

AVALIAÇÃO DO DESEMPENHO DE MODELOS PARA PREDIÇÃO DE COAGULANTE E CONTROLE DE PH NO TRATAMENTO DE ÁGUA

Larissa Lopes Gomes*
Karla Patrícia Oliveira Esquerre**
Robson da Silva Magalhães***

RESUMO: O processo de coagulação é uma importante etapa no tratamento de água. As dosagens de coagulantes e dos controladores de pH a serem aplicadas no tratamento da água são previstas através do teste de jarro. Esse teste é realizado em laboratório e a média dos valores obtidos é o que será aplicado na planta de tratamento de água. Alguns fatores, como mudanças nos índices pluviométricos, podem alterar a qualidade da água, necessitando novos ajustes das dosagens de coagulante e controladores de pH. Para que a modificação das dosagens de hidróxido de sódio (NaOH) e sulfato de alumínio (Al_2SO_4) seja realizada em tempo real, esse estudo propõe a aplicação de modelos baseados em redes neurais e regressão linear. O modelo de rede neural com otimizador apresentou o melhor resultado de predição.

PALAVRAS-CHAVE: Redes Neurais; Regressão Linear Múltipla; Teste de Jarro.

THE PERFORMANCE OF MODELS FOR THE PREDICTION OF COAGULANT AND pH CONTROL IN WATER TREATMENT

ABSTRACT: Coagulation is an important step in water treatment. Doses of coagulants and pH controllers in the treatment of water are predicted by the jar test. The test is performed in a laboratory and mean rates obtained will be applied to the plant. Factors, such as changes in rainfall indexes, may change water quality and new adjustments are required for coagulant doses and pH controllers. Current assay proposes the application of models based on neural networks and linear regression so that modifications in doses of sodium hydroxide (NaOH) and aluminum sulfate (Al_2SO_4) could be performed in real time. The best prediction result was obtained by the neural network model with optimizer.

KEYWORDS: Neural Network; Multiple Linear Regression; Jar Test.

INTRODUÇÃO

O processo de coagulação e floculação é essencial no tratamento da água e é utilizado para a remoção de impurezas, de microorganismos, de sólidos em suspensão e de outras partículas indesejadas. Segundo Di Bernardo e Sabogal Paz (2008), a coagulação é um processo que consiste na desestabilização das partículas e combinação de mecanismos de varredura e adsorção e/ou neutralização. Esse processo é feito

utilizando o princípio das forças intermoleculares. O sulfato de alumínio (coagulante) é adicionado à água fazendo com que as partículas em suspensão fiquem mais próximas. A base adicionada (hidróxido de alumínio) que precipita na coagulação, promove a aglomeração das partículas por choques induzidos que formam aglomerados cada vez maiores que fazem uma varredura das partículas em suspensão e precipitam. A quantidade de coagulante e de base que são adicionadas no tratamento da água dependerá da

* Graduanda em Engenharia Química Departamento de Engenharia Química (DEQ) da Universidade Federal da Bahia – UFBA, Salvador (BA), Brasil; Bolsista de Iniciação Científica pelo CNPQ.

** Docente do departamento de Engenharia Química e dos Programas de Pós-Graduação em Engenharia Industrial (PEI) e Mestrado em Meio Ambiente, Águas e Saneamento (MAASA) da Universidade Federal da Bahia – UFBA, Salvador (BA), Brasil; E-mail: karlaesquerre@ufba.br.

*** Docente do departamento de Engenharia Química e do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial (PEI) da Universidade Federal da Bahia – UFBA, Salvador (BA), Brasil.

qualidade dessa água. Dosagens além das necessárias podem comprometer a qualidade da água e oferecer riscos à saúde devido ao alumínio residual. Por isso variáveis como turbidez, pH, sólidos em suspensão, alcalinidade, coloração entre outras devem ser analisadas continuamente visando a definição das dosagens necessárias a um tratamento que resulte em uma água com qualidade.

