



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA HIDRÁULICA E AMBIENTAL**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL**  
**MESTRADO ACADÊMICO EM ENGENHARIA CIVIL**

**LEVY FELIPE SANTIAGO SALDANHA**

**PREVISÃO DO COMPORTAMENTO DOS PROCESSOS DE TRANSFERÊNCIA DE  
OXIGÊNIO INDUZIDOS POR PLUMAS DE BOLHAS EM TANQUES DE ÁGUA  
USANDO APRENDIZADO DE MÁQUINA E CINÉTICA DE ORDEM SUPERIOR**

**FORTALEZA**

**2025**

LEVY FELIPE SANTIAGO SALDANHA

PREVISÃO DO COMPORTAMENTO DOS PROCESSOS DE TRANSFERÊNCIA DE  
OXIGÊNIO INDUZIDOS POR PLUMAS DE BOLHAS EM TANQUES DE ÁGUA USANDO  
APRENDIZADO DE MÁQUINA E CINÉTICA DE ORDEM SUPERIOR

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Engenharia Civil do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia Civil. Área de Concentração: Recursos Hídricos

Orientador: Prof. Dr. Iran Eduardo Lima Neto

Coorientador: Prof. Dr. Paulo Roberto Lacerda Tavares

FORTALEZA

2025



Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Sistema de Bibliotecas  
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

---

- S154p Saldanha, Levy Felipe Santiago.  
Previsão do comportamento dos processos de transferência de oxigênio induzidos por plumas de bolhas em tanques de água usando aprendizado de máquina e cinética de ordem superior / Levy Felipe Santiago Saldanha. – 2025.  
300 f. : il. color.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil: Recursos Hídricos, Fortaleza, 2025.  
Orientação: Prof. Dr. Iran Eduardo Lima Neto.  
Coorientação: Prof. Dr. Paulo Roberto Lacerda Tavares.
1. Aeração Artificial. 2. Oxigênio Dissolvido. 3. Coeficiente de Reaeração. 4. Injeção de Ar. 5. Aprendizado de Máquina. I. Título.
- 

CDD 627

LEVY FELIPE SANTIAGO SALDANHA

PREVISÃO DO COMPORTAMENTO DOS PROCESSOS DE TRANSFERÊNCIA DE  
OXIGÊNIO INDUZIDOS POR PLUMAS DE BOLHAS EM TANQUES DE ÁGUA USANDO  
APRENDIZADO DE MÁQUINA E CINÉTICA DE ORDEM SUPERIOR

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Engenharia Civil do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil do Centro de Tecnologia da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Engenharia Civil. Área de Concentração: Recursos Hídricos

Aprovada em: 11/04/2025

BANCA EXAMINADORA

---

Prof. Dr. Iran Eduardo Lima Neto (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Paulo Roberto Lacerda  
Tavares (Coorientador)  
Universidade Federal do Cariri (UFCA)

---

Prof. Dr. José Carlos Alves Barroso Júnior  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

---

Prof. Dr. Germário Marcos Araújo  
Instituto Federal do Ceará (IFCE)

A Deus, que sempre guiou meus passos; ao meu pai e minha avó, que descansam em paz e cujas memórias permanecerão sempre vivas; à minha mãe, minha irmã e minha futura noiva, as mulheres da minha vida, e à toda minha família. Meu amor e gratidão por vós é inexorável.

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente a Deus, autor do universo e rei dos reis, pela vida, família e todas as circunstâncias que tem me proporcionado e me permitido viver até hoje, quer sejam boas, quer sejam ruins, e também pela coroa de vida eterna que me promete se permanecer como um filho firme e perseverar fiel à sua palavra e aos seus valores até o fim.

Ao meu pai, Francisco Adalberto Saldanha, e minha avó, Raimunda Gomes da Silva, que já não estão mais entre nós, e descansam no Senhor, por todo o modelo e exemplo de força, perseverança, fé e disciplina que permanecerá vivo dentro do meu coração até o meu fim, e por todo o incentivo, enquanto em vida, à progredir em minha qualificação profissional, além de todo o amor incondicional passado, mesmo em seus últimos dias.

Às mulheres da minha vida: minha mãe, Asenate, pelas incontáveis compreensões e acalentos, e por sempre tentar me compreender e me proporcionar o melhor que se está ao alcance, e em tudo cuidar de mim; minha irmã, Sarah, pelo companheirismo, parceria, incentivo e proteção em momentos de vulnerabilidade, e minha futura noiva, Sâmua, também por todo o companheirismo, apoio, compreensão e doces palavras de incentivo, que nunca faltam em nossa convivência.

Ao meu avô, José Felipe Santiago, por desde pequeno me transmitir preciosos conhecimentos que irão estar comigo por toda a vida, e à minha avó, Elisa Cristina, por toda paciência, cuidado e amor transmitidos intensamente desde a infância.

Aos meus tios e tias, bem como alguns primos mais velhos, que de perto estiveram presentes durante o meu crescimento e nunca mediram esforços em também me amar incondicionalmente, me proporcionando ótimos momentos e sempre me ajudando: tias Imelda, Abigail, Nalva, Diná e Marinete; tios Valdo, Samoel e Antônio (que já também foi recolhido pelo Senhor Deus); primos Alex, Zildyson e Klarty.

A todo o restante desta vasta família, incluindo primos de convivência desde a infância como Franklin, Jennyfer, Évillyn, Sadraque, Zildyálefe, Samya, além de tios e tias mais distantes, mas que sempre transmitiram amor e incentivo ao crescimento.

Ao professores Iran, meu orientador, e Paulo Roberto, meu coorientador, por toda paciência, por sempre acreditarem no meu potencial, e por toda a orientação para que fosse possível a execução dessa pesquisa e dissertação de seus resultados, além do enorme incentivo e indicação de oportunidades únicas.

Aos professores José Carlos e Germário, examinadores interno e externo, respec-

tivamente, que gentilmente cederam seu tempo aceitando o convite de composição da banca avaliadora deste trabalho, contribuindo com pontos diversos para melhoria do mesmo.

Ao amigo e irmão na fé Marcelo Leandro, que por todo este tempo agiu em muitos momentos praticamente como um pai, não medindo esforços para me ajudar em tudo que pôde, além de sua forma de agir e cuidar da família, que para mim é exemplo e inspiração.

Aos amigos, companheiros de curso e universidade Ricardo, Tereza, Aloísio e Judivan, e todos os companheiros de laboratório (LRH) pela parceria, incentivo, experiências trocadas, momentos de compreensão e por todos os aprendizados, conhecimentos e momentos de vida proporcionados.

À Universidade Federal do Ceará (UFC), ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Hidráulica e Ambiental (POSDEHA) e ao Laboratório de Recursos Hídricos (LRH), pelo gentil acolhimento e a condição de estar nas vivências acima gratificadas. Ao CNPq, pelo financiamento através de bolsa de mestrado, do qual também foi imprescindível para manutenção da continuidade de todo o curso de mestrado e da pesquisa do qual resulta esta dissertação.

“Porquanto um anjo descia em certo tempo ao tanque, e agitava a água, e o primeiro que ali descia, depois do movimento da água, sarava de qualquer enfermidade que tivesse.”

(João 5:4)

## RESUMO

O processo de transferência de oxigênio à água tem diversas aplicações em engenharia e é referido na literatura como uma reação com cinética de ordem 1 derivada da lei de *Fick*. A complexidade deste fenômeno, contudo, introduz desafios à sua avaliação, especialmente em sistemas de aeração artificial, onde a injeção de ar geralmente resulta em escoamentos por plumas de bolhas que transferem gás por diferentes mecanismos. A partir disso, diversos estudos têm analisado o problema propondo sofisticações à esta abordagem. Esse estudo explora uma abordagem por aprendizado de máquina (ML) para a previsão do comportamento da transferência de oxigênio por injeção de ar em tanques de água através da predição do coeficiente de reaeração  $k_2$  considerando cinéticas de ordem superior, abordagem essa pouco explorada dentro deste contexto. Foram conduzidas 99 repetições de um experimento ao longo de 300 segundos cada, em tanques de laboratório para diferentes condições de entrada: vazões de injeção de ar ( $Q_{air}$ ), temperaturas ( $T$ ), concentrações de oxigênio dissolvido iniciais ( $C_0$ ) e de saturação ( $C_s$ ), diferentes tipos de difusores de ar ( $t_{dif}$ ), volumes ( $Vol_t$ ) e alturas de água nos tanques ( $h_w$ ). Após ajuste dos coeficientes  $k_2$  a partir das séries temporais de concentração de oxigênio dissolvido (OD) e posterior construção do conjunto de dados final, oito modelos de ML foram estudados considerando os coeficientes com ordens de 1 à 4 como variáveis de saída. Os coeficientes ajustados às ordens superiores resultaram nos modelos mais promissores (em contraste à teórica ordem 1), com destaque à ordem 2, que resultou nos melhores modelos, fatos que se justificam devido ao mecanismo complexo composto por quatro principais processos de transferência de gás que ocorrem simultaneamente. Os modelos de árvore obtiveram as melhores métricas, em especial a árvore de regressão (RT) ( $r^2 = 0.668$ , RMSE = 7.00, MAE = 4.81, MAPE = 0.200 e RMSLE = 0.268). A partir disso, uma análise da importância das variáveis foi feita para um melhor entendimento da interação das variáveis na dinâmica do fenômeno, com estimativas através dos modelos de árvore e lineares. Estes concordaram sobre as variáveis menos importantes para a previsão de  $k_2$  no contexto destes experimentos, que foram a vazão de injeção de ar ( $Q_{air}$ ), a velocidade média da pluma na superfície ( $V_{plum}$ ) e a presença ou ausência de pedras porosas, enquanto que, para os modelos mais acurados (modelos de árvores), as consideradas mais importantes foram o volume ( $Vol_t$ ) e a altura da água nos tanques ( $h_w$ ).

**Palavras-chave:** Aeração artificial. Oxigênio dissolvido. Coeficiente de reaeração. Injeção de ar. Aprendizado de máquina.

## ABSTRACT

The process of oxygen transfer to water has several applications in engineering and is referred to in the literature as a reaction with kinetics of order 1 derived from *Fick's* diffusion law. The complexity of this phenomenon, however, introduces challenges to its evaluation, especially in artificial aeration systems, where air injection usually results in flows through bubble plumes that transfer gas by different mechanisms. From this, several studies have analyzed the problem proposing sophistications to this approach. This study explores a machine learning (ML) approach to predict the behavior of oxygen transfer by air injection in water tanks by predicting the reaeration coefficient  $k_2$  considering higher-order kinetics, an approach that has been little explored in this context. A total of 99 replicates of an experiment were conducted over 300 seconds each in laboratory tanks for different inlet conditions: air injection flow rates ( $Q_{air}$ ), temperatures ( $T$ ), initial dissolved oxygen concentrations ( $C_0$ ) and saturation ( $C_s$ ), different types of air diffusers ( $t_{dif}$ ), volumes ( $Vol_t$ ) and water heights in the tanks ( $h_w$ ). After adjusting the coefficients  $k_2$  from the dissolved oxygen (DO) concentration time series and subsequently constructing the final dataset, eight ML models were studied considering coefficients with orders from 1 to 4 as output variables. The coefficients adjusted to higher orders resulted in the most promising models (in contrast to order 1), with emphasis on order 2, which is justified by the complex mechanism composed of four main gas transfer processes that occur simultaneously. For this order, the tree-based models obtained the best metrics, especially the regression tree (RT), with  $r^2 = 0.668$ , RMSE = 7.00, MAE = 4.81, MAPE = 0.200 and RMSLE = 0.268. From this, an analysis of feature importance was made for a better understanding of the interaction of the variables in the dynamics of the phenomenon, with estimates through the tree and linear models. These models agreed on the least important variables for predicting  $k_2$  in the context of these experiments, which were the air injection flow rate ( $Q_{air}$ ), the average plume velocity at the surface ( $V_{plum}$ ) and the presence or absence of porous airstones, while for the more accurate models (tree-based models), the most important variables were the volume ( $Vol_t$ ) and the water height in the tanks ( $h_w$ ).

**Keywords:** Artificial aeration. Dissolved oxygen. Reaeration coefficient. Air injection. Machine learning.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação esquemática do algoritmo Regressão por Árvore de Decisão ( <i>Regression Tree</i> ) (RT) . . . . .	48
Figura 2 – Representação esquemática de uma rede neural Rede Neural Perceptron Multicamadas ( <i>Multilayer Perceptron</i> ) (MLP) rasa . . . . .	51
Figura 3 – Representação esquemática de uma rede neural MLP profunda . . . . .	51
Figura 4 – Representação esquemática da configuração experimental e dos processos de transferência de oxigênio . . . . .	54
Figura 5 – Fotografia dos tanques cúbicos . . . . .	55
Figura 6 – Fotografias da sonda de qualidade da água multiparamétrica . . . . .	55
Figura 7 – Fotografias do anemômetro molinete . . . . .	56
Figura 8 – Fotografias do compressor e dos difusores de ar . . . . .	56
Figura 9 – Fotografias das plumas de bolhas formadas pelos diferentes bocais e difusores de ar . . . . .	57
Figura 10 – Fotografias da superfície da água agitada e com formação da região do efeito de fonte pela chegada da pluma de bolhas . . . . .	57
Figura 11 – Fotografia da configuração experimental real durante a realização dos experimentos . . . . .	58
Figura 12 – Gráficos de nove séries temporais de Oxigênio Dissolvido (OD) com valores iniciais padronizados . . . . .	66
Figura 13 – Gráficos reunindo a distribuição de variações totais das 99 séries temporais de OD . . . . .	67
Figura 14 – Gráficos das dez séries temporais de OD ajustadas nos modelos de cinética de ordens 1 à 10 com as maiores métricas de ajuste . . . . .	68
Figura 15 – Gráficos das dez séries temporais de OD ajustadas nos modelos de cinética de ordens 1 à 10 com as menores métricas de ajuste . . . . .	69
Figura 16 – Gráfico de boxplots representando a distribuição das métricas de ajustes para cada ordem de 1 à 10 . . . . .	70
Figura 17 – Gráficos de dispersão para os modelos utilizados neste estudo e com variável de saída $k_2$ de ordem 2. . . . .	76
Figura 18 – Gráficos da importância das variáveis em cada modelo, de forma individual . . . . .	77
Figura 19 – Gráficos da importância das variáveis com valores agrupados . . . . .	77

Figura 20 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 1 à 6 .	86
Figura 21 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 7 à 12	87
Figura 22 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 13 à 18	88
Figura 23 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 19 à 24	89
Figura 24 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 25 à 30	90
Figura 25 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 31 à 36	91
Figura 26 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 37 à 42	92
Figura 27 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 43 à 48	93
Figura 28 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 49 à 54	94
Figura 29 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 55 à 60	95
Figura 30 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 61 à 66	96
Figura 31 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 67 à 72	97
Figura 32 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 73 à 78	98
Figura 33 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 79 à 84	99
Figura 34 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 85 à 90	100
Figura 35 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 91 à 96	101
Figura 36 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 97 à 99	102
Figura 37 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 1 . . . . .	103
Figura 38 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 1 . . . . .	104
Figura 39 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 2 . . . . .	105
Figura 40 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 2 . . . . .	106
Figura 41 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 3 . . . . .	107
Figura 42 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 3 . . . . .	108
Figura 43 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 4 . . . . .	109

Figura 44 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 4 . . . . .	110
Figura 45 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 5 . . . . .	111
Figura 46 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 5 . . . . .	112
Figura 47 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 6 . . . . .	113
Figura 48 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 6 . . . . .	114
Figura 49 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 7 . . . . .	115
Figura 50 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 7 . . . . .	116
Figura 51 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 8 . . . . .	117
Figura 52 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 8 . . . . .	118
Figura 53 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 9 . . . . .	119
Figura 54 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 9 . . . . .	120
Figura 55 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 10 . . . . .	121
Figura 56 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 10 . . . . .	122
Figura 57 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 11 . . . . .	123
Figura 58 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 11 . . . . .	124
Figura 59 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 12 . . . . .	125

Figura 60 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 12 . . . . .	126
Figura 61 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 13 . . . . .	127
Figura 62 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 13 . . . . .	128
Figura 63 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 14 . . . . .	129
Figura 64 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 14 . . . . .	130
Figura 65 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 15 . . . . .	131
Figura 66 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 15 . . . . .	132
Figura 67 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 16 . . . . .	133
Figura 68 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 16 . . . . .	134
Figura 69 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 17 . . . . .	135
Figura 70 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 17 . . . . .	136
Figura 71 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 18 . . . . .	137
Figura 72 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 18 . . . . .	138
Figura 73 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 19 . . . . .	139
Figura 74 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 19 . . . . .	140
Figura 75 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 20 . . . . .	141

Figura 76 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 20 . . . . .	142
Figura 77 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 21 . . . . .	143
Figura 78 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 21 . . . . .	144
Figura 79 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 22 . . . . .	145
Figura 80 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 22 . . . . .	146
Figura 81 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 23 . . . . .	147
Figura 82 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 23 . . . . .	148
Figura 83 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 24 . . . . .	149
Figura 84 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 24 . . . . .	150
Figura 85 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 25 . . . . .	151
Figura 86 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 25 . . . . .	152
Figura 87 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 26 . . . . .	153
Figura 88 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 26 . . . . .	154
Figura 89 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 27 . . . . .	155
Figura 90 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 27 . . . . .	156
Figura 91 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 28 . . . . .	157

Figura 92 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 28 . . . . .	158
Figura 93 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 29 . . . . .	159
Figura 94 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 29 . . . . .	160
Figura 95 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 30 . . . . .	161
Figura 96 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 30 . . . . .	162
Figura 97 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 31 . . . . .	163
Figura 98 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 31 . . . . .	164
Figura 99 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 32 . . . . .	165
Figura 100 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 32 . . . . .	166
Figura 101 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 33 . . . . .	167
Figura 102 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 33 . . . . .	168
Figura 103 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 34 . . . . .	169
Figura 104 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 34 . . . . .	170
Figura 105 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 35 . . . . .	171
Figura 106 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 35 . . . . .	172
Figura 107 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 36 . . . . .	173

Figura 108–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 36 . . . . .	174
Figura 109–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 37 . . . . .	175
Figura 110–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 37 . . . . .	176
Figura 111–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 38 . . . . .	177
Figura 112–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 38 . . . . .	178
Figura 113–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 39 . . . . .	179
Figura 114–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 39 . . . . .	180
Figura 115–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 40 . . . . .	181
Figura 116–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 40 . . . . .	182
Figura 117–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 41 . . . . .	183
Figura 118–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 41 . . . . .	184
Figura 119–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 42 . . . . .	185
Figura 120–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 42 . . . . .	186
Figura 121–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 43 . . . . .	187
Figura 122–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 43 . . . . .	188
Figura 123–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 44 . . . . .	189

Figura 124–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 44 . . . . .	190
Figura 125–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 45 . . . . .	191
Figura 126–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 45 . . . . .	192
Figura 127–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 46 . . . . .	193
Figura 128–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 46 . . . . .	194
Figura 129–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 47 . . . . .	195
Figura 130–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 47 . . . . .	196
Figura 131–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 48 . . . . .	197
Figura 132–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 48 . . . . .	198
Figura 133–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 49 . . . . .	199
Figura 134–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 49 . . . . .	200
Figura 135–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 50 . . . . .	201
Figura 136–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 50 . . . . .	202
Figura 137–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 51 . . . . .	203
Figura 138–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 51 . . . . .	204
Figura 139–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 52 . . . . .	205



Figura 140–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 52 . . . . .	206
Figura 141–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 53 . . . . .	207
Figura 142–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 53 . . . . .	208
Figura 143–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 54 . . . . .	209
Figura 144–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 54 . . . . .	210
Figura 145–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 55 . . . . .	211
Figura 146–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 55 . . . . .	212
Figura 147–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 56 . . . . .	213
Figura 148–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 56 . . . . .	214
Figura 149–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 57 . . . . .	215
Figura 150–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 57 . . . . .	216
Figura 151–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 58 . . . . .	217
Figura 152–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 58 . . . . .	218
Figura 153–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 59 . . . . .	219
Figura 154–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 59 . . . . .	220
Figura 155–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 60 . . . . .	221

Figura 156–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 60 . . . . .	222
Figura 157–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 61 . . . . .	223
Figura 158–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 61 . . . . .	224
Figura 159–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 62 . . . . .	225
Figura 160–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 62 . . . . .	226
Figura 161–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 63 . . . . .	227
Figura 162–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 63 . . . . .	228
Figura 163–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 64 . . . . .	229
Figura 164–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 64 . . . . .	230
Figura 165–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 65 . . . . .	231
Figura 166–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 65 . . . . .	232
Figura 167–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 66 . . . . .	233
Figura 168–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 66 . . . . .	234
Figura 169–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 67 . . . . .	235
Figura 170–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 67 . . . . .	236
Figura 171–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 68 . . . . .	237

Figura 172–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 68 . . . . .	238
Figura 173–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 69 . . . . .	239
Figura 174–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 69 . . . . .	240
Figura 175–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 70 . . . . .	241
Figura 176–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 70 . . . . .	242
Figura 177–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 71 . . . . .	243
Figura 178–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 71 . . . . .	244
Figura 179–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 72 . . . . .	245
Figura 180–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 72 . . . . .	246
Figura 181–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 73 . . . . .	247
Figura 182–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 73 . . . . .	248
Figura 183–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 74 . . . . .	249
Figura 184–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 74 . . . . .	250
Figura 185–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 75 . . . . .	251
Figura 186–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 75 . . . . .	252
Figura 187–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 76 . . . . .	253

Figura 188–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 76 . . . . .	254
Figura 189–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 77 . . . . .	255
Figura 190–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 77 . . . . .	256
Figura 191–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 78 . . . . .	257
Figura 192–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 78 . . . . .	258
Figura 193–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 79 . . . . .	259
Figura 194–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 79 . . . . .	260
Figura 195–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 80 . . . . .	261
Figura 196–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 80 . . . . .	262
Figura 197–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 81 . . . . .	263
Figura 198–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 81 . . . . .	264
Figura 199–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 82 . . . . .	265
Figura 200–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 82 . . . . .	266
Figura 201–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 83 . . . . .	267
Figura 202–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 83 . . . . .	268
Figura 203–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 84 . . . . .	269

Figura 204–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 84 . . . . .	270
Figura 205–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 85 . . . . .	271
Figura 206–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 85 . . . . .	272
Figura 207–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 86 . . . . .	273
Figura 208–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 86 . . . . .	274
Figura 209–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 87 . . . . .	275
Figura 210–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 87 . . . . .	276
Figura 211–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 88 . . . . .	277
Figura 212–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 88 . . . . .	278
Figura 213–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 89 . . . . .	279
Figura 214–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 89 . . . . .	280
Figura 215–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 90 . . . . .	281
Figura 216–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 90 . . . . .	282
Figura 217–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 91 . . . . .	283
Figura 218–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 91 . . . . .	284
Figura 219–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 92 . . . . .	285

Figura 220–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 92 . . . . .	286
Figura 221–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 93 . . . . .	287
Figura 222–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 93 . . . . .	288
Figura 223–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 94 . . . . .	289
Figura 224–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 94 . . . . .	290
Figura 225–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 95 . . . . .	291
Figura 226–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 95 . . . . .	292
Figura 227–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 96 . . . . .	293
Figura 228–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 96 . . . . .	294
Figura 229–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 97 . . . . .	295
Figura 230–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 97 . . . . .	296
Figura 231–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 98 . . . . .	297
Figura 232–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 98 . . . . .	298
Figura 233–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 99 . . . . .	299
Figura 234–Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 99 . . . . .	300

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Estatísticas e descrição das variáveis de entrada numéricas . . . . .	59
Tabela 2 – Espaços de busca dos principais hiperparâmetros otimizados . . . . .	64
Tabela 3 – Estatísticas e descrição das variáveis de saída . . . . .	70
Tabela 4 – Descrição do conjunto de dados . . . . .	71
Tabela 5 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída $k_2$ de ordem 1 . . . . .	72
Tabela 6 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída $k_2$ de ordem 2 . . . . .	72
Tabela 7 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída $k_2$ de ordem 3 . . . . .	73
Tabela 8 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída $k_2$ de ordem 4 . . . . .	73
Tabela 9 – Comparação entre os modelos com melhores métricas para cada variável de saída . . . . .	74
Tabela 10 – Hiperparâmetros otimizados para os modelos finais considerando $k_2$ de ordem 2	75

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ASCE	<i>American Society of Civil Engineers</i>
ccp	Coeficiente de Poda por Custo-Complexidade ( <i>Cost-Complexity Pruning</i> )
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional ( <i>Computational Fluid Dynamics</i> )
CV	Validação Cruzada ( <i>Cross-Validation</i> )
ELNET	Regressão Linear com Regularização <i>Elastic Net</i>
GBM	Máquinas de Reforço de Gradiente ( <i>Gradient Boosting Machine</i> )
GLM	Regressão Linear Generalizada ( <i>Generalized Linear Model</i> )
GLMgm	GLM considerando distribuição de erros Gama
LASSO	Operador de Seleção e Encolhimento Mínimo Absoluto ( <i>Least Absolute Shrinkage and Selection Operator</i> )
MAE	Erro Médio Absoluto ( <i>Mean Absolute Error</i> )
MAPE	Erro Percentual Médio Absoluto ( <i>Mean Absolute Percentage Error</i> )
ML	Aprendizado de Máquina ( <i>Machine Learning</i> )
MLP	Rede Neural Perceptron Multicamadas ( <i>Multilayer Perceptron</i> )
OD	Oxigênio Dissolvido
OLR	Regressão Linear Ordinária ( <i>Ordinary Linear Regression</i> )
ReLU	Unidade de Retificação Linear ( <i>Rectified Linear Unit</i> )
RF	Floresta Aleatória ( <i>Random Forest</i> )
RMSE	Raiz do Erro Quadrático Médio ( <i>Root Mean Squared Error</i> )
RMSLE	Raiz do Erro Logarítmico Quadrático Médio ( <i>Root Mean Squared Logarithmic Error</i> )
RT	Regressão por Árvore de Decisão ( <i>Regression Tree</i> )
SSR	Soma dos Resíduos Quadráticos ( <i>Sum of Squared Residuals</i> )
SVR	Regressão por Máquinas de Vetores de Suporte ( <i>Support Vector Regression</i> )
XAI	Inteligência Artificial Explicável ( <i>Explainable Artificial Intelligence</i> )



## LISTA DE SÍMBOLOS

[L]	Dimensão básica de comprimento	—
[M]	Dimensão básica de massa	—
[T]	Dimensão básica de tempo	—
[Θ]	Dimensão básica de temperatura	—
[N]	Dimensão básica de quantidade de matéria	—
<b>b</b>	Matriz coluna dos coeficientes dos modelos lineares	—
$\frac{b}{B}$	Razão entre a escala de comprimento para o jato e pluma na superfície livre e o raio do tanque ou meia largura	Adimensional
$c_1$	Valor constante resposta do modelo RT quando o valor da variável estiver contido no semi-espço $R_1$	—
$c_2$	Valor constante resposta do modelo RT quando o valor da variável estiver contido no semi-espço $R_2$	—
$d$	Grau da transformação polinomial correspondente à sua função <i>kernel</i>	—
$f, f(\cdot)$	Função representando a aprendizagem dos modelos preditivos	—
$\frac{fL}{U}$	Frequência errante adimensional	Adimensional
$h_d$	Profundidade do difusor de bolhas	[L]
$h_w$	Altura de água no tanque	[L]
$i, j$	Índices de contagem dentre o número de observações e variáveis de entrada, respectivamente	—
$k$	Número de <i>folds</i> do processo de validação cruzada	—
$k_2$	Coeficiente de reaeração (ordem de cinética $p$ )	$[L^{-3+3p} \cdot M^{1-p} \cdot T^{-1}]$
$k_{chla}$	Taxa de redução líquida da concentração de clorofila-a	$[T^{-1}]$
$k_{pheo.}$	Taxa de crescimento líquido da concentração de feofitina-a	$[T^{-1}]$
$l_{1r}$	Hiperparâmetro da taxa de regularização $\mathcal{L}_1$ no modelo ELNET	—
$m_{try}$	Hiperparâmetro da quantidade de variáveis a se considerar para se treinar cada árvore de um modelo RF	—

$n, m$	Número de amostras/ observações e variáveis de entrada, respectivamente	—
$p$	Ordem do modelo de cinética de reação	Adimensional
$r^2$	Coeficiente de determinação	—
$t$	Tempo	[T]
$t_{dif}$	Tipo de difusor	—
$t_{dif.,d1}$	Tipo de difusor: pedra porosa 1	—
$t_{dif.,d2}$	Tipo de difusor: pedra porosa 2	—
$t_{dif.,d3}$	Tipo de difusor: orifício livre	—
$x_{i,1}, x_{i,2}$	Primeira e segunda variáveis de entrada ( $i$ -ésimo valor)	—
$x_{i,m}, x_{i,j}$	$m$ -ésima e $j$ -ésima variáveis de entrada ( $i$ -ésimo valor)	—
$\mathbf{x}'$	Matriz linha de novas observações das variáveis de entrada	—
$\mathbf{x}_i$	Matriz linha da $i$ -ésima amostra das variáveis de entrada	—
$y_i$	Variável de saída ( $i$ -ésimo valor)	—
$\hat{y}_i$	Aproximação da variável de saída ( $i$ -ésimo valor)	—
$\bar{y}$	Média do conjunto da variável de saída	—
$\mathbf{y}$	Matriz coluna do conjunto da variável de saída	—
$y_{obs.}$	Valores observados da variável de saída	—
$y_{pred.}$	Valores preditos pelos modelos, da variável de saída	—
$z$	Distância de um ponto ao difusor, no eixo das alturas	[L]
$A_T$	Área de seção transversal do tanque	[L <sup>2</sup> ]
$C$	Concentração de oxigênio dissolvido	[L <sup>-3</sup> · M]
$C^*$	Concentração de oxigênio em equilíbrio na fase líquida das bolhas	[L <sup>-3</sup> · M]
$C_0$	Concentração inicial de oxigênio dissolvido	[L <sup>-3</sup> · M]
$C_N$	Concentração de nitrogênio dissolvido	[L <sup>-3</sup> · M]
$C_N^*$	Concentração de nitrogênio em equilíbrio na fase líquida das bolhas	[L <sup>-3</sup> · M]

$C_s$	Concentração de saturação do oxigênio dissolvido	$[L^{-3} \cdot M]$
$C_{Ns}$	Concentração de saturação de nitrogênio dissolvido	$[L^{-3} \cdot M]$
$C_{svr}$	Hiperparâmetro de custo do modelo SVR	—
$D$	Déficit de oxigênio dissolvido	$[L^{-3} \cdot M]$
$D_N$	Coefficiente de difusão do nitrogênio na água	$[L^2 \cdot T^{-1}]$
$D_O$	Coefficiente de difusão do oxigênio na água	$[L^2 \cdot T^{-1}]$
$Fr$	Número de <i>Froude</i>	Adimensional
$H_N$	Constante da lei de Henry para o nitrogênio	$[L^2 \cdot M \cdot T^{-2} \cdot N^{-1}]$
$H_O$	Constante da lei de Henry para o oxigênio	$[L^2 \cdot M \cdot T^{-2} \cdot N^{-1}]$
$K(\cdot)$	Função <i>kernel</i>	—
$K_2$	Fator de conversão de unidade	—
$K_L a$	Coefficiente de transferência volumétrica de massa de oxigênio	$[T^{-1}]$
$K_{LB} a_B$	Coefficiente de transferência volumétrica de massa de oxigênio pelas bolhas	$[T^{-1}]$
$K_{LS} a_S$	Coefficiente de transferência volumétrica de massa de oxigênio pela superfície	$[T^{-1}]$
$K_{pol}(\cdot)$	Função <i>kernel</i> polinomial	—
$K_{rbf}(\cdot)$	Função <i>kernel</i> de base radial	—
$L_\varepsilon(\cdot)$	Função de insensibilidade $\varepsilon$ do modelo SVR	—
$\frac{L_{CV}}{L_{CH}}$	Razão entre a distância vertical da superfície da água ao centro das células de circulação e a distância horizontal da linha central do bocal ao centro das células de circulação	Adimensional
$Q_{air}$	Vazão volumétrica de injeção de ar	$[L^3 \cdot T^{-1}]$
$R^2$	Quadrado do coeficiente de correlação de <i>Pearson</i>	—
$R_1$	Primeiro semi-espço resultante da divisão pelo algoritmo do modelo RT	—
$R_2$	Segundo semi-espço resultante da divisão pelo algoritmo do modelo RT	—
$T$	Temperatura da água do tanque	$[^\circ]$

$V_{plum}$	Velocidade do escoamento superficial devido à pluma de bolhas	$[L \cdot T^{-1}]$
$Vol_t$	Volume de água no tanque	$[L^3]$
$\mathbf{X}$	Matriz das variáveis de entrada	—
$Y_O$	Composição de oxigênio na fase gasosa	Adimensional
$\mathcal{L}_1$	Regularização <i>Ridge</i>	—
$\mathcal{L}_2$	Regularização LASSO	—
$\log \mathcal{U} [ , ]$	Distribuição probabilística log-uniforme contínua no intervalo $[ , ]$	—
$\mathcal{U} [ , ]$	Distribuição probabilística uniforme contínua no intervalo $[ , ]$	—
$\mathcal{U}_d [ , ]$	Distribuição probabilística uniforme discreta no intervalo $[ , ]$	—
$\alpha$	Hiperparâmetro da intensidade da regularização ELNET	—
$\beta_0$	Coefficiente intercepto dos modelos lineares	—
$\beta_j$	Coefficiente dos modelos lineares correspondente ao $j$ -ésimo preditor	—
$\beta_{hid.}$	Parâmetro definido por Lima Neto (2012a) para descrever a hidrodinâmica das plumas de bolhas	Adimensional
$\gamma_0$	Coefficiente intercepto do modelo SVR	—
$\gamma_j$	Coefficiente do modelo SVR	—
$\varepsilon_i$	Erro aleatório irreduzível de um modelo	—
$\varepsilon_{ins.}$	Hiperparâmetro margem de insensibilidade do modelo SVR	—
$\varepsilon_{kin.}$	Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta	$[L^2 \cdot T^{-3}]$
$\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$	Valores da divisão ótima dos semi-espaços nos modelos RT	—
$\lambda$	Hiperparâmetro da intensidade de regularização ( <i>Ridge</i> e LASSO)	—
$\xi_i$	Parâmetro da intensidade da regularização no modelo SVR	—
$\sigma_{pol}$	Hiperparâmetro de escalonamento da função <i>kernel</i> polinomial	—
$\sigma_{rbf}$	Hiperparâmetro de escalonamento da função <i>kernel</i> de base radial	—
$\phi_1, \phi_2, \dots$	Valores dos parâmetros de uma rede neural	—
$\Phi$	Conjunto de parâmetros de uma rede neural (pesos, <i>bias</i> )	—

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>32</b>
<b>1.1</b>	<b>Problemática e justificativa . . . . .</b>	<b>32</b>
<b>1.2</b>	<b>Objetivos . . . . .</b>	<b>34</b>
<b>1.2.1</b>	<b><i>Objetivo geral . . . . .</i></b>	<b>34</b>
<b>1.2.2</b>	<b><i>Objetivos específicos . . . . .</i></b>	<b>34</b>
<b>1.3</b>	<b>Estrutura da dissertação . . . . .</b>	<b>35</b>
<b>2</b>	<b>REFERENCIAL TEÓRICO . . . . .</b>	<b>37</b>
<b>2.1</b>	<b>Plumas de bolhas e aeração artificial . . . . .</b>	<b>37</b>
<b>2.1.1</b>	<b><i>Aplicações práticas . . . . .</i></b>	<b>37</b>
<b>2.1.2</b>	<b><i>Estudos experimentais . . . . .</i></b>	<b>38</b>
<b>2.2</b>	<b>Mecanismos de transferência de oxigênio em processos de aeração . . .</b>	<b>41</b>
<b>2.2.1</b>	<b><i>Transferência durante a ascensão da pluma e na superfície . . . . .</i></b>	<b>41</b>
<b>2.2.2</b>	<b><i>Outros mecanismos de transferência . . . . .</i></b>	<b>43</b>
<b>2.3</b>	<b>Aprendizado de máquina . . . . .</b>	<b>45</b>
<b>2.3.1</b>	<b><i>Regressão linear generalizada . . . . .</i></b>	<b>45</b>
<b>2.3.2</b>	<b><i>Modelos baseados em árvores . . . . .</i></b>	<b>47</b>
<b>2.3.2.1</b>	<b><i>Modelos ensemble de árvores . . . . .</i></b>	<b>49</b>
<b>2.3.3</b>	<b><i>Redes neurais artificiais . . . . .</i></b>	<b>50</b>
<b>2.3.4</b>	<b><i>Máquinas de vetores de suporte . . . . .</i></b>	<b>50</b>
<b>3</b>	<b>MATERIAIS E MÉTODOS . . . . .</b>	<b>53</b>
<b>3.1</b>	<b>Configuração experimental . . . . .</b>	<b>53</b>
<b>3.2</b>	<b>Conjunto de dados . . . . .</b>	<b>59</b>
<b>3.2.1</b>	<b><i>Variáveis de entrada . . . . .</i></b>	<b>59</b>
<b>3.2.2</b>	<b><i>Variáveis de saída . . . . .</i></b>	<b>59</b>
<b>3.2.3</b>	<b><i>Pré-processamento . . . . .</i></b>	<b>60</b>
<b>3.3</b>	<b>Modelos de aprendizado de máquina . . . . .</b>	<b>61</b>
<b>3.4</b>	<b>Configuração e seleção dos modelos . . . . .</b>	<b>62</b>
<b>3.4.1</b>	<b><i>Otimização de hiperparâmetros . . . . .</i></b>	<b>63</b>
<b>3.4.2</b>	<b><i>Métricas de performance . . . . .</i></b>	<b>64</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÕES . . . . .</b>	<b>66</b>

<b>4.1</b>	<b>Resultados dos experimentos . . . . .</b>	<b>66</b>
<b>4.2</b>	<b>Ajustes aos modelos de reação . . . . .</b>	<b>67</b>
<b>4.3</b>	<b>Performance dos modelos de aprendizado de máquina . . . . .</b>	<b>71</b>
<b>4.4</b>	<b>Importância das variáveis . . . . .</b>	<b>75</b>
<b>5</b>	<b>CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>79</b>
<b>5.1</b>	<b>Sugestões para trabalhos futuros . . . . .</b>	<b>80</b>
	<b>REFERÊNCIAS . . . . .</b>	<b>81</b>
	<b>APÊNDICES . . . . .</b>	<b>86</b>
	<b>APÊNDICE A – Gráficos de dispersão das séries temporais resultantes dos experimentos . . . . .</b>	<b>86</b>
	<b>APÊNDICE B – Gráficos dos ajustes dos coeficientes de reaeração às séries temporais medidas . . . . .</b>	<b>103</b>

# 1 INTRODUÇÃO

Plumas de bolhas ocorrem quando gases são injetados em líquidos, tipicamente água. A sua ocorrência induz a transferência de gás à água, gerando processos de aeração artificial e mistura turbulenta utilizados em tanques, lagos, reservatórios e estações de tratamento de águas residuais, refletindo uma variedade de aplicações em engenharia ambiental, química e mecânica (DeMoyer *et al.*, 2003; Schierholz *et al.*, 2006; Lima Neto *et al.*, 2007; Pacheco; Lima Neto, 2017; Moura *et al.*, 2020).

A ampla gama de implementações deste fenômeno evidencia a possibilidade de diferentes abordagens, como trabalhos experimentais em escala laboratorial, com experimentos acoplados à simulações utilizando Dinâmica dos Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics*) (CFD) (Fayolle *et al.*, 2007), estudos avaliando a influência da geometria dos tanques (Lima Neto *et al.*, 2008b), de diferentes bocais (Lima Neto *et al.*, 2008a; Lima; Lima Neto, 2018), da vazão de injeção de ar (Behzadipour *et al.*, 2023) e da maneira com que a injeção ocorre, seja vertical ou horizontalmente (Lima Neto *et al.*, 2008c).

Ainda de natureza experimental, outros trabalhos estudaram a influência da presença de telas grades (Behzadipour *et al.*, 2022; Behzadipour; Azimi, 2023), a consideração da não-uniformidade da distribuição de bolhas (Ye *et al.*, 2022), e também focaram em variar as características dos fluidos, estudando jatos borbulhantes em escoamentos cruzados (Zhang; Zhu, 2013; Zhang; Zhu, 2014; Zhang *et al.*, 2023), em injeções horizontais (Lima Neto *et al.*, 2008c), e plumas de bolhas percorrendo fluidos de densidades distintas (Lima Neto *et al.*, 2016).

As consequências de suas aplicações em escala real geram resultados práticos em áreas diversas, com o melhoramento da qualidade da água a partir da aeração de rios cobertos de gelo (Lima Neto *et al.*, 2007), a redução de concentrações de clorofila-a, cianobactérias (Pacheco; Lima Neto, 2017) e fósforo (Moura *et al.*, 2020), a utilização da aeração por nanobolhas para o tratamento de águas residuárias (Lyu *et al.*, 2023) e o aprofundamento do entendimento do chamado “efeito de fonte” (Aprin *et al.*, 2019; Aprin *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2024a; Wang *et al.*, 2024b).

## 1.1 Problemática e justificativa

Diante da sua diversidade de aplicações, quantificar a transferência de gás é objeto central em processos de aeração. A transferência a partir das plumas de bolhas, contudo, introduz

complexidades substanciais, desde a formação das bolhas nos orifícios de injeção, o escoamento de ascensão em forma de pluma até a agitação e o efeito de fonte provocados na superfície (McWhirter; Hutter, 1989; DeMoyer *et al.*, 2003; Schierholz *et al.*, 2006; Lima Neto *et al.*, 2008a; Aprin *et al.*, 2019; Aprin *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2024a; Wang *et al.*, 2024b), o que dificulta a sua avaliação.

Abordagens mais clássicas têm empregado modelos integrais (Lima Neto, 2012a; Lima Neto, 2012b; Lima Neto; Parente, 2016), e mais recentemente de Aprendizado de Máquina (*Machine Learning*) (ML) (Biessey *et al.*, 2021) e de Aprendizado Profundo acoplados à modelos de hidrodinâmica computacional (Dhakane *et al.*, 2024) para predição das dimensões e parâmetros hidrodinâmicos das plumas.

Outros estudos, a partir da expressão derivada da lei de difusão de *Fick*, presente na Equação 1.1 (Mueller *et al.*, 2002):

$$\frac{dC}{dt} = K_L a (C_s - C), \quad (1.1)$$

em que  $C$  é a concentração de OD  $[L^{-3} \cdot M]$ ,  $C_s$  a sua concentração de saturação  $[L^{-3} \cdot M]$  e  $K_L a$  o coeficiente de transferência volumétrica de massa de oxigênio  $[T^{-1}]$ , têm expandido as suas considerações para contabilizar as parcelas referentes aos diferentes mecanismos que compõem este processo, geralmente considerando não desprezíveis as parcelas de transferência devidas à ascensão das bolhas e à agitação da superfície, como estudado em McWhirter e Hutter (1989), DeMoyer *et al.* (2003) e Schierholz *et al.* (2006).

A parcela ( $K_L a$ ) se assemelha ao coeficiente de reaeração  $k_2$  (Lima Neto *et al.*, 2007; Souza Inácio Gonçalves *et al.*, 2017; Arora; Keshari, 2018; Arora; Keshari, 2022; Arora; Keshari, 2023). A sua estimativa tem sido abordagem mandatória na boa compreensão e utilização deste processo (Kalburgi *et al.*, 2015).

O problema da predição de  $k_2$  é muito presente em cenários de rios, e vem sendo tratado com abordagens diversas, como o ajuste de equações empíricas utilizando relações adimensionais (Souza Inácio Gonçalves *et al.*, 2017), a utilização de regressão linear multivariada com variáveis hidráulicas e de qualidade da água (Arora; Keshari, 2018), e a utilização de modelos de inteligência artificial, como a utilização de sistemas de inferência *neuro-fuzzy* (Arora; Keshari, 2023) e a sua hibridização com acoplamento ao modelo ARIMA (Arora; Keshari, 2022). A utilização de modelos de ML para estimativa deste coeficiente em tanques de água, contudo, ainda não foi explorada.



A utilização de ordens superiores se justifica na intenção de capturar em apenas um valor de coeficiente o efeito dos diferentes processos que influenciam a transferência de OD (ver Figura 4) em contraste às abordagens em McWhirter e Hutter (1989), DeMoyer *et al.* (2003) e Schierholz *et al.* (2006), que propuseram coeficientes distintos para contabilizar os efeitos dos processos de transferência de gás durante a ascensão das plumas de bolhas e na formação dos escoamentos superficiais quando estas agitam a superfície (processos **2** e **4** da Figura 4), e Aprin *et al.* (2019), Aprin *et al.* (2020), Li *et al.* (2023), Wang *et al.* (2024a) e Wang *et al.* (2024b), que estudaram a influência dos comportamento de difusão do gás e efeito de fonte (processos **2** e **3** da Figura 4).

## 1.2 Objetivos

### 1.2.1 Objetivo geral

Este estudo objetiva estimar o coeficiente de reaeração  $k_2$  em processos de transferência de OD em tanques de água induzidos por plumas de bolhas utilizando a predição por modelos de ML sob a consideração de cinéticas de ordem superior à teórica.

### 1.2.2 Objetivos específicos

- i. Realizar experimentos de injeção de ar em tanques de água sob diversas condições de entrada controladas e/ou medidas;
- ii. Ajustar o coeficiente  $k_2$  considerando equações de reação com cinéticas superiores à teórica;
- iii. Treinar, otimizar e testar modelos de ML considerando os coeficientes  $k_2$  ajustados às diversas ordens como variáveis de saída e as condições de entrada como variáveis de entrada;
- iv. Comparar os modelos entre si, dentro de cada variável de saída (cada  $k_2$  com diferente ordem), e selecionar aqueles com as melhores performances, medidas a partir de diversas métricas;
- v. Comparar os melhores modelos e selecionar a ordem de  $k_2$  que resultou nas melhores performances, medidas a partir das métricas que independem da escala da saída;
- vi. Analisar, a partir do(s) modelo(s) selecionado(s), a relação e influência das variáveis no processo de aeração por plumas de bolhas a partir das estimativas de importância de

variáveis.

### **1.3 Estrutura da dissertação**

Essa dissertação apresenta uma estrutura tradicional, composta principalmente pelos capítulos de Introdução (o presente capítulo, 1), Referencial Teórico (2), Materiais e Métodos (3), Resultados e Discussões (4) e Conclusões (5) como elementos textuais, e Referências, Apêndices A e B como pós-textuais.

O capítulo 1 (este), Introdução, trata de uma exposição inicial e sucinta aos principais temas e trabalhos relacionados à este estudo, expondo na seção 1.1 a Problemática e justificativa que embasam a pesquisa, e na seção 1.2 os Objetivos: objetivo geral na seção 1.2.1 e específicos na 1.2.2. A presente seção (1.3) apresenta uma visão geral e alguns pormenores da Estrutura da dissertação.

