

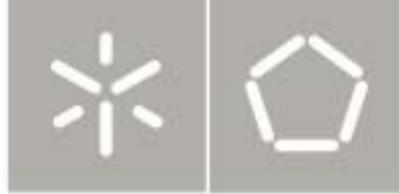


**Universidade do Minho**  
Escola de Engenharia

Isabel Alexandra Costa Pinho do Espírito Santo

**Desenho Óptimo de Estações de Águas Residuais  
Através da Modelação de Funções Custo**

Março de 2007



**Universidade do Minho**  
Escola de Engenharia

Isabel Alexandra Costa Pinho do Espírito Santo

**Desenho Óptimo de Estações de Águas Residuais  
Através da Modelação de Funções Custo**

Tese de Doutoramento em Engenharia de Produção e  
Sistemas, Área de Métodos Numéricos e Estatísticos

Trabalho efectuado sob a orientação de

**Professora Doutora Edite Manuela da Graça Pinto Fernandes**

**Professora Doutora Maria Madalena Teixeira de Araújo**

## DECLARAÇÃO

**Nome:** ISABEL ALEXANDRA COSTA PINHO DE ESPÍRITO SANTO

**Endereço Electrónico:** iapinho@dps.uminho.pt    **Telefone:** 933 254 321

**N.º do Bilhete de Identidade:** 10060302

**Título da Tese de Doutoramento:**

Desenho Ótimo de Estações de Águas Residuais Através da Modelação de Funções Custo

**Orientadores:**

Professora Doutora Edite Manuela da Graça Pinto Fernandes

Professora Doutora Maria Madalena Teixeira de Araújo

**Ano de conclusão:** 2007

**Ramo de Conhecimento do Doutoramento:**

Engenharia de Produção e Sistemas, Área de Métodos Numéricos e Estatísticos

É AUTORIZADA A REPRODUÇÃO INTEGRAL DESTA TESE, APENAS PARA EFEITOS DE INVESTIGAÇÃO,  
MEDIANTE DECLARAÇÃO ESCRITA DO INTERESSADO, QUE A TAL SE COMPROMETE.

Universidade do Minho,    /    /

Assinatura: \_\_\_\_\_

Ao Fernando e ao Paulo.



# Agradecimentos

Depois de muitos meses dedicados ao trabalho que culmina nesta tese, é com alguma emoção que me sento para escrever estas poucas linhas de agradecimento a todos que, de alguma forma me ajudaram a levar a bom porto esta tarefa.

O primeiro e maior agradecimento vai, sem qualquer dúvida, para a minha orientadora Professora Doutora Edite Fernandes. Muito para além das suas "obrigações" de orientadora de grande competência, foi sempre uma amiga preocupada e atenta durante todas as fases do trabalho. Tudo o que aprendi com ela vai muito para além do que é exposto nesta tese. Espero um dia saber orientar um estudante meu tal e qual ela o fez comigo.

Quero agradecer também à minha segunda orientadora, a Professora Doutora Madalena Araújo, cuja orientação foi também de grande competência, em particular, pelas visitas que organizou a várias empresas, fundamentais para a recolha de dados e constatação da realidade que se vive no tratamento de efluentes e na parte de engenharia de custos, que permitiu formular a função custo.

Ao Professor Doutor Eugénio Ferreira, com quem tive também o prazer de trabalhar, o meu muito obrigada. Atento ao desenrolar do trabalho, teve um tempo para mim sempre que lho solicitei. Sem dúvida que a tarefa de estudar os processos biológicos teria sido muito complicada sem a sua colaboração.

Ao Doutor Ismael Vaz, um grande obrigada. Além de brilhante na programação - muito do que aprendi lho devo - foi de uma amizade desinteressada incomparável. A sua ajuda foi preciosa no desenvolvimento do *solver* e na resolução de todas as pequenas questões informáticas que foram surgindo.

Aos meus colegas do subgrupo de Métodos Numéricos e Estatísticos, agradeço o apoio sempre manifestado, em particular quando foi necessário substituírem-me nas aulas.

O *solver* apresentado nesta tese teve como primeira versão uma codificação do algoritmo feita pelo Engenheiro Rodolfo Carvalhido, a quem agradeço também.

Ao meu marido, Paulo, agradeço tudo. Para além da revisão final da tese, acreditou sempre que eu era capaz, mesmo nos momentos em que eu duvidava e proporcionou-me estabilidade emocional que me permite, neste momento, pensar no doutoramento como uma etapa de trabalho prazenteiro.

À empresa Factor Ambiente, em especial aos Engenheiros Isabel Assunção e Henrique Assunção, um muito obrigada por terem acreditado no meu trabalho e me terem fornecido, sem qualquer reserva, todos os dados de que precisei.

Agradeço à Universidade do Minho pelos três anos e meio de dispensa de serviço docente, sem a qual teria sido difícil levar a bom termo esta tese.

# Resumo

Uma das grandes preocupações actuais prende-se com a preservação do meio ambiente. Em particular, no caso do tratamento de efluentes líquidos domésticos e/ou industriais, cujo impacto ambiental é muito significativo, é conveniente fazer-se uma análise detalhada aos efluentes em causa e aos processos de tratamento disponíveis, bem como proceder-se a um estudo económico, de modo a que os custos, à partida muito elevados, possam ser minimizados.

Assim, o objectivo desta tese é determinar o desenho óptimo de uma estação de tratamento de águas residuais (ETAR), de tal forma que os custos de investimento e operação sejam minimizados. Os processos envolvidos, em particular os relacionados com o tratamento secundário - um sistema de lamas activadas -, foram modelados de modo a serem determinadas as equações matemáticas que correspondem ao problema de optimização. Foram obtidas algumas funções custo a partir de dados reais fornecidos por uma empresa construtora de ETARs em Portugal.

O processo de modelação centrou-se no tanque arejador e no sedimentador secundário, tendo este sido objecto de um estudo mais detalhado. Para além das normas ATV e do modelo da dupla exponencial (DE), foi analisado um modelo combinado destes dois e testado numa ETAR real que está a ser instalada no norte interior de Portugal. Os resultados obtidos são encorajadores, tendo-se verificado que este modelo não só origina um desenho equilibrado como é mais robusto que os outros dois, se usados em separado, quando testados por simulação.

Para além do sistema de lamas activadas, incluiu-se ainda no procedimento de optimi-

zação o tratamento e deposição final das lamas em excesso. Foi analisada a contribuição deste tratamento para o custo total da ETAR.

Na presença de funções não diferenciáveis, que foram encontradas nas equações matemáticas do modelo DE, é mais adequado usar-se uma técnica de optimização que não requer o uso de derivadas. Por este motivo implementou-se e testou-se um algoritmo de pesquisa em padrão generalizada. Este algoritmo é baseado numa função Lagrangeana aumentada de modo a obter-se uma solução que satisfaça as restrições de igualdade e desigualdade do problema. Os resultados experimentais são bastante animadores e originam desenhos de ETARs bastante atractivos em termos económicos.

Nesta tese conduz-se um procedimento de optimização, que é pouco comum no desenho de ETARs. Este procedimento inclui uma função objectivo - a função custo obtida através de dados reais - e restrições provenientes da modelação do sistema de lamas activadas. Propõe-se um modelo inovador para o sedimentador secundário que permite ultrapassar as limitações dos modelos tradicionais ATV e DE. No entanto, devido à presença de funções não diferenciáveis provenientes do modelo DE, desenvolveu-se um novo algoritmo de optimização de pesquisa em padrão, adaptado a problemas com todo o tipo de restrições, que não recorre a derivadas. Este algoritmo foi codificado na linguagem de programação C e deu origem a um *solver* que inclui uma interface de ligação ao AMPL.

# Abstract

One of the main concerns nowadays is environmental preservation. In particular, for domestic and/or industrial wastewater treatment, with significant environmental impact, a careful analysis on the corresponding effluents and of the available treatment processes, as well as an economic study should be conducted, so that the associated high costs can be minimized.

Thus, the aim of this thesis is to determine the optimal design of a wastewater treatment plant (WWTP) in a way that the investment and operational costs are minimized. The involved processes, in particular those related with the secondary treatment - an activated sludge system - were modelled in order to obtain the mathematical equations of the corresponding optimization problem. Some cost functions were obtained using real data collected from a WWTP company builder in Portugal.

The modelling process took into account the aeration tank and the secondary settler, being the latter subject to a detailed study. Besides the ATV design procedure and the double exponential model (DE), a combination of these two models was analyzed and tested in a real WWTP being installed in the interior north of Portugal. The obtained results are encouraging, and it was observed that this model not only gives an equilibrated design, as it is more robust than the other two used separately, when tested by simulation.

Besides the activated sludge system, the treatment and final disposal of the wasted sludge was also included in the optimization procedure. Its contribution to the WWTP total cost was analyzed.

In the presence of non-differentiable functions as encountered in the mathematical equa-

tions involved in the DE model, a derivative-free optimization technique is the most appropriate. So, a generalized pattern search algorithm was implemented and tested. This algorithm relies on an augmented Lagrangian function in order to obtain a solution that satisfies the equality and inequality constraints of the problem. The experimental results are very stimulating and give economically attractive WWTP designs.

In this thesis an optimization procedure, which is not very common in WWTP designs is conducted. This procedure includes an objective function - the cost function obtained with real data - and constraints originating from the activated sludge system modelling. An innovative model for the secondary settler that is able to overcome the disadvantages of the two traditional models ATV and DE is proposed. However, due to the non-differentiable equations present in the DE model, a new pattern search optimization algorithm, adapted to all types of constraints, which does not require any derivative information, is developed. This algorithm was coded in the C programming language and originated a solver that includes an interface to AMPL.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>v</b>
<b>Resumo</b>	<b>vii</b>
<b>Abstract</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Introdução ao problema . . . . .	1
1.2 Motivação . . . . .	6
1.3 Contribuições . . . . .	6
1.4 Estrutura da tese . . . . .	9
<b>2 O sistema de lamas activadas</b>	<b>11</b>
2.1 Introdução . . . . .	11
2.2 Tanque arejador . . . . .	12
2.2.1 O modelo ASM1 . . . . .	13
2.2.2 Experiências preliminares . . . . .	19
2.3 Sedimentador secundário . . . . .	26
2.3.1 Funções do sedimentador . . . . .	26
2.3.2 Modelos de sedimentadores secundários . . . . .	30
<b>3 Funções custo</b>	<b>33</b>
3.1 Introdução . . . . .	33

3.2	Noções básicas de engenharia de custos . . . . .	34
3.3	Funções custo na literatura . . . . .	36
3.4	Funções custo obtidas através de dados reais . . . . .	38
3.4.1	Tanque arejador . . . . .	39
3.4.2	Sedimentador secundário . . . . .	40
3.4.3	Tratamento das lamas . . . . .	41
3.4.4	Resultados . . . . .	43
3.5	Programação geométrica . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Sedimentador secundário</b>	<b>47</b>
4.1	Introdução . . . . .	47
4.2	Ponto de separação simples . . . . .	47
4.2.1	Clarificação perfeita . . . . .	47
4.2.2	Saída de sólidos no effluente . . . . .	52
4.3	Modelo ATV . . . . .	56
4.3.1	Resultados com dados do simulador GPS-X . . . . .	58
4.3.2	Resultados com dados reais . . . . .	65
4.4	Modelo da dupla exponencial . . . . .	70
4.5	Combinação dos modelos ATV e DE . . . . .	73
4.5.1	Introdução . . . . .	73
4.5.2	Resultados . . . . .	74
4.5.3	Comparação dos modelos . . . . .	76
4.5.4	Resultados de experiências incluindo o tratamento de lamas . . . . .	81
<b>5</b>	<b>Método de pesquisa em padrão</b>	<b>85</b>
5.1	Introdução . . . . .	85
5.2	Pesquisa em padrão com limites simples . . . . .	88
5.2.1	O padrão . . . . .	89
5.2.2	Movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves . . . . .	90

5.2.3	Algoritmo de pesquisa em padrão generalizada com limites simples	94
5.2.4	Convergência . . . . .	96
5.2.5	Admissibilidade . . . . .	100
5.3	Método da Lagrangeana aumentada . . . . .	101
5.3.1	Convergência . . . . .	107
5.4	Resultados . . . . .	112
5.4.1	Problemas acadêmicos . . . . .	113
5.5	Problemas reais . . . . .	118
<b>6</b>	<b>Conclusões e trabalho futuro</b>	<b>123</b>
6.1	Conclusões . . . . .	123
6.2	Trabalho Futuro . . . . .	125
	<b>Apêndices</b>	<b>129</b>
	<b>A Notação e unidades</b>	<b>131</b>
	<b>B Glossário</b>	<b>135</b>
	<b>C Exemplos de funções custo na literatura</b>	<b>143</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>145</b>



# Capítulo 1

## Introdução

Neste capítulo introduz-se a problemática que se pretende tratar ao longo da tese. O trabalho realizado na optimização de ETARs é escasso e o que existe é baseado essencialmente em simulações. Fala-se da motivação que levou ao desenvolvimento desta investigação, bem como a contribuição da mesma no panorama actual desta área. Por fim apresenta-se a estrutura da tese.

### 1.1 Introdução ao problema

A deterioração acentuada do meio ambiente, em particular dos recursos hídricos, motivada pela explosão demográfica e pelo progresso industrial insustentáveis, conduziram a uma consciencialização gradual e global, que se repercutiu na legislação ambiental e na emergência de uma cidadania ecológica.

A actuação governamental e autárquica incidiu primeiramente sobre as empresas potencialmente poluidoras, localizadas em regiões densamente povoadas do litoral de Portugal. Importa igualmente alargar essas acções a outras regiões, no devido respeito pelas especificidades locais. Em particular, a região de Trás-os-Montes, no interior norte do país, apresenta complexidades próprias uma vez que, para além dos efluentes maioritariamente domésticos, alberga a designada "zona quente", região produtora de vinhos de boa qualidade por parte de adegas cooperativas, com implicações previsíveis na alteração sazonal das águas residuais, aos níveis do caudal e carga poluente (época das vindimas - Outu-

bro/Novembro).

Neste contexto, a instalação de uma estação de tratamento de águas residuais (ETAR) ou reformulação de uma já existente, requer um estudo económico pormenorizado e cuidado de todos os processos aí envolvidos. Para o tipo de efluente em causa, deve calcular-se a combinação que leva a um desenho óptimo (mais eficiente/menos dispendioso), recorrendo a modelos matemáticos que descrevam a evolução no sistema das características físicas, químicas e biológicas da água a tratar. Já nos anos 70 os elevados custos, quer de construção, quer de operação, associados ao tratamento das águas ameaçavam a sobrevivência de algumas indústrias menos preparadas [67]. Ainda hoje isso acontece. Muitas empresas, para conseguirem colocar no mercado os seus produtos a preços competitivos, têm que abdicar de um tratamento de efluentes adequado.

De igual modo, em municípios de pequenas dimensões, cujos rendimentos e/ou financiamentos são escassos e a densidade populacional é baixa, é de todo conveniente que se conduza este processo com todo o cuidado e pormenor possíveis de modo a evitar custos excessivos. No caso da região que é objecto de estudo nesta tese, acresce o facto de os efluentes serem complicados devido às alterações sazonais já antes referidas.

Há uma série de etapas que devem ser consideradas no processo da modelação matemática e optimização económica de ETARs, que podem ser descritas, de modo resumido, da seguinte maneira:

- o esquema genérico das instalações que deverão constituir a ETAR;
- os modelos matemáticos dos processos fundamentais que ocorrem na ETAR;
- os modelos matemáticos para cada um dos processos unitários;
- os modelos matemáticos globais que descrevem a operação da estação como um todo;
- a selecção dos custos que poderão ser optimizados;
- a formulação de funções que descrevem os custos de cada processo unitário;
- a optimização económica da estação, com base nos referidos modelos globais [67].

Torna-se, assim, muito importante a definição de métodos objectivos para avaliar o projecto e a operação das ETARs como um todo, quer por motivos económicos, quer por razões ambientais. Na maior parte das vezes, as dificuldades neste tipo de trabalho surgem na definição de um objectivo específico da ETAR que possa ser quantificado e, mais ainda, na medição do esforço exigido para que tal objectivo seja alcançado.

É preciso ter em consideração que os objectivos de minimizar o custo e maximizar o desempenho numa ETAR são concorrentes. Uma forma de resolver este problema é fixar um dos objectivos num valor aceitável e otimizar o outro.

A tecnologia de informação e as potencialidades computacionais atingiram níveis tais que grandes quantidades de informação podem ser analisadas de forma eficiente usando métodos sofisticados de interpretação, o que permite enfrentar um problema à partida muito complexo. Por outro lado, estão disponíveis novos sensores e técnicas de medição que produzem dados que são fidedignos. Os novos meios de comunicações digitais tornam possível distribuir esses dados de forma simples.

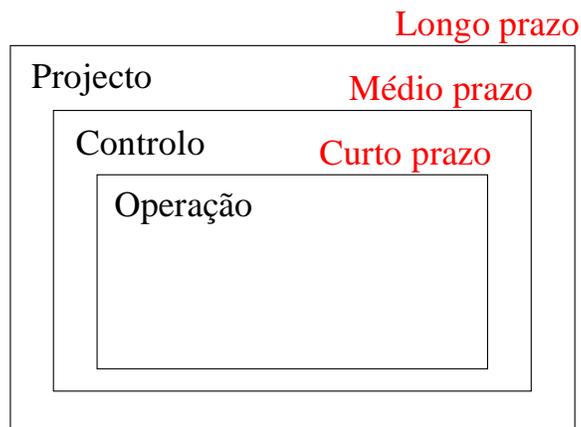


Figura 1.1: Limitações na tomada de decisão impostas pelas diferentes escalas de tempo (adaptado de [69]).

Na operação e projecto de uma ETAR as decisões estão não só interligadas como a sua avaliação pode também ser operada em escalas de tempo diferenciadas. Uma decisão tomada ao nível do projecto tem implicações ao longo de toda a vida útil da ETAR. No

entanto, uma decisão ao nível do controlo de oxigénio dissolvido, por exemplo, produz efeito apenas em alguns minutos. Isto significa que um processo de apoio à decisão tem que ponderar toda a gama de escalas temporais, não sendo prático incluir tudo isto numa mesma análise. É proposto que o nível de desempenho seja avaliado de acordo com um esquema hierárquico, no qual as decisões de longo prazo (escala de tempo=anos, exemplo: projecto) são avaliadas em primeiro lugar (ver Figura 1.1) [69].

Apesar dos modelos dinâmicos terem um papel essencial ao nível do impacto das decisões operacionais, nas escalas de tempo de médio e longo prazo é conveniente usar modelos de estado estacionário para a avaliação do índice de desempenho.

A decisão da escala temporal simplifica um pouco o problema, mas não é suficiente para que este seja tratado de forma expedita. É ainda razoável fazer uma separação espacial dos vários processos unitários, tomando-se cada um deles como ponto de partida. De seguida vão-se associando de modo a alcançar o sistema que se pretende estudar. Isto é conseguido através de balanços mássicos e volúmicos globais (considerando todo o sistema). Torna-se necessário fazer esta separação com precaução, já que alguns processos interagem de perto uns com os outros. De facto, otimizar cada processo separadamente pode levar a um resultado que se encontre muito longe do óptimo (Figura 1.2).

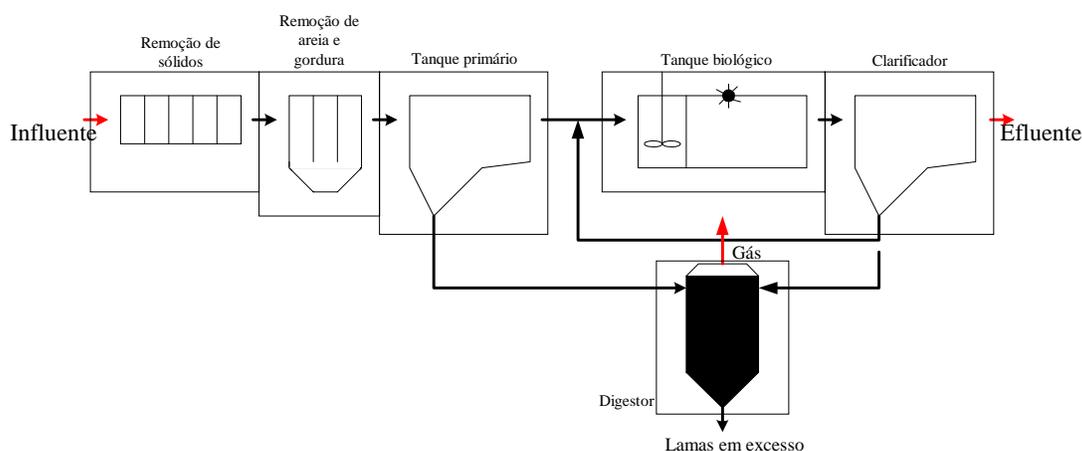


Figura 1.2: Separação espacial dos processos unitários numa ETAR.

Muitos dos processos unitários têm fronteiras em comum, de tal forma que a saída de um é a entrada do seguinte. Em termos ideais, ao resolver este problema com o objectivo de encontrar uma ETAR que não apresente lucros nem prejuízos, obter-se-á o custo do termo que representa a multa que os contribuintes e indústria teriam que pagar para o tratamento das águas residuais que produzem [70].

Se as leis ambientais fossem correctamente aplicadas, os/a contribuintes/indústria pagariam as suas descargas proporcionalmente à carga poluente libertada para o saneamento municipal ( $\Delta\alpha$ ) (Figura 1.3). Isto até um determinado limite permitido, imposto por lei. Uma vez atingido este valor, passar-se-ia para um patamar onde o montante a pagar seria superior ( $\beta_0$ ), bem como a proporção em que este valor aumentaria em função do aumento da descarga poluente ( $\Delta\beta$ ). Quando fosse atingido o valor limite permitido por lei, seria aplicada uma multa ( $\beta_1$ ) cujo valor seria tal que obrigaria a indústria prevaricadora a fechar.

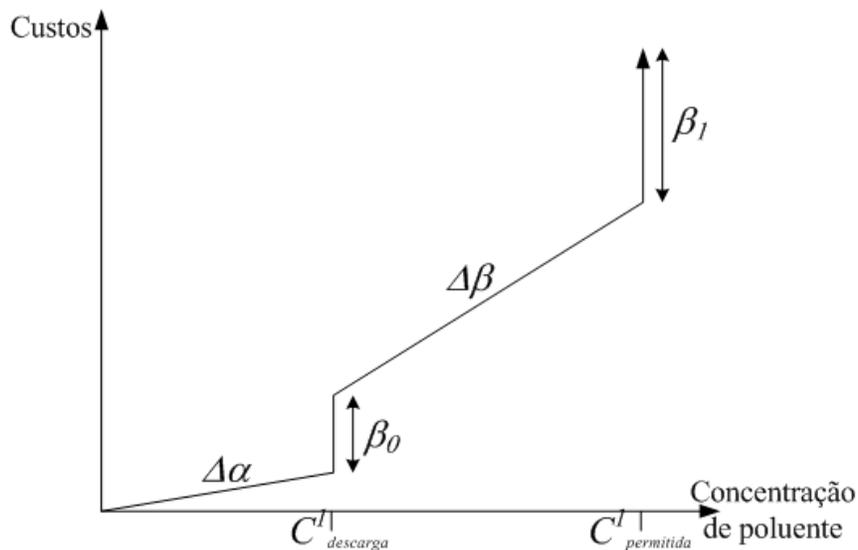


Figura 1.3: Evolução do pagamento dos/da contribuintes/indústria de acordo com a descarga poluente (Adaptado de [69]).

## 1.2 Motivação

Hoje em dia tem-se produzido muito trabalho na área da biotecnologia e modelação, no que respeita à operação de ETARs. No entanto, essa investigação apoia-se essencialmente em simulações [10, 27, 50, 53]. O que é feito neste tipo de trabalhos é focar a atenção em obter a melhor combinação das variáveis de estado, testando por simulação três ou quatro desenhos alternativos e escolhendo o que apresentar um custo mais baixo.

Para além do trabalho de Tyteca [67], que usa modelos muito simples para descrever o tanque arejador e o sedimentador secundário, é conhecido apenas o trabalho apresentado em [2] onde é abordado um problema de optimização de um sistema de lamas activadas, ainda que de forma bastante superficial, no qual não são apresentadas claramente as equações utilizadas. Por outro lado, as funções custo estão desactualizadas e não são específicas para a realidade portuguesa.

Os trabalhos que recorrem aos modelos do tipo ASM [29, 30], para o tanque arejador, e aos modelos ATV [12] ou dupla exponencial [57], para o sedimentador, apenas tentam obter a melhor combinação das variáveis de estado, testando por simulação vários desenhos alternativos para escolher o mais económico.

As simulações têm vindo a ser feitas recorrendo a simuladores como o DESASS [53], GPS-X (<http://www.hydromantis.com>) ou WEST++ (<http://www.hemmis.be>).

Um dos grupos de trabalho mais importantes nesta área é o COST [10], sediado na Flandres, que estabeleceu um *benchmark* que permite avaliar o desempenho de simuladores.

Sem dúvida, um processo de optimização permite chegar a uma solução mais abrangente e correcta, uma vez que não há, à partida, uma pré-selecção de desenhos com determinadas características. A solução é a óptima, e não a melhor entre algumas.

## 1.3 Contribuições

Quando se iniciou esta investigação, havia muito pouco trabalho desenvolvido na tentativa de se optimizarem sistemas de tratamento de águas residuais, tendo como base um

problema de optimização na sua verdadeira acepção: uma função objectivo e restrições.

Numa primeira abordagem, fez-se o estudo de um sistema de lamas activadas, começando pelo tanque arejador e usando o modelo actualmente mais aceite para este processo unitário: o ASM1 [30].

De seguida, considerou-se também o sedimentador secundário como um ponto simples em duas vertentes. Numa primeira abordagem, com clarificação perfeita [14] e, depois, permitindo a saída de sólidos abaixo do limite legal no efluente [13].

Para que fosse possível dimensionar-se o sedimentador secundário, considerou-se o modelo baseado nas regras ATV [12]. Trata-se de um modelo bastante simples, suportado em equações empíricas, mas que tem sido usado com bons resultados no projecto de sedimentadores secundários em ETARs. O princípio deste modelo consiste em dividir o sedimentador secundário em quatro camadas, de acordo com as características do efluente em cada uma delas. Além disso, considera os eventos de pico, o que permite que um sedimentador projectado com base nestas normas seja capaz de contornar situações em que o caudal é excessivo e se verifica uma redução de concentração das lamas. Nesta fase do trabalho foi contactada uma empresa construtora de ETARs, que orçamenta projectos e gere as ETARs instaladas, por forma a ser possível obter dados reais e conseguir-se modelar os custos, quer de investimento ao nível da construção e instalação, quer de operação. Na altura que esta empresa foi contactada, estava envolvida num concurso para a construção de quatro ETARs em Trás-os-Montes - Alijó, Murça, Sabrosa e Sanfins do Douro - e foram recolhidos os dados do projecto, em termos de desenho e de custos associados, o que permitiu obter as funções custo de investimento baseadas em dados reais. Pela experiência desta empresa na gestão das ETARs já construídas, apurou-se que os custos de operação em termos de construção civil são cerca de 1% nos primeiros dez anos de vida da ETAR e 2% nos dez seguintes. Para além disso, o material electromecânico é substituído ao fim de dez anos de funcionamento. Todos os outros custos de operação são desprezáveis. A partir desta informação foi também possível estabelecer as funções custo de operação. Também foram realizadas visitas às ETARs já em funcionamento e a outras em fase de construção, de forma a poder-se averiguar quais os processos mais comuns presentes.

Nos procedimentos de otimização apresentados nesta tese, em que o modelo ATV foi usado [17, 16], recorreu-se a *solvers* comerciais para a sua resolução: inicialmente o LOQO [16] e, mais tarde, outros *solvers* disponíveis no NEOS *Server* [17]. Verificou-se ainda o impacto da presença e eficiência de um tratamento primário [17].

Sendo que o modelo mais usado, e com bons resultados, nos procedimentos de simulação é o da dupla exponencial (DE) [57], na tentativa de se melhorarem os resultados até aqui obtidos, introduziu-se este modelo na descrição do sedimentador secundário. O modelo DE divide o sedimentador em camadas iguais (neste estudo consideraram-se dez), sendo  $h$  a altura total do sedimentador. São feitos balanços mássicos em torno de cada uma destas camadas, o que resulta num modelo mais próximo da realidade, mas que não contempla eventos de pico, o que origina desenhos pouco robustos em processos de otimização, como se mostra nesta tese. Surgiu assim a ideia de combinar as vantagens deste modelo com as do modelo ATV, podendo-se assim ultrapassar as limitações de cada um deles, potenciando em simultâneo as propriedades desejáveis [15].

Para se assegurar que de facto esta combinação tem melhor desempenho que cada um dos modelos usado em separado, fez-se a otimização do sistema de lamas activadas usando para o sedimentador secundário as três abordagens: o modelo ATV, o modelo DE e a combinação dos dois. O desenho obtido deste processo de otimização foi introduzido num simulador - o GPS-X - e provou-se que, de facto, a combinação proposta funciona melhor que cada um dos modelos empregue isoladamente [18, 19].

A este problema adicionou-se ainda o tratamento e deposição de lamas de modo a considerar-se toda a estação de tratamento [20, 21]. No desenho estudado nesta tese, o tratamento de lamas utilizado consiste na centrifugação eficiente das lamas seguida da sua deposição em aterro. Trata-se de um processo simples, mas que funciona bem para ETARs de pequena e média escala.

Uma questão que surgiu ao serem incluídas as equações referentes ao modelo DE é que estas não são diferenciáveis. Assim, desenvolveu-se um algoritmo que não recorre ao cálculo das derivadas das funções envolvidas no modelo - método de pesquisa em padrão - usando um método de multiplicadores baseado numa Lagrangeana aumentada para o

manuseamento das restrições de igualdade e desigualdade. Este algoritmo foi implementado na linguagem C em três versões diferentes para garantir a admissibilidade dos iterandos, em termos de limites simples nas variáveis, ao longo do processo. Foi ainda feita a ligação do código ao AMPL [25]. Para avaliar o *solver* assim obtido, testaram-se as três versões com alguns problemas académicos seleccionados. De seguida, testaram-se problemas reais de optimização de ETARs, onde se obtiveram resultados para o desenho que origina o custo mínimo, tendo em conta as características do efluente a tratar.

## 1.4 Estrutura da tese

Depois de feita a introdução ao problema neste capítulo, o Capítulo 2 é dedicado ao sistema de lamas activadas. Explica-se aqui em detalhe o modelo ASM1 para o tanque arejador e apresentam-se os resultados de algumas experiências preliminares neste processo unitário. Faz-se também uma primeira abordagem ao sedimentador secundário e a alguns modelos existentes para o descrever.

No Capítulo 3 são apresentadas as funções custo. Para além de algumas noções básicas de engenharia económica, mostram-se funções custo encontradas na literatura bem como o processo de obtenção das mesmas através de dados reais. Apresentam-se resultados de ambas as situações. Faz-se ainda uma breve descrição da programação geométrica.

O Capítulo 4 é dedicado ao sedimentador secundário. Apresentam-se os vários modelos em detalhe e a sua utilização nos problemas de optimização de estações de tratamento de águas residuais. É neste capítulo que se explora a nova estratégia para modelar o sedimentador secundário ao combinar os dois modelos ATV e DE. São incluídos resultados para todos os modelos apresentados, bem como algumas simulações dos desenhos obtidos.

No Capítulo 5 apresenta-se o algoritmo do método da Lagrangeana aumentada baseado numa pesquisa em padrão generalizada. Mostram-se as componentes do algoritmo, as condições de convergência do método, os detalhes de implementação, bem como os resultados, quer de um conjunto de problemas académicos, quer dos problemas de optimização de ETARs apresentados nos capítulos anteriores.

Finalmente, no Capítulo 6, apresentam-se as conclusões e sugestões de trabalho futuro.

Fazem parte da tese três apêndices - o Apêndice A descreve a notação e unidades usadas, o Apêndice B contém o glossário e o Apêndice C mostra algumas das funções custo encontradas na literatura.

# Capítulo 2

## O sistema de lamas activadas

O sistema de lamas activadas é o principal tratamento secundário que pode ser encontrado em ETARs. É constituído por um tanque arejador e por um sedimentador secundário. Fala-se neste capítulo de alguns dos modelos existentes para descrever cada um deles e apresentam-se alguns resultados preliminares de optimização para o tanque arejador.

### 2.1 Introdução

Uma ETAR típica (Figura 1.2) é, em geral, constituída por um tratamento primário, um tratamento secundário e, em alguns casos, um tratamento terciário. À parte do tratamento dos efluentes, surge como corrente secundária o tratamento das lamas eventualmente resultantes do processo de despoluição.

O tratamento primário é um processo físico e o seu objectivo é eliminar sólidos grosseiros e gordura, de modo a evitar o entupimento das unidades que se seguem. Uma vez que o seu custo não depende directamente das características da água residual a tratar, não é incluído nos procedimentos de optimização, já que a sua eficiência típica é conhecida.

O tratamento secundário é um processo biológico e trata-se do mais importante da ETAR, já que elimina os poluentes solúveis. Um dos mais utilizados é o sistema de lamas activadas, constituído por um tanque arejador e um sedimentador. A denominação de lamas activadas provém do facto de este sistema envolver a produção de uma massa activa de microrganismos capazes de estabilizar uma água residual na presença de oxigénio. Existem

muitas variantes deste processo, mas na sua essência elas são similares [58].

Quando o efluente em questão é muito poluído (temos o exemplo dos efluentes têxteis) torna-se, por vezes, necessária a presença de um processo terciário (regra geral, um processo químico).

Em relação às lamas, pode proceder-se à sua digestão aeróbia ou anaeróbia, de modo a serem estabilizadas, ou simplesmente serem desidratadas em centrífugas, com ou sem adição de polímeros. Posteriormente, na maioria dos casos, são depositadas em aterros ou incineradas. Quando não possuem produtos tóxicos podem ser usadas como fertilizantes.

Surgiu a necessidade de modelar estes processos, já que se consegue deste modo reduzir um sistema complexo a uma imagem conceptual de como ele funciona. Hoje em dia esta modelação tornou-se parte essencial no desenho e operação de ETARs. Assim sendo, existem modelos propostos e aceites pela comunidade científica. A vantagem de se utilizarem tais modelos reside no facto de todos os modeladores poderem usar uma linguagem universal, quer em termos de conceitos, quer em termos de nomenclatura.

## 2.2 Tanque arejador

O principal objectivo do arejador é remover a matéria orgânica solúvel. É aqui que permanecem as lamas juntamente com a água a ser tratada. O seu nome resulta de haver fornecimento de oxigénio, dado que as bactérias que conduzem o processo são aeróbias.

Os modelos mais difundidos são os do tipo ASM [28, 29, 30], que, por utilizarem uma notação matricial, tornam-se muito simples de interpretar. Foram descritos pelo *IWA Task Group on Mathematical Modelling for Design and Operation of Biological Wastewater Treatment* e o mais divulgado é o ASM1 [30], que contempla, além da remoção da matéria carbonácea, os processos de remoção de azoto - nitrificação e desnitrificação. Este modelo pode ser utilizado para todos os tipos de reactores e de arejamento.

### 2.2.1 O modelo ASM1

O modelo ASM1 incorpora a oxidação do carbono, a nitrificação e a desnitrificação, o que permite simulações do sistema de lamas activadas com resultados muito próximos da realidade.

Dentro de um sistema, a concentração de um componente pode ser afectada por vários processos diferentes. Para ser possível, de uma forma expedita, identificar e verificar o que se passa com cada um destes componentes, surgiu a representação em matriz de Peterson (Tabela 2.1). Este tipo de representação permite ainda a obtenção dos balanços mássicos de uma forma quase imediata e bastante intuitiva.

A equação genérica para um balanço mássico é dada por

$$\text{Entrada} - \text{Saída} + \text{Reacção} = \text{Acumulação}$$

o que em termos matemáticos, considerando um Reactor Perfeitamente Agitado (RPA), se traduz por

$$\frac{Q}{V_a} (\xi_{\text{entrada}} - \xi) + r_\xi = \frac{d\xi}{dt},$$

em que  $Q$  é o caudal que entra no reactor,  $V_a$  é o volume do tanque de arejamento,  $\xi$  e  $\xi_{\text{entrada}}$  são as concentrações do componente em torno do qual os balanços mássicos estão a ser feitos, dentro do reactor e na entrada, respectivamente. Convém neste ponto referir que num RPA a concentração de um componente é a mesma em qualquer ponto do reactor e na saída desse reactor. O termo de reacção para o componente em causa,  $r_\xi$ , é obtido através do somatório do produto dos coeficientes estequiométricos,  $\nu_{\xi j}$ , com a expressão da taxa de reacção do processo,  $\rho_j$ , da matriz de Peterson (Tabela 2.1)

$$r_\xi = \sum_j \nu_{\xi j} \rho_j.$$

Tabela 2.1: Matriz de Petersen do modelo ASMI

j	Componentes											Taxa do processo, $\rho_j$	
	$S_I$	$S_S$	$X_I$	$X_S$	$X_{BH}$	$X_{BA}$	$X_P$	$SO$	$S_{NO}$	$S_{NH}$	$X_{ND}$		$S_{ALK}$
1		$-\frac{1}{Y_H}$					$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$			$iX_B$		$-\frac{iX_B}{14}$	$\mu_H \left( \frac{SS}{K_S + SS} \right) \left( \frac{SO}{K_{OH} + SO} \right) X_{BH}$
2		$-\frac{1}{Y_H}$					$-\frac{1-Y_H}{2.86Y_H}$			$-iX_B$		$-\frac{1-Y_H}{14 \times 2.86Y_H} - \frac{iX_B}{14}$	$\mu_H \left( \frac{SS}{K_S + SS} \right) \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + SO} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NH} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{BH}$
3							$-\frac{4.57 - Y_A}{Y_A}$		$\frac{1}{Y_A}$	$-iX_B - \frac{1}{Y_A}$		$-\frac{iX_B}{14} - \frac{1}{7Y_A}$	$\mu_A \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left( \frac{SO}{K_{OA} + SO} \right) X_{BA}$
4				$1 - f_p$							$iX_B - f_p iX_P$		$b_H X_{BH}$
5				$1 - f_p$							$iX_B - f_p iX_P$		$b_A X_{BA}$
6												$\frac{1}{14}$	$k_a S_{ND} X_{BH}$
7		1		-1									$k_h \frac{(X_S/X_{BH})}{K_X + (X_S/X_{BH})} \left( \frac{SO}{K_{OH} + SO} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + SO} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) X_{BH}$
8													$\rho_T \frac{X_{ND}}{X_S}$

Em estado estacionário, o termo de acumulação dado por  $\frac{d\xi}{dt}$  é zero, porque a concentração é constante ao longo do tempo. Uma ETAR em operação por um período de tempo suficientemente longo, sem variações significativas, é considerada em estado estacionário. Isto é válido sempre que o propósito seja fazer predições de custos para o tempo de vida de uma ETAR, ou seja, a longo prazo.