Para prever a quantidade de coagulante e de hidróxido de alumínio que deverá ser usada no tratamento de água, é realizado o teste de jarro (*jarrest*). Na realização desse teste, coleta-se uma amostra da água que será tratada. Essa amostra é dividida em seis amostras menores. Então, cada uma dessas amostras menores deve ser testada com uma quantidade específica de sulfato de alumínio e de base. Como resultado do teste, será obtida uma faixa (dosagens) que se acredita que contenha o valor ótimo que deverá ser adicionado no tratamento da água que foi amostrada (ROSSIN, 2008). Esse método possui algumas limitações, já que existe a possibilidade de mudanças na qualidade da água enquanto o teste está sendo realizado em laboratório. As dosagens indevidas de coagulante e de base podem comprometer a qualidade da água, tornando-a imprópria para uso. Se for adicionada uma quantidade de sulfato de alumínio maior do que a necessária pode haver uma grande concentração de alumínio residual, o que é indesejado, visto que a presença dessa substância em águas de consumo está associada ao mal de Alzheimer, apresentando riscos à saúde humana (DOREA, 2009; FLATEN, 2001). A incorreta faixa de pH também pode comprometer o tratamento de água, fazendo com que a coagulação não seja eficaz ou que seja necessária uma dosagem muito grande de coagulante.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 REGRESSÃO LINEAR

A regressão linear é um dos métodos mais simples de modelagem. No entanto, para que seja garantido seu resultado, um dos pré-requisitos é a

normalidade dos dados utilizados. Se esses dados não forem normais, a regressão pode ser utilizada, mas não é possível realizar inferências sobre os resultados encontrados. A regressão linear é um modelo criado a partir do método dos mínimos quadrados que traça uma reta que melhor se ajuste aos dados a partir da equação 1 (OLIVEIRA–ESQUERRE, 2003):

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n + e \quad (1)$$

O valor a ser predito é o Y, as variáveis predictoras são os Xs, os β s ($s = 1, \dots, n$) são os coeficientes de regressão, e o e é o erro associado ao modelo.

Existem coeficientes que determinam a adequação do modelo ao processo estudado. O R^2 , coeficiente de correlação múltipla, mede a fração da variabilidade nas observações de Y explicada pela regressão dos valores de X, por isso, esse valor varia entre 0 e 1 (MONTGOMERY; PECK; VINING, 2012). No entanto esse parâmetro sempre aumenta com a adição de uma variável, mesmo que esta não esteja correlacionada com a saída e não melhore o modelo. Por isso, o coeficiente mais utilizado para medir o quanto o valor predito se assemelha ao medido, sem a interferência do número de variáveis, é o R^2 ajustado (OLIVEIRA–ESQUERRE et al., 2004).

2.2 ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS

A análise de componentes principais é uma técnica multivariada utilizada para reduzir a dimensão de um conjunto de dados. São feitas projeções através de combinações lineares com as variáveis para maximizar a variância em diferentes direções, e cada componente criada é ortogonal à outra, ou seja, elas são sempre independentes entre si.

A técnica de componentes principais é adequada ao estudo porque ela não exige a normalidade dos dados. A primeira componente aponta para a direção de maior variabilidade dos dados, a segunda aponta na direção da segunda

maior variabilidade e assim por diante. Dessa forma podem ser selecionadas algumas componentes que representem uma variância significativa dos dados para representar o sistema, reduzindo o número de variáveis e garantindo a independência delas. O uso de outras técnicas de ortogonalização de dados também pode ser verificado em combinação com a técnica de redes neurais, como a técnica de análise fatorial (CHU; LU; ZHANG, 2013).

Para cada amostra dos dados são gerados “scores” para cada uma das componentes. Esses “scores” representam o valor da componente em cada observação. Com esses valores, é possível criar modelos com as componentes principais.