O capítulo 2, Referencial Teórico, apresenta as principais referências para os principais tópicos relativos à este trabalho: Transferência de oxigênio à água por plumas de bolhas, na seção 2.1, com uma síntese de trabalhos e estudos mais clássicos de autores conceituados e estudos mais recentes, os diferentes Mecanismos de transferência de oxigênio que tornam o processo como um todo complexo, na seção 2.2 e Aprendizado de máquina (ML), na seção 2.3, tratando dos modelos utilizados neste trabalho à partir de referências consolidadas.

O capítulo 3, Materiais e Métodos, apresenta as descrições dos procedimentos experimentais, na seção 3.1, a formação e preparação do conjunto de dados, na seção 3.2, os modelos de ML utilizados, na seção 3.3 e os seus procedimentos de treinamento e seleção, na seção 3.4.

O capítulo 4, Resultados e Discussões, apresenta os resultados iniciais das 99 repetições do experimento (séries temporais de OD), na seção 4.1, os resultados dos ajustes dos modelos de cinética de reação de ordens superiores, na seção 4.2, as métricas finais de cada modelo para cada uma das variáveis de saída, na seção 4.3, e apresenta também a quantificação da influência relativa de cada variável na produção dos valores preditos, na seção 4.4.

O capítulo 5, Conclusões, apresenta uma síntese de todo o decorrer do trabalho destacando os objetivos que foram alcançados e as consequências disso a partir do que se esperava. Aponta ainda lacunas deixadas por este trabalho e perspectivas de possibilidades para futuros trabalhos suprirem essas.

Por fim, os elementos pós-textuais contêm as Figuras com os gráficos resultantes

dos experimentos, no Apêndice A, e as curvas ajustadas para todas as ordens consideradas, no Apêndice B.

## 2 REFERENCIAL TEÓRICO

As seções à seguir tratam das referências mais relevantes para os dois principais tópicos relativos à este trabalho: Transferência de oxigênio à água por plumas de bolhas, na seção 2.1, com uma síntese de trabalhos e estudos mais clássicos de autores conceituados e estudos mais recentes, os diferentes Mecanismos de transferência de oxigênio que tornam o processo como um todo complexo, na seção 2.2, e Aprendizado de máquina (ML), na seção 2.3, tratando dos modelos utilizados neste trabalho à partir de referências consolidadas.

### 2.1 Plum as de bolhas e aeração artificial

De estudos em escala de laboratório, experimentos em escala real, aplicações de interesse prático em larga escala e até mesmo à necessidade de estudo em situações ao qual não se deseja a sua ocorrência, são diversos os cenários em que este complexo escoamento bifásico pode ocorrer e/ou ser aplicado.

#### 2.1.1 Aplicações práticas

Lima Neto *et al.* (2007) estudaram formas alternativas de aeração em rios onde a transferência na superfície se torna impedida pela cobertura de gelo durante o inverno, no qual a aeração artificial através da injeção de oxigênio diretamente na descarga de efluentes através de um difusor se mostrou eficaz, com incrementos de 0.16 e 0.21 mg/L de OD decorrentes de taxas de injeção mássica de aproximadamente 1587 e 2268 kg/dia de oxigênio líquido, o que corresponde à uma eficiência de absorção de 50%. Estes acréscimos foram semelhantes aos da aeração natural na superfície ao longo dos 6.07 km de extensão de curso aberto do rio estudado, que resultou no aumento de 0.26 mg/L dos níveis de concentração de OD.

Pacheco e Lima Neto (2017), a partir da realização de pesquisas de campo em um lago raso hipereutrofizado, analisaram o efeito da circulação por aeração artificial na melhoria da qualidade da água em termos de redução das concentrações de clorofila-a e cianobactérias, obtendo as relações descritas nas Equações 2.1, 2.2 e 2.3:

$$k_{chla} = 1.61 \ln(\beta_{hid.}) + 0.33, \quad (2.1)$$

$$k_{chla} = 1.13 \ln(\epsilon_{kin.}) + 4.37, \quad (2.2)$$

$$k_{chla} = 0.89 \ln(k_{pheo.}) + 0.53, \quad (2.3)$$

em que  $k_{chla}$  e  $k_{pheo.}$  são a taxa de redução e crescimento líquidos das concentrações de clorofila-a e feofitina-a, respectivamente ( $\text{dia}^{-1}$ ),  $\beta_{hid.}$  é um parâmetro adimensional definido por Lima Neto (2012a) para descrever a hidrodinâmica das plumas de bolhas e  $\epsilon_{kin.}$  é Taxa de dissipação da energia cinética turbulenta ( $\text{cm}^2/\text{s}^3$ ). Essas são Equações úteis na predição do impacto da circulação artificial na remoção de algas em lagos e reservatórios, o que possibilita, por exemplo, a estimativa do período necessário para melhorias nas classificações de possibilidade de uso da água em reservatórios se adotada determinada medida.

Em Moura *et al.* (2020) as plumas de bolhas foram utilizadas para diminuir a concentração do fósforo liberado na coluna de água, anteriormente precipitado e contido em sedimentos após a ocorrência de condições anóxicas em reservatórios da região semiárida tropical brasileira, contribuindo para uma melhor compreensão da dinâmica do fósforo nestes ambientes além de propor novos modelos de simulação das suas taxas de troca em reservatórios sob estas condições hidroclimáticas.

Lyu *et al.* (2023) investigaram o acoplamento de aeração por nanobolhas em sistemas de tratamento de águas residuárias do tipo “*wetlands* construídos”, alcançando eficiências de remoção de carbono orgânico total e amônia de 49% e 65%, respectivamente, que representam um aumento de aproximadamente 36% dos valores atingidos com técnicas de aeração tradicionais.

Wang *et al.* (2024a) estudaram a dinâmica de dispersão das plumas de bolhas e o seu efeito de fonte simulando cenários de vazamentos de gás em ambientes subaquáticos, providenciando um modelo preditivo através de valores adimensionais e regressão multivariada capaz de fornecer suporte para análise do risco em acidentes deste tipo, também generalizando para a ocorrência de plumas de bolhas em larga escala, cenário no qual há intenso efeito de fonte.

### 2.1.2 Estudos experimentais

As possibilidades de estudo em escala laboratorial são de suma importância para uma melhor compreensão da sua dinâmica, seja tratando-se das plumas de bolhas, transferência de oxigênio ou dos fenômenos relacionados à estes.

Fayolle *et al.* (2007) estudaram a aplicação de CFD na transferência de oxigênio em tanques de aeração utilizando experimentos com difusores de bolhas finas para validá-los, obtendo um modelo para predição do coeficiente de transferência de oxigênio com resultados dentro de um intervalo de  $\pm 5\%$  dos valores experimentais.

Lima Neto *et al.* (2008a) e Lima e Lima Neto (2018) investigaram a influência

de diferentes tipos de bocais (singulares, múltiplos, com pedras porosas) na hidrodinâmica gerada pelas plumas de bolhas em tanques de água, sob injeção direta de ar (Lima Neto *et al.*, 2008a) ou misturas gás-líquido na forma de jatos borbulhantes (Lima; Lima Neto, 2018), constatando significativo incremento da eficiência de transferência do gás quando sob uso de múltiplos orifícios, e que esta configuração se torna comparável ao uso de pedras porosas quando utilizada com diâmetros pequenos nos orifícios.

Lima Neto *et al.* (2008b) avaliaram o efeito da geometria de tanques retangulares e cúbicos nos padrões da circulação induzida por plumas de bolhas circulares e jatos de água, desenvolvendo relações entre o tamanho dos tanques e os padrões das células de circulação, como mostrado nas Equações 2.4 e 2.5:

$$\frac{fL}{U} = Fr^{2.9} \left[ 0.268 \log \left( \frac{b}{B} \right) + 0.205 \right], \quad (2.4)$$

$$\frac{L_{CV}}{L_{CH}} = 0.675 \log \left( \frac{b}{B} \right) + 1.419, \quad (2.5)$$

em que  $fL/U$  é a frequência errante,  $L_{CV}/L_{CH}$  é a razão entre a distância vertical da superfície da água ao centro das células de circulação e a distância horizontal da linha central do bocal ao centro das células de circulação,  $b/B$  é a  $r$  e  $Fr$  é o número de *Froude*, todos adimensionais.

Segundo Lima Neto *et al.* (2008b), a Equação 2.4 demonstra como a frequência adimensional  $fL/U$  cresce conforme o tamanho do tanque diminui proporcionalmente ao raio do jato, até a taxa  $b/B = 0.76$ , e a partir daí demonstra não variar mais com mudanças no tamanho do tanque. A Equação 2.5, por sua vez, pelo crescimento logarítmico da razão  $L_{CV}/L_{CH}$  com  $b/B$ , atesta que células de circulações maiores são formadas em tanques maiores.

Em Lima Neto *et al.* (2008c), em contrapartida à recorrente injeção aos fundos, foi analisado o efeito do lançamento horizontal de misturas gás-líquido, propondo correlações adimensionais para descrever a trajetória da pluma e outras características em função do número de *Froude* e da fração volumétrica de gás.

Zhang e Zhu (2013) realizaram um estudo experimental das características das bolhas em escoamentos cruzados gerados pela injeção de jatos borbulhantes, encontrando evidências de que as distribuições radiais de fração de vazios, frequência de bolhas e sua área específica da interface ar-água seguem distribuições Gaussianas, além de observarem, no que diz respeito à relação entre velocidade de deslizamento e o diâmetro das bolhas nestes escoamentos, um comportamento mais próximo ao de bolhas únicas e isoladas em água estagnada do que de jatos borbulhantes neste mesmo cenário.

Zhang e Zhu (2014) estudaram a trajetória das fases líquido e gasosa de jatos borbulhantes em escoamentos cruzados, desenvolvendo, a partir de análise dimensional, uma equação preditiva semi-empírica para a altura de separação de jatos com alto momento inicial.

Lima Neto *et al.* (2016) estudaram o comportamento das plumas percorrendo fluidos distintos através da condução de experimentos com duas camadas de diferentes densidades, obtendo expressões relevantes que podem ser aplicadas ao projeto de sistemas de mistura e aeração em reservatórios de água doce.

Behzadipour *et al.* (2022) e Behzadipour e Azimi (2023) conduziram experimentos com telas grades para examinar o efeito de diferentes aberturas, distâncias ao bocal e vazões de injeção de ar nas características das plumas, no intuito de aperfeiçoar a capacidade de mistura em plumas de bolhas injetadas verticalmente: Behzadipour *et al.* (2022) obtiveram decréscimo médio na velocidade vertical das bolhas, acréscimo aproximado em sua concentração e redução aproximada em seu tamanho de 38%, 9% e 31%, respectivamente, também propondo equações empíricas que correlacionam o número de Reynolds das bolhas com o comprimento de mistura efetivo sob a presença das telas, enquanto Behzadipour e Azimi (2023) obtiveram redução nas forças de empuxo e de arrasto de 49% e 42%, respectivamente, propondo correlações não lineares entre estas e outras forças hidrodinâmicas e o número de Reynolds das bolhas, bem como modelos empíricos para a predição da tensão superficial e da força induzida pelas bolhas nas telas.

Ye *et al.* (2022) aprimoraram as considerações utilizadas em modelos integrais de plumas uniformes e com as mesmas velocidades de deslizamento ao estudar o seu comportamento sob consideração de não-uniformidade, através de um algoritmo recentemente desenvolvido para análise das imagens capturadas.

Behzadipour *et al.* (2023) examinaram a influência da vazão de injeção de ar na dinâmica das plumas de bolhas em cenários de injeção vertical, observando independência das características das bolhas à vazão em distâncias de até 35% da profundidade de água nos tanques e forte dependência dela em diante, além de observarem um acréscimo médio de 32% no diâmetro médio das bolhas ao se utilizar vazões quatro vezes maiores, relações de acréscimos não lineares do número de bolhas e suas velocidades com a vazão de ar, e um crescimento não linear na probabilidade de ocorrência de maiores intervalos de intensidades de turbulência das bolhas.

Zhang *et al.* (2023) estudaram jatos borbulhantes em escoamentos cruzados em

tubos, concluindo que a distância horizontal entre a saída dos jatos até a região onde a linha central das bolhas toca o topo da tubulação pode ser expressa como função dos números de Reynolds e Weber do escoamento no tubo, e do número de Reynolds das fases líquida e gasosa dos jatos.

Li *et al.* (2023) investigaram o comportamento da difusão do gás e efeito de fonte utilizando técnicas de fotografias de alta velocidade e processamento de imagens em experimentos sob diferentes pressões e vazões de gás e profundidades de água, propondo relações para a altura de fonte através da análise de fatores adimensionais correlacionados com ela.

## 2.2 Mecanismos de transferência de oxigênio em processos de aeração

As seções 2.2.1 e 2.2.2 apresentam os principais trabalhos que embasaram as considerações dos diversos mecanismos de transferência de oxigênio utilizadas neste estudo como embasamento.

### 2.2.1 *Transferência durante a ascensão da pluma e na superfície*

Para rios e cursos d'água os estudos em Streeter e Phelps (1925) particularizaram a lei de difusão de *Fick* para modelar a sua dinâmica de desoxigenação e reaeração natural que sob condições estacionárias estabelece a concentração de OD dependendo principalmente da velocidade do curso ao longo da sua extensão. De forma semelhante, a taxa de variação na concentração de oxigênio com relação ao tempo em sistemas de aeração pode ser modelada pela Equação 1.1, também derivada da lei de difusão de *Fick* (Mueller *et al.*, 2002):

$$\frac{dC}{dt} = K_L a (C_s - C), \quad (2.6)$$

em que  $C$  é a concentração de OD  $[L^{-3} \cdot M]$ ,  $C_s$  a sua concentração de saturação  $[L^{-3} \cdot M]$  e  $K_L a$  o coeficiente de transferência volumétrica de massa de oxigênio  $[T^{-1}]$

A transferência a partir das plumas de bolhas, introduz complexidades substanciais. Os valores de  $K_L a$ , presente na Equação 2.6 são controlados pelo tamanho das bolhas e a transferência de oxigênio se dá por diferentes processos, desde a formação das bolhas nos orifícios de injeção, o escoamento de ascensão em forma de pluma, a agitação e o efeito de fonte provocados na superfície (McWhirter; Hutter, 1989; DeMoyer *et al.*, 2003; Schierholz *et al.*, 2006; Lima Neto *et al.*, 2008a; Aprin *et al.*, 2019; Aprin *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2024a; Wang *et al.*, 2024b), o que dificulta a sua avaliação.



McWhirter e Hutter (1989) se tornaram pioneiros em sua pesquisa ao tecer duras críticas ao método padrão desenvolvido pela *American Society of Civil Engineers* (ASCE) para avaliação da transferência mássica de oxigênio à água em sistemas de aeração, cuja expressão modelo do método é a Equação 2.6, denominando-o “excessivamente simplificado”. Em seu estudo, desenvolve um modelo que descreve como mais fisicamente realístico ao abordar a transferência de oxigênio a partir de dois mecanismos distintos: a transferência que ocorre por dispersão das bolhas de gás durante a ascensão da pluma, e a que ocorre na superfície devido à sua turbulência, provocada pela chegada das bolhas. Essa divisão é expressa matematicamente com a contabilização dos diferentes mecanismos em parcelas também distintas de  $K_L a$  a partir do sistema de equações diferenciais abaixo (Equação 2.7):

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = K_{LB} a_B \int_0^{h_d} \frac{(C^* - C)}{h_d} dz + K_{LS} a_S (C_s - C), \\ \frac{dY_O}{dz} = -K_{LB} a_B \left( \frac{A_T}{Q_{air}} \right) (C^* - C) K_2, \end{cases} \quad (2.7)$$

em que as parcelas  $K_{LS} a_S$  e  $K_{LB} a_B$  correspondem aos coeficientes de transferência volumétrica de massa de oxigênio pela superfície e pelas bolhas, respectivamente  $[T^{-1}]$ ;  $C$ ,  $C_s$  e  $C^*$  são as concentrações de OD, de saturação de OD e de oxigênio em equilíbrio na fase líquida das bolhas, respectivamente  $[L^{-3} \cdot M]$ ;  $h_d$  e  $z$  são a profundidade do difusor de bolhas e a distância de um ponto ao difusor, no eixo das alturas, respectivamente  $[L]$ ;  $A_T$  é a área de seção transversal do tanque  $[L^2]$ ,  $Q_{air}$  a vazão volumétrica de injeção de ar  $[L^3 \cdot T^{-1}]$ ,  $Y_O$  a composição de oxigênio na fase gasosa (adimensional) e  $K_2$  um fator de conversão de unidades.

DeMoyer *et al.* (2003) e Schierholz *et al.* (2006) basearam seus trabalhos no modelo com as considerações anteriores, aprimorando-o. Ainda considerando a divisão do processo em dois mecanismos distintos de transferência, DeMoyer *et al.* (2003) acrescentou a consideração da transferência de nitrogênio durante a ascensão da pluma de bolhas. Seus experimentos resultaram em valores da parcela referente à transferência na superfície ( $K_{LS} a_S$ ) como sendo 59% à 85% da referente à transferência pelas bolhas ( $K_{LB} a_B$ ), permitindo-lhes corroborar a significativa contribuição da transferência pela superfície. A Equação 2.8 apresenta o sistema de equações diferenciais que expressam o seu modelo:

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = K_{LB} a_B \int_0^{h_d} \frac{(C^* - C)}{h_d} dz + K_{LS} a_S (C_s - C), \\ \frac{dY_O}{dz} = -K_{LB} a_B \left( \frac{A_T}{Q_{air}} \right) \left( \frac{1}{C_N^*} (C^* - C) - \left( \frac{D_N}{D_O} \right)^{1/2} \frac{C^*}{(C_N^*)^2} (C_N^* - C_N) \right), \end{cases} \quad (2.8)$$

no qual a principal mudança em relação à Equação 2.7 é a adição de termos referentes à concentração de nitrogênio dissolvido:  $C_N$  e  $C_N^*$ , que são as concentração de nitrogênio dissolvido e de nitrogênio em equilíbrio na fase líquida das bolhas, respectivamente  $[L^{-3} \cdot M]$ , e os termos de difusão de nitrogênio e oxigênio,  $D_N$  e  $D_O$ , respectivamente  $[L^2 \cdot T^{-1}]$ .

Schierholz *et al.* (2006), partindo do modelo anterior, determinaram os coeficientes de ambos os mecanismos de transferência de oxigênio em 179 testes de aeração, desenvolvendo equações empíricas para predição de  $K_{LBA}B$  e  $K_{LSA}S$  em função da vazão de injeção de ar ( $Q_{air}$ ), a profundidade do difusor ( $h_d$ ), a área da seção ( $A_T$ ) e o volume de água ( $Vol_t$ ). Sua análise preditiva através dessas equações o permitiram concluir que a transferência pelas bolhas é correlacionada positivamente com  $Q_{air}$  e  $h_d$ , e negativamente com  $Vol_t$ , e a transferência na superfície, semelhantemente, se correlaciona positivamente com  $Q_{air}$  e  $h_d$ . Em seu modelo de equações diferenciais, avançaram o modelo da Equação 2.8 ao incluir mais considerações sobre influência do nitrogênio dissolvido, conforme sistema da Equação 2.9:

$$\begin{cases} \frac{dC}{dt} = K_{LBA}B \int_0^{h_d} \frac{(C^* - C)}{h_d} dz + K_{LSA}S (C_s - C), \\ \frac{dC_N}{dt} = K_{LBA}B \left( \frac{D_N}{D_O} \right)^{1/2} \int_0^{h_d} \frac{(C_N^* - C_N)}{h_d} dz + K_{LSA}S \left( \frac{D_N}{D_O} \right)^{1/2} (C_{Ns} - C_N), \\ \frac{dY_O}{dz} = -K_{LBA}B \left( \frac{A_T}{Q_{air}} \right) \left( \frac{1}{H_N C_N^*} (C^* - C) - \left( \frac{D_N}{D_O} \right)^{1/2} \frac{H_O C^*}{(H_N C_N^*)^2} (C_N^* - C_N) \right), \end{cases} \quad (2.9)$$

em que  $H_O$  e  $H_N$  são as constantes da lei de *Henry* para oxigênio e nitrogênio, respectivamente  $[L^2 \cdot M \cdot T^{-2} \cdot N^{-1}]$ , e  $C_{Ns}$  a concentração de saturação de nitrogênio dissolvido  $[L^{-3} \cdot M]$ . Neste sistema, tanto a equação relacionada à concentração de OD no tempo quanto nitrogênio podem ser utilizadas para os ajustes de  $K_{LBA}B$  e  $K_{LSA}S$ .

## 2.2.2 Outros mecanismos de transferência

Os mecanismos anteriores avançaram a avaliação do comportamento da transferência de oxigênio à água induzida por plumas de bolhas de modo objetivo ao contabilizar de forma separada a parcela de transferência devida a cada um destes processos em suas respectivas equações e com parcelas do coeficiente  $K_La$  distintas. Apesar disso, existem também outros subprocessos que influenciam nesse comportamento, mesmo que não quantificados de forma direta.

Lima Neto *et al.* (2008a) estudou, através da condição de experimentos de injeção de ar em grandes tanques de água, o efeito de diferentes tipos de bocais de injeção nas características

hidrodinâmicas da pluma de bolhas decorrentes. No embasamento de sua justificativa, argumenta que diferentes mecanismos distintos influenciam de forma significativa o comportamento da transferência de oxigênio, dentre eles, destaca os já abordados anteriormente (transferência durante a ascensão das bolhas e na superfície turbulenta) e também adiciona uma parcela desta que é produto direto do processo de injeção de ar. Segundo o autor, no(s) orifício(s) do bocal, durante a formação das bolhas, a transferência de oxigênio se inicia, mecanismo esse que o seu texto sugere distinção dos demais.

Aprin *et al.* (2019), Aprin *et al.* (2020), Li *et al.* (2023), Wang *et al.* (2024a) e Wang *et al.* (2024b) estudaram mecanismos de transferência sob condições de plumas de bolhas em larga escala que ocorrem tipicamente em cenários subaquáticos devido ao vazamento em dutos de transporte de gás, o que pode representar riscos, e portanto justifica o entendimento da dinâmica das plumas de bolhas consequentes destas situações. Além do comportamento de difusão e dispersão das bolhas durante a ascensão das plumas, o chamado “efeito de fonte” representa um objeto de interesse comum à todos esses trabalhos.

Em particular, Wang *et al.* (2024a), que simularam as condições destes cenários acidentais através de experimentos com foco na modelagem da máxima altura de fonte, denominaram o grau da ocorrência do efeito de fonte como intenso nessas situações. Através de análise de regressão multivariável e com números adimensionais, obteve correlações entre a máxima altura de fonte adimensional e estes números. A sua ocorrência em nível intenso induzida por plumas de bolhas em larga escala sugere que, mesmo diminuída, a sua influência ainda se mantém significativa diante de menores escalas.

Em Li *et al.* (2023), experimentos com diferentes vazões de injeção de ar foram conduzidos no intuito de se observar a resposta das características do efeito de fonte à essa variável. A altura de fonte foi característica observada, e os resultados demonstraram correlação positiva com a variação da vazão de injeção de ar e negativa com a profundidade do vazamento, ou, no cenário experimental, a profundidade de injeção do gás ( $h_d$ ).

Aprin *et al.* (2019) e Aprin *et al.* (2020) variaram, dentre outros parâmetros, a natureza do gás, injetando ar, metano e dióxido de carbono. Os seus experimentos revelaram a dependência do efeito de fonte à densidade e solubilidade do gás injetado, com a altura máxima da fonte crescendo conforme decresce a densidade e cresce a solubilidade.

## 2.3 Aprendizado de máquina

O problema de aprendizagem supervisionada de aproximar  $n$  pontos de dados de  $m$  diferentes preditores consiste em aprender uma função  $f$  de tal forma que (Liu *et al.*, 2024):

$$\begin{aligned} \text{Dados } ((x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,m}), y_i), i = 1, 2, \dots, n \\ y_i \approx f(x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,m}), \forall i, \end{aligned} \quad (2.10)$$

no qual  $x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,m}$  representam os valores da matriz de variáveis de entrada e  $y_i$ , da matriz coluna de variáveis de saída.

Neste trabalho, oito abordagens distintas para aproximação de  $f$  foram utilizadas: Regressão Linear Ordinária (*Ordinary Linear Regression*) (OLR), Regressão Linear Generalizada (*Generalized Linear Model*) (GLM), Regressão Linear com Regularização *Elastic Net* (ELNET), RT, Floresta Aleatória (*Random Forest*) (RF), Máquinas de Reforço de Gradiente (*Gradient Boosting Machine*) (GBM), MLP e a Regressão por Máquinas de Vetores de Suporte (*Support Vector Regression*) (SVR). Os tópicos à seguir abordam estes modelos de ML em termos de sua teoria matemática e algorítmica.

### 2.3.1 Regressão linear generalizada

Resolver o problema estabelecido na Equação 2.10 com uma regressão linear implica utilizar  $f$  de tal forma que:

$$y_i = \beta_0 + \sum_{j=1}^m \beta_j x_{i,j} + \varepsilon_i. \quad (2.11)$$

O modelo pode ser descrito então como linear em seus parâmetros, caso consiga ser escrito direta ou indiretamente neste formato (Kuhn; Johnson, 2014).  $\beta_0$  é chamado intercepto, os coeficientes  $\beta_j$  são referentes à cada preditor, e  $\varepsilon_i$  é o erro irreduzível que não pode ser explicado pelo modelo.

Em sua forma generalizada, o erro aleatório pode assumir diferentes distribuições probabilísticas, como Normal, Binomial, Poisson e Gama (Nelder; Wedderburn, 1972). A assunção de um modelo de regressão linear generalizado com distribuição dos erros  $\varepsilon_i$  seguindo uma distribuição normal é modelo OLR e temos também o GLM considerando distribuição de erros Gama (GLMgm).

O treinamento do modelo GLM consiste em ajustar os coeficientes  $\beta_0, \beta_j$ , e pode ser feito de modo geral utilizando estimadores de máxima verossimilhança com base na distribuição

do erro adotada (Nelder; Wedderburn, 1972). Para um modelo OLR, contudo, é equivalente e mais comum minimizar a Soma dos Resíduos Quadráticos (*Sum of Squared Residuals*) (SSR), que agrupa em uma métrica a diferença entre os valores preditos e observados conforme equação:

$$\min \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \Rightarrow \quad (2.12)$$

$$\Rightarrow \mathbf{b} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}, \quad (2.13)$$

cujos vetores colunas  $\mathbf{b}$  e  $\mathbf{y}$  são os dos coeficientes e dos valores de saída, respectivamente,  $\mathbf{X}$  é a matriz dos preditores e  $\hat{y}_i$  é o valor aproximado da saída, estimado pelo modelo. A consideração de outras distribuições impõe a necessidade de algoritmos numéricos de otimização.

A adição de um termo de regularização ao processo de treinamento pode ajudar à prevenir a ocorrência de *overfitting*, aumentando a capacidade de generalização do modelo e também selecionando automaticamente as variáveis mais influentes. Esta técnica se dá, nos modelos lineares, com a adição de um termo de penalidade ao processo de minimização. Para o OLR, as penalidades de segunda e primeira ordem são as mais usuais ( $\mathcal{L}_2$  e  $\mathcal{L}_1$ ) e expandem o problema descrito na Equação 2.12 em, respectivamente:

$$\min \left[ \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^m \beta_j^2 \right], \quad (2.14)$$

$$\min \left[ \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \lambda \sum_{j=1}^m |\beta_j| \right], \quad (2.15)$$

que também são chamadas regularizações *Ridge* e Operador de Seleção e Encolhimento Mínimo Absoluto (*Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*) (LASSO). Nestas equações,  $\lambda$  é o parâmetro de intensidade da regularização: quanto mais próximo os valores de  $\beta_j$  estiverem de minimizar a parcela SSR, maior magnitude tomará o termo de regularização impulsionado pelo termo de penalidade, impedindo o modelo de se sobreajustar aos dados de treinamento.

A regularização *Elastic Net* (ELNET), por sua vez, combina os termos de penalidade incrementados nas Equações 2.14 e 2.15, de forma a induzir esparsidade e consequentemente selecionar variáveis, como a regularização  $\mathcal{L}_1$ , ao mesmo tempo que encoraja um efeito de agrupamento nas que estiverem fortemente correlacionadas, como faz a penalidade  $\mathcal{L}_2$  (Zou; Hastie, 2005). A combinação das penalidades resulta em um problema da forma:

$$\min \left[ \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \alpha \left( \frac{1}{2} (1 - l_{1r}) \sum_{j=1}^m \beta_j^2 + l_{1r} \sum_{j=1}^m |\beta_j| \right) \right], \quad (2.16)$$

no qual o parâmetro  $l_{1r}$  controla a taxa de regularização imposta pela penalidade  $\mathcal{L}_1$ , e  $\alpha$  é a magnitude da regularização como um todo. Ambos são hiperparâmetros, necessitando de otimização externa ao processo de minimização para determinação dos coeficientes.

Para treinamento pela otimização dos estimadores de máxima verossimilhança, o algoritmo L-BFGS (*Limited-memory Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno*) pode ser utilizado. O algoritmo BFGS é o mais popular da família de métodos *Quasi-Newton* de otimização numérica (Najafabadi *et al.*, 2017), que acelera a determinação da direção de busca estimando a inversa da matriz Hessiana utilizando as derivadas de primeira ordem, não necessitando do seu cálculo direto (Arora, 2017); a sua versão L-BFGS armazena esta estimativa na forma de vetores e utilizando menos memória (Najafabadi *et al.*, 2017).

Apesar de simples em suas estimativas finais por considerar apenas relações lineares entre os preditores e a saída, o seu treinamento é computacionalmente leve. A sua simplicidade também se reflete em seu nível de interpretabilidade, tendo este como uma de suas grandes vantagens: é imediato ver como cada coeficiente corresponde à taxa de variação da saída em relação à sua variável correspondente. Além disso, sua estrutura simplificada contribui para um alto nível de interpretabilidade, uma vez que cada coeficiente pode ser diretamente associado à taxa de variação da variável de saída em relação ao respectivo preditor (Nunes Carvalho *et al.*, 2022).

### 2.3.2 Modelos baseados em árvores

Árvores de decisão, sejam de regressão ou classificação, são métodos que nascem de uma ideia intuitiva de associar um conjunto de regras em cadeia para se decidir o valor final predito. De um ponto de vista matemático, o espaço de variáveis é particionado em um conjunto de hiper-retângulos, com uma resposta relativamente simples para cada uma destas regiões, como uma constante. Isso é conceitualmente simples, mas suficientemente poderoso (Hastie *et al.*, 2017).

No caso dos modelos RT, é comum se proceder inicialmente com o conjunto total de variáveis  $\mathbf{X}$  e considerar uma variável de índice  $j$  que será responsável pela divisão inicial do espaço em 2 semiespaços a partir de um ponto  $s$ . O objetivo é então encontrar  $j$  e  $s$  de tal forma a resolver:

$$\min \left[ \min_{x_{i,j} \in R_1} \sum (y_i - c_1)^2 + \min_{x_{i,j} \in R_2} \sum (y_i - c_2)^2 \right], \quad (2.17)$$

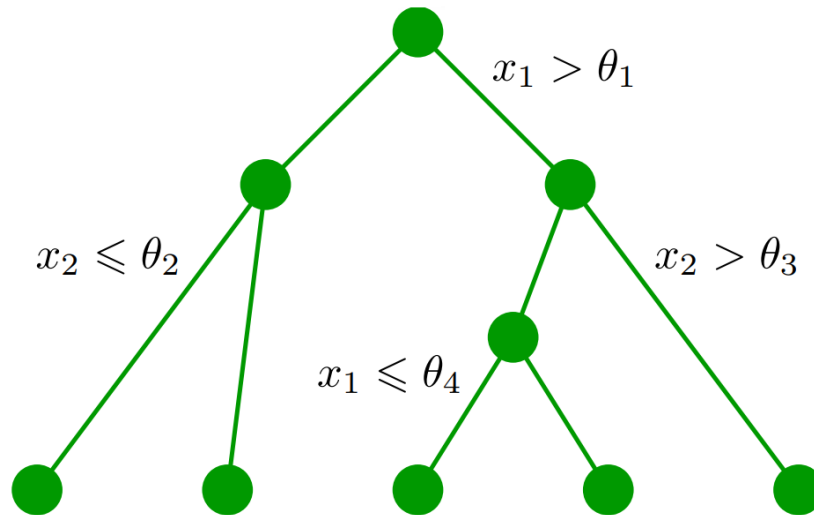
em que  $R_1$  e  $R_2$  são os conjuntos particionados e  $c_1$  e  $c_2$  os valores constantes de resposta do modelo. Na Equação 2.17, as minimizações internas resultam que os valores constantes ótimos são as médias da variável de saída ( $\bar{y}$ ) dentro de seus respectivos subconjuntos, e então a minimização externa pode ser resolvida rapidamente para se encontrar a melhor subdivisão definida pelo par  $(j, s)$ .

Uma vez encontrada a melhor subdivisão, a Equação 2.17 é resolvida dentro de cada região e o algoritmo é repetido em todas as regiões resultantes subsequentes, com atenção para que a árvore **i)** não cresça muito, ou seja, realize muitas subdivisões, podendo se ajustar muito aos dados de treinamento e perdendo poder de generalização (*overfitting*), e nem **ii)** permaneça muito rasa e não consiga capturar importantes relações (*underfitting*) (Hastie *et al.*, 2017).

Uma estratégia utilizada frequentemente é permitir o crescimento de árvores profundas até que se tenha um número menor ou igual ao mínimo estabelecido de amostras por nó e posteriormente controlar a sua complexidade com poda pelo Coeficiente de Poda por Custo-Complexidade (*Cost-Complexity Pruning*) (ccp) (Hastie *et al.*, 2017).

A Figura 1 apresenta uma representação esquemática que ilustra a sequência de etapas do algoritmo destes modelos, em que  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  e  $\theta_4$  são exemplos dos valores resultantes das minimizações de partição do espaço (Equação 2.17)

Figura 1 – Representação esquemática do algoritmo RT



Fonte: (Bishop, 2006).

### 2.3.2.1 Modelos ensemble de árvores

Apesar de conceitualmente simples, facilmente computáveis e com alto potencial de interpretabilidade, modelos RT tendem a ter uma série de desvantagens, sendo uma das principais a sua instabilidade, traduzida na forma de alta variância, podendo facilmente se sobreajustar aos dados de treinamento (Kuhn; Johnson, 2014). Esta desvantagem, contudo, é uma característica explorada por métodos *ensemble* para criação de modelos mais robustos, como os modelos RF e GBM.

Os modelos RF fazem uso da técnica *bagging* para construir o agregado de árvores, combinando árvores construídas de maneira independente com apenas alguns dos preditores originais amostrados de forma aleatória e com a mesma distribuição para divisão de cada nó interno, o que previne a correlação entre as árvores que formam a floresta e favorece um modelo robusto a ruídos nos dados e a *overfitting* (Breiman, 2001).

O tamanho do subconjunto de variáveis amostrado aleatoriamente para divisão de cada nó nas árvores do modelo RF ( $m_{try}$ ) bem como a quantidade de regressores utilizados e o número mínimo de amostras por nós são hiperparâmetros comumente otimizados no seu treinamento.

Os modelos GBM constroem as suas árvores do conjunto total de forma diferente dos modelos RF, utilizando a estratégia chamada *boosting*, produto da conexão das ideias de expansão aditiva por etapas e minimização do gradiente mais íngreme, resultando em modelos competitivos, altamente robustos e com boa interpretabilidade (Friedman, 2001). A sua construção é de forma dependente, com a primeira árvore se ajustando aos dados originais e a partir daí cada regressor subsequente treinado no resíduo do seu anterior no objetivo de minimizá-lo.

Para os modelos GBM, o número de estimadores e a quantidade mínima de observações por nós também são hiperparâmetros influentes em sua configuração. Pela forma de construção de cada árvore, o estimador ótimo a cada etapa será sempre escolhido e isso pode expor o modelo à *overfitting*. Para lidar com isso, o parâmetro de regularização “taxa de aprendizado” pode ser também adicionado ao modelo, e foi utilizado neste trabalho. Tomando valores entre 0 e 1, este hiperparâmetro representa a fração da predição da árvore atual que será adicionada às anteriores.



### 2.3.3 Redes neurais artificiais

Redes neurais são funções do tipo  $\mathbf{y} = f(\mathbf{X}; \Phi)$ , cujo conjunto de parâmetros  $\Phi = \{\phi_1, \phi_2, \dots\}$  mapeia as entradas de múltiplas variáveis ( $\mathbf{X}$ ) em múltiplas saídas ( $\mathbf{y}$ ) (Prince, 2023). A entrada das múltiplas variáveis compõe a camada de entrada, enquanto o processamento final para a saída compõe a camada de saída; o processamento intermediário definido pela função  $f$  é realizado nas camadas ocultas, podendo acontecer em mais de uma, definindo assim outras funções a serem compostas com a  $f$ .

Redes neurais rasas têm apenas uma camada oculta; com mais de uma, ela já é dita profunda. Apesar das diferenças, o termo “perceptron multicamadas” (MLP) engloba ambas as redes, desde que não haja conexões de retorno. O objetivo em seu treinamento é aprender o conjunto de parâmetros  $\Phi$  para que a função  $f$  aproxime os pontos de saída da melhor forma (Goodfellow *et al.*, 2016).

O seu treinamento também pode ser feito pelo algoritmo L-BFGS (Najafabadi *et al.*, 2017) nos casos em que há pequenos conjuntos de dados por sua maior velocidade de convergência em comparação ao Gradiente Descendente Estocástico. A função de perda minimizada para problemas de regressão é o erro quadrático, com estimativa dos valores de seu gradiente feita por algoritmo de retropropagação, e as função de ativação das unidades da camada oculta e da camada de saída são normalmente as funções Unidade de Retificação Linear (*Rectified Linear Unit*) (ReLU) e identidade (Goodfellow *et al.*, 2016; Prince, 2023). Os hiperparâmetros comumente otimizados são a largura das camadas (o número de neurônios das camadas ocultas) e a profundidade da rede (número de camadas ocultas).

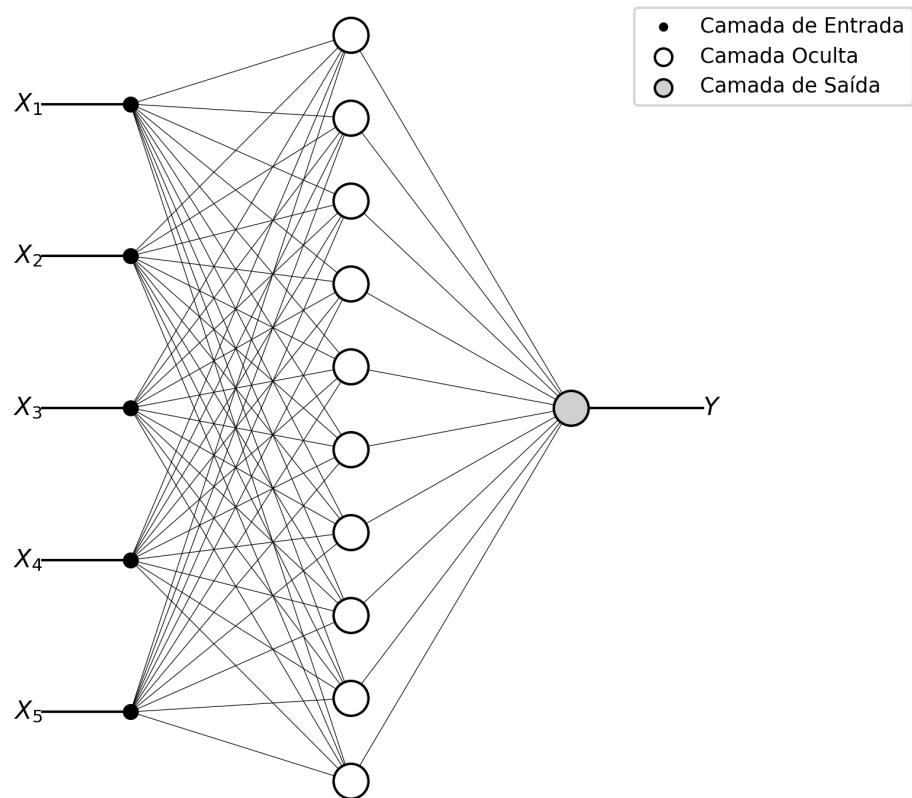
As Figuras 2 e 3 apresentam representações esquemáticas de redes neurais MLP, rasa e profunda, respectivamente. Tratam-se de representações genéricas.

### 2.3.4 Máquinas de vetores de suporte

Máquinas de vetores de suporte denominam uma classe de poderosas e altamente flexíveis técnicas de modelagem. Desenvolvidas inicialmente no contexto de problemas de classificação (Kuhn; Johnson, 2014), elas também podem ser utilizadas para regressão (SVR).

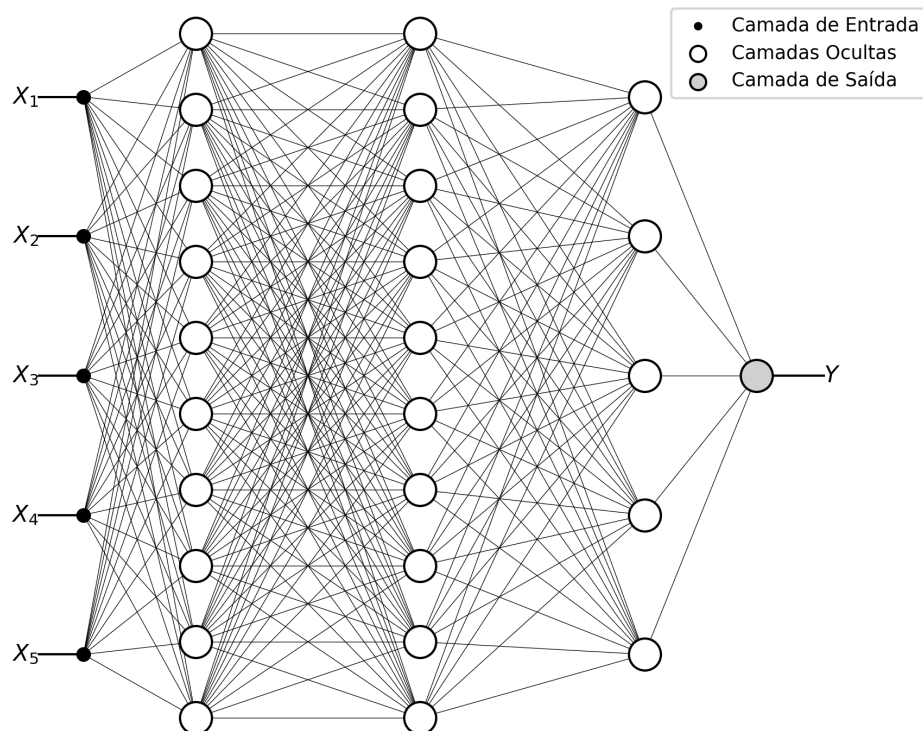
Modelos SVR são construídas a partir da perspectiva de robustez ao efeito de *outliers*, que podem influenciar funções de perda comuns como a soma dos resíduos quadráticos (Equação 2.12) utilizada para treinamento, por exemplo, de regressões lineares. Definido um

Figura 2 – Representação esquemática de uma rede neural MLP rasa



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 3 – Representação esquemática de uma rede neural MLP profunda



Fonte: Elaborada pelo autor.

limite  $\varepsilon_{svr}$ , pontos com resíduos dentro dele não irão contribuir para o ajuste de regressão (técnica denominada “regressão  $\varepsilon$ -insensível”). Para treinamento de seus parâmetros, o problema 2.18 pode ser resolvido:

$$\min \left[ C_{svr} \sum_{i=1}^n L_{\varepsilon}(y_i - \hat{y}_i) + \sum_{j=1}^m \gamma_j^2 \right], \quad (2.18)$$

em que a aproximação  $\hat{y}_i$  pode ser escrita em sua forma generalizada:

$$f(\mathbf{x}') = \gamma_0 + \sum_{i=1}^n \xi_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'), \quad (2.19)$$

com os parâmetros desconhecidos  $\xi_i$  sendo os da decomposição de um novo ponto de entrada  $\mathbf{x}'$  em termos dos dados de treinamento,  $L_{\varepsilon}$  sendo a função  $\varepsilon$ -insensível,  $C_{svr}$  sendo chamado parâmetro de custo, que penaliza resíduos grandes e  $K(\cdot)$  a função *kernel*, que mapeia um ponto de dado para outros espaços, possibilitando ao modelo aprender relações não-lineares (advento chamado *kernel trick*) (Kuhn; Johnson, 2014).

Dois exemplos de funções *kernel* estão representados nas Equações 2.20 e 2.21: de base radial e polinomial, respectivamente:

$$K_{rbf}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}') = \exp(-\sigma_{rbf} \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}'\|^2), \quad (2.20)$$

$$K_{pol}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}') = (\sigma_{pol} (\mathbf{x}_i \mathbf{x}'^T) + 1)^d, \quad (2.21)$$

em que  $\sigma_{rbf}$  e  $\sigma_{pol}$  são hiperparâmetros de escalonamento,  $d$  é o grau da transformação polinomial a ser utilizada,  $C_{svr}$  o chamado parâmetro de custo e  $\varepsilon_{svr}$  a margem de insensibilidade, todos estes sendo hiperparâmetros do modelo.

### 3 MATERIAIS E MÉTODOS

As seções à seguir descrevem os procedimentos experimentais (3.1), a formação e preparação do conjunto de dados (3.2), os modelos de ML utilizados (3.3) e os procedimentos de treinamento e seleção (3.4).