O modelo ASM1 [30] envolve 8 processos que incorporam 13 componentes diferentes. Os balanços para os materiais inertes,  $S_I$  e  $X_I$ , não são considerados porque são componentes unicamente de transporte. As taxas dos processos são as seguintes:

crescimento aeróbio de heterotróficos,  $\rho_1$

$$\rho_1 = \mu_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) X_{BH};$$

crescimento anóxico de heterotróficos,  $\rho_2$

$$\rho_2 = \mu_H \left( \frac{S_S}{K_S + S_S} \right) \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \eta_g X_{BH};$$

crescimento aeróbio de autotróficos,  $\rho_3$

$$\rho_3 = \mu_A \left( \frac{S_{NH}}{K_{NH} + S_{NH}} \right) \left( \frac{S_O}{K_{OA} + S_O} \right) X_{BA};$$

declínio de heterotróficos,  $\rho_4$

$$\rho_4 = b_H X_{BH};$$

declínio de autotróficos,  $\rho_5$

$$\rho_5 = b_A X_{BA};$$

amonificação de azoto orgânico solúvel,  $\rho_6$

$$\rho_6 = k_a S_{ND} X_{BH};$$

hidrólise de orgânicos em suspensão,  $\rho_7$

$$\rho_7 = k_h \frac{\frac{X_S}{X_{BH}}}{K_X + \frac{X_S}{X_{BH}}} \left[ \left( \frac{S_O}{K_{OH} + S_O} \right) + \eta_h \left( \frac{K_{OH}}{K_{OH} + S_O} \right) \left( \frac{S_{NO}}{K_{NO} + S_{NO}} \right) \right] X_{BH};$$

hidrólise de azoto orgânico em suspensão,  $\rho_8$

$$\rho_8 = \rho_7 \frac{X_{ND}}{X_S}.$$

A unidade de medida adoptada foi g  $CQO/m^3$  e as equações obtidas do modelo ASM1 com os balanços mássicos são as que se seguem (todos os símbolos e unidades aqui utilizados, bem como no resto da tese, encontram-se listados no Apêndice A - Notação e unidades):

substrato solúvel ( $S_S$ )

$$-\frac{1}{Y_H} \rho_1 - \frac{1}{Y_H} \rho_2 + \rho_7 + \frac{Q}{V_a} (S_{S_{entrada}} - S_S) = 0; \quad (2.1)$$

substrato lentamente biodegradável ( $X_S$ )

$$(1 - f_P) \rho_4 + (1 - f_P) \rho_5 - \rho_7 + \frac{Q}{V_a} (X_{S_{entrada}} - X_S) = 0; \quad (2.2)$$

biomassa activa heterotrófica ( $X_{BH}$ )

$$\rho_1 + \rho_2 - \rho_4 + \frac{Q}{V_a} (X_{BH_{entrada}} - X_{BH}) = 0; \quad (2.3)$$

biomassa activa autotrófica ( $X_{BA}$ )

$$\rho_3 - \rho_5 + \frac{Q}{V_a} (X_{BA_{entrada}} - X_{BA}) = 0; \quad (2.4)$$

produtos em suspensão provenientes do declínio da biomassa ( $X_P$ )

$$f_P \rho_4 + f_P \rho_5 + \frac{Q}{V_a} (X_{P_{entrada}} - X_P) = 0; \quad (2.5)$$

azoto sob a forma de nitritos e nitratos ( $S_{NO}$ )

$$-\frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \rho_2 + \frac{1}{Y_A} \rho_3 + \frac{Q}{V_a} (S_{NO_{entrada}} - S_{NO}) = 0; \quad (2.6)$$

azoto sob a forma de  $NH_4^+ + NH_3$  ( $S_{NH}$ )

$$-i_{X_B}\rho_1 - i_{X_B}\rho_2 - \left(i_{X_B} + \frac{1}{Y_A}\right)\rho_3 + \rho_6 + \frac{Q}{V_a}(S_{NH_{entrada}} - S_{NH}) = 0; \quad (2.7)$$

azoto orgânico biodegradável solúvel ( $S_{ND}$ )

$$-\rho_6 + \rho_8 + \frac{Q}{V_a}(S_{ND_{entrada}} - S_{ND}) = 0; \quad (2.8)$$

azoto orgânico biodegradável em suspensão ( $X_{ND}$ )

$$(i_{X_B} - f_P i_{X_P})\rho_4 + (i_{X_B} - f_P i_{X_P})\rho_5 - \rho_8 + \frac{Q}{V_a}(X_{ND_{entrada}} - X_{ND}) = 0; \quad (2.9)$$

alcalinidade ( $S_{alk}$ )

$$\begin{aligned} & -\frac{i_{X_B}}{14}\rho_1 + \left(\frac{1 - Y_H}{14 \times 2.86 Y_H} - \frac{i_{X_B}}{14}\right)\rho_2 - \left(\frac{i_{X_B}}{14} + \frac{1}{7Y_A}\right)\rho_3 + \frac{1}{14}\rho_6 \\ & + \frac{Q}{V_a}(S_{alk_{entrada}} - S_{alk}) = 0; \end{aligned} \quad (2.10)$$

oxigénio ( $S_O$ )

$$K_{La}(S_{O_{sat}} - S_O) - \frac{1 - Y_H}{Y_H}\rho_1 - \frac{4.57 - Y_A}{Y_A}\rho_3 + \frac{Q}{V_a}(S_{O_{entrada}} - S_O) = 0. \quad (2.11)$$

Para a transferência de massa de oxigénio, considerando arejamento por difusão tem-se:

$$K_{La} = \frac{\alpha G_S \eta P_{O_2} 1333.3}{V_a S_{O_{sat}}} \theta^{(T-20)} \quad (2.12)$$

onde

$$S_{O_{sat}} = \frac{1777.8\beta\rho P_{O_2}}{HenryO_2}$$

e

$$\rho = 999.96(2.29 \times 10^{-2}T) - (5.44 \times 10^{-3}T^2), \quad HenryO_2 = 708 T + 25700.$$

$\theta$  e  $\beta$  são factores de correcção relativos, respectivamente, à temperatura e salinidade da água residual.

Na maior parte dos casos, num sistema real, as variáveis de estado não se encontram disponíveis para medição. Sendo assim, estas são substituídas por outras susceptíveis de avaliação, designadas por variáveis compostas. As equações que se seguem traduzem uma forma de agrupar as variáveis provenientes do modelo ASM1 de maneira a relacioná-las com as variáveis compostas. Este esquema está de acordo com o utilizado em [41].

CQO em suspensão

$$X = X_I + X_S + X_{BH} + X_{BA} + X_P; \quad (2.13)$$

CQO solúvel

$$S = S_I + S_S; \quad (2.14)$$

CQO total

$$CQO = X + S; \quad (2.15)$$

Sólidos suspensos voláteis

$$SSV = \frac{X}{i_{cv}}; \quad (2.16)$$

Sólidos suspensos totais

$$SST = SSV + SSI; \quad (2.17)$$

Carência bioquímica de oxigénio

$$CBO = f_{CBO} (S_S + X_S + X_{BH} + X_{BA}); \quad (2.18)$$

Azoto total de Kjeldahl

$$TKN = S_{NH} + S_{ND} + X_{ND} + i_{X_B} (X_{BH} + X_{BA}) + i_{X_P} (X_P + X_I); \quad (2.19)$$

Azoto total

$$N = TKN + S_{NO}. \quad (2.20)$$

$icv$  é a fração da  $CQO$  suspensa nos sólidos suspensos voláteis ( $SSV$ ) e  $f_{CBO}$  é a contribuição biológica da  $CQO$  para a  $CBO$ .

Os parâmetros que aparecem nestas equações são de três tipos: estequiométricos, cinéticos e operacionais. Aparecem listados nas Tabelas 2.2 a 2.5 e foram obtidos através do simulador GPS-X para efluentes tipicamente domésticos.

Tabela 2.2: Parâmetros estequiométricos

$Y_A$	$Y_H$	$f_P$	$i_{X_B}$	$i_{X_P}$
0.24	0.666	0.08	0.086	0.06

Tabela 2.3: Parâmetros cinéticos

$\mu_H$	$K_S$	$K_{OH}$	$K_{NO}$	$b_H$	$\eta_g$	$k_h$	$K_X$	$\mu_A$	$K_{NH}$	$b_A$	$K_{OA}$	$k_a$	$\eta_h$
6	20	0.2	0.5	0.62	0.8	0.4	3	0.03	0.8	1	0.04	0.4	0.08

Tabela 2.4: Parâmetros operacionais

$T$	$P_{O_2}$	$\alpha$	$\eta$
20	0.21	0.8	0.07

### 2.2.2 Experiências preliminares

Numa fase inicial foram consideradas funções objectivo bastante simples, nomeadamente o volume do tanque arejador, o caudal de ar e a  $CQO$  solúvel ( $S$ ) (não se considera a  $CQO$  em suspensão uma vez que as lamas ainda estão misturadas com o efluente tratado).

Estas funções, apesar de simples, permitem uma análise detalhada do sistema. Quando a preocupação primordial são os custos de investimento, deve minimizar-se o volume do tanque arejador, uma vez que a sua construção é a principal contribuição para esses custos.

A minimização do caudal de ar torna-se mais importante quando predominam os custos de operação, em particular quando a ETAR está já em funcionamento. Neste caso, o volume do tanque arejador é considerado como parâmetro. A situação é similar quando se pretende minimizar a *CQO* solúvel.

As restrições obtidas para os processos que ocorrem no tanque arejador são descritas pelas equações (2.1) a (2.12). São ainda consideradas como restrições as variáveis compostas (2.13) a (2.20).

Os limites legais impostos, quer para a *CQO* quer para o azoto (*N*), são um factor a ter sempre presente. Não se considera, nesta fase, o limite de sólidos, uma vez que não é incluído o sedimentador secundário. Pelo mesmo motivo são consideradas apenas as parcelas solúveis da *CQO* e de *N*. Assim sendo, definem-se as restrições de qualidade (2.21) e (2.22):

$$S \leq S_{lei}, \quad (2.21)$$

$$N \leq N_{lei}. \quad (2.22)$$

Todas as variáveis são não negativas. No entanto, por questões de consistência operacional, algumas delas precisam de limites mais restritivos:

$$0 \leq K_L a \leq 300 \quad (2.23)$$

$$0.05 \leq TRH \leq 2 \quad (2.24)$$

$$20 \leq SRT \leq 30 \quad (2.25)$$

$$800 \leq SST \leq 6000 \quad (2.26)$$

$$2500 \leq SST_r \leq 10000 \quad (2.27)$$

$$0.5 \leq r \leq 2 \quad (2.28)$$

$$6 \leq S_{alk} \leq 8 \quad (2.29)$$

$$6 \leq S_{alk_{ent}} \leq 8 \quad (2.30)$$

$$S_O \geq 2. \quad (2.31)$$

Estes problemas foram codificados na linguagem de modelação matemática AMPL [25] e foram resolvidos usando o pacote de *software* LOQO [68].

As experiências realizaram-se considerando valores de  $S_{lei}$  a variar entre 35 e 50. Adoptou-se o valor de  $N_{lei}$  sempre igual a 15. A Tabela 2.5 apresenta a composição do influente à entrada do tanque arejador. Estes valores foram retirados do simulador GPS-X [42] e correspondem a efluentes maioritariamente domésticos.

Tabela 2.5: Características da água no influente ao tanque arejador

$Q$	$S_I$	$X_{BH}$	$X_{BA}$	$X_P$	$S_O$	$S_{NO}$	$S_{alk}$	$S_S$
4000	30	355.5	$9.49 \times 10^{-7}$	87.06	0	$5 \times 10^{-7}$	6.846	32.78
$X_I$	$X_S$	$S_{NH}$	$S_{ND}$	$X_{ND}$	$X_{II}$	$X$	$S$	
727.3	422.4	9.54	0.6129	17.39	588.6	1592.26	62.78	

Para uma mais fácil interpretação dos resultados, são apresentados gráficos nos quais é considerado um índice de qualidade ( $IQ$ ) [10], que define a quantidade de poluição no efluente, e o custo total (CT), baseado nas funções custo apresentadas na Secção 3.4 e que depende dos custos de investimento e operação do tanque arejador

$$IQ = (CQO + 2 \times CBO) \frac{Q_{ef}}{1000},$$

em que a  $CQO$  e a  $CBO$  correspondem às suas fracções solúveis.

Observando as Tabelas 2.6 e 2.7, a  $CQO$  solúvel ( $S$ ) atinge sempre o máximo valor permitido, excepto no último caso ( $S \leq 50$ ). Para limites de  $50 \text{ g/m}^3$  e superiores,  $S$  no efluente nunca passa de  $45.2 \text{ g/m}^3$ . Isto deve-se ao limite imposto do tempo de retenção hidráulica ( $TRH$ ) de 0.05 dias, o que implica um volume mínimo para o tanque arejador de  $200 \text{ m}^3$ . Para um tanque com estas dimensões o tratamento mínimo atingido é  $S = 45.2 \text{ g/m}^3$ .

Quando a função objectivo é o volume do tanque arejador, para o mesmo índice de qualidade no efluente, o custo total é mais elevado do que no caso em que o caudal de ar

Tabela 2.6: Resultados considerando o volume do tanque arejador como função objectivo, para  $N_{sol} \leq 15\text{g/m}^3$

limite de $S$	35	40	45	50
iterações	427	66	79	91
$V_a$	2788	918	207.5	200
$K_La$	300	300	300	265.6
$G_S$	216 316	71 226	16 103	13 740
$S$	35	40	45	45.2
$N_{sol}$	8.5	5.9	8.3	8.4
$TRH$	0.70	0.23	0.052	0.05

Tabela 2.7: Resultados considerando o caudal de ar como função objectivo, para  $N_{sol} \leq 15\text{g/m}^3$

limite de $S$	35	40	45	50
iterações	135	54	139	127
$V_a$	2947	939	211	200
$K_La$	146.2	223.5	241.4	243.8
$G_S$	111 413	54 301	13 143	12 612
$S$	35	40	45	45.2
$N_{sol}$	8.8	6.0	8.3	8.4
$TRH$	0.74	0.23	0.053	0.05

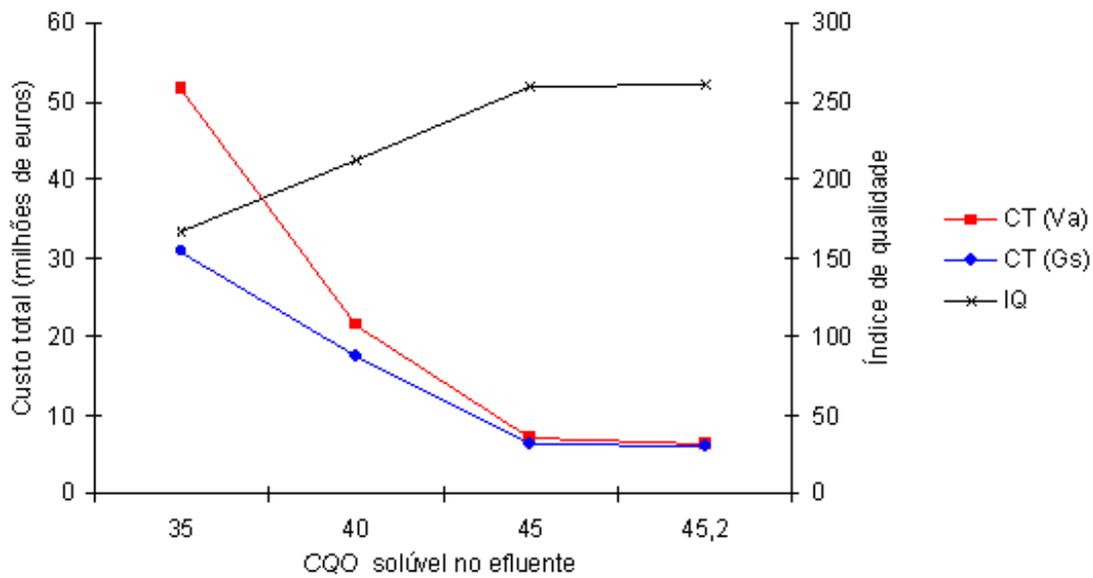


Figura 2.1: Custo total ( $CT$ ) e índice de qualidade ( $IQ$ ) versus  $CQO$  solúvel no efluente, para a minimização do volume do tanque arejador ( $V_a$ ) e do caudal de ar ( $G_S$ )

Tabela 2.8: Resultados considerando o caudal de ar como função objectivo e o volume do tanque arejador como parâmetro, para  $N_{sol} \leq 15 \text{ g/m}^3$  e  $S \leq 45 \text{ g/m}^3$

$V_a$	500	1000	1500	2000	2500
iterações	20	25	26	26	26
$K_{La}$	218.3	224.4	214.5	186.3	162.4
$G_S$	28 227	58 055	83 212	96 382	105 043
$S$	41.6	39.8	38.1	36.6	35.6
$N_{sol}$	7.1	5.9	6.0	6.9	7.9

Tabela 2.9: Resultados considerando a  $CQO$  solúvel como função objectivo e o volume do tanque arejador inicialmente como variável e depois como parâmetro, para  $N_{sol} \leq 15 \text{ g/m}^3$  e  $S \leq 45 \text{ g/m}^3$

$V_a$	Variável	500	1000	1500	2000	2500
iterações	9892	208	369	3234	5898	7675
$V_a$	6488	500	1000	1500	2000	2500
$K_L a$	143.1	300	300	300	300	300
$G_S$	240 179	38 799	77 599	116 298	155 197	193 997
$S$	33.1	41.6	39.7	37.9	36.4	35.4
$N_{sol}$	15.0	7.1	5.8	6.0	6.8	8.2
$TRH$	1.62	0.125	0.25	0.375	0.5	0.625

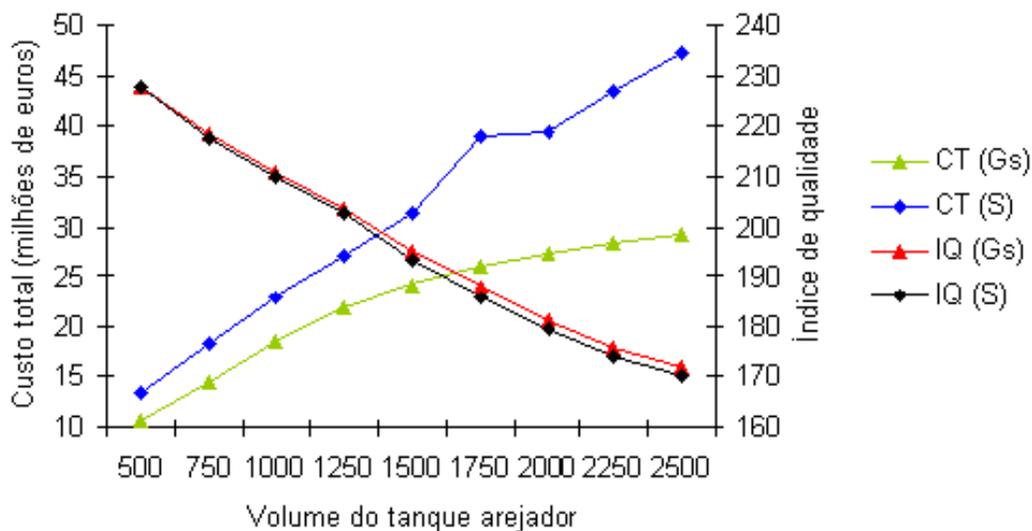


Figura 2.2: Custo total ( $CT$ ) e índice de qualidade ( $IQ$ ) versus volume do tanque arejador ( $V_a$ ), para a minimização do caudal de ar ( $G_S$ ) e da  $CQO$  solúvel no efluente ( $S$ )

é minimizado (Figura 2.1). Isto revela que os custos de operação têm uma contribuição mais significativa no custo total que os custos de investimento.

Na Tabela 2.8 o volume é considerado parâmetro, o que simula uma ETAR já estabelecida. A  $CQO$  solúvel no efluente está sempre abaixo do limite imposto de  $45 \text{ g/m}^3$ . Neste caso, é o volume do tanque que limita o tratamento. À medida que se minimiza o caudal de ar para um valor fixado do volume do tanque arejador, o oxigénio dissolvido é mantido a  $2 \text{ g/m}^3$ , o que corresponde à concentração mínima permitida no reactor para que as bactérias cresçam de modo adequado. Este nível de oxigénio implica uma qualidade de efluente superior à mínima exigida, e por esta razão a qualidade aumenta à medida que o volume aumenta, sempre abaixo do limite imposto.

Quando a  $CQO$  solúvel é a função objectivo (Tabela 2.9), são consideradas duas situações distintas. Na primeira o volume é considerado variável (segunda coluna da Tabela 2.9) e a convergência é muito lenta. Na realidade esta situação não faz muito sentido, já que significa que não há qualquer tipo de preocupação com os custos. O volume obtido é enorme ( $9892 \text{ m}^3$ ), o que para além de graves problemas operacionais acarretaria um custo incomportável.

Na segunda situação, o volume é imposto como parâmetro, o que significa que o desempenho de uma ETAR já estabelecida vai ser optimizado.

Da Figura 2.2 pode aferir-se que a optimização da qualidade do efluente não compensa. O custo é muito mais elevado e não há um ganho significativo na qualidade do efluente, medida pelo índice de qualidade.

Outra observação às Tabelas 2.6 a 2.9 permite-nos verificar que o azoto solúvel ( $N_{sol}$ ), com excepção da segunda coluna da Tabela 2.9, está sempre abaixo do limite estabelecido de  $15 \text{ g/m}^3$ . Uma vez que o azoto solúvel constitui uma pequena parte do azoto total, tal não é de estranhar. Por outro lado, constata-se que a restrição de qualidade limitante para o projecto de uma ETAR é a  $CQO$  solúvel. O limite do azoto solúvel só é atingido quando se minimiza a  $CQO$ . Neste caso, o sistema irá negligenciar, tanto quanto possível, a qualidade em termos de azoto para que esta possa ser a melhor em termos de  $CQO$ .

## 2.3 Sedimentador secundário

Apesar de tradicionalmente se dar mais importância ao tanque arejador nos sistemas de lamas activadas, o sedimentador secundário desempenha também um papel crucial no tratamento de efluentes.

Depois do efluente abandonar o tanque arejador, onde sofreu o tratamento biológico, é necessário separar a água tratada das lamas biológicas. A forma mais comum de se efectuar esta separação é através de sedimentação em tanques.

### 2.3.1 Funções do sedimentador

Um sedimentador que funcione de forma adequada tem que, forçosamente, cumprir três funções, sob pena de, se uma delas falhar, o efluente ser de má qualidade e as lamas que são recicladas de volta ao arejador não terem qualidade suficiente para manter um comportamento adequado, no que diz respeito à idade das mesmas. As funções de um sedimentador são:

**Espessador**, de modo a produzir uma quantidade adequada de lamas espessadas para regressarem ao arejador;

**Clarificador**, para produzir um efluente final clarificado;

**Tanque de armazenagem**, de forma a permitir a conservação das lamas em períodos com picos no caudal de efluente.

O comportamento do tanque sedimentador depende do seu desenho, assim como da sua operação. Os factores que mais afectam o seu desempenho podem ser, grosso modo, divididos em quatro grupos:

1. Características hidráulicas e dimensões externas do tanque, tal como o caudal de águas residuais;

2. Características físicas internas, tais como as características da entrada da alimentação ao sedimentador, presença de zonas de floculação ou colecta das lamas;
3. Condições do local, tais como vento e temperatura;
4. Características das lamas.

Todos estes factores são importantes, mas os que mais influenciam o tamanho do sedimentador são, sem sombra de dúvida, o caudal de efluente a tratar e as características das lamas. Uma vez que os caudais de efluente são conhecidos para uma determinada situação, são as características das lamas (sedimentabilidade e capacidade de espessamento) que dominam o dimensionamento da área de sedimentação e profundidade do tanque. Uma vez especificadas estas dimensões, os outros factores são determinados de modo a conseguir-se um bom desempenho do sedimentador e uma baixa concentração de sólidos à saída.

As condições do reactor biológico afectam também o desempenho deste processo unitário. Por essa razão, nunca se pode olhar para um sem ter em atenção o outro. Ou seja, uma falha em qualquer um deles implicará uma falha no sistema para se atingir a qualidade de efluente pretendida.

### **Função de espessador**

Esta função do sedimentador é governada pela sedimentabilidade e capacidade de espessar das lamas e pela concentração de sólidos no reactor. Este tem sido, e ainda é, projectado com base em critérios de taxas hidráulicas e de carga de sólidos empíricas, ou seja, essencialmente o seu desenho baseia-se no Índice Volumétrico de Lamas (*IVL*), o que leva a algumas incorrecções. Por este motivo, nas últimas décadas, tem-se feito algum esforço no sentido de se obterem melhores medidas das características das lamas para se tentar melhorar a adequação do desenho do sedimentador à realidade.

A sedimentabilidade das lamas e a sua concentração no reactor, que governam a função de espessador, também determinam o caudal e carga diários que podem ser tratados numa determinada estação. Para uma determinada estação que se encontre a operar, o pico de

efluente em condições de chuva determina a taxa máxima de corrente superior no sedimentador. O tipo de água residual (com ou sem pré-tratamento) e massa diária de material orgânico tratado determina a concentração de lamas no reactor.

Na verdade, a função de espessador desta unidade de tratamento limita a capacidade de tratamento da estação. Por exemplo, tendo uma estação sido projectada para uma determinada capacidade de tratamento e sedimentabilidade de lamas, se esta última se deteriorar o sedimentador limitará o desempenho da estação. E então, para se conseguir recuperar a capacidade de tratamento dessa estação, será necessário:

1. Aumentar a capacidade do sedimentador;
2. melhorar a sedimentabilidade das lamas (controlando a proliferação de microrganismos filamentosos);
3. diminuir a concentração da alimentação ao arejador ou ao sedimentador, diminuindo a idade das lamas, ou mantendo a concentração das lamas controlada.

Posto isto, a inter-relação entre a sedimentabilidade das lamas, concentração de lamas no reactor e capacidade da estação, torna-se numa aproximação extremamente útil para estimar a concentração de lamas de projecto no reactor, tendo em vista uma análise de minimização de custos de um sistema de lamas activadas. A massa de material orgânico tratado por dia, o tipo de água residual e a idade das lamas fixam a massa de lamas que é necessário manter no reactor. O volume do reactor é, deste modo, função da concentração seleccionada. Quanto mais elevada for esta concentração mais pequeno será o volume do reactor e logo, menor o custo do tanque.

A área do sedimentador é função do caudal de ponta, da configuração do próprio tanque, da concentração de lamas no arejador e da sedimentabilidade das lamas. Quanto maior for a concentração de lamas no arejador, maior será a área de sedimentação para o espessamento e, por isso, mais elevado o custo de construção do sedimentador. O custo do sistema tem que ter em conta estes dois factores para que se chegue a um custo óptimo do conjunto, utilizando funções custo adequadas.

De um modo geral, este custo combinado aumenta quando:

1. as águas residuais não têm qualquer tipo de pré-tratamento;
2. os efluentes são mais poluídos (*CQO* e *CBO* mais elevadas);
3. a idade das lamas é mais elevada;

e diminui para:

1. razões entre o caudal de ponta e o caudal médio mais elevadas;
2. uma pior sedimentabilidade de lamas.

Apesar de todas estas considerações, não pode ser especificado um óptimo universal. Em países cujas águas residuais não são muito poluídas e são usadas idades das lamas baixas, a concentração óptima de lamas no reactor será baixa (2000 a 3000 g *SST*/m<sup>3</sup>), ao passo que, na presença de águas residuais muito poluídas e idades de lamas muito elevadas, as concentrações de lamas no reactor serão elevadas (4000 a 6000 g *SST*/m<sup>3</sup>).

Estas inter-relações entre os dois processos unitários permitem também maximizar o desempenho de uma ETAR já existente, ou seja, que tenha um volume do arejador e a área de sedimentação conhecidas. No entanto é ainda necessário ligar a carga orgânica, tipo de efluente e idade das lamas com a massa de lamas no reactor, a sedimentabilidade das mesmas e sua concentração no arejador com a velocidade da corrente superior permissível.

### **Função de clarificador**

Esta função tem recebido muito menos atenção que a anterior, apesar de ser igualmente importante. A eficiência de um sedimentador na sua função de clarificação depende da capacidade de capturar a massa de lamas que nele entra. De um modo geral, cerca de 98% da biomassa que entra no sedimentador deposita e retorna ao reactor biológico. A remanescente fracção, que compreende as partículas mais pequenas e lentamente sedimentáveis, tem um efeito maciço na qualidade do efluente.

Uma falha na função de clarificação pode significar o não cumprimento da qualidade de efluente *standard*, mesmo estando o tanque a funcionar perfeitamente como espessador e o arejador estar a conseguir a eficiência do processo biológico pretendida.

### **Função de armazenagem de lamas**

As condições mais críticas a considerar no projecto de um sedimentador secundário, em particular para estações de tratamento municipais, são as condições mais extremas que acontecem quando há cargas de sólidos e taxas de velocidade decorrente superior muito elevadas, o que sucede em condições atmosféricas de chuvas. Pelo facto das condições extremas não ocorrerem com muita frequência, este aspecto é, muitas vezes, desprezado no projecto destes tanques.

Uma forma de contornar este problema é alocar volume suficiente no tanque sedimentador de modo a que este consiga suportar as flutuações de sólidos durante os eventos de picos de caudal. É de notar que o inventário de sólidos que são transferidos do arejador para o sedimentador neste tipo de eventos deve-se a uma sobrecarga da função de espessamento deste último tanque e/ou à necessidade de aumentar a concentração de sólidos nas correntes de fundo, uma vez que a taxa de reciclagem diminui. Isto tudo leva a um aumento do tempo de espessamento. Aparte das razões que levam ao aumento da transferência de sólidos para o sedimentador, a função de clarificação não pode ser comprometida. As normas ATV incluem um assunto específico, em que é alocada uma certa profundidade do sedimentador para armazenamento em condições atmosféricas adversas. Esta ou outras técnicas podem ser empregues, tendo sempre em mente que a carga de sólidos deve ser mantida abaixo do fluxo de sólidos limite.

### **2.3.2 Modelos de sedimentadores secundários**

O modelo mais simples que permite descrever um sedimentador secundário associado a um tanque arejador é o do ponto de separação simples. Neste caso, não são atribuídas dimensões a este processo unitário, pelo que, em termos de optimização, não é de grande

utilidade. No entanto, cumpre muito bem a função quando o objectivo é estudar de forma rápida e simples o comportamento do tanque arejador num sistema de lamas activadas.

O modelo mais usado para dimensionar tanques sedimentadores é o baseado nas normas ATV [12]. É um modelo definido por equações empíricas mas que funciona muito bem, incorporando já conceitos tal como o caudal de pico. O sedimentador é dividido em quatro camadas. A inferior contém as lamas espessadas que são extraídas ( $h_4$ ). Acima desta ocorre o armazenamento de lamas ( $h_3$ ), sendo esta a zona que permite que o sedimentador suporte as condições adversas durante eventos de pico, mantendo uma concentração de lamas adequada. A seguir vem uma zona de transição, onde ocorre a separação entre as lamas e o efluente tratado ( $h_2$ ) e, finalmente, na camada superior,  $h_1$ , é onde se encontra o efluente tratado que é extraído do sistema de lamas activadas. A altura do sedimentador ( $h$ ) é o resultado da soma destas quatro camadas. Este modelo estabelece ainda uma relação entre a área de sedimentação ( $A_s$ ) e a altura, mais em concreto  $h_3$ . Pode haver assim uma troca entre altura e área da forma que for mais conveniente para o sistema em causa, quer em termos de custos, quer em termos de tipo de construção - sedimentador mais largo *versus* sedimentador mais alto. Para que haja controlo do efluente em situações de pico, estabelece-se uma relação entre o caudal nesta situação e a área de sedimentação.

Em termos de simulações, o modelo por excelência é o da dupla exponencial [57]. Comparado com o modelo anterior, este está mais próximo da realidade já que se baseia em balanços mássicos no interior do próprio sedimentador, que é dividido em camadas. Estas são agrupadas de acordo com a sua posição relativa à camada onde é introduzido o efluente que vem do tanque arejador. A estrutura das equações resultantes, que tem duas exponenciais (de onde provém o nome do modelo), permite contemplar as situações com uma elevada concentração de sólidos (abaixo da alimentação), bem como com uma concentração de sólidos pequena (acima da alimentação). Impõe ainda a limitação de passagem de sólidos para uma camada inferior caso esta tenha atingido uma concentração limite (que depende do tipo de lamas) e estabelece que uma camada inferior não pode ter uma concentração de sólidos inferior à que se encontra imediatamente acima, para que o modelo seja consistente em termos físicos. Este tipo de limite origina equações não

diferenciáveis. Por tudo o que foi descrito, este modelo é o ideal para simulações. No entanto, ao ser usado num processo de optimização, não são previstos os eventos de pico. Por essa razão, o sedimentador obtido deste modo não é robusto.

A análise destes modelos bem como a sua utilização em processos de optimização de ETARs são feitas no Capítulo 4.

# Capítulo 3

## Funções custo

Para que o processo de otimização seja mais eficiente, deve incluir-se em simultâneo custos de investimento e operação, bem como todas as unidades de tratamento presentes. Isso é conseguido de forma simples através de funções custo. É aqui explicado como são obtidas, depois de uma breve análise a alguns conceitos de engenharia de custos. Apresentam-se os resultados utilizando funções custo adaptadas da literatura e também de outras obtidas através de dados reais. Por fim faz-se uma breve apresentação da programação geométrica.

### 3.1 Introdução

No capítulo anterior foram feitas experiências baseadas em funções objectivo muito simples. Pretendeu-se analisar o impacto que cada uma das variáveis teria no desenho do tanque arejador. No caso da minimização do volume do tanque simulou-se a minimização dos custos de investimento, no caso do caudal de ar os custos de operação e no caso da carga poluente pretendeu-se maximizar o desempenho desta unidade de tratamento.

Por forma a incluir todas estas variáveis numa mesma análise, torna-se mais conveniente utilizar uma função custo que traduza de alguma forma o custo total do sistema, seja em termos de custos de investimento, seja em termos de custos de operação. Para desenvolver uma função custo apropriada, parece necessário introduzir algumas noções básicas de engenharia de custos.

## 3.2 Noções básicas de engenharia de custos

Os investimentos decorrem sempre ao longo do tempo e o tempo tem um valor monetário. Um investidor espera que o seu investimento cresça de interesse ao longo do tempo, sob a forma de valorização monetária. O aumento do investimento deve ter em atenção o tempo, muito à semelhança do aumento num depósito bancário, mas a valorização do dinheiro numa aplicação financeira concretiza-se sem ser necessária qualquer transacção bancária.

Considera-se um determinado valor  $P$  que valoriza à taxa  $i$  (decimal) por ano. Ao fim de um ano

$$S_1 = P + iP = P(1 + i)$$

ou seja,  $P(1 + i)$  vai ser o valor inicial no começo do segundo ano. No fim do segundo ano ter-se-á

$$S_2 = P(1 + i) + iP(1 + i) = [P(1 + i)](1 + i) = P(1 + i)^2.$$

Repetindo para o ano seguinte vem:

$$S_3 = P(1 + i)^2 + iP(1 + i)^2 = [P(1 + i)^2](1 + i) = P(1 + i)^3$$

e para  $n$  anos

$$S = P(1 + i)^n. \tag{3.1}$$

Isto significa que o valor futuro é igual a um valor presente que multiplica por um factor de interesse composto.

A valorização monetária é contínua, no entanto, por uma questão de simplicidade considera-se, na maior parte das vezes, discreta. Neste trabalho adoptou-se esta estratégia, sendo que a unidade de tempo utilizada foi o ano.

A equação (3.1) pode reescrever-se como expressão do valor presente  $P$  em função de  $S$ , o valor futuro,

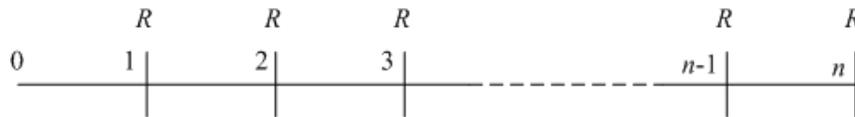
$$P = S(1 + i)^{-n}. \tag{3.2}$$

Pelas equações (3.1) e (3.2) pode constatar-se que uma quantia futura se reduz quando convertida para um valor presente. Isto deve-se ao facto de, por causa do valor temporal do dinheiro, o futuro não valer tanto como o presente, quando observado a partir deste.