2.3 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

As redes neurais artificiais, também conhecidas como RNAs, são chamadas dessa forma por modelar o comportamento dos neurônios. A partir do entendimento do cérebro humano, da inteligência e da capacidade de raciocínio, foram desenvolvidos sistemas computacionais e algoritmos que são capazes de reconhecer padrões em um banco de dados e fazer generalizações. A aplicação de RNAs se estende da matemática e estatística até problemas de medicina e sociologia. Na engenharia, as redes neurais são muito utilizadas para modelagem de sistemas quando modelos fenomenológicos não estão disponíveis (VALENÇA; LUDEMIR, 2007).

Segundo Braga, Carvalho e Ludermir (2007), o funcionamento de um neurônio biológico pode ser visualizado da seguinte forma: as suas múltiplas entradas recebem ativações excitatórias ou inibitórias dos neurônios anteriores, e caso essa soma de excitações ou inibições ultrapasse um determinado limite, o neurônio emite um impulso nervoso.

Desta forma, McCulloch e Pitts em 1943 propuseram um sistema matemático análogo, onde as entradas em um neurônio são as variáveis observadas multiplicadas por pesos. Se o resultado do somatório dessa multiplicação (Equação 3) for maior que o limiar (função de ativação, Equação 2), esse neurônio é

excitado e emite um impulso nervoso, caso contrário, o neurônio não é ativado.

$$Y = \begin{cases} 1, & \text{se } z \geq \theta \\ 0, & \text{se } z < \theta \end{cases} \quad (\text{função de ativação}) \quad (2)$$

$$z = b + \sum_{i=1}^n X_i W_i \quad (3)$$

X_i são as variáveis de entrada de cada neurônio; W_i ($i = 1, \dots, n$) são os pesos atribuídos a cada uma dessas variáveis, e b é o bias, que é o limiar do neurônio.

Esse tipo de neurônio apresentado é chamado de neurônio binário, pois suas saídas são sempre zero ou um (Equação 2). Esse tipo de RNA é muito utilizado para reconhecimento de padrões e divisão de categorias.

2.4. REDES NEURAIS PERCEPTRON MULTICAMADAS

Conforme Braga, Carvalho e Ludermir (2007) uma RNA é composta por um conjunto de nodos com capacidade de processamento local e independente dos demais e uma topologia que define a forma como estes nodos estão conectados, além de uma regra de aprendizagem. Essa regra se baseia na atualização dos pesos a partir do erro calculado (valor obtido pela rede menos o valor do banco de dados experimentais). Ou seja, temos que o novo peso é o peso antigo somado a taxa de aprendizagem multiplicada pelo erro e pelo valor de X , como pode ser visto nas equações 4 e 5.

$$W(i+1) = W(i) + \eta \cdot \text{erro} \cdot X(i) \quad (4)$$

$$\text{erro} = d_i - Y_i \quad (5)$$

A forma que os nodos estão ligados nesse problema é do formato “*feedforward*” onde a rede é alimentada nas entradas e segue para frente até a saída. De acordo com Braga, Carvalho e Ludermir (2007) essa é uma das formas mais utilizadas para modelagem

do tratamento de água. O algoritmo utilizado como regra de aprendizagem é o *Backpropagation*, que usa a derivada da função para recalcular os pesos. Uma das funções de ativação mais utilizadas é a sigmoideal (Equação 6), pois ela é facilmente derivada (Equação 7) e regularmente usada nesse tipo de problema.

$$Y_i = \frac{1}{1 + \exp(-z_i)} \quad (6)$$

$$Y'_i = \frac{dY_i}{dz_i} \quad (7)$$

$$Y'_i = Y_i |1 - Y_i|$$

2.5 VARIÁVEIS

Variáveis são medidas na entrada e na saída do processo de tratamento de água para verificar a sua qualidade. Cada uma delas tem um significado. As variáveis medidas neste estudo foram: pH, coloração, sólidos em suspensão, turbidez e alcalinidade.