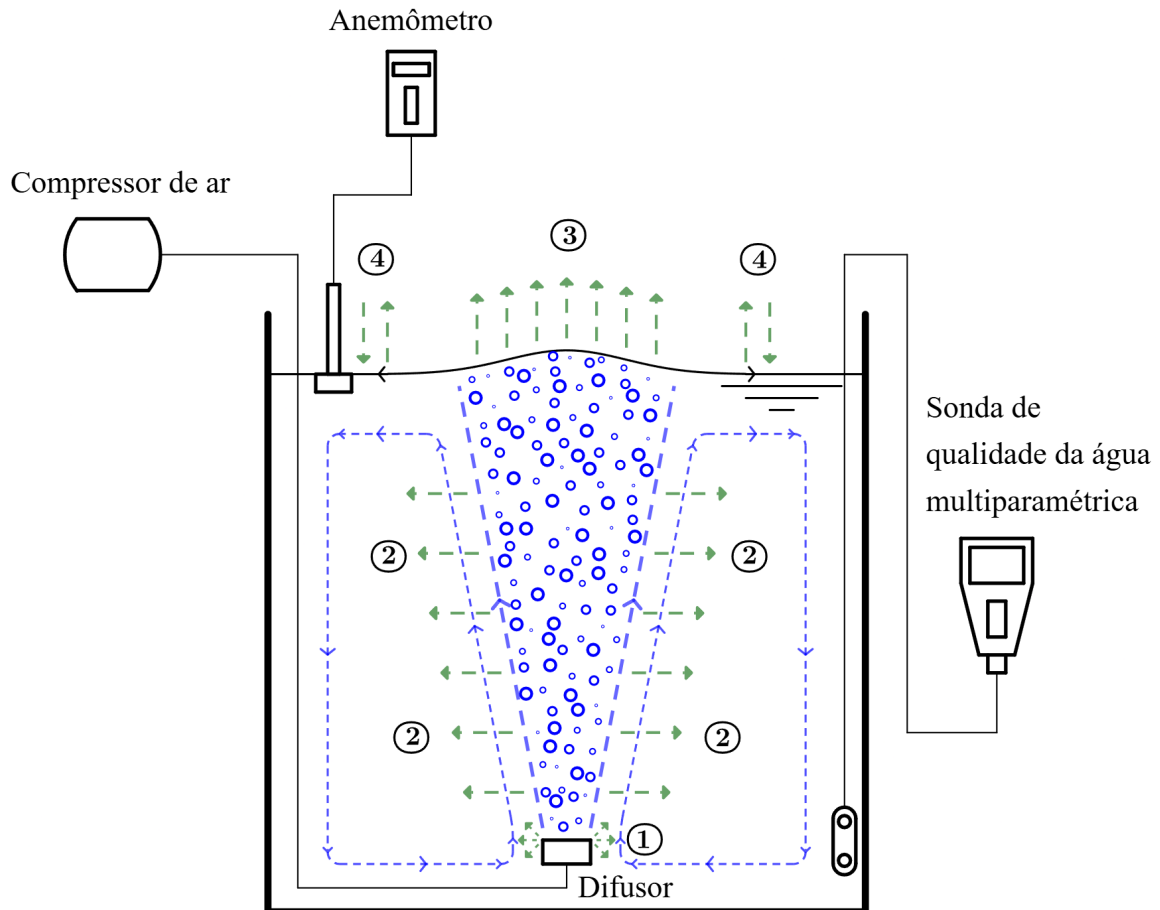
#### 3.1 Configuração experimental

Os experimentos foram realizados em três tanques cúbicos de acrílico; o menor possuía arestas de 20 cm, o intermediário, 40 cm, e o maior, 60 cm. Os tanques foram preenchidos com alturas de água de 10, 15 e 20 cm para o tanque menor, 10, 15, 20, 25, 30, 35 e 40 cm para o tanque intermediário, e 20, 25 e 30 para o tanque maior, utilizando água potável advinda diretamente do sistema de abastecimento, sem nenhuma modificação por parte dos operadores do experimento. As vazões volumétricas de ar utilizadas para aeração dos tanques foram de 1, 2 e 3 cm<sup>3</sup>/s, ajustadas previamente ao início da série de experimentos através de um rotâmetro e injetadas ao fundo do tanque de forma centralizada através de diferentes bocais e difusores: orifício singular livre e duas opções de pedra porosa.

O aparato experimental pode ser observado de forma esquemática na Figura 4, cujos processos de transferência de oxigênio envolvidos na aeração frequentemente descritos na literatura também estão representados: **1)** transferência na região ligeiramente ao redor do difusor devido à injeção de gás e formação de bolhas (Lima Neto *et al.*, 2008a), **2)** transferência devido ao contato das bolhas com a água durante a ascensão da pluma (McWhirter; Hutter, 1989; DeMoyer *et al.*, 2003; Schierholz *et al.*, 2006; Lima Neto *et al.*, 2008a), **3)** transferência devido ao escape de gás no colapso das bolhas na superfície, o chamado “efeito de fonte” (Aprin *et al.*, 2019; Aprin *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2024a; Wang *et al.*, 2024b), e **4)** transferência na superfície em um processo de troca com o ambiente externo devido ao fluxo giratório resultante da agitação causada pelas bolhas (McWhirter; Hutter, 1989; DeMoyer *et al.*, 2003; Schierholz *et al.*, 2006; Lima Neto *et al.*, 2008a). O procedimento em cada repetição envolveu a aferição da temperatura média da água durante o processo ( $T$ ), que acabou por se mostrar constante, e registros contínuos da concentração de OD durante 300 segundos, ambos realizados com sonda de qualidade da água multiparamétrica, e da velocidade média do escoamento na superfície gerado pela pluma ( $V_{plum}$ ) com anemômetro molinete. Uma nova repetição do experimento, com outras condições de entrada, era realizada apenas após um intervalo mínimo de cinco minutos,

no intuito de se estabilizar a concentração de OD novamente próxima ao valor de início.

Figura 4 – Representação esquemática da configuração experimental e dos processos de transferência de oxigênio



Fonte: Elaborada pelo autor;

- ①: transferência durante a formação das bolhas devido à injeção de ar (geralmente não mencionado e/ou discutido);
- ②: transferência durante a ascensão da pluma de bolhas;
- ③: transferência pelo “efeito de fonte” devido à chegada da pluma na superfície e o colapso das bolhas;
- ④: transferência na forma de trocas na superfície devido ao escoamento provocado pela agitação da mesma.

As Figuras de 5 à 11 contêm fotografias da configuração experimental real utilizada nas repetições dos experimentos: os tanques cúbicos de acrílico estão representados na Figura 5; a sonda de qualidade da água multiparamétrica, na Figura 6; o anemômetro molinete, na Figura 7; o compressor de ar e os diferentes tipos de bocal e difusores de ar, na Figura 8. A Figura 9 contém fotografias das plumas de bolhas formadas durante os experimentos, tanto na configuração de orifício livre como utilizando o difusor do tipo pedra porosa; na Figura 10, as superfícies consequentes da chegada das plumas nos dois cenários de bocal descritos anteriormente; na Figura 11, por fim, uma fotografia da visão geral da configuração experimental real, complementando a representação esquemática presente na Figura 4.

Figura 5 – Fotografia dos tanques cúbicos



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Arestas do menor para o maior: 20, 40 e 60 cm.

Figura 6 – Fotografias da sonda de qualidade da água multiparamétrica



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Visão geral (à esquerda) e visor (à direita).



Figura 7 – Fotografias do anemômetro molinete



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Visão geral (à esquerda), visor (ao centro) e sonda de velocidade (à direita).

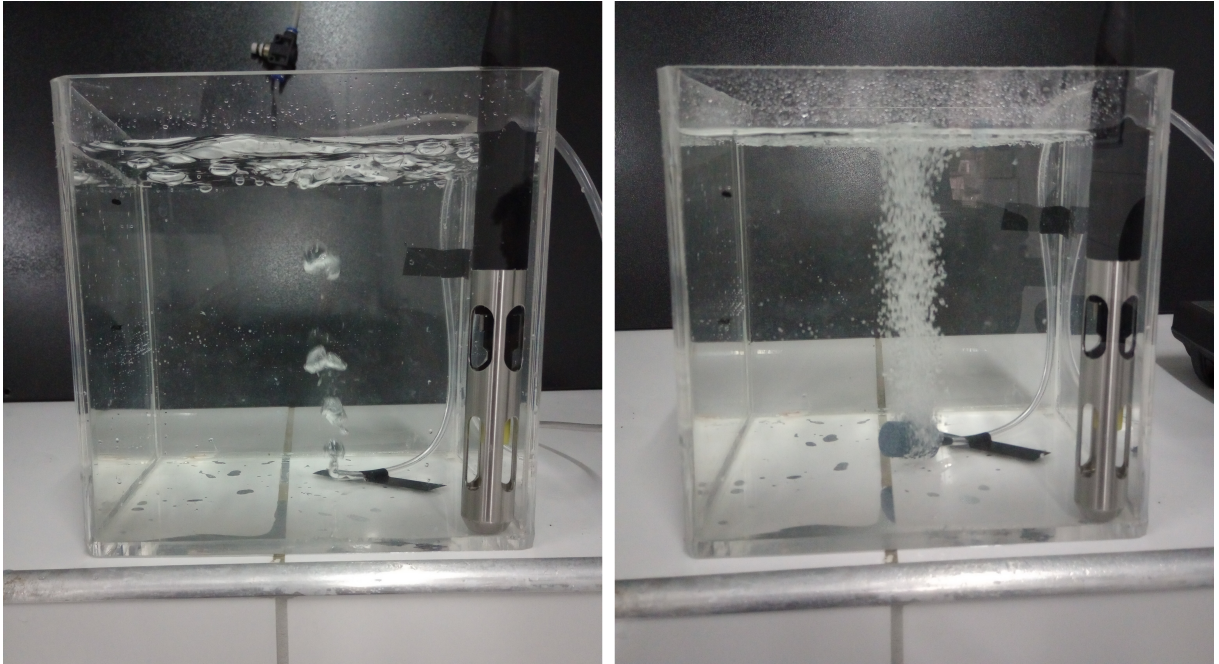
Figura 8 – Fotografias do compressor e dos difusores de ar



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Visão geral (à esquerda) e orifícios e pedras porosas (à direita).

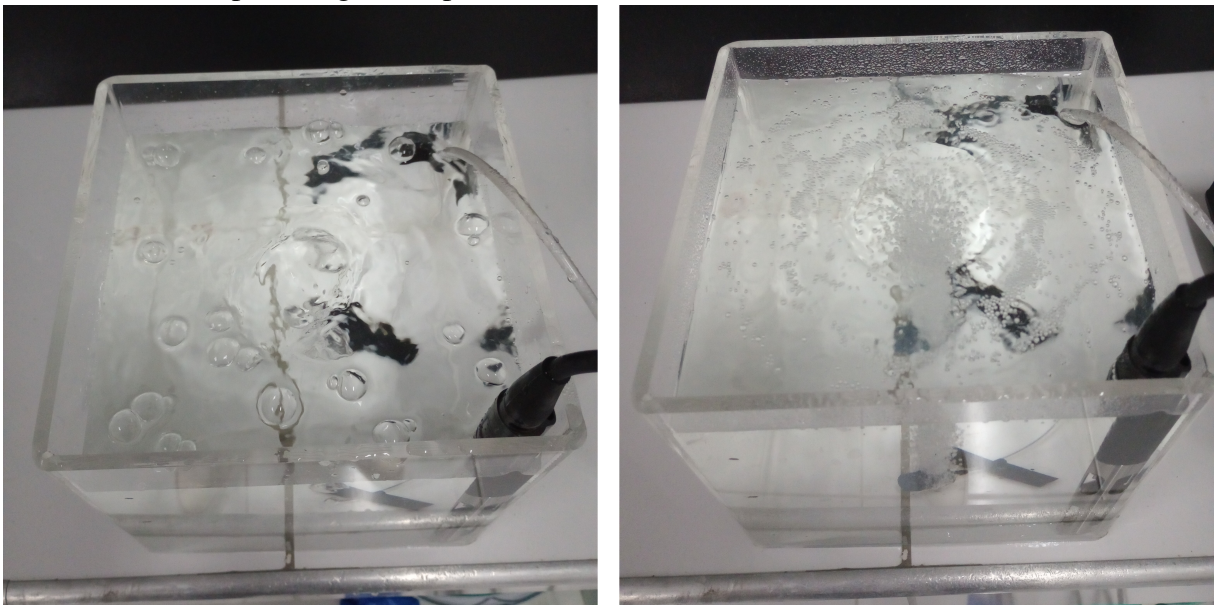
Figura 9 – Fotografias das plumas de bolhas formadas pelos diferentes bocais e difusores de ar



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Plum as a partir do orifício livre (à esquerda) e a partir das pedras porosas (à direita).

Figura 10 – Fotografias da superfície da água agitada e com formação da região do efeito de fonte pela chegada da pluma de bolhas

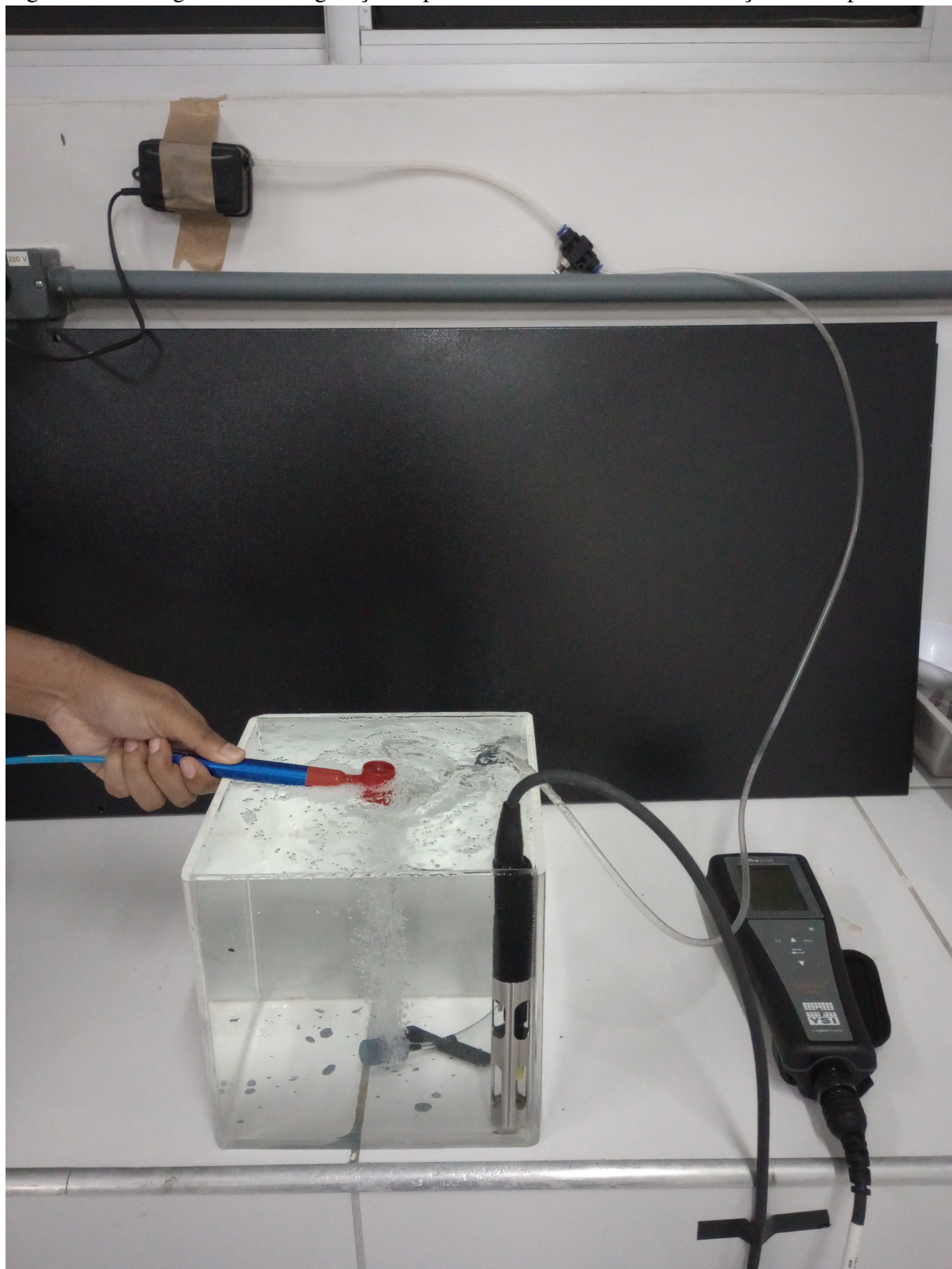


Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: Exemplo de experimentos com orifício livre (à esquerda) e com pedras porosas (à direita).



Figura 11 – Fotografia da configuração experimental real durante a realização dos experimentos



Fonte: Elaborada pelo autor.

### 3.2 Conjunto de dados

O conjunto de dados inicial foi composto pelas séries temporais de concentração de OD com medições à cada cinco segundos até o tempo limite de 300 s. O conjunto final foi construído a partir do ajuste destas séries temporais às Equações 3.4 e 3.5 considerando diversas ordens de cinética (inicialmente de 1 à 10). Os valores resultantes do coeficiente  $k_2$  bem como o quadrado do coeficiente de correlação entre os pontos da curva ajustada e os dados observados foram concatenados aos valores medidos das outras variáveis, em um total de 99 repetições do experimento, cada um com uma combinação diferente das condições de entrada.

#### 3.2.1 Variáveis de entrada

As variáveis temperatura ( $T$ ), concentração de OD inicial ( $C_0$ ) e de saturação ( $C_s$ ) e velocidade média da pluma de bolhas ( $V_{plum}$ ) não eram controláveis diretamente, enquanto a vazão de ar injetado ( $Q_{air}$ ), o tipo de difusor ( $t_{dif}$ ), a altura da coluna de água ( $h_w$ ) e o volume de água no tanque ( $Vol_t$ ) eram estabelecidas pelo operador do experimento. A concentração de saturação ( $C_s$ ) foi determinada em função de  $T$  por interpolação dos valores disponíveis em Gulliver (2007).

Tabela 1 – Estatísticas e descrição das variáveis de entrada numéricas

Variável	<sup>1</sup> U.M	Média	<sup>1</sup> D.P	<sup>1</sup> C.V	<sup>1</sup> C.A	<sup>1</sup> Mín.	<sup>1</sup> Máx.	<sup>1</sup> Amp.
$Q_{air}$	cm <sup>3</sup> /s	2.0	0.8	0.41	0.00	1.0	3.0	2.0
$h_w$	cm	22.3	9.5	0.43	0.41	10.0	40.0	30.0
$Vol_t$	L	35.3	26.7	0.76	0.74	4.0	108.0	104.0
$T$	°C	27.7	1.4	0.05	-0.96	22.9	30.5	7.6
$C_0$	mg/L	4.49	0.25	0.06	0.47	3.89	5.40	1.51
$C_s$	mg/L	7.91	0.21	0.03	0.90	7.56	8.62	1.05
$V_{plum}$	m/s	0.17	0.06	0.32	0.37	0.07	0.33	0.26

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: **U.M**: unidade de medida; **D.P**: desvio padrão da amostra; **C.V**: coeficiente de variação; **C.A**: coeficiente de assimetria; **Mín.**: valor mínimo; **Máx.**: valor máximo; **Amp.**: amplitude total.

#### 3.2.2 Variáveis de saída

Neste estudo, alguns tipos de coeficiente de reaeração ( $k_2$ ) foram considerados para treinamento dos modelos; os coeficientes são relativos aos ajustes em modelos de decaimento do déficit da concentração de OD considerando as ordens de 1 até no máximo 10.

A taxa de variação na concentração de oxigênio com relação ao tempo em sistemas de aeração segue a seguinte equação diferencial, derivada da lei de difusão de *Fick* (Mueller *et al.*, 2002):

$$\frac{dC}{dt} = K_L a (C_s - C). \quad (3.1)$$

Se fizermos  $D(t) = C_s - C(t)$  teremos:

$$-\frac{dD}{dt} = -\frac{d}{dt}(C_s - C) = \frac{dC}{dt}, \quad (3.2)$$

que substituindo na Equação 3.1 e agrupando  $K_L a = k_2$  nos dá:

$$\frac{dD}{dt} = -k_2 D, \quad (3.3)$$

em que  $D$  é o déficit de OD,  $C$  a sua concentração e  $C_s$  a sua concentração de saturação, todos com dimensão  $[L^{-3} \cdot M]$ . Para esta Equação, o coeficiente  $k_2$  tem dimensão  $[T^{-1}]$ .

A Equação 3.3 modela uma reação de decaimento de primeira ordem. Um modelo de decaimento de ordem  $p$  qualquer estabelece a taxa de variação proporcional à sua  $p$ -ésima potência; para o déficit da concentração de OD sem a presença significativa de matéria orgânica (água limpa), esse pode ser representado pelo problema de valor inicial 3.4:

$$\begin{cases} \frac{dD}{dt} = -k_2 D^p, \\ D(0) = C_s - C_0, \end{cases} \quad (3.4)$$

que se resolve analiticamente na Equação 3.5:

$$C(t) = \begin{cases} C_s - (C_s - C_0)e^{-k_2 t}, & p = 1 \\ C_s - \left[ (C_s - C_0)^{1-p} - (1-p)k_2 t \right]^{\left(\frac{1}{1-p}\right)}, & p \neq 1 \end{cases} \quad (3.5)$$

com  $p \in \mathbb{N}$  (adimensional),  $t$  o tempo  $[T]$  e  $C_0$  a concentração de OD no instante inicial  $[L^{-3} \cdot M]$ . Neste caso mais geral, o coeficiente  $k_2$  terá dimensão dependente da ordem  $p$   $[L^{-3+3p} \cdot M^{1-p} \cdot T^{-1}]$ .

### 3.2.3 Pré-processamento

Modelos de ML podem se beneficiar da distribuição dos dados ser o mais simétrica possível e diferentes preditores terem escalas parecidas entre si, além de seus valores estarem em uma magnitude pequena. Alguns deles, inclusive, só aceitam valores numéricos e só performam bem sob estas condições anteriores.

Neste estudo, transformações de potência de *Yeo-Johnson* foram aplicadas às variáveis numéricas para minimização do coeficiente de assimetria, com exceção à  $Q_{air}$ , por já ter a sua distribuição perfeitamente simétrica. No mesmo intuito, posteriores transformações de normalização foram empregadas: para o modelo de redes neurais a transformação *min-max*, e para todos os outros, centralização na média e escalonamento pelo desvio padrão. As variáveis categóricas foram expandidas em variáveis *dummy* por codificação ordinal para os modelos baseados em árvore e *One-Hot* para os outros.

### 3.3 Modelos de aprendizado de máquina

Por se tratar também de um problema com saída numérica contínua, foram utilizados oito algoritmos de aprendizado supervisionado de regressão: OLR, GLM, ELNET, RT, RF, GBM, MLP e a SVR.

Neste trabalho, foram consideradas, para os modelos lineares, distribuições de erro Gama (GLMgm) e Normal (OLR); o modelo com regularização ELNET foi aplicado considerado distribuição Normal. Em sua forma OLR, o treinamento consistiu na resolução descrita na Equação 2.13, enquanto para o modelo GLMgm a otimização dos estimadores de máxima verossimilhança foi feita utilizando o algoritmo L-BFGS.

Para o modelo RT, a estratégia utilizada neste trabalho, adotada frequentemente, foi permitir o crescimento de árvores profundas até que se tenha um número menor ou igual ao mínimo estabelecido de amostras por nó e posteriormente controlar a sua complexidade com poda pelo ccp. Ambos os parâmetros foram otimizados com busca aleatória utilizando-se distribuição discreta uniforme para o número mínimo de amostras por nós, e distribuição contínua log-uniforme para o coeficiente ccp.

Para os modelos *ensemble*, no modelo RF, o tamanho do subconjunto de variáveis amostrado aleatoriamente para divisão de cada nó nas árvores ( $m_{try}$ ) bem como a quantidade de regressores utilizados e o número mínimo de amostras por nós foram os hiperparâmetros considerados no treinamento. Nos modelos GBM, o número de estimadores, a quantidade mínima de observações por nós, a profundidade máxima das árvores e a taxa de aprendizado foram otimizados durante o seu treinamento.

Neste trabalho, modelos MLP rasos e profundos de duas e três camadas foram utilizados, treinados pelo algoritmo L-BFGS. A função de perda minimizada foi o erro quadrático, com estimativa dos valores de seu gradiente feita por algoritmo de retropropagação. A função de

ativação das unidades da camada oculta foi a função ReLU, e para camada de saída, identidade. Os hiperparâmetros otimizados foram a largura das camadas (o número de neurônios das camadas ocultas) e a sua profundidade (número de camadas ocultas).

Para os modelos SVR, duas funções *kernel* foram utilizadas: de base radial (Equação 2.20) e polinomial (Equação 2.21). Os seus hiperparâmetros de escalonamento foram escolhidos como o inverso do produto do tamanho do conjunto de treinamento pela sua variância. O parâmetro de custo  $C_{svr}$  e de margem de insensibilidade  $\epsilon_{svr}$  foram considerados na otimização de ambos os modelos, bem como, de forma específica para o SVR com *kernel* polinomial, o grau da transformação polinomial  $d$  e o termo independente da função, semelhante ao intercepto em regressões lineares.

### 3.4 Configuração e seleção dos modelos

O conjunto de dados total foi dividido em conjunto de treinamento e de teste, para avaliação dos modelos e posterior seleção; o conjunto de treinamento, por sua vez, foi dividido em conjuntos de estimativa e validação, para ajuste da configuração dos modelos por otimização dos hiperparâmetros.

Ambas as divisões foram realizadas com reamostragem do tipo *k-fold* Validação Cruzada (*Cross-Validation*) (CV), que consiste em dividir o conjunto em questão em  $k$  partes disjuntas e de igual tamanho. Uma das partes é então utilizada como teste/ validação, enquanto o restante, neste mesmo momento, como treinamento/ estimativa, e o processo é repetido  $k$  vezes, uma em cada uma das partes.

Este esquema de CV empregado neste trabalho resultou em um CV externo para seleção dos modelos, aninhado a um CV interno para otimização de hiperparâmetros. Externamente executou-se um *10-fold* CV, e internamente um *5-fold* CV. Apesar de mais comumente adotado para ajuste da configuração dos modelos, neste caso, uma única divisão em treinamento e teste para um conjunto de um número intermediário de dados poderia introduzir um viés considerável, sendo necessário o aninhamento deste segundo CV para minimizá-lo, tornando as métricas de seleção dos modelos mais confiáveis.

### 3.4.1 Otimização de hiperparâmetros

Internamente ao esquema geral de CV, em cada etapa do *5-fold CV* o processo de otimização da configuração dos hiperparâmetros foi conduzido por busca aleatória e busca em grade. A configuração de modelo com melhor performance estimada (maior  $r^2$  médio) era selecionada.

A busca exaustiva em grade consiste em estabelecer valores possíveis para cada hiperparâmetro e treinar os modelos em cada uma das combinações possíveis com estes valores pré-determinados. A vantagem desta abordagem é a de ter certeza que todo o domínio estabelecido foi considerado; a sua desvantagem se dá no fato de que pode se tornar computacionalmente caro, principalmente em modelos com diferentes hiperparâmetros a serem otimizados, como os modelos em árvore.

Diferentemente da busca exaustiva em grade, a busca aleatória pode acontecer em três abordagens: **i)** definir uma grade, semelhantemente ao primeiro processo, selecionando, contudo as configurações desta grade de modo aleatório e uniforme; **ii)** definir distribuições de probabilidade para os parâmetros, de tal forma que os seus valores em cada iteração da busca sejam gerados por essas, ou **iii)** uma combinação destas abordagens. Para espaços de busca com alta dimensão ela se mostra muito mais econômica computacionalmente, podendo até mesmo superar a performance da busca em grade, especialmente se o modelo é afetado pelos hiperparâmetros em um intervalo pequeno de valores (Liashchynskyi; Liashchynskyi, 2019).

Neste trabalho, a busca em grade foi utilizada apenas nos modelos MLP; para os outros foram definidas distribuições de probabilidade para a grande maioria dos hiperparâmetros, abarcando os intervalos desejáveis de busca. As distribuições uniforme contínua e discreta foram utilizadas, juntamente com a log-uniforme para hiperparâmetros em que o intervalo compreendia diferentes escalas, e ao invés da equidade da chance de seleção estar no valor absoluto em si, era mais razoável que ela estivesse em cima das diferentes magnitudes, como exemplo do parâmetro  $\alpha$  da regularização ELNET, que compreendeu valores nas escalas  $10^{-5}$ ,  $10^{-4}$ ,  $\dots$ ,  $10^2$ , e era importante que todos estas pudessem ter a mesma probabilidade de serem experimentadas no processo. A Tabela 2 reúne todos estes valores.

Tabela 2 – Espaços de busca dos principais hiperparâmetros otimizados

Modelo	Hiperparâmetros	<sup>2</sup> Valores de busca
<sup>1</sup> ELNET	$\alpha$ $l_{1r}$	$\log \mathcal{U} [10^{-5}, 10^2]$ $\mathcal{U} [0, 1]$
RT	ccp Mínimo de amostras por nó	$\log \mathcal{U} [10^{-5}, 10^2]$ $\mathcal{U}_d [5, 30]$
RF	Número de árvores $m_{try}$ (taxa) Mínimo de amostras por nó	$\{10, 20, \dots, 100, 200, \dots, 1000\}$ $\mathcal{U} [0, 1]$ $\mathcal{U}_d [5, 30]$
GBM	Número de árvores Taxa de aprendizado Profundidade máxima das árvores Mínimo de amostras por nó	$\{10, 20, \dots, 100, 200, \dots, 1000\}$ $\log \mathcal{U} [10^{-3}, 10^{-1}]$ $\mathcal{U}_d [1, 10]$ $\mathcal{U}_d [5, 30]$
MLP	Largura da rede Profundidade da rede	$\{10, 20, 30\}$ $\{1, 2, 3\}$
SVR	$C_{svr}$ $\epsilon_{svr}$ $d$ <sup>3</sup> Termo independente na função <i>kernel</i>	$\log \mathcal{U} [10^{-5}, 10^2]$ $\log \mathcal{U} [10^{-5}, 10^0]$ $\mathcal{U}_d [2, 5]$ $\mathcal{U} [-10, 10]$

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: Os outros modelos de regressão linear generalizada (OLR, GLMgm) não tinham hiperparâmetros;

<sup>2</sup>: Distribuições contínuas uniforme ( $\mathcal{U}$ ), log-uniforme ( $\log \mathcal{U}$ ) e discreta uniforme ( $\mathcal{U}_d$ ) dentro do intervalo  $[a, b]$  dado;

<sup>3</sup>: Apenas para o *kernel* polinomial.

### 3.4.2 Métricas de performance

A avaliação de performance final para seleção dos modelos foi feita a partir das métricas Raiz do Erro Quadrático Médio (*Root Mean Squared Error*) (RMSE), Erro Médio Absoluto (*Mean Absolute Error*) (MAE), Erro Percentual Médio Absoluto (*Mean Absolute Percentage Error*) (MAPE), Raiz do Erro Logarítmico Quadrático Médio (*Root Mean Squared Logarithmic Error*) (RMSLE) e o Coeficiente de Determinação ( $r^2$ ), mostrados nas Equações 3.6 à 3.10:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (3.6)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|, \quad (3.7)$$

$$\text{MAPE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|, \quad (3.8)$$

$$\text{RMSLE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\log(y_i + 1) - \log(\hat{y}_i + 1))^2}, \quad (3.9)$$

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}, \quad (3.10)$$

em que  $y_i$  é a  $i$ -ésima amostra de um conjunto com  $n$  observações,  $\bar{y}$  é a média deste conjunto e  $\hat{y}_i$  é o seu valor estimado. O coeficiente  $r^2$  foi utilizado como objetivo de maximização na otimização de hiperparâmetros e juntamente às métricas MAPE e RMSLE foi utilizado para comparação dos melhores modelos em cada variável de saída, uma vez que seus valores são independentes da escala e unidade dessas.



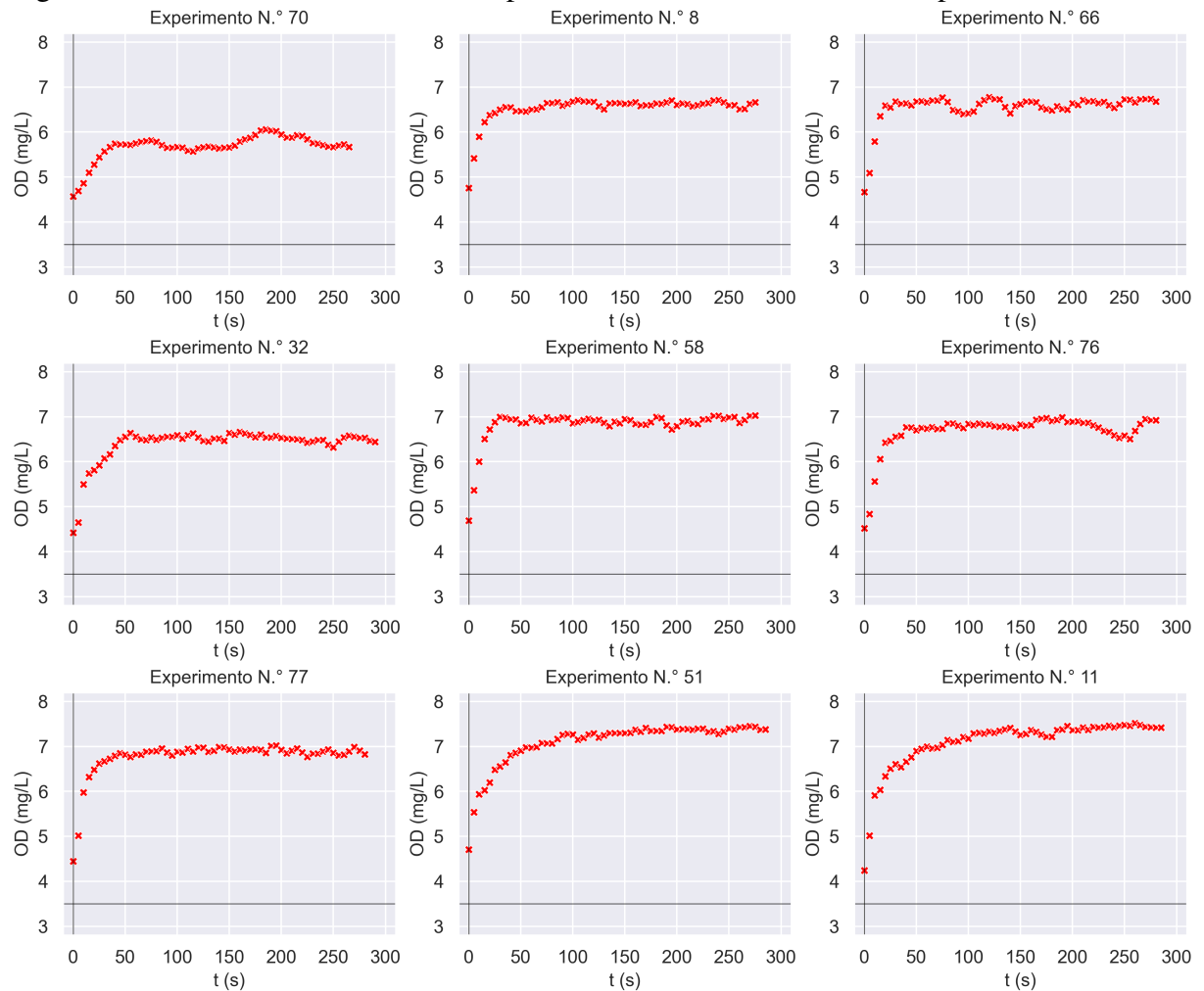
## 4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este capítulo apresenta os resultados iniciais e finais das 99 repetições do experimento, nas seções 4.1 e 4.2, as métricas finais de cada modelo de ML para cada uma das saídas considerada, na seção 4.3, e a quantificação da influência relativa de cada variável na produção dos valores preditos, na seção 4.4.

### 4.1 Resultados dos experimentos

Após realização dos experimentos, os primeiros resultados colhidos foram as séries temporais de OD ao longo dos 300 s, aferidos a cada cinco segundos. Nove destas séries temporais estão contidas na Figura 12.

Figura 12 – Gráficos de nove séries temporais de OD com valores iniciais padronizados



Fonte: Elaborada pelo autor;

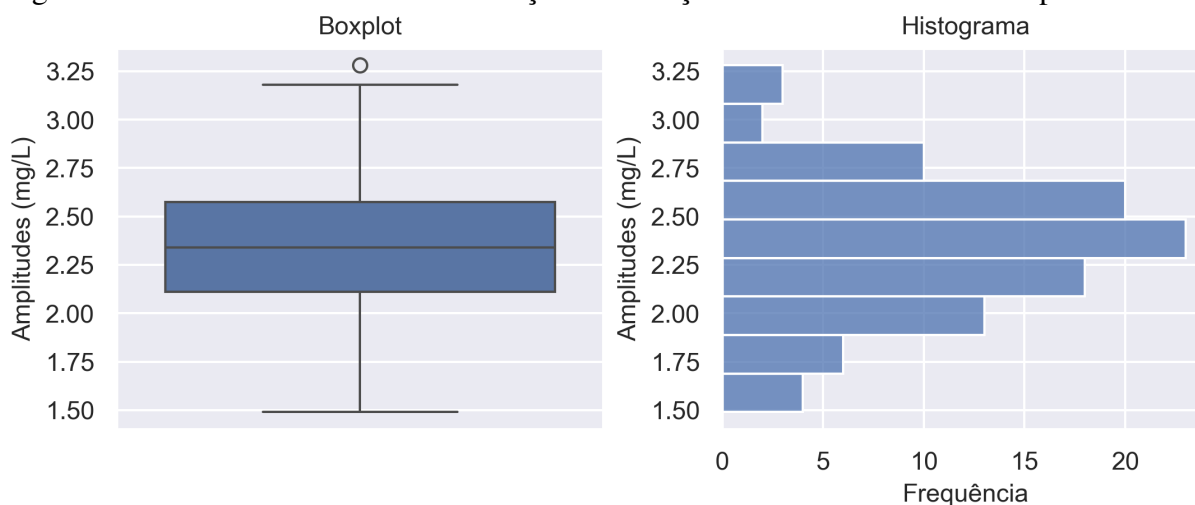
Nota: Experimentos com amplitude correspondentes aos percentis 0 (mínimo), 12.5, 25, 37.5, 50, 62.5, 75, 87.5 e 100 (máximo), da esquerda para a direita e de cima para baixo, respectivamente.

A numeração dos experimentos segue a ordem em que foram executados. Para padronização do momento em que a água em todo o reservatório estava sob influência dos escoamentos induzidos pela pluma de bolhas, na Figura 12, os primeiros valores foram excluídos a partir do critério  $\frac{dC}{dt} < 1.0 \text{ mg/(L} \cdot \text{s)}$ .

Os gráficos que compõem a Figura 12 também foram escolhidos para demonstrar as variações totais mínima e máxima da concentração de OD entre os experimentos, correspondentes aos experimentos n.º 70 e 11, respectivamente. Os outros gráficos, dos experimentos n.º 8, 66, 32, 58, 76, 77 e 51, correspondem, no intuito de abarcar de modo uniforme toda distribuição de variações, aos percentis 12.5, 25.0 (quartil 1), 37.5, 50.0 (mediana e quartil 2), 62.5, 75.0 (quartil 3) e 87.5, respectivamente.

A Figura 13 reúne os valores dessa distribuição de variações totais ou amplitudes nas séries de OD de modo mais específico, com valores mínimo e máximo de 1.49 e 3.28 mg/L, respectivamente, e variação média e mediana de 2.34 mg/L.

Figura 13 – Gráficos reunindo a distribuição de variações totais das 99 séries temporais de OD



Fonte: Elaborada pelo autor.

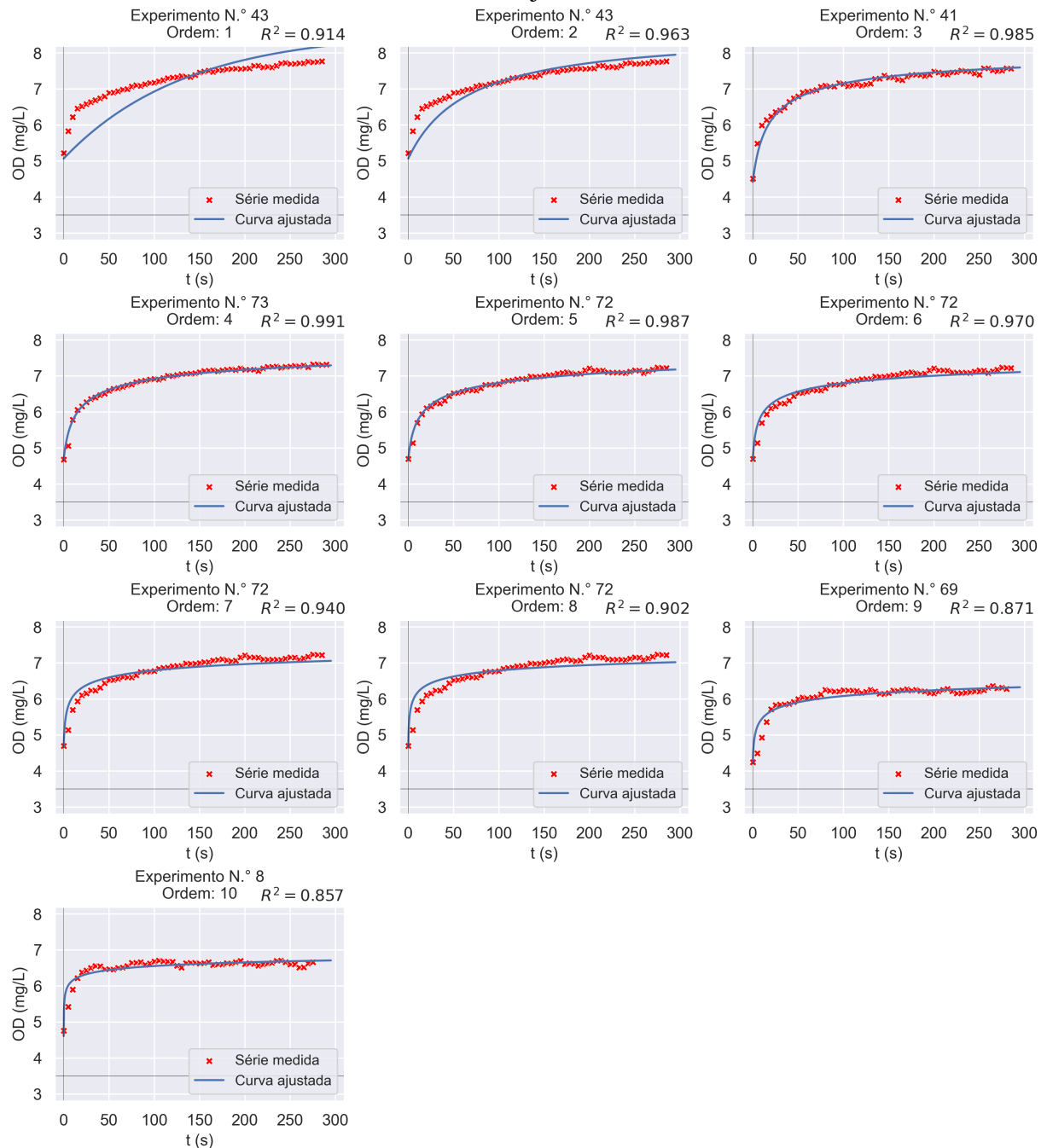
Os gráficos da Figura 12 são apenas 10% de todos os experimentos. O Apêndice A contém as Figuras que apresentam todos os 99 gráficos correspondente os experimentos.

## 4.2 Ajustes aos modelos de reação

As Figuras 14 e 15 contêm dez gráficos cada, escolhidos de forma a demonstrar, para cada ordem de 1 à 10, as séries temporais que obtiveram os melhores (Figura 14) e piores ajustes (Figura 15) às Equações 3.4 e 3.5, quantificados a partir do quadrado do coeficiente de

correlação de *Pearson* entre os valores medidos e os seus correspondentes dos modelos ajustados. Ajuste por mínimos quadrados não-lineares foi executado.

Figura 14 – Gráficos das dez séries temporais de OD ajustadas nos modelos de cinética de ordens 1 à 10 com as maiores métricas de ajuste



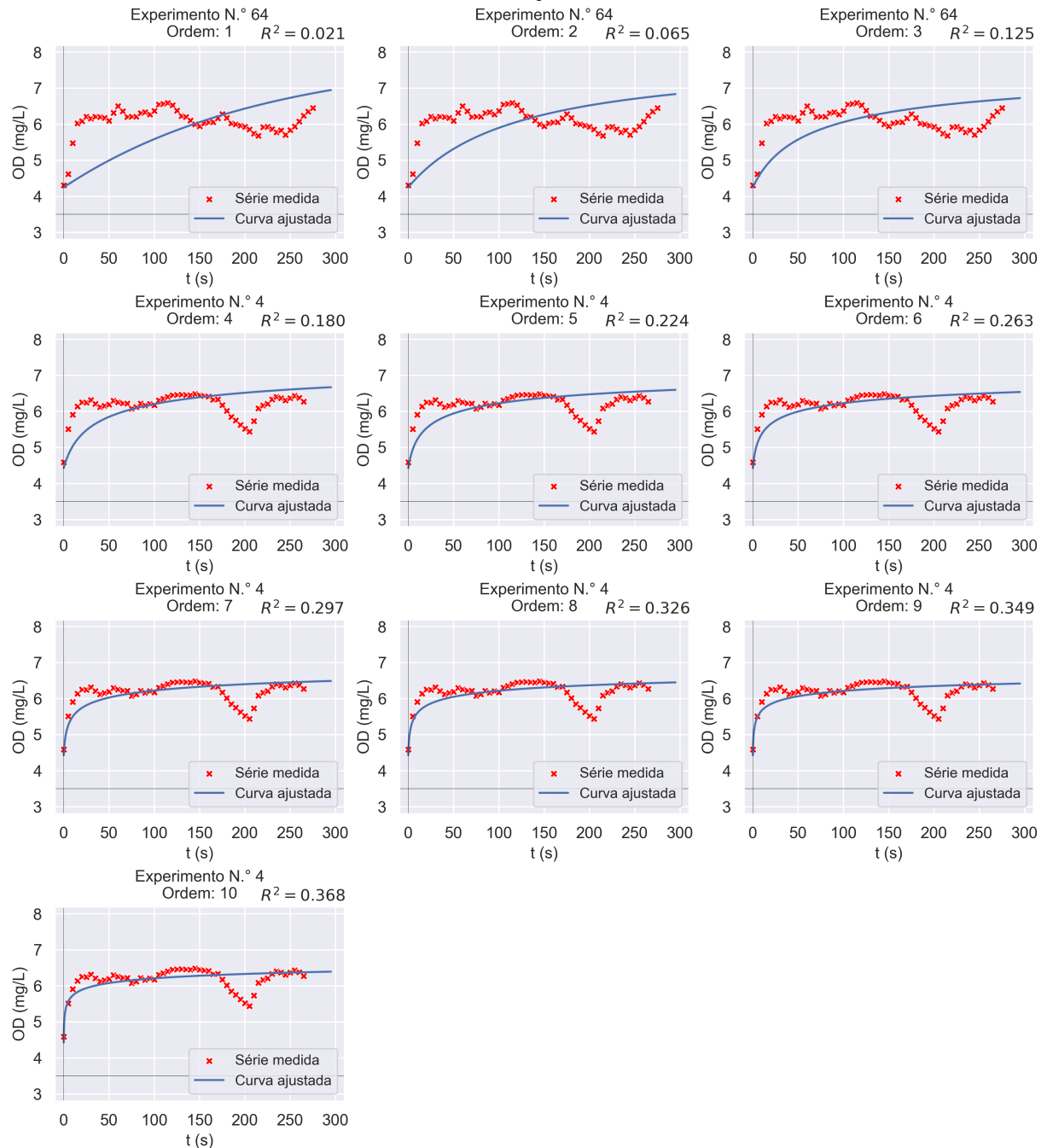
Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

A Figura 16 reúne os valores da métrica de ajuste de todos os experimentos e em cada ordem, possibilitando a sua comparação. Juntamente às Figuras 14 e 15, nota-se como as equações de ordem superior à teórica obtiveram ajustes mais satisfatórios. A partir da ordem

4, entretanto, não houve mais incrementos significantes do valor mediano, do valor mínimo, e houve decréscimo do valor máximo da métrica de ajuste. Para o treinamento dos modelos de ML, portanto, as ordens consideradas para a variável de saída  $k_2$  foram de 1 à 4.