Na engenharia de custos, despesas e receitas devem ser representadas em linhas verticais, posicionadas ao longo de uma linha horizontal que simboliza o tempo, apontando em sentidos opostos. Deste modo, o problema pode ser visualizado e cada quantia pode ser movida para o instante comum que está a ser considerado. O instante de referência é chamado o ponto focal [43, 74].

### Receita anual uniforme

Considere-se uma renda uniforme de final de ano de quantidade  $R$  por um período de  $n$  anos. O diagrama é:



em que  $R$  será a renda. Estes termos  $R$  podem ser substituídos por um único valor presente  $P$ , movendo os termos para o tempo zero, usando uma relação de conversão tempo-valor:

$$P = R \left[ \frac{1}{1+i} + \frac{1}{(1+i)^2} + \cdots + \frac{1}{(1+i)^n} \right].$$

Seja  $\Gamma$  o termo entre parêntesis que corresponde à soma de uma série geométrica de  $n$  termos com o primeiro termo igual a  $\frac{1}{1+i}$  e razão  $\frac{1}{1+i}$ . Como a soma da série é dada por

$$\text{Soma} = \frac{1 - \text{razão}^{\text{número de termos}}}{1 - \text{razão}} \text{ (primeiro termo)},$$

obtém-se uma expressão mais simples para  $\Gamma$ ,

$$\Gamma = \sum_{j=1}^n \frac{1}{(1+i)^j} = \frac{1 - \left[ \frac{1}{(1+i)^n} \right]}{1 - \left[ \frac{1}{(1+i)} \right]} \frac{1}{1+i} = \frac{(1+i)^n - 1}{i(1+i)^n} = \frac{1 - (1+i)^{-n}}{i}. \quad (3.3)$$

Assim, o valor presente em função da renda pode escrever-se na forma

$$P = R\Gamma.$$

Esta relação é muito importante para a definição de uma função custo que descreva os custos de investimento e de operação de uma ETAR, como se verá nas secções seguintes.

### 3.3 Funções custo na literatura

As funções custo surgem para descrever a instalação e operação de uma ETAR, de modo a reflectir a influência de cada processo unitário.

Uma função custo descreve de forma mais detalhada e fidedigna a optimização do sistema porque inclui em simultâneo os custos de investimento e operação, bem como todos os processos intervenientes no tratamento das águas residuais.

As funções custo mais utilizadas são do tipo  $C = aZ^b$  [47]. São apresentados alguns exemplos de funções custo no Apêndice C, de uma recolha feita por Gillot *et al.* [27]. Os custos de investimento têm todos esta estrutura de base, já que é um modelo que se adequa bem a este tipo de estimativa. No entanto, as funções custo de operação são lineares, uma vez que tratam de custos energéticos, de materiais, de reagentes ou de mão-de-obra.

Os parâmetros  $a$  e  $b$  devem ser estimados e dependem dos dados de que se dispõe. Significa que estão directamente relacionados com o efluente que se pretende tratar, com os custos materiais e humanos e, por isso, dependem do espaço e do tempo onde se pretende instalar a ETAR.  $Z$  é a variável de projecto do processo unitário em causa que mais influencia o custo.

A função custo final resulta do somatório de todas as parcelas que provêm de cada processo unitário.

As funções custo podem ser obtidas directamente a partir das existentes na literatura, como a seguir se descreve. São usados os parâmetros  $a$  e  $b$  já estimados e actualizam-se os custos.

A primeira tentativa que se fez para a obtenção de uma função custo foi através das referidas nos trabalhos de Tyteca [60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67]. Estas foram devidamente actualizadas através da adopção de indicadores económicos. O que pareceu mais adequado para o caso das ETARs foi o Chemical Engineering Plant Index (CEPI) [1]. Trata-se de um índice obtido para a construção de reactores químicos, que se considerou adequado usar neste estudo, dado que as unidades de tratamento de uma ETAR são de construção semelhante.

Os custos de operação encontram-se numa base anual. Como tal, é necessário passá-las para um valor presente, ou seja, para a mesma base do custo de investimento. Isto é conseguido através do parâmetro  $\Gamma$  (3.3), que transforma rendas anuais em valor presente.

A função custo (custo total,  $CT$ ) para cada processo unitário vai ser dada pela soma dos custos de investimento e dos custos de operação, ou seja,

$$CT = CI + CO$$

em que  $CI$  representa o custo de investimento e  $CO$  o custo de operação do processo. Para se obter a função custo da ETAR, somam-se os custos de todos os processos unitários que a constituem.

A função custo de investimento encontrada para o tanque arejador é dada por

$$CI_{arejador} = 461\Psi V_a^{0.71} + 6530\Psi G_S^{0.71}; \quad (3.4)$$

por sua vez, a função custo de operação é dada por

$$CO_{arejador} = 53.9\Gamma w_{ma} G_S^{0.6} + 121\Gamma w_{op} G_S^{0.55} + 65\Gamma P_c HP, \quad (3.5)$$

em que  $\Psi$  é o parâmetro económico que permite actualizar as funções custo apresentadas do ano de 1971 para o ano de 2002, e é dado por

$$\Psi = \frac{394.3}{132.2}. \quad (3.6)$$

Foram usados valores de 2002 uma vez que estas experiências foram feitas em 2003, e nessa altura apenas se dispunha dos parâmetros respeitantes ao ano de 2002.

$w_{ma}$  e  $w_{op}$  representam respectivamente os ordenados horários para manutenção e operação. Da mesma forma estes valores foram actualizados para 2002 e os valores obtidos foram  $w_{ma}=22.02$  euros e  $w_{op}=19.70$  euros.  $P_c$  é o custo da energia eléctrica (euros/KWh) e  $HP$  é a potência das bombas de arejamento (Watt).

No caso do sedimentador, o custo de investimento é representado por

$$CI_{sedimentador} = 824\Psi A_s^{0.77} \quad (3.7)$$

e o de operação por

$$CO_{sedimentador} = 9.23\Gamma w_{ma}A_s^{0.6} + 8.62\Gamma\Psi A_s^{0.76} + 17.1\Gamma w_{op}A_s^{0.6}. \quad (3.8)$$

Estas funções custo têm a desvantagem de não se basearem em dados característicos de Portugal, mais ainda de uma determinada região de Portugal. Além disso, no caso dos custos de mão-de-obra, as ETARs evoluíram muito, ou seja, há muito menos necessidade de pessoas a trabalhar directamente uma vez que os processos estão, de uma maneira geral, totalmente automatizados. Por essa razão, partiu-se para uma recolha de dados reais, numa região onde estavam a ser construídas ETARs. Quanto mais concretos forem os dados, mais rigorosa será a solução obtida.

### 3.4 Funções custo obtidas através de dados reais

Uma forma de obter funções custo mais fidedignas é através do recurso directo a dados reais de empresas construtoras de ETARs, de preferência instaladas na zona onde se pretende efectuar o estudo.

Através de dados reais e actuais, fornecidos por uma empresa que gere a construção de ETARs, e que dizem respeito à realidade portuguesa, em particular no norte de Portugal (Alijó, Murça, Sabrosa e Sanfins do Douro), chegou-se a funções custo, para essa região e para um determinado tipo de ETARs.

Mantém-se a estrutura das funções custo apresentadas na secção anterior, dada a sua aceitação pela comunidade científica.

O modelo  $C = aZ^b$  é não linear nos parâmetros. No entanto, pode ser facilmente linearizado; aplicando logaritmo em ambos os termos,

$$\ln C = \ln a + b \ln Z \quad (3.9)$$

e são estimados os parâmetros  $\ln a$  e  $b$ . A partir do primeiro facilmente se obtém o parâmetro  $a$  do modelo original. Estes parâmetros foram estimados pela técnica dos mínimos quadrados, que recorre a polinómios ortogonais.

Considera-se que a deslocação dos fluidos se efectua exclusivamente por acção da gravidade, não se considerando a existência de bombas.

Desprezaram-se todos os custos que são iguais, que no caso das quatro ETARs observadas, são o custo do terreno, a instalação dos quadros eléctricos, o tratamento paisagístico, entre outros. Sendo constantes, não têm qualquer influência no desenho obtido pelo processo de optimização, mas se for pretendido avaliar o custo final da ETAR têm que ser considerados.

Apesar de na maioria dos projectos serem considerados valores de sucata e/ou desmantelamento no fim de vida do empreendimento, no caso das ETARs, estes não são considerados, uma vez que é usual fazer-se uma actualização ou remodelação em termos de construção civil após os 20 anos de vida considerados no projecto. Em relação aos elementos electromecânicos, todos os componentes são substituídos de 10 em 10 anos.

### 3.4.1 Tanque arejador

Tabela 3.1: Dados referentes ao arejador

$V_a$ ( $m^3$ )	$G_S$ ( $m^3/dia$ PTN)	$HP$ (KW.h) (base anual)	Custo (euro)	
			Const. civil	Electromecânica
400	437.448	27720	87158.00	8416.00
600	596.52	129600	159796.00	10029.33
1000	942.5016	95040	189952.00	12198.67
1300	1282.518	162000	366145.50	17056.00

Com os dados recolhidos, apresentados na Tabela 3.1, formulou-se a função custo para o arejador. Esta tem duas componentes. A primeira refere-se à construção civil do tanque e depende do volume. A segunda diz respeito à utilização de material electromecânico (arejadores) e depende do caudal de ar necessário ( $G_S$ ).

O custo de investimento obtido para o arejador foi

$$CI_{arejador} = 148.6V_a^{1.07} + 7737G_S^{0.62}. \quad (3.10)$$

Os dados recolhidos dizem respeito a um conjunto de ETARs ainda em fase de projecto, como tal, não se dispõe de dados de operação. No entanto, pela experiência adquirida pela empresa em questão, que além de instalar as estações de tratamento também as gere durante a sua vida útil, toma-se como aceitável que as despesas de manutenção para a parte de construção civil são cerca de 1% durante os primeiros 10 anos de vida da ETAR e cerca de 2% nos 10 anos seguintes. As despesas de manutenção da componente electromecânica são desprezáveis, considerando-se apenas que todo este material é substituído passados 10 anos de operação, tal como foi referido. Usando o termo  $\Gamma$  já definido (3.3), obtém-se a função custo de operação para o arejador:

$$CO_{arejador} = [0.01\Gamma + 0.02\Gamma(1+i)^{-10}] (148.6V_a^{1.07}) + (1+i)^{-10}7737G_S^{0.62} + 115.1\Gamma P_c G_S. \quad (3.11)$$

O termo  $(1+i)^{-10}$  utiliza-se para transportar um valor futuro (neste caso a 10 anos de distância) para um valor presente.  $P_c$ , o custo da energia, considerou-se igual a 0.08 euros/KWh.

Esta função custo tem uma estrutura diferente das que se encontram na literatura para custos de operação, que se baseiam em relações lineares (Apêndice C), pelo motivo já referido de não se dispor de dados de operação. A excepção é o último termo de (3.11) que diz respeito ao consumo energético. A potência dos arejadores a instalar é conhecida, bem como o custo da energia em Portugal. Em relação aos custos de mão-de-obra, são considerados constantes em todas as ETARs estudadas, já que, tendo em conta a gama de dimensões, o número de trabalhadores necessário em cada uma delas será o mesmo.

### 3.4.2 Sedimentador secundário

Para o sedimentador, o custo de investimento é dado pelo mesmo modelo de função custo que a do tanque arejador, já que a construção é do mesmo tipo. Dispondo-se de vários dados de áreas ( $A_s$ ) e profundidades ( $h$ ) de sedimentadores e respectivos custos de construção, considerou-se uma função custo dependente da área de sedimentação e da altura do tanque, já que são estas variáveis que mais influenciam este processo unitário.

Tabela 3.2: Dados referentes ao sedimentador

$A_s$	$h$	Custo
51.8	3.55	39355.00
71.4	3.9	61348.00
100	4.55	103741.00

Considerou-se um tanque que funciona apenas por acção da gravidade, isto é, não necessita de qualquer tipo de material electromecânico e é de fundo plano. Sendo assim, com os dados da Tabela 3.2 e com o mesmo procedimento matemático, obteve-se como função custo de investimento para o sedimentador

$$CI_{sedimentador} = 955.5A_s^{0.97} \quad (3.12)$$

e para o custo de operação, que diz respeito apenas à manutenção da construção civil,

$$CO_{sedimentador} = [0.01\Gamma + 0.02\Gamma(1+i)^{-10}] 148.6(A_s h)^{1.07}. \quad (3.13)$$

### 3.4.3 Tratamento das lamas

Uma das desvantagens do tratamento biológico de lamas activadas são precisamente as lamas que são produzidas em excesso e que têm que ser purgadas do sedimentador secundário. Quando as lamas saem deste processo unitário, parte delas é reciclada para o tanque arejador, mas há sempre uma parte em excesso que tem que ser extraída.

O destino que se lhes dá depende da ETAR. De entre os mais comuns, pode proceder-se à sua digestão, quer aeróbica, quer anaeróbica, sendo esta última a mais usual, de modo a estabilizarem-se as suas propriedades e a reduzir-se o seu volume.

De seguida podem ser espessadas, por sedimentação (acção da gravidade) ou por flotação/flutuação, obtendo-se novamente uma redução no volume.

Por último, são desidratadas por centrifugação ou com filtros, com ou sem adição de polímeros.

As lamas daqui resultantes podem ser usadas como fertilizante, no caso de não serem provenientes do tratamento de efluentes tóxicos, ou apenas depositadas em aterros ou incineradas.

No caso das quatro ETARs estudadas, localizadas no norte de Portugal (Alijó, Murça, Sabrosa e Sanfins do Douro), o método empregue é muito mais simples. As lamas são desidratadas através de uma centrífuga de alta eficiência e de seguida são transportadas para um aterro. Este procedimento é aplicável neste caso pois as ETARs referidas são de média dimensão. Numa ETAR de grande dimensão os custos energéticos tornariam este procedimento inoportável. Um sistema baseado numa prévia digestão de lamas, aeróbio ou anaeróbio, seria o mais apropriado.

### Função custo associada ao tratamento das lamas

Depois de se fazer uma análise pormenorizada dos custos associados à centrifugação e deposição de lamas nos quatro casos em análise, verificou-se que os custos de investimento são independentes do tamanho da ETAR. Por essa razão não são incluídos nesta análise.

Em termos de custos de operação, devem considerar-se a energia consumida pela centrífuga e o custo do transporte e deposição em aterro das lamas.

Os dados recolhidos, que dizem respeito à energia consumida pela centrífuga em função do volume do tanque arejador, encontram-se sumariados na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Consumos energéticos da centrífuga

$V_a$	Custo anual ( $HP \times P_c$ )
400	26057
600	26057
1000	48469
1300	48469

Seguindo o procedimento descrito na Subsecção 3.4.1, obteve-se para os custos energéticos da centrífuga a seguinte função:

$$C_{\text{centrífuga}} = 544.5V_a^{0.63}. \quad (3.14)$$

Relativamente aos custos associados ao transporte e deposição, estes estão directamente relacionados com a quantidade de lamas produzidas.

O custo do transporte é de 5 euros/tonelada e da deposição 50 euros/tonelada. Neste caso apenas tem que se obter uma relação destes custos com as lamas que são purgadas (em termos de massa) anualmente.

Sabe-se que é purgado um caudal  $Q_w$  m<sup>3</sup>/dia, com uma concentração  $SST_w$  g/m<sup>3</sup>. Fazendo os acertos necessários de unidades, chega-se facilmente à expressão

$$C_{\text{deposição}} = 0.02Q_wSST_w. \quad (3.15)$$

As expressões (3.14) e (3.15) encontram-se numa base anual. Para que possam ser adicionadas aos custos dados pelas equações (3.10) a (3.13) têm que se converter em valor presente com o termo  $\Gamma$  (3.3). Obtém-se, assim, o custo do tratamento de lamas:

$$C_{\text{lamas}} = 6786.7V_a^{0.63} + 0.249Q_wSST_w. \quad (3.16)$$

### 3.4.4 Resultados

Foram feitas experiências com a função custo obtida através da literatura (3.4) e (3.5) e também com a obtida através da recolha de dados reais (3.10) e (3.11). Estes resultados foram alcançados considerando apenas o tanque arejador.

Tal como para os problemas anteriores, estes foram codificados usando a linguagem AMPL [25] e foram resolvidos com o *solver* LOQO [68].

Verifica-se que, independentemente da função custo utilizada, os resultados atingidos em termos de desenho do tanque arejador são exactamente os mesmos, bem como quando se utiliza o caudal de ar como função objectivo, o que comprova uma vez mais que o volume é a variável que mais influencia o custo do tanque arejador. O facto de se obter valores mais elevados no caso da função custo de Tyteca deve-se ao facto desta função incluir

Tabela 3.4: Resultados considerando a função custo de Tyteca [64] e a função custo obtida a partir de dados reais como função objectivo, para  $N_{sol} \leq 15 \text{ g/m}^3$

limite de $S$	35	40	45	50
iterações (Tyteca)	41	42	32	48
iterações (dados reais)	44	43	37	48
custo de Tyteca (milhões de euros)	113	68	26	25
custo com dados reais (milhões de euros)	30	17	6	6
$V_a$	2947	939	211	200
$K_L a$	146.2	223.5	241.4	243.8
$G_S$	111 413	54 301	13 143	12 612
$S$	35	40	45	45.2
$N_{sol}$	8.8	6.0	8.3	8.4
$TRH$	0.74	0.23	0.053	0.05

mais termos que a baseada em dados reais, nomeadamente a mão de obra. Como já foi antes discutido, para os dados em análise desprezou-se tudo o que fosse constante, tendo em conta os vários tamanhos das ETARs estudadas, uma vez que não teriam qualquer influência no desenho obtido pelo procedimento de optimização. Por esta razão se obteve um custo mais baixo.

### 3.5 Programação geométrica

As funções custo apresentadas anteriormente têm a forma de um posinómio. Este tipo de função é característico de um problema de programação matemática, conhecido na literatura como programação geométrica.

A programação geométrica é uma técnica de optimização que permite manipular um certo tipo de funções com expoentes fraccionários ou negativos de forma eficiente.

Um polinómio do tipo

$$f = u_1 + u_2 + \cdots + u_n \quad (3.17)$$

é conhecido por posinómio quando cada termo da direita tem a forma

$$u_i = c_i X_1^{a_{1i}} X_2^{a_{2i}} X_3^{a_{3i}} \cdots X_n^{a_{ni}}$$

em que  $c_i$  deve ser uma constante positiva e os expoentes podem ser positivos, negativos ou zero. As variáveis  $X_1, \dots, X_n$  também são positivas.

A equação (3.17) é conhecida por função primal na programação geométrica. Na função dual, o óptimo pode ser calculado sem encontrar os valores das variáveis do problema, o que é exclusivo da programação geométrica.

Smeers e Tyteca [55] apresentam uma reformulação do modelo matemático obtido para uma ETAR baseado num problema signomial da forma

$$\begin{aligned} \min \quad & f(X) \equiv \sum_{i=1}^m c_{i0} \prod_{j=1}^n X_j^{a_{ji0}} \\ \text{s.a} \quad & \sum_{i=1}^{m_k} c_{ik} \prod_{j=1}^n X_j^{a_{ijk}} \leq \begin{cases} 1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}, \quad k = 1, 2, \dots, p \\ & X_j > 0, \quad j = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.18)$$

As expressões que aparecem nas restrições de desigualdade e na função objectivo  $f$  são posinómios, uma vez que todos os  $c_{ik}$  são positivos. No caso de conterem apenas um termo chamam-se monómios.

As vantagens deste tipo de programação advêm do facto de se poderem sempre escrever as expressões algébricas sob a forma de signómios. Além disso, um modelo deste tipo, pode ser descrito com facilidade na forma de uma tabela.

Na formulação apresentada são eliminadas as restrições com monómios, sendo estas incorporadas nas outras. De cada vez que se procede desta forma, o número de variáveis decresce em uma unidade. Também é usual substituir as igualdades (que surgem por exemplo nos balanços mássicos) por desigualdades, aumentando assim a região admissível e evitando não convexidades.

O grau de dificuldade,  $D$ , na programação geométrica é definido como o número total de termos  $T$  no posinómio, menos o número de variáveis independentes  $N$  mais um:

$$D = T - (N + 1).$$

A programação geométrica desenvolveu-se para ultrapassar as limitações de um problema do tipo definido em (3.18). No entanto, sempre que haja termos, quer na função objectivo, quer nas restrições, que não obedeçam a esta estrutura, estas têm que ser manuseadas de forma a que o algoritmo da programação geométrica possa ser aplicado. A remoção de cada uma destas limitações obtém-se à custa de um acréscimo na dificuldade matemática.

As restrições, mesmo as de desigualdade, podem ser incluídas usando o método de Lagrange dos multiplicadores indeterminados. A exigência de todos os termos da função objectivo terem que ser positivos também pode ser contornada [43].

As vantagens da programação geométrica são as seguintes. Se as funções com expoentes negativos e fraccionários se podem tratar de forma eficiente, não é necessário obter o valor de cada variável e até as restrições podem ser incorporadas nas técnicas de resolução.

Se o grau de dificuldade é superior a zero, o problema formulado pode ser mais complicado que o original. Outra desvantagem tem a ver com o facto de todas as variáveis terem de ser contínuas, ou pelo menos têm que ser tratadas como tal. Também não é aplicável a problemas de grandes dimensões e complexos, já que as equações não estariam, muito provavelmente, no formato adequado [3, 43, 47].

No caso concreto dos problemas tratados nesta tese, a programação geométrica não seria de todo aconselhável. Apesar da função objectivo se encontrar na forma favorável à aplicação deste tipo de algoritmo, nem todas as funções de restrição obedecem à estrutura apresentada em (3.18). O facto de algumas das restrições terem que ser manipuladas aumentaria de forma significativa a dificuldade do problema, o que o tornaria mais complexo que o original. Trata-se de uma situação em que as vantagens da programação geométrica são largamente sobrepostas pela complexidade do problema.

# Capítulo 4

## Sedimentador secundário

Neste capítulo faz-se uma análise detalhada dos principais modelos para um sedimentador secundário. Apresenta-se um modelo inovador que combina dois dos modelos tradicionais: ATV e DE. São mostrados resultados de optimização utilizando cada um dos modelos apresentados e é feita uma simulação com esses resultados que permite concluir que o modelo combinado ATV+DE é superior aos dois modelos quando usados separadamente, levando a desenhos mais robustos. São ainda apresentados resultados quando se inclui o tratamento final das lamas, considerando centrifugação e deposição em aterro.

### 4.1 Introdução

Para uma optimização completa do sistema de lamas activadas é necessário considerar-se, para além do tanque arejador, o sedimentador secundário. Há alguns modelos, mais ou menos complexos, que podem ser utilizados. Vão discutir-se, de seguida, as vantagens e limitações de alguns deles.

### 4.2 Ponto de separação simples

#### 4.2.1 Clarificação perfeita

O modelo mais simples de um sedimentador secundário é obtido assumindo um ponto de separação simples com clarificação perfeita [56]. Se o objectivo for o desenho do sedimen-

tador, então este modelo, só por si, não é de grande utilidade. No entanto, torna-se de extrema importância quando o objectivo é estudar o tanque arejador que lhe é adjacente num sistema de lamas activadas (Figura 4.1). Na sua simplicidade, este modelo adiciona conceitos importantes, tais como a taxa de reciclagem ( $r$ ) e a idade das lamas ( $SRT$ ). Seguidamente, apresentam-se as equações deste modelo.

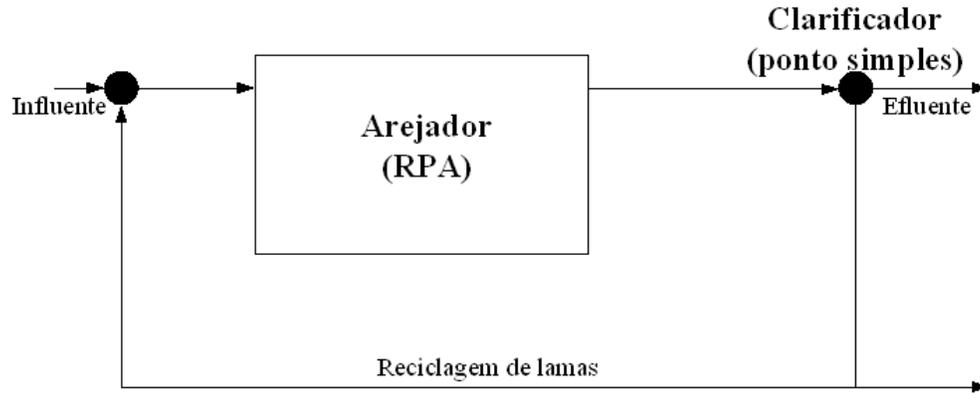


Figura 4.1: Representação esquemática do sistema de lamas activadas, considerando o sedimentador como um ponto de separação simples

Por definição, a taxa de reciclagem é a razão entre o caudal de lamas que retorna ao tanque arejador e o caudal de influente que entra no sistema:

$$r = \frac{Q_r}{Q_{inf}}. \quad (4.1)$$

Este conceito é de extrema importância na manutenção correcta de um tanque arejador, já que é responsável pela concentração adequada de lamas dentro do reactor.

A idade das lamas determina durante quanto tempo estas permanecem dentro do tanque arejador. Sabe-se que, para um bom desempenho na sedimentabilidade das lamas, este parâmetro deve variar entre 3 e 30 dias [12]. A sua definição é

$$SRT = \frac{V_a X}{Q_w X_r}. \quad (4.2)$$

O valor adequado da  $SRT$  depende do efluente a tratar. Para águas pouco poluídas é conveniente uma  $SRT$  de poucos dias, enquanto que para águas muito poluídas é desejável

o oposto. Uma  $SRT$  elevada implica lamas mais concentradas, um tanque arejador mais pequeno e uma maior área de sedimentação para o sedimentador. Em termos de custos, todos estes factores desempenham o seu papel.

Os balanços mássicos aos componentes em suspensão resultantes, considerando o sistema representado na Figura 4.1, são:

$$(1+r)Q_{inf}X_{Sent} = Q_{inf}X_{S_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_S - V_a \frac{X}{SRT} \left( \frac{X_{S_r}}{X_r} \right) \quad (4.3)$$

$$(1+r)Q_{inf}X_I = Q_{inf}X_{I_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_I - V_a \frac{X}{SRT} \left( \frac{X_{I_r}}{X_r} \right) \quad (4.4)$$

$$(1+r)Q_{inf}X_{BH_{ent}} = Q_{inf}X_{BH_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_{BH} - V_a \frac{X}{SRT} \left( \frac{X_{BH_r}}{X_r} \right) \quad (4.5)$$

$$(1+r)Q_{inf}X_{BA_{ent}} = Q_{inf}X_{BA_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_{BA} - V_a \frac{X}{SRT} \left( \frac{X_{BA_r}}{X_r} \right) \quad (4.6)$$

$$(1+r)Q_{inf}X_{P_{ent}} = Q_{inf}X_{P_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_P - V_a \frac{X}{SRT} \left( \frac{X_{P_r}}{X_r} \right) \quad (4.7)$$

e para a matéria dissolvida:

$$(1+r)Q_{inf}S_{Sent} = Q_{inf}S_{S_{inf}} + rQ_{inf}S_{S_r} \quad (4.8)$$

$$(1+r)Q_{inf}S_{O_{ent}} = Q_{inf}S_{O_{inf}} + rQ_{inf}S_{O_r} \quad (4.9)$$

$$(1+r)Q_{inf}S_{NO_{ent}} = Q_{inf}S_{NO_{inf}} + rQ_{inf}S_{NO_r} \quad (4.10)$$

$$(1+r)Q_{inf}S_{NH_{ent}} = Q_{inf}S_{NH_{inf}} + rQ_{inf}S_{NH_r} \quad (4.11)$$

$$(1+r)Q_{inf}S_{ND_{ent}} = Q_{inf}S_{ND_{inf}} + rQ_{inf}S_{ND_r} \quad (4.12)$$

$$(1+r)Q_{inf}S_{alk_{ent}} = Q_{inf}S_{alk_{inf}} + rQ_{inf}S_{alk_r} \quad (4.13)$$

$$QS = (Q - (Q_r + Q_w))S + (Q_r + Q_w)S_r. \quad (4.14)$$

Para que o sistema seja consistente, fazem-se também balanços aos caudais:

$$Q = Q_{inf} + Q_r \quad (4.15)$$

e

$$Q = Q_{ef} + Q_r + Q_w. \quad (4.16)$$

## Resultados

Para determinar o desenho óptimo deste sistema de lammas activadas tendo como objectivo minimizar os custos de operação e investimento, formulou-se um problema de programação matemática. As restrições que condicionam os valores das diferentes variáveis de decisão do problema apresentam-se de seguida. Às equações referentes ao modelo do Capítulo 2, em que se considerava apenas o tanque arejador, são adicionadas as que dizem respeito aos balanços mássicos que aparecem devido ao sedimentador (equações (4.3) a (4.14)), bem como os balanços aos caudais (equações (4.15) e (4.16)). São acrescentadas ainda as equações (4.1) e (4.2), que representam os novos conceitos acrescentados por este processo unitário.

Os valores dos parâmetros estequiométricos, cinéticos e operacionais são os apresentados nas Tabelas 2.2, 2.3 e 2.4. As características do caudal de entrada dizem agora respeito ao

Tabela 4.1: Características da água no influente ao sistema de lammas activadas

$Q$	$S_I$	$X_{BH}$	$X_{BA}$	$X_P$	$S_O$	$S_{NO}$	$S_{alk}$	$S_S$
2000	30	0	0	0	0	0	7	52.73
$X_I$	$X_S$	$S_{NH}$	$S_{ND}$	$X_{ND}$	$X_{II}$	$X$	$S$	
73.65	123	11.7	0.63	1.251	59.6	196.7	82.73	

influyente (entrada do sistema) e não à entrada do arejador, e podem ser vistas na Tabela 4.1. Estes valores foram obtidos através do simulador GPS-X [42] e são os valores típicos para efluentes maioritariamente domésticos.

A função objectivo neste caso é representada pela soma dos custos de investimento e operação do tanque arejador (3.10) e (3.11).

Estes problemas foram codificados em AMPL [25] e resolvidos com o *solver* LOQO [68].

Tal como esperado, o custo decresce à medida que a qualidade do efluente deteriora (Figura 4.2). Pela Tabela 4.2 pode verificar-se que o volume do tanque arejador não varia

muito (cerca de 9%), mas, pelo contrário, o caudal de ar decresce drasticamente de um valor de 12479 m<sup>3</sup>/dia PTN para 754.6 m<sup>3</sup>/dia PTN (cerca de 94%), o que confirma o facto de que os custos de operação predominam quando se considera um tempo de vida da ETAR comum. (Neste caso foram considerados 20 anos.)

Mais uma vez, a  $CQO$  solúvel atinge o limite imposto, excepto quando o valor do limite iguala o que entra no tanque arejador ( $S = 82.73$ ).

A idade das lamas ( $SRT$ ) é sempre o limite inferior imposto, 20 dias, uma vez que este implica um volume do tanque arejador menor e um caudal de ar mais baixo.

Foram feitas também experiências para outros limites de azoto, mas não se verificaram quaisquer alterações.

Tabela 4.2: Resultados para as variáveis de desenho e operação, considerando a função custo baseada em dados reais, para  $N_{ef} \leq 15$  g/m<sup>3</sup>

limite de $S$	45	55	65	75	85
iterações	78	89	94	105	155
Custo total	6.22	3.98	3.06	2.30	1.28
$V_a$	1383	1520	1520	1498	1476
$G_S$	12479	6146	3991	2426	754.6
$K_La$	34.9	15.6	10.2	6.26	1.98
$r$	0.50	1.01	1.36	1.52	0.5
$TRH$	0.46	0.38	0.32	0.30	0.49
$SRT$	20.0	20.0	20.0	20.0	20.0
$Q_w$	133	165	176	174	170
$S_{ef}$	45.0	55.0	65.0	75.0	82.73

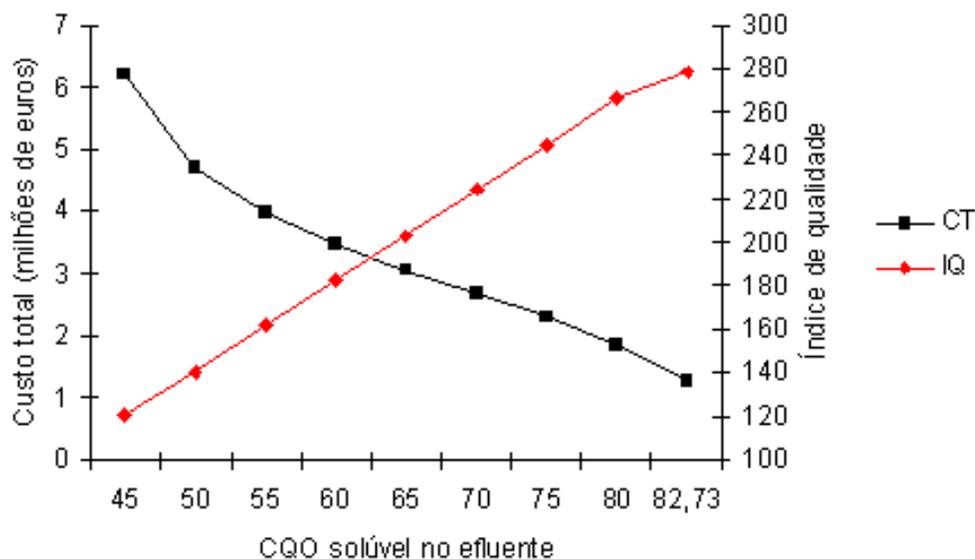


Figura 4.2: Custo total e índice de qualidade *versus* CQO solúvel no efluente, para a minimização da função custo, considerando o sistema de lamas activadas

#### 4.2.2 Saída de sólidos no efluente

Quando se considera a saída de sólidos no efluente, o modelo torna-se mais próximo da realidade. A única diferença em relação ao modelo anterior é que neste se inclui a saída de sólidos do sistema, quando se procede a balanços.

Nos balanços à matéria em suspensão são considerados os sólidos voláteis ( $X$ ) e os inorgânicos ( $X_{II}$ ). A relação  $SSV/SST$  à entrada é considerada 0.7 (valor típico para efluentes domésticos). No entanto, ao longo do sistema esta relação pode alterar-se, daí serem considerados os dois balanços em separado:

$$(1+r) Q_{inf} X_{ent} = Q_{inf} X_{inf} + (1+r) Q_{inf} X - \frac{V_a X}{SRT X_r} (X_r - X_{ef}) - Q_{inf} X_{ef} \quad (4.17)$$

e

$$(1+r) Q_{inf} X_{ent} = Q_{inf} 0.2 SST_{inf} + (1+r) Q_{inf} X_{II} - \frac{V_a X_{II}}{SRT X_r} (X_{IIr} - X_{IIef}) - Q_{inf} X_{IIef} \quad (4.18)$$

Há ainda a acrescentar o balanço ao azoto em suspensão, que não está incluído nos *SST*:

$$(1+r)Q_{inf}X_{ND_{ent}} = Q_{inf}X_{ND_{inf}} + (1+r)Q_{inf}X_{ND} - \frac{V_a X}{SRT X_r} (X_{ND_r} - X_{ND_{ef}}) - Q_{inf}X_{ND_{ef}}. \quad (4.19)$$

Relativamente à matéria dissolvida, os balanços são os mesmos que no modelo anterior.

Devido à saída de sólidos, há a necessidade de adicionar mais uma restrição de qualidade, de acordo com a lei vigente em Portugal:

$$SST_{ef} \leq 35. \quad (4.20)$$

Além disso, quer o azoto quer a *CQO* considerada nestes limites, dizem respeito também à fracção em suspensão:

$$N_{ef} \leq 15 \quad (4.21)$$

e

$$CQO_{ef} \leq 125. \quad (4.22)$$

Todos estes valores são os constantes na lei portuguesa (Decreto-Lei n<sup>o</sup> 152/97, de 19 de Junho).

## Resultados

Neste novo problema de optimização, os parâmetros de entrada são os mesmos que os considerados no caso anterior. A única diferença neste problema, em relação ao apresentado previamente, é que é permitida a saída de sólidos no efluente e os balanços vão ser, neste caso, os apresentados nas equações (4.17) a (4.19). Acrescentam-se ainda as restrições de qualidade (4.20) a (4.22).

A função objectivo a minimizar é a função custo representada pela soma dos custos de investimento e de operação do tanque arejador.

Este problema, que tem 53 parâmetros, 77 variáveis e 59 restrições, é já bastante próximo da realidade, sendo a sua complexidade razoável. A linguagem de modelação e *software* utilizados foram, respectivamente, o AMPL e o LOQO.

A Tabela 4.3 apresenta os valores obtidos para algumas das variáveis, para o custo total (em milhões de euros), bem como o número de iterações realizadas pelo LOQO, considerando o limite de  $N = 15$  e de  $SST = 35$ . Cada linha corresponde a um valor diferente de limite de  $CQO$  imposta à saída. Foram feitas experiências para valores entre 45 e 90, com intervalos de 5.