O pH é o parâmetro que indica o grau de acidez ou basicidade do meio através da concentração ou atividade de íons H^+ . Em sistemas de abastecimento, valores reduzidos de pH promovem problemas como corrosão, enquanto que valores elevados de pH tendem a formar incrustações (DI BERNARDO; SABOGAL PAZ, 2008; METCALF; EDDY, 2013).

A característica de alcalinidade conferida às águas é função da presença de minerais que se encontram naturalmente dispersos na água, e que são capazes de reagir com ácidos, podendo neutralizar certa quantidade dos reagentes utilizados no tratamento da água (RICHTER; AZEVEDO NETTO, 1991). A alcalinidade em águas brutas deve-se à presença de carbonatos, bicarbonatos e hidróxidos. A alcalinidade influencia na coagulação química, pois os agentes coagulantes mais utilizados no Brasil (sulfato de alumínio e cloreto férrico) liberam cátions para a solução, de forma que uma água com baixa alcalinidade, para atingir uma coagulação satisfatória,

poderá exigir adição de alcalinizante para o ajuste do pH (DI BERNARDO; SABOGAL PAZ, 2008).

Os sólidos em suspensão (SS, medidos em $mg L^{-1}$) medem a quantidade de partículas insolúveis e que possuem uma sedimentação lenta, geralmente, com tamanho superior a 1,0 μm . Essas partículas podem diminuir a claridade da água e afetar sua composição, absorvendo substâncias químicas (KIPERSTOK et al., 2002).

A cor (uH) e a turbidez (uT) estão diretamente ligadas à qualidade da água. A turbidez representa o nível de interferência na passagem de luz através da água em função da existência de partículas como areia, matéria orgânica, argila entre outras que absorvem essa luz. A coloração também está ligada às partículas presentes no efluente, principalmente aos metais, compostos orgânicos de origem mineral, vegetal e animal e resíduos (MENEZES, 2011).

3 METODOLOGIA

3.1 ANÁLISE DESCRITIVA DOS DADOS

O resumo do tratamento inicial estatístico realizado encontra-se na Tabela 1. A partir dos dados do teste jarro foram obtidas as médias e os desvios padrões para as variáveis, assim como o coeficiente de variação, o máximo, o mínimo e a amplitude.

A partir dos dados da Tabela 1 podem ser feitas análises estatísticas das variáveis. Como, por exemplo, a demarcação do primeiro e do terceiro quartil é um método para indicar possíveis *outliers*. O coeficiente de assimetria reflete o grau de simetria em relação à média e o de curtose o grau de achatamento da distribuição dos dados quando comparada com a distribuição normal (HINES et al., 2003). Uma variável normal possui o coeficiente de curtose igual a zero e possui uma distribuição simétrica.

Tabela 1. Estatística descritiva dos parâmetros de entrada e saída

Variável	Unid.	Média	DP	Cv	Mín	Máx	Amplitude	Assimetria	Curtose
pH_e	–	6,54	0,37	0,06	5,7	8,5	2,8	1,02	3,29
cor_e	uH	132,4	85,9	0,7	11	696	685	2,17	8,29
ss_e	mg/L	9,3	7,9	0,8	2	84	82	4,89	36,38
turb_e	uT	11,5	7,3	0,6	0,5	38	37,5	1,26	1,85
alca_e	mg/L	13,3	2,9	0,2	8	24	16	0,89	0,57
NaOH_e	mg/L	9,3	6,3	0,7	0	35	35	0,9	0,47
Sulf_e	mg/L	33,9	10,9	0,3	5	75	70	0,56	-0,65
pH_s	–	6,05	0,25	0,04	4,5	7,2	2,7	-0,67	3,78
cor_s	uH	7,9	6,1	0,8	1	102	101	6,31	73,69
ss_s	mg/L	1,5	1,1	0,7	1	12	11	3,6	17,68
turb_s	uT	0,77	0,62	0,8	0,06	9,1	9,04	5,5	56,56
alum_s	mg/L	0,091	0,002	0,02	0	1	1	6,05	50,75