Figura 15 – Gráficos das dez séries temporais de OD ajustadas nos modelos de cinética de ordens 1 à 10 com as menores métricas de ajuste

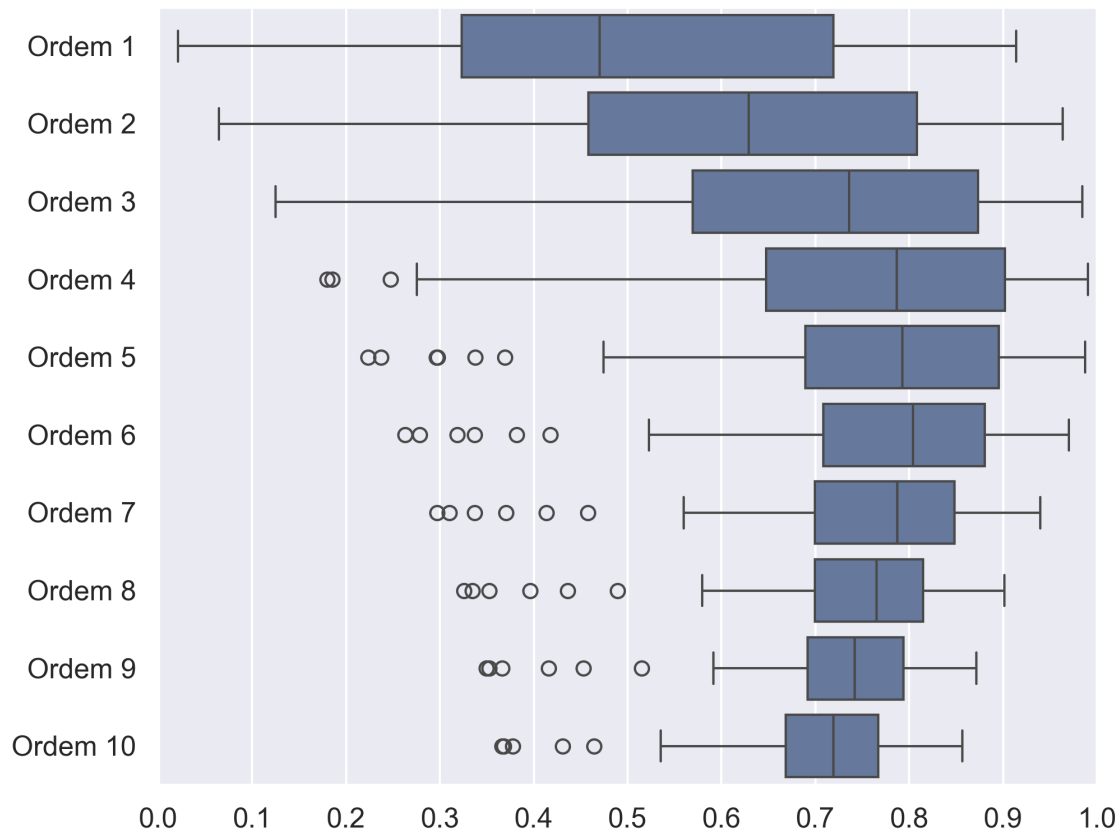


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

A Tabela 3 contém uma descrição estatística dos valores de cada possível saída ( $k_2$ ) nas ordens citadas anteriormente a serem consideradas aos modelos de ML. Nota-se que, da

Figura 16 – Gráfico de boxplots representando a distribuição das métricas de ajustes para cada ordem de 1 à 10



Fonte: Elaborada pelo autor;

Nota: A métrica de ajuste é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*.

mesma forma que a unidade de medida é alterada, a magnitude dos valores, para os mesmos dados medidos, também se altera. Nota-se também como a ordem 2, relativamente falando, apresentou valores mais uniformes e se dispersaram menos, evidenciado pelos menores valores de coeficiente de variação e de assimetria.

Tabela 3 – Estatísticas e descrição das variáveis de saída

Variável	<sup>1</sup> U.M	Média	<sup>1</sup> D.P	<sup>1</sup> C.V	<sup>1</sup> C.A	<sup>1</sup> Mín.	<sup>1</sup> Máx.	<sup>1</sup> Amp.
$k_2$ (Ordem 1)	$\text{h}^{-1}$	35.58	26.03	0.73	3.12	9.24	185.74	176.49
$k_2$ (Ordem 2)	$(\text{mg/L})^{-1} \text{h}^{-1}$	21.36	13.18	0.62	1.20	3.62	71.99	68.37
$k_2$ (Ordem 3)	$(\text{mg/L})^{-2} \text{h}^{-1}$	13.49	9.71	0.72	1.24	1.40	50.07	48.67
$k_2$ (Ordem 4)	$(\text{mg/L})^{-3} \text{h}^{-1}$	8.87	7.76	0.88	1.65	0.54	40.83	40.29

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: **U.M**: unidade de medida; **D.P**: desvio padrão da amostra; **C.V**: coeficiente de variação; **C.A**: coeficiente de assimetria; **Mín.**: valor mínimo; **Máx.**: valor máximo; **Amp.**: amplitude total.

Os gráficos das Figuras 14 e 15 representam apenas 2% de todos os ajustes. O Apêndice B contém as Figuras que apresentam todos os ajustes a cada uma das 99 séries de OD (990 gráficos).

### 4.3 Performance dos modelos de aprendizado de máquina

A Tabela 4 apresenta uma descrição geral do conjunto de dados final, utilizado no treinamento, otimização e seleção dos modelos de ML. Não há valores faltantes; do total de oito preditores, apenas o tipo de bocal ( $t_{dif}$ ) é categórico. Quatro possibilidades de variável de saída (ordens 1 à 4) foram utilizadas.

Tabela 4 – Descrição do conjunto de dados

Parâmetro	Descrição
Quantidade de amostras	99
Total de preditores	8
Preditores numéricos	7
Preditores categóricos	1
Número de possíveis saídas	4
Valores faltantes	0

Fonte: Elaborada pelo autor.

As Tabelas 5 à 8 apresentam os resultados das métricas de performance dos modelos, calculadas como a média dos dez valores obtidos em cada iteração do processo de CV externo. Os valores em destaque representam as melhores métricas.

Considerando a variável de saída de ordem 1, a Tabela 5 mostra como não houve modelos com bons ajustes. Com exceção ao SVR, nenhum conseguiu capturar a dinâmica de  $k_2$  em função das variáveis de entrada utilizadas, fato evidenciado pelos valores negativos de  $r^2$ , que implicam ajustes inferiores à média das saídas em termos de proporção de variância (Chicco *et al.*, 2021). O modelo SVR, contudo, apresentou  $r^2 > 0$  e teve outras métricas com os melhores valores, sendo utilizado como o modelo representativo para esta ordem de variável de saída.

A partir da ordem 2 não houve modelos com  $r^2 < 0$ . Tratando-se dessa em específico, nota-se que os modelos de árvore (RT, RF e GBM) e a rede neural MLP apresentaram as melhores métricas (Tabela 6). Estes modelos são aptos a capturar relações não-lineares e efeitos de interações entre as variáveis, o que aparenta ser o caso neste estudo. Como consequência, era esperado que os modelos lineares não pudessem aprender estas relações satisfatoriamente, fato que se confirmou a partir das menores métricas. Houve, entretanto, uma melhora sutil a partir da

Tabela 5 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída  $k_2$  de ordem 1

Modelo	$r^2$	<sup>1</sup> RMSE	<sup>1</sup> MAE	MAPE	RMSLE
OLR	-0.470	21.88	15.70	0.486	—
GLMgm	-0.071	20.72	13.90	0.380	0.422
ELNET	-0.561	22.73	16.17	0.513	—
RT	-0.600	20.90	13.25	0.384	0.403
RF	-0.183	21.18	13.18	0.449	0.462
GBM	-0.628	22.52	13.74	0.467	0.467
MLP	-0.780	21.52	13.27	0.423	—
<b>SVR</b>	<b>0.190</b>	<b>20.34</b>	<b>11.21</b>	<b>0.272</b>	<b>0.389</b>

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: Valores com a unidade do  $k_2$  de ordem 1:  $\text{h}^{-1}$ .

adição da regularização ELNET e uma melhora mais significativa a partir da assunção de erro com distribuição Gama (GLMgm) em comparação ao modelo OLR.

Tabela 6 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída  $k_2$  de ordem 2

Modelo	$r^2$	<sup>1</sup> RMSE	<sup>1</sup> MAE	MAPE	RMSLE
OLR	0.148	10.62	8.19	0.481	—
GLMgm	0.229	10.44	7.89	0.409	0.423
ELNET	0.152	10.62	8.19	0.481	—
<b>RT</b>	<b>0.668</b>	<b>7.00</b>	<b>4.81</b>	<b>0.200</b>	<b>0.268</b>
RF	0.470	8.49	5.98	0.399	0.378
GBM	0.471	8.53	6.36	0.425	0.390
MLP	0.506	8.07	5.98	0.299	0.305
SVR	0.347	9.56	6.52	0.343	—

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: Valores com a unidade do  $k_2$  de ordem 2:  $\text{h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$ .

É notável como o modelo RT obteve as melhores métricas, ultrapassando os modelos *ensemble* (RF e GBM) e conseguindo explicar cerca de 2/3 da variabilidade dos dados. Como explicado na seção 2.3.2.1, a construção dos modelos *ensemble* é feita de modo a superar, no geral, a performance de uma árvore de decisão singular (Hastie *et al.*, 2017; Nunes Carvalho *et al.*, 2022), o que era também esperado. Apesar disso, árvores singulares podem ter a sua performance superior em alguns casos (Ließ *et al.*, 2012; Youssef *et al.*, 2016; Ao *et al.*, 2019).

A consideração da variável de saída  $k_2$  com ordem 3 manteve as performances satisfatórias (Tabela 7). Em termos de variância explicada, com exceção ao MLP todos os modelos obtiveram métricas ligeiramente superiores aos modelos com ordem 2. Em termos de erros relativos (MAPE e RMSLE), entretanto, houve degradação considerável, que se acentuou ao considerar a ordem 4 (Tabela 8); houve piora também no coeficiente de determinação. Nestas ordens novamente os modelos baseados em árvores e lineares apresentaram as melhores e piores

métricas, respectivamente.

Tabela 7 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída  $k_2$  de ordem 3

Modelo	$r^2$	<sup>1</sup> RMSE	<sup>1</sup> MAE	MAPE	RMSLE
OLR	0.155	7.81	6.01	0.667	—
GLMgm	0.233	7.72	5.79	0.517	0.485
ELNET	0.158	7.82	6.01	0.667	—
<b>RT</b>	<b>0.685</b>	<b>4.99</b>	<b>3.54</b>	<b>0.278</b>	<b>0.314</b>
RF	0.476	6.24	4.55	0.595	0.460
GBM	0.485	6.17	4.77	0.604	0.475
MLP	0.178	7.73	5.45	0.542	0.497
SVR	0.360	6.97	4.79	0.452	—

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: Valores com a unidade do  $k_2$  de ordem 3:  $\text{h}^{-1} (\text{mg/L})^{-2}$ .

Tabela 8 – Métricas de performance dos modelos considerando como variável de saída  $k_2$  de ordem 4

Modelo	$r^2$	<sup>1</sup> RMSE	<sup>1</sup> MAE	MAPE	RMSLE
OLR	0.077	6.37	4.83	1.035	—
GLMgm	0.177	6.30	4.57	0.684	0.553
ELNET	0.081	6.37	4.82	1.033	—
<b>RT</b>	<b>0.412</b>	<b>5.10</b>	<b>3.53</b>	<b>0.454</b>	<b>0.420</b>
RF	0.326	5.36	3.79	0.989	0.558
GBM	0.241	5.80	4.38	1.161	0.659
MLP	0.171	5.67	3.92	0.612	—
SVR	0.332	5.72	3.73	0.603	—

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: Valores com a unidade do  $k_2$  de ordem 4:  $\text{h}^{-1} (\text{mg/L})^{-3}$ .

Com exceção aos modelos considerando a ordem 1, o modelo RT obteve as melhores performances. A Tabela 9 compara estes valores trazendo apenas as métricas que independem da magnitude da saída, que diminui conforme a ordem aumenta. Os valores do MAPE e RMSLE foram consideravelmente melhores para a ordem 2, que também obteve um valor alto de  $r^2$  em comparação às outras ordens, próximo ao valor obtido para ordem 3, que foi levemente superior.

A consideração de ordens 2 e 3 levou aos modelos mais acurados relativamente, com destaque para a ordem 2, superior em duas das três métricas e com  $r^2$  satisfatório, próximo ao melhor valor. De fato, como mostrado na Figura 4, a ocorrência simultânea de diferentes mecanismos de transferência de OD sugere uma ineficiência dos modelos de ordem 1 representados nas Equações 3.1 e 3.3 na captura da dinâmica do processo como um todo. O estudo de McWhirter e Hutter (1989) foi pioneiro na crítica a estes modelos, alegando uma simplificação exagerada do processo. Em Lima Neto *et al.* (2008a) um mecanismo é destacado como tendo



Tabela 9 – Comparação entre os modelos com melhores métricas para cada variável de saída

Melhor modelo	Ordem de $k_2$	$r^2$	MAPE	RMSLE
SVR	1	0.190	0.272	0.389
<b>RT</b>	<b>2</b>	0.668	<b>0.200</b>	<b>0.268</b>
RT	3	<b>0.685</b>	0.278	0.314
RT	4	0.412	0.454	0.420

Fonte: Elaborada pelo autor.

influência no processo: a transferência durante a formação de bolhas devido à injeção de gás (processo **1** na Figura 4). McWhirter e Hutter (1989) propôs a consideração separada dos efeitos de transferência pelo contato das bolhas com a água durante a ascensão da pluma e pelo fluxo giratório gerado na superfície devido à agitação causada pela pluma (processos **2** e **4** na Figura 4), com DeMoyer *et al.* (2003) e Schierholz *et al.* (2006) reforçando seu estudo implementando modelos baseados nestas mesmas considerações. Outro mecanismo atualmente bastante estudado e que contribui para a ideia da necessidade de análises mais sofisticadas é o chamado “efeito de fonte” (processo **3** na Figura 4), que se forma a partir do colapso das bolhas quando a pluma atinge a superfície, elevando esta região em um formato curvo, que passa a atuar como uma fonte deste gás, e é um mecanismo que vem sendo amplamente estudado em situações envolvendo vazamento de gás em dutos de transporte submarinos (Aprin *et al.*, 2019; Aprin *et al.*, 2020; Li *et al.*, 2023; Wang *et al.*, 2024a; Wang *et al.*, 2024b), situações no qual, sob cenário de formação de plumas de bolhas em larga escala, os autores relatam intensa ocorrência do efeito de fonte, o que sugere a sua relevância também em escalas menores.

Diante da complexidade do processo, com quatro mecanismos atuando concomitantemente, é razoável esperar que a sofisticação do modelo das Equações 3.1 e 3.3, que se deu neste trabalho através da consideração de ordens superiores (Equações 3.4 e 3.5), implicasse resultados mais satisfatórios. Apoiado nesta discussão, na ocorrência das melhores métricas e acrescentado também o fato de ser a ordem mais próxima à teórica, as próximas análises serão realizadas apenas para ordem 2. Os hiperparâmetros ótimos dos modelos de ML finais utilizando  $k_2$  desta ordem estão apresentados na Tabela 10.

A Figura 17 exibe gráficos de dispersão para os modelos treinados e otimizados na ordem 2, comparando valores observados e preditos. Ressalta-se o uso de todas as predições em cada iteração do CV externo. Quanto maior a proximidade dos pontos à reta preta, melhor o ajuste dos modelos, de modo que é possível confirmar visualmente a superioridade

Tabela 10 – Hiperparâmetros otimizados para os modelos finais considerando  $k_2$  de ordem 2

Modelo	Hiperparâmetros	Valores finais
ELNET	$\alpha$	$4.63 \times 10^{-4}$
	$l_{1r}$	0.0956
RT	ccp	$3.40 \times 10^{-5}$
	Mínimo de amostras por nó	6
RF	Número de árvores	20
	$m_{try}$ (taxa)	0.53
GBM	Número de árvores	700
	Taxa de aprendizado	$7.37 \times 10^{-2}$
	Profundidade máxima das árvores	1
	Mínimo de amostras por nó	16
<sup>1</sup> MLP	Largura da rede	30
	Profundidade da rede	3
SVR ( <i>kernel</i> polinomial)	$C_{svr}$	8.16
	$\epsilon_{svr}$	0.838
	$d$	2
	Termo independente na função <i>kernel</i>	8.77

Fonte: Elaborada pelo autor;

<sup>1</sup>: A arquitetura final do melhor MLP foi (8, 30, 30, 30, 1), ou seja, uma rede profunda de 3 camadas ocultas, todas com 30 neurônios.

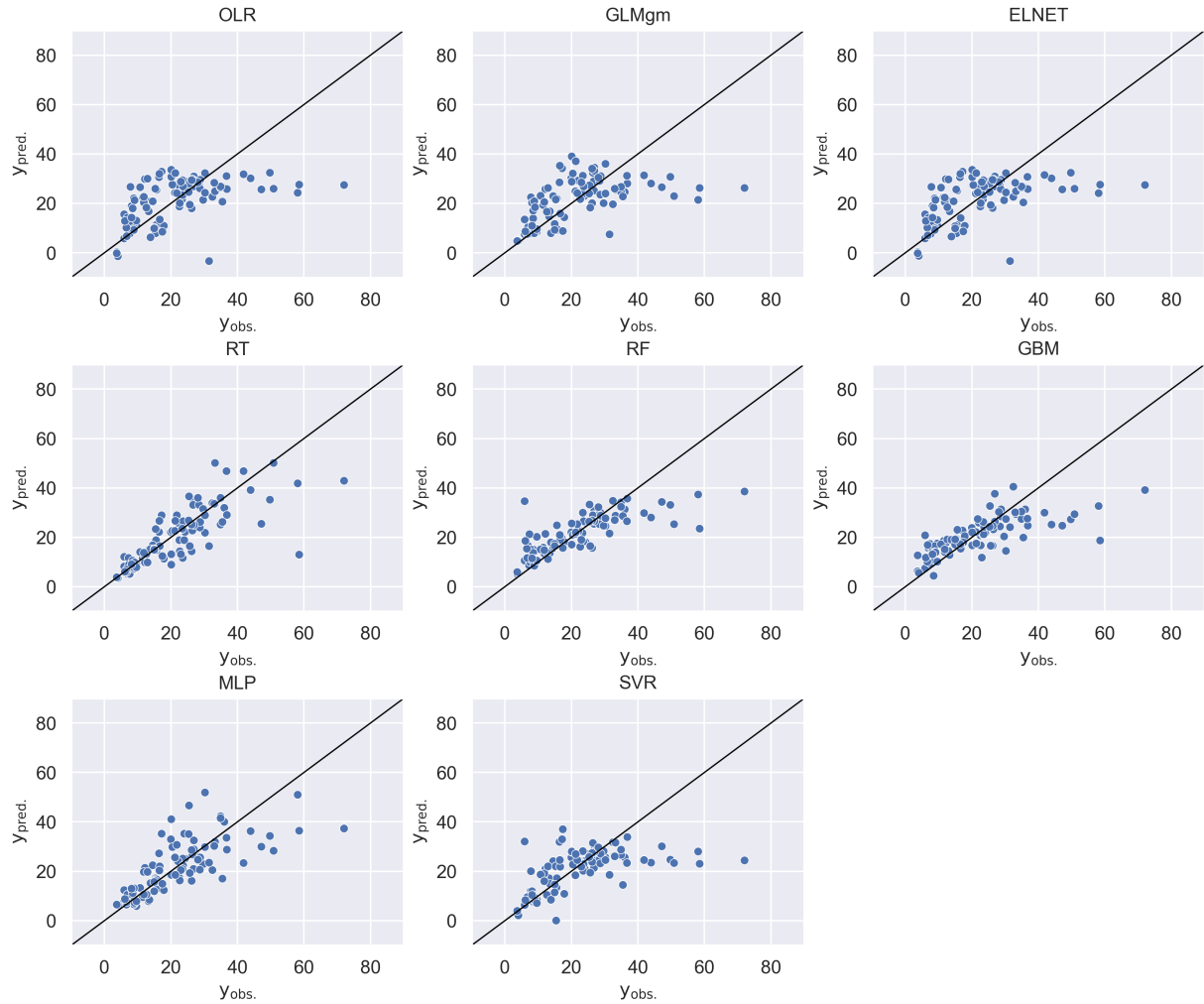
dos modelos de árvores e a maior dispersão dos modelos lineares em torno da reta de ajuste perfeito, inclusive retornando valores negativos. Nota-se que **i)** nenhum modelo predisse adequadamente os valores mais altos ( $y_{obs.} > 40 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$ ); **ii)** os modelos RT e MLP obtiveram ajustes superiores nos valores menores ( $y_{obs.} \lesssim 15 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$ ) quando comparados aos demais, e **iii)** os modelos RF e GBM obtiveram maior acurácia na região intermediária ( $15 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1} \lesssim y_{obs.} < 40 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$ ).

#### 4.4 Importância das variáveis

Para comparar a influência das variáveis na predição de  $k_2$  entre os diferentes modelos, as medidas foram extraídas em termos percentuais, de modo que a soma das importâncias tenha resultado unitário.

As Figuras 18 e 19 exibem a importância relativa das variáveis a partir dos diferentes modelos. Foram excluídos desta análise os modelos SVR (*kernel* polinomial) e MLP, chamados modelos *black-box* (Guidotti *et al.*, 2018; Hassija *et al.*, 2024) por não fornecerem de forma clara o funcionamento por trás da produção dos seus resultados, necessitando de técnicas de Inteligência Artificial Explicável (*Explainable Artificial Intelligence*) (XAI), por exemplo

Figura 17 – Gráficos de dispersão para os modelos utilizados neste estudo e com variável de saída  $k_2$  de ordem 2.



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: Uma maior proximidade à linha preta representa um maior poder de predição do modelo.

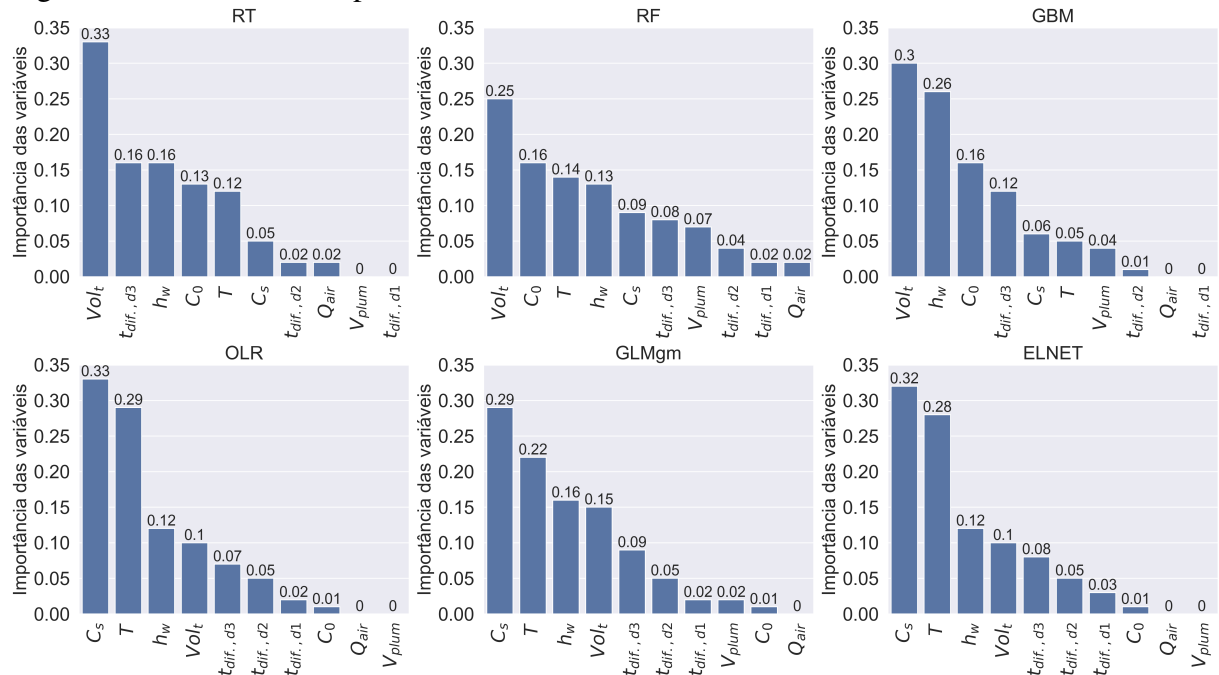
(Hassija *et al.*, 2024) para uma melhor compreensão, o que está fora do escopo deste estudo.

Nos modelos de árvores foi medida a importância de impureza, calculada como a soma das reduções deste critério (soma dos resíduos quadráticos no caso de regressões) em todos os nós, normalizado pelo número de árvores no caso dos modelos *ensemble* (Nembrini *et al.*, 2018). Para os modelos lineares foi contabilizado o valor do coeficiente associado a cada variável (Nunes Carvalho *et al.*, 2022) relativo à soma dos coeficientes, uma vez que as variáveis foram escalonadas e centralizadas no pré-processamento.

A Figura 18 apresenta os valores de importância das variáveis para os seis modelos utilizados na análise de forma individual e em ordem de influência, enquanto a Figura 19 agrupa estes valores em modelos de desempenhos semelhantes e no total, possibilitando um olhar mais geral.

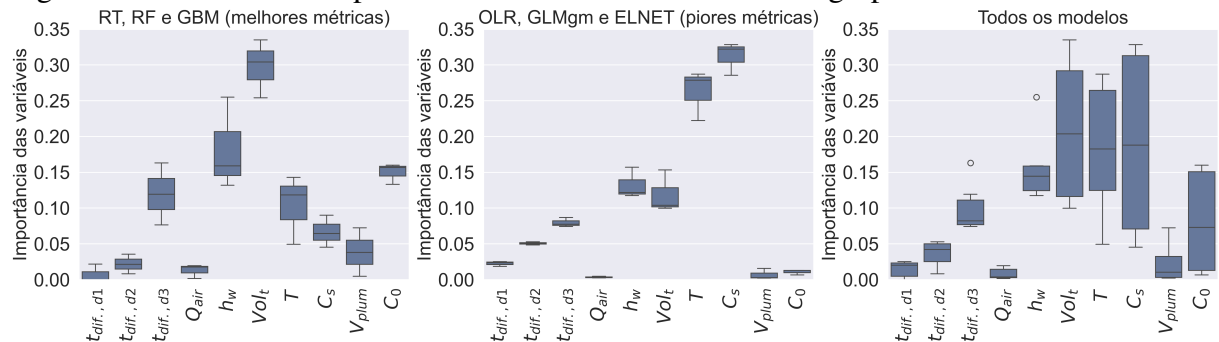
A variável  $Vol_t$  é consenso para os modelos de árvores como a mais influente,

Figura 18 – Gráficos da importância das variáveis em cada modelo, de forma individual



Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 19 – Gráficos da importância das variáveis com valores agrupados



Fonte: Elaborada pelo autor.

enquanto para os modelos lineares essa é a  $C_s$ . Em ambos os tipos de modelos ela tem sempre uma importância próxima à da temperatura ( $T$ ), o que pode ser explicado pela relação direta entre elas; os modelos não-lineares, contudo, demonstram uma preferência ligeiramente maior à  $T$ .

A baixa importância das variáveis  $Q_{air}$ ,  $V_{plum}$  e das variáveis *dummy* relacionadas ao tipo de difusor é consenso entre todos os modelos. A variável  $t_{dif.,d3}$  (codificação da presença ou não de pedras porosas), contudo, demonstrou importância mediana, o que pode ser explicado pelo fato do formato e quantidade das bolhas mudarem bruscamente com a utilização ou não das pedras, ao passo que a mudança de pedras não parece ter tido efeito significativo.

Para a vazão de injeção de ar ( $Q_{air}$ ) era esperado uma influência mais alta. Em Lima Neto e Parente (2016) a vazão de injeção de gás foi variável que afetou significativamente

a hidrodinâmica das plumas de bolhas, modificando a forma como o gás era incorporado à água. Em Behzadipour *et al.* (2023), a vazão de injeção de ar foi estudada como objeto central, apresentando forte influência nas características das bolhas a distâncias a partir de 35% da altura da coluna d'água, o que impactaria em parte do processo de transferência durante a ascensão da pluma de bolhas, na intensidade do efeito de fonte e na transferência pela agitação da superfície (processos 2, 3 e 4 da Figura 4). Apesar disso, os valores variaram na análise de sensibilidade em Lima Neto e Parente (2016) na ordem de  $10^{-1} \text{ m}^3/\text{s}$ , enquanto neste estudo, na ordem de  $10^{-6} \text{ m}^3/\text{s}$  (100 000 vezes menor), o que pode significar que o intervalo de variabilidade dos valores não foi o suficiente para alterar a dinâmica da transferência de oxigênio.

Os modelos também concordaram sobre a significativa importância da variável  $h_w$ , comumente utilizada em estudos anteriores (Lima Neto *et al.*, 2007; Lima Neto; Parente, 2016; Lima; Lima Neto, 2018). Para os modelos de árvore ela foi a segunda mais influente nas previsões com variações na ordem de  $10^{-1} \text{ m}$ , o que colabora com a análise de sensibilidade em Lima Neto e Parente (2016), que a identificou como variável mais influente na hidrodinâmica das plumas, variando o seu valor na ordem de  $10^1 \text{ m}$  (100 vezes maior).

De modo geral, os modelos discordaram sobre as variáveis  $Vol_t$ ,  $T$ ,  $C_s$  e  $C_0$ . Concor-  
daram, entretanto, sobre a baixa importância das variáveis *dummy* do tipo de difusor,  $Q_{air}$ ,  $V_{plum}$  e sobre a importância mediana de  $h_w$ . Para as primeiras citadas é razoável ter uma maior atenção aos modelos de árvores, cujo potencial de explicação das variáveis foi consideravelmente maior em comparação aos lineares; esses concordaram que  $Vol_t$  foi a variável mais decisiva, seguida de  $h_w$ ,  $C_0$ ,  $T$  e  $C_s$ .

## 5 CONCLUSÕES

Neste estudo, o comportamento da transferência OD à água por plumas de bolhas formadas pela injeção de ar foi estudado a partir da predição do coeficiente de reaeração  $k_2$  em tanques de água utilizando modelos de ML.

Foram realizadas 99 repetições de um experimento em escala laboratorial a partir de diferentes configurações das variáveis de entrada: temperatura da água ( $T$ ), concentração de OD inicial ( $C_0$ ) e de saturação ( $C_s$ ), velocidade média do escoamento gerado pelas plumas de bolhas ( $V_{plum}$ ), vazão volumétrica de ar injetado ( $Q_{air}$ ), tipo de difusor ( $t_{dif}$ ), altura da coluna de água ( $h_w$ ) e o volume de água no tanque ( $Vol_t$ ).

As séries temporais de concentração de OD, medidas à cada cinco segundos em um intervalo total de 300 segundos, foram utilizadas no ajuste do coeficiente  $k_2$  considerando-se uma expansão às ordens superiores do modelo tradicional de ordem 1, que foi considerada como outra possibilidade de avanço, embasada na complexidade de um processo que envolve quatro mecanismos de transferência ocorrendo concomitantemente. Inicialmente, as ordens de 1 à 10 foram consideradas para o ajuste.

O conjunto de dados resultante foi utilizado em oito modelos de ML, que foram treinados e testados em um esquema de *k-fold CV* aninhado, tanto para otimização de hiperparâmetros (CV interno) quanto para seleção dos modelos (CV externo), no intuito de se minimizar o viés pela divisão do conjunto de dados em um cenário de quantidade média de dados (99 amostras). Após análise da qualidade do ajuste, os coeficientes  $k_2$  de ordens 1 à 4 foram utilizados como variável de saída, configurando quatro cenários de análise.

Os resultados sugerem um bom potencial da abordagem por ML e também da consideração de ordens superiores, como se objetivava ao início. A consideração das ordens 2 e 3 resultou nos modelos de ML com métricas mais satisfatórias, com destaque para o modelo RT com variável de saída de ordem 2, obtendo métricas  $r^2 = 0.668$ ,  $MAPE = 0.200$ ,  $RMSLE = 0.268$ ,  $RMSE = 7.00 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$  e  $MAE = 4.81 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$ , em um cenário de desvio padrão e coeficiente de variação de  $13.18 \text{ h}^{-1} (\text{mg/L})^{-1}$  e 0.62, respectivamente. Nenhum modelo de ordem 1 obteve resultados expressivos.

Conclui-se que as ordens superiores forneceram aos modelos melhores informações da dinâmica do processo do que a ordem 1, em especial a 2, que resultou nos melhores modelos, o que se justifica na ineficiência de uma reação de ordem 1 em explicar a complexidade de um fenômeno composto por quatro processos distintos de transferência de OD à água, como

exemplificados na Figura 4: **1)** durante a injeção de ar e formação de bolhas, **2)** durante a ascensão das bolhas, **3)** devido ao efeito de fonte que se forma na região onde as bolhas chegam, e **4)** devido ao escoamento na superfície da água pela agitação provocada pelas bolhas.

A partir dos modelos de árvore para coeficiente  $k_2$  de ordem 2, a análise de influência das variáveis concluiu baixa importância de  $Q_{air}$  e  $V_{plum}$ , também concordado pelos modelos lineares, o que pode se justificar pelos baixos valores utilizados, em comparação aos experimentos em outros estudos, insuficientes para influenciar de modo considerável nos valores do coeficiente, uma vez que são variáveis com importâncias normalmente reportadas como altas. As variáveis  $Vol_t$  e  $h_w$  foram concluídas como as mais influentes, seguidas de  $C_0$ ,  $T$  e  $C_s$ .

### 5.1 Sugestões para trabalhos futuros

Para aprimorar a utilização da abordagem com ML, sugere-se que estudos futuros realizem mais repetições dos experimentos, obtendo um conjunto com mais amostras, o que pode remover a necessidade de um esquema de CV externo. Mais amostras também implicarão maior diversidade dos valores nas condições das variáveis de entrada, levando a modelos ainda mais robustos.

Outro ponto de aprimoramento é a variação dos valores de vazão de injeção de ar ( $Q_{air}$ ) e da profundidade da coluna de água ( $h_w$ ) em intervalos mais próximos aos das escalas reais, comuns na literatura, no intuito de capturar a sua influência esperada aos modelos, o que também pode contribuir para a capacidade preditiva. Maiores valores de  $Q_{air}$  irão provocar maiores velocidades dos escoamentos superficiais decorrentes das plumas ( $V_{plum}$ ), o que pode trazer ao modelo também o potencial de influência que se espera desta variável, além de refletir, juntamente à nova magnitude de  $h_w$ , contextos de aplicabilidade direta a processos de interesse prático.

Recomenda-se também a experimentação de outros tipos de bocais, como os diferentes arranjos possíveis com múltiplos orifícios, colaborando para a análise de quais características nestes arranjos são mais determinantes.

## REFERÊNCIAS

AO, Y.; LI, H.; ZHU, L.; ALI, S.; YANG, Z. The linear random forest algorithm and its advantages in machine learning assisted logging regression modeling. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 174, p. 776–789, 2019. ISSN 0920-4105. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.petrol.2018.11.067>>.

APRIN, L.; LAURET, P.; HEYMES, F.; LOPEZ, C.; LE FLOCH, S. Experimental investigation on plume enlargement and fountain effect due to gas blowout in seawater. **Chemical Engineering Transactions**, AIDIC [2002-....], v. 77, 2019. Disponível em: <<https://hal.science/hal-02414482>>.

APRIN, L.; LAURET, P.; HEYMES, F.; LOPEZ, C.; PETRIE, F.; LE FLOCH, S. Experimental investigation of blowouts, characterization of fountain effect consequences at the sea surface. **Chemical Engineering Transactions**, AIDIC [2002-....], v. 82, p. 229–234, 2020. Disponível em: <<https://imt-mines-ales.hal.science/hal-02991443>>.

ARORA, J. S. Chapter 11 - more on numerical methods for unconstrained optimum design. In: ARORA, J. S. (Ed.). **Introduction to Optimum Design (Fourth Edition)**. Fourth edition. Boston: Academic Press, 2017. p. 455–509. ISBN 978-0-12-800806-5. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128008065000111>>.

ARORA, S.; KESHARI, A. K. Estimation of re-aeration coefficient using mlr for modelling water quality of rivers in urban environment. **Groundwater for Sustainable Development**, v. 7, p. 430–435, 2018. ISSN 2352-801X. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352801X17301133>>.

ARORA, S.; KESHARI, A. K. Simulation of re-aeration coefficient using anfis and arima models. In: **Groundwater and Water Quality: Hydraulics, Water Resources and Coastal Engineering**. Cham: Springer International Publishing, 2022. p. 53–69. ISBN 978-3-031-09551-1. Disponível em: <[https://doi.org/10.1007/978-3-031-09551-1\\_4](https://doi.org/10.1007/978-3-031-09551-1_4)>.

ARORA, S.; KESHARI, A. K. Implementing machine learning algorithm to model reaeration coefficient of urbanized rivers. **Environmental Modeling & Assessment**, Springer, v. 28, n. 4, p. 535–546, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10666-023-09895-0>>.

BEHZADIPOUR, A.; AZIMI, A. H. Hydrodynamic modifications in vertical bubble plumes by a grid-screen. **Chemical Engineering Science**, v. 282, p. 119307, 2023. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250923008631>>.

BEHZADIPOUR, A.; AZIMI, A. H.; LIMA NETO, I. E. Effect of grid-screen on bubble characteristics of vertically discharged bubble plumes. **Chemical Engineering Science**, v. 253, p. 117545, 2022. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250922001294>>.

BEHZADIPOUR, A.; AZIMI, A. H.; LIMA NETO, I. E. Effects of air discharge on bubble dynamics in vertically discharged bubble plumes. **Chemical Engineering Science**, v. 268, p. 118440, 2023. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250922010259>>.

BIESSEY, P.; BAYER, H.; THEßELING, C.; HILBRANDS, E.; GRÜNEWALD, M. Prediction of bubble sizes in bubble columns with machine learning methods.



**Chemie Ingenieur Technik**, v. 93, n. 12, p. 1968–1975, 2021. Disponível em: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cite.202100157>>.

BISHOP, C. M. **Pattern Recognition and Machine Learning**. New York: Springer, 2006.

BREIMAN, L. Random forests. **Machine Learning**, Springer, v. 45, p. 5–32, 2001. Disponível em: <<https://doi.org/10.1023/A:1010933404324>>.

CHICCO, D.; WARRENS, M. J.; JURMAN, G. The coefficient of determination r-squared is more informative than smape, mae, mape, mse and rmse in regression analysis evaluation. **PeerJ Computer Science**, PeerJ Inc., v. 7, p. e623, 2021. Disponível em: <<https://doi.org/10.7717/peerj-cs.623>>.

DEMOYER, C. D.; SCHIERHOLZ, E. L.; GULLIVER, J. S.; WILHELMS, S. C. Impact of bubble and free surface oxygen transfer on diffused aeration systems. **Water Research**, v. 37, n. 8, p. 1890–1904, 2003. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135402005663>>.

DHAKANE, V.; MISHRA, P.; YADAV, A. Computational fluid dynamics (cfd)- deep neural network (dnn) model to predict hydrodynamic parameters in rectangular and cylindrical bubble columns. **Digital Chemical Engineering**, v. 13, p. 100185, 2024. ISSN 2772-5081. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2772508124000474>>.

FAYOLLE, Y.; COCKX, A.; GILLOT, S.; ROUSTAN, M.; HÉDUIT, A. Oxygen transfer prediction in aeration tanks using cfd. **Chemical Engineering Science**, v. 62, n. 24, p. 7163–7171, 2007. ISSN 0009-2509. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009250907006367>>.

FRIEDMAN, J. H. Greedy function approximation: A gradient boosting machine. **The Annals of Statistics**, Institute of Mathematical Statistics, v. 29, n. 5, p. 1189–1232, 2001. ISSN 00905364, 21688966. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/2699986>>.

GOODFELLOW, I.; BENGIO, Y.; COURVILLE, A. **Deep Learning**. Cambridge: The MIT Press, 2016. Disponível em: <<http://www.deeplearningbook.org>>.

GUIDOTTI, R.; MONREALE, A.; RUGGIERI, S.; TURINI, F.; GIANNOTTI, F.; PEDRESCHI, D. A survey of methods for explaining black box models. **ACM Computing Surveys (CSUR)**, Association for Computing Machinery, New York, NY, USA, v. 51, n. 5, ago. 2018. ISSN 0360-0300. Disponível em: <<https://doi.org/10.1145/3236009>>.

GULLIVER, J. S. **Introduction to chemical transport in the environment**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/CBO9780511808944>>.

HASSIJA, V.; CHAMOLA, V.; MAHAPATRA, A.; SINGAL, A.; GOEL, D.; HUANG, K.; SCARDAPANE, S.; SPINELLI, I.; MAHMUD, M.; HUSSAIN, A. Interpreting black-box models: a review on explainable artificial intelligence. **Cognitive Computation**, Springer, v. 16, n. 1, p. 45–74, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s12559-023-10179-8>>.

HASTIE, T.; TIBSHIRANI, R.; FRIEDMAN, J. **The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction**. [S.l.]: Springer, 2017.

KALBURGI, P. B.; JHA, R.; OJHA, C. S. P.; DESHANNAVAR, U. B. Evaluation of re-aeration equations for river ghataprabha, karnataka, india and development of refined equation.

**Environmental Technology**, IAHR Website, v. 36, n. 1, p. 79–85, 2015. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/09593330.2014.937770>>.

KUHN, M.; JOHNSON, K. **Applied predictive modeling**. [S.l.]: Springer, 2014.

LI, Q.; ZHANG, R.; XU, H.; YE, H. Experimental investigation on diffusion and fountain behavior of bubble plumes in quiescent water. **Physics of Fluids**, AIP Publishing, v. 35, n. 12, p. 123314, 2023. Disponível em: <<https://doi.org/10.1063/5.0177354>>.

LIASHCHYNSKYI, Petro; LIASHCHYNSKYI, Pavlo. Grid search, random search, genetic algorithm: a big comparison for nas. **arXiv:1912.06059 preprint**, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.48550/arXiv.1912.06059>>.

LIEß, M.; GLASER, B.; HUWE, B. Uncertainty in the spatial prediction of soil texture: Comparison of regression tree and random forest models. **Geoderma**, v. 170, p. 70–79, 2012. ISSN 0016-7061. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0016706111002953>>.

LIMA, D. D.; LIMA NETO, I. E. Effect of nozzle design on bubbly jet entrainment and oxygen transfer efficiency. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 144, n. 8, p. 06018010, 2018. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HY.1943-7900.0001493](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HY.1943-7900.0001493)>.

LIMA NETO, I. E. Bubble plume modelling with new functional relationships. **Journal of Hydraulic Research**, IAHR Website, v. 50, n. 1, p. 134–137, 2012. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00221686.2011.651278>>.

LIMA NETO, I. E. Modeling the liquid volume flux in bubbly jets using a simple integral approach. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 138, n. 2, p. 210–215, 2012. Disponível em: <<https://ascelibrary.org/doi/abs/10.1061/%28ASCE%29HY.1943-7900.0000499>>.

LIMA NETO, I. E.; CARDOSO, S. S. S.; WOODS, A. W. On mixing a density interface by a bubble plume. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge University Press, v. 802, p. R3, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1017/jfm.2016.454>>.

LIMA NETO, I. E.; PARENTE, P. A. B. Influence of mass transfer on bubble plume hydrodynamics. **Anais da Academia Brasileira de Ciências**, SciELO Brasil, v. 88, n. 1, p. 411–422, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1590/0001-3765201520140453>>.

LIMA NETO, I. E.; ZHU, D. Z.; RAJARATNAM, N. Air injection in water with different nozzles. **Journal of Environmental Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 134, n. 4, p. 283–294, 2008. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2008\)134:4\(283\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2008)134:4(283))>.

LIMA NETO, I. E.; ZHU, D. Z.; RAJARATNAM, N. Effect of tank size and geometry on the flow induced by circular bubble plumes and water jets. **Journal of Hydraulic Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 134, n. 6, p. 833–842, 2008. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9429\(2008\)134:6\(833\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(2008)134:6(833))>.

LIMA NETO, I. E.; ZHU, D. Z.; RAJARATNAM, N. Horizontal injection of gas-liquid mixtures in a water tank. **Journal of Hydraulic Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 134, n. 12, p. 1722–1731, 2008. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9429\(2008\)134:12\(1722\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(2008)134:12(1722))>.

LIMA NETO, I. E.; ZHU, D. Z.; RAJARATNAM, N.; YU, T.; SPAFFORD, M.; MCEACHERN, P. Dissolved oxygen downstream of an effluent outfall in an ice-covered river: Natural and artificial aeration. **Journal of Environmental Engineering**, American Society of Civil Engineers, v. 133, n. 11, p. 1051–1060, 2007. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2007\)133:11\(1051\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2007)133:11(1051))>.

LIU, Z.; WANG, Y.; VAIDYA, S.; RUEHLE, F.; HALVERSON, J.; SOLJAČIĆ, M.; HOU, T. Y.; TEGMARK, M. KAN: Kolmogorov-Arnold Networks. **arXiv:2404.19756 preprint**, 2024. Disponível em: <<https://doi.org/10.48550/arXiv.2404.19756>>.

LYU, T.; WU, Y.; ZHANG, Y.; FAN, W.; WU, S.; MORTIMER, R. J.; PAN, G. Nanobubble aeration enhanced wastewater treatment and bioenergy generation in constructed wetlands coupled with microbial fuel cells. **Science of The Total Environment**, v. 895, p. 165131, 2023. ISSN 0048-9697. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969723037543>>.

MCWHIRTER, J. R.; HUTTER, J. C. Improved oxygen mass transfer modeling for diffused/subsurface aeration systems. **AIChE Journal**, v. 35, n. 9, p. 1527–1534, 1989. Disponível em: <<https://aiche.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/aic.690350913>>.

MOURA, D. S.; LIMA NETO, I. E.; CLEMENTE, A.; OLIVEIRA, S.; PESTANA, C. J.; APARECIDA DE MELO, M.; CAPELO-NETO, J. Modeling phosphorus exchange between bottom sediment and water in tropical semiarid reservoirs. **Chemosphere**, v. 246, p. 125686, 2020. ISSN 0045-6535. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045653519329261>>.

MUELLER, J.; BOYLE, W. C.; POPEL, H. J. **Aeration: Principles and Practice**. [S.l.]: CRC press, 2002. Disponível em: <<https://doi.org/10.1201/9781420010343>>.

NAJAFABADI, M. M.; KHOSHGOFTAAR, T. M.; VILLANUSTRE, F.; HOLT, J. Large-scale distributed L-BFGS. **Journal of Big Data**, Springer, v. 4, n. 1, p. 22, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1186/s40537-017-0084-5>>.

NELDER, J. A.; WEDDERBURN, R. W. M. Generalized linear models. **Royal Statistical Society. Journal. Series A: General**, v. 135, n. 3, p. 370–384, 1972. ISSN 0035-9238. Disponível em: <<https://doi.org/10.2307/2344614>>.

NEMBRINI, S.; KÖNIG, I. R.; WRIGHT, M. N. The revival of the gini importance? **Bioinformatics**, v. 34, n. 21, p. 3711–3718, 05 2018. ISSN 1367-4803. Disponível em: <<https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bty373>>.