Tabela 4.3: Resultados para as variáveis de desenho e operação, considerando a função custo baseada em dados reais, para  $N_{ef} \leq 15$  g/m<sup>3</sup> e  $SST_{ef} \leq 35$  g/m<sup>3</sup>

$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	$V_a$	$G_S$	$r$	$Q_{ef}$	custo total	iteraões
45.0	33.2	5.7	813	14535	1.15	1973	6.72	41
50.0	33.2	9.0	886	8735	1.65	1970	4.77	39
55.0	33.2	10.3	907	6320	2.00	1970	3.86	45
60.0	33.2	10.9	911	4796	1.41	1970	3.23	57
65.0	33.2	11.4	910	3629	1.71	1969	2.71	55
70.0	33.2	12.0	905	2641	1.74	1970	2.23	58
75.0	33.2	12.4	898	1755	1.76	1970	1.75	57
80.0	33.2	12.8	890	933	1.85	1970	1.23	60
85.0	34.8	13.2	876	503	1.87	1971	0.900	49
85.4	35.0	13.2	874	503	1.87	1971	0.899	47

Considerando os sólidos, define-se novamente o índice de qualidade da seguinte maneira [10]:

$$IQ = \frac{Q_{ef}}{1000} (2 SST_{ef} + CQO_{ef} + 2 CBO_{ef} + 20 TKN_{ef} + 20 S_{NO_{ef}}) \quad (4.23)$$

e observando a Figura 4.3 verifica-se que o custo vai diminuindo à medida que se exige menos do efluente, ou seja, que a qualidade do efluente deteriora. O valor máximo da

$CQO$  que se atinge no efluente é de 85.4, ainda que se aumente o limite permitido à saída. Isto deve-se às restrições de consistência operacional, ou seja, a partir de um determinado mínimo o desenho não consegue tornar-se mais económico, ou tornar-se-á inoperante.

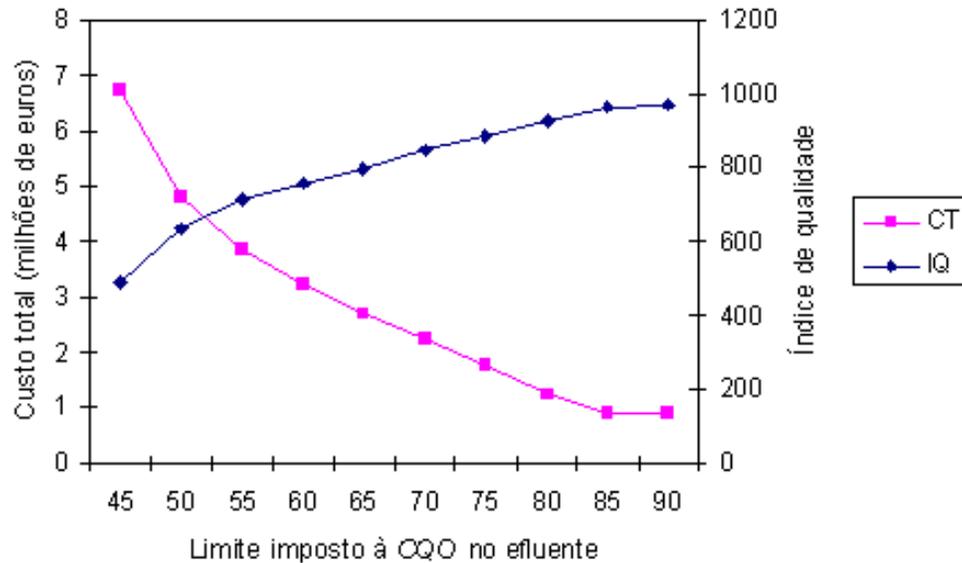


Figura 4.3: Custo total e índice de qualidade *versus*  $CQO$  no efluente, para a minimização da função custo, considerando o sistema de lamas activadas, com saída de sólidos

Fizeram-se experiências alterando os limites de azoto total e sólidos suspensos totais no efluente. No entanto, não houve qualquer implicação no custo final, uma vez que a  $CQO$  influi muito mais no desenho do sistema de lamas activadas do que qualquer uma das outras duas variáveis. Pode verificar-se ainda que o limite do azoto ( $15 \text{ g/m}^3$ ) nunca é atingido e o dos sólidos suspensos totais ( $35 \text{ g/m}^3$ ) é atingido apenas na última linha da Tabela 4.3. Isto significa que para se atingir a qualidade exigida em termos de matéria carbonada, é possível manter os valores de  $N_{ef}$  e  $SST_{ef}$  abaixo do exigido.

### 4.3 Modelo ATV

As normas ATV [12] descrevem o processo de sedimentação de forma bastante correcta, dando dimensões ao tanque sedimentador. Passa a ter-se assim o sistema completo de lamas activadas (Figura 4.4).

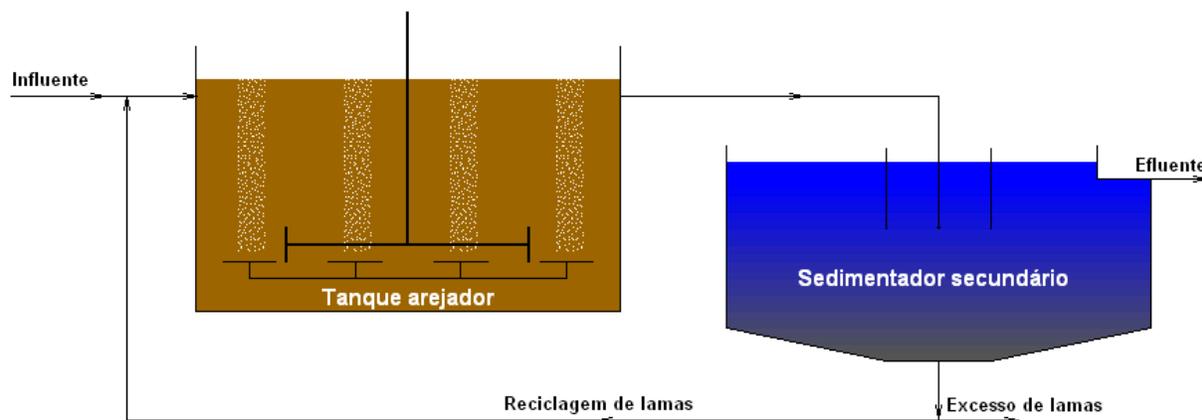


Figura 4.4: Representação esquemática de um sistema de lamas activadas (Adaptado do simulador GPS-X [42])

Trata-se de um modelo baseado em equações empíricas, mas que tem em conta os eventos de pico de caudal, durante os quais há uma redução da concentração das lamas.

De acordo com este modelo, estabelece-se uma relação entre o caudal de pico,  $Q_P$ , e a área de sedimentação,  $A_s$  (carga hidráulica,  $q_A$ ):

$$q_A = \frac{Q_P}{A_s} \leq 2400 (X_P IVLD)^{-1.34} \quad (4.24)$$

onde  $X_P$  representa a concentração de lamas no afluente à decantação secundária, durante a ocorrência do caudal de ponta, e  $IVLD$  é o índice de lamas diluídas. O sedimentador é dividido em quatro zonas (Figura 4.5). A zona de água clarificada,  $h_1$ , a zona de separação,  $h_2$ , a zona de armazenamento,  $h_3$ , e a zona de compactação,  $h_4$ .

A zona  $h_3$  é contemplada para fazer face aos eventos de pico. É alocada uma certa profundidade para suportar a flutuação de sólidos durante os eventos de pico, permitindo-

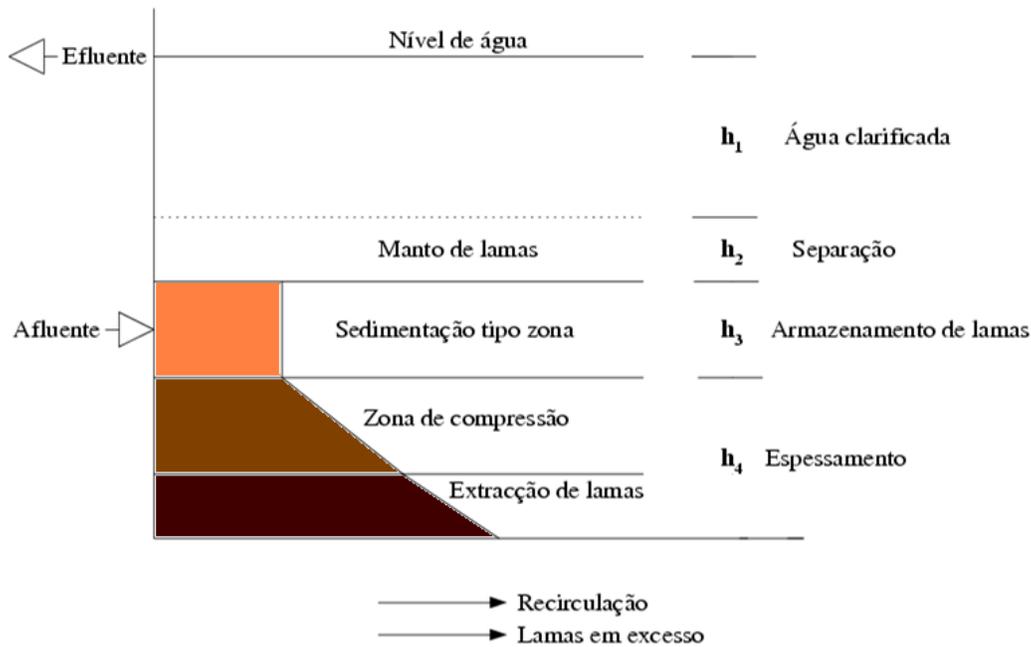


Figura 4.5: Perfil típico de concentração de sólidos - profundidade, adoptado pelas normas ATV (Adaptado de [12])

se assim uma redução na área de sedimentação:

$$h_3 = \Delta X V_a \frac{IVLD}{480 A_s} \quad (4.25)$$

onde  $\Delta X$  é a variação na concentração de lamas dentro do tanque arejador durante um evento de pico. Considera-se em geral uma redução na concentração das lamas de 30% nestes eventos.

A zona  $h_4$  permite às lamas espessarem de forma a atingir-se a concentração ideal para retornar ao tanque arejador. Esta depende apenas e só das características das lamas e é definida com base no  $IVLD$ , determinado em laboratório para cada tipo de lamas específico

$$h_4 = X_P \frac{IVLD}{1000}. \quad (4.26)$$

As alturas  $h_1$  e  $h_2$  são estabelecidas empiricamente, considerando-se 1 m a soma das duas.

A altura do tanque sedimentador é dada pelo somatório das alturas destas quatro zonas:

$$h = h_1 + h_2 + h_3 + h_4. \quad (4.27)$$

### 4.3.1 Resultados com dados do simulador GPS-X

Formulou-se um problema de optimização relativo ao sistema de lamas activadas, incluindo o tanque arejador e o sedimentador secundário.

Este problema contém 7 conjuntos de restrições.

1. balanços de massa ao tanque arejador usando o modelo ASM1 (equações (2.1) a (2.12));
2. modelo ATV do sedimentador secundário (equações (4.24) a (4.27));
3. igualdades lineares que definem as variáveis compostas (equações (2.13) a (2.20));
4. balanços ao sistema em termos de massa e caudais (equações (4.8) a (4.19));
5. variáveis de definição do sistema:

$$SRT = \frac{V_a X}{Q_w X_r}, \quad (4.28)$$

$$TRH = \frac{V_a}{Q}, \quad (4.29)$$

$$r = \frac{Q_r}{Q_{inf}}, \quad (4.30)$$

$$r_P = \frac{0.7 SST}{SST_{maxP} - 0.7 SST}, \quad (4.31)$$

$$Q_{rP} = r_P Q_P, \quad (4.32)$$

$$\frac{Q_P}{A_s} \leq 2, \quad (4.33)$$

$$\frac{SSV}{SST} = 0.7, \quad (4.34)$$

em que  $r_P$  e  $Q_{r_P}$  são, respectivamente, a taxa de reciclagem e caudal de reciclagem, durante um evento de pico.  $SST_{max_P}$  é a concentração máxima de sólidos suportada durante um evento de pico;

6. limites simples nas variáveis - todas são não negativas, no entanto algumas, devido a limitações operacionais, têm limites mais apertados (equações (2.23) a (2.31));
7. restrições de qualidade no efluente (equações (4.20) a (4.22)).

A função custo utilizada como função objectivo diz respeito aos custos de investimento e operação para o tanque arejador e para o sedimentador secundário, obtidas através de dados reais (equações (3.10) a (3.13)), e é dada por:

$$F_{obj} = 174.2V_a^{1.07} + 12487G_S^{0.62} + 114.8G_S + 955.5A_s^{0.97} + 41.3(A_s h)^{1.07}. \quad (4.35)$$

Esta formulação contém 57 parâmetros, 82 variáveis e 64 restrições, onde 28 são igualdades não lineares, 35 são igualdades lineares e apenas 1 é uma desigualdade não linear. Das variáveis, 71 são limitadas inferiormente e 11 são limitadas inferior e superiormente.

Os parâmetros estequiométricos, cinéticos e operacionais são os dados pelas Tabelas 2.2 a 2.4.

As características da água residual à entrada são dadas pela Tabela 4.1. Mais uma vez, este problema foi codificado na linguagem AMPL e os resultados foram obtidos correndo o LOQO. No critério de paragem considerou-se as não admissibilidades primal e dual  $\leq 10^{-5}$  e dois dígitos de concordância entre as funções objectivo primal e dual. Todos os outros parâmetros foram deixados com os valores por defeito do *solver*. A necessidade de alterar algumas tolerâncias do critério de paragem tem a ver com a complexidade do problema.

Tabela 4.4: Variáveis do problema e seus valores iniciais (val. inic.)

variável	val. inic.	variável	val. inic.	variável	val. inic.	variável	val. inic.
$Q$	4000	$X_{BH_{ent}}$	0	$X_{ND_{ent}}$	0	$SSV_r$	0
$Q_w$	100	$X_{BH}$	350	$X_{ND}$	20	$SSV_{ef}$	0
$Q_r$	2000	$X_{BH_r}$	711	$X_{ND_r}$	0	$SST_{ent}$	0
$Q_{ef}$	1900	$X_{BH_{ef}}$	0	$X_{ND_{ef}}$	0	$SST$	1800
$Q_{r_p}$	0	$X_{S_{ent}}$	0	$K_{La}$	100	$SST_r$	5000
$r$	1	$X_S$	350	$G_S$	10000	$SST_{ef}$	10
$V_a$	1000	$X_{S_r}$	807	$X_{ent}$	0	$X_{II}$	0
$A_s$	1000	$X_{S_{ef}}$	0	$X$	1000	$X_{II_{ef}}$	0
$h_3$	0	$X_{BA_{ent}}$	0	$X_r$	4440	$X_{II_r}$	0
$h_4$	0	$X_{BA}$	$10^{-6}$	$X_{ef}$	0	$BOD_{ent}$	0
$r_p$	0	$X_{BA_r}$	$2 \times 10^{-6}$	$S_{ent}$	0	$CBO$	500
$X_I$	727	$X_{BA_{ef}}$	0	$S$	50	$CBO_r$	0
$X_{I_r}$	950	$S_{NH_{ent}}$	0	$S_{alk_{ent}}$	0	$CBO_{ef}$	0
$X_{I_{ef}}$	0	$S_{NH}$	7.5	$S_{alk}$	7	$TKN_{ent}$	0
$S_{S_{ent}}$	0	$X_{P_{ent}}$	0	$COD_{ent}$	0	$TKN$	106
$S_S$	10	$X_P$	90	$CQO$	1600	$TKN_r$	0
$S_O$	2	$X_{P_r}$	175	$CQO_r$	0	$TKN_{ef}$	0
$S_{O_{ent}}$	0	$X_{P_{ef}}$	0	$CQO_{ef}$	0	$N_{ent}$	0
$S_{NO_{ent}}$	0	$S_{ND_{ent}}$	0	$SSV_{ent}$	0	$N_r$	0
$S_{NO}$	$10^{-6}$	$S_{ND}$	0.5	$SSV$	1050	$N_{ef}$	0
$HRT$	3.5	$N$	106				

De qualquer forma, a precisão dos resultados obtidos pode considerar-se satisfatória tendo em conta que se trata de um problema real e o valor que se procura (em unidades de milhão de euros) é aceitável com dois dígitos de concordância.

Na Tabela 4.4 estão listadas todas as variáveis envolvidas no problema, bem como os respectivos valores iniciais.

Nestas experiências foram considerados vários limites de  $CQO$  no efluente, isto é, na restrição de qualidade (4.22). O valor 125 é substituído por valores que variam entre 45, que é o valor mínimo para o qual se conseguiu convergência, e 140. O problema não

Tabela 4.5: Resultados para algumas das variáveis considerando diferentes limites de  $CQO$  no efluente

lim. $CQO$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	$V_a$	$A_s$	$h$	$G_S$	$r$	$Q_{ef}$	CT	iter.
45	0.40	5.9	1346	337	3.5	14521	1.8	1933	7.2	86
50	0.16	9.0	1483	332	3.7	8735	1.8	1929	5.3	72
55	1.8	10.2	1525	330	3.7	6320	1.8	1931	4.4	75
60	1.8	11.0	1498	341	3.7	4796	1.9	1931	3.8	75
65	0.93	11.7	1462	351	3.6	3629	2.0	1931	3.2	89
70	0.50	12.2	1454	351	3.6	2641	2.0	1930	2.8	92
75	0.32	12.4	1444	351	3.6	1755	2.0	1932	2.3	100
80	0.15	12.7	1431	351	3.6	933	2.0	1929	1.8	113
85	1.6	13.1	1408	351	3.6	503	2.0	1930	1.4	84
90	4.9	13.2	1373	351	3.5	503	2.0	1930	1.4	71
95	8.3	13.3	1338	351	3.5	503	2.0	1935	1.4	52
100	11.7	13.6	1303	351	3.4	503	2.0	1932	1.4	54
105	15.1	13.9	1268	351	3.4	503	2.0	1933	1.4	55
110	18.4	14.1	1233	351	3.3	503	2.0	1934	1.4	61
115	21.8	14.2	1197	351	3.3	503	2.0	1942	1.3	67
120	25.2	14.3	1162	351	3.2	503	2.0	1941	1.3	59
125	28.7	14.4	1136	347	3.2	503	2.0	1941	1.3	110
130	32.3	14.4	1117	340	3.1	503	1.9	1946	1.3	209
135	35.0	14.5	1099	334	3.1	503	1.8	1948	1.3	266
140	35.0	14.5	1099	334	3.1	503	1.8	1946	1.3	271

converge para valores inferiores pela razão de que há um mínimo abaixo do qual não é possível melhorar mais a qualidade do efluente, devido à fracção inerte ( $S_I$ ) que não é possível eliminar num processo biológico.

A solução para algumas das variáveis mais importantes está listada na Tabela 4.5, tais como sólidos suspensos totais, azoto total, volume do tanque arejador, área de sedimentação e profundidade do sedimentador secundário, caudal de ar, taxa de reciclagem, caudal de efluente e custo total ( $CT$ ) em milhões de euros. Tudo isto para os diferentes valores limite de  $CQO$  imposta na saída do sistema. Na última coluna da tabela mostra-se ainda

o número de iterações (iter.) usadas pelo LOQO para convergir para a solução, de acordo com o critério de paragem estipulado.

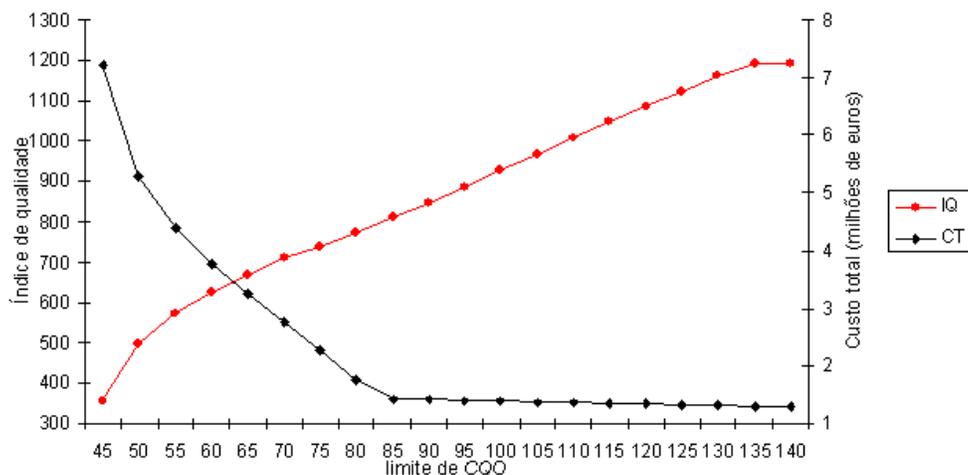


Figura 4.6: Custo total e índice de qualidade *versus* limite de  $CQO$  no efluente

Para uma interpretação mais imediata dos resultados, foram mais uma vez construídos gráficos. Num deles (Figura 4.6) esquematiza-se o custo total e o índice de qualidade (4.23) como função do limite de  $CQO$ . As Figura 4.7 e 4.8, por sua vez, compara a contribuição relativa dos custos de investimento/operação e tanque arejador/sedimentador secundário.

Pela observância da Tabela 4.5 e da Figura 4.6, o custo total decresce e a qualidade do efluente deteriora à medida que o limite da  $CQO$  imposto aumenta. Em termos de custo total, a redução é mais pronunciada para limites de  $CQO$  entre 45 e 85. Acima deste valor a redução no custo observada é muito pequena. Por exemplo, quando o limite da  $CQO$  é  $85 \text{ g/m}^3$ , o custo mínimo atingido é de 1.4 milhões de euros, enquanto para um limite de  $125 \text{ g/m}^3$  esse valor decresce para 1.3 milhões de euros. Isto deve-se aos limites operacionais e ao facto de a partir de um certo ponto o preço do projecto já não diminuir.

Em relação ao índice de qualidade, deteriora mais acentuadamente até um limite na  $CQO$  de 60. Para valores mais elevados esta deterioração evolui de forma quase linear.

Outra observação pertinente prende-se com o facto de o limite da  $CQO$  ser sempre atingido, enquanto os  $SST$  no efluente só atingirem o limite quando a  $CQO_{ef}$  é de 135,

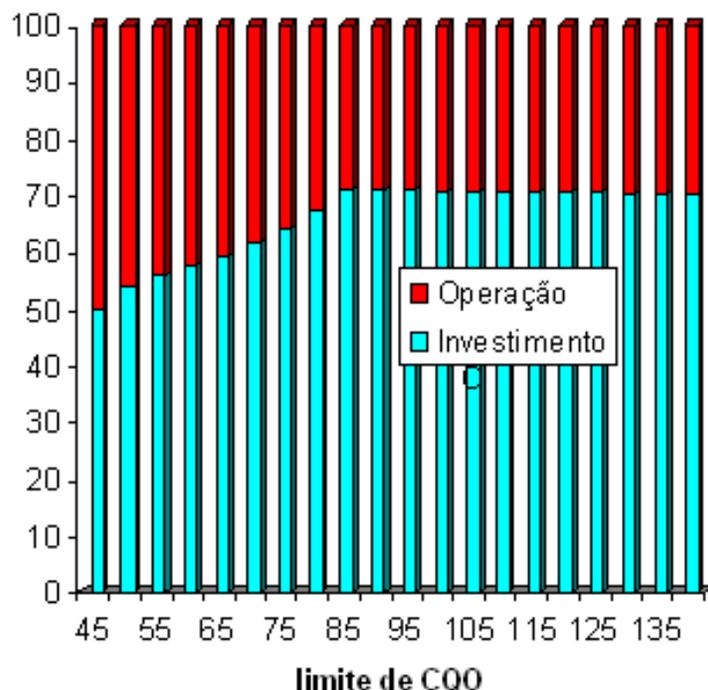


Figura 4.7: Contribuições dos custos de investimento e operação

ou mais, e o limite de  $N$  nunca ser atingido. Apesar disto, à medida que o limite da  $CQO$  aumenta, os  $SST$  e o  $N$  no efluente aumentam também. Isto significa que para o intervalo considerado, a matéria carbonada domina o processo, sendo a variável que acaba por determinar o custo. Isto vem reforçar a ideia já adquirida nas experiências anteriores.

Para limites de  $CQO$  entre 90 e 120, a área de sedimentação mantém-se em  $351 \text{ m}^2$ , enquanto a profundidade diminui, isto porque o modelo ATV permite uma troca entre a área de sedimentação e a profundidade. No entanto, os 5 primeiros casos, em que se tem  $A_s = 351$  e  $h = 3.6$  são aceitáveis, uma vez que a concentração de  $SST$  é mantida em valores baixos. Para valores mais elevados de  $CQO$ , quer a área de sedimentação, quer a profundidade do sedimentador diminuam.

O volume do tanque arejador e o caudal de ar, de uma maneira geral, diminuem à medida que as condições impostas à  $CQO$  são menos exigentes. Da redução dramática do caudal de ar verificada no intervalo  $[45, 85]$ , pode concluir-se que o caudal de ar é a

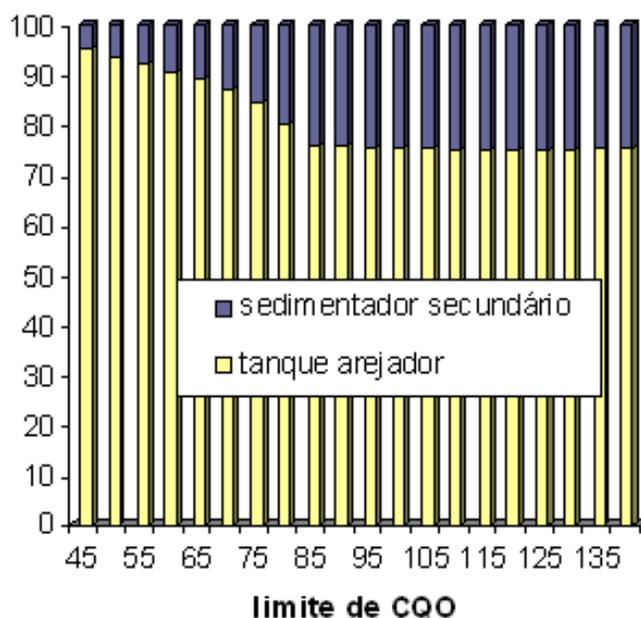


Figura 4.8: Contribuições dos custos do tanque arejador e do sedimentador secundário

principal contribuição para o custo total.

Relativamente à taxa de reciclagem, atinge o valor 2 (o seu máximo permitido) para um limite de  $CQO$  de 65 e isto acontece por duas razões. A primeira é que, para se atingir os  $SST$  mínimos no efluente, as lamas vão para a parte inferior do sedimentador. O segundo motivo é que, para se atingir a qualidade exigida é necessário manter tanta biomassa quanto possível dentro do tanque arejador.

Olhando para os custos com mais detalhe, e com a ajuda da Figura 4.7, pode observar-se que os custos de investimento se sobrepõem aos custos de operação, considerando o tempo de vida útil da ETAR igual a 20 anos. No entanto, para um sistema mais exigente, esta diferença é menor. Por exemplo, para um limite na  $CQO$  de 45, os custos de operação são equivalentes aos de investimento.

Em relação aos dois processos unitários estudados, pode concluir-se que o custo associado ao tanque arejador é muito mais elevado que o do sedimentador secundário, em especial para limites de  $CQO$  inferiores a 85. Veja-se a Figura 4.8.

Em ambos os casos descritos, as relações entre os custos mantêm-se quase constantes para limites de  $CQO$  de 85 ou superiores.

### 4.3.2 Resultados com dados reais

Neste segundo conjunto de experiências, consideraram-se dados reais de uma região do Norte de Portugal.

Os dados de entrada no sistema (Tabela 4.6) são os recolhidos nas 4 povoações onde as ETARs foram instaladas - Alijó, Murça, Sabrosa e Sanfins do Douro - e definem as condições médias que são cruciais para o dimensionamento da estação. Consistem na população equivalente (pop. eq.), caudal de entrada, caudal de pico,  $CQO_{inf}$  e  $SST_{inf}$ .

Tabela 4.6: Dados recolhidos das quatro povoações

	Localização da ETAR			
	Alijó	Murça	Sabrosa	Sanfins
pop. eq.	6850	3850	2750	3100
caudal de influente ( $m^3/dia$ )	1050	885	467.5	530
caudal de pico ( $m^3/h$ )	108	86.4	48.6	54
$CQO_{inf}$ ( $Kg/m^3$ )	2000	1750	1250	1250
$SST_{inf}$ ( $Kg/m^3$ )	750	660	610	610

Nestas experiências, e por conhecimento do desenho das ETARs em causa, consideraram-se várias reduções na carga poluente proporcionadas pelo tratamento primário, sabendo-se de antemão que esta eficiência varia entre 40 e 70%.

Para resolver estes problemas recorreu-se ao sítio da *internet* NEOS *Server*, que permite solucionar problemas de optimização em máquinas muito potentes de modo simples e empírico.

Dependendo do tipo de problema a resolver, o utilizador tem disponível uma lista de *solvers* dos quais pode escolher o que achar mais adequado. A atenção deve ser dada também à linguagem na qual o problema está codificado.

Para otimização não linear contínua, com restrições e codificação em AMPL, estão disponíveis os seguintes *solvers*: FILTER, IPOPT, LOQO 6.06, SNOPT 6.2, KNITRO, LANCELOT, MINOS, MOSEK e PENNON.

Desta lista foram excluídos de imediato o MOSEK, já que não funciona para problemas não convexos. Os KNITRO, LANCELOT, MINOS e PENNON foram igualmente excluídos, uma vez que não convergiram, uns para alguns dos problemas, outros para todos. Os quatro *solvers* restantes convergiram para todas as experiências, embora nem todos para a mesma solução.

### **FILTER**

O FILTER é um *software* desenvolvido por R. Fletcher e S. Leyffer e é baseado num algoritmo Filtro-PQS, que implementa Programação Quadrática Sequencial com regiões de confiança e um filtro que assegura a convergência global do método [22, 23]. A ideia do filtro é motivada pelo objectivo de evitar o uso de parâmetros de penalidade, tal como são requeridos pelo uso das funções mérito  $l_1$  ou Lagrangeana aumentada.

### **IPOPT**

O IPOPT (<http://www.research.ibm.com/people/a/andreasw/papers/ipoppt.pdf>) foi desenvolvido por A. Wächter, L. T. Biegler, A. Raughunathan e Yi-Dong Lang. Implementa um algoritmo primal-dual de pontos interiores com uma estratégia de procura unidimensional com filtro. Como método de barreira que é, este algoritmo calcula as soluções aproximadas de uma sucessão de problemas barreira (associados ao problema original) para uma sucessão decrescente de parâmetros barreira positivos a tenderem para zero. Os problemas barreira são resolvidos usando um algoritmo de procura unidimensional com filtro [71, 72, 73].

### **LOQO**

O *solver* LOQO (<http://www.princeton.edu/~rvdb/loqo/>) foi desenvolvido por R. J. Vanderbei e H. Y. Benson, baseando-se num método primal-dual de pontos interiores não ad-

missíveis com uma função mérito de penalidade  $l_2$  que assegura o progresso em direcção à admissibilidade e à optimalidade [54, 68].

### SNOPT

O SNOPT ([http://www.sbsi-sol-optimize.com/asp/sol\\_product\\_snopt.htm](http://www.sbsi-sol-optimize.com/asp/sol_product_snopt.htm)) é um método de Programação Quadrática Sequencial, para problemas de optimização de grandes dimensões que envolvam restrições lineares e não lineares, que usa uma estratégia de conjunto activo de restrições [26].

Na Tabela 4.7 pode observar-se a influência do tratamento primário no custo do sistema de lamas activadas. Apresenta-se o caso de Alijó com o *solver* FILTER. O valor do custo total vem dado em milhões de euros e na tabela está o registo do número de iterações necessárias ao FILTER para convergir, o número de avaliações da função (calc. func.) e o número de avaliações das restrições (calc. restr.).

Tabela 4.7: Comparação dos resultados na ETAR de Alijó, considerando diferentes reduções na  $CQO$  no tratamento primário

	redução da $CQO$		
	40%	55%	70%
custo total	11.33	7.62	5.25
iterações	28	20	21
calc. func.	15	11	10
calc. restr.	34	20	21

Como se pode verificar, a eficiência do tratamento primário é crucial, uma vez que, quanto mais elevada for a redução de  $CQO$  nesta unidade, mais baixos serão os custos de investimento e operação do sistema de lamas activadas. Faz-se aqui uma ressalva para o facto do custo do tratamento primário estar também relacionado de alguma forma com a sua eficiência. No entanto, não de maneira tão dramática como acontece no tratamento secundário. Posto isto, apresentam-se de seguida apenas os resultados considerando uma

eficiência de 70%, isto é, a situação mais favorável.

Tabela 4.8: Resultados para as ETARs estudadas para os diferentes *solvers*, considerando 70% de redução na *CQO* no tratamento primário

<i>Solver</i>		Localização da ETAR			
		Alijó	Murça	Sabrosa	Sanfins
FILTER	custo total	5.25	4.03	6.23	1.46
	iterações	21	20	19	40
	calc. func.	10	12	1	29
	calc. restr.	21	21	23	40
ILOPT	custo total	5.25	4.03	1.33	1.46
	iterações	53	50	68	63
	calc. func.	119	57	70	68
	calc. restr.	119	57	70	68
SNOPT 6.2	custo total	8.37	4.03	1.56	1.46
	iterações	346	529	853	665
	calc. func.	53	113	404	277
	calc. restr.	52	112	403	276
LOQO 6.06	custo total	8.36	5.91	1.56	1.70
	iterações	85	74	41	45
	calc. func.	85	74	41	45
	calc. restr.	85	74	41	45

A Tabela 4.8 contém o custo total mínimo (em milhões de euros) das quatro ETARs em estudo, o número de iterações necessárias para se encontrar a solução e o número de cálculos da função e das restrições, usando cada um dos *solvers* (FILTER, ILOPT, SNOPT 6.2 e LOQO 6.06). Os *solvers* encontraram a solução usando os valores dos parâmetros por defeito.

Pode verificar-se que a solução encontrada por cada um dos *solvers* não é sempre a mesma. Observa-se ainda uma vantagem em usar o *software* ILOPT, uma vez que converge para uma solução com o custo mais baixo em todas as ETARs.

Tabela 4.9: Solução do desenho e operação óptimos para as ETARs estudadas, considerando 70% de redução de  $CQO$  no tratamento primário e usando o *solver* IPOPT

	Alijó	Murça	Sabrosa	Sanfins
$V_a(\text{m}^3)$	1673	1203	395	448
$A_s(\text{m}^2)$	217	173	97	108
$h(\text{m})$	5.4	5.0	3.6	3.6
$G_S(\text{m}^3/\text{day STP})$	8707	6039	1147	1300
$CQO_{ef}(\text{g } CQO/\text{m}^3)$	98.8	99.6	125	125
$SST_{ef}(\text{g}/\text{m}^3)$	35	35	35	35
$N_{ef}(\text{g N}/\text{m}^3)$	8.2	9.5	13.0	13.0

A Tabela 4.9 contém os valores óptimos do volume do tanque arejador, área de sedimentação, caudal de ar,  $CQO$  no efluente,  $SST$  no efluente e  $N$  no efluente obtidos através do *solver* IPOPT para cada estação.

Pode verificar-se que o valor atingido para os  $SST$  é em todos os casos o imposto por lei. O mesmo já não acontece com a  $CQO$  e o  $N$ .

O azoto que está a entrar no sistema é apenas a quantidade requerida para assegurar o correcto crescimento das bactérias presentes nas lamas biológicas. Isto significa que nas povoações estudadas o azoto não atinge limites considerados poluentes. Por essa razão, na Tabela 4.6 o azoto não aparece como parâmetro de entrada. Sendo assim, é natural que se mantenha sempre abaixo dos limites impostos por lei.

Em relação à  $CQO$  a situação é distinta. Nas ETARs de maiores dimensões (Alijó e Sanfins do Douro) o limite imposto por lei nunca é atingido uma vez que para o sistema atingir o limite de  $SST$  é capaz de remover mais  $CQO$  que a exigida. Algo diferente se passa para as duas ETARs menores. Uma vez que são muito pequenas, o custo mínimo é atingido quando a  $CQO$  atinge o limite.

## 4.4 Modelo da dupla exponencial

O modelo da dupla exponencial (DE) [57] surge para dar resposta ao problema de existirem num tanque sedimentador zonas de concentrações de sólidos muito distintas. Há a zona do fundo do tanque onde a concentração de sólidos é muito elevada e ao mesmo tempo há o topo do tanque onde é retirado o efluente clarificado com uma concentração de sólidos muito baixa. Isto implica que não possam ser aplicados modelos de sedimentação dificultada ou discreta a todo o tanque.

Este modelo assume um sedimentador unidimensional, o qual é dividido em 10 camadas de igual espessura (Figura 4.9). São consideradas algumas simplificações:

- considera-se que não há reacções biológicas neste tanque, o que significa que a concentração de matéria dissolvida se mantém sempre constante ao longo de todas as camadas;
- é considerado apenas fluxo vertical;
- os sólidos são distribuídos uniformemente ao longo de toda a área transversal da camada de alimentação ( $j = 7$ ).

Este modelo é baseado na análise tradicional dos fluxos, mas o fluxo numa determinada camada é limitado pelo que pode ser suportado pela camada adjacente.

A função de sedimentação descrita neste modelo é

$$\nu_{s,j} = \max \left( 0, \min \left( \nu'_0, \nu_0 \left( e^{-r_h(SST_j - f_{ns}SST_a)} - e^{-r_p(SST_j - f_{ns}SST_a)} \right) \right) \right), \quad (4.36)$$

daí o seu nome de dupla exponencial. O primeiro termo exponencial caracteriza a velocidade de sedimentação para partículas grandes, enquanto o segundo é um factor de correcção da velocidade que tem em conta as partículas mais pequenas e lentas. Para concentrações baixas, a equação (4.36) é mais sensível a  $r_p$  e dá valores maiores de  $\nu_s$  à medida que a concentração aumenta. Para concentrações elevadas, esta equação reduz-se praticamente ao primeiro termo exponencial. As zonas de baixas e altas concentrações são separadas por uma região onde  $\nu_s$  atinge um valor máximo.