Legenda: DP = desvio padrão; Cv = coeficiente de variação; Q1 = 1º quartil; Q3 = 2º quartil; pH_e = pH da água bruta; cor_e = cor da água bruta; ss_e = sólidos em suspensão da água bruta; turb_e = turbidez da água bruta; alca_e = alcalinidade da água bruta; NaOH_e = hidróxido de sódio aplicado; Sulf_e = sulfato de alumínio aplicado; pH_s = pH da água tratada; cor_s = cor da água tratada; ss_s = sólidos em suspensão da água tratada; turb_s = turbidez da água tratada; alum_s = alumínio residual da água tratada.

Fonte: Adaptado de Meneses (2011).

Observa-se que nenhuma das variáveis é normal e a maioria delas apresenta uma cauda mais pesada do que a normal exceto Sulf_e, turb_e, alca_e e NaOH_e. O teste de normalidade foi realizado através do teste estatístico de Anderson–Darling onde a hipótese nula (de que os dados seguem uma distribuição normal) é rejeitada (ou seja, p-valor < 0,10) para um valor crítico de 0,631. Para um nível de significância de 10%, todas as variáveis excederam o valor crítico. Portanto as variáveis não podem ser tratadas como se possuíssem distribuição normal, nem por aproximação. Como as variáveis são complexas deve-se priorizar o uso de métodos que não necessitem da distribuição normal dos dados.

3.2 ELIMINAÇÃO DE OUTLIERS

Análise de componentes principais foi utilizada para avaliar a correlação das variáveis, o comportamento da massa de dados e a detecção de outliers.

A primeira e a segunda componentes mostradas na Figura 1, geradas a partir da análise de componentes principais, juntas explicam 54,1%

dos dados. O conjunto de dados destacados são as suspeitas de dados espúrios. O conjunto mais acima no canto direito da Figura 1 apresenta os valores de cor_e e ss_e 1,5 e 1,75 vezes respectivamente, mais elevados que o segundo maior valor medido para essas variáveis. Já no conjunto inferior na Figura 1, os aspectos de variação da qualidade da água bruta em todo o sistema não foram observados.

Devido aos aspectos citados, os conjuntos destacados na Figura 1 foram retirados da amostra onde restaram 1924 amostras das 1941 inicialmente coletadas.

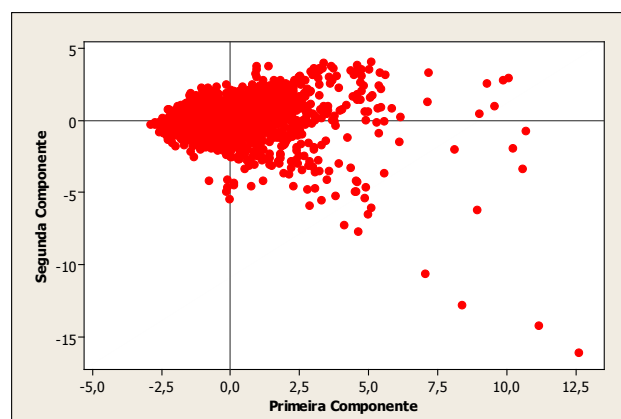


Figura 1. Scores da primeira e segunda componentes

3.3 SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

A seleção das variáveis adequadas (correlacionadas) é muito importante para que se tenha um resultado satisfatório com um menor custo operacional. A escolha de parâmetros que não estejam relacionados com as variáveis preditas implica em um tempo e em custos computacionais desnecessários. Para evitar esse problema foi aplicado o coeficiente de correlação Spearman que mede a relação entre as saídas desejadas (dose de coagulante e de base) com as variáveis medidas (qualidade da água). Este coeficiente não é sensível às assimetrias na distribuição, não exigindo que os dados possuam distribuições normais nem que as relações entre as variáveis sejam lineares (MONTGOMERY; RUNGER; HUBELE, 2011).