NUNES CARVALHO, T. M.; LIMA NETO, I. E.; SOUZA FILHO, F. de A. de. Uncovering the influence of hydrological and climate variables in chlorophyll-a concentration in tropical reservoirs with machine learning. **Environmental Science and Pollution Research**, Springer, v. 29, n. 49, p. 74967–74982, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11356-022-21168-z>>.

PACHECO, C. H. A.; LIMA NETO, I. E. Effect of artificial circulation on the removal kinetics of cyanobacteria in a hypereutrophic shallow lake. **Journal of Environmental Engineering**, v. 143, n. 12, p. 06017010, 2017. Disponível em: <<https://ascelibrary.org/doi/abs/10.1061/%28ASCE%29EE.1943-7870.0001289>>.

PRINCE, S. J. D. **Understanding Deep Learning**. Cambridge: The MIT Press, 2023. Disponível em: <<http://udlbook.com>>.

SCHIERHOLZ, E. L.; GULLIVER, J. S.; WILHELMS, S. C.; HENNEMAN, H. E. Gas transfer from air diffusers. **Water Research**, v. 40, n. 5, p. 1018–1026, 2006. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135405007505>>.

SOUZA INÁCIO GONÇALVES, J. C. de; SILVEIRA, A.; JÚNIOR, G. B. L.; LUZ, M. S. da; SIMÕES, A. L. A. Reaeration coefficient estimate: new parameter for predictive equations. **Water, Air, & Soil Pollution**, Springer, v. 228, p. 1–10, 2017. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s11270-017-3491-5>>.

STREETER, H. W.; PHELPS, E. B. A study of the pollution and natural purification of the ohio river. **Public Health Service**, USA Public Health Bulletin, Washington DC, n. 148, 1925.

WANG, H.; JIA, Y.; LIU, X.; LIU, J.; WANG, K.; JIANG, J.; XU, H.; TANG, J.; SUN, C. Study on the fountain effect of the bubble plume formed by submarine gas pipeline leakage. **Frontiers in Marine Science**, v. 11, 2024b. ISSN 2296-7745. Disponível em: <<https://www.frontiersin.org/journals/marine-science/articles/10.3389/fmars.2024.1402784>>.

WANG, Q.; DING, L.; XUE, Z.; CHEN, T.; PAN, X.; SHORT, M. Bubble plume dispersion from underwater gas leakage: An experimental and dimensionless modelling study. **Applied Ocean Research**, v. 153, p. 104305, 2024a. ISSN 0141-1187. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141118724004267>>.

YE, Xin-wei; ZHOU, Hao-jie; SHAO, Dong-dong; NIU, Xiao-jing. Experimental study of non-uniform bubbles in a plume. **Journal of Hydrodynamics**, Springer, v. 34, n. 1, p. 116–124, 2022. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s42241-022-0012-9>>.

YOUSSEF, A. M.; POURGHASEMI, H. R.; POURTAGHI, Z. S.; AL-KATHEERI, M. M. Landslide susceptibility mapping using random forest, boosted regression tree, classification and regression tree, and general linear models and comparison of their performance at wadi tayyah basin, asir region, saudi arabia. **Landslides**, Springer, v. 13, n. 5, p. 839–856, 2016. Disponível em: <<https://doi.org/10.1007/s10346-015-0614-1>>.

ZHANG, H.; YIN, Z.; CHEN, M.; ZHANG, W. Experiment on bubble characteristics of turbulent bubbly jets in pipe crossflow. **Ocean Engineering**, v. 271, p. 113782, 2023. ISSN 0029-8018. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002980182300166X>>.

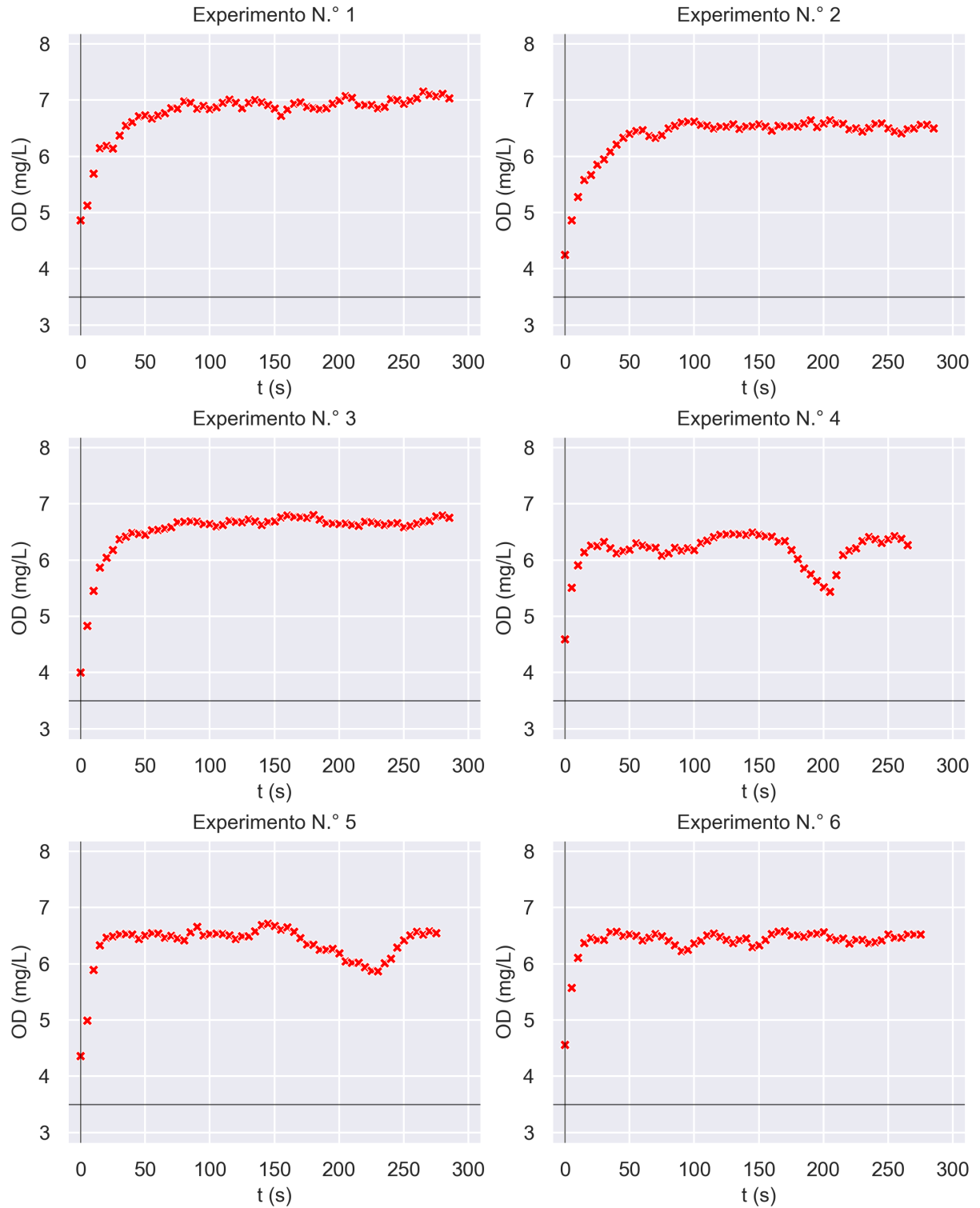
ZHANG, W.; ZHU, D. Z. Bubble characteristics of air-water bubbly jets in crossflow. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 55, p. 156–171, 2013. ISSN 0301-9322. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301932213000761>>.

ZHANG, W.; ZHU, D. Z. Trajectories of air-water bubbly jets in crossflows. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 140, n. 7, p. 06014011, 2014. Disponível em: <[https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)HY.1943-7900.0000886](https://doi.org/10.1061/(ASCE)HY.1943-7900.0000886)>.

ZOU, H.; HASTIE, T. Regularization and variable selection via the elastic net. **Journal of the Royal Statistical Society Series B: Statistical Methodology**, v. 67, n. 2, p. 301–320, 03 2005. ISSN 1369-7412. Disponível em: <<https://doi.org/10.1111/j.1467-9868.2005.00503.x>>.

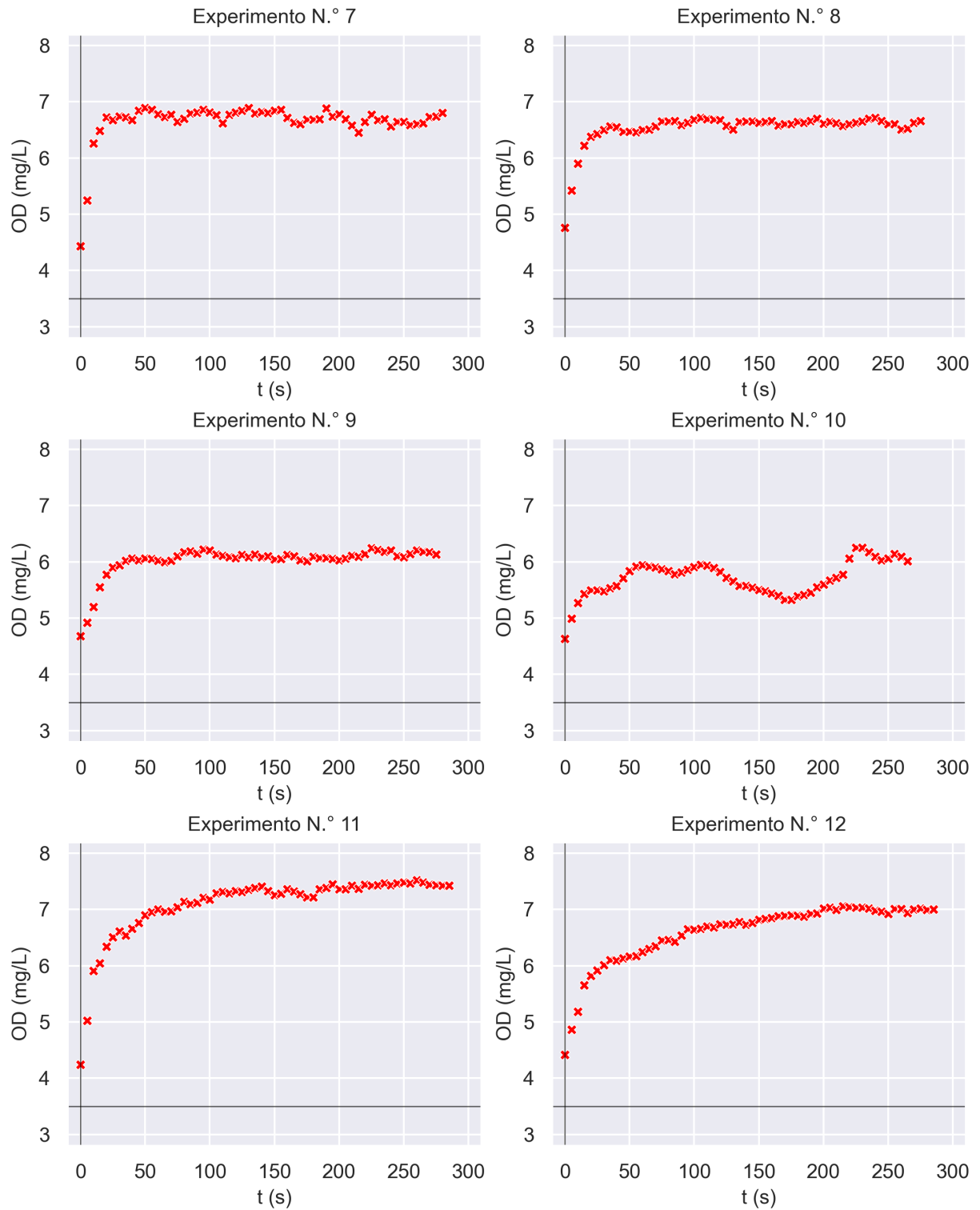
## APÊNDICE A – GRÁFICOS DE DISPERSÃO DAS SÉRIES TEMPORAIS RESULTANTES DOS EXPERIMENTOS

Figura 20 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 1 à 6



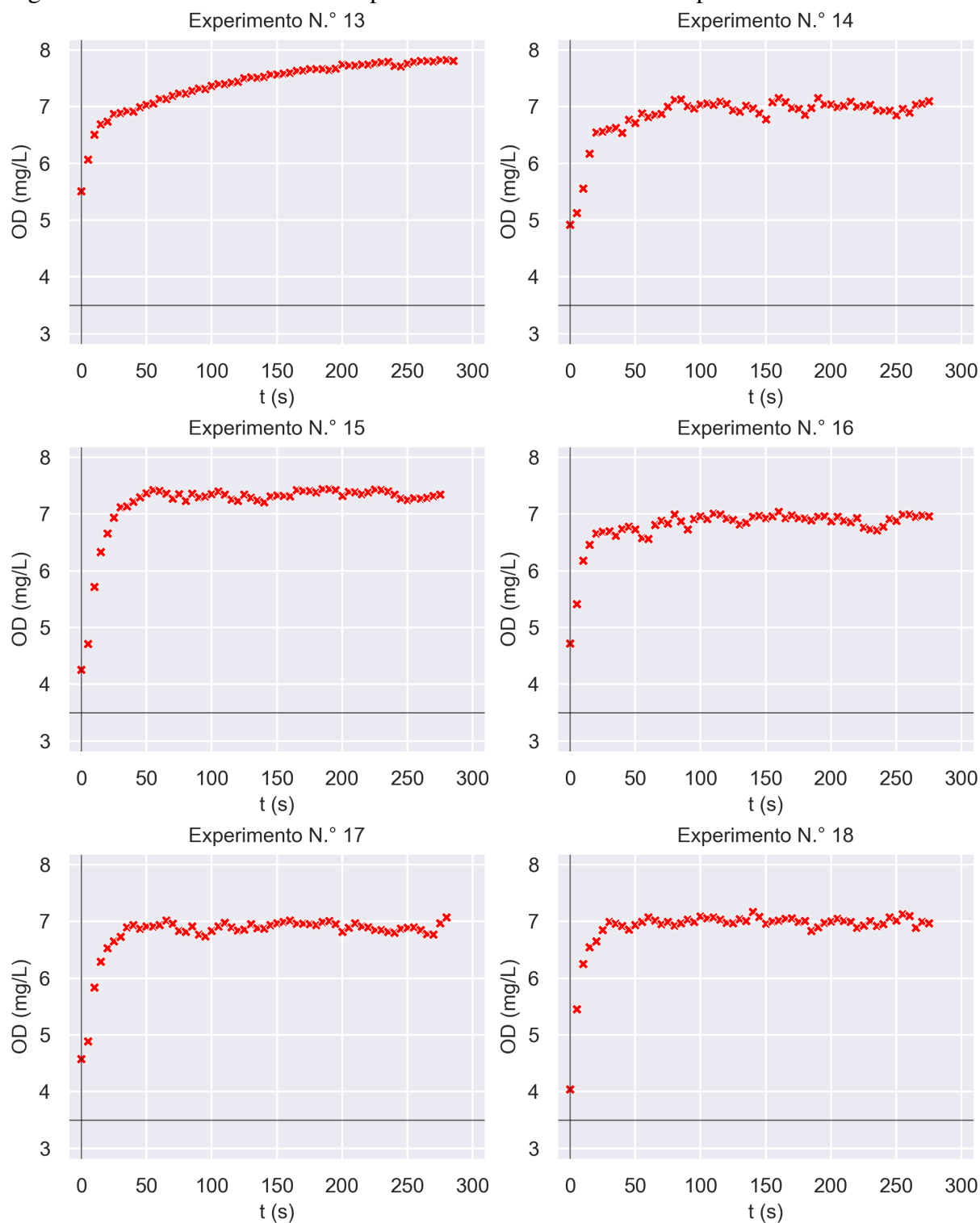
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 21 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 7 à 12



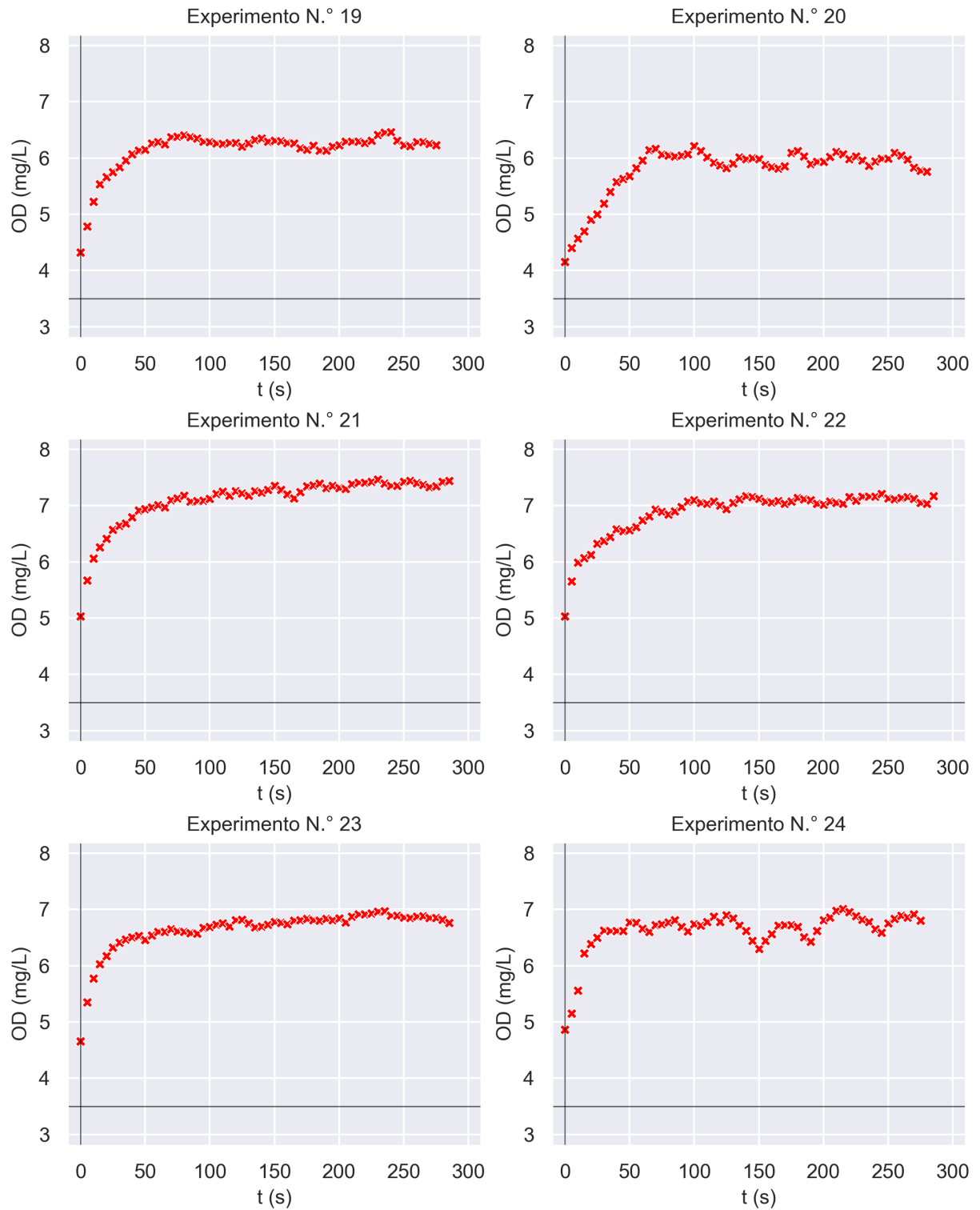
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 22 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 13 à 18



Fonte: Elaborada pelo autor.

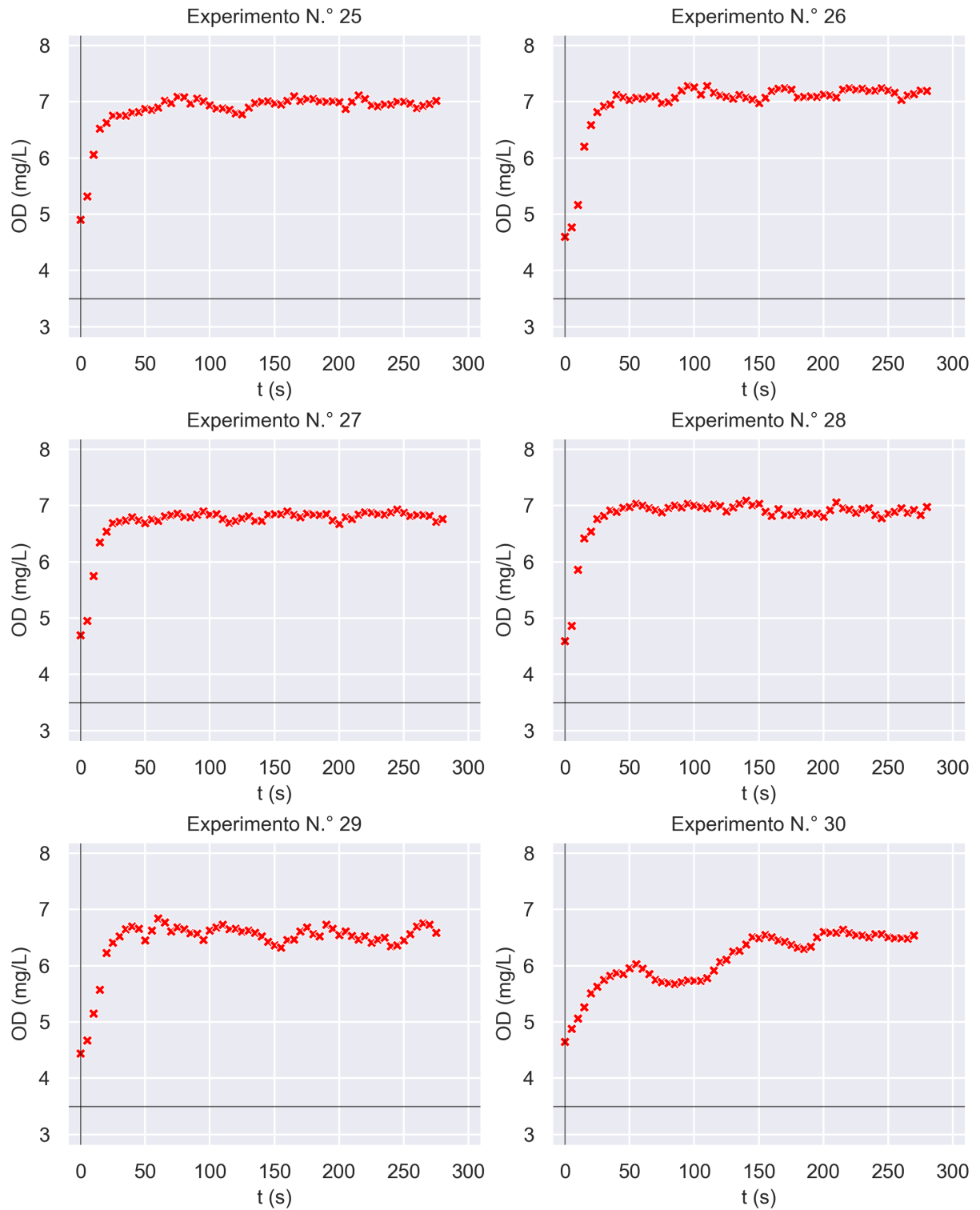
Figura 23 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 19 à 24



Fonte: Elaborada pelo autor.

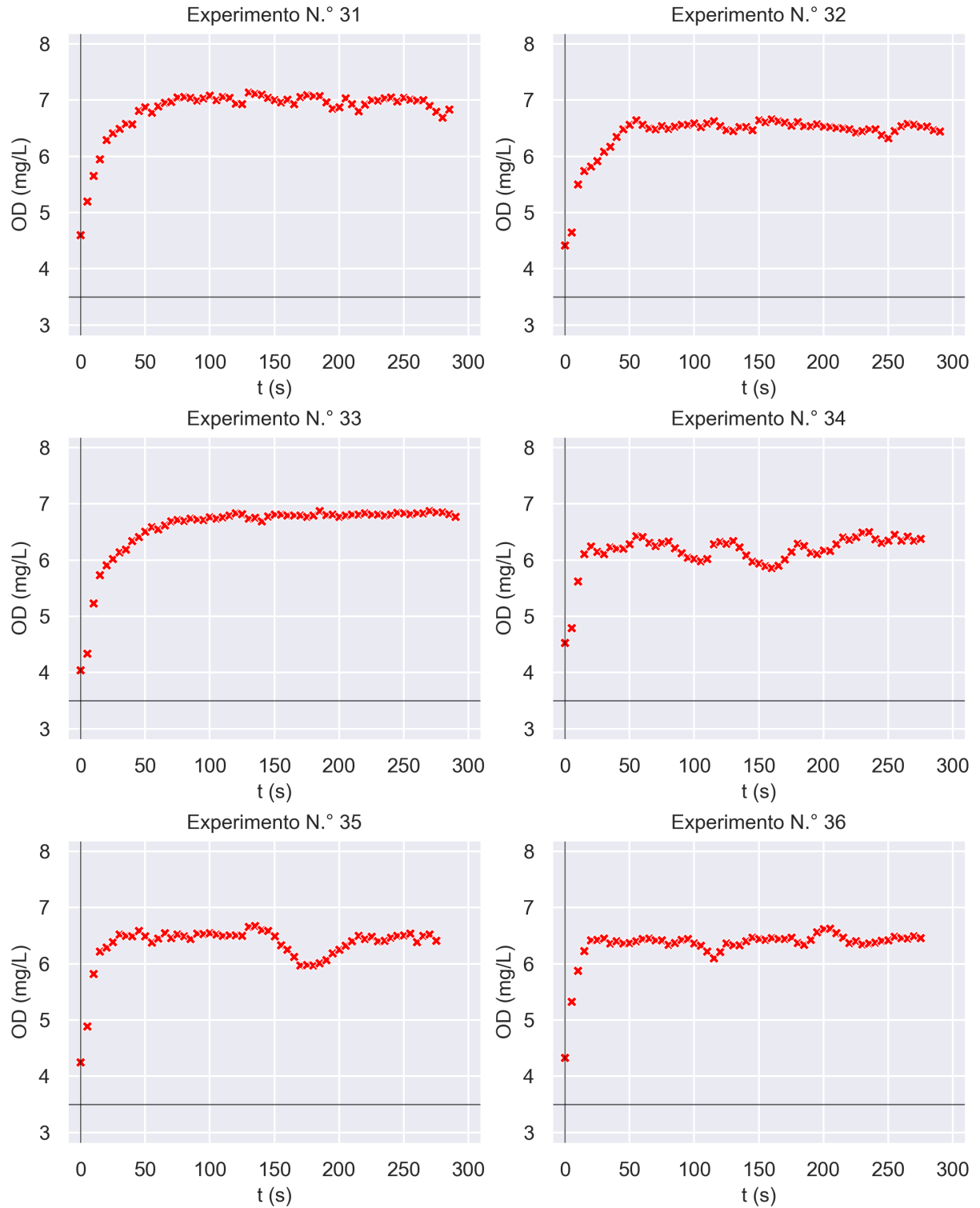


Figura 24 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 25 à 30



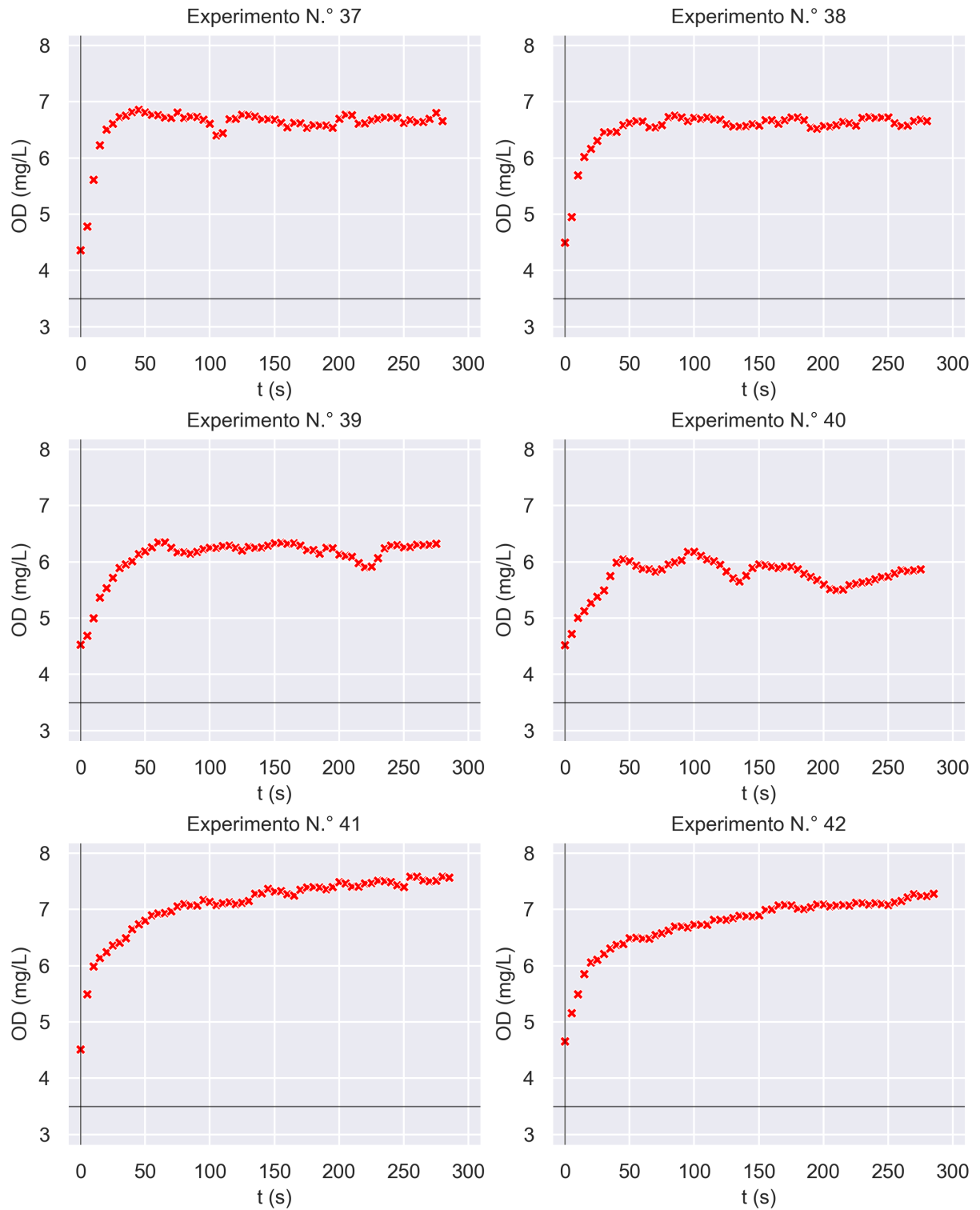
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 25 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 31 à 36



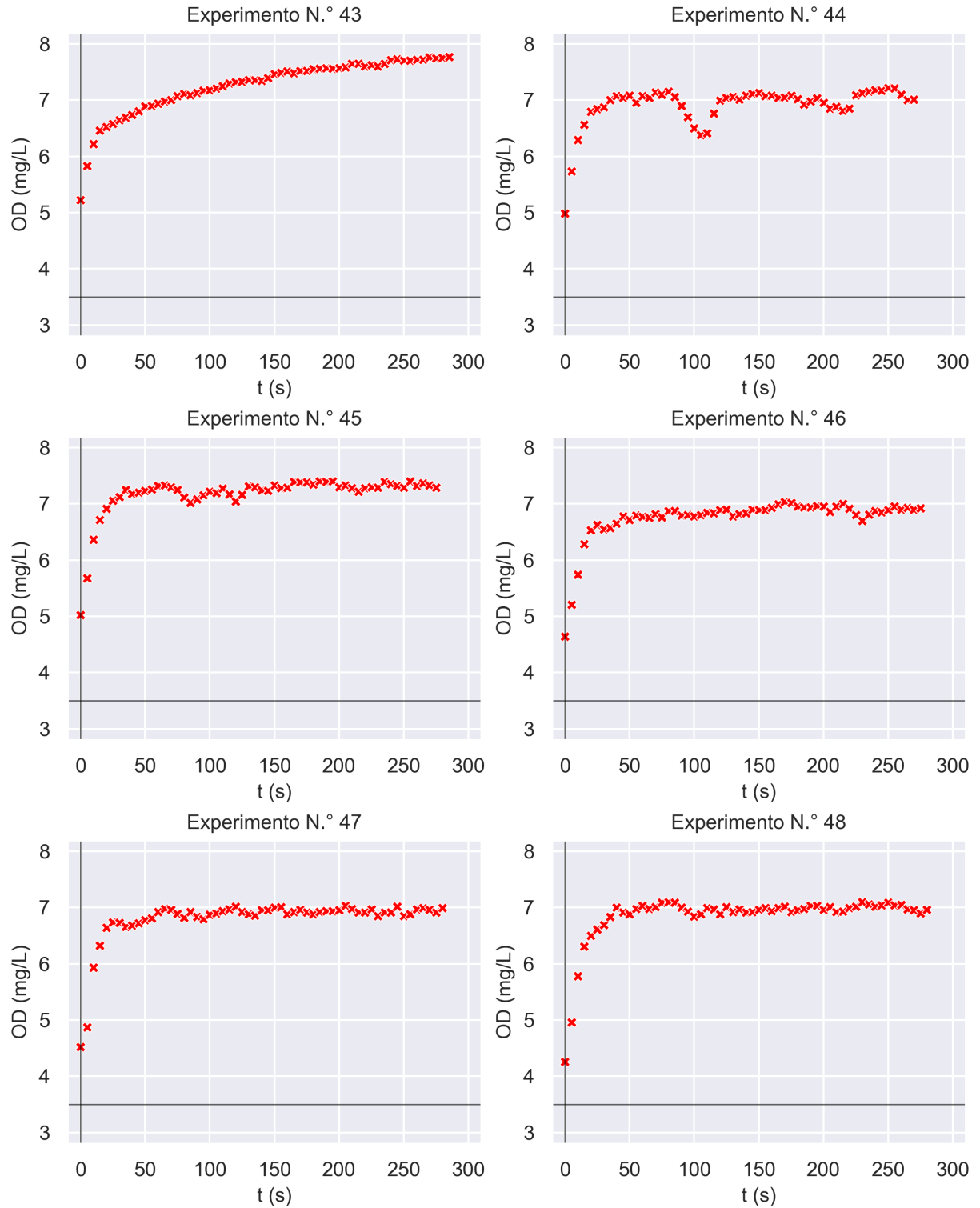
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 26 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 37 à 42



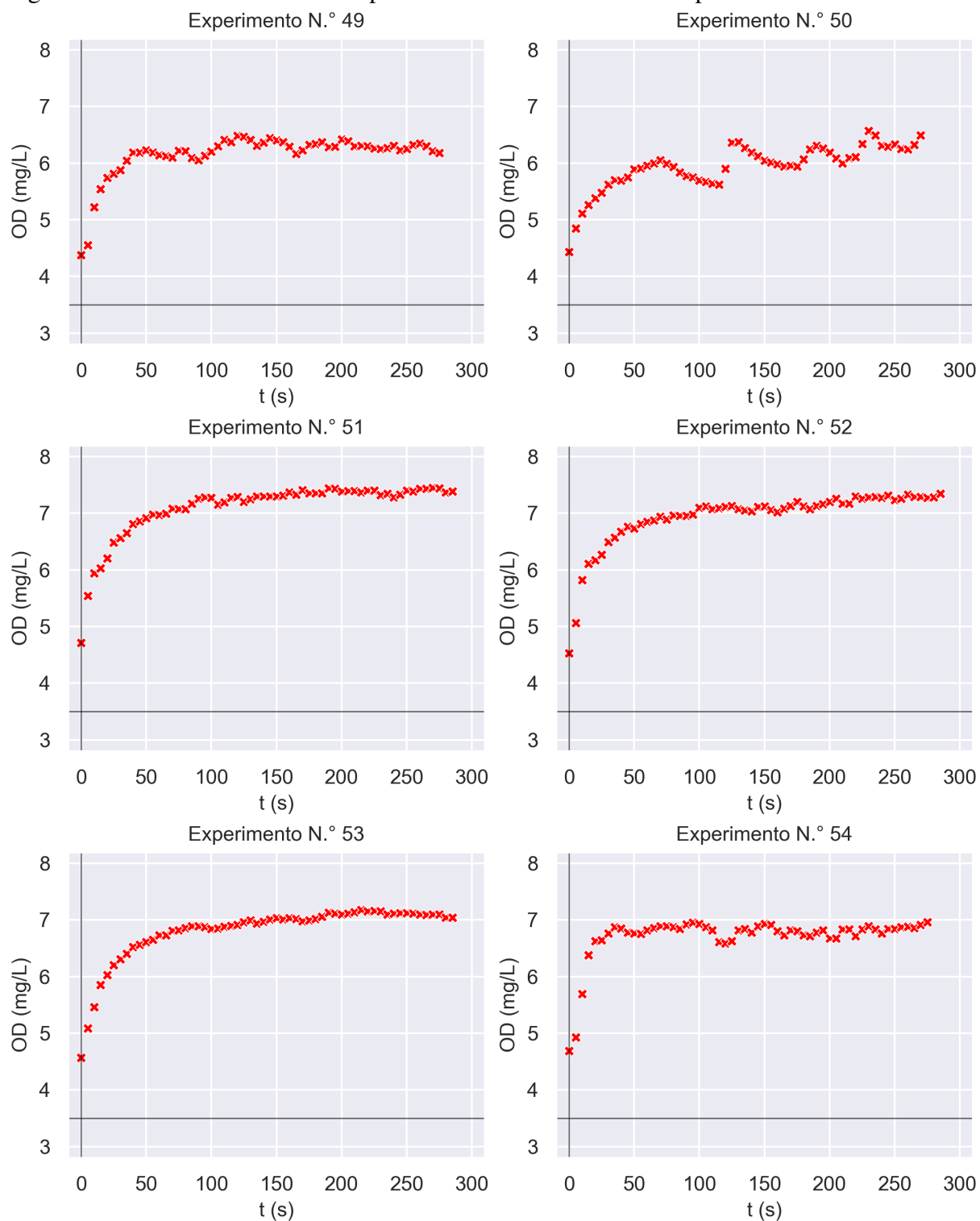
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 27 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 43 à 48



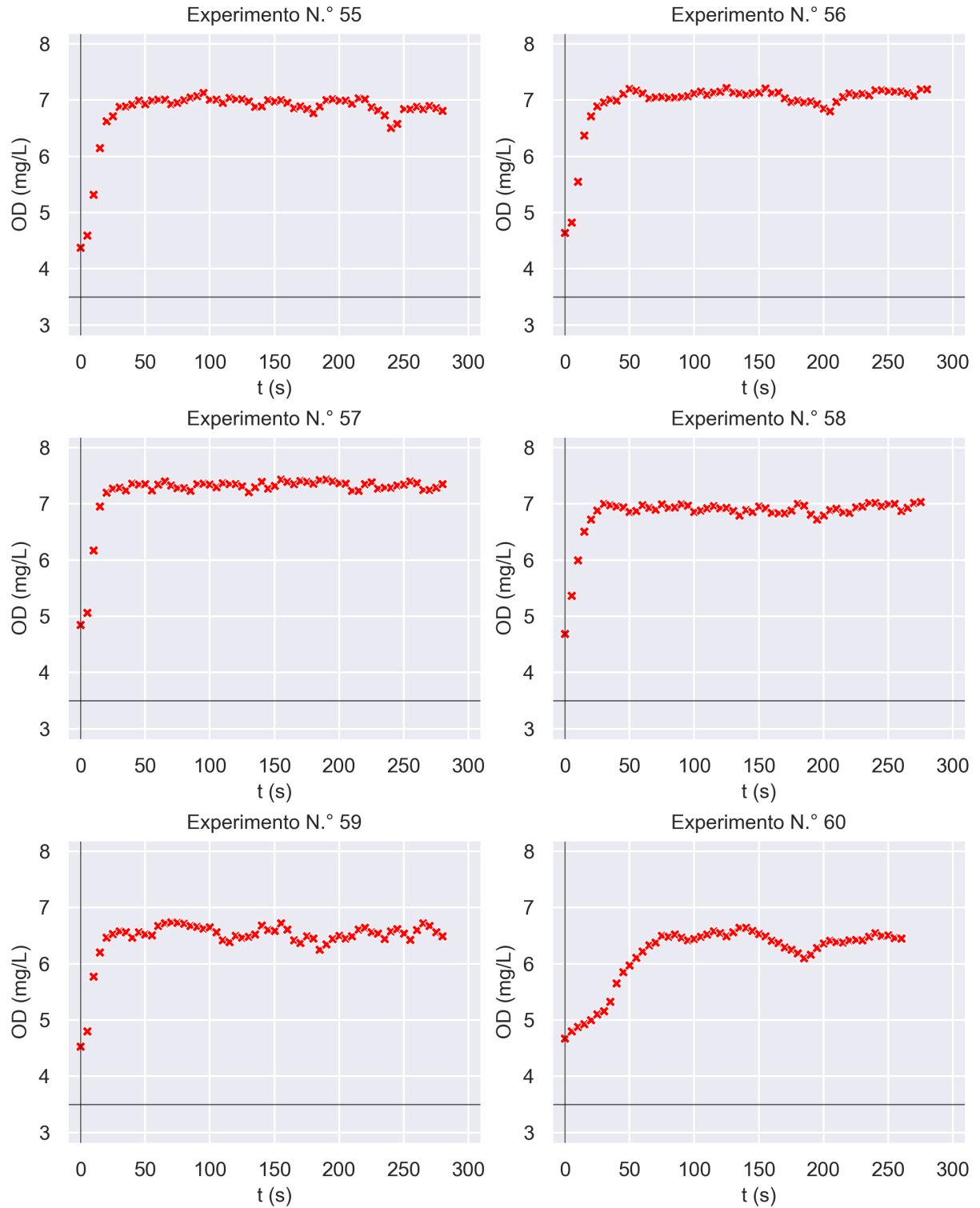
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 28 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 49 à 54



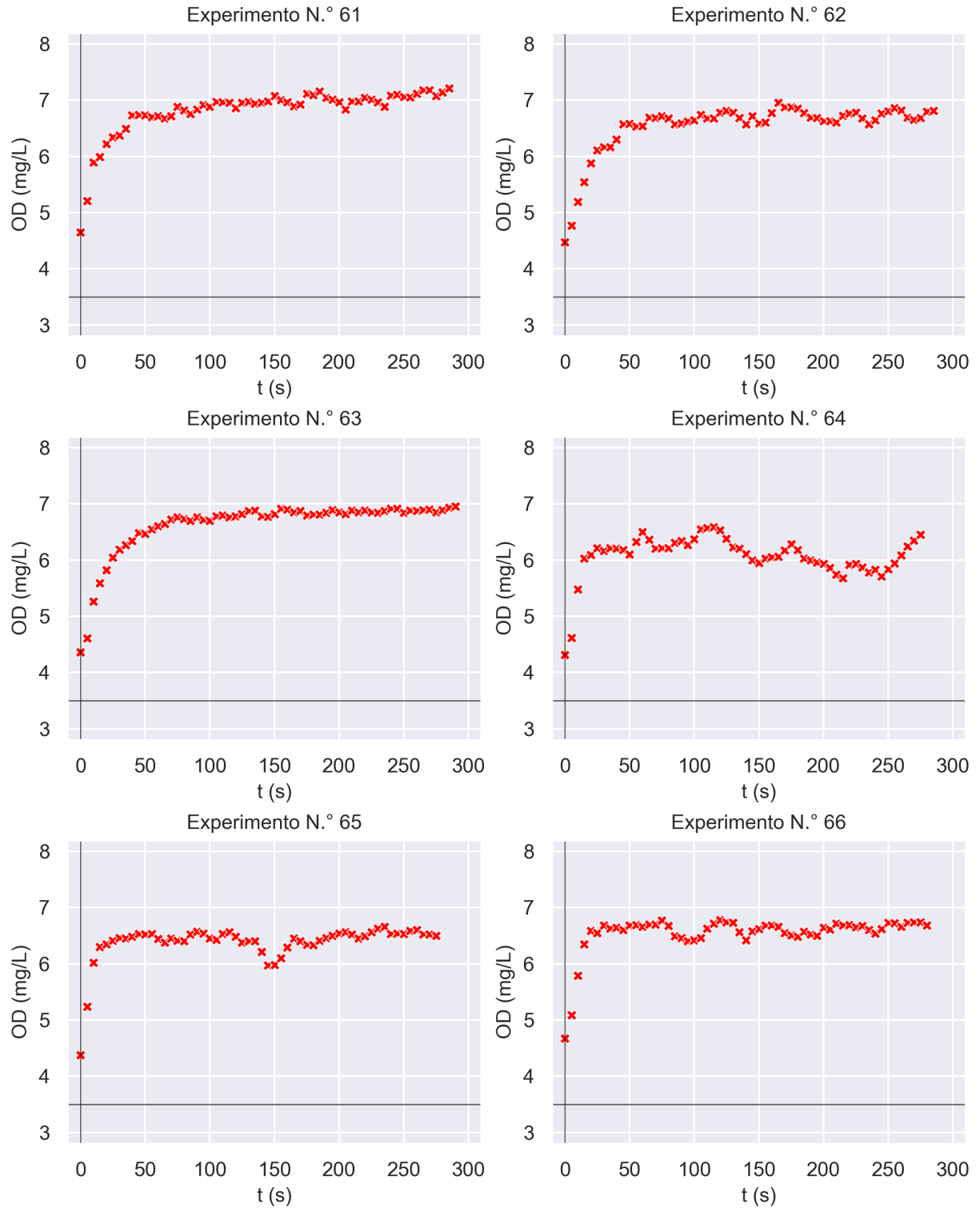
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 29 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 55 à 60



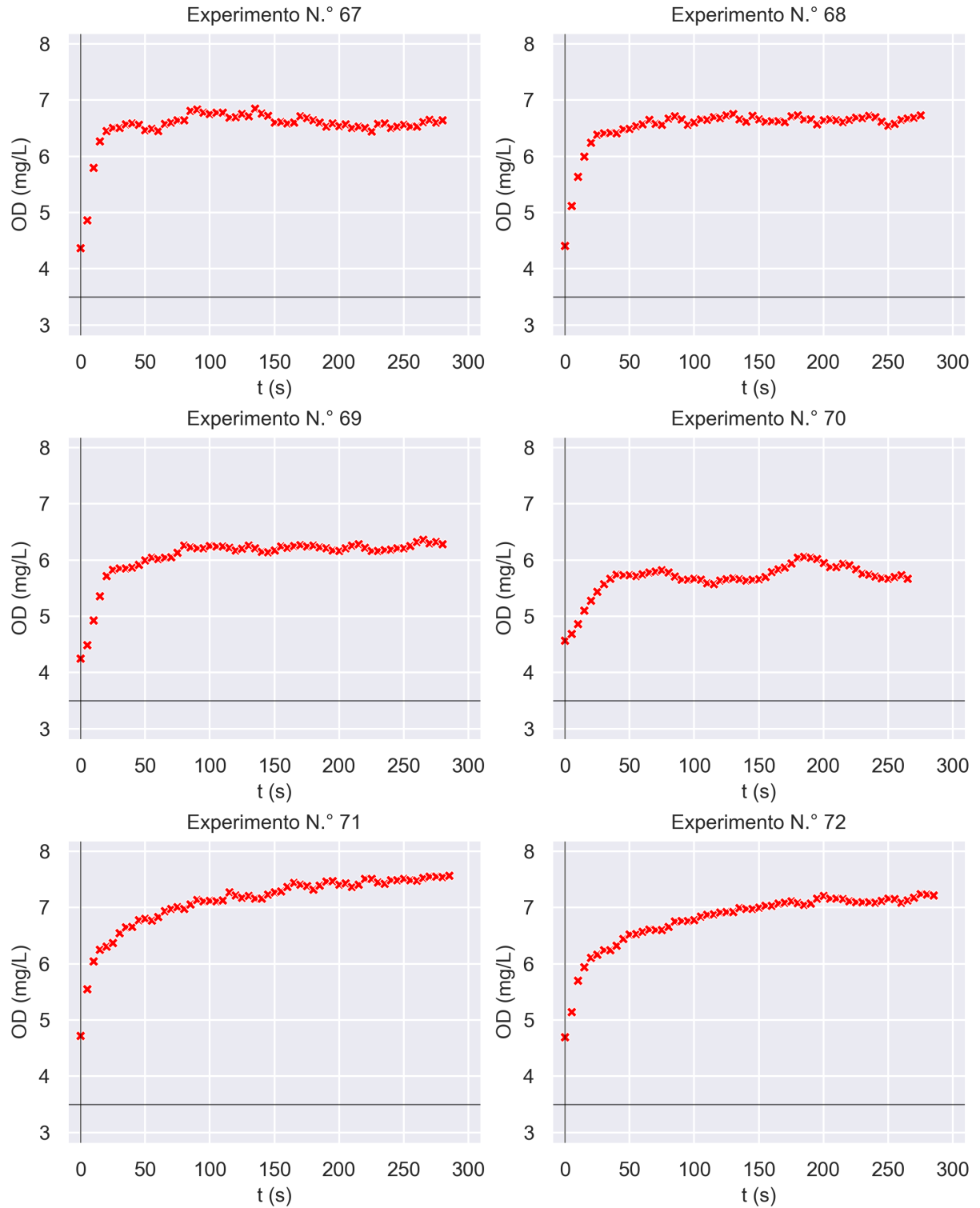
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 30 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 61 à 66



Fonte: Elaborada pelo autor.