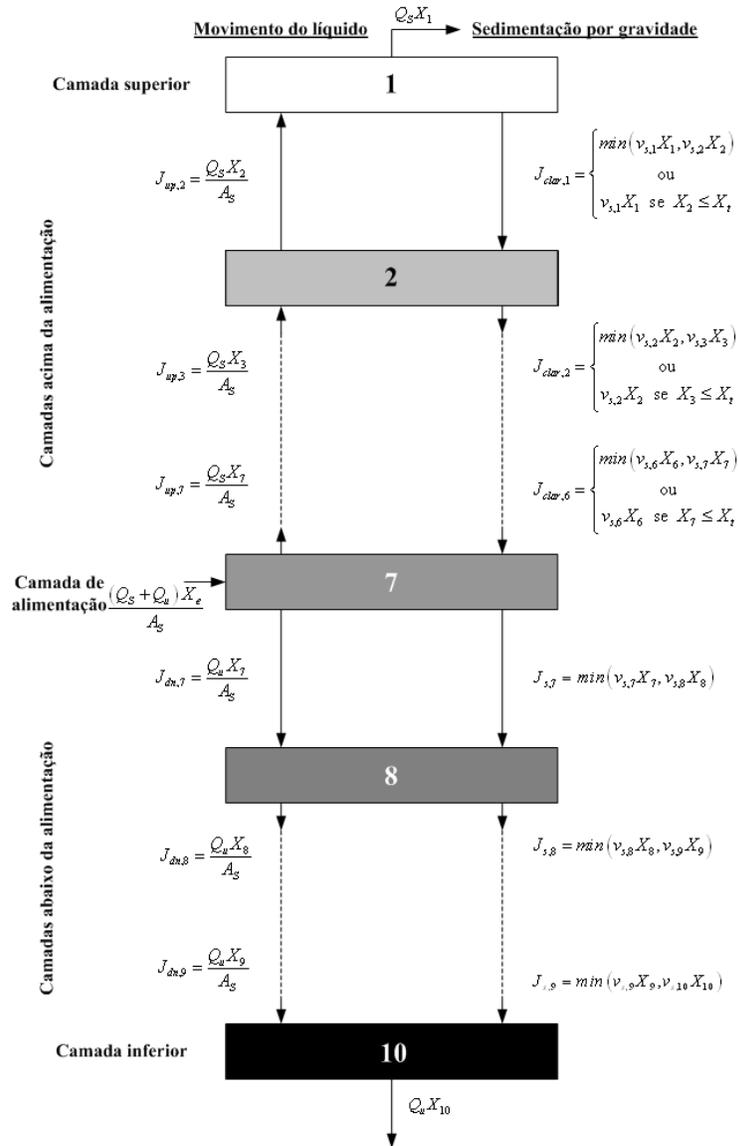


Figura 4.9: Balanços de sólidos em torno das camadas do sedimentador, de acordo com o modelo da dupla exponencial (adaptado de [57])

$\nu_{s,j}$  é a velocidade de sedimentação na camada  $j$ ,  $SST_j$  são os sólidos suspensos totais em cada uma das dez camadas do sedimentador e  $\nu_0$ ,  $\nu'_0$ ,  $r_h$ ,  $r_p$  e  $f_{ns}$  são parâmetros de sedimentação.  $SST_7$  vai ser igual a  $SST_a$ , uma vez que a camada de alimentação é a sétima e vai ter precisamente a concentração de sólidos que vem do tanque arejador.

O fluxo de sólidos devido aos movimentos no seio do líquido pode ser ascendente ou descendente,  $\nu_{up}$  e  $\nu_{dn}$  respectivamente, dependendo da posição relativa à camada de alimentação. Assim,

$$\nu_{up} = \frac{Q_{ef}}{A_s} \quad (4.37)$$

e

$$\nu_{dn} = \frac{Q_r + Q_w}{A_s}. \quad (4.38)$$

O fluxo de sedimentação,  $J_s$ , para a camada de alimentação e camadas abaixo da alimentação ( $j = 7, \dots, 10$ ), é dado por

$$J_{s,j} = \nu_{s,j} SST_j, \quad (4.39)$$

enquanto nas camadas acima da alimentação ( $j = 1, \dots, 6$ ) o fluxo de clarificação,  $J_{clar}$ , é dado por

$$J_{clar,j} = \begin{cases} \nu_{s,j} SST_j & \text{se } SST_{j+1} \leq SST_t \\ \min(\nu_{s,j} SST_j, \nu_{s,j+1} SST_{j+1}) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.40)$$

em que  $SST_t$  é a concentração limite que as lamas podem atingir. Os balanços resultantes em torno de cada camada, considerando estado estacionário, são os que se seguem:

- camada superior ( $j = 1$ )

$$\frac{\nu_{up}(SST_{j+1} - SST_j) - J_{clar,j}}{h/10} = 0; \quad (4.41)$$

- camadas intermédias acima da camada de alimentação ( $j = 2, \dots, 6$ )

$$\frac{\nu_{up}(SST_{j+1} - SST_j) + J_{clar,j-1} - J_{clar,j}}{h/10} = 0; \quad (4.42)$$

- camada de alimentação ( $j = 7$ )

$$\frac{\frac{Q}{A_s} SST_a + J_{clar,j-1} - (\nu_{up} + \nu_{dn}) SST_j - \min(J_{s,j}, J_{s,j+1})}{h/10} = 0; \quad (4.43)$$

- camadas intermédias abaixo da camada de alimentação ( $j = 8, 9$ )

$$\frac{\nu_{dn} (SST_{j-1} - SST_j) + \min (J_{s,j}, J_{s,j-1}) - \min (J_{s,j}, J_{s,j+1})}{h/10} = 0; \quad (4.44)$$

- camada inferior ( $j = 10$ )

$$\frac{\nu_{dn} (SST_{j-1} - SST_j) + \min (J_{s,j-1}, j_{s,j})}{h/10} = 0. \quad (4.45)$$

## 4.5 Combinação dos modelos ATV e DE

### 4.5.1 Introdução

Quer o modelo ATV quer o DE têm vantagens e inconvenientes. No entanto, o que é vantagem num é inconveniente noutra, e vice-versa. Ora isto sugere uma possível combinação destes dois modelos.

O modelo ATV [12] é baseado em equações empíricas obtidas por experiências. Este modelo não contém balanços de sólidos, no entanto contempla os eventos de pico. Esta desvantagem pode ser ultrapassada pelo modelo DE que é baseado em balanços mássicos.

O modelo da dupla exponencial, originalmente proposto por [57], tem sido o mais utilizado em simulações, uma vez que produz resultados muito próximos da realidade. Porém, nunca foi usado em processos de optimização. Dado que não consagra eventos de pico, necessita da aplicação de factores de segurança exteriores ao próprio modelo, muitas vezes inadequados. Por outro lado, o modelo DE não contempla os eventos de caudal de pico, tornando os desenhos muito frágeis a variações no efluente. Isto pode ser ultrapassado pelas equações empíricas do modelo ATV que consideram esta situação.

O modelo aqui proposto combina as normas ATV com o modelo da dupla exponencial, e é caracterizado pelo conjunto de equações e inequações referenciado na Subsecção 4.3.1 e pelas equações (4.36) a (4.45). A função objectivo é dada por (4.35).

A formulação deste problema envolve 64 parâmetros, 115 variáveis e 105 restrições, das quais 67 são igualdades não lineares, 37 são igualdades lineares e tem apenas uma

desigualdade não linear. Das variáveis, 104 são limitadas inferiormente e 11 são limitadas inferior e superiormente.

### 4.5.2 Resultados

Realizaram-se algumas experiências de modo a testar-se o efeito da presença e eficiência do tratamento primário.

Os dados de entrada são os apresentados na Tabela 4.6 para a ETAR de Alijó.

O problema foi codificado em AMPL [25] e resolvido através do *solver* SNOPT [26] do NEOS *Server*. Todos os parâmetros do SNOPT foram deixados por defeito.

Concretizaram-se várias experiências à ETAR em estudo. Consideraram-se vários valores de redução da *CQO* no tratamento primário. Esta redução varia tipicamente entre 40 e 70%.

A Tabela 4.10 demonstra o efeito da eficiência do tratamento primário no custo e desenho do sistema de lamas activadas na ETAR de Alijó. Na tabela apresenta-se o volume do tanque arejador, o caudal de ar, a área e profundidade do sedimentador secundário, *CQO*, *SST* e *N* no efluente, e o custo total em milhões de euros.

Tabela 4.10: Resultados para o modelo combinado ATV+DE para várias eficiências do tratamento primário

eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
0	6300	217013	15035	1.77	108.2	5.3	0.67	65.2
40	3917	124832	216.7	10.6	68.9	6.0	0.63	34.3
50	3917	99721	216.7	10.6	58.9	6.0	0.64	29.0
60	3917	74603	216.7	10.6	49.0	6.0	1.2	23.5
70	3917	48941	216.7	10.6	43.3	6.0	1.2	17.4

Pode observar-se que o caudal de ar é a variável mais dependente da eficiência do tratamento primário, isto porque o volume do tanque arejador, a área de sedimentação e a profundidade do sedimentador secundário são mantidos constantes para diferentes eficiências. Assim, o caudal de ar depende directamente da eficiência do tratamento primário.

A Figura 4.10 representa a relação entre a eficiência do tratamento primário e o custo do sistema de lamas activadas, bem como o índice de qualidade do efluente resultante medido pelo índice de qualidade (4.23).

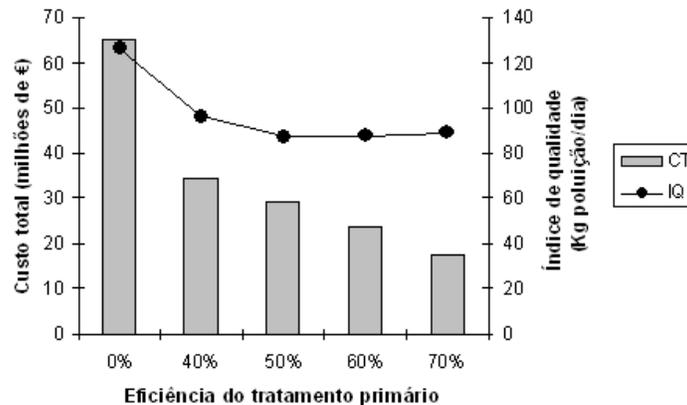


Figura 4.10: Custo total e índice de qualidade *versus* eficiência do tratamento primário

Do gráfico representado na Figura 4.10 pode ver-se claramente que, à medida que a eficiência do tratamento primário aumenta, o custo diminui e a qualidade do efluente melhora. No entanto, a diferença mais dramática ocorre quando se passa da situação em que não existe qualquer tratamento primário para a que tem um tratamento primário com uma eficiência de 40%. A partir deste ponto, as diferenças no custo total não são tão significativas e a qualidade do efluente é aproximadamente mantida para os níveis de eficiência de 50, 60 e 70%.

Como mostrado mais uma vez, a eficiência de um tratamento primário é crucial porque quanto maior for a remoção de *CQO* conseguida nesse tratamento, menores vão ser os custos de investimento e operação do tratamento secundário. Como já foi dito anteriormente, também o custo do tratamento primário está relacionado com a sua eficiência, contudo não de forma tão dramática quanto o tratamento secundário. No caso das 4 ETARs estudadas, o custo do tratamento primário é independente do tamanho da ETAR.

Em todas as situações avaliadas, os limites da *CQO*, *N* e *SST* nunca são atingidos,

permanecendo sempre abaixo dos valores legais (respectivamente 125, 15 e 35).

### 4.5.3 Comparação dos modelos do sedimentador secundário por optimização e simulação

Fizeram-se experiências de modo a seleccionar o melhor modelo de sedimentador. Para a mesma ETAR (Sabrosa) (ver Tabela 4.6) e com as mesmas condições de entrada, considerando 70 % de redução da  $CQO$  no tratamento primário, correu-se o problema de optimização com o *solver* SNOPT do NEOS *Server*.

Esta experiência foi repetida considerando os três modelos do sedimentador secundário do sistema de lamas activadas (Tabela 4.11):

1. modelo ATV, tal como descrito na Secção 4.3;
2. modelo DE, tal como descrito na Secção 4.4;
3. combinação aqui proposta dos modelos ATV e DE.

Os resultados obtidos podem ser vistos na Tabela 4.11.

Tabela 4.11: Comparação entre três modelos do sedimentador secundário

modelo	$V_a$	$A_s$	$h$	$G_S$	$CQO_{ef}$	$N_{ef}$	$SST_{ef}$	custo
ATV	884	97	6.1	10863	26	13	35	5.6
DE	1503	48	1	2825	57	9	35	2.5
ATV + DE	1744	97	10.5	5163	26	5	6	3.8

O resultado mais imediato que decorre da observação da Tabela 4.11 é que o modelo que fica mais caro é o ATV. Este resultado é previsível uma vez que são usadas apenas equações empíricas que contemplam dimensões por excesso.

De igual modo esperado é o facto do modelo DE originar o desenho mais barato. Uma vez que não são contemplados eventos de pico, mas apenas balanços baseados em condições médias, o óptimo vai ser o mínimo possível de modo a satisfazer essas condições.

Por exemplo, não vai ser aqui considerada uma profundidade extra no sedimentador de modo a contornar os eventos de pico.

A solução mais equilibrada acaba por ser, como se esperava, a obtida pela combinação dos dois modelos. O custo situa-se entre as duas situações, mas o efluente à saída é, para as condições médias, sempre abaixo dos valores de lei, dado que está preparado para os eventos de pico. Incorporando os balanços do modelo DE ultrapassa-se a questão de estar a projectar somente com base nas equações empíricas, evitando-se em parte o sobre-dimensionamento inerente ao modelo ATV quando utilizado isoladamente.

Depois de obtidas estas soluções, foram simuladas no GPS-X (Figura 4.11) as três alternativas, considerando inicialmente o caudal com um valor médio de  $467.5 \text{ m}^3/\text{dia}$  - conforme referenciado pelo projecto - e passando de seguida para o valor de pico de  $1200 \text{ m}^3/\text{dia}$  (Figuras 4.12 a 4.14).

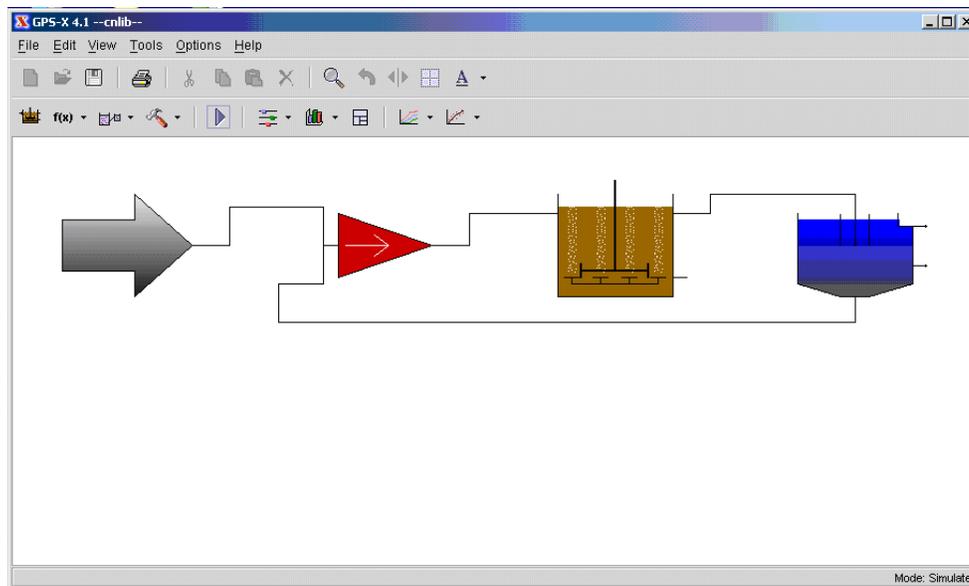


Figura 4.11: Esquema introduzido no simulador GPS-X

Olhando para as Figuras 4.12 a 4.14 verifica-se de imediato que o modelo mais sensível a uma variação do caudal é o DE (Figura 4.13), já que, quer os sólidos totais à saída, quer a  $CQO$ , aumentam de forma mais acentuada neste caso quando o caudal passa de

467.5 para 1200. Os outros dois desenhos são aproximadamente equivalentes em termos de desempenho. No entanto, em qualquer uma das três situações, e para um tempo de simulação de 30 dias, todos eles conseguem suportar este aumento de caudal sem que os limites legais sejam ultrapassados.

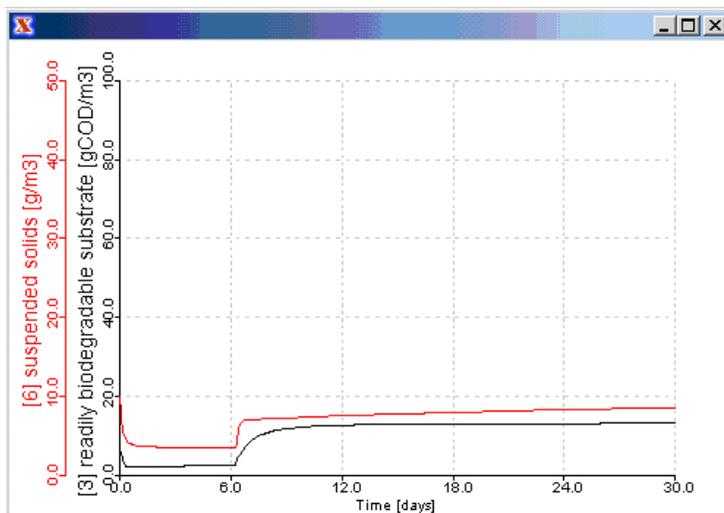


Figura 4.12: Simulação da solução obtida com o modelo ATV, com o caudal a variar de 467.5 para 1200

De seguida, com o intuito de testar a robustez dos três modelos possíveis, aumentou-se o caudal para um valor já muito elevado - 2500 m<sup>3</sup>/dia - Figuras 4.15 a 4.17.

O que se verifica nesta nova situação é que o modelo que combina ATV com DE (Figura 4.17) é o único que consegue suportar estas condições extremas durante os 30 dias da simulação, quando se aumenta o caudal para 2500.

Quando se utiliza o desenho obtido por ATV (Figura 4.15) o sistema ainda consegue dar resposta positiva durante algum tempo, até cerca de 18 dias de simulação. No entanto, a partir desse ponto há um disparo nos sólidos, ou seja, o sedimentador deixa de ser capaz de suportar este caudal. Se se atentar na Tabela 4.11, verifica-se que neste desenho é onde o caudal de ar requerido é maior. Isto vai provocar uma concentração de lamas superior que, em casos de pico, não se consegue manter de modo a que a qualidade do efluente permaneça satisfatória.

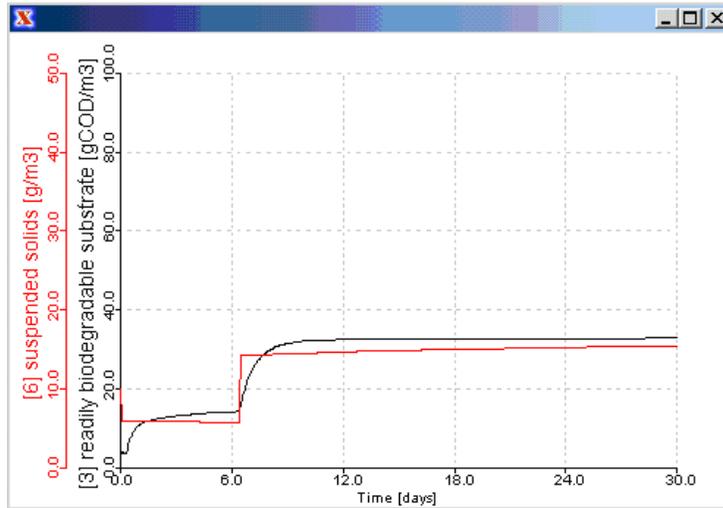


Figura 4.13: Simulação da solução obtida com o modelo DE, com o caudal a variar de 467.5 para 1200

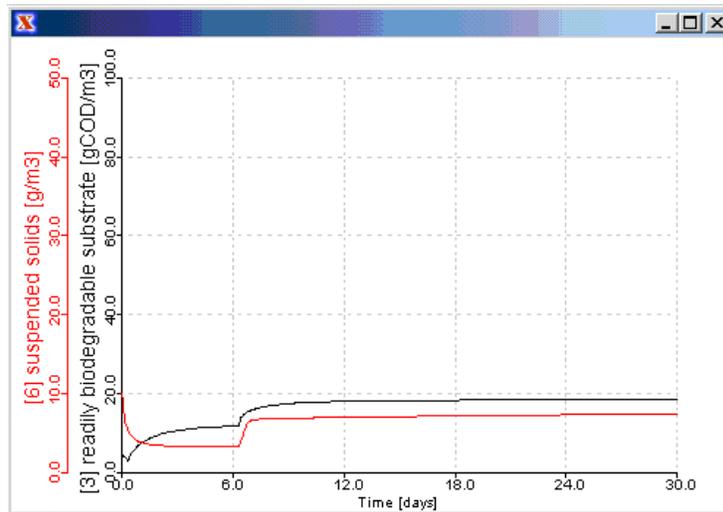


Figura 4.14: Simulação da solução obtida com a combinação dos modelos ATV e DE, com o caudal a variar de 467.5 para 1200

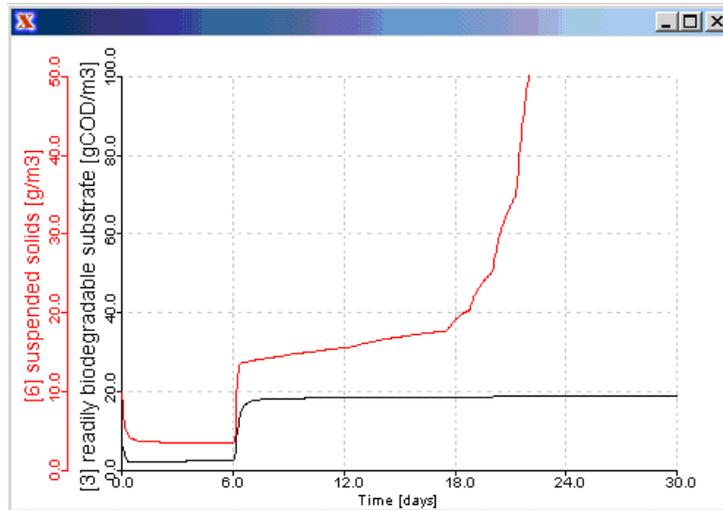


Figura 4.15: Simulação da solução obtida com o modelo ATV, com o caudal a variar de 467.5 para 2500

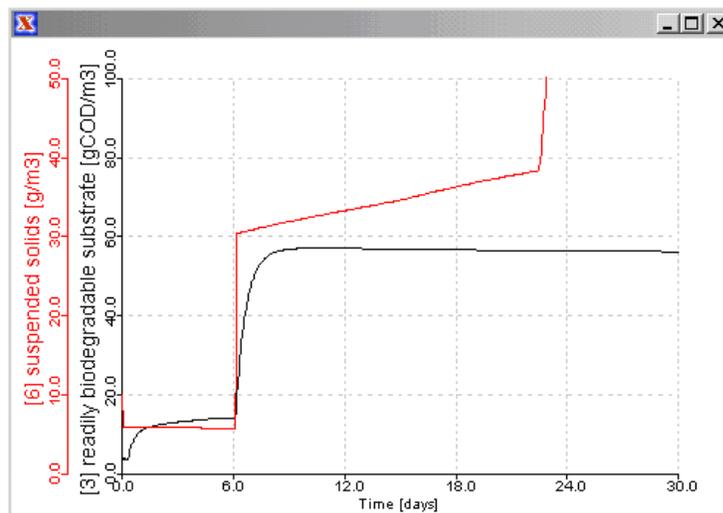


Figura 4.16: Simulação da solução obtida com o modelo DE, com o caudal a variar de 467.5 para 2500

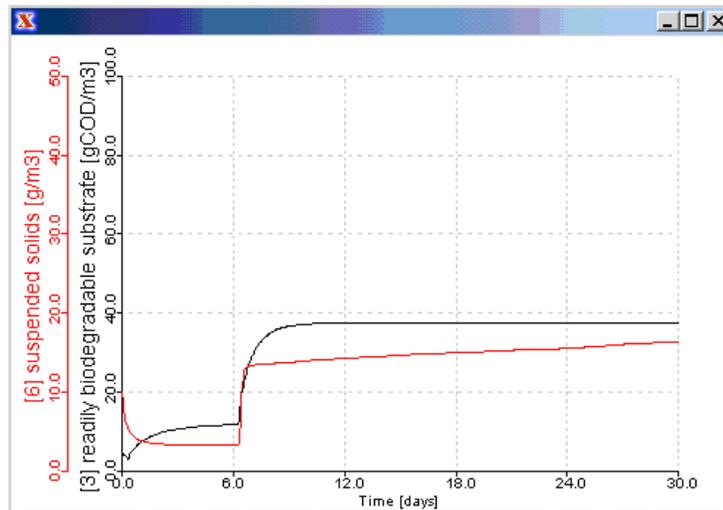


Figura 4.17: Simulação da solução obtida com a combinação dos modelos ATV e DE, com o caudal a variar de 467.5 para 2500

No caso do modelo ser o DE (Figura 4.16), verifica-se mais uma vez que é este o mais sensível a variações, tendo o maior aumento, quer em termos de sólidos totais, quer em termos de *CQO*. O que acontece é que logo que se aumenta o caudal para o valor de pico, os sólidos ficam muito próximos do seu limite (35) e vão aumentando progressivamente, até cerca dos 22 dias, em que ocorre uma saturação e o sedimentador deixa de conseguir dar resposta ao evento.

Quando se combinam os dois modelos (Figura 4.17), obtém-se o desenho mais robusto e que consegue suportar a variação durante os 30 dias da simulação.

#### 4.5.4 Resultados de experiências incluindo o tratamento de lamas

Uma vez que as experiências anteriores suportam o modelo combinado ATV+DE para o sedimentador secundário, representando a formulação do sistema de lamas activadas mais equilibrada e robusta, passou-se para a fase seguinte que integra no modelo final o tratamento de lamas.

O tratamento adoptado inclui a centrifugação de alta eficiência das lamas e posterior

transporte e deposição em aterro.

A inclusão do tratamento de lamas não implica restrições adicionais ao problema. No entanto, vai afectar o custo total da ETAR devido ao consumo de energia, transporte e deposição das mesmas.

A função objectivo usada neste caso resulta da soma dos termos (4.35) e (3.16).

Este problema foi codificado em AMPL e resolvido com o pacote de *software* LOQO disponível no NEOS *Server*.

Fizeram-se dois conjuntos de experiências de modo a avaliar-se a influência das lamas no processo de optimização. No primeiro integrou-se o termo (3.16) na função custo total. De seguida, repetiram-se as mesmas experiências retirando o termo (3.16) da função objectivo.

O objectivo destas experiências foi avaliar a percentagem do custo total que se deve ao tratamento e deposição final das lamas. Foram analisadas 3 ETARs: Murça, Sabrosa e Sanfins, sendo que a primeira é ligeiramente maior que as outras duas. Não foi incluída a ETAR de Alijó nestes resultados porque para esta o problema com lamas não convergiu, não se conseguindo, assim, fazer o estudo comparativo.

Pode-se atribuir a não convergência ao facto do modelo matemático deste problema envolver equações não diferenciáveis. O método que está a ser usado na sua resolução - um método primal-dual de pontos interiores - utiliza informação das derivadas. Ao longo das iterações realizadas, é possível que um dos pontos encontrados não admita derivada. Quando isto acontece, não se consegue progredir de modo a encontrar-se uma solução e o problema não converge. Por este motivo, decidiu-se desenvolver um algoritmo que permitisse a resolução de problemas de optimização sem recorrer a derivadas - um método de pesquisa directa.

A Tabela 4.12 mostra os resultados para ambos os casos considerados: com tratamento de lamas ( $CT_{lamas}$ ) e sem o tratamento ( $CT$ ).  $CT$  representa o custo total em milhões de euros.

Depois de analisados os resultados, verificou-se que a solução encontrada é exactamente a mesma, quer se inclua o tratamento de lamas ou não na função custo, sendo, como é evidente, o custo obtido maior.

Tabela 4.12: Resultados para as 3 ETARs, considerando ou não o tratamento das lammas

ETAR	$V_a$	$A_s$	$h$	$G_S$	$CT_{lammas}$	$CT$	%
Murça	1903	173	7.1	9271	6.43	5.50	14
Sabrosa	540	97.5	4.3	5588	3.96	3.56	10
Sanfins	612	108	4.4	6334	4.33	3.89	10

Este resultado faz todo o sentido, já que o tratamento usado nestas lammas é o mais simples e básico possível. Sendo assim, é natural que o seu impacto não seja suficiente para alterar o desenho obtido, apenas afectando o custo total. Por essa razão, para se alcançar o desenho óptimo do sistema de lammas activadas, o processo de tratamento das lammas pode ser deixado de fora.

Comparando o custo total, verifica-se um aumento de 10 a 14% nas ETARs observadas. Este peso no custo total é significativo uma vez que são deixados de fora os custos de investimento (comuns a todas as ETARs). Para uma estimativa correcta de toda a ETAR todos estes custos devem ser incluídos.

No caso de ETARs com digestão de lammas, o mais provável era que este resultado fosse diferente. Aqui seria exigida a construção de digestores e os custos associados seriam superiores e mais dependentes do tamanho da ETAR e da quantidade de lammas produzida. Dessa forma, era natural que o sistema se deslocasse no sentido de produzir menos lammas, obtendo-se assim um desenho diferente.

É importante referir ainda que o tratamento das lammas acaba por ser uma consequência do tratamento das águas e, apesar de não estar directamente envolvido no mesmo, deve ser considerado dado que implica custos elevados.



# Capítulo 5

## Método de pesquisa em padrão

Os métodos de pesquisa directa permitem resolver problemas de optimização sem recorrer às derivadas das funções envolvidas no modelo. Um dos métodos desta classe é o método de pesquisa em padrão. Neste capítulo descreve-se um método de multiplicadores baseado numa função Lagrangeana aumentada, para o tratamento das restrições de igualdade e desigualdade, que utiliza o método de pesquisa em padrão para resolver uma sucessão de subproblemas com restrições de limites simples. Este método usa os movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves para a determinação de um passo promissor. Explica-se a implementação do algoritmo e apresentam-se resultados para alguns problemas académicos e para problemas reais de optimização de ETARs.

### 5.1 Introdução

Quando se começa a tratar da optimização de problemas do mundo real, depressa se verifica que, para além de serem muito complexos e envolverem muitas variáveis, não é sempre possível avaliar as suas derivadas, ou porque não estão disponíveis ou pura e simplesmente porque o problema não é diferenciável.

Isto acontece com um dos problemas apresentados no capítulo anterior. Ao serem introduzidas as restrições, que dizem respeito ao modelo da dupla exponencial, para o sedimentador secundário, constata-se de imediato que estas funções não têm derivadas em certos pontos do domínio.

Por esta razão, é mais conveniente usar um método que não exija a avaliação analítica das derivadas nem mesmo de aproximações. Esta é uma das características dos métodos de pesquisa directa.

Um dos métodos deste tipo é o de Rosenbrock, publicado nos anos 60 [51]. É particularmente indicado para casos em que a função objectivo não requer muito esforço computacional na sua avaliação. Se for esse o caso não há necessidade de se recorrer a algoritmos de optimização muito complicados uma vez que estes vão ocupar mais tempo a fazer cálculos de optimização do que a avaliar a função objectivo. Este método começa por fazer uma pesquisa simples ao longo dos  $n$  eixos coordenados, sendo  $n$  o número de variáveis do problema. Se a procura ao longo de cada um dos eixos for bem sucedida, isto é, se o valor da função objectivo no novo ponto de ensaio é menor do que o valor da função no ponto actual, aumenta-se o comprimento do passo a usar na pesquisa ao longo daquela direcção na iteração seguinte. Caso contrário, diminui-se o comprimento do passo e a pesquisa a realizar na iteração seguinte seguirá o sentido contrário. Sempre que se conseguir, ao longo de todas as direcções, um deslocamento bem sucedido seguido de um mal sucedido, o sistema de eixos coordenados é rodado, de tal forma que a primeira direcção dos novos eixos aponta na direcção da resultante dos deslocamentos bem sucedidos com o sistema de eixos anterior. As restantes direcções no novo sistema de eixos são calculadas a partir da primeira direcção pelo processo de Gram-Schmidt, que gera vectores ortonormais. O processo repete-se a partir daqui.

O método de pesquisa directa mais conhecido, no entanto, é o de Nelder-Mead [49]. É denominado muitas vezes por método do simplex já que define em cada iteração um simplex, que, em  $\mathbb{R}^n$ , é baseado em  $n + 1$  vértices. Apenas com base nos valores da função objectivo desses vértices, constrói-se um novo simplex, para a iteração seguinte, através de operações básicas - reflexão, contracção, expansão ou redução. Em certas situações, este método falha ou torna-se muito lento, mesmo para funções objectivo muito simples. Isto deve-se a uma possível degenerescência do simplex. Existem actualmente várias versões do método de Nelder-Mead. Uma delas é apresentada em Lagarias *et al.* [44]. Para esta versão, e de acordo com condições apropriadas que consideram a função estritamente

convexa de uma variável, o conjunto de nível limitado, o simplex inicial não degenerado e ainda condições nos parâmetros de reflexão, expansão e contracção do simplex, os autores provam que o método converge para um minimizante. A análise de convergência do método é estendida a problemas com duas variáveis e com as mesmas condições descritas acima. Nestas condições, Lagarias *et al.* [44] provam que essa versão gera simplex com diâmetros que tendem para zero (isto é, colapsam num ponto), o que significa que convergem para um ponto de acumulação.

Um outro método deste tipo é a pesquisa em padrão, que se baseia apenas no cálculo de valores das funções envolvidas no modelo, não recorrendo em nenhuma situação à informação das derivadas. Este tipo de métodos pode usar um padrão pré-especificado, ou um que vai sendo adaptado, com o objectivo de pesquisar o espaço das variáveis e calcular soluções. São exemplos a procura coordenada com comprimentos de passo fixos, o método de operações evolucionárias (proposto inicialmente por Box [8]), o algoritmo original de pesquisa em padrão de Hooke and Jeeves [33] e mais recentemente o algoritmo de procura multi-direccional de Dennis e Torczon [11]. Todos estes métodos têm uma base comum que os distingue de outros métodos de pesquisa directa, uma vez que fazem uma pesquisa usando um padrão de pontos que é independente da função objectivo [59].

Uma outra classe de métodos que não recorrem a derivadas é baseada na aproximação de funções por modelos quadráticos, construídos a partir de polinómios interpoladores de Lagrange. São exemplos os métodos DFO [9] e CONDOR [6]. Este tipo de métodos está vocacionado para problemas cujo cálculo de funções é pesado e está afectado de ruído.

Não sendo os problemas tratados nesta tese deste tipo, optou-se por desenvolver um algoritmo de pesquisa em padrão que resolvesse o problema de optimização com todos os tipos de restrições. Acresce ainda o facto de que o único *solver* disponível no NEOS *Server* para optimização sem derivadas ser o CONDOR, com o qual não foi possível resolver nenhum dos problemas reais de optimização de ETARs.

## 5.2 Pesquisa em padrão com limites simples

A definição de Torczon [59] de método de pesquisa em padrão requer a existência de uma grelha de pontos  $T$  tal que, se  $x^1, \dots, x^N$  são os primeiros  $N$  iterandos gerados por um método de pesquisa em padrão, então existe um factor de escalonamento  $\Delta^N$  tal que os passos  $x^1 - x^0, x^2 - x^1, \dots, x^N - x^{N-1}$  pertencem à grelha escalonada  $\Delta^N T$ . A grelha depende do padrão, conjunto de possíveis passos de ensaio, que é característico do método e da escolha inicial do parâmetro de controlo do comprimento do passo, mas é independente da função objectivo.

Esta classe de métodos foi estendida a problemas de optimização com limites simples nas variáveis [46], cuja formulação é a seguinte:

$$\begin{aligned} & \text{minimizar}_{x \in \mathbb{R}^n} && \Phi(x) \\ & \text{s. a} && l \leq x \leq u \end{aligned} \tag{5.1}$$

em que  $\Phi$  designa a função objectivo. Permite-se que  $l_i, u_i = \pm\infty$  ( $i = 1, \dots, n$ ), ou seja, algumas das variáveis podem não ser limitadas abaixo ou acima. Se  $\Omega$  for o conjunto de pontos admissíveis do problema (5.1), isto é,  $\Omega = \{x \in \mathbb{R}^n : l \leq x \leq u\}$  então o método de pesquisa em padrão com limites simples exige que todos os iterandos têm que pertencer a este conjunto.

Lewis e Torczon [46] apresentam uma análise de convergência do método de pesquisa em padrão para o problema (5.1). Essa análise segue os mesmos passos da análise que foi desenvolvida para o problema sem restrições [59]. Assim, se a função  $\Phi$  é continuamente diferenciável então uma subsucessão de iterandos gerada pelo algoritmo de pesquisa em padrão para o problema (5.1) converge para um ponto estacionário de (5.1). Note-se que um ponto estacionário do problema (5.1),  $x$ , é um ponto admissível que satisfaz a condição de optimalidade de primeira ordem, ou seja, para todo o ponto admissível  $z$ , tem-se que  $\nabla\Phi(x)^T(z - x) \geq 0$ , onde  $\nabla\Phi(x)$  representa o vector gradiente da função  $\Phi(x)$ .

### 5.2.1 O padrão

Para definir um padrão são necessárias duas componentes: uma matriz de base e uma matriz geradora.

A matriz de base pode ser qualquer matriz não singular  $B \in \mathbb{R}^{n \times n}$ .