3.4 ESCALONAMENTO DOS DADOS

Os dados também foram pré-processados. Como cada variável apresenta uma unidade de medida diferente foi necessário padronizá-las (por normalização) para que o impacto obtido pelas variáveis de entrada nas respostas desejadas não seja mascarado pela ordem de grandeza de cada uma das variáveis de entrada. Por exemplo, a *cor_e* tem uma média de 132,4 enquanto o *alum_s* tem uma média de 0,091. Para saber qual deles tem a maior correlação com as saídas é necessário realizar uma padronização (normalização). Os dados foram padronizados entre 0,1 e 0,9 através de um escalonamento linear. E também foram padronizados a partir de seu desvio padrão e média, a fim de manter a variabilidade dos dados.

3.5 CONSTRUÇÃO DOS MODELOS

O modelo de regressão linear foi obtido a partir das variáveis selecionadas e padronizadas. Elas foram aplicadas ao modelo de regressão a partir do uso do software *Minitab*, para prever as saídas. Foram gerados dois modelos, um para a predição de hidróxido de sódio e outro para o sulfato de alumínio.

O modelo de componentes principais foi gerado utilizando todas as variáveis significativas para cada modelo. As quatro primeiras componentes foram selecionadas, pois estas representavam mais de 70% da variabilidade dos dados. Os *scores* dessas componentes foram salvos para que pudessem ser gerados modelos de regressão linear e redes neurais a partir desses dados.

Para a modelagem de redes neurais o conjunto de dados originais normalizados foi dividido em dois grupos, um de treinamento e outro de validação. O primeiro grupo continha oitenta e cinco por cento dos dados e o segundo grupo, o restante. Foram feitas duas redes MISO (“*Multiple Input Single Output*”) porque o coagulante depende da base e vice-versa.

A topologia da rede, ou seja, o número de neurônios na camada oculta foi definido através do gráfico do número de neurônios pelo erro associado à predição de cada rede, num processo que também é conhecido como tentativa e erro (OLIVEIRA-ESQUERRE, 2003). O ponto de mínimo erro foi de 12 neurônios para a rede preditora do NaOH e 10 neurônios para a rede do sulfato de alumínio e essas quantidades foram usadas na camada oculta para treinar a rede. As redes escolhidas possuem apenas uma camada oculta (interpolador universal).

O algoritmo *backpropagation* possui algumas limitações. Ele encontra sempre um erro mínimo local, mas não quer dizer que esse erro seja o menor erro da função, ou seja, a depender do “chute” inicial dos pesos e da taxa de aprendizagem, o *backpropagation* será conduzido ao mínimo local mais próximo, que não necessariamente será o mínimo local global. Outra limitação também envolve a lentidão com que os dados são treinados.

Dessa forma, para gerar um modelo mais robusto, em função dessas limitações do algoritmo *backpropagation*, foi utilizado um otimizador (MAGALHÃES et al., 2010). Esse otimizador implica em um maior custo computacional no treinamento da rede, mas ele garante que o mínimo encontrado esteja convergindo para o mínimo global, pois, ao tratar da função objetiva, o otimizador procura o mínimo global

variando (de forma independente) os parâmetros do modelo (RNA), garantindo assim, um melhor resultado na predição dos dados de saída.

4 RESULTADOS

Através dos modelos gerados, utilizando-se os dados de validação, foi possível testar a capacidade de previsão de cada modelo. Então, foi utilizado o mesmo método (R^2) aplicado na regressão, avaliando-se o quanto as respostas obtidas pelas redes neurais se aproximam dos valores medidos.

