwer Academic Publishers BV.
- [27] POMBO, S.C.M.A. (2010). Contributo para a utilização de modelos de simulação dinâmica no dimensionamento de processos de lamas activadas. Tese de Mestrado, Faculdade de Ciências e Tecnologia, Universidade Nova de Lisboa, Portugal.

- [28] SAENSING, P. e KANCHANATAWEE, S. (2009). Development of combined ultimate hybrid respirometer-titrate meter to estimate kinetic parameters of activated sludge. Suranaree Journal of Science and Technology, Vol. 16, No. 3, pp. 221–233.
- [29] SILVA, F.J.S., CATUNDA, S.Y.C., NETO, J.V.F. e VAN HAANDEL, A.C. (2010). Dissolved oxygen PWM control and oxygen uptake rate estimation using Kalman Filter in activated sludge systems. IEEE International Instrumentation and Measurement Technology Conference (I2MTC 2010), Austin, Texas, USA, pp. 579–584.
- [30] SOARES, S.R.A., MACHADO, A.F., OLIVEIRA, D.R. e BERNARDES, R.S. (2001). Perfil respirométrico de reator biológico em sistema de lodos ativados com remoção de nutrientes. 21º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. João Pessoa, ABES.
- [31] SÖDERSTRÖM, T. e STOICA, P. (1989). System Identification. Prentice Hall, Upper Saddle River, New Jersey, USA.
- [32] SOTOMAYOR, O.A.Z., PARK, S.W. e GARCIA, C. (2002). Software sensor for on-line estimation of the microbial activity in activated sludge systems. ISA TRANSACTIONS, Vol. 41, pp. 127–143.
- [33] SPANJERS, H. e VANROLLEGHEM, P. (1995). Respirometry as a tool for rapid characterization of wastewater and activated sludge. Water, Science and Technology, Vol. 31, No. 2, pp. 105–114.
- [34] SPANJERS, H., VANROLLEGHEM, P.A., OLSSON, G. e DOLD, P.L. (1998). Respirometry in Control of the Activated Sludge Process: Principles. Scientific and Technical Report No. 7. IAWQ, London, UK.
- [35] TREMIER, A., DE GUARDIA, A., MASSIANI, C., PAUL, E. e MARTEL, J.L. (2005). A respirometric method for characterizing the organic composition and biodegradation kinetics and the temperature influence on the biodegradation kinetics, for a mixture of sludge and bulking agent to be co-composted. Bioresource Technology, Vol. 96, pp. 169–180.
- [36] VAN LOON, G.W. e DUFFY, S.J. (2005). Environmental Chemistry: A Global Perspective. Second edition, Oxford University Press, USA.
- [37] VANROLLEGHEM, P.A., SPANJERS, H., PETERSEN, B., GINESTET, P. e TAKACS, I. (1999). Estimating (combinations of) Activated Sludge Model No. 1 parameters and components by respirometry. Water, Science and Technology, Vol. 39, No. 1, pp. 195–214.
- [38] VANROLLEGHEM, P.A. (2002). Principles of respirometry in activated sludge wastewater treatment. Proceedings International Workshop on Recent Development in Respirometry for Wastewater Treatment Plant Monitoring and Control, Taipei, Taiwan, pp. 2/1–20.
- [39] WELJERS, S. (2000). Modelling, identification and control of activated sludge plants for nitrogen removal. Ph.D. Thesis, Eindhoven University of Technology, Netherlands.
- [40] WELCH, G. e BISHOP, G. (2001). An introduction to the Kalman filter. Technical Report, TR 95-041, University of North Carolina at Chapel Hill, USA.

- [41] WIMBERGER, D. e RODARTE, C.V. (2005). Online monitoring of an aerobic SBR process based on dissolved oxygen measurement. Congresso Mundial IFAC, Praga, Rep. Checa.
- [42] *Activated Sludge*. (18 de Julho de 2011). Acedido em Agosto de 2011, de Wikipedia: http://en.wikipedia.org/wiki/Activated_sludge.
- [43] *Agua de Portugal*. (Setembro de 2011). Acedido em Outubro de 2011, de: <http://www.adp.pt/>.
- [44] *INSAAR*. (Agosto de 2011). Acedido em Agosto de 2011, de: <http://insaar.inag.pt/>.
- [45] *The Modbus Organization*. (2011). Acedido em Julho de 2011, de: <http://www.modbus.org/>.