A matriz geradora é uma matriz  $C^k \in \mathbb{Z}^{n \times r}$ , que varia ao longo do processo iterativo, em que  $k$  é o contador de iteração e  $r > 2n$ . A matriz geradora pode ser dividida em componentes:

$$C^k = \begin{bmatrix} M^k & -M^k & L^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Gamma^k & L^k \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

É exigido que  $M^k \in \mathcal{M} \subset \mathbb{Z}^{n \times n}$ , em que  $\mathcal{M}$  é um conjunto finito de matrizes não singulares,  $L^k \in \mathbb{Z}^{n \times (r-2n)}$  e contém pelo menos uma coluna de zeros.

O padrão,  $\Pi^k$ , é definido pelas colunas da matriz  $BC^k$ . Uma vez que quer  $B$  quer  $C^k$  têm característica  $n$ , as colunas de  $\Pi^k$  geram  $\mathbb{R}^n$ . Por conveniência, usa-se a partição da matriz  $C^k$  dada por (5.2) como partição de  $\Pi^k$  da maneira seguinte:

$$\Pi^k = BC^k = \begin{bmatrix} BM^k & -BM^k & BL^k \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B\Gamma^k & BL^k \end{bmatrix}. \quad (5.3)$$

Para garantir que o padrão define pontos admissíveis que também produzem uma redução na função  $\Phi$ , é necessário que a matriz  $BM^k$  seja diagonal. Esta é uma das condições que diferencia o método de pesquisa em padrão com limites simples do método para problemas sem restrições.

Dado  $\Delta^k \in \mathbb{R}$ ,  $\Delta^k > 0$ , define-se passo de ensaio,  $s_i^k$ , como qualquer vector da forma

$$s_i^k = \Delta^k Bc_i^k, \quad (5.4)$$

para algum  $i \in \{1, \dots, r\}$ , em que  $c_i^k$  é a coluna  $i$  de  $C^k = [c_1^k \dots c_r^k]$ .  $Bc_i^k$  determina a direcção do passo e  $\Delta^k$  é um parâmetro que representa o comprimento do passo.

Um passo de ensaio diz-se admissível se  $x^k + s_i^k \in \Omega$ .

Na iteração  $k$ , define-se ponto de ensaio como qualquer ponto da forma  $x_i^k = x^k + s_i^k$ , em que  $x^k$  é o iterando actual. Realizam-se movimentos em torno de  $x^k$  para escolher um

novo iterando  $x^{k+1} = x^k + s^k$ , para um passo admissível  $s^k$ , que será determinado ao longo dos movimentos exploratórios.

Para assegurar a convergência do método de pesquisa em padrão com limites simples, aplicado ao problema (5.1), há dois tipos de condições que devem ser verificadas, e que não estão presentes no método para problemas sem restrições. A primeira tem a ver com o facto do método ser de pontos admissíveis. Isto é, a procura inicia-se com um ponto que satisfaz os limites e mantém essa admissibilidade durante toda a procura. A segunda condição exige que o padrão principal  $BM^k$  seja definido por uma matriz diagonal. Esta condição garante que se o ponto actual ainda não é um ponto estacionário admissível, existe pelo menos uma direcção admissível e descendente. Além disso, a direcção admissível descendente deve garantir que a admissibilidade se mantém para um passo não muito pequeno. Na prática esta condição assegura que existem direcções que nos permitem mover ao longo de direcções paralelas às restrições.

A exigência de admissibilidade está patente nas seguintes hipóteses:

**Hipótese 5.2.1**  $s^k \in \Delta^k \Pi^k \equiv \Delta^k BC^k \equiv \Delta^k [B\Gamma^k \ BL^k]$ .

**Hipótese 5.2.2**  $(x^k + s^k) \in \Omega$ .

**Hipótese 5.2.3** Se  $\min\{\Phi(x^k + y) : y \in \Delta^k B\Gamma^k, x^k + y \in \Omega\} < \Phi(x^k)$ , então  $\Phi(x^k + s^k) < \Phi(x^k)$ .

A notação  $y \in A$ , em que  $A$  é uma matriz, significa que o vector  $y$  é uma coluna de  $A$ .

A terceira hipótese diz que, se na actual iteração for possível encontrar uma redução do valor de  $\Phi$  entre todos os passos de ensaio admissíveis do conjunto (contidos nas colunas de)  $\Delta^k B\Gamma^k$ , então o movimento exploratório deve produzir um passo admissível  $s^k$  que também origina uma redução (simples) de  $\Phi$ , nesta iteração.

## 5.2.2 Movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves

A base dos métodos de pesquisa em padrão consiste em executar uma série de movimentos bem definidos e determinísticos em torno do iterando actual, antes de se declarar um novo

e actualizar a informação associada a ele. Este procedimento constitui os denominados movimentos exploratórios. O objectivo deste procedimento é encontrar um novo iterando  $x^{k+1} = x^k + s^k$  que tenha um valor de função  $\Phi$  inferior ao valor de  $\Phi$  em  $x_k$ .

Os vários métodos de pesquisa em padrão distinguem-se apenas pela forma como são conduzidos estes movimentos exploratórios.

A escolha dos movimentos exploratórios deve assegurar duas condições:

1. a direcção de qualquer passo  $s^k$  aceite na iteração  $k$  é definida pelo padrão  $\Pi^k$  e o seu comprimento é determinado por  $\Delta^k$ ,
2. se for encontrada uma redução simples no valor da função no novo iterando entre qualquer um dos  $2n$  passos de ensaio definidos por  $\Delta^k B \Gamma^k$ , os movimentos exploratórios devem produzir um passo  $s^k$  que também produz uma redução simples no valor da função no novo iterando. Em particular,  $\Phi(x^k + s^k)$  não necessita de ser menor ou igual a  $\min\{\Phi(x^k + y), y \in \Delta^k B \Gamma^k\}$ .

O método dos movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves [33] é uma variante da procura coordenada (procura realizada apenas ao longo dos eixos coordenados), que introduz um passo padrão na tentativa de acelerar o processo, ao explorar a informação conseguida na pesquisa em iterações anteriores bem sucedidas. Por essa razão, o método é reconhecido como "oportunista".

Se a iteração anterior foi bem sucedida ( $\rho^{k-1} = \Phi(x^{k-1}) - \Phi(x^k) > 0$ ), a actual iteração decorre ao longo de uma pesquisa coordenada em torno de um iterando especulativo  $x^k + (x^k - x^{k-1})$ , em vez do actual  $x^k$ . Este é o passo padrão. A ideia é investigar o progresso que é possível ao longo da direcção genérica  $x^k - x^{k-1}$ , já que esta é claramente uma direcção promissora.

Por exemplo, assumindo  $k > 0$  e  $x^k \neq x^{k-1}$ , o algoritmo de pesquisa em padrão dá o passo  $x^k - x^{k-1}$  a partir de  $x^k$ . A função é avaliada neste novo ponto e é aceite temporariamente, mesmo que  $\Phi(x^k + (x^k - x^{k-1})) \geq \Phi(x^k)$ . O algoritmo de Hooke e Jeeves faz pesquisa coordenada em torno do iterando temporário  $x^k + (x^k - x^{k-1})$ .

Se a procura coordenada em torno de  $x^k + (x^k - x^{k-1})$  for bem sucedida, o ponto devolvido pela busca coordenada em torno do iterando temporário é aceite como novo iterando  $x^{k+1}$ . Caso contrário, o passo padrão declara-se falhado e o método reduz-se à pesquisa coordenada em torno de  $x^k$ .

Se a iteração anterior não foi bem sucedida,  $x^k = x^{k-1}$ , a iteração limita-se à procura coordenada em torno de  $x^k$ . No entanto, o algoritmo de actualização de  $\Delta^k$  reduz o tamanho do passo ( $\Delta^k = \theta_1 \Delta^{k-1}$ ,  $\theta_1 < 1$ ).

O algoritmo não executa esse passo padrão quando  $k = 0$ .

A matriz de base,  $B$ , é neste caso igual à identidade,  $B = I$ .

### Matriz geradora

Quando existe apenas uma procura coordenada, a matriz geradora consiste em todas as combinações possíveis de  $\{-1, 0, 1\}$  e nunca é alterada. No caso do algoritmo de Hooke e Jeeves, esta matriz vai mudando de iteração para iteração, de modo a captar o efeito do passo padrão.

A todas as  $3^n$  combinações possíveis de  $\{-1, 0, 1\}$  adicionam-se mais  $3^n$  colunas com as mesmas combinações. Esta será a matriz geradora inicial. Isto significa que  $C^k$  tem  $r = 2 \times 3^n$  colunas. As  $3^n$  colunas adicionais permitem expressar o efeito do passo padrão com respeito a  $x^k$  e não do iterando temporário  $x^k + (x^k - x^{k-1})$ . A matriz  $M^k$  não se altera,  $M^k = I$ . No entanto,  $L^k \in \mathbb{Z}^{n \times (r-2n)}$  pode variar, mas apenas nas colunas associadas ao passo padrão. Considere-se este exemplo, para  $n = 2$ ,

$$C^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (5.5)$$

Por conveniência de notação, requer-se que a última coluna de  $C^0$ , denotada por  $c_r^0$ , seja a coluna de zeros. No algoritmo de actualização de  $C^k$  (Algoritmo 5.2.4) e no algoritmo dos movimentos exploratórios (Algoritmo 5.2.1) usa-se a coluna  $c_r^k$  para medir a acumulação de uma sequência de passos padrão bem sucedidos. Por exemplo, se for dado um passo

(1, 1) bem sucedido, a matriz geradora passa a ser

$$C^k = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 2 & 1 & 0 & 1 & 2 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.6)$$

O passo padrão  $(x^k - x^{k-1})$  é representado pelo vector (1, 1), que pode ver-se na última coluna de  $C^k$ . As últimas  $3^n$  colunas de  $C^k$  foram obtidas a partir de  $C^0$  adicionando o vector (1, 1). O algoritmo actualiza as últimas  $3^n$  colunas de  $C^k$  e deixa as primeiras  $3^n$  colunas inalteradas (como na procura coordenada).

O objectivo do algoritmo de actualização de  $C^k$  é incorporar o resultado da pesquisa da iteração actual no padrão para a próxima iteração. A última coluna tem o papel específico de representar o passo padrão  $(x^k - x^{k-1})$ .

### Algoritmo de Hooke e Jeeves

No Algoritmo 5.2.1,  $e_i$ ,  $i = 1, \dots, n$  são os vectores unitários dos eixos coordenados e  $c_r^k$  é a última coluna de  $C^k$ . Estabelece-se que  $\rho^{-1} = 0$  para que  $\rho^{k-1}$  esteja definido quando  $k = 0$ .

#### Algoritmo 5.2.1 Movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves

**dados:**  $x^k$ ,  $\Delta^k$ ,  $\Phi(x^k)$  e  $\rho^{k-1}$ ;

**seja:**  $\rho^k = \rho^{k-1}$  e  $\min = \Phi(x^k + s^k)$ ;

**se**  $\rho^k > 0$  **então**  $s^k = \Delta^k B c_r^k$ ,  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x^k + s^k)$  e  $\min = \Phi(x^k + s^k)$ ;

**para**  $i = 1, \dots, n$  **fazer**

$s_i^k = s^k + \Delta^k B e_i$  e  $x_i^k = x^k + s_i^k$ ; calcular  $\Phi(x_i^k)$ ;

**se**  $\Phi(x_i^k) < \min$  **então**  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x_i^k)$ ,  $\min = \Phi(x_i^k)$  e  $s^k = s_i^k$ ;

**senão**

$s_i^k = s^k - \Delta^k B e_i$  e  $x_i^k = x^k + s_i^k$ ; calcular  $\Phi(x_i^k)$ ;

**se**  $\Phi(x_i^k) < \min$  **então**  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x_i^k)$ ,  $\min = \Phi(x_i^k)$  e  $s^k = s_i^k$ ;

se  $\rho^k \leq 0$  então  $s^k = 0$ ,  $\rho^k = 0$  e  $\min = \Phi(x^k)$ ;

para  $i = 1, \dots, n$  fazer

$s_i^k = s^k + \Delta^k B e_i$  e  $x_i^k = x^k + s_i^k$ ; calcular  $\Phi(x_i^k)$ ;

se  $\Phi(x_i^k) < \min$  então  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x_i^k)$ ,  $\min = \Phi(x_i^k)$  e  $s^k = s_i^k$ ;

senão

$s_i^k = s^k - \Delta^k B e_i$  e  $x_i^k = x^k + s_i^k$ ; calcular  $\Phi(x_i^k)$ ;

se  $\Phi(x_i^k) < \min$  então  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x_i^k)$ ,  $\min = \Phi(x_i^k)$  e  $s^k = s_i^k$ .

fim

Noutros algoritmos de movimentos exploratórios poder-se-á ter, em extremos opostos, movimentos que de algum modo "adivinhem" qual dos passos definidos por  $\Delta^k \Pi^k$  produzem diminuição simples e avaliam a função apenas nesse passo, ou por outro lado movimentos exploratórios que avaliem todos os  $r$  passos definidos por  $\Delta^k \Pi^k$  e devolvam o passo que produz o menor valor da função.

### 5.2.3 Algoritmo de pesquisa em padrão generalizada com limites simples

O Algoritmo 5.2.2 traduz o método de pesquisa em padrão generalizada para problemas de optimização com limites simples da forma (5.1).

**Algoritmo 5.2.2** *Método de pesquisa em padrão generalizada com limites simples*

seja  $x^0 \in \Omega$  e  $\Delta^0 > 0$ ,  $k = 0$

enquanto o critério de paragem não for verificado fazer

Calcular  $\Phi(x^k)$ ;

Determinar o passo  $s^k$  usando o algoritmo de movimentos exploratórios de Hooke e

Jeeves de tal forma que  $x^k + s^k \in \Omega$ ;

Calcular  $\rho^k = \Phi(x^k) - \Phi(x^k + s^k)$ ;

se  $\rho^k > 0$

**então**  $x^{k+1} = x^k + s^k$ ;

**senão**  $x^{k+1} = x^k$ ;

Actualizar  $\Delta^k$  e  $C^k$ ;

$k = k + 1$ .

*fim de enquanto*

*fim*

O critério de paragem deste algoritmo deve assegurar que o iterando calculado  $x^k$  é uma aproximação razoável a um ponto estacionário do problema (5.1). A condição a impor no contexto deste método de pesquisa em padrão será explicada mais adiante (aquando da análise de convergência na Subsecção 5.2.4 e na Secção 5.3).

O Algoritmo 5.2.3 determina a actualização de  $\Delta^k$ . Esta actualização tem como objetivo forçar uma redução estrita em  $\Phi$  ( $\rho^k > 0$ ), ou seja, uma iteração bem sucedida.

**Algoritmo 5.2.3** Actualização de  $\Delta^k$

**dado**  $\tau \in \mathbb{Q}$ ;

**seja**  $\theta_1 = \tau^{w_0}$  e  $\theta_2 \in \Lambda = \{\tau^{w_1}, \dots, \tau^{w_U}\}$ , em que  $\tau > 1$  e  $\{w_0, w_1, \dots, w_U\} \subset \mathbb{Z}$ ,

$U \equiv |\Lambda| < +\infty$ ,  $w_0 < 0$  e  $w_i \geq 0$ ,  $i = 1, \dots, U$ ;

se  $\rho^k \leq 0$  **então**  $\Delta^{k+1} = \theta_1 \Delta^k$ ;

**senão**  $\Delta^{k+1} = \theta_2 \Delta^k$ .

*fim*

As condições impostas a  $\theta_1$  e a  $\Lambda$  asseguram que  $0 < \theta_1 < 1$  e  $\theta_2 \geq 1$  para todo o  $\theta_2 \in \Lambda$ . Garante-se assim que se uma iteração for bem sucedida o parâmetro de comprimento do

passo,  $\Delta^k$ , nunca poderá diminuir. No entanto, se a iteração não foi bem sucedida, então  $\Delta^k$  deve diminuir.

O algoritmo de actualização de  $C^k$  depende do método escolhido para os movimentos exploratórios, no entanto, basta garantir que as suas colunas satisfaçam a Hipótese 5.2.1 e as condições requeridas para  $M^k \in \mathcal{M} \subset \mathbb{Z}^{n \times n}$  e  $L^k \in \mathbb{Z}^{n \times (r-2n)}$ .

**Algoritmo 5.2.4** *Actualização de  $C_k$*

*para*  $i = 3^n + 1, \dots, 2 \times 3^n$  **fazer**

$$c_i^{k+1} = c_i^k + \frac{1}{\Delta^k} s^k - c_r^k.$$

**fim**

Uma vez que  $(1/\Delta^k)s^k$  é necessariamente uma coluna de  $C^k$  e  $C^0 \in \mathbb{Z}^{n \times r}$ , as colunas de  $C^k$  são sempre compostas por inteiros.

## 5.2.4 Convergência

Os resultados de convergência apresentados de seguida são independentes da função que está a ser optimizada, são factos algébricos sobre a natureza dos métodos de pesquisa em padrão e é a natureza dos iterandos que permite provar convergência global sem impor uma redução significativa no valor da função  $\Phi$  no novo iterando.

Os dois lemas e o teorema seguintes foram estendidos directamente da teoria de convergência para problemas sem restrições [59].

**Lema 5.2.1** [46] *Existe uma constante  $\zeta_* > 0$ , independente de  $k$ , tal que para qualquer passo de ensaio  $s_i^k \neq 0$  produzido por um método de pesquisa em padrão generalizada (Algoritmo 5.2.2) tem-se*

$$\|s_i^k\| \geq \zeta_* \Delta^k.$$

No Lema 5.2.1 mostra-se em que sentido  $\Delta^k$  controla o passo. O seu papel é regular possíveis recuos no processo iterativo, impedindo que se dêem passos demasiado pequenos.

O Teorema 5.2.1 é a chave da convergência dos métodos de pesquisa em padrão e estabelece que os iterandos gerados por este método têm uma estrutura rígida.

**Teorema 5.2.1** [46] *Qualquer iterando  $x^N$  produzido por um método de pesquisa em padrão generalizada (Algoritmo 5.2.2) pode ser expresso da seguinte maneira:*

$$x^N = x^0 + (\beta^{r_{inf}} \alpha^{-r_{sup}}) \Delta^0 B \sum_{k=0}^{N-1} z^k,$$

em que

- $x^0$  é a aproximação inicial,
- $\beta/\alpha \equiv \tau$ , com  $\alpha, \beta \in \mathbb{N}$  e primos entre si, e  $\tau$  é definido tal como no algoritmo de actualização de  $\Delta^k$ ,
- $r_{inf}$  e  $r_{sup}$  são inteiros e dependem de  $N$ ,
- $\Delta^0$  é a escolha inicial para o parâmetro de controlo do tamanho do passo,
- $B$  é a matriz de base, e
- $z^k \in \mathbb{Z}^n$ ,  $k = 0, \dots, N - 1$ .

O Teorema 5.2.1 sintetiza as exigências colocadas no padrão, na definição de passo e no algoritmo para actualização de  $\Delta^k$ . Isto significa que para um determinado  $N$ , todos os iterandos ficam localizados numa direcção inteira modificada gerada por  $x^0$  e pelas colunas de  $\beta^{r_{inf}} \alpha^{-r_{sup}} \Delta^0 B$ .

O Teorema 5.2.1, juntamente com o Lema 5.2.1, dizem que se se limitar o tamanho dos elementos da matriz geradora então o comprimento do passo efectuado por um método de pesquisa em padrão é completamente controlado por  $\Delta^k$ . Este resultado é uma consequência directa do facto de  $s_i^k = \Delta^k B c_i^k$ .

**Lema 5.2.2** [46] *Se existe uma constante  $\mathcal{C} > 0$  tal que para todo o  $k$ ,  $\mathcal{C} > \|c_i^k\|$  para todo  $i = 1, \dots, r$ , então existe uma constante  $\psi_* > 0$ , independente de  $k$ , tal que para*

qualquer passo de ensaio  $s_i^k$  produzido por um método de pesquisa em padrão generalizada (Algoritmo 5.2.2) tem-se

$$\Delta^k \geq \psi_* \|s_i^k\|.$$

De seguida apresentam-se as condições de convergência para um ponto estacionário num problema com restrições de limites simples.

Se  $P$  for a projecção ortogonal de  $x$  sobre o conjunto  $\Omega$ , definida componente a componente por

$$(P[x])_i = \begin{cases} l_i & \text{se } x_i \leq l_i \\ u_i & \text{se } x_i \geq u_i \\ x_i & \text{nos casos restantes} \end{cases}$$

então dado  $x \in \Omega$  e o vector  $\nabla\Phi(x)$  define-se o operador

$$P(x, \nabla\Phi(x)) = x - P[x - \nabla\Phi(x)]$$

que é interpretado da seguinte forma. Se o iterando  $x$  está no interior de  $\Omega$ , então  $P(x, \nabla\Phi(x)) = 0$  se e só se  $\nabla\Phi(x) = 0$ . No entanto, se  $x$  está sobre a fronteira do conjunto  $\Omega$ , então  $P(x, \nabla\Phi(x)) = 0$  se e só se  $\nabla\Phi(x)$  é normal a  $\Omega$ .

Na teoria definida para problemas com limites simples,  $P(x, \nabla\Phi(x))$  assume o papel de  $\nabla\Phi(x)$  que está presente na teoria desenvolvida para problemas sem restrições, fornecendo assim uma medida contínua de proximidade a um ponto estacionário admissível.

Da Proposição 5.2.1 resulta que  $x$  é um ponto estacionário de (5.1) se e só se  $P(x, \nabla\Phi(x)) = 0$ . Esta proposição é também válida para um qualquer domínio fechado e convexo.

**Proposição 5.2.1** [46] *Seja  $x \in \Omega$ . Então*

$$\|P(x, \nabla\Phi(x))\| \leq \|\nabla\Phi(x)\|,$$

*e  $x$  é um ponto estacionário para o problema (5.1) se e só se  $P(x, \nabla\Phi(x)) = 0$ .*

Considerem-se ainda as seguintes hipóteses:

**Hipótese 5.2.4** *O conjunto de nível  $L_\Omega(x^0) = \{x \in \Omega : \Phi(x) \leq \Phi(x^0)\}$  é compacto.*

**Hipótese 5.2.5**  $\Phi$  é continuamente diferenciável numa vizinhança aberta  $D$  de  $L_\Omega(x^0)$ .

O Teorema 5.2.2 combina a estrutura algébrica dos iterandos com a condição de simples redução presentes no Algoritmo 5.2.2 juntamente com as regras de actualização de  $\Delta^k$  (Algoritmo 5.2.3), para estabelecer os limites do comportamento de  $\Delta^k$ .

**Teorema 5.2.2** [46] *Suponha-se que a Hipótese 5.2.4 é verificada. Então  $\liminf_{k \rightarrow +\infty} \Delta^k = 0$ .*

O teorema seguinte é consequência directa do teorema anterior.

**Teorema 5.2.3** [46] *Suponha-se que as Hipóteses 5.2.4 e 5.2.5 são satisfeitas. Seja  $\{x^k\}$  a sucessão de iterandos produzida por um método de pesquisa em padrão generalizada (Algoritmo 5.2.2) para a resolução do problema (5.1). Então*

$$\liminf_{k \rightarrow +\infty} \|P(x^k, \nabla\Phi(x^k))\| = 0.$$

O resultado do Teorema 5.2.3 pode ficar mais forte impondo as seguintes condições adicionais. A primeira exige que as colunas da matriz geradora  $C^k$  se mantenham limitadas em norma. A segunda traduz uma versão mais forte da Hipótese 5.2.3.

**Hipótese 5.2.6** *Existe uma constante  $\mathcal{C}$  tal que para todo o  $k$ ,  $\mathcal{C} > \|c_i^k\|$ , para todo  $i = 1, \dots, r$ .*

**Hipótese 5.2.7** *Se  $\min\{\Phi(x^k + y) : y \in \Delta^k B\Gamma^k, x^k + y \in \Omega\} < \Phi(x^k)$ , então  $\Phi(x^k + s^k) \leq \min\{\Phi(x^k + y) : y \in \Delta^k B\Gamma^k, x^k + y \in \Omega\}$ .*

Além disso, a condição seguinte exige que a sucessão  $\{\Delta^k\}$  seja não crescente. O método de pesquisa em padrão baseado nos movimentos exploratórios de Hooke e Jeeves satisfaz esta condição uma vez que a escolha do conjunto  $\Lambda$  se resume ao conjunto  $\{1\} \equiv \{\tau^0\}$ .

**Hipótese 5.2.8**  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \Delta^k = 0$ .

**Teorema 5.2.4** [46] *Suponha-se que as Hipóteses 5.2.4, 5.2.5, 5.2.6 e 5.2.8 são satisfeitas. Seja  $\{x^k\}$  a sucessão de iterandos produzida por um método de pesquisa em padrão generalizada (Algoritmo 5.2.2) baseado em movimentos exploratórios que verificam a Hipótese 5.2.7, para a resolução do problema (5.1). Então*

$$\lim_{k \rightarrow +\infty} \|P(x^k, \nabla\Phi(x^k))\| = 0.$$

### 5.2.5 Admissibilidade

Uma das estratégias para assegurar admissibilidade dos iterandos consiste em usar uma técnica de penalização, ou seja, definir uma nova função objectivo que satisfaz

$$F(x) = \begin{cases} \Phi(x) & \text{se } x \in \Omega \\ \infty & \text{nos casos restantes.} \end{cases} \quad (5.7)$$

Este método garante que os iterandos produzidos se mantêm admissíveis uma vez que qualquer ponto de ensaio que não pertença ao conjunto  $\Omega$  nunca será aceite.

Quando se aplica um método de pesquisa em padrão ao problema (5.1) produzem-se os mesmos iterandos que se obteriam caso se aplicasse o mesmo método ao problema sem restrições  $\min F(x)$ . No entanto, esta estratégia não pode ser aplicada com um qualquer método de pesquisa em padrão para problemas sem restrições, uma vez que é necessário garantir que a matriz  $BM^k$  seja diagonal. É esta condição que garante que existem pontos admissíveis no padrão que produzem uma redução na função objectivo.

Se se aplicar um método de pesquisa em padrão directamente ao problema (5.1), a admissibilidade também pode ser forçada por reflexão ou por projecção. A reflexão de um ponto de ensaio para o interior do conjunto admissível é traduzida por:

$$x_i = \begin{cases} l_i + (l_i - x_i) & \text{se } x_i < l_i \\ x_i & \text{se } l_i \leq x_i \leq u_i \\ u_i - (x_i - u_i) & \text{se } x_i > u_i \end{cases} \quad (5.8)$$

Se o ponto continuar a ser não admissível, pode definir-se  $x_i = \frac{l_i + u_i}{2}$ .

Por sua vez, a projecção é dada por:

$$x_i = \begin{cases} l_i & \text{se } x_i < l_i \\ x_i & \text{se } l_i \leq x_i \leq u_i \\ u_i & \text{se } x_i > u_i \end{cases} . \quad (5.9)$$

### 5.3 Método da Lagrangeana aumentada

A extensão apresentada aqui do método de pesquisa em padrão a problemas não lineares com restrições de igualdade e desigualdade, e limites simples, é baseada na técnica da Lagrangeana aumentada [45]. Mais recentemente foram propostas outras formas de abordar este tipo de problemas, tais como a apresentada em [4], que usa filtros no tratamento das restrições em vez de funções de penalidade, e a apresentada em [5], que usa uma técnica de pesquisa directa com uma grelha de pontos adaptativa.

A forma geral do problema é agora a seguinte

$$\begin{aligned} & \text{minimizar } f(x) \\ & \text{sujeito a } b(x) = 0 \\ & g(x) \leq 0 \\ & l \leq x \leq u \end{aligned} \quad (5.10)$$

em que  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  é a função objectivo,  $b(x) = 0$  são as restrições de igualdade com  $b(x) = (b_1(x), \dots, b_m(x))^T$  e  $g(x) \leq 0$  representam as restrições de desigualdade, sendo  $g(x) = (g_1(x), \dots, g_p(x))^T$ . Algumas das variáveis poderão não ter limites, quer superiores, quer inferiores, isto é, permite-se que  $l_j, u_j = \pm\infty, j \in \{1, \dots, n\}$ .

Uma função Lagrangeana aumentada do problema definido em (5.10) é dada por:

$$\Phi(x; \lambda, \delta, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i b_i(x) + \frac{1}{2\mu} \sum_{i=1}^m b_i(x)^2 + \frac{\mu}{2} \sum_{i=1}^p \left( \max \left( 0, \delta_i + \frac{g_i(x)}{\mu} \right)^2 - \delta_i^2 \right) \quad (5.11)$$

em que os vectores  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_m)^T$  e  $\delta = (\delta_1, \dots, \delta_p)^T$  contêm os multiplicadores de Lagrange associados, respectivamente, às restrições de igualdade e desigualdade, e  $\mu$  é o

parâmetro de penalidade positivo. Todas as restrições de igualdade  $b$  e de desigualdade  $g$  foram incorporadas na Lagrangeana aumentada  $\Phi$  e são deixados explícitos os limites simples. Os autores, em [45], consideram uma formulação apenas com restrições de igualdade e que pressupõe que as restrições de desigualdade são convertidas em restrições de igualdade através da introdução de variáveis de folga não negativas. Estas restrições de não negatividade são incorporadas nos limites simples do problema. Esta estratégia tem o inconveniente de aumentar a dimensão do problema. Além das variáveis  $x$ , existem também as variáveis de folga para determinar. Este aumento do número de variáveis não favorece o desempenho dos métodos de pesquisa em padrão.

Neste trabalho, optou-se por integrar em  $\Phi$  os termos de uma função Lagrangeana aumentada que correspondem às restrições de desigualdade.

Num método de multiplicadores baseado na função (5.11), determina-se uma sucessão de aproximações à solução do problema (5.10),  $\{x^j\}$ , resolvendo em cada iteração o seguinte subproblema:

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} \quad & \Phi^j(x) \equiv \Phi(x; \lambda^j, \delta^j, \mu^j) \\ \text{sujeito a} \quad & l \leq x \leq u, \end{aligned} \tag{5.12}$$

considerando valores fixos para os vectores dos multiplicadores,  $\lambda^j$  e  $\delta^j$ , e para o parâmetro de penalidade  $\mu^j$ . O índice  $j$  serve para referenciar este processo iterativo externo. Cada um dos subproblemas (5.12) é resolvido pelo método de pesquisa em padrão generalizada, tal como foi descrito na secção anterior.

Neste tipo de métodos, o subproblema (5.12) pode ser resolvido aproximadamente [7, 9, 45].

De acordo com [9], o grau de aproximação que se deve exigir na resolução do subproblema (5.12) é determinado pela condição

$$\|P(x^j, \nabla \Phi^j(x^j))\| \leq \omega^j \tag{5.13}$$

em que  $\omega^j$  é uma tolerância que vai sendo actualizada ao longo do processo iterativo externo. Note-se, no entanto, que a sucessão  $\{\omega^j\}$  de escalares positivos deve convergir

para zero à medida que  $j$  aumenta. Uma vez que no método de pesquisa em padrão não é utilizada a informação relativa às derivadas, a condição (5.13) é substituída por outra que envolve o comprimento do passo usado na pesquisa em padrão

$$\Delta^{j,k^*} \leq \varepsilon^j, \quad (5.14)$$

em que  $\varepsilon^j$  está de alguma forma relacionado com  $\omega^j$  e  $k^*$  denota o índice da última iteração realizada do algoritmo de pesquisa em padrão com limites simples no cálculo de uma aproximação à solução do subproblema (5.12) de acordo com a condição de paragem (5.14) [45]. Denota-se a aproximação calculada por  $x^{j,k^*}$ .

Em cada iteração  $j$ , o ponto inicial para o algoritmo de pesquisa em padrão, aqui denotado por  $x^{j,0}$ , é a aproximação obtida na resolução do subproblema (5.12) da iteração anterior.

Num método baseado numa Lagrangeana aumentada, os vectores  $\lambda^j$  e  $\delta^j$  são estimativas dos vectores dos multiplicadores óptimos  $(\lambda^*, \delta^*)$  do problema (5.10), uma vez que estes não são conhecidos. Essas estimativas devem ser actualizadas ao longo do processo iterativo externo. No caso do método de pesquisa em padrão, as fórmulas de actualização de primeira ordem são as mais apropriadas, uma vez que as outras fórmulas exigem informação das derivadas. Assim, a actualização dos multiplicadores associados às restrições de igualdade é feita por

$$\lambda_i^{j+1} = \lambda_i^j + \frac{b_i(x^{j+1})}{\mu^j}, \quad i = 1, \dots, m \quad (5.15)$$

e para a actualização dos multiplicadores associados às restrições de desigualdade usa-se a fórmula

$$\delta_i^{j+1} = \max \left( 0, \delta_i^j + \frac{g_i(x^{j+1})}{\mu^j} \right), \quad i = 1, \dots, p. \quad (5.16)$$

Os métodos da Lagrangeana aumentada tradicionais convergem localmente se os subproblemas (5.12) forem resolvidos aproximadamente, de acordo com uma certa tolerância, para valores suficientemente pequenos do parâmetro de penalidade. Para obter convergência global é necessário forçar a sucessão  $\{\mu^j\}$  a tender para zero e garantir que as estimativas dos multiplicadores de Lagrange tenham um comportamento razoável.

A avaliação da violação das restrições é baseada numa tolerância que se espera atingir se o processo iterativo do método dos multiplicadores convergir. Uma medida para avaliar a violação das restrições de igualdade considera a função erro  $A_{\text{ig}}(x)$ , definida por

$$A_{\text{ig}}(x^{j+1}) = \frac{\|b(x^{j+1})\|_2}{1 + \|x^{j+1}\|_2}. \quad (5.17)$$

No caso das restrições de desigualdade, a função erro  $A_{\text{des}}(x, \delta)$  mede a violação da admissibilidade e da complementaridade

$$A_{\text{des}}(x^{j+1}, \delta^{j+1}) = \frac{\max \left( \max_{1 \leq i \leq p} g_i(x^{j+1}), \sum_{i=1}^p \delta_i^{j+1} |g_i(x^{j+1})| \right)}{1 + \|\delta^{j+1}\|_2}. \quad (5.18)$$

Em geral, a escolha do parâmetro de penalidade  $\mu^j$  tem um impacto significativo no desempenho do processo iterativo externo. Se o algoritmo se esforça para atingir um ponto admissível, parece ser vantajoso diminuir  $\mu$ . No entanto, se  $\mu$  diminui muito rapidamente, o método pode tornar-se muito lento. Assim, a redução do parâmetro de penalidade só é implementada se a aproximação calculada originar violações das restrições e da complementaridade, medidas pelas funções erro (5.17) e (5.18), que não sejam razoavelmente pequenas, por forma a tentar reduzir as violações no subproblema da iteração seguinte.

No entanto, se essas violações forem consideradas razoavelmente pequenas de acordo com certas tolerâncias, o parâmetro de penalidade mantém-se, uma vez que o seu valor actual garante um grau de admissibilidade e complementaridade satisfatório. Nesta situação, actualizam-se os multiplicadores associados às restrições de igualdade.

A actualização dos multiplicadores associados às restrições de desigualdade é implementada em todas as iterações uma vez que as novas estimativas são necessárias para a avaliação da função erro (5.18).

De modo a relacionar-se a tolerância que é usada na resolução aproximada dos subproblemas (5.12) com as estimativas dos multiplicadores e com o parâmetro de penalidade, define-se a função

$$\theta(\lambda, \delta, \mu) = \left( 1 + \|\lambda\|_2 + \|\delta\|_2 + \frac{1}{\mu} \right)^{-1}. \quad (5.19)$$

Esta função tende para zero quando  $\left(\|\lambda\|_2 + \|\delta\|_2 + \frac{1}{\mu}\right) \rightarrow \infty$  e é também usada para relacionar a tolerância  $\varepsilon^j$  da condição (5.14) com  $\omega^j$  da condição (5.13), da seguinte forma:

$$\varepsilon^j = \theta(\lambda^j, \delta^j, \mu^j)\omega^j. \quad (5.20)$$

O Algoritmo 5.3.1 estabelece os passos para resolver o problema (5.10).

**Algoritmo 5.3.1** *Método da Lagrangeana aumentada baseado na pesquisa em padrão*

**dados** Escolher  $\lambda^0, \delta^0, x^0, \Delta^0$  e as constantes positivas  $\eta_0, \mu_0, \omega_0, \nu < 1, \gamma_1 < 1, \varepsilon^* \ll 1, \eta^* \ll 1, \alpha_\omega, \beta_\omega, \alpha_\eta$  e  $\beta_\eta$ ;

**seja**  $\mu^0 = \mu_0, \alpha^0 = \min(\mu^0, \gamma_1), \omega^0 = \omega_0 (\alpha^0)^{\alpha_\omega}, \varepsilon^0 = \theta(\lambda^0, \delta^0, \mu^0)\omega^0, \eta^0 = \eta_0 (\alpha^0)^{\alpha_\eta}$  e  $j = 0$ .