Foram testados vários modelos de regressão com o uso das variáveis originais e com as componentes principais geradas a partir desses dados. Modelos de redes neurais foram testados com diferentes formas de padronização dos dados, a primeira foi com base no desvio padrão, e a segunda foi a redução dos dados para uma escala entre 0,1 e 0,9. São utilizados diferentes tipos de padronização para verificar se existe alteração significativa no desempenho dos modelos, a fim de certificar que não há perda de informação (variabilidade) na normalização entre 0,1 e 0,9. Os resultados de todos os modelos gerados podem ser observados de forma sucinta na Tabela 2 (hidróxido de sódio) e na Tabela 3 (sulfato de alumínio):

Tabela 2. Resultados dos modelos de predição do NaOH

Modelos	R^2	R^2 ajustado	R^2 com otimizador
Regressão linear das variáveis originais	72,10%	71,90%	NR
Regressão dos PCs	46,40%	46,20%	NR
Redes Neurais com padronização pelo desvio padrão	80,60%	80,60%	82,70%
Redes Neurais com padronização entre 0,1 e 0,9	81,90%	81,80%	83,90%
Redes Neurais com os PCS	60,50%	60,30%	63,10%

NR: não realizado

Tabela 3. Resultados dos modelos de predição do sulfato de alumínio

Modelos	R^2	R^2 ajustado	R^2 com otimizador
Regressão linear das variáveis originais	70,30%	70,20%	NR
Regressão dos PCs	33,10%	33,00%	NR
Redes Neurais com padronização pelo desvio padrão	78,80%	78,80%	79,80%
Redes Neurais com padronização entre 0,1 e 0,9	81,30%	81,20%	83,30%
Redes Neurais com os PCs	42,90%	42,70%	45,60%

NR: não realizado

Podemos avaliar com base nos resultados encontrados que todos os modelos de redes neurais apresentaram um desempenho superior do que os modelos de regressão linear. Isso comprova o comportamento não linear das variáveis, se tratando de um conjunto mais complexo. Além disso, como os dados utilizados não são normais, não é possível inferir com precisão utilizando a regressão. O modelo de redes neurais, mais complexo e robusto, independe das distribuições das variáveis e se mostra eficaz na previsão do comportamento das respostas. O uso do otimizador, que está nos modelos da última coluna da Tabela 2 e na última coluna da Tabela 3, melhora o modelo, no entanto implica em um custo computacional mais alto na fase de treinamento, e não é necessário, pois o modelo gerado apenas pela rede já possui um desempenho bom.

O modelo de redes neurais com a padronização dos dados a partir do desvio padrão, tanto para o sulfato de alumínio quanto para o hidróxido de sódio obteve um desempenho um pouco inferior em comparação aos modelos obtidos através da normalização entre 0,1 e 0,9. Isso demonstra que não há uma perda de variabilidade na padronização dos dados entre 0,1 e 0,9. Neste tipo de normalização a derivada da função sigmoideal é mais evidente, por isso o modelo possui um R^2 um pouco superior em relação aos outros modelos.

O uso do otimizador diminui o erro da rede neural, melhorando o desempenho do modelo.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

A partir de diversos modelos gerados para prever a quantidade de sulfato de alumínio e hidróxido de sódio que devem ser utilizados no processo de coagulação–floculação no tratamento de água o melhor desempenho encontrado foi para o modelo de redes neurais a partir dos dados escalonados entre 0,1 e 0,9. Dessa forma a modificação na qualidade da água pode ser acompanhada e a quantidade de dosagem de coagulante e controlador de pH podem ser obtidos em tempo real.

Foram construídos diversos modelos a fim de escolher aquele que melhor representam o sistema estudado. Os modelos de regressão são vantajosos por serem mais simples, entretanto seus desempenhos não foram satisfatórios.

Os modelos de redes neurais são usados principalmente quando não se conhece as distribuições das variáveis e os sistemas modelados são muito complexos. O desempenho na maioria das vezes é superior ao da regressão linear.