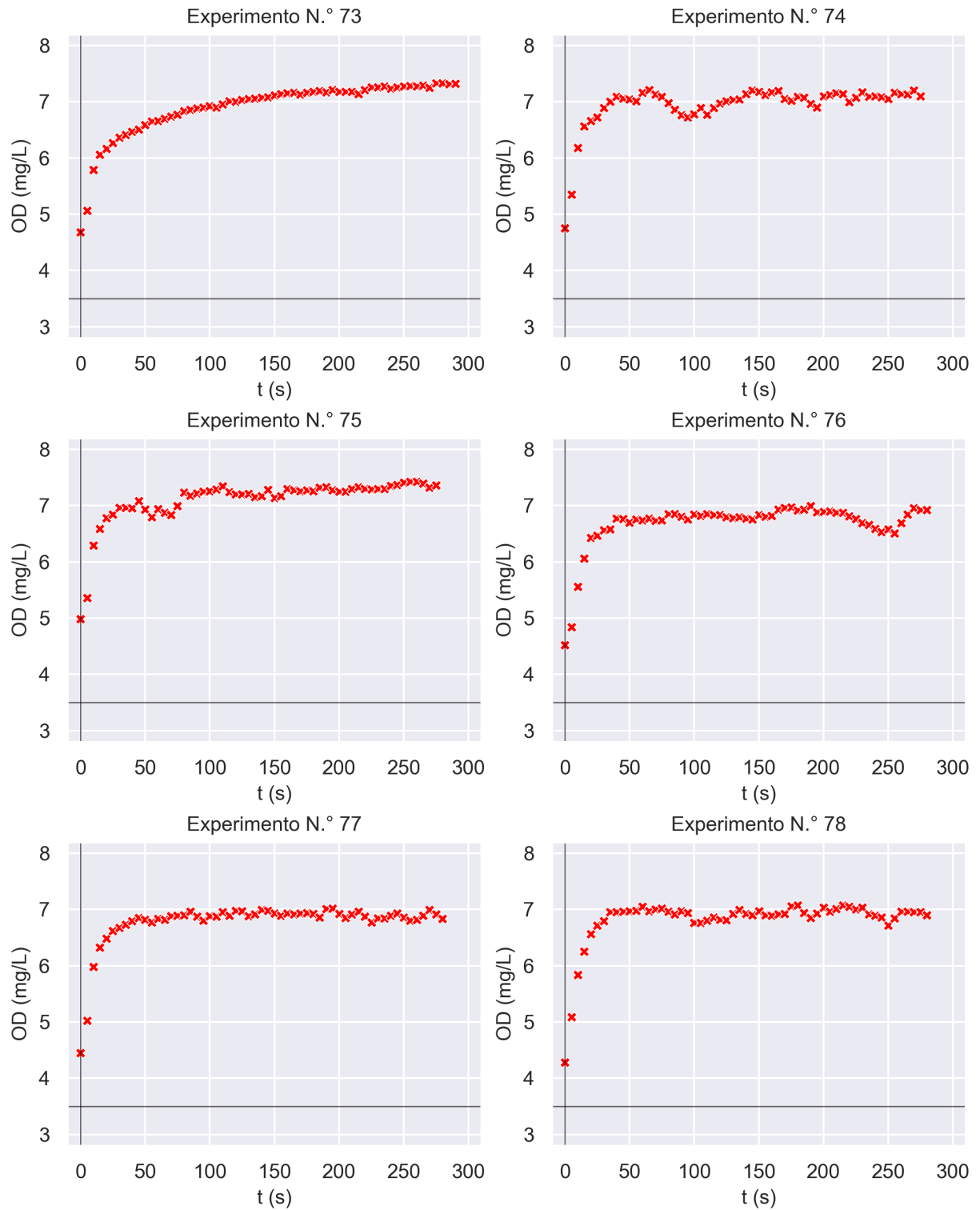
Figura 31 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 67 à 72



Fonte: Elaborada pelo autor.

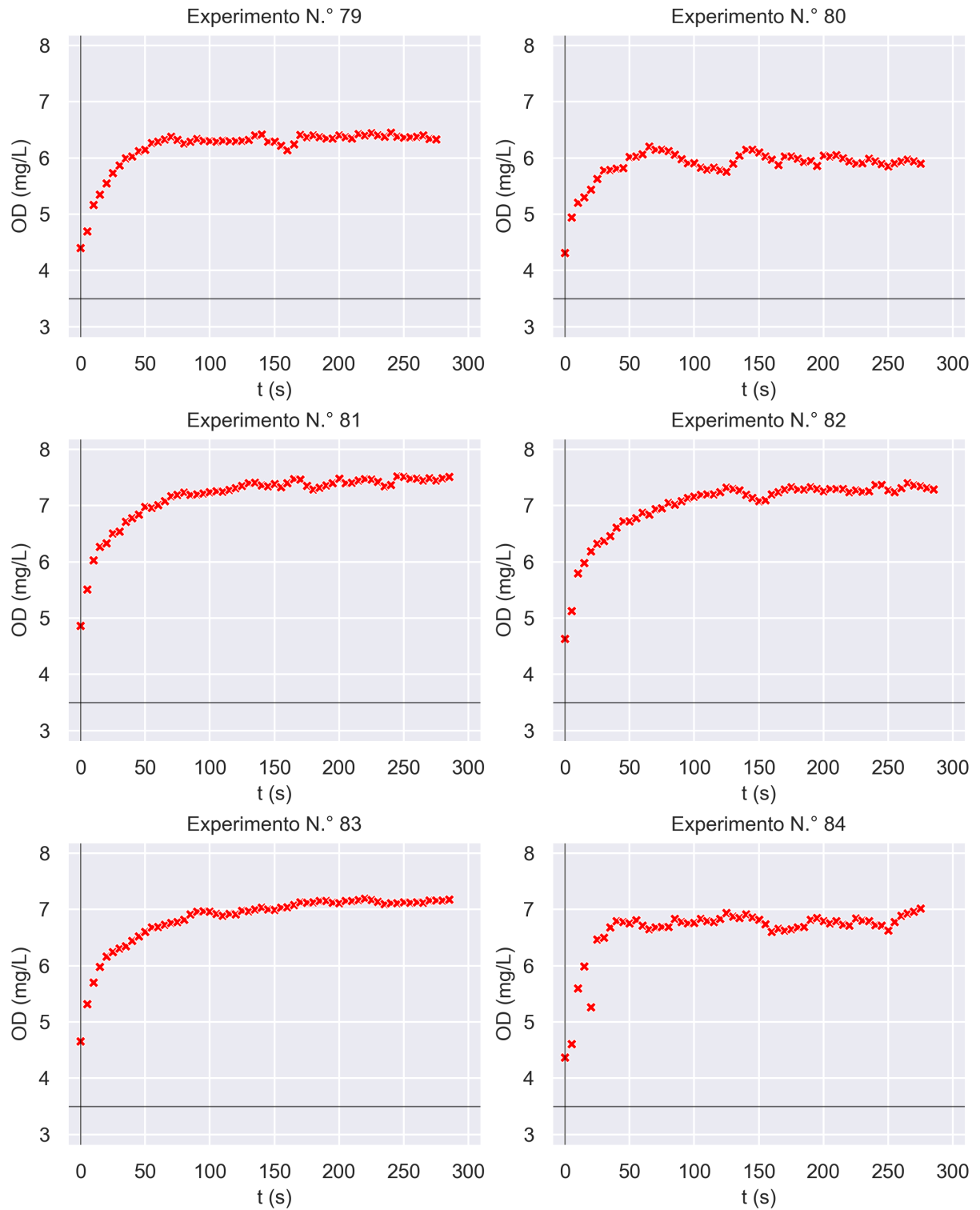


Figura 32 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 73 à 78



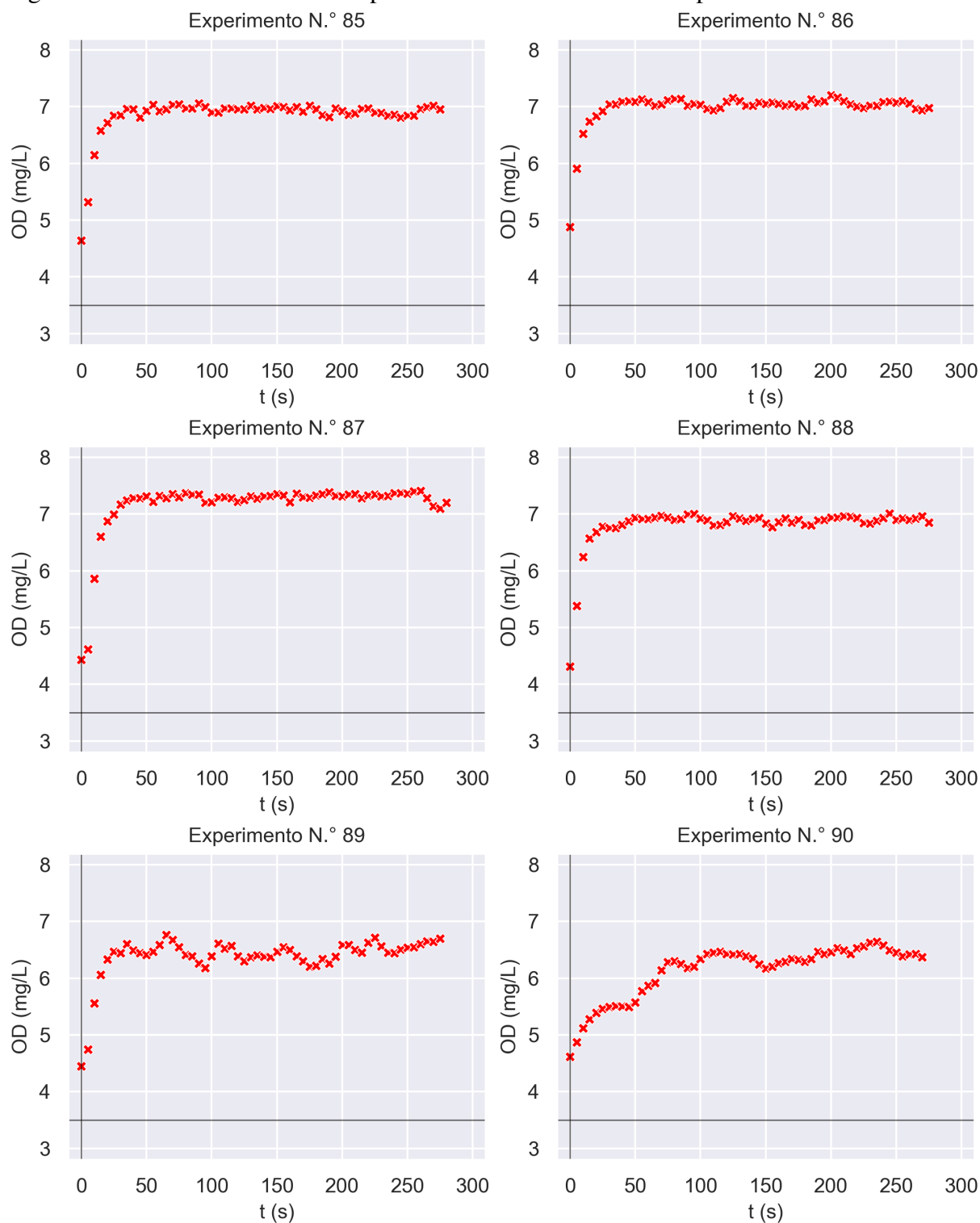
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 33 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 79 à 84



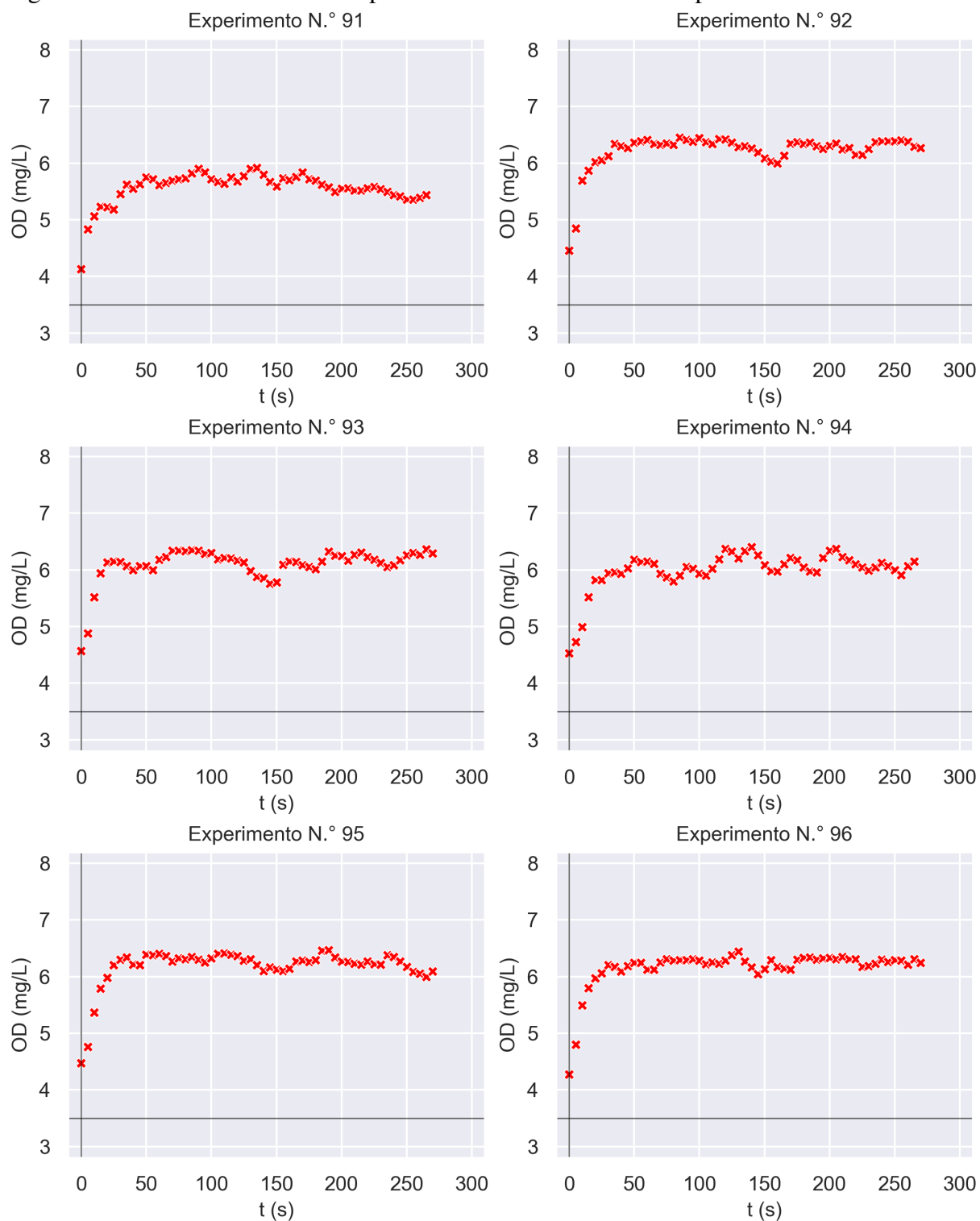
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 34 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 85 à 90



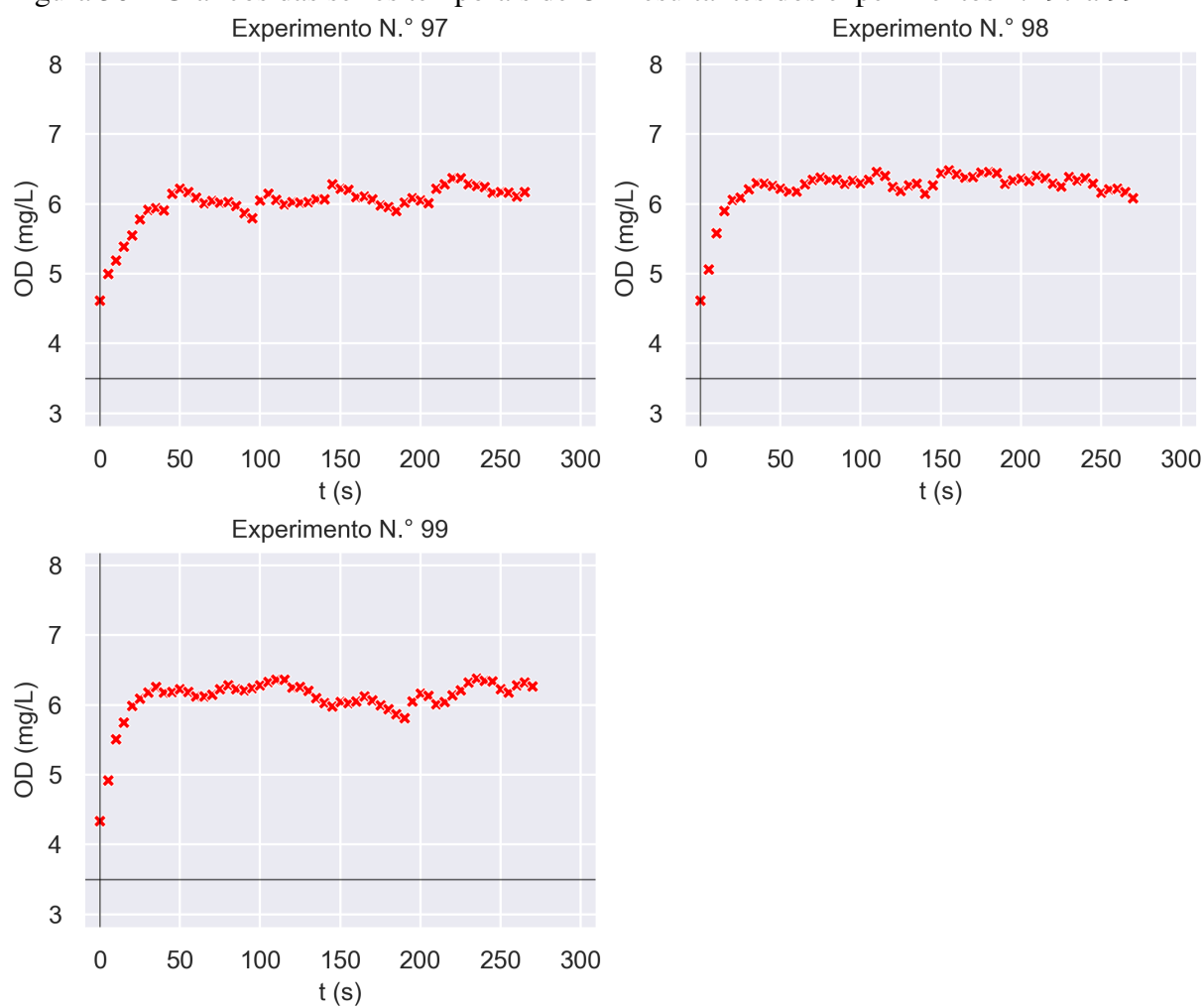
Fonte: Elaborada pelo autor.

Figura 35 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 91 à 96



Fonte: Elaborada pelo autor.

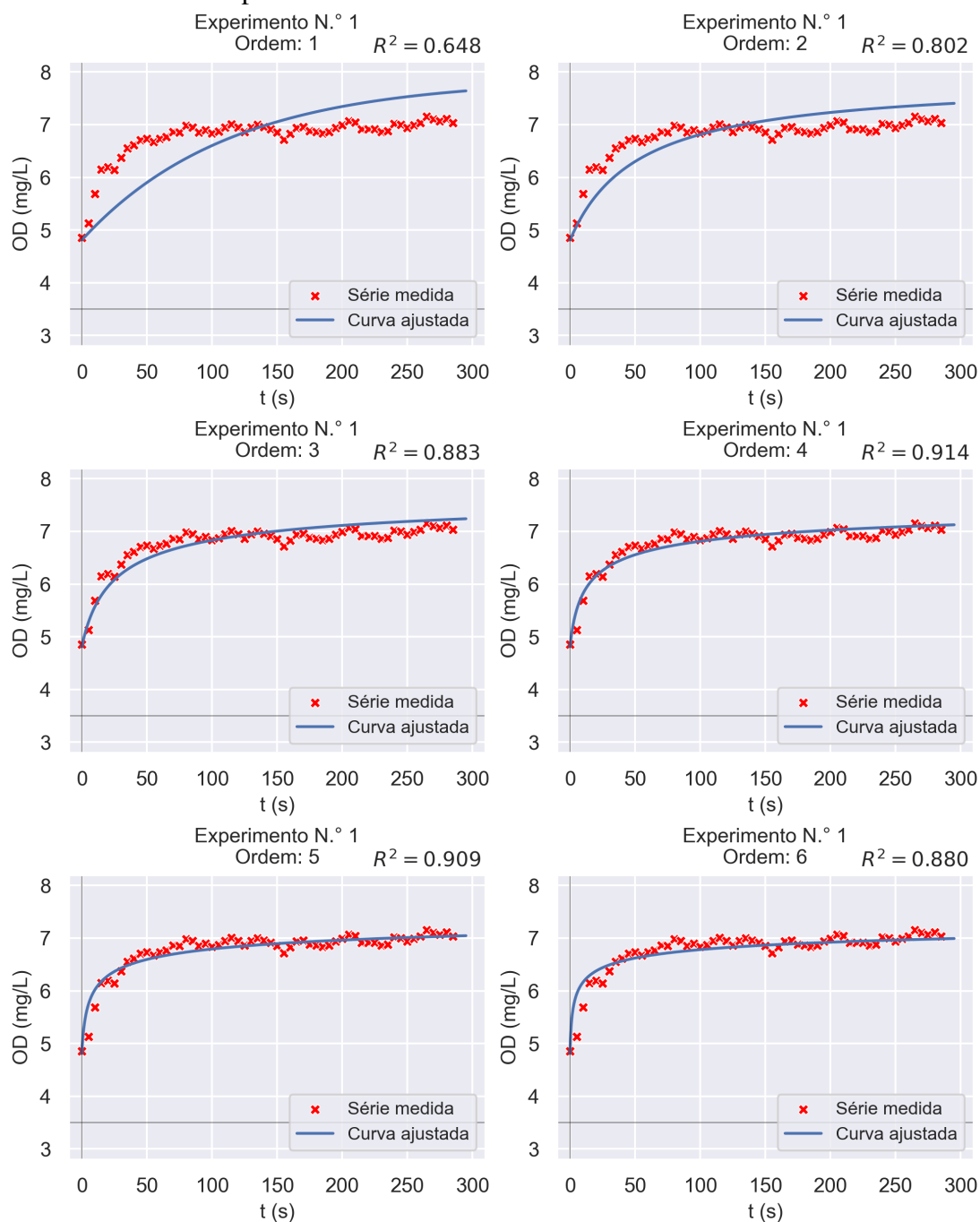
Figura 36 – Gráficos das séries temporais de OD resultantes dos experimentos n.º 97 à 99



Fonte: Elaborada pelo autor.

## APÊNDICE B – GRÁFICOS DOS AJUSTES DOS COEFICIENTES DE REAERAÇÃO ÀS SÉRIES TEMPORAIS MEDIDAS

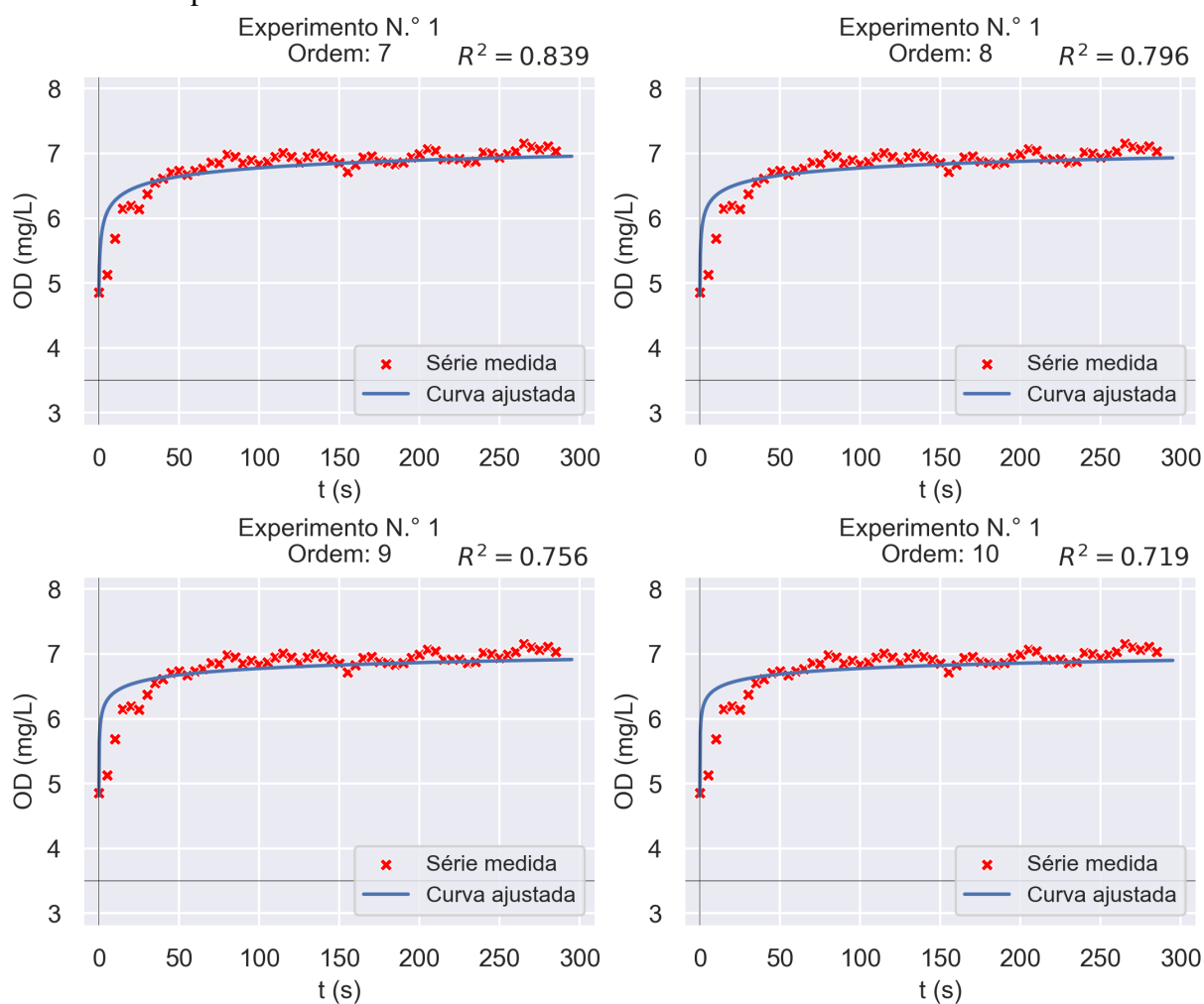
Figura 37 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 1



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

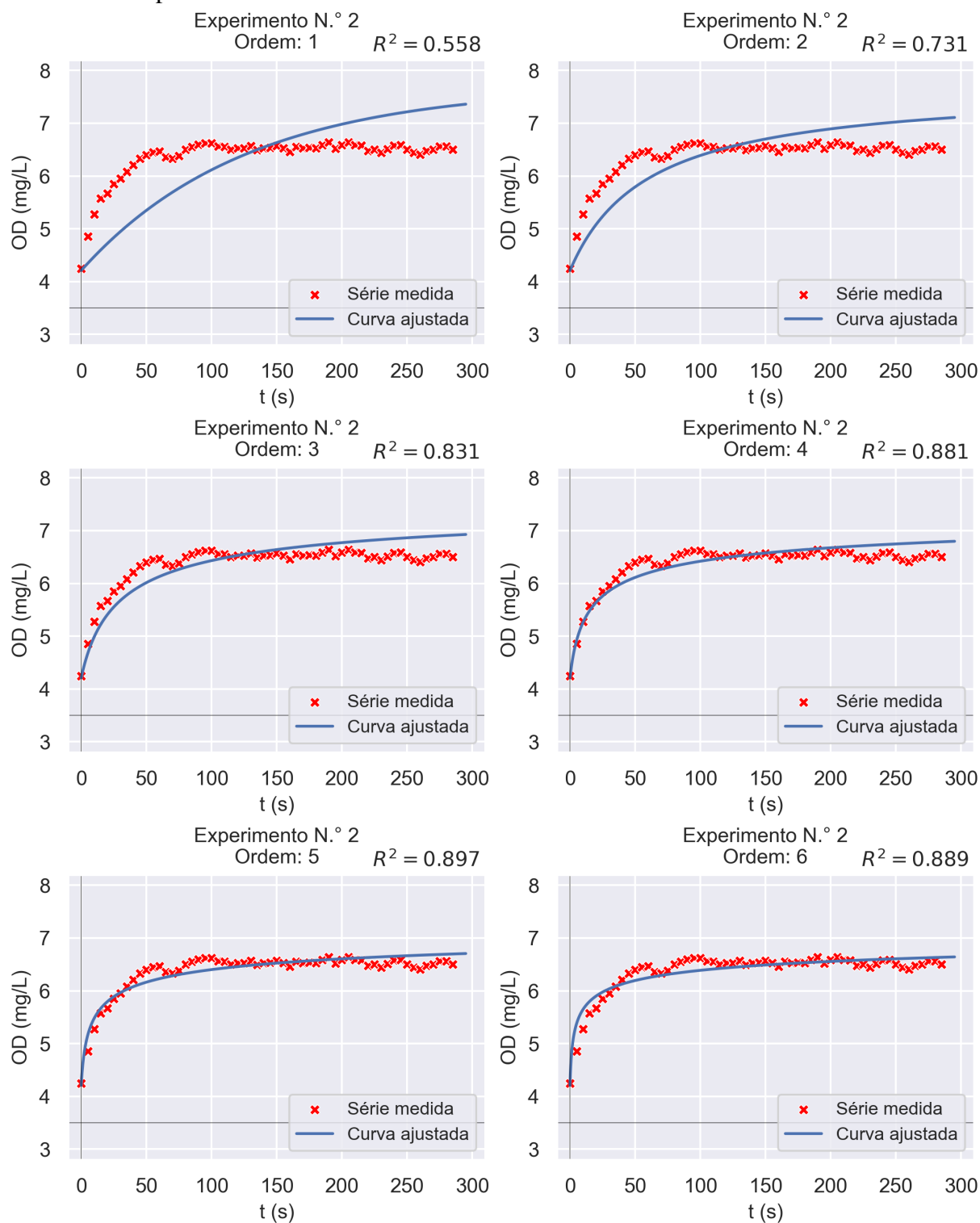
Figura 38 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 1



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 39 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 2

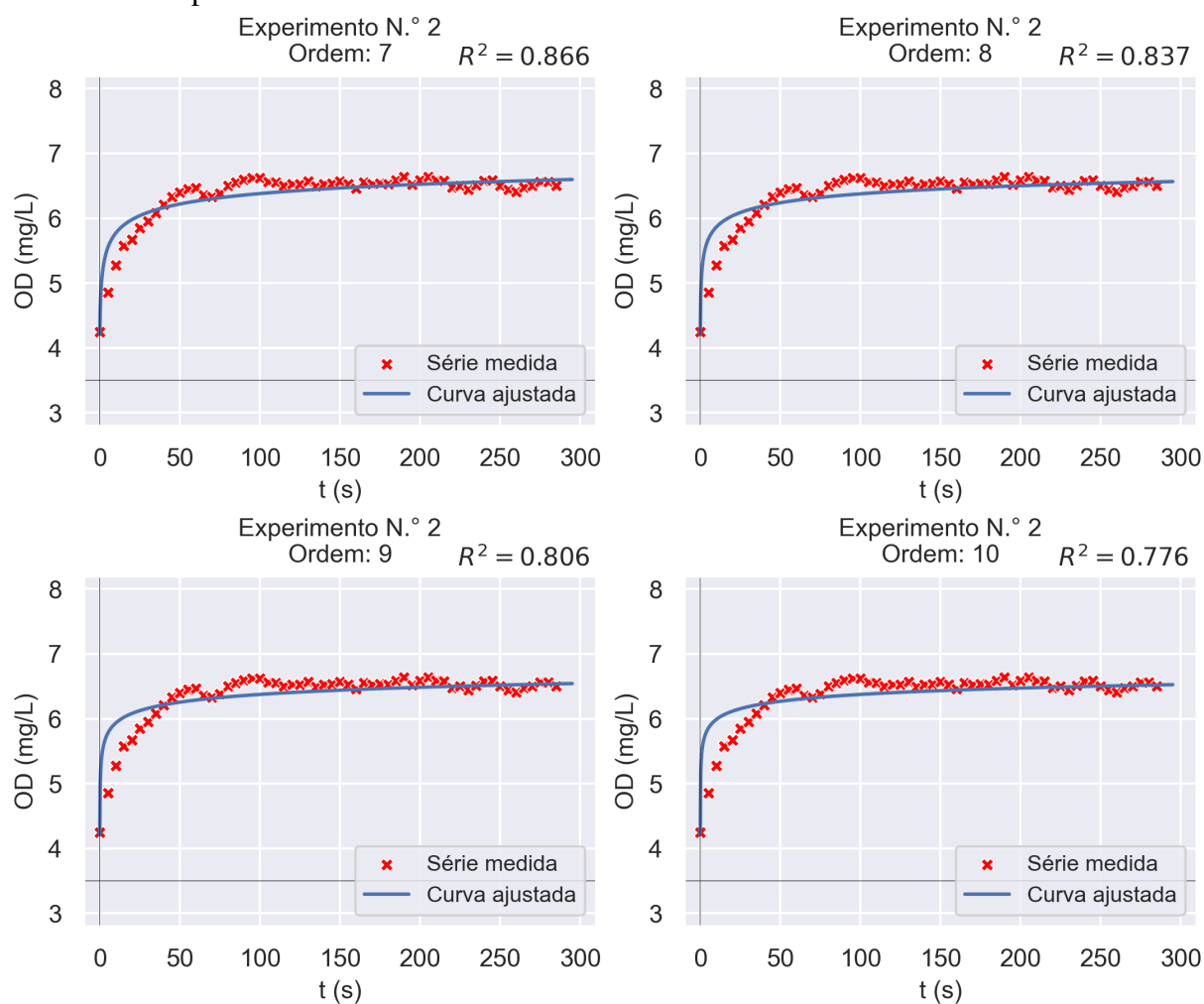


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



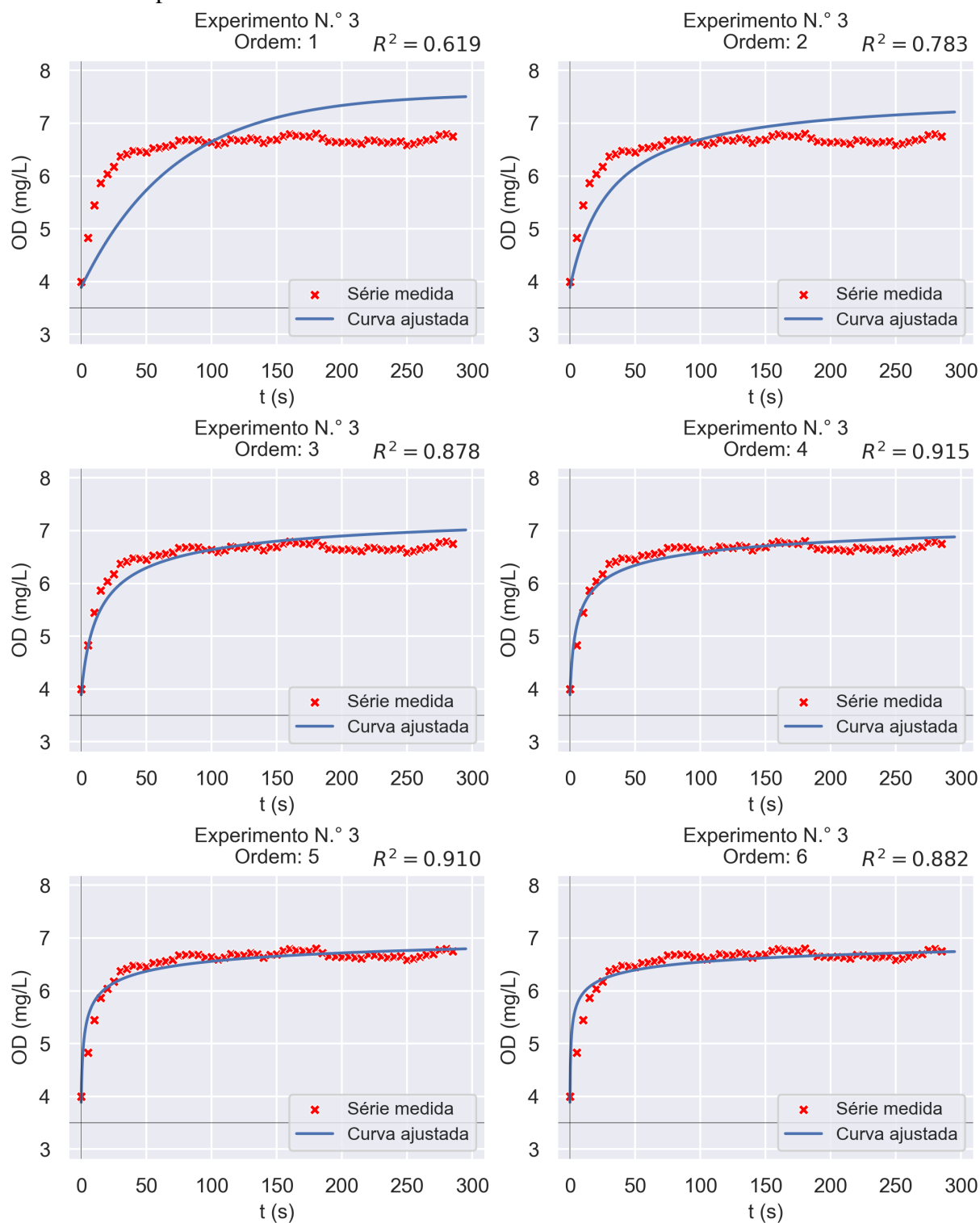
Figura 40 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 2



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

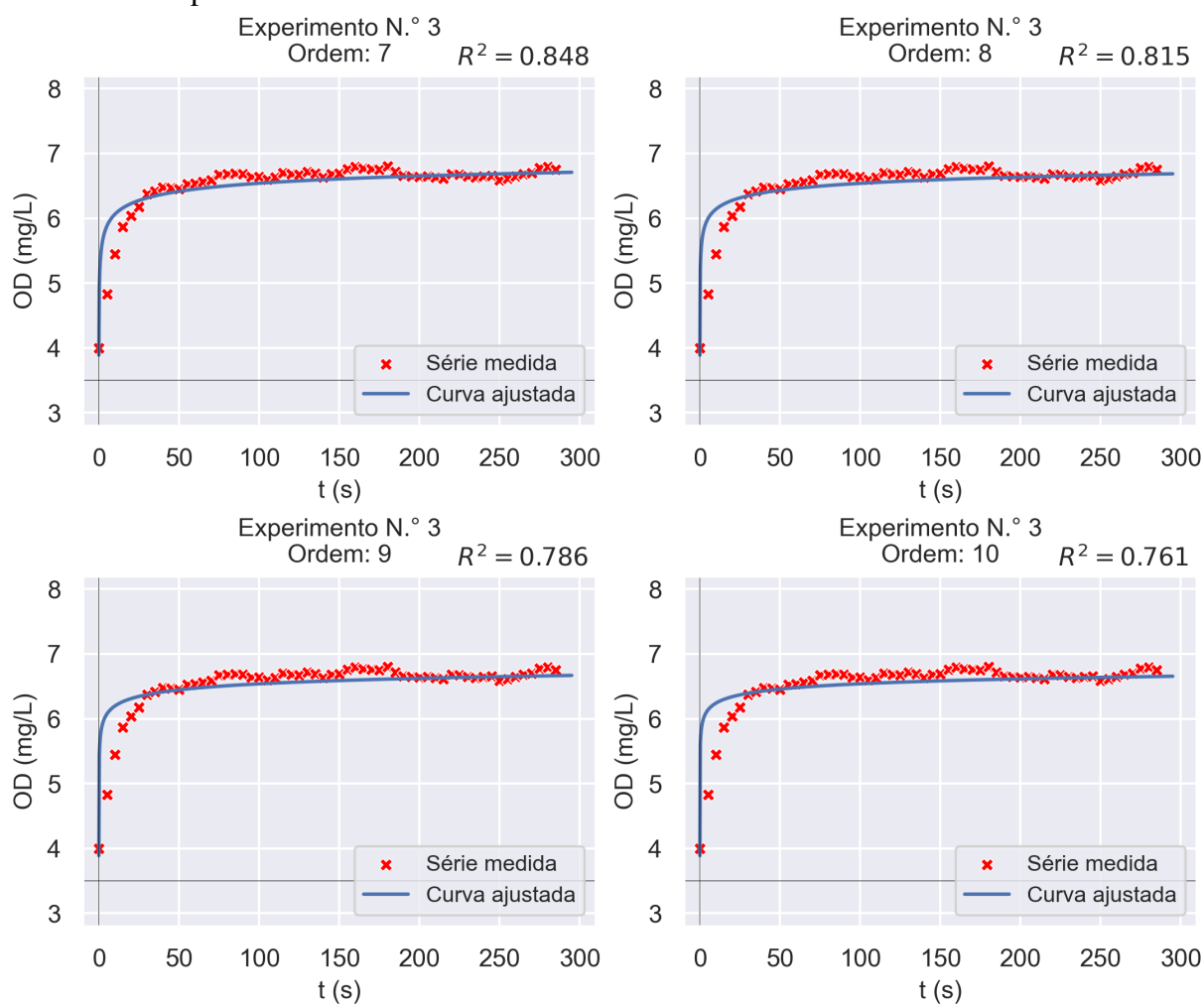
Figura 41 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 3



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

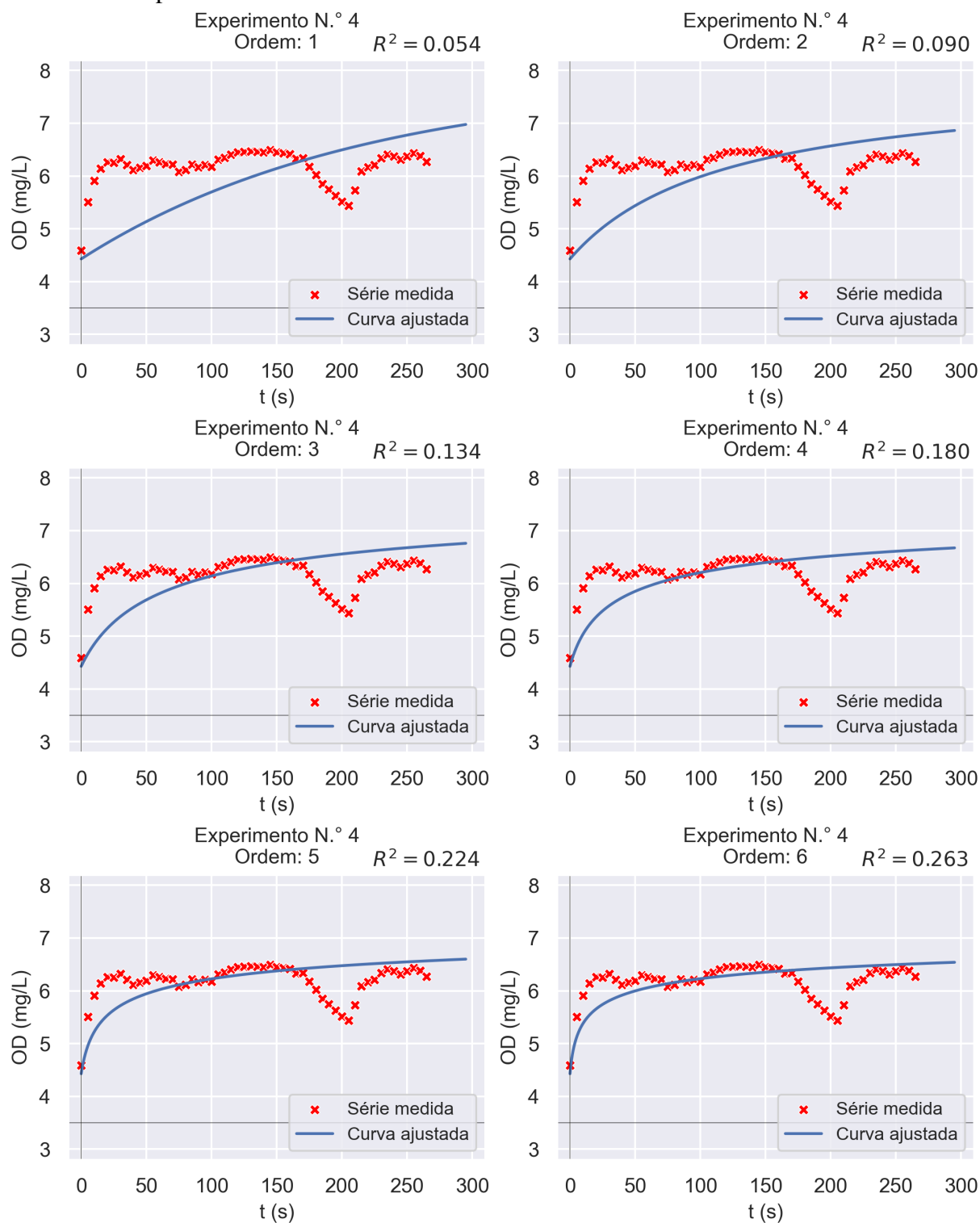
Figura 42 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 3