**enquanto** o critério de paragem não for verificado **fazer**

A partir de  $x^{j,0} \leftarrow x^j$  e  $\Delta^{j,0} \leftarrow \Delta^j$

Aplicar o Algoritmo 5.2.2 ao problema:

$$\begin{aligned} &\text{minimizar} && \Phi^j(x; \lambda^j, \delta^j, \mu^j) \\ &\text{sujeito a} && l \leq x \leq u \end{aligned}$$

de modo a encontrar uma aproximação  $x^{j,k^*}$  (após  $k^*$  iterações) que satisfaça

$$\Delta^{j,k^*} \leq \varepsilon^j.$$

Fazer  $x^{j+1} \leftarrow x^{j,k^*}, \Delta^{j+1} \leftarrow \Delta^{j,k^*}$ ;

Actualizar o vector dos multiplicadores  $\delta$  por (5.16);

**Se**  $A_{\text{ig}}(x^{j+1}) \leq \eta^j \wedge A_{\text{des}}(x^{j+1}, \delta^{j+1}) \leq \eta^j$  **então**

Actualizar o vector dos multiplicadores  $\lambda$  por (5.15);

*Fazer*

$$\begin{aligned}\mu^{j+1} &= \mu^j \\ \alpha^{j+1} &= \min(\mu^{j+1}, \gamma_1) \\ \omega^{j+1} &= \omega^j (\alpha^{j+1})^{\beta_\omega} \\ \varepsilon^{j+1} &= \theta(\lambda^{j+1}, \delta^{j+1}, \mu^{j+1}) \omega^{j+1} \\ \eta^{j+1} &= \eta^j (\alpha^{j+1})^{\beta_\eta}\end{aligned}$$

*senão*

**Se**  $\mu^j < \mu_{\min}$  **então** *terminar* **senão**

*Fazer*

$$\begin{aligned}\mu^{j+1} &= \nu \mu^j \\ \lambda^{j+1} &= \lambda^j \\ \alpha^{j+1} &= \min(\mu^{j+1}, \gamma_1) \\ \omega^{j+1} &= \omega_0 (\alpha^{j+1})^{\alpha_\omega} \\ \varepsilon^{j+1} &= \theta(\lambda^{j+1}, \delta^{j+1}, \mu^{j+1}) \omega^{j+1} \\ \eta^{j+1} &= \eta_0 (\alpha^{j+1})^{\alpha_\eta}\end{aligned}$$

*Fazer*  $j = j + 1$ .

*fim de enquanto*

*fim*

As tolerâncias usadas para medir o grau de admissibilidade e complementaridade das aproximações calculadas definem uma sucessão  $\{\eta^j\}$  que é actualizada em todas as iterações. Esta actualização deve garantir que a sucessão converge para zero, por forma a tornar cada vez mais precisas as soluções dos subproblemas à medida que  $j \rightarrow \infty$ . Este é também o objectivo que deve estar presente na actualização da sucessão  $\{\omega^j\}$ , que por sua vez afecta o comportamento da sucessão  $\{\varepsilon^j\}$ , de acordo com (5.20).

O critério de paragem deste algoritmo baseia-se em três condições. Duas delas envolvem as medidas de admissibilidade e complementaridade já definidas anteriormente. A outra condição mede a proximidade a um ponto estacionário e admissível do problema com limites simples, avaliada pela grandeza do passo  $\Delta^{j,k}$ . Assim, para constantes positivas próximas

de zero  $\varepsilon^*$  e  $\eta^*$ , considera-se que uma solução calculada  $x^j$  é ótima se as três condições são verificadas:

$$\varepsilon^j \leq \varepsilon^* \text{ e } A_{\text{ig}}(x^j) \leq \eta^* \text{ e } A_{\text{des}}(x^j, \delta^j) \leq \eta^*.$$

### 5.3.1 Convergência

De seguida descreve-se brevemente as propriedades de convergência do método da Lagrangeana aumentada baseado no método de pesquisa em padrão para a resolução de subproblemas do tipo (5.12) em que a função Lagrangeana aumentada  $\Phi$  integra apenas os termos relativos às restrições de igualdade [45]. As alterações relativas ao método original proposto em [9] são reduzidas. Considerem-se as seguintes hipóteses:

**Hipótese 5.3.1** *As funções  $f(x)$  e  $b(x)$  são duas vezes continuamente diferenciáveis para todo o  $x \in \Omega$ .*

**Hipótese 5.3.2** *A sucessão de iterandos  $\{x^j\}$  pertence ao domínio fechado e limitado  $\Omega$ .*

**Hipótese 5.3.3** *Para qualquer ponto de acumulação  $x^*$  da sucessão  $\{x^j\}$ , a matriz  $\widehat{\nabla}b(x^*)$  é de característica completa por colunas.*

A matriz  $\widehat{\nabla}b$  contém as colunas da matriz do Jacobiano de  $b$  que correspondem aos índices  $i$  das variáveis  $x$  para os quais se verifica

$$l_i < x_i^j - (\nabla\Phi^j(x^j))_i < u_i \text{ e } l_i < x_i^* < u_i \quad (5.21)$$

para todo o  $j \in J$  suficientemente grande, sendo  $x^*$  o ponto de acumulação de uma subseqüência convergente  $\{x^j\}$ ,  $j \in J$ .

De modo a assegurar-se que o algoritmo de pesquisa em padrão com limites simples aplicado a um subproblema do tipo (5.12) termina e o método da Lagrangeana aumentada é bem definido, assume-se ainda [45]:

**Hipótese 5.3.4** *Para um dado  $j$ , o conjunto  $\Omega \cap \{x : \Phi^j(x) \leq \Phi^j(x^{j,0})\}$  é compacto.*

Esta hipótese assume que o conjunto de pontos  $x \in \Omega$ , para os quais o valor da Lagrangeana aumentada não é superior ao valor da Lagrangeana aumentada no ponto inicial usado na resolução dos subproblemas (5.12), é compacto. Assim, de acordo com o Teorema 5.2.2, conclui-se que o critério de paragem (5.14) é eventualmente satisfeito nalguma iteração.

Além disso, se for imposta a condição seguinte, é possível provar que, usando o critério de paragem (5.14), existe uma correlação entre  $\Delta^{j,k}$  e a estacionaridade da Lagrangeana aumentada nas iterações mal sucedidas do método de pesquisa em padrão na resolução de (5.12).

**Hipótese 5.3.5** *Existe um  $d^*$  tal que para todos os  $j$  e  $k$  tem-se  $\|y\| \leq d^*$  para todo o  $y \in \Gamma^{j,k}$ .*

O algoritmo de actualização de  $\Delta^{j,k}$  (Algoritmo 5.2.3) determina que o comprimento do passo só atinge um valor inferior a  $\varepsilon^j$  numa iteração mal sucedida da pesquisa em padrão. Neste caso, não é encontrado um passo aceitável em  $\Delta^{j,k}\Gamma^{j,k}$ , isto é,

$$\Phi^j(x^{j,k} + s) \geq \Phi^j(x^{j,k}) \text{ para todo o } s \in \Delta^{j,k}\Gamma^{j,k}, \text{ com } (x^{j,k} + s) \in \Omega.$$

A seguinte proposição mostra que a condição mais fraca (5.14) introduzida no Algoritmo 5.3.1 garante que a condição (5.13) será satisfeita.

**Proposição 5.3.1** [45] *Existe um  $\kappa$  independente de  $j$ , tal que*

$$\|P(x^j, \nabla\Phi^j(x^j))\| \leq \kappa\omega^j$$

*em todas as iterações  $j$  do método da Lagrangeana aumentada baseado na pesquisa em padrão.*

A quantidade  $\varepsilon^j$  que surge no Algoritmo 5.3.1 e que não está presente no algoritmo original, Algoritmo 1 de [9], bem como a função  $\theta$  (5.19) que relaciona aquela quantidade com  $\omega^j$  e a Hipótese 5.3.5 são peças importantes para o resultado estabelecido na Proposição 5.3.1.

Desta proposição pode concluir-se que o comportamento assintótico de  $\|P(x^j, \nabla\Phi^j(x^j))\|$  no método da Lagrangeana aumentada baseado na pesquisa em padrão é similar ao da mesma quantidade no algoritmo original de [9]. Sendo assim, remete-se a análise de convergência para esse artigo, uma vez que, devido à Proposição 5.3.1, as provas originais destes resultados mantêm-se. Esta prova de convergência é feita apenas para as restrições de igualdade.

Seja

$$\nabla L(x, \lambda) = \nabla f(x) + \sum_{i=1}^m \lambda_i \nabla b_i(x)$$

o gradiente da função Lagrangeana, em ordem a  $x$ , associada a um problema com restrições de igualdade  $b(x) = 0$ , sem considerar as restrições de limites simples.

Defina-se a seguinte função relativa aos multiplicadores associados às restrições de igualdade:

$$\lambda_{\text{ig}}(x, \lambda, \mu) = \lambda + \frac{b(x)}{\mu}.$$

**Teorema 5.3.1** (Teorema 5.2 em [45]) *Suponha-se que a Hipótese 5.3.1 se verifica. Seja  $x^*$  um ponto de acumulação da sucessão  $\{x^j\}$  gerada pelo método da Lagrangeana aumentada baseado na pesquisa em padrão para o qual se verificam as Hipóteses 5.3.2 e 5.3.3, e seja  $J$  o conjunto de índices de uma subsucessão infinita dos  $x^j$  cujo ponto de acumulação é  $x^*$ . Então verifica-se o seguinte:*

- (i)  $b(x^*) = 0$ ,
- (ii)  $x^*$  é um ponto de Karush-Kuhn-Tucker (ponto estacionário de primeira ordem) para um problema do tipo (5.10) sem as restrições de desigualdade,  $\lambda^*$  é o correspondente vector dos multiplicadores de Lagrange e a sucessão  $\{\lambda_{\text{ig}}(x^j, \lambda^j, \mu^j)\}$  converge para  $\lambda^*$  para  $j \in J$ ,
- (iii) Existem constantes positivas  $a_1, a_2, s_1$  e um inteiro  $j_0$  tais que

$$\|\lambda_{\text{ig}}(x^j, \lambda^j, \mu^j) - \lambda^*\| \leq a_1 \omega^j + a_2 \|x^j - x^*\|$$

e

$$\|b(x^j)\| \leq s_1 (a_1 \omega^j \mu^j + \mu^j \|\lambda^j - \lambda^*\| + a_2 \mu^j \|x^j - x^*\|)$$

para todo o  $j \geq j_0$ ,  $j \in J$ .

(iv) Os gradientes  $\nabla \Phi^j$  convergem para  $\nabla L(x^*, \lambda^*)$  para  $j \in J$ .

Se forem impostas algumas hipóteses adicionais obtêm-se resultados de convergência mais fortes, tal como descrito em [45] (Lema 5.3, Corolário 5.4 e Teorema 5.5). O resultado do Lema 5.3 é importante porque estabelece a relação entre a convergência dos iterandos com o erro nos multiplicadores de Lagrange. Esta relação é característica dos métodos de multiplicadores baseados em Lagrangeanas aumentadas [7].

Um outro resultado importante neste contexto tem a ver com o comportamento da sucessão  $\{\mu^j\}$ . Em [9] prova-se que se o ponto de acumulação da sucessão de iterandos não for único, pode ter-se  $\mu^j \rightarrow 0$ . Nesta situação, a tolerância  $\varepsilon^j$  da condição de paragem (5.14) do método de pesquisa em padrão na resolução dos subproblemas (5.12) sofre uma redução da ordem de  $(\mu^j)^2$ .

O Teorema 5.5 em [45] estabelece condições para garantir que a sucessão  $\mu^j$  se conserva limitada e longe do zero. Uma das condições é a unicidade do ponto de acumulação. Também são estabelecidas as seguintes condições entre as constantes do Algoritmo 5.3.1:  $\alpha_\eta < \min(1, \alpha_\omega)$ ,  $\beta_\eta < \min(1, \beta_\omega)$ .

A definição de  $\alpha^{j+1} = \min(\mu^{j+1}, \gamma_1)$  presente no Algoritmo 5.3.1, e que é usada na definição das sucessões  $\{\omega^j\}$ ,  $\{\varepsilon^j\}$  e  $\{\eta^j\}$ , também é justificada em [45] para garantir que as sucessões  $\{x^j\}$  e  $\{\lambda^j\}$  têm pelos menos convergência  $R$ -linear com factor- $R$  quando muito  $\hat{\mu}^{\min(\beta_\omega, \beta_\eta)}$ , com  $\hat{\mu} = \min(\gamma_1, \mu_-)$ , sendo  $\mu_-$  o menor valor do parâmetro de penalidade gerado pelo algoritmo.

A estratégia que considera o tratamento das restrições de igualdade e desigualdade através da função Lagrangeana aumentada definida em (5.11) é analisada no livro de Bertsekas [7], que mostra a equivalência entre os problemas

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \Phi(x; \lambda, \delta, \mu) \tag{5.22}$$

e

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n, z \in \mathbb{R}^p} \Psi(x, z; \lambda, \delta, \mu), \quad (5.23)$$

em que o vector  $z$  contém as variáveis de folga, que são usadas para transformar as restrições de desigualdade em restrições de igualdade (por exemplo,  $g_i(x) \leq 0 \Leftrightarrow g_i(x) + z_i^2 = 0$ , para cada  $i \in \{1, \dots, p\}$ ) e  $\Psi$  é a Lagrangeana aumentada que surge quando as restrições são todas de igualdade.

Esta equivalência implica que toda a teoria desenvolvida do método da Lagrangeana aumentada para problemas com restrições de igualdade pode ser estendida aos problemas com restrições de igualdade e desigualdade, embora em termos práticos se possa resolver o problema (5.22) em vez de (5.23) que envolve as variáveis adicionais  $z_i, i = 1, \dots, p$ .

Registe-se que, de acordo com a função (5.11) e a Hipótese 5.3.6, análoga à Hipótese 5.3.1, se tem neste caso:

**Hipótese 5.3.6** *As funções  $f(x)$ ,  $b(x)$  e  $g(x)$  são duas vezes continuamente diferenciáveis para todo o  $x \in \Omega$ .*

**Proposição 5.3.2** *Se a Hipótese 5.3.6 é satisfeita, então a função (5.11) é duas vezes continuamente diferenciável no conjunto*

$$\hat{\Omega}_{\delta, \mu} = \Omega \cap \{x : g_i(x) \neq -\mu\delta_i, \text{ para todo } i = 1, \dots, p\}$$

para todo o  $\lambda, \delta$  e  $\mu > 0$ .

Apesar do método da Lagrangeana aumentada baseado na pesquisa em padrão não utilizar informação quanto às derivadas das funções objectivo e das restrições, para provar a convergência, como foi visto até aqui, parte-se do pressuposto que quer uma quer outras são diferenciáveis. Note-se que, no entanto, um dos problemas formulados neste trabalho, que contém o modelo da dupla exponencial na modelação do sedimentador secundário, não é diferenciável. Algumas das funções envolvidas nas restrições de igualdade não são sequer contínuas. Este facto significa que não é possível garantir convergência para um ponto estacionário da Lagrangeana aumentada.

Em termos práticos, o algoritmo do método da Lagrangeana aumentada aqui proposto tem um desempenho satisfatório para a grande maioria dos problemas testados, como se verá na secção seguinte.

## 5.4 Resultados

O Algoritmo 5.3.1 foi implementado em linguagem C em três versões diferentes. Em duas delas a admissibilidade (dos limites simples) é forçada, numa por reflexão (5.8) e noutra por projecção (5.9). Estas versões são denominadas respectivamente por  $PPG_{\text{reflexão}}$  (Pesquisa em Padrão Generalizada) e  $PPG_{\text{projecção}}$ . Na terceira implementação usa-se a estratégia de penalização (5.7) e é denominada por  $PPG_{\text{penalização}}$ . Foram também feitas as ligações deste *solver* ao AMPL [25]. Aos parâmetros que aparecem no algoritmo foram dados os valores que se listam na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Parâmetros usados na implementação do Algoritmo 5.3.1

$\theta_1$	$\theta_2$	$\nu$	$\mu_0$	$\mu_{\min}$	$\omega_0$	$\eta_0$	$\alpha_\omega$	$\beta_\omega$	$\alpha_\eta$	$\beta_\eta$	$\gamma_1$	$\eta^*$	$\varepsilon^*$
1	0.5	0.5	1	$10^{-6}$	1	1	0.9	0.9	$0.9\min(1, \alpha_\omega)$	$0.5\min(1, \beta_\omega)$	0.5	$10^{-2}$	$10^{-5}$

O valor inicial do comprimento do passo ( $\Delta^0$ ) foi estabelecido em função do valor inicial das variáveis. O algoritmo considera a opção de definir tamanhos de passo diferentes para diferentes variáveis. Desta forma evitam-se passos demasiado grandes ou pequenos em problemas com questões de escalonamento, que podem ter variáveis com ordens de grandeza muito distintas, como é o caso do problema de optimização dos custos de uma ETAR. Assim, se o valor da variável for nulo, o valor inicial da componente do vector  $\Delta$  toma o valor 0.1. Caso contrário, toma o valor inicial dessa variável multiplicado por 0.1:

Se  $x_i^0 = 0$  então  $\Delta_i^0 = 0.1$  senão  $\Delta_i^0 = 0.1x_i^0$ ,  $i = 1, \dots, n$ .

Todos os problemas correram num processador Intel Pentium M a 1.5 GHz com memória RAM de 504 MB.

### 5.4.1 Problemas acadêmicos

Com o objectivo de testar o *solver* desenvolvido com base no método da Lagrangeana aumentada com uma pesquisa em padrão generalizada, seleccionaram-se alguns problemas teste académicos de pequenas dimensões, de forma a serem contempladas todas as situações possíveis: restrições de igualdade, restrições de desigualdade e limites simples. A Tabela 5.2 apresenta as características de cada problema, em termos de número de variáveis ( $n$ ), número de restrições de igualdade ( $m$ ), número de restrições de desigualdade ( $p$ ) e número de limites simples ( $ls$ ). Apresenta-se ainda a referência à fonte de onde foram retirados (ref).

Tabela 5.2: Características dos problemas académicos testados

Problema	$n$	$m$	$p$	$ls$	ref.	Problema	$n$	$m$	$p$	$ls$	ref.
audet	2	0	1	4	[4]	audet2	2	0	2	1	[4]
corridor	3	0	7	6	[24]	dennis_20	20	0	1	0	[5]
dennis_5	5	0	1	0	[5]	ex1_vrahatis	2	1	1	0	[31]
ex2_vrahatis	2	0	2	4	[24]	ex6_vrahatis	6	0	2	11	[48]
hs083	5	0	6	10	[32]	hs100	7	0	4	14	[32]
rosenbrock2	3	0	1	6	[24]	s219	4	2	0	0	[52]
s220	2	1	0	2	[52]	s221	2	0	1	2	[52]
s224	2	0	4	4	[52]	s225	2	0	5	0	[52]
s226	2	0	2	2	[52]	s227	2	0	2	0	[52]
s228	2	0	2	0	[52]	s230	2	0	2	0	[52]
s232	2	0	3	2	[52]	s235	3	1	0	0	[52]
s248	3	1	1	0	[52]	s250	3	0	2	6	[52]
s254	3	2	0	1	[52]	s263	4	2	2	0	[52]
s269	5	3	0	0	[52]	s324	2	0	2	1	[52]
s325	2	1	2	0	[52]	schwefel6	2	0	1	4	[24]

A Tabela 5.3 mostra os resultados obtidos para os 30 problemas da Tabela 5.2 usando a implementação  $PPG_{\text{reflexão}}$ , na Tabela 5.4 estão os resultados da implementação  $PPG_{\text{projecção}}$

Tabela 5.3: Resultados para os problemas acadêmicos com a implementação PPG<sub>reflexão</sub>

Problema	it. externas	it. internas	calc. função	$f(x)$	pen
audet	18	277	1407	-1.000000e+02	0.000000e+00
audet2	18	25	151	1.000000e+00	0.000000e+00
corridor	18	68	343	-3.000000e+02	0.000000e+00
dennis_20	18	1000	44111	-3.443556e+01	0.000000e+00
dennis_5	18	238	2749	-8.660251e+00	-3.181102e-06
ex1_vrahatis	18	49	310	1.999976e-01	2.441425e-06
ex2_vrahatis	15	8504	40774	-6.383206e+03	2.600728e-04
ex6_vrahatis	56	12290	315212	-1.500726e+02	5.374615e+13
hs083	54	45365	444009	-2.939311e+04	1.810505e+11
hs100	12	1216	16915	6.806299e+02	2.690981e-04
rosenbrock2	18	15	123	0.000000e+00	0.000000e+00
s219	17	358	3420	-9.929924e-01	-7.119801e-03
s220	14	1212	6188	1.125021e+00	-3.664410e-08
s221	60	11247	111283	-1.700000e+00	1.589539e+15
s224	13	341	1695	-2.932197e+02	1.574005e-03
s225	35	4261	21288	2.064559e+00	-6.477069e-03
s226	17	82	501	-5.000019e-01	1.941889e-06
s227	17	343	1809	9.929914e-01	6.964409e-03
s228	18	70	399	-2.999994e+00	-6.103866e-06
s230	18	92	571	3.749939e-01	6.103492e-06
s232	56	38313	201209	7.633004e-28	1.058459e+26
s235	18	1389	9523	8.925302e-02	-2.119471e-07
s248	17	203	1625	-7.999878e-01	-1.220737e-05
s250	10	249	1452	-3.268740e+03	0.000000e+00
s254	12	133	953	-1.730469e+00	-1.284894e-03
s263	37	6559	55574	-9.954749e-01	4.650077e-03
s269	19	473	5355	4.084517e+00	8.500275e-03
s324	22	205	997	5.000010e+00	-1.020470e-05
s325	13	146	834	3.791302e+00	3.952493e-05
schwefel6	18	93	477	8.056865e-01	-1.403254e-05

Tabela 5.4: Resultados para os problemas acadêmicos com a implementação PPG<sub>projecção</sub>

Problema	it. externas	it. internas	calc. função	$f(x)$	pen
audet	18	278	1414	-1.000000e+02	0.000000e+00
audet2	18	15	93	1.000000e+00	0.000000e+00
corridor	18	60	303	-3.000000e+02	0.000000e+00
dennis_20	18	1000	44111	-3.443556e+01	0.000000e+00
dennis_5	18	238	2749	-8.660251e+00	-3.181102e-06
ex1_vrahatis	18	49	310	1.999976e-01	2.441425e-06
ex2_vrahatis	35	24049	112231	-3.253039e+03	-2.446003e+06
ex6_vrahatis	10	129	1375	-2.130000e+02	-1.030287e-12
hs083	38	30022	293848	-3.014259e+04	-2.512800e-06
hs100	12	1216	16915	6.806299e+02	2.690981e-04
rosenbrock2	18	15	123	0.000000e+00	0.000000e+00
s219	17	358	3420	-9.929924e-01	-7.119801e-03
s220	19	212	1161	1.000000e+00	0.000000e+00
s221	75	44382	244174	-1.142061e+00	1.147182e+11
s224	13	424	2108	-2.941639e+02	1.826263e-03
s225	35	4261	21288	2.064559e+00	-6.477069e-03
s226	17	82	501	-5.000019e-01	1.941889e-06
s227	17	343	1809	9.929914e-01	6.964409e-03
s228	18	70	399	-2.999994e+00	-6.103866e-06
s230	18	92	571	3.749939e-01	6.103492e-06
s232	56	54010	287615	0.000000e+00	1.044814e+26
s235	18	1389	9523	8.925302e-02	-2.119471e-07
s248	17	203	1625	-7.999878e-01	-1.220737e-05
s250	8	160	918	-3.300000e+03	0.000000e+00
s254	17	51	369	-1.732050e+00	-1.247009e-06
s263	37	6559	55574	-9.954749e-01	4.650077e-03
s269	19	473	5355	4.084517e+00	8.500275e-03
s324	22	205	997	5.000010e+00	-1.020470e-05
s325	13	146	834	3.791302e+00	3.952493e-05
schwefel6	18	93	477	8.056865e-01	-1.403254e-05

Tabela 5.5: Resultados para os problemas acadêmicos com a implementação PPG<sub>penalização</sub>

Problema	it. externas	it. internas	calc. função	$f(x)$	pen
audet	18	280	1433	-1.000000e+02	0.000000e+00
audet2	18	25	160	1.000000e+00	0.000000e+00
corridor	18	85	630	-3.000000e+02	0.000000e+00
dennis_20	18	1000	44111	-3.443556e+01	0.000000e+00
dennis_5	18	238	2749	-8.660251e+00	-3.181102e-06
ex1_vrahatis	18	49	310	1.999976e-01	2.441425e-06
ex2_vrahatis	17	9781	45741	-6.118965e+03	-5.580882e-04
ex6_vrahatis	16	139	2367	-2.130000e+02	-8.171241e-13
hs083	54	45430	422972	-3.003329e+04	5.785774e+12
hs100	12	1216	16915	6.806299e+02	2.690981e-04
rosenbrock2	18	15	123	0.000000e+00	0.000000e+00
s219	17	358	3420	-9.929924e-01	-7.119801e-03
s220	18	1971	10125	1.182000e+03	-3.240075e-12
s221	64	17036	156000	-1.568490e+00	4.560555e+14
s224	13	404	2031	-2.939181e+02	1.741493e-03
s225	35	4261	21288	2.064559e+00	-6.477069e-03
s226	17	82	501	-5.000019e-01	1.941889e-06
s227	17	343	1809	9.929914e-01	6.964409e-03
s228	18	70	399	-2.999994e+00	-6.103866e-06
s230	18	92	571	3.749939e-01	6.103492e-06
s232	56	38288	201066	4.131731e-26	1.058459e+26
s235	18	1389	9523	8.925302e-02	-2.119471e-07
s248	17	203	1625	-7.999878e-01	-1.220737e-05
s250	8	269	2034	-3.300000e+03	0.000000e+00
s254	17	65	584	-1.732062e+00	1.095920e-05
s263	37	6559	55574	-9.954749e-01	4.650077e-03
s269	19	473	5355	4.084517e+00	8.500275e-03
s324	22	205	997	5.000010e+00	-1.020470e-05
s325	13	146	834	3.791302e+00	3.952493e-05
schwefel6	18	93	477	8.056865e-01	-1.403254e-05

e na Tabela 5.5 os resultados da implementação  $\text{PPG}_{\text{penalização}}$ . Estas tabelas registam o número de iterações externas (it. externas), que no Algoritmo 5.3.1 é referenciado pelo contador  $j$ , o número total de iterações internas (it. internas), que contabiliza o número total de chamadas ao Algoritmo 5.2.1, o número total de cálculos da função  $\Phi$  (calc. função), o valor da função objectivo do problema (5.10) na solução encontrada ( $f(x)$ ) e o valor do termo de penalização  $\Phi - f$  na solução (pen).

A Tabela 5.6 apresenta um resumo do desempenho das três implementações do *solver* do método da Lagrangeana aumentada com a pesquisa em padrão generalizada. Registou-se o número de problemas que convergiram ( $nc$ ), o número médio de iterações externas ( $\bar{n}_{ie}$ ), o número médio de iterações internas ( $\bar{n}_{ii}$ ) e o número médio de cálculos da função  $\Phi$  ( $\bar{n}_{cf}$ ).

Tabela 5.6: Desempenho das três versões implementadas no *solver* de pesquisa em padrão

<i>solver</i>	$nc$	$\bar{n}_{ie}$	$\bar{n}_{ii}$	$\bar{n}_{cf}$
$\text{PPG}_{\text{reflexão}}$	26	19	2753	25155
$\text{PPG}_{\text{projecção}}$	27	21	3375	26030
$\text{PPG}_{\text{penalização}}$	27	20	2735	23894

A observação da Tabela 5.6 permite constatar que as 3 implementações originam resultados similares. Na versão  $\text{PPG}_{\text{reflexão}}$  convergem menos problemas (26) que nas outras  $\text{PPG}_{\text{projecção}}$  e  $\text{PPG}_{\text{penalização}}$  (27), apesar de a diferença não ser significativa. No entanto verificou-se que os problemas s232 e s235 não convergiram com nenhuma das implementações. O *ex6\_vrahatis* não convergiu com a implementação  $\text{PPG}_{\text{reflexão}}$ . Relativamente ao problema s221, só convergiu com a implementação  $\text{PPG}_{\text{projecção}}$ . Contudo, o *ex2\_vrahatis* não converge apenas nesta mesma implementação.

Em termos de cálculos da função e iterações internas, a implementação que exige menos é a  $\text{PPG}_{\text{penalização}}$ , o que se explica pelo facto de que, quando o ponto não é admissível, o cálculo da função já não ser feito, uma vez que esta toma imediatamente o valor  $\infty$ .

O número médio de iterações externas é superior na versão  $PPG_{\text{projecção}}$ . A que tem mais iterações internas e cálculos de função é a versão  $PPG_{\text{projecção}}$ .

## 5.5 Problemas reais

Para se seleccionar a versão mais adequada do *solver* para os problemas reais, em particular para as ETARs de Alijó, Murça, Sabrosa e Sanfins do Douro, começou-se por comparar as versões  $PPG_{\text{reflexão}}$  e  $PPG_{\text{projecção}}$ . A primeira parece ser mais robusta, uma vez que convergiu para mais problemas académicos. Também realizou menos iterações externas, apesar de apresentar números de cálculos da função e iterações internas maiores. Por esse motivo, foram realizadas algumas experiências com as versões  $PPG_{\text{reflexão}}$  e  $PPG_{\text{penalização}}$ . Esta última originou piores resultados nos testes preliminares feitos com os problemas reais. Assim, as Tabelas 5.7 a 5.10 apresentam os resultados obtidos com a implementação  $PPG_{\text{reflexão}}$ .

Nestas experiências usou-se a formulação matemática que considera o modelo ASM1 para o tanque arejador e o modelo que combina as normas ATV e o modelo da dupla exponencial para o sedimentador secundário. A função objectivo é a referenciada em (4.35).

Tabela 5.7: Resultados obtidos para várias eficiências do tratamento primário para a ETAR de Alijó

Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
0	2632	108	654	23.8	41.1	22.8	6.4	2.79
40	1738	100	811	16.4	44.6	11.2	6.5	2.41
50	1155	101	600	16.8	22.8	19.9	8.2	1.81
60	516	100	801	8.4	62.5	16.5	9.5	1.48
70	1308	100	659	9.8	43.5	16.4	6.4	1.60

Tabela 5.8: Resultados obtidos para várias eficiências do tratamento primário para a ETAR de Murça

Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
0	1599	102	746	16.5	12.8	10.4	3.1	2.24
40	913	101	371	16.9	74.7	24.2	9.5	1.25
50	946	101	933	11.1	40.0	20.1	6.8	2.00
60	650	273	703	8.9	82.8	14.5	9.4	1.62
70	748	159	715	7.2	63.7	10.6	6.8	1.44

Tabela 5.9: Resultados obtidos para várias eficiências do tratamento primário para a ETAR de Sabrosa

Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
0	1344	100	707	17.5	88.7	20.1	9.1	2.14
40	914	133	557	9.6	28.7	14.6	9.7	1.36
50	1447	100	768	14.5	63.2	20.4	8.6	2.11
60	955	102	997	8.2	51.1	14.3	8.1	1.88
70	706	100	987	7.9	63.7	12.6	8.1	1.76

Analisando as Tabelas 5.7 a 5.10 verifica-se que, no geral, o custo total (em milhões de euros) diminui à medida que a eficiência do tratamento primário aumenta. A exceção é para a ETAR de Sanfins do Douro, em que o custo evolui de forma menos expectável. Nas restantes ETARs verifica-se que para Alijó há um ligeiro aumento quando se passa de uma eficiência do tratamento primário de 60% para 70%, o que é perfeitamente aceitável uma vez que, nestes casos, as características do influente são bastante similares. Nas ETARs de Murça e Sabrosa há uma diminuição mais acentuada quando se passa da ausência de tratamento primário para uma eficiência de 40%.

Se se atentar nos desenhos obtidos, verifica-se que a tendência do volume do arejador é diminuir com o aumento da eficiência do tratamento primário, o caudal de ar mantém-se dentro da mesma gama de valores, a área do sedimentador não segue nenhum padrão em particular, mas mantém-se em valores da mesma ordem de grandeza. O mesmo acontece com a altura do sedimentador, apesar de se notar neste caso uma tendência para o valor

Tabela 5.10: Resultados obtidos para várias eficiências do tratamento primário para a ETAR de Sanfins do Douro

Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
0	1263	103	703	14.0	51.7	24.0	10.5	1.90
40	1179	158	404	10.7	51.2	16.3	9.7	1.28
50	885	100	736	8.8	28.7	13.8	9.5	1.53
60	1086	151	898	10.7	55.0	17.4	9.7	2.03
70	801	182	998	24.7	87.8	16.5	9.4	3.36

diminuir com o aumento da eficiência do tratamento primário. Excepção é o caso de Sanfins do Douro, tal como acontece no custo total, em que o comportamento não é o expectável.

Para todos os casos verifica-se que os valores da carga poluente em termos de  $CQO$ ,  $SST$  e  $N$  são sempre muito inferiores aos impostos por lei, o que aponta no sentido dos desenhos obtidos serem robustos, isto é, capazes de suportar condições adversas no influente.

No sentido de se comparar a solução obtida pelo *solver*, que implementa o método da Lagrangeana aumentada com base numa pesquisa em padrão generalizada (conforme o Algoritmo 5.3.1, na sua versão  $PPG_{\text{reflexão}}$ ), realizou-se um conjunto de experiências recorrendo também ao *solver* LOQO, disponível no NEOS *Server*. Apresentam-se os resultados obtidos para ambos os *solvers*, neste caso apenas para as eficiências do tratamento primário de 0, 60 e 70%, uma vez que nas restantes a maioria dos problemas não convergiu com o LOQO.

Tabela 5.11: Resultados obtidos para algumas eficiências do tratamento primário para a ETAR de Alijó com os *solvers*  $PPG_{\text{reflexão}}$  e LOQO

<i>Solver</i>	Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
$PPG_{\text{reflexão}}$	0	2632	109	654	23.8	41.1	22.8	6.4	2.79
	60	516	100	801	8.4	62.5	16.5	9.5	1.48
	70	1308	100	659	9.8	43.5	16.4	6.4	1.60
LOQO	0	2646	205362	94	8.9	29.8	7.0	1.1	49.6
	60	2584	12991	217	7.5	36.5	6.1	2.3	7.06
	70	1930	9032	217	6.0	40.4	6.1	5.0	5.46

Tabela 5.12: Resultados obtidos para algumas eficiências do tratamento primário para a ETAR de Murça com os *solvers* PPG<sub>reflexão</sub> e LOQO

<i>Solver</i>	Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
PPG <sub>reflexão</sub>	0	1599	102	746	16.5	12.8	10.4	3.1	2.24
	60	650	273	703	8.9	82.8	14.5	9.4	1.62
	70	748	159	715	7.2	63.7	10.6	6.8	1.44
LOQO	0	1959	152023	74	8.3	27.7	7.3	1.1	38.9
	60	1903	9271	173	7.1	35.6	6.2	3.8	5.50
	70	1180	13915	173	5.0	46.2	6.2	2.5	6.83

Tabela 5.13: Resultados obtidos para algumas eficiências do tratamento primário para a ETAR de Sabrosa com os *solvers* PPG<sub>reflexão</sub> e LOQO

<i>Solver</i>	Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
PPG <sub>reflexão</sub>	0	1344	100	707	17.5	88.7	20.1	9.1	2.14
	60	955	102	997	8.2	51.1	14.3	8.1	1.88
	70	706	100	987	7.9	63.7	12.6	8.1	1.76
LOQO	0	—	—	—	—	—	—	—	não converge
	60	540	5588	98	4.3	47.6	6.1	1.3	3.56
	70	468	3007	98	4.0	58.2	6.2	6.8	2.39

A conclusão mais imediata a retirar das Tabelas 5.11 a 5.14 é que os dois *solvers* não estão a convergir para a mesma solução. Há uma grande diferença entre elas em termos de custo total, em especial no caso em que não existe tratamento primário.

O volume do tanque arejador é da mesma ordem de grandeza em ambos os casos. Nas ETARs maiores (Alijó e Murça), o volume do tanque arejador obtido é superior no caso da solução obtida pelo LOQO. Nas menores (Sabrosa e Sanfins do Douro), acontece o oposto. A única exceção é para a ETAR de Sanfins do Douro, no caso em que não há tratamento primário.

Tabela 5.14: Resultados obtidos para algumas eficiências do tratamento primário para a ETAR de Sanfins do Douro com os *solvers* PPG<sub>reflexão</sub> e LOQO

<i>Solver</i>	Eficiência	$V_a$	$G_S$	$A_s$	$h$	$CQO_{ef}$	$SST_{ef}$	$N_{ef}$	custo total
PPG <sub>reflexão</sub>	0	1263	103	703	14.0	51.7	24.0	10.5	1.90
	60	1086	151	898	10.7	55.0	17.4	9.7	2.03
	70	801	182	998	24.7	87.8	16.5	9.4	3.36
LOQO	0	1579	26842	108	8.8	27.2	6.0	1.8	10.76
	60	612	6334	108	4.4	47.6	6.2	1.3	3.89
	70	720	9131	56	5.0	24.8	6.5	1.5	4.93

A área e a altura do sedimentador secundário são sempre inferiores na solução encontrada pelo LOQO. No entanto, e aí reside a razão principal das grandes diferenças no custo, o caudal de ar requerido pela solução do LOQO é sempre muito superior.

Tal como acontece com o *solver* PPG<sub>reflexão</sub>, a solução encontrada pelo LOQO apresenta valores da  $CQO$ ,  $SST$  e  $N$  muito aquém dos exigidos por lei (125, 35 e 15, respectivamente). Por essa razão, esta solução é também robusta.

# Capítulo 6

## Conclusões e trabalho futuro

Neste capítulo apresentam-se as principais conclusões do trabalho realizado, bem como as linhas de investigação a seguir no futuro.

### 6.1 Conclusões

A optimização de ETARs é um assunto de grande importância, já que os custos que decorrem da sua instalação e operação são muito elevados.

Neste trabalho desenvolveu-se toda uma estratégia de abordagem à técnica de optimização dos processos envolvidos numa ETAR, com especial ênfase ao sedimentador secundário, já que no geral não é tão explorado quando considerado como parte integrante do sistema de lamas activadas.