O uso do otimizador pode melhorar o desempenho dos modelos na previsão de variáveis, mas também implica em um maior custo computacional no treinamento dos dados. É importante avaliar se o modelo de redes sem o otimizador já satisfaz o problema abordado, dessa forma o uso do otimizador pode não ser necessário.

6 AGRADECIMENTOS

Os autores gostariam de agradecer ao eng. Fábio Menezes pelas discussões ocorridas durante o início da pesquisa e ao Programa de Iniciação Tecnológica da Universidade Federal da Bahia (UFBA) pelo fornecimento da bolsa de pesquisa.

REFERÊNCIAS

BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. C.; LUDERMIR, T. B. **Redes neurais artificiais: teoria e aplicações**. 2. ed. São Carlos: LTC, 2007.

CHU, H. B.; LU, W. X.; ZHANG, L. Application of artificial neural network in environmental water quality assessment. **Journal of Agricultural Science and Technology**, v. 15, n. 2, 343–356, 2013.

DI BERNARDO, L.; SABOGAL PAZ, L. P. **Seleção de tecnologias de tratamento de água**. São Carlos: LDIBE, 2008. v.1.

DOREA, C. C. Coagulant–based emergency water treatment. **Desalination**, n. 248, p. 83–90, 2009.

FLATEN, T. P. Aluminium as a risk factor in Alzheimer’s disease, with emphasis on drinking water. **Brain Research Bulletin**, v. 55, n. 2, p. 187–196, 2001.

HINES, W. et al. **Probability and Statistics in Engineering**. 4th ed. USA: John Wiley & Sons, 2003.

KIPERSTOK, A. et al. **Prevenção da poluição**. Brasília: SENAI/DN, 2002.

MAGALHÃES, R. S. et al. A model for three–dimensional simulation of acoustic emissions from rotating machine vibration. **The Journal of the Acoustical Society of America**, v. 127, n. 6, p. 3569–3576, 2010.

MENEZES, F. C. Uso de redes neurais artificiais na predição da dosagem de sulfato de alumínio e do hidróxido de sódio no processo de coagulação. Tese (Mestrado) – Universidade Federal da Bahia, Escola Politécnica, Salvador, 2011.

MONTGOMERY, D. C.; PECK, E. A.; VINING, G. G. **Introduction to linear regression analysis**. 5th ed. New Jersey: John Wiley & Sons, (2012).

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C.; HUBELE, N. F. **Estatística aplicada à Engenharia**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

METCALF & EDDY. **Wastewater engineering: treatment and resource recovery**. 5th ed. [s.l.]: McGraw–Hill Science, 2013.

OLIVEIRA–ESQUERRE, K. P. **Aplicação de técnicas estatísticas multivariadas e de redes neurais**

na modelagem de um sistema de tratamento de efluentes industriais. 2003. Tese (Doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, 2003.

OLIVEIRA–ESQUERRE, K. P. et al. Application of steady–state and dynamic modeling for the prediction of the BOD of an aerated lagoon at a pulp and paper mill Part I. Linear approaches. **Chemical Engineering Journal**, v. 104, p. 73–81, 2004.

RICHTER, C. A.; AZEVEDO NETTO, J. M. de. **Tratamento de água.** São Paulo: Edgard Blucher, 1991. 332 p.

ROSSIN, A. C. Técnica de abastecimento e tratamento de água teste de jarros – (Jar Test). **Portal Tratamento de Água**, 2008. Disponível em: <http://www.tratamentodeagua.com.br/R10/Biblioteca_Detalhe.aspx?codigo=388>. Acesso em: 2014.

VALENÇA, M. J. S.; LUDEMIR, T. B. Explicando a relação entre variáveis de uma rede neural – iluminando a “caixa preta”. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, 17., 2007, São Paulo. **Anais...** Porto Alegre: ABRH, 2007.

Recebido em: 30 de abril de 2013
Aceito em: 06 de novembro de 2014