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

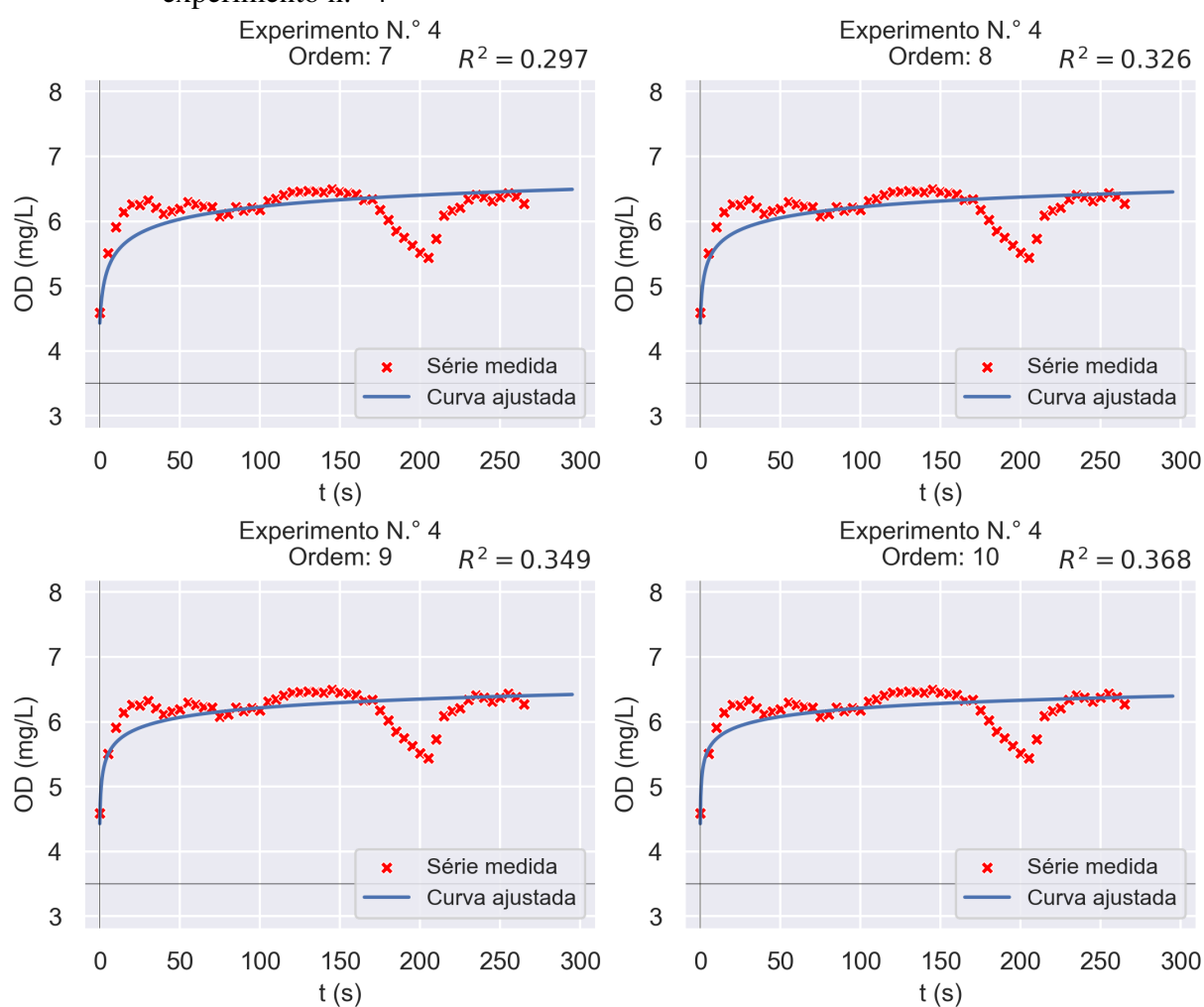
Figura 43 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 4



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

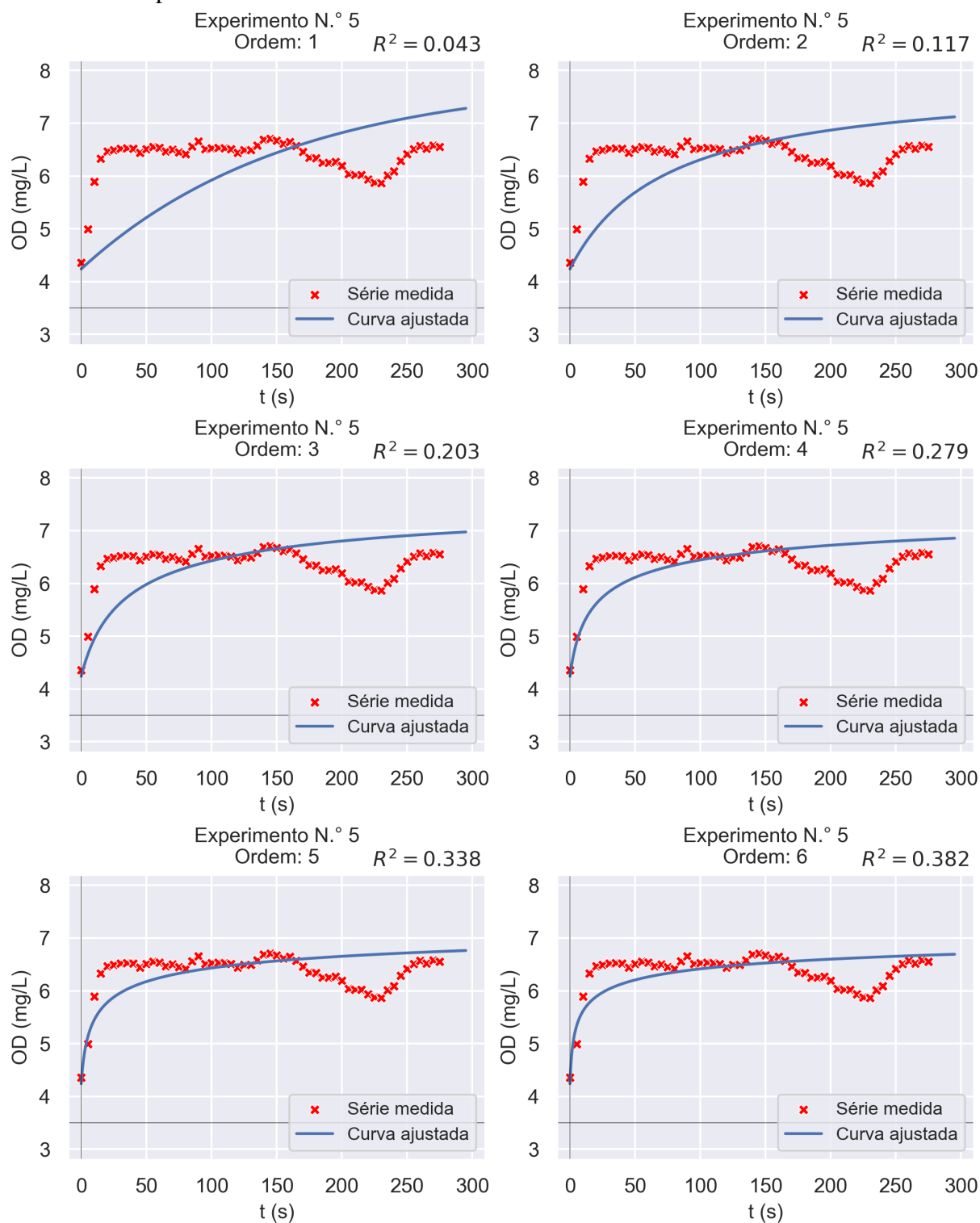
Figura 44 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 4



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

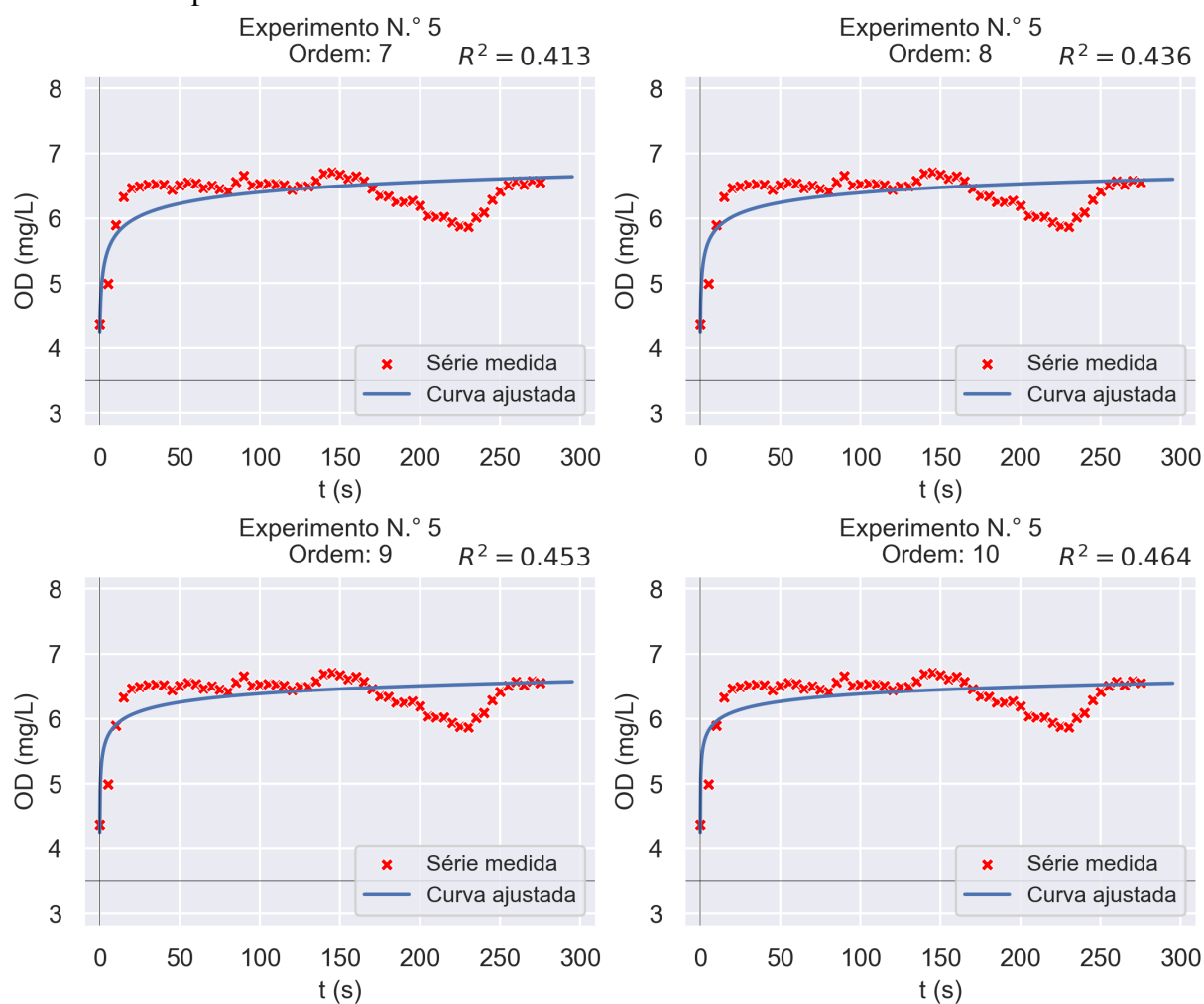
Figura 45 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 5



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

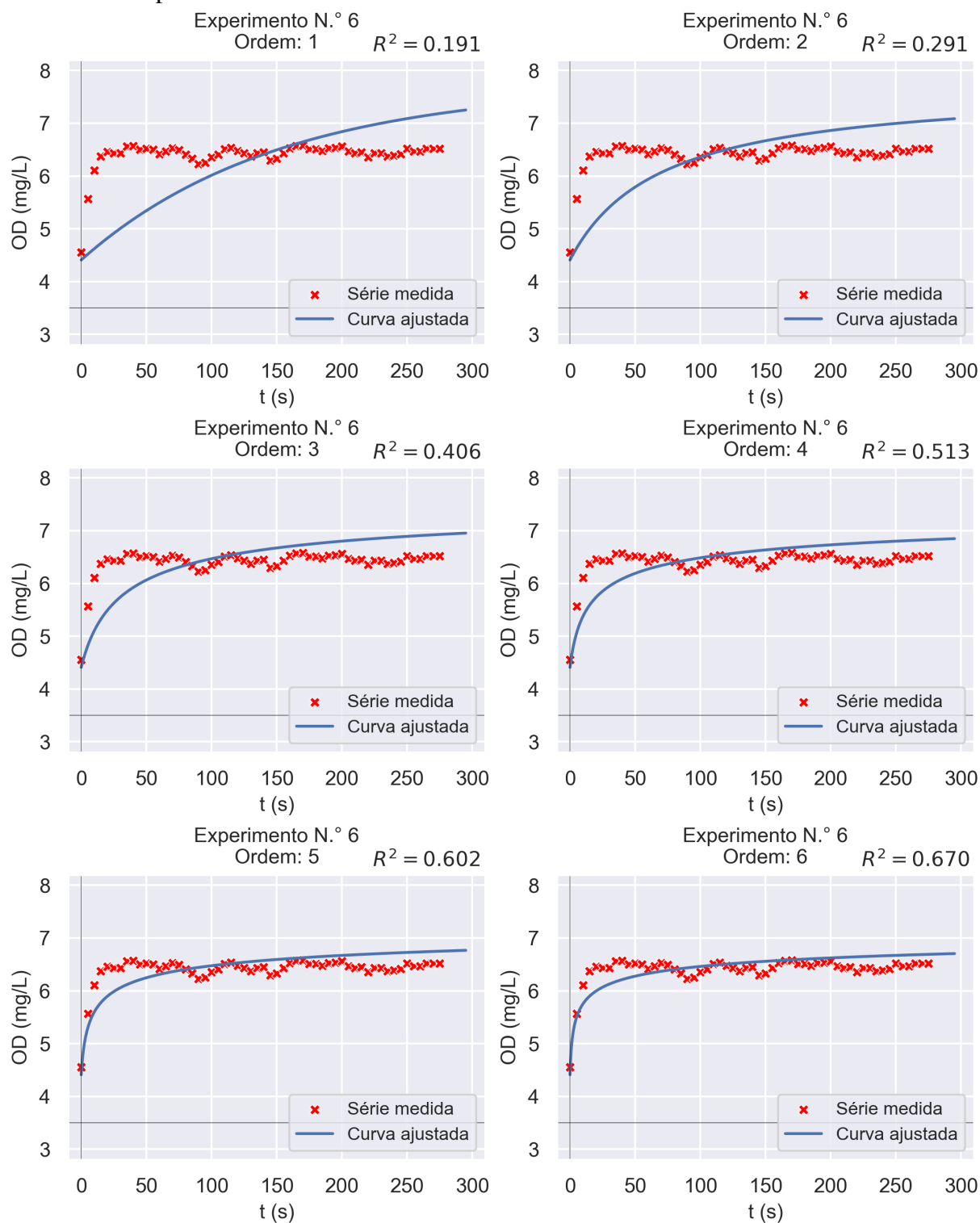
Figura 46 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 5



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 47 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 6

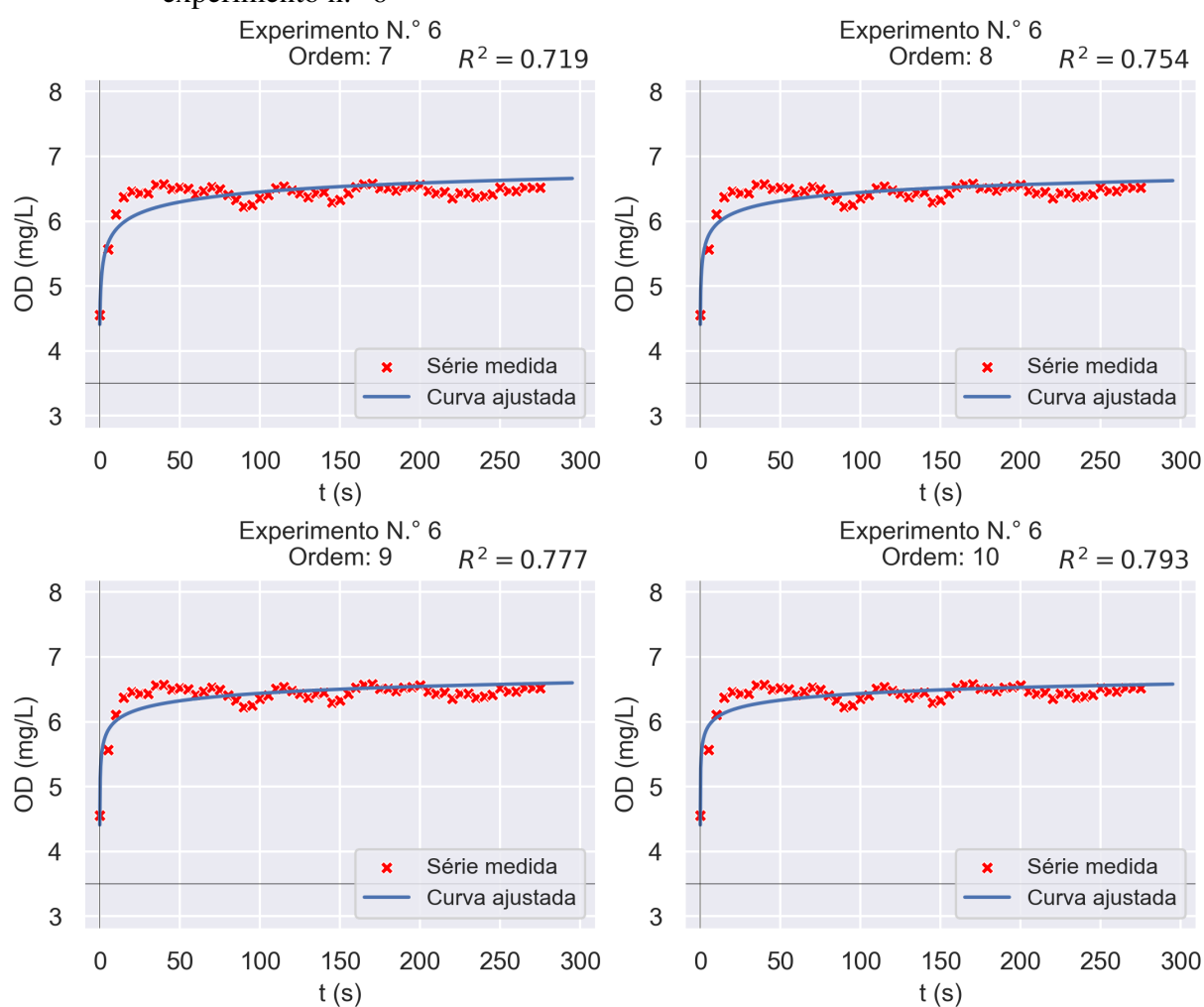


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



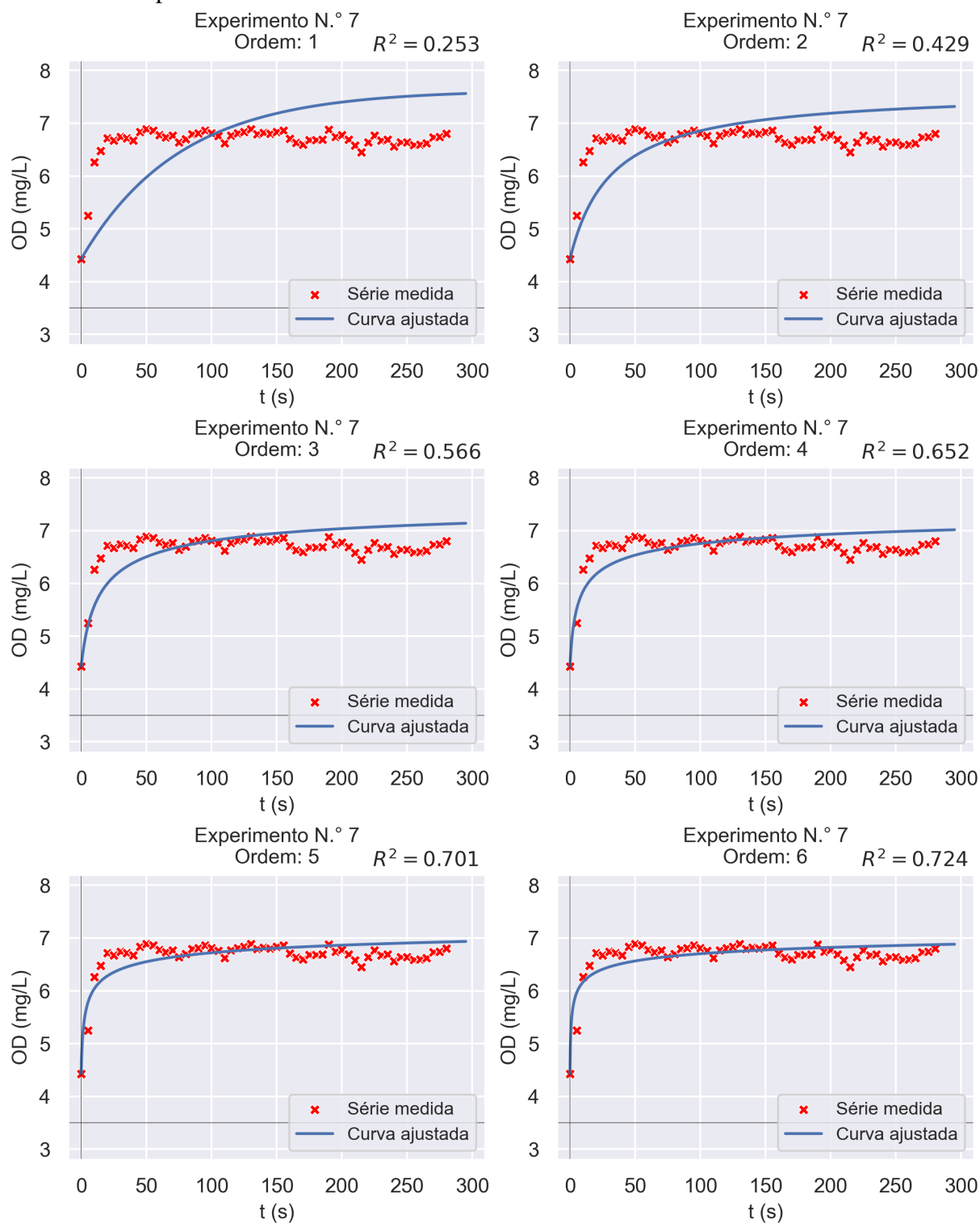
Figura 48 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 6



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

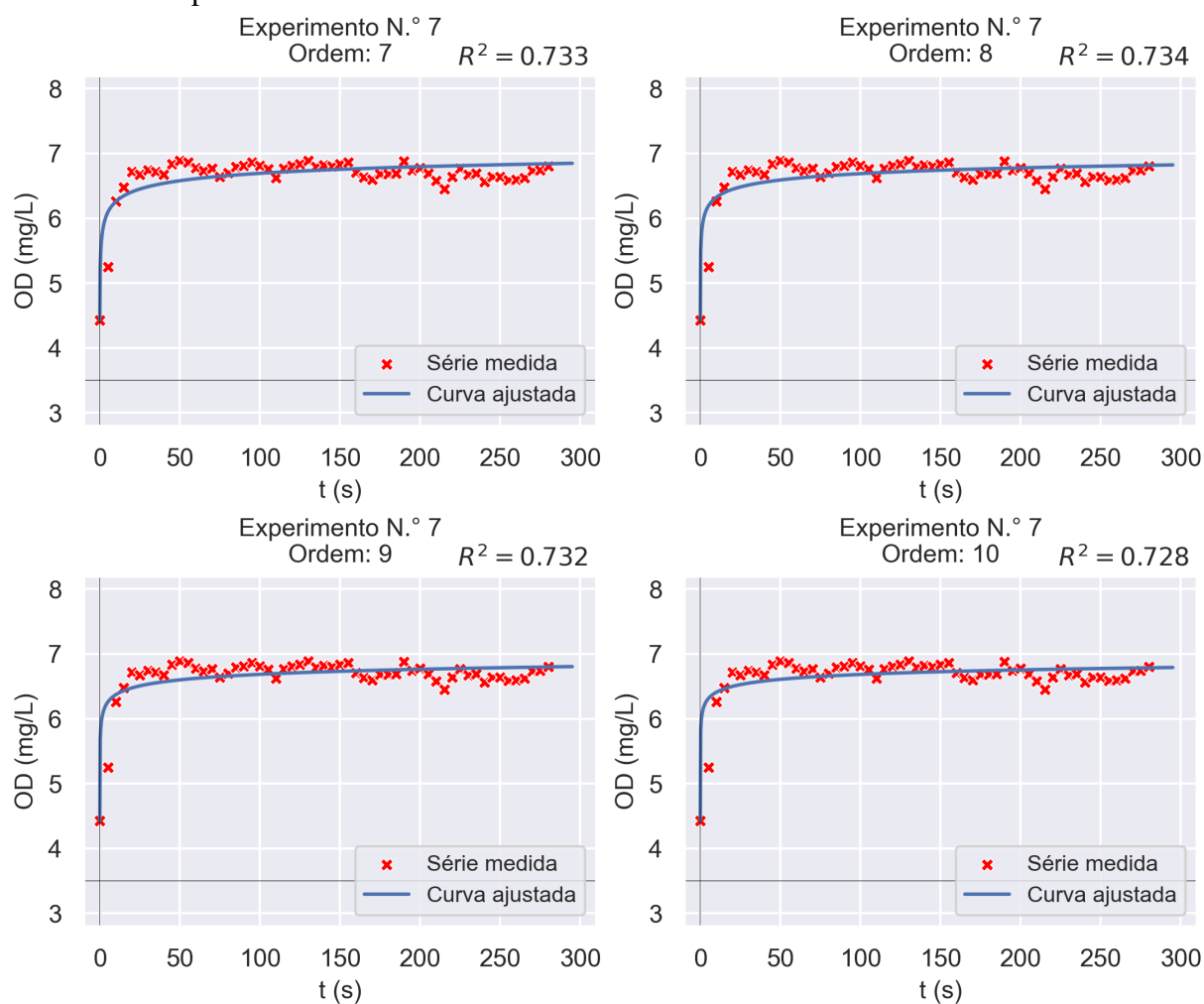
Figura 49 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 7



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

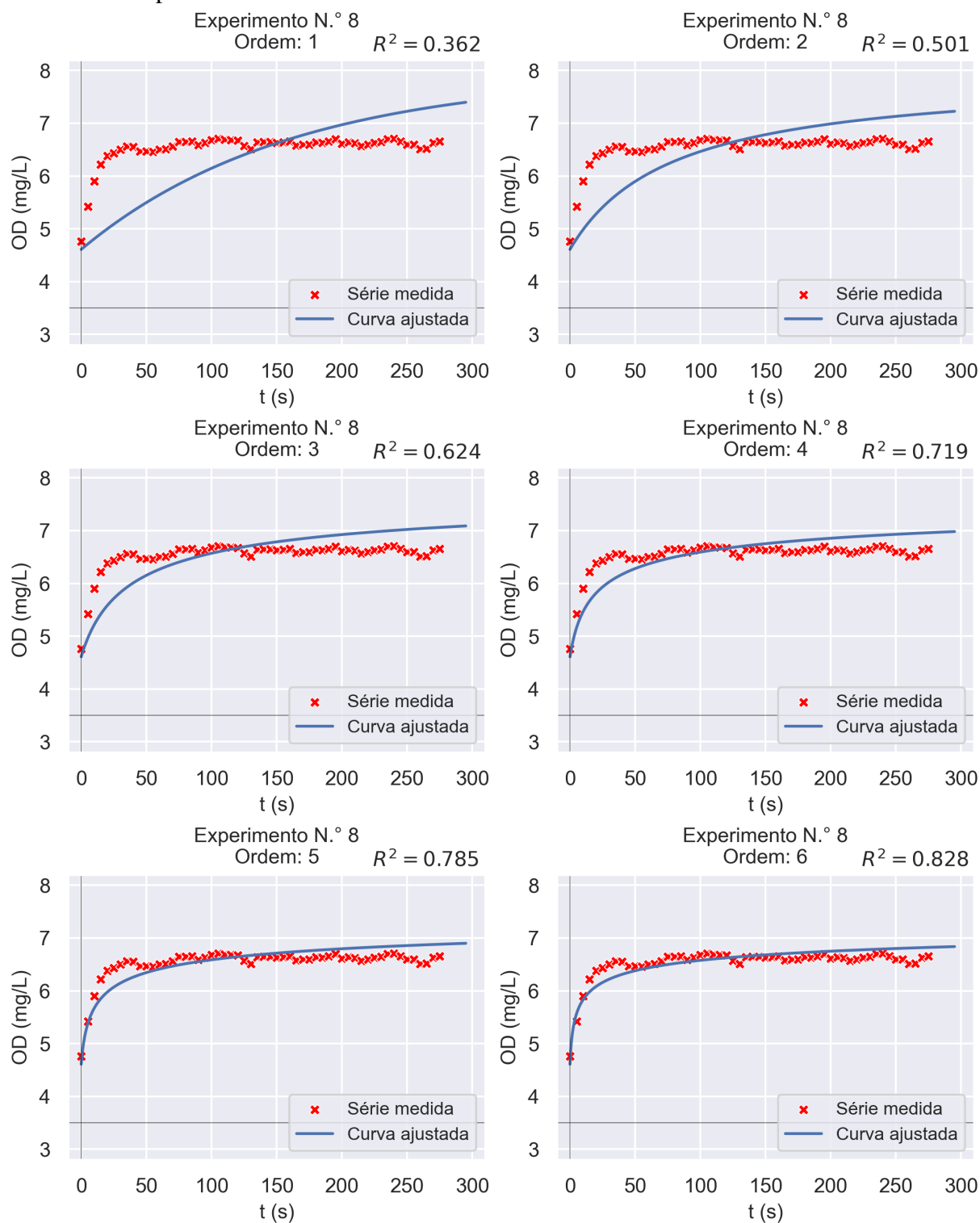
Figura 50 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 7



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

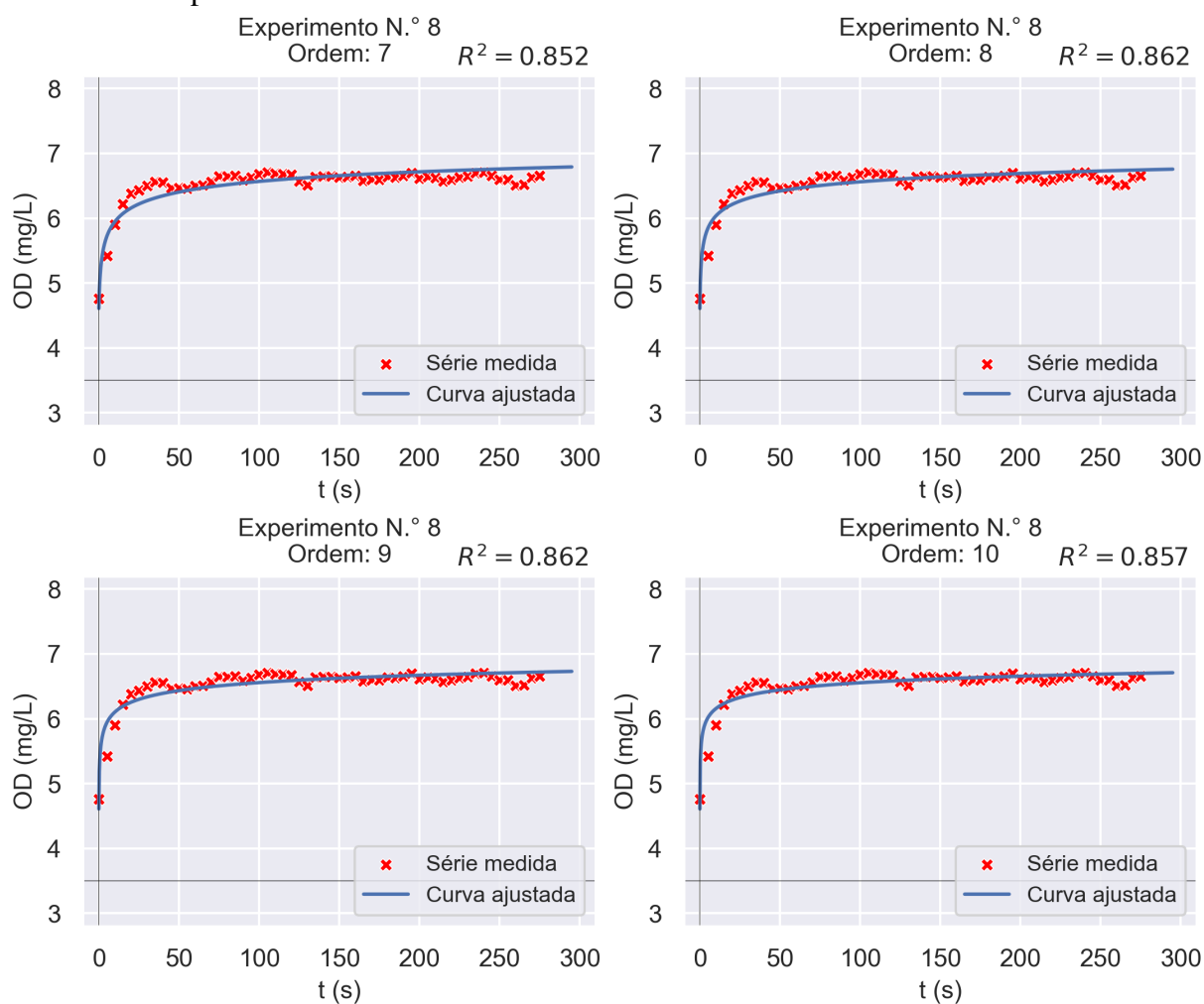
Figura 51 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 8



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

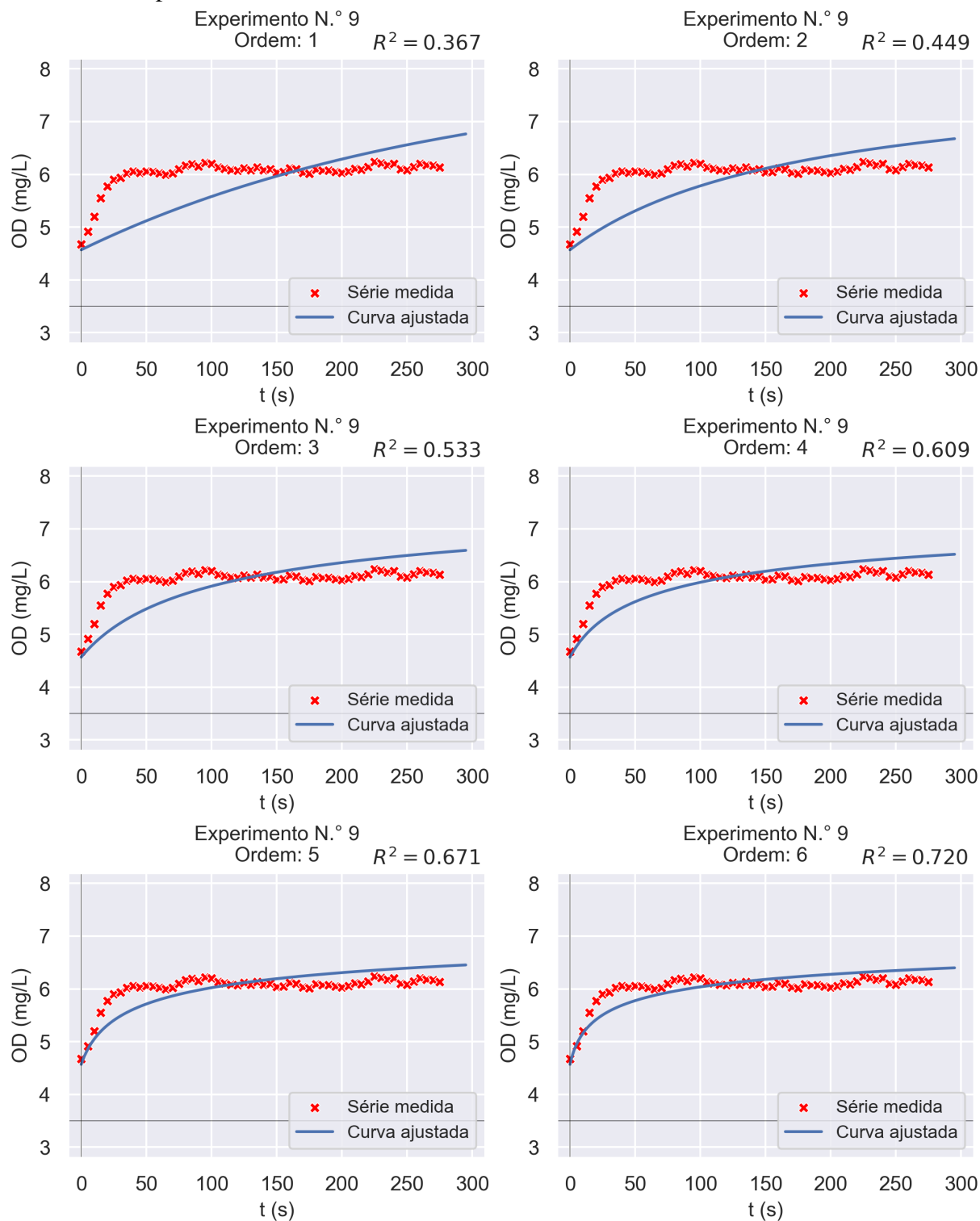
Figura 52 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 8



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

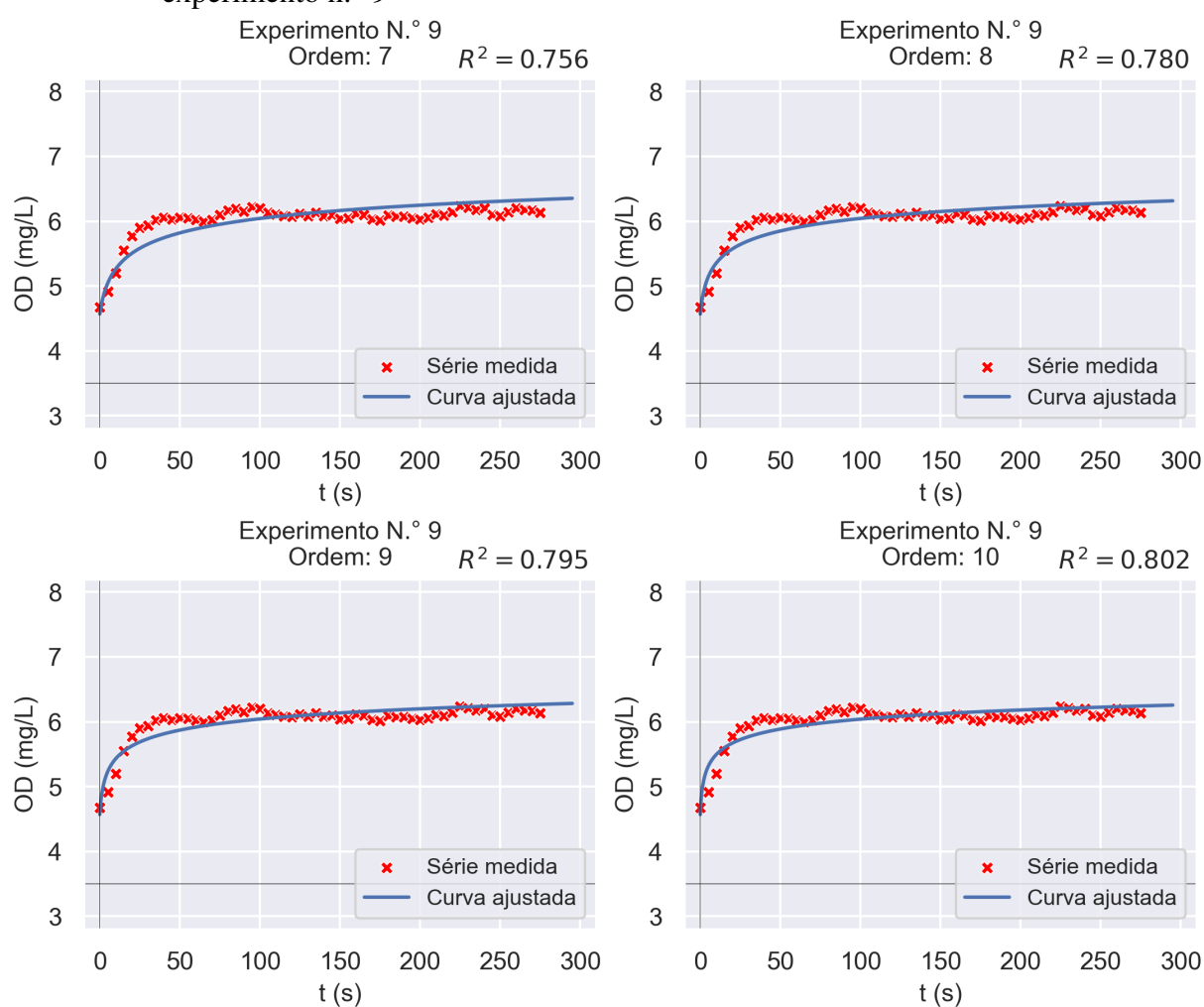
Figura 53 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 9



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

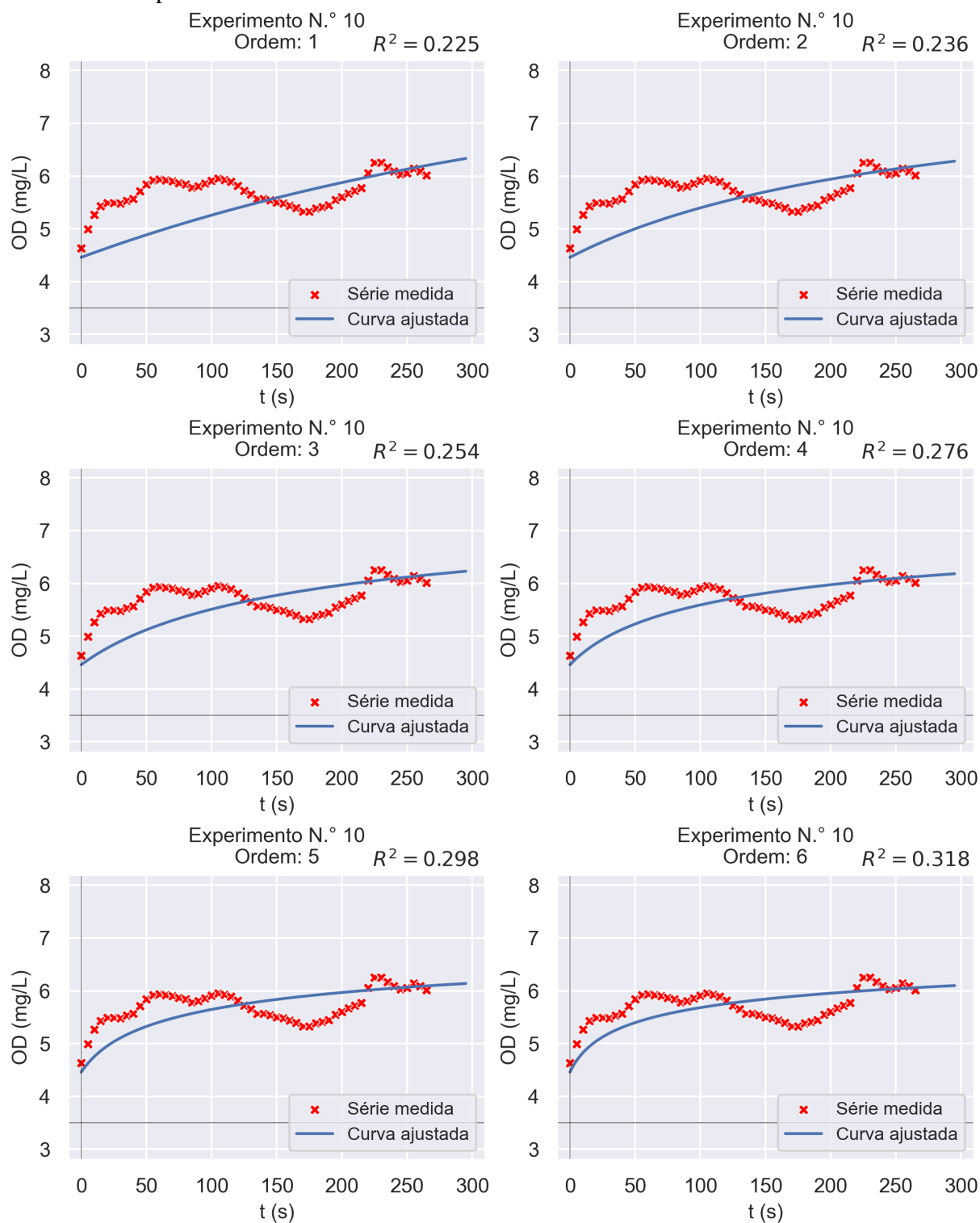
Figura 54 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 9



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 55 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 10