Listam-se de seguida as principais contribuições deste trabalho:

- definição de uma função custo que traduz os custos associados à instalação e operação de uma ETAR, a partir de dados reais obtidos numa região de Portugal;
- desenvolvimento de um procedimento de optimização, pouco comum nesta área, com o objectivo de determinar o desenho óptimo de uma ETAR, que integra uma função objectivo, relacionada com os custos de operação e de investimento associados ao projecto, e restrições que descrevem os diversos processos envolvidos nas unidades

de tratamento do sistema de lamas activadas - o tanque arejador e o sedimentador secundário;

- desenvolvimento de um modelo inovador para descrever os processos presentes no sedimentador secundário, que combina dois modelos tradicionais e que permite ultrapassar as limitações e potenciar as vantagens de cada um dos dois modelos quando usados separadamente;
- desenvolvimento de um algoritmo de optimização sem derivadas baseado numa pesquisa em padrão para a resolução de problemas de programação matemática com todos os tipos de restrições;
- desenvolvimento de um código (*solver*) na linguagem de programação C, que integra uma interface ao AMPL (linguagem de programação matemática), de modo a ser possível ler um problema de optimização codificado nessa linguagem;
- realização de variadas experiências computacionais, a partir de dados reais de ETARs.

Uma das conclusões mais imediata e esperada das experiências efectuadas é que a qualidade exigida ao efluente final influencia directamente os custos, em especial a carência química de oxigénio, em oposição aos sólidos suspensos totais e azoto, que não têm uma implicação tão considerável. Verificou-se ainda que o tanque arejador contribui de forma mais acentuada para os custos do sistema de lamas activadas, sendo que os custos de operação superam os de investimento quando o tempo de vida da ETAR considerado é de 20 anos. Este facto deve-se maioritariamente ao consumo energético do arejamento.

Verificou-se o impacto da presença e eficiência do tratamento primário e concluiu-se que é de toda a conveniência que esteja presente numa ETAR.

Os custos considerados são os que contribuem para o desenho da ETAR, tendo sido desprezados os que são fixos, não influenciando, por isso, o processo de optimização. São exemplo os custos do terreno, de instalações eléctricas, paisagísticos, entre outros.

Foi proposto um modelo inovador para descrever o sedimentador secundário, que combina os dois modelos tradicionais ATV e dupla exponencial e provou-se por simulação que

de facto esta combinação resulta numa solução mais robusta e em simultâneo economicamente atractiva.

Testou-se o peso económico do tratamento das lamas no caso deste ser por centrifugação e deposição em aterro, tendo-se verificado que, ainda que contribua com uma parcela significativa no custo total, não altera o desenho obtido, podendo, por esta razão, ser deixado de fora do processo de optimização quando o objectivo deste é chegar ao desenho óptimo do tratamento secundário (tanque arejador + sedimentador secundário).

Quando o modelo da dupla exponencial, para o sedimentador secundário, é integrado na formulação deste tipo de problema de optimização, algumas funções de restrição do problema não são diferenciáveis. Este facto leva a que alguns métodos de optimização, que utilizam informação das derivadas das funções envolvidas no modelo, possam ter problemas de convergência.

Para ultrapassar esta questão, foi desenvolvido um algoritmo de pesquisa em padrão generalizada, que não recorre ao cálculo das derivadas, e que usa uma função Lagrangeana aumentada para manusear as restrições de igualdade e desigualdade do problema.

Foi desenvolvido um *solver* na linguagem C que integra ligações ao AMPL, para possibilitar a resolução de qualquer problema de optimização codificado na linguagem de modelação matemática AMPL.

Em relação às experiências realizadas com este *solver*, os resultados obtidos são encorajadores. Nos problemas académicos conseguiu-se convergência na maioria dos casos testados para as três versões do algoritmo. Nos problemas reais obtiveram-se resultados credíveis dentro dos parâmetros esperados.

## 6.2 Trabalho Futuro

A investigação apresentada nesta tese consiste num fio condutor que permite estabelecer um procedimento básico para a optimização de uma ETAR, tendo em conta uma realidade muito específica. Neste caso, foram analisadas quatro ETARs no norte de Portugal, em Trás-os-Montes. A ideia geral é alargar este procedimento a outras regiões com diferentes

realidades. Assim, o trabalho futuro será desenvolvido em três vertentes:

### 1. Melhoramento dos modelos

No caso das lamas activadas, pretende-se incluir, para além da remoção da matéria orgânica e de azoto, a remoção de fósforo. Para isso será utilizado o modelo ASM2d [29]. Além disso pretende-se testar outro tipo de regime que não o RPA, nomeadamente os escoamentos do tipo reactor-pistão ou processo orbal, com arejamento intermitente, usando equações diferenciais [75]. Também se pretende explorar outro tipo de processos no espessamento de lamas, tais como a flutuação/flotação. Será também interessante explorar outro tipo de tratamento secundário que não as lamas activadas. Podem referir-se, a título de exemplo, os tanques percoladores, os discos rotativos ou os reactores anaeróbios. Para além dos processos biológicos, podem ainda explorar-se os processos químicos, sendo no entanto estes mais usados como tratamentos terciários. Na disposição final das lamas, pretende-se estudar o impacto económico da sua possível recuperação como fertilizante, bem como alguns processos de estabilização biológica, aeróbios ou anaeróbios.

### 2. Desenvolvimento do *solver*

Em relação ao *solver* PPG (Pesquisa em Padrão Generalizada), pretende-se melhorar o código, bem como a definição de alguns parâmetros. Pretende-se ainda testar outras estratégias, quer nos movimentos exploratórios (outros padrões para além do Hooke e Jeeves), quer no tratamento das restrições (por exemplo, através da técnica dos filtros e de outras funções de penalidade).

### 3. Simplificação da formulação do problema

Na formulação deste problema, o objectivo era torná-lo genérico e simples de interpretar. Pequenas alterações, quer em termos do modelo propriamente dito, quer em termos de parâmetros são fáceis de efectuar. No entanto, a formulação pode ser simplificada, por exemplo, eliminando algumas restrições mais simples que podem ser incorporadas noutras. Outra estratégia a experimentar é a transformação das

variáveis em parâmetros adimensionais, evitando-se deste modo problemas mal condicionados. Uma forma muito interessante de abordar o problema, que se pretende também testar, é através da suavização das restrições não diferenciáveis, tornando o problema mais fácil de resolver. Uma estratégia deste género é apresentada em [40].



# Apêndices



# Apêndice A

## Notação e unidades

- $b_A$ =coeficiente do declínio da biomassa autotrófica, dia<sup>-1</sup>  
 $b_H$ =coeficiente do declínio da biomassa heterotrófica, dia<sup>-1</sup>  
 $CBO$ =carência bioquímica de oxigénio, g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>  
 $CBO_U$ = $CBO$  terminal, g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>  
 $CQO$ =carência química de oxigénio, g  $CQO$ /m<sup>3</sup>  
 $CO$ =custos de operação, euros  
 $CI$ =custos de investimento, euros  
 $CT$ =custo total, euros  
 $CC$ =custos energéticos da centrífuga, euros  
 $CD$ =custos de deposição das lamas, euros  
 $CI$ =custo de investimento, euros de 2003;  
 $CO$ =custo de operação, euros de 2003  
 $CT$ =custo total, euros de 2003  
 $f_{CBO}$ =taxa  $CBO/CBO_U$   
 $f_P$ =fracção de biomassa que leva a produtos em suspensão  
 $G_S$ =caudal de ar, m<sup>3</sup>/dia em condições PTN  
 $HenryO_2$ =constante de Henry  
 $i$ =ininteresse do dinheiro

$icv$ =razão  $X/SSV$ , g  $CQO$ /g  $SSV$

$i_{X_B}$ =conteúdo de azoto na biomassa activa, g  $N$ /g  $CQO$

$i_{X_P}$ =conteúdo de azoto na biomassa endógena/inerte, g  $N$ /g  $CQO$

$IQ$ =índice de qualidade, Kg de poluição/dia

$IVLD$ =índice volumétrico de lamas diluídas

$k_a$ =taxa de amonificação,  $m^3$  g  $CQO$ /dia

$k_h$ =taxa específica máxima de hidrólise, dia<sup>-1</sup>

$K_{La}$ =coeficiente de transferência de massa, dia<sup>-1</sup>

$K_{NH}$ =coeficiente de meia saturação da amónia para o crescimento de biomassa autotrófica, g  $N/m^3$

$K_{NO}$ =coeficiente de meia saturação do nitrato para a biomassa heterotrófica desnitrificante, g  $N/m^3$

$K_{OA}$ =coeficiente de meia saturação de oxigénio para o crescimento de autotróficos, g  $O_2/m^3$

$K_{OH}$ =coeficiente de meia saturação de oxigénio para o crescimento de heterotróficos, g  $O_2/m^3$

$K_S$ =coeficiente de meia saturação de substrato rapidamente biodegradável para a biomassa heterotrófica, g  $CQO/m^3$

$K_X$ =coeficiente de meia saturação para a hidrólise do substrato lentamente biodegradável, g  $CQO/g$   $CQO$

$n$ =tempo de vida da estação de tratamento, anos

$N$ =azoto total, g  $N/m^3$

$P_{O_2}$ =pressão parcial de oxigénio não corrigida

$PTN$ =pressão e temperatura normais

$Q$ =caudal,  $m^3$ /dia

$r$ =taxa de reciclagem

$S$ = $CQO$  solúvel, g  $CQO/m^3$

$S_{alk}$ =alcalinidade, unidades molares

$S_I$ =matéria orgânica inerte solúvel, g  $CQO/m^3$

- $S_{ND}$ =azoto orgânico biodegradável solúvel, g  $N/m^3$   
 $S_{NH}$ =amónia livre e sob a forma ionizada, g  $N/m^3$   
 $S_{NO}$ =azoto sob a forma de nitrito e nitrato, g  $N/m^3$   
 $S_O$ =oxigénio dissolvido, g  $(-COD)/m^3$   
 $S_{O_{sat}}$ =concentração de saturação de oxigénio, g/ $m^3$   
 $S_S$ =substrato rapidamente biodegradável solúvel, g  $CQO/m^3$   
 $SRT$ =idade das lamas, dia  
 $SST$ =sólidos suspensos totais, g/ $m^3$   
 $SSV$ =sólidos suspensos voláteis, g/ $m^3$   
 $T$ =temperatura, C  
 $TKN$ =azoto total de Kjeldahl, g  $N/m^3$   
 $TRH$ =tempo de retenção hidráulica, dia  
 $V_a$ =volume do tanque arejador,  $m^3$   
 $X=CQO$  em suspensão, g  $CQO/m^3$   
 $X_{BA}$ =biomassa activa autotrófica, g  $CQO/m^3$   
 $X_{BH}$ =biomassa activa heterotrófica, g  $CQO/m^3$   
 $X_I$ =matéria orgânica em suspensão inerte, g  $CQO/m^3$   
 $X_{II}$ =sólidos suspensos inorgânicos inertes, g/ $m^3$   
 $X_{ND}$ =azoto orgânico biodegradável em suspensão, g  $N/m^3$   
 $X_P$ = produtos em suspensão provenientes do declínio da biomassa, g  $CQO/m^3$   
 $X_S$ =substrato lentamente biodegradável, g  $CQO/m^3$   
 $Y_A$ =crescimento para a biomassa autotrófica, g  $CQO/g N$   
 $Y_H$ =crescimento para a biomassa heterotrófica, g  $CQO/g CQO$   
 $\alpha$ =coeficiente água residual/água limpa  
 $\beta$ =factor de correcção de salinidade e iões  
 $\eta$ =eficiência de transferência de oxigénio *standard*  
 $\eta_g$ =factor de correcção para  $\mu_H$  sob condições anóxicas  
 $\eta_h$ =factor de correcção para a hidrólise sob condições anóxicas  
 $\mu_A$ =taxa máxima de crescimento específica para a biomassa autotrófica, dia $^{-1}$

$\mu_H$ =taxa máxima de crescimento específica para a biomassa heterotrófica, dia<sup>-1</sup>

$\rho$ =massa específica da água, Kg/m<sup>3</sup>

$\theta$ =factor de correção da temperatura

*subscritos*

*a*=tanque de arejamento

*ef*=efluente

*ent*=entrada do tanque de arejamento

*inf*=influyente

*P*=durante um evento de pico

*r*=reciclagem

*s*=tanque sedimentador

*w*=lamas purgadas

sem índice=dentro do tanque de arejamento=interior do tanque de arejamento

# Apêndice B

## Glossário

### **Aeróbio**

É um organismo que baseia o seu metabolismo no oxigénio. A aerobiose é o uso do oxigénio para oxidação do substrato, por exemplo, açúcares e gorduras, para obter energia. Este processo é conhecido também como respiração.

### **Águas residuais por tratar**

São águas residuais descarregadas sem qualquer tratamento.

### **Águas residuais urbanas**

Resíduos líquidos que derivam de actividades domésticas, comerciais e industriais num local urbano. Significa águas residuais domésticas ou a mistura de águas residuais domésticas com águas residuais industriais e/ou águas pluviais.

### **Anaeróbio**

É uma palavra técnica que significa literalmente sem ar e se opõe a aeróbio. A presença ou ausência de ar ou, mais precisamente, a presença ou ausência de oxigénio no ar, afecta várias reacções químicas e biológicas.

**Anóxico**

São organismos que não utilizam o oxigênio no seu metabolismo mas também não são afectados pela sua presença.

**Aterro**

É um local onde se depositam resíduos, sobre o solo ou enterrados.

**ATV**

Do alemão, Abwassertechnische Vereinigung.

**Autotrófico**

Também se pode denominar auto-nutritivo, ou seja, organismo que se nutre a si mesmo. São organismos capazes de fabricar matéria orgânica partindo de substâncias inorgânicas.

**Azoto**

É um nutriente essencial na alimentação das plantas e animais. Estes últimos obtêm-no em compostos, em particular os amino-ácidos. Apesar de cerca de 80% da atmosfera ser constituída por azoto gasoso, muito poucos organismos conseguem assimilá-lo nesta forma. As plantas superiores normalmente obtêm-no do solo através de microrganismos que o convertem em amónia ou nitratos, que depois poderão absorver.

**Bactérias**

Grupo de microrganismos unicelulares. São os menores dos organismos vivos. Algumas são indispensáveis à manutenção da vida, outras são responsáveis por doenças humanas muito perigosas, tais como o antrax, o tétano e a tuberculose. As bactérias encontram-se por todo o lado: nos solos, água e ar.

## **Balanço**

Diferença entre a quantidade de determinado elemento que entra num sistema e a que sai, num determinado intervalo de tempo.

## ***Benchmark***

É uma variável mensurável que é usada como linha de base ou referência na avaliação do desempenho de uma organização. Os *benchmarks* podem derivar de uma experiência interna, de outras organizações ou de exigências legais. São usados muitas vezes como instrumentos de mudança no desempenho ao longo do tempo.

## **Biodegradável**

Tem a capacidade de se decompor rapidamente através da acção de microrganismos sob condições naturais (aeróbias e/ou anaeróbias). A maioria dos materiais orgânicos, tais como restos de comida e papel, são biodegradáveis.

## **Biomassa**

Trata-se da fracção biodegradável dos produtos, resíduos agrícolas (incluindo substâncias animais e vegetais), silvicultura e indústrias relacionadas, bem como a fracção biodegradável dos resíduos municipais e industriais.

## **Carência bioquímica de oxigénio - *CBO***

É a quantidade de oxigénio usada na oxidação bioquímica num dado volume de água a uma dada temperatura e durante um período de tempo determinado. A *CBO* é um índice do grau de poluição orgânica na água.

## **Carência química de oxigénio - *CQO***

É a quantidade de oxigénio usada na oxidação biológica e não biológica dos materiais existentes na água. É uma medida da qualidade da água.

**Concentração**

Quantidade de material ou substância contidos numa certa quantidade de um dado meio ou sistema.

**Desenho**

Adoptou-se esta designação para substituir o termo comumente encontrado *design*, tornando-o mais abrangente. Define o projecto, as unidades de tratamento incluídas, as dimensões e parâmetros de operação de uma ETAR.

**Desnitrificação**

Decomposição de nitratos através de bactérias, resultando na libertação de azoto livre. Este processo tem lugar sob condições anaeróbias.

**Digestão de lamas**

Fase final de redução bioquímica no tratamento de esgotos na qual a matéria orgânica é decomposta e estabilizada por bactérias e outros microrganismos.

**Efluentes municipais**

Descarga de uma ETAR que recebe águas residuais domésticas, comerciais e industriais. São incluídos os esgotos e correntes de *overflow* causadas por tempo chuvoso.

**Estação de tratamento de águas residuais (ETAR)**

É uma estação onde, através de processos físicos, químicos e biológicos, a matéria orgânica, bactérias, vírus e sólidos são removidos de águas residuais domésticas, comerciais e industriais, antes de serem descarregadas em rios, lagos ou no mar. Tratam as águas residuais, lamas, águas pluviais ou de arrefecimento de modo a cumprirem as leis ambientais estipuladas ou outras normas de qualidade para permitir o seu reaproveitamento ou reciclagem.

**Heterotrófico**

É um organismo que obtém o seu alimento a partir de outros organismos e cuja fonte de carbono são compostos orgânicos.

**Lamas**

Massa semi-fluída de um sedimento resultante do tratamento de água, águas residuais ou outros resíduos.

**Nitrato**

Forma inorgânica de azoto. É a fase mais oxidada no ciclo do azoto. É um nutriente importante para as plantas. Na água, a maior fonte de nitratos são as fossas assépticas, restos de comida e fertilizantes.

**Nitrificação**

É um processo químico conduzido por bactérias no qual o azoto, principalmente na forma de amónia, se oxida primeiro em nitritos e depois em nitratos.

**Nível de pico**

Nível de um evento muito acima da média ou que ocorre durante curtos períodos de tempo em resposta a uma alteração súbita.

**Nutriente**

Elemento químico envolvido na construção de um tecido vivo e que é necessário a todos os seres vivos. Os mais importantes em termos de abundância são o carbono, hidrogénio e oxigénio, com outros essenciais incluindo o azoto, potássio, cálcio, enxofre e fósforo.

**Matéria em suspensão**

Nome colectivo que se dá aos sólidos finos ou partículas de líquido adicionados à atmosfera por processos à superfície da terra. A matéria em suspensão inclui pó, fumos, fuligem, pólen e partículas de solo.

**Matéria orgânica**

Resíduos carbonáceos provenientes de fontes humanas e animais. Resíduos de plantas e animais que se decompõem e se tornam parte do solo.

**Meia-vida (biológica)**

Tempo necessário a um organismo vivo para eliminar, por processos naturais, metade da quantidade de uma substância que tenha entrado no seu sistema.

**Modelação**

Técnica de investigação que usa a representação matemática ou física de um sistema ou teoria que tem em conta algumas das suas propriedades conhecidas. Os modelos são usados muitas vezes para testar o efeito de alterações das componentes do sistema no desempenho global do mesmo.

**Oxigénio dissolvido**

Quantidade de oxigénio gasoso efectivamente presente na água em termos de presença por volume ou a sua proporção percentual em relação à água saturada.

**Poluição da água**

Presença na água de materiais prejudiciais ou inconvenientes obtidos em esgotos, resíduos industriais e águas pluviais, em concentrações suficientes que tornem a água imprópria para qualquer utilização.

**População equivalente - p.e.**

Uma população equivalente (1 p.e.) significa a carga orgânica biodegradável que tem uma carência bioquímica de oxigênio de cinco dias de 60 gramas de oxigênio por dia.

**Processo biológico**

Processo que diz respeito a organismos vivos.

**Qualidade da água**

Propriedades físicas, químicas, biológicas e organolépticas da água.

**Resíduo orgânico**

Resíduo que contém compostos de carbono.

**Sedimentação**

Deposição de materiais de vários tamanhos, minerais ou orgânicos, de modo a separá-los do seu local de origem, por ação da água, vento, gravidade ou gelo.

**Sólidos dissolvidos**

Material orgânico e inorgânico desintegrado presente na água. A sua presença excessiva torna a água imprópria para consumo ou para a utilização em processos industriais.

**Sólidos suspensos**

Partículas sólidas suspensas em água. Podem ser removidos por filtração ou sedimentação.

**Tratamento biológico de águas residuais**

Processo no qual são utilizados microrganismos aeróbios e/ou anaeróbios e resulta num efluente decantado e em lamas que contêm a massa microbiana juntamente com os poluentes. Os processos de tratamento biológico são muitas vezes usados em combinação com

outros processos unitários. É o tratamento secundário que aparece mais frequentemente numa ETAR.

### **Tratamento preliminar/primário**

Promove a remoção de sólidos de grandes dimensões, gordura e outros materiais que possam vir no esgoto, de modo a proteger as unidades de tratamento seguintes e também de sólidos menores que possam estar em suspensão ou a flutuar. Trata-se do primeiro passo no tratamento de águas residuais. É usado um processo físico e/ou químico que pode envolver a sedimentação de sólidos suspensos ou outros processos que permitam reduzir a *CQO* e sólidos suspensos da água residual que dá entrada na ETAR.

### **Tratamento químico**

São métodos de tratamento que são usados para levar a cabo a neutralização completa de resíduos perigosos em gases não tóxicos ou, com mais frequência, modificar as propriedades dos resíduos, por exemplo através da redução da solubilidade da água ou neutralização da acidez ou alcalinidade.

Fontes: [34, 35, 36, 37, 38, 39]

# Apêndice C

## Exemplos de funções custo na literatura

Tabela C.1: Funções custo de investimento desenvolvidas para ETARs municipais na Flânderes [27]

processo unitário	item	componentes	função custo	variável
tratamento primário	C	parafusos grelhas	$2334Q^{0.637}$	caudal de influente $Q$
	EM		$2123Q^{0.540}$ $3090Q^{0.349}$	
discos biológicos	C	tanque arejador	$10304V^{0.477}$	volume, $V$
	EM	sistema de arejamento	$8590CO^{0.433}$	capacidade de oxigênio, $CO$
sedimentador	C	raspador	$2630A^{0.678}$	área
	EM		$6338A^{0.325}$	$A$
reciclagem de lamas	EM	parafusos	$5038Q^{0.304}$	$Q$
espessador	C	tanque de equalização	$5559V^{0.473}$	$V$
	EM	bombas	$10093A^{0.149}$	$A$
unidade de efluente	EM	medidor de Venturi	$3350Q^{0.363}$	$Q$
construção			$6592Q^{0.498}$	$Q$
infraestruturas			$3873Q^{0.772}$	$Q$
electricidade			$16482Q^{0.383}$	$Q$
instrumentação			$2438Q^{0.351}$	$Q$

C - construção civil

EM - equipamento electromecânico

Tabela C.2: Exemplos de funções de custos de operação fixos [27]

custo	função custo	símbolos	variável
operação e manutenção	$L = U_c PE$	$L =$ trabalho $U_c =$ unidade de custo	população equivalente $PE$
clarificador	$P = \theta A^b$	$P =$ potência $\theta, b,$ constantes	área $A$
misturadores	$P = P_s V$	$P$ $P_s =$ potência específica	volume $V$
equipamento pequeno	$C = U_c PE$	$C =$ custo $U_c$	$PE$
análises	$C = U_c PE$	$C$ $U_c$	$PE$

Tabela C.3: Exemplos de funções de custos de operação variáveis [27]

custo	função custo	símbolos	variável
potência das bombas	$P = \frac{Qwh}{\eta}$	$P =$ potência $w =$ peso específico do líquido $h =$ cabeça dinâmica $\eta =$ eficiência da bomba	caudal $Q$
potência de arejamento	$q_{ar} = \left( \frac{K_L a_f C_s V}{A \alpha \rho O_2 y O_2} \right)^{\frac{1}{B+1}}$ $P = \frac{\gamma}{\gamma-1} \frac{P_1}{\eta} q_{ar} \left[ \left( \frac{P_2}{P_1} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} - 1 \right]$	ver [27]	transferência de oxigênio, $K_L a$ oxigênio dissolvido, $C$
tratamento de lamas	$U_c SST$	$U_c =$ unidade de custo	lamas em excesso $SST$
consumo de químicos	$U_c C_n$	$U_c =$ unidade de custo	consumo $C_n$
taxas de efluente	$L = U_c (k_{org} N_{org} + k_{nut} N_{nut})$	ver [27]	$CQO, CBO,$ $N, P, SST$

# Bibliografia

- [1] Economic indicators. *Chemical Engineering*, 1973.
- [2] P. N. C. M. Afonso. *Modelação Matemática de Reactores Biológicos No Tratamento Terciário de Efluentes*. PhD thesis, Universidade do Porto, 2001.
- [3] M. M. T. Araújo. *Economic Planning in Portuguese Industrial Wastewater*. PhD thesis, University of Birmingham, 1986.
- [4] C. Audet e J. E. Dennis Jr. A pattern search filter method for nonlinear programming without derivatives. *SIAM Journal on Optimization*, 14(4):980–1010, 2004.
- [5] C. Audet e J. E. Dennis Jr. Mesh adaptative direct search algorithms for constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 17(1):188–217, 2006.
- [6] F. Vanden Berghen e H. Bersini. CONDOR, a new parallel, constrained extension of Powell’s UOBYQA algorithm: Experimental results and comparissions with the DFO algorithm. *Journal of Computation and Applied Mathematics, Elsevier*, 181(1):157–175, 2005.
- [7] D.P. Bertsekas. *Constrained optimization and Lagrange multiplier methods*. *Athena Scientific*, 1996.
- [8] G. E. P. Box. Evolutionary operation: A method for increasing industrial productivity. *Applied Statistics*, 6:81–101, 1957.

- [9] A. R. Conn, N. I. M. Gould, e P. L. Toint. A globally convergent augmented Lagrangian algorithm for optimization with general constraints and simple bounds. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 28(2):545–572, 1991.
- [10] J.B. Copp, editor. *The Cost Simulation Benchmark - Description and Simulator Manual*. Office for Official Publications of the European Communities, 2002.
- [11] J. E. Dennis e V. Torczon. Direct search methods on parallel machines. *SIAM Journal on Optimization*, 1:448–474, 1991.
- [12] G. A. Ekama, J. L. Barnard, F. W. Günthert, P. Krebs, J. A. McCrquodale, D. S. Parker, e E. J. Wahlberg. Secondary settling tanks: Theory, modelling, design and operation. Technical Report 6, IAWQ - International Association on Water Quality, 1997.
- [13] I. A. C. P. Espírito Santo, E. M. G. P. Fernandes, M. M. Araújo, e E. C. Ferreira. Optimização de um processo biológico de tratamento de águas residuais. In *8ª Conferência Nacional de Ambiente*, 11 pp CD-ROM, Lisboa, 2004.
- [14] I. A. C. P. Espírito Santo, E. M. G. P. Fernandes, M. M. Araújo, e E. C. Ferreira. Optimization of wastewater treatment processes. In *XXVIII Congreso de Estadística e Investigación Operativa*, 20 pp CD-ROM, Cádiz, 2004. ISBN 84-689-0438-4.
- [15] I. A. C. P. Espírito Santo, E. M. G. P. Fernandes, M. M. Araújo, e E. C. Ferreira. Biological process optimal design in a wastewater treatment plant. In J. Herkowitz, S. Mazorche, e A. Canelas, editors, *Proceedings of the 6th World Congress of Structural and Multidisciplinary Optimization*, 8 pp CD-ROM, Brasil, 2005. ISBN:85-285-0070-5.
- [16] I. A. C. P. Espírito Santo, E. M. G. P. Fernandes, M. M. Araújo, e E. C. Ferreira. How wastewater processes can be optimized using LOQO. In A. Seeger, editor, *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems - Recent Advances in Optimization*, Vol. 563, páginas 435–455. Springer-Verlag, 2006.

- [17] I. A. C. P. Espírito Santo, E. M. G. P. Fernandes, M. M. Araújo, e E. C. Ferreira. NEOS server usage in wastewater treatment cost minimization. In O. Gervasi, M. Gavrilova, V. Kumar, e et al, editors, *Lecture Notes in Computer Science - Computational Science and its Applications, Vol. 3483*, páginas 632–641. Springer-Verlag, 2005.
- [18] I.A.C.P. Espírito Santo, E.M.G.P. Fernandes, M.M. Araújo, e E.C. Ferreira. On the secondary settler models robustness by simulation. *WSEAS Transactions on Information Science and Applications, ISSN: 1790-0832*, 3:2323–2330, 2006.
- [19] I.A.C.P. Espírito Santo, E.M.G.P. Fernandes, M.M. Araújo, e E.C. Ferreira. Optimization and simulation of secondary settler models. *Proceedings of the 6th. WSEAS International Conference on Simulation, Modelling and Optimization, A. Madureira (Ed.), ISSN: 1790-5117, ISBN: 960-8457-53-X*, páginas 240–245, 2006.
- [20] I.A.C.P. Espírito Santo, E.M.G.P. Fernandes, M.M. Araújo, e E.C. Ferreira. Contribution of a simple sludge treatment in a WWTP optimization procedure. *Proceedings of the 5th WSEAS International Conference on System Science and Simulation in Engineering (ICOSSE'06), ISSN: 1790-5117, ISBN: 960-8457-57-2*, páginas 54–59, 2006.
- [21] I.A.C.P. Espírito Santo, E.M.G.P. Fernandes, M.M. Araújo, e E.C. Ferreira. Wasted sludge treatment contributions in the WWTP total cost. *WSEAS Transactions on Information Science and Applications, ISSN 1790-0832*, 4(4):655–662, 2007.
- [22] R. Fletcher, N. I. M. Gould, S. Leyffer, Ph. L. Toint, e A. Wächter. Global convergence of a trust-region SQP-filter algorithm for general nonlinear programming. *SIAM Journal on Optimization*, 13:635–659, 2002.
- [23] R. Fletcher e S. Leyfer. Nonlinear programming without a penalty function. *Mathematical Programming*, 91:239–269, 2002.

- [24] C. A. Floudas e P. M. Pardalos. A collection of test problems for constrained global optimization algorithms. *Lecture Notes in Computer Science, Springer-Verlag*, 455, 1987.
- [25] R. Fourer, D. M. Gay, e B. Kernighan. A modeling language for mathematical programming. *Management Science*, 36(5):519–554, 1990. <http://www.ampl.com>.
- [26] P. E. Gill, W. Murray, e M. A. Saunders. SNOPT: An SQP algorithm for large scale constrained optimization. *SIAM Journal on Optimization*, 12:979–1006, 2002.
- [27] S. Gillot, B. De Clercq, D. Defour, F. Simoens, K. Gernaey, e P. A. Vanrolleghem. Optimization of wastewater treatment plant design and operation using simulation and cost analysis. *Proceedings 72nd Annual WEF Conference and Exposition, New Orleans, USA*, 1999.
- [28] W. Gujer, M. Henze, T. Mino, e M. Van Loosdrecht. Activated sludge model no 1. *Water Science and Technology*, 39(1):183–193, 1999.
- [29] M. Henze, W. Gujer, T. Mino, T. Matsuo, M. C. Wentzel, G. V. R. Marais, e M. C. M. Van Loosdrecht. Activated sludge model no. 2d, ASM2d. *Water Science and Technology*, 39(1):165–182, 1999.
- [30] M. Henze, C. P. L. Grady Jr, W. Gujer, G. V. R. Marais, e T. Matsuo. Activated sludge model no. 1. Technical Report 1, IAWPRC Task Group on Mathematical Modelling for design and operation of biological wastewater treatment, 1986.
- [31] D. M. Himmelblau. *Applied Nonlinear Programming*. McGraw-Hill, 1972.
- [32] W. Hock e K. Schittkowski. Test examples for nonlinear programming codes. *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems, Springer-Verlag*, 187, 1981.
- [33] R. Hooke e T. A. Jeeves. Direct search solution of numerical and statistical problems. *Journal on Associated Computation*, 8:212–229, 1961.

- [34] <http://filaman.ifm geomar.de/Glossary/>.
- [35] <http://glossary.eea.eu.int/EEAGlossary>.
- [36] <http://pt.wikipedia.org/wiki/>.
- [37] <http://www.hannainst.com/products>.
- [38] [http://www.oceanario.pt/site/ol\\_glossario\\_00.asp](http://www.oceanario.pt/site/ol_glossario_00.asp).
- [39] <http://www.redeambiente.org.br/>.
- [40] W. Huyer e A. Neumaier. A new exact penalty function. *SIAM Journal on Optimization*, 13(4):1141–1158, 2003.
- [41] Hydromantis, Inc. *GPS-X User's Guide*, 2001.
- [42] Hydromantis, Inc., Canada. <http://www.hydromantis.com/software02.html>, *GPS-X V4.1*, 2002.
- [43] F. C. Jelen e J. H. Black. *Cost and Optimization Engineering*. McGraw-Hill Book Company, 1983.
- [44] J.C. Lagarias, J.A. Reeds, M.H. Wright, e P.E. Wright. Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions. *SIAM Journal on Optimization*, 9(1):112–147, 1998.
- [45] R. M. Lewis e V. Torczon. A globally convergent augmented Lagrangian pattern search algorithm for optimization with general constraints and simple bounds. *SIAM Journal on Optimization*, 12(4):1075–1089, 2002.
- [46] R.M. Lewis e V. Torczon. Pattern search algorithms for bound constrained minimization. *SIAM Journal on Optimization*, 9(4):1082–1099, 1999.
- [47] J. R. McNamara. *The Optimal Design of Water Quality Management Systems: An Application of Multistage Geometric Programming*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Institute, 1971.

- [48] Z. Michalewicz. *Genetic Algorithms + Data Structures = Evolution Programs*. Springer-Verlag, New York, 1992.
- [49] J. A. Nelder e R. Mead. A simplex method for function minimization. *Computer Journal*, 7:308–313, 1965.
- [50] R. Otterpohl, T. Rolfs, e J. Londong. Optimizing operation of wastewater treatment plants by offline and online computer simulation. *Water Science and Technology*, 30(2):165–174, 1994.
- [51] H. H. Rosenbrock. An automatic method for finding the greatest or least value of a function. *Computer Journal*, 3:175–184, 1960.
- [52] K. Schittkowski. *More Test Examples for Nonlinear Programming Codes*. Springer-Verlag, 1987.
- [53] A. Seco, J. Serralta, e J. Ferrer. Biological nutrient removal model no.1 (BNMR1). *Water Science and Technology*, 50(6):69–78, 2004.
- [54] D. F. Shanno e R. J. Vanderbei. Interior-point methods for nonconvex nonlinear programming: Orderings and higher-order methods. *Mathematical Programming B*, 87:303–316, 2000.
- [55] Y. Smeers e D. Tyteca. A geometric programming model for the optimal design of wastewater treatment plants. *Operations Research*, 32(2):314–342, 1982.
- [56] I. Y. Smets, J. V. Haeghebaert, R. Carrette, e J. F. Van Impe. Linearization of the activated sludge model ASM1 for fast and reliable predictions. *Water Research*, 37(8):1831–1851, 2003.
- [57] I. Takács, G. G. Patry, e D. Nolasco. A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research*, 25(10):1263–1271, 1991.
- [58] G. Tchobanoglous e F. L. Burton. *Wastewater Engineering*. Metcalf & Eddy, Inc., 1991.

- [59] V. Torczon. On the convergence of pattern search algorithms. *SIAM Journal on Optimization*, 7(1):1–25, February 1997.
- [60] D. Tyteca. Cost functions for wastewater conveyance systems. *Water Pollution Control Federation*, 48(9):2120–2130, 1976.
- [61] D. Tyteca. Méthode et optimisation économique d’une station d’épuration d’eaux résiduaires urbaines. *Etudes & Expansion*, páginas 101–112, 1979.
- [62] D. Tyteca. Nonlinear programming model of wastewater treatment plant. *Journal of the Environmental Engineering Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, 107(EE4):747–766, 1981.
- [63] D. Tyteca. Sensivity analysis of the optimal design of a municipal wastewater treatment plant. In D. Dubois, editor, *Progress in Ecological Engineering and Management by Mathematical Modelling, Proceedings of the Second International Conference on the State-of-the-Art in Ecological Modelling*, páginas 743–766, Liège, 1981. Éditions Cebedoc.
- [64] D. Tyteca. *Mathematical Models in Biological Waste Water Treatment*. Elsevier Science Publishers B. V., Amesterdam, 1985.
- [65] D. Tyteca e E. J. Nyns. Design and operational charts for complete mixing activated sludge systems. *Water Research*, 13:929–948, 1979.
- [66] D. Tyteca e Y. Smeers. Nonlinear programming design of wastewater treatment plant. *Journal of the Environmental Engineering Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, 107(EE4):767–779, 1981.
- [67] D. Tyteca, Y. Smeers, e E. J. Nyns. Mathematical modeling and economic optimization of wastewater treatment plants. *CRC Critical Reviews in Environmental Control*, 8(1):1–89, 1977.

- [68] R. J. Vanderbei e D. F. Shanno. An interior-point algorithm for nonconvex nonlinear programming. *Computational Optimization and Applications*, 13:231–252, 1999.
- [69] P. A. Vanrolleghem, U. Jeppsson, J. Carstensen, B. Carlsson, e G. Olsson. Integration of wastewater treatment plant design and operation - a systematic approach using cost functions. *Water Science and Technology*, 36(3-4):159–171, 1996.
- [70] P. A. Vanrolleghem, W. Schilling, W. Rauch, P. Krebs, e H. Aalderink. Setting up measuring campaigns for integrated wastewater modelling. *Water Science and Technology*, 39(4):257–268, 1999.
- [71] A. Wächter e L. T. Biegler. Line search filter methods for nonlinear programming: Local convergence. *SIAM Journal on Optimization*, 16:32–48, 2005.
- [72] A. Wächter e L. T. Biegler. Line search filter methods for nonlinear programming: Motivation and global convergence. *SIAM Journal on Optimization*, 16:1–31, 2005.
- [73] A. Wächter e L. T. Biegler. On the implementation of an interior-point filter line search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 106:25–57, 2006.
- [74] J. A. White, M. H. Agee, e K. E. Case. *Principles of Engineering Economic Analysis*. John Wiley & Sons, 1989.
- [75] H. Zhao, S. H. Isaacs, H. Soerberg, e M. Kümmel. An analysis of nitrogen removal and control strategies in an alternating activated sludge process. *Water Research*, 29(2):535–544, 1995.