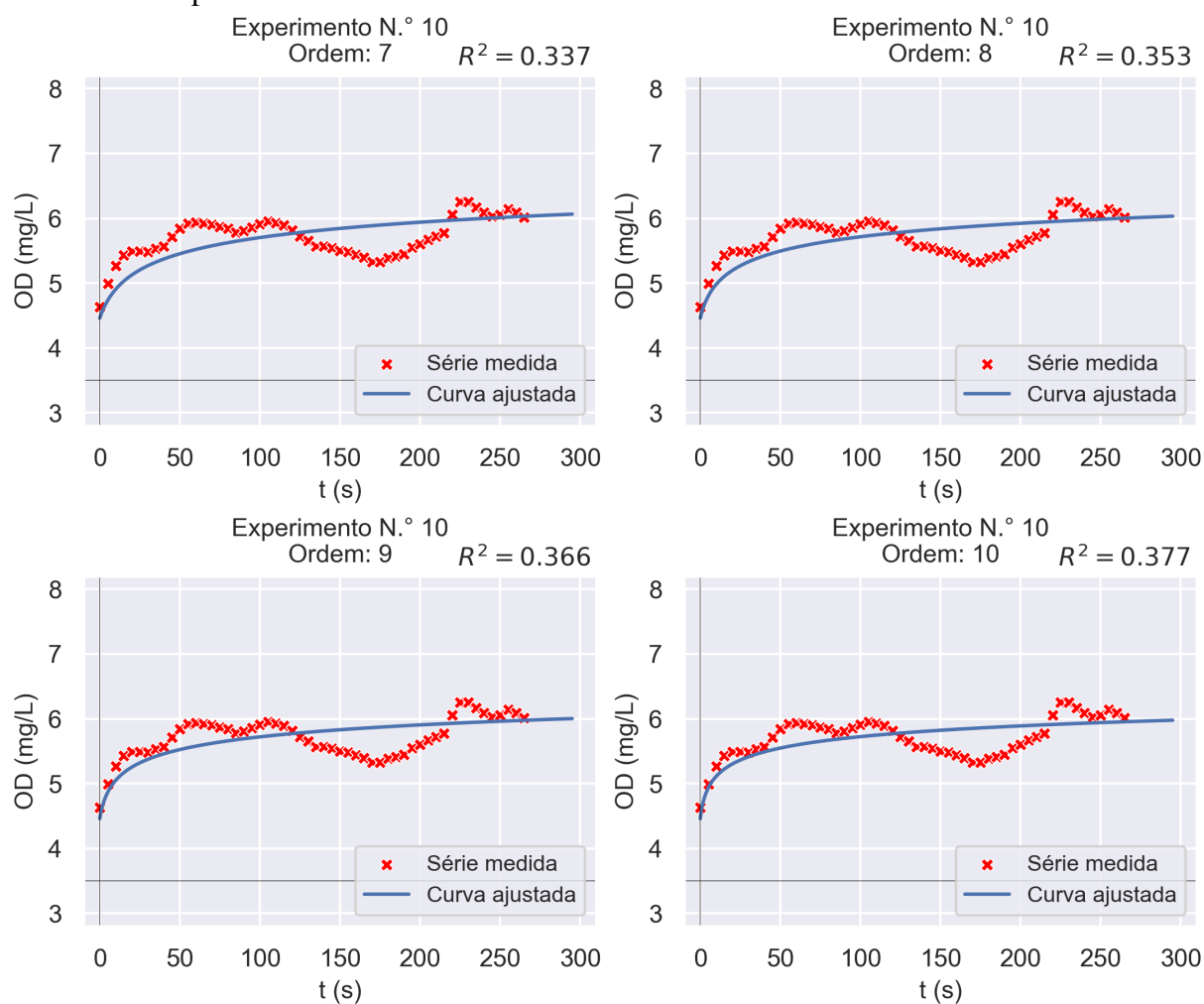


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



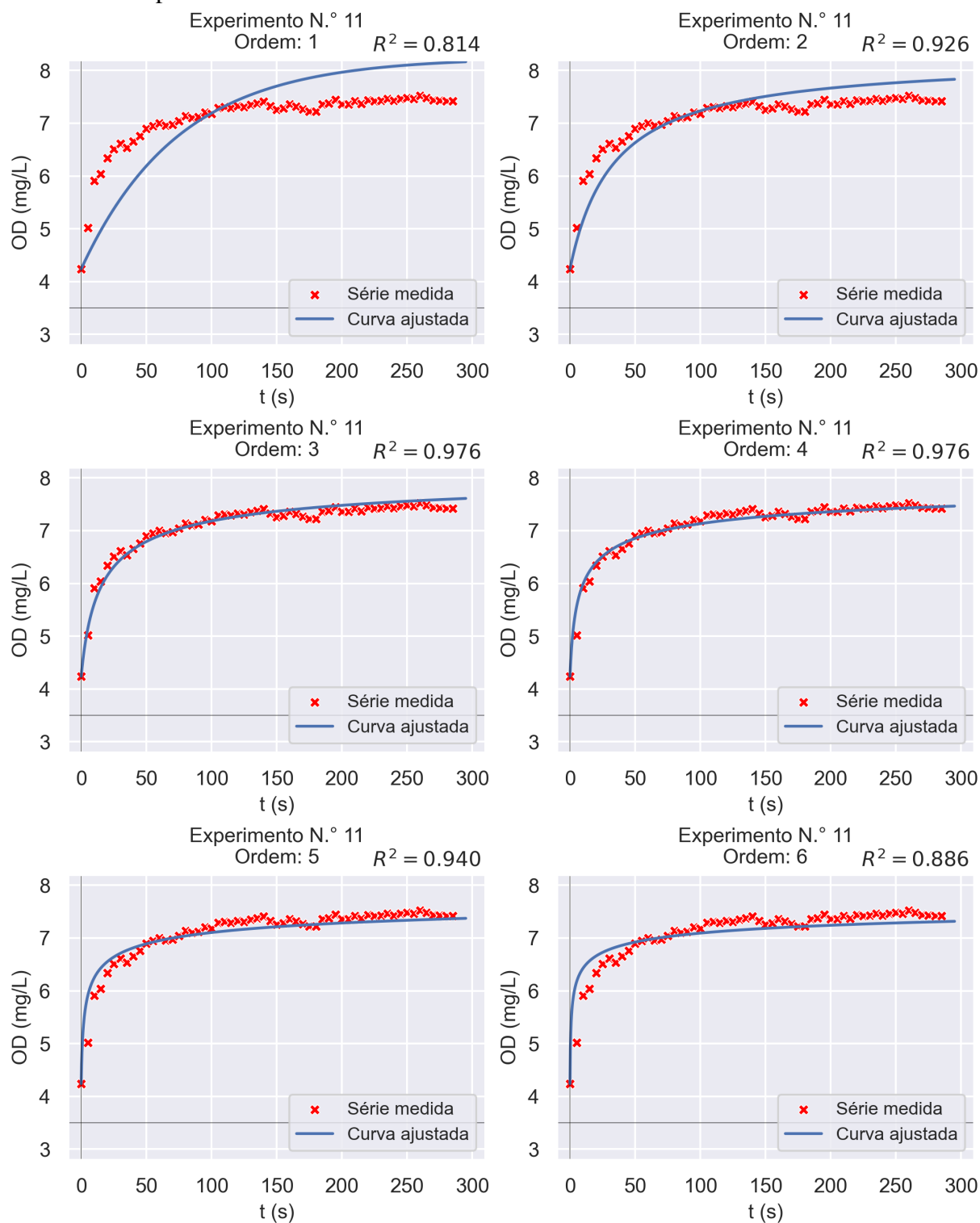
Figura 56 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 10



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

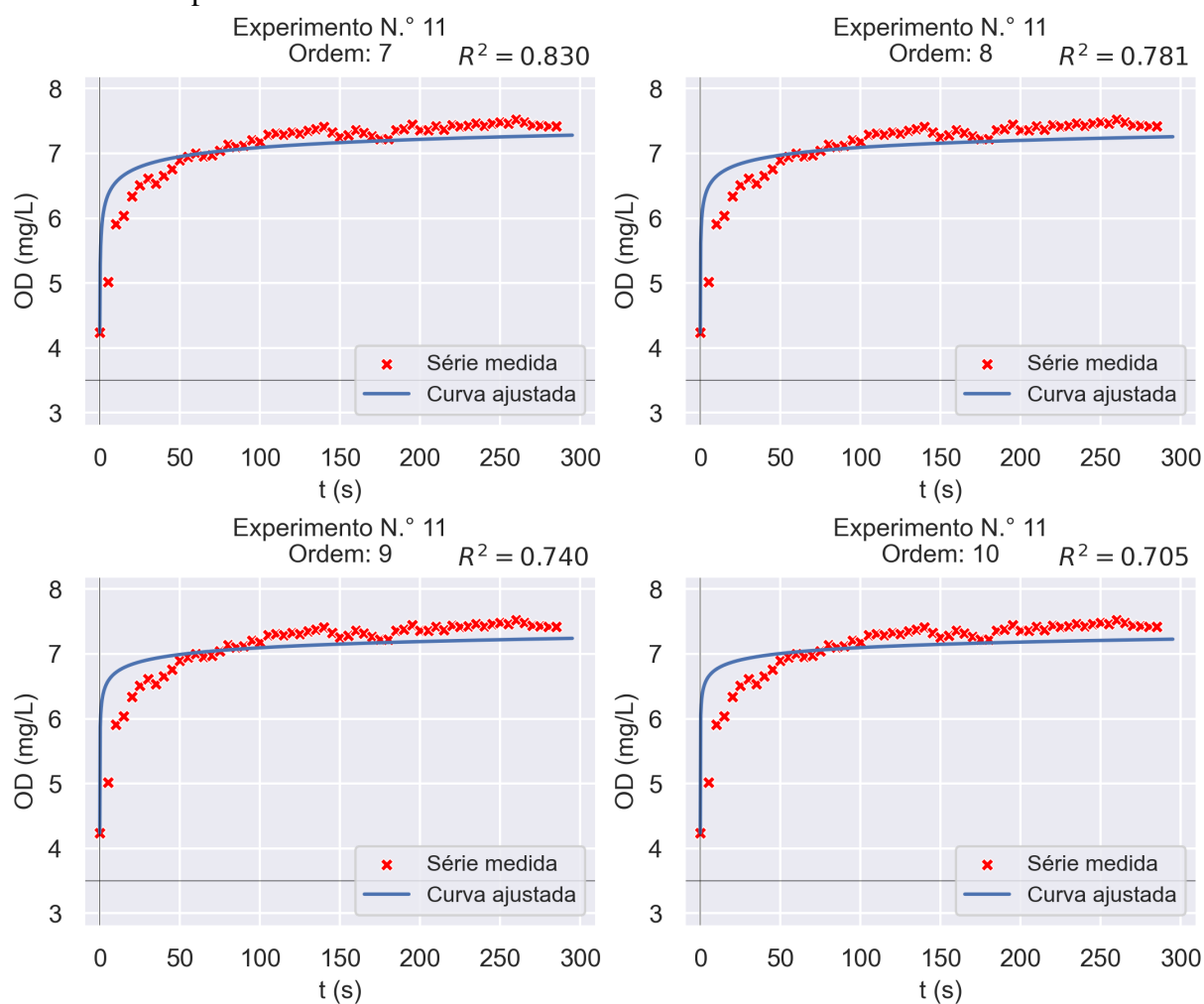
Figura 57 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 11



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

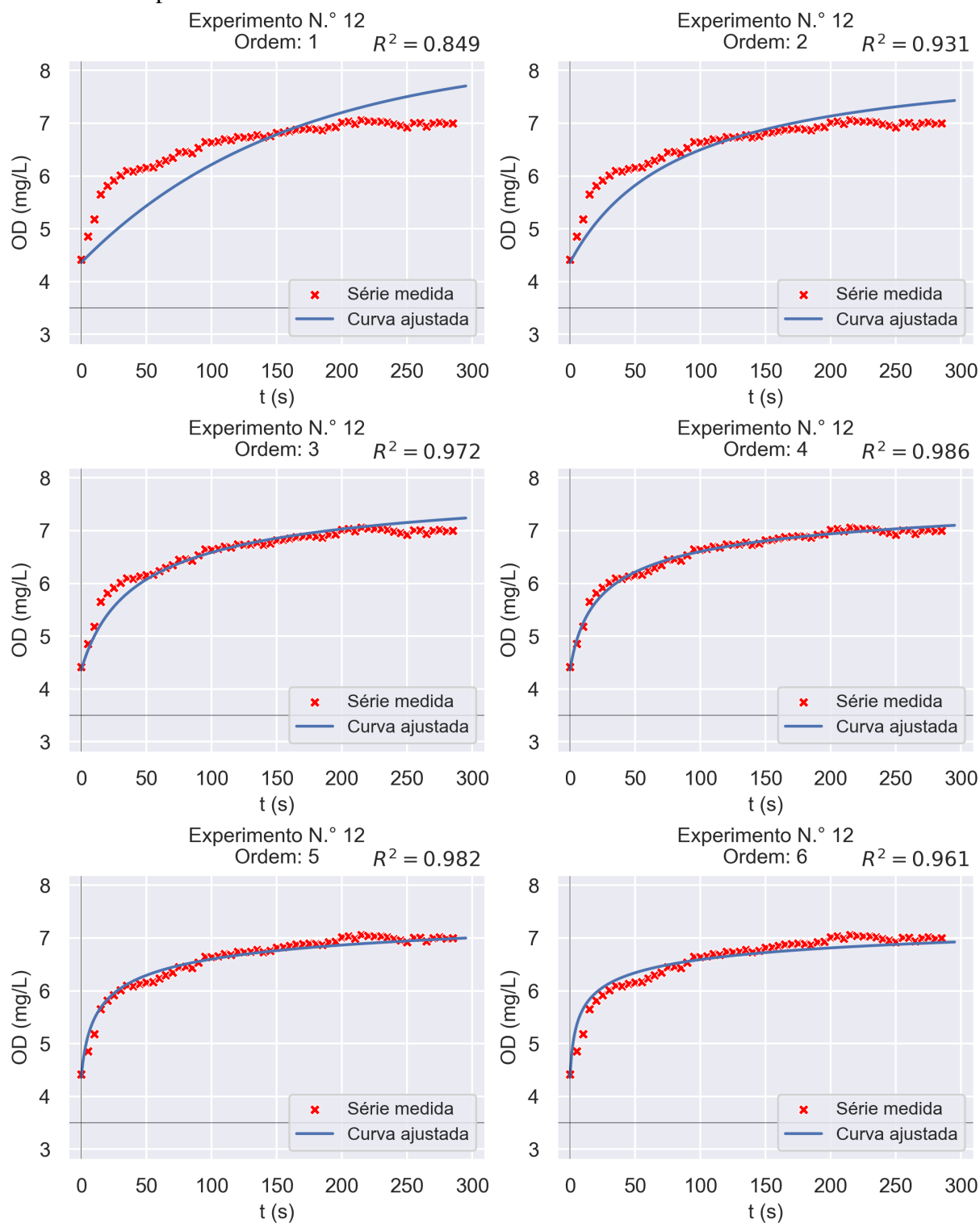
Figura 58 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 11



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

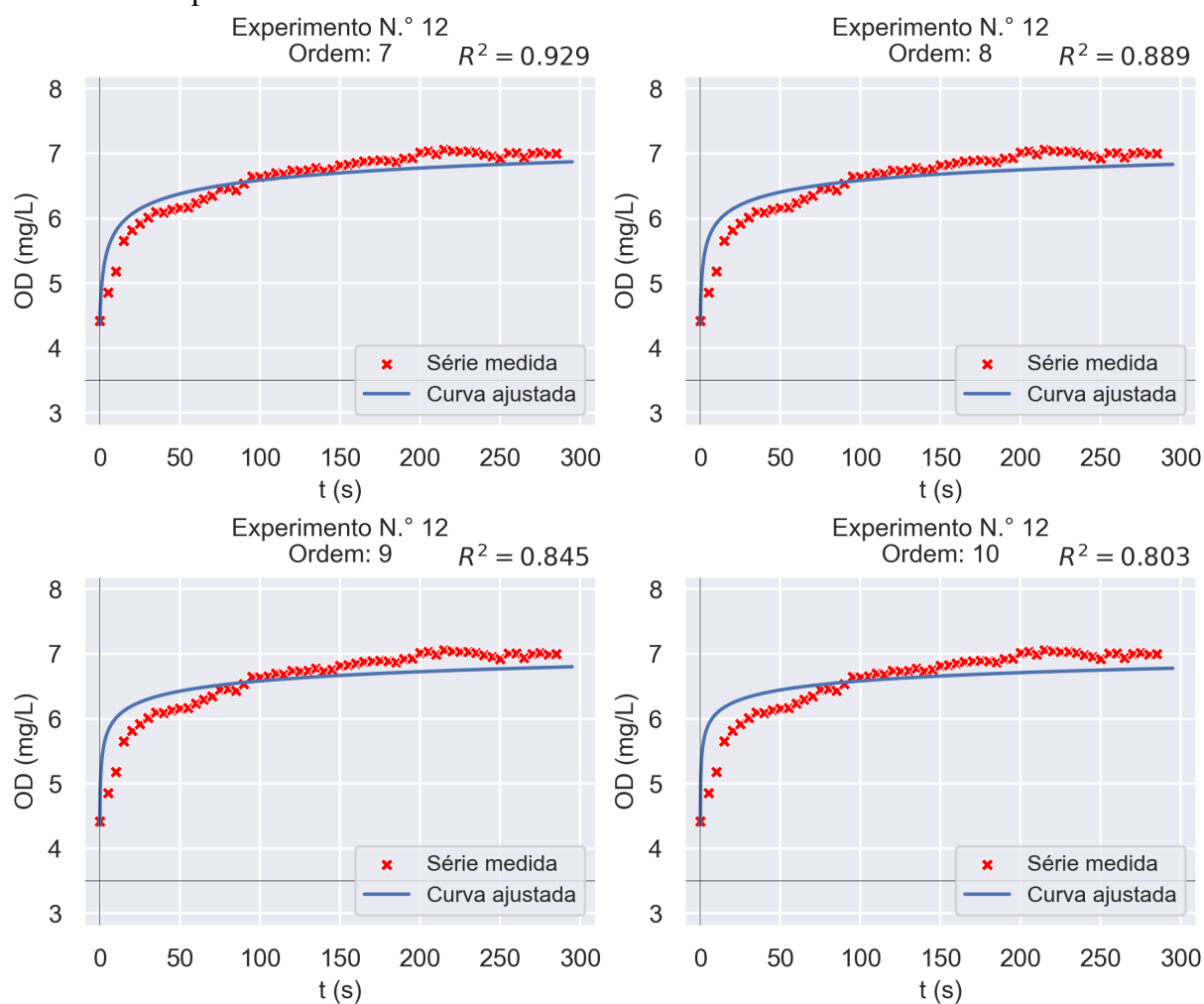
Figura 59 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 12



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

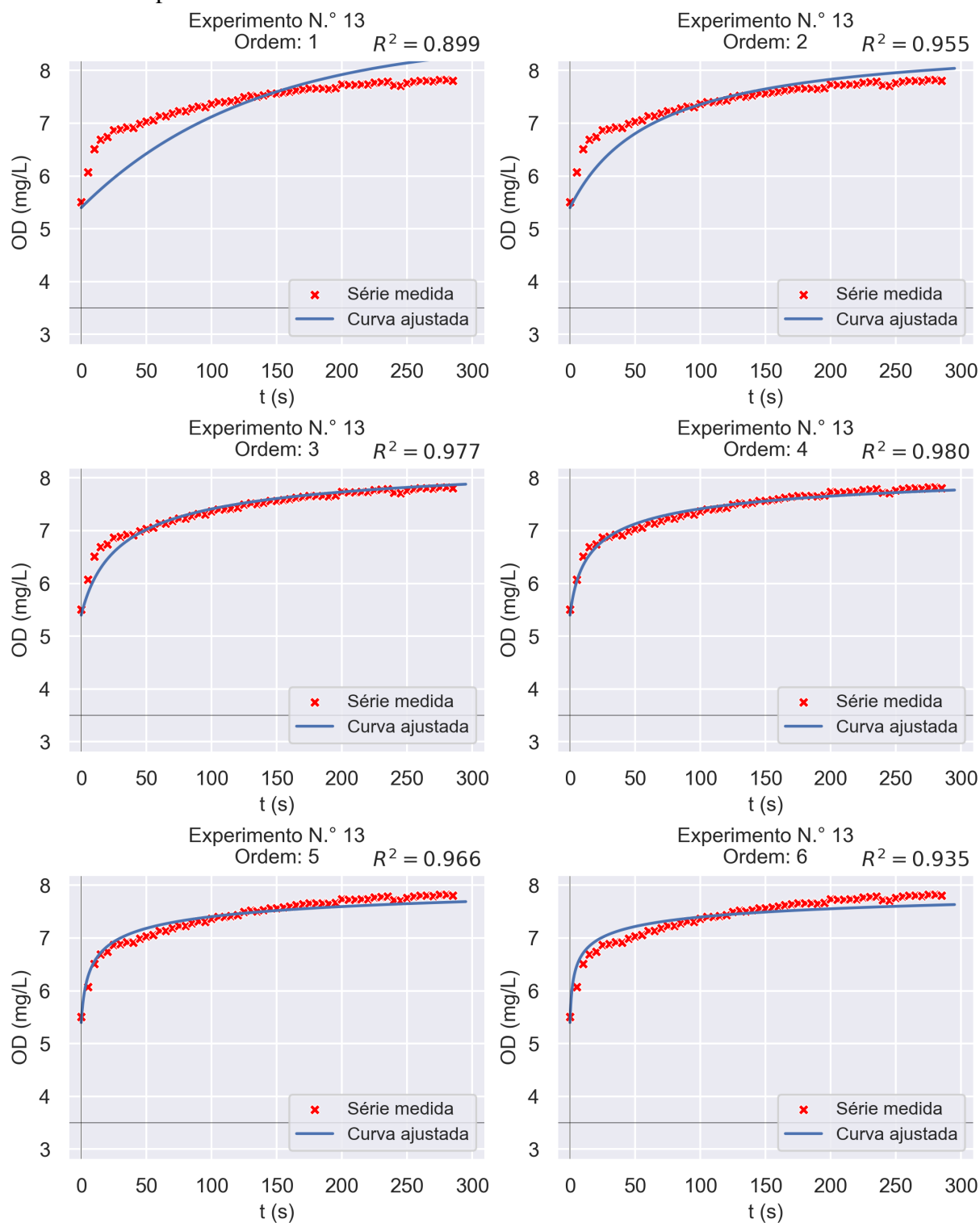
Figura 60 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 12



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

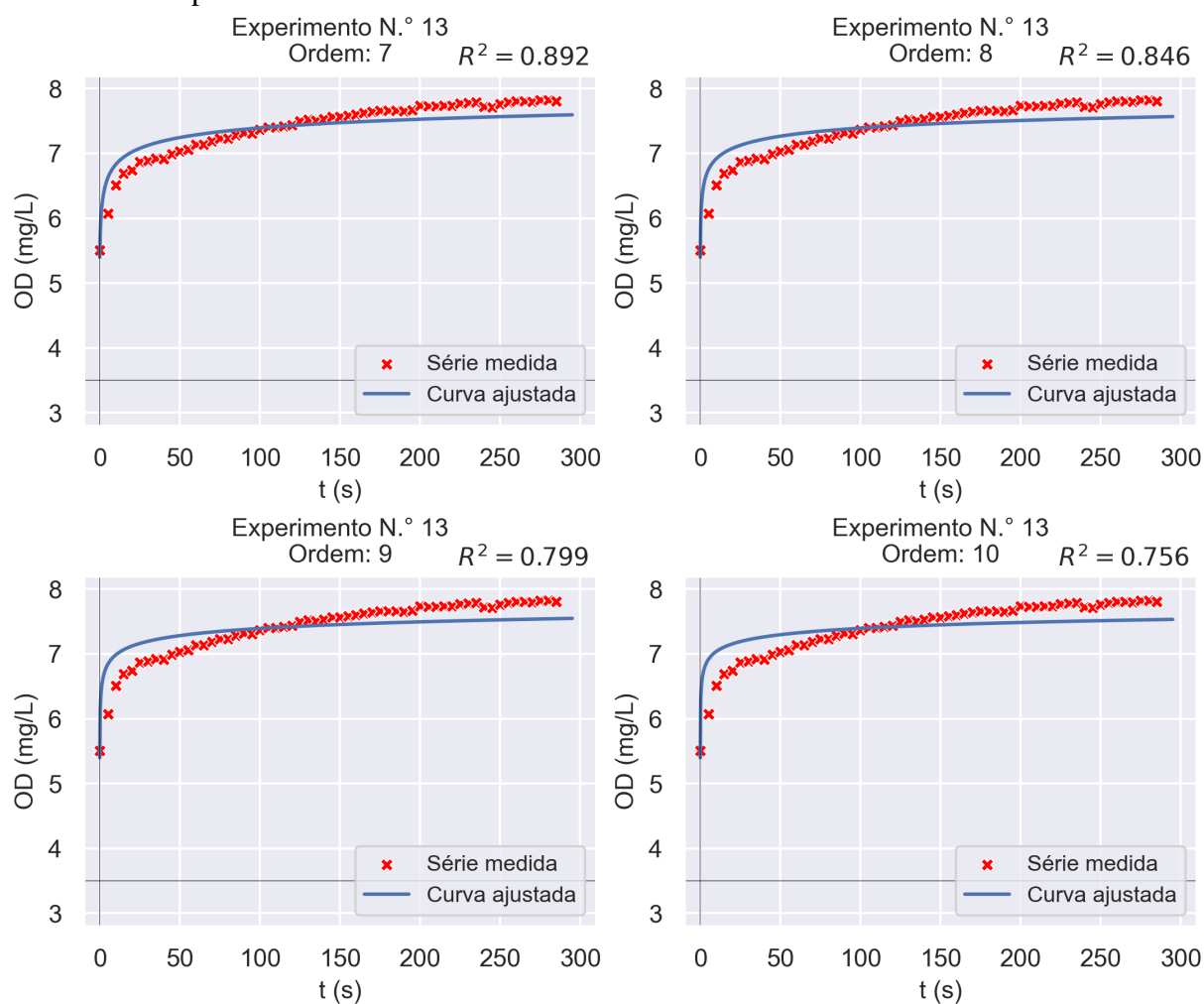
Figura 61 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 13



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

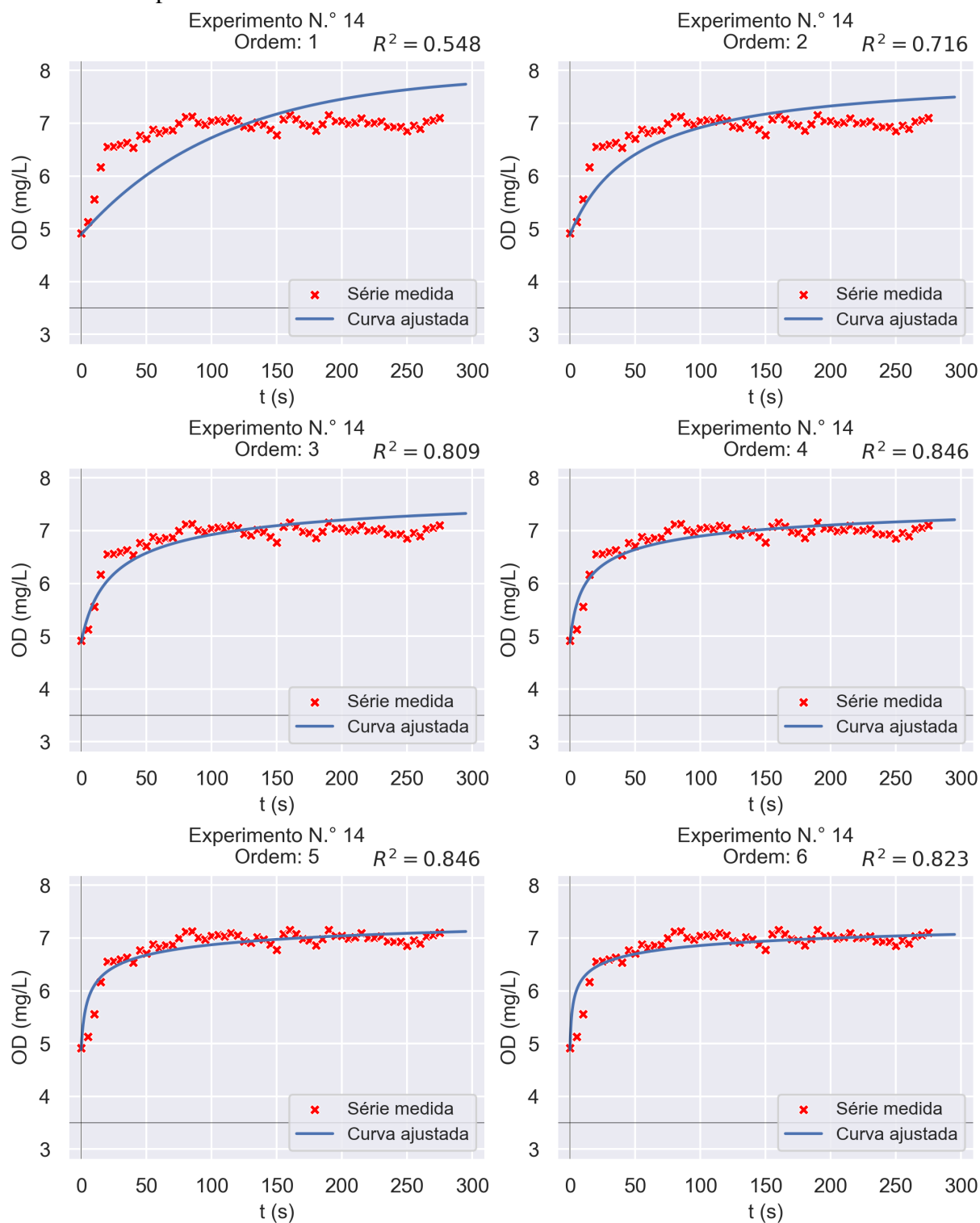
Figura 62 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 13



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 63 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 14

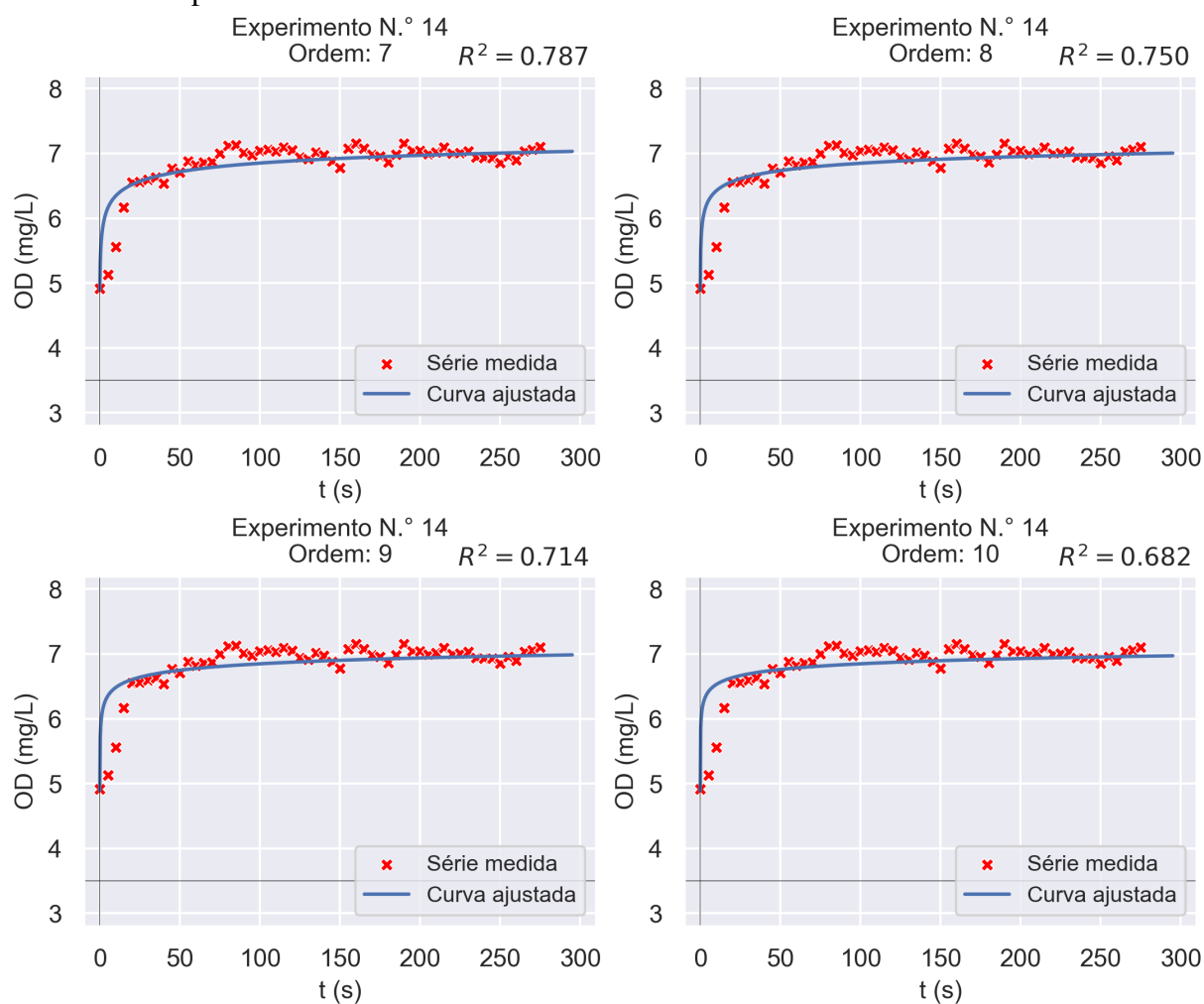


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



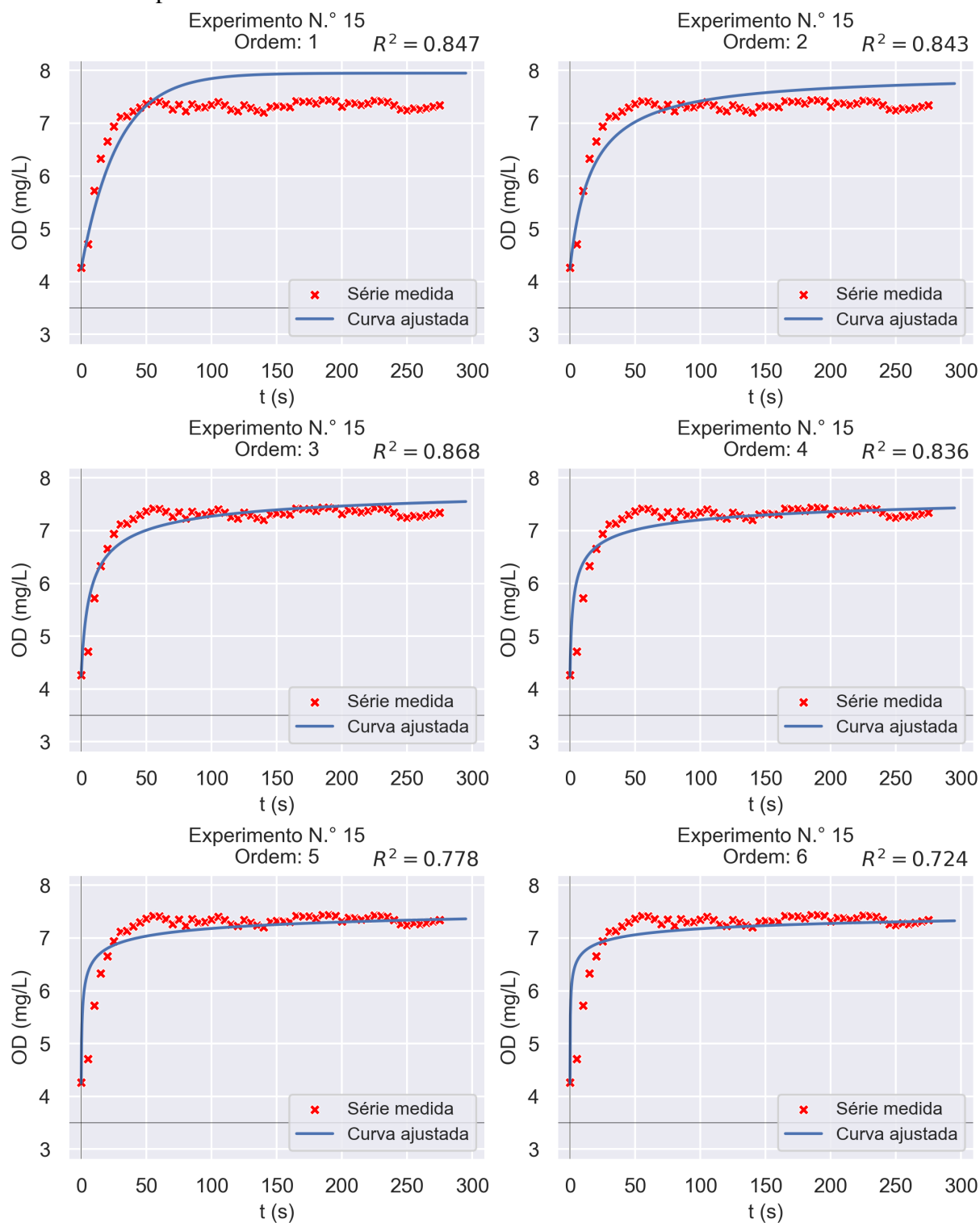
Figura 64 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 14



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

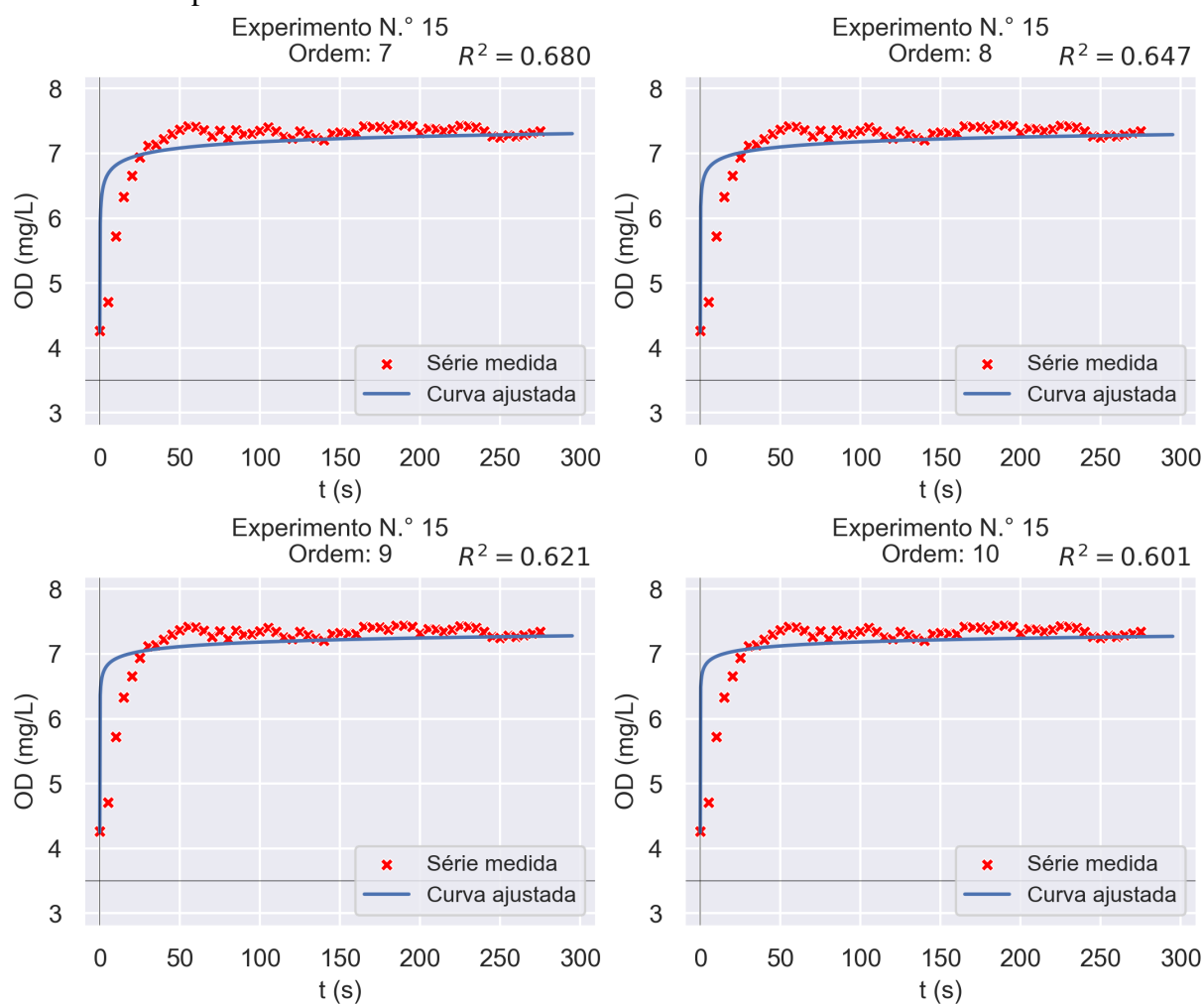
Figura 65 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 15



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

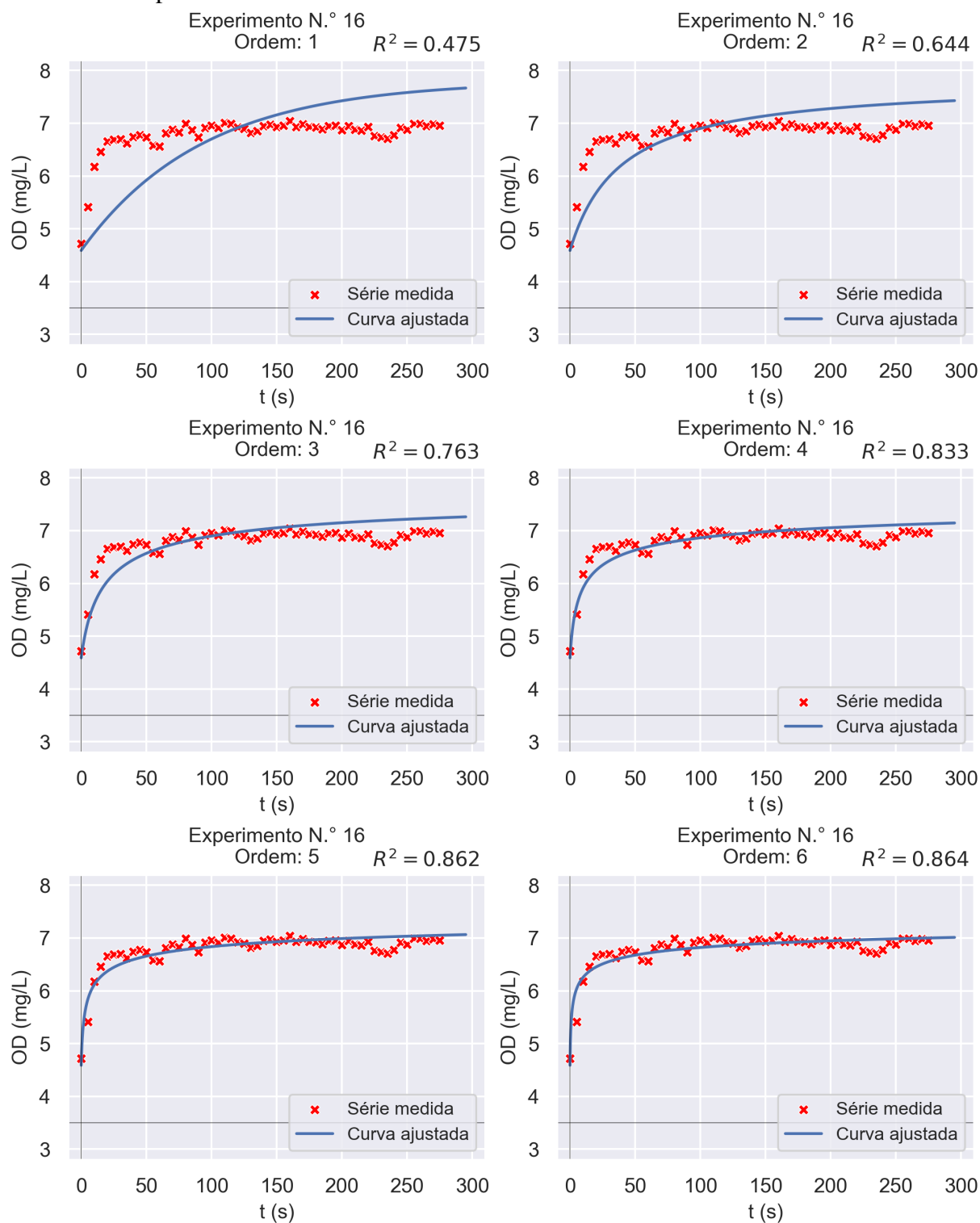
Figura 66 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 15



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

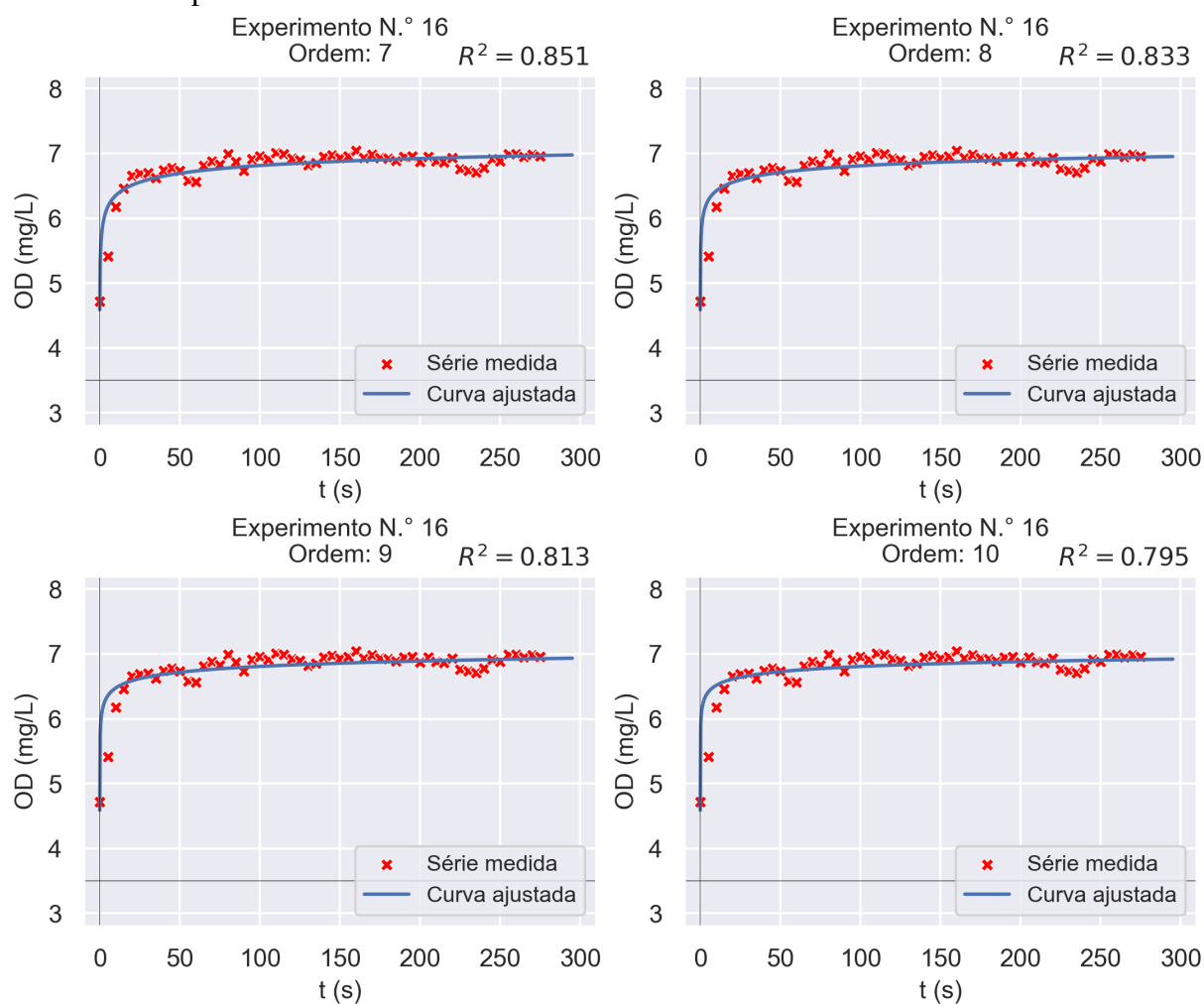
Figura 67 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 16



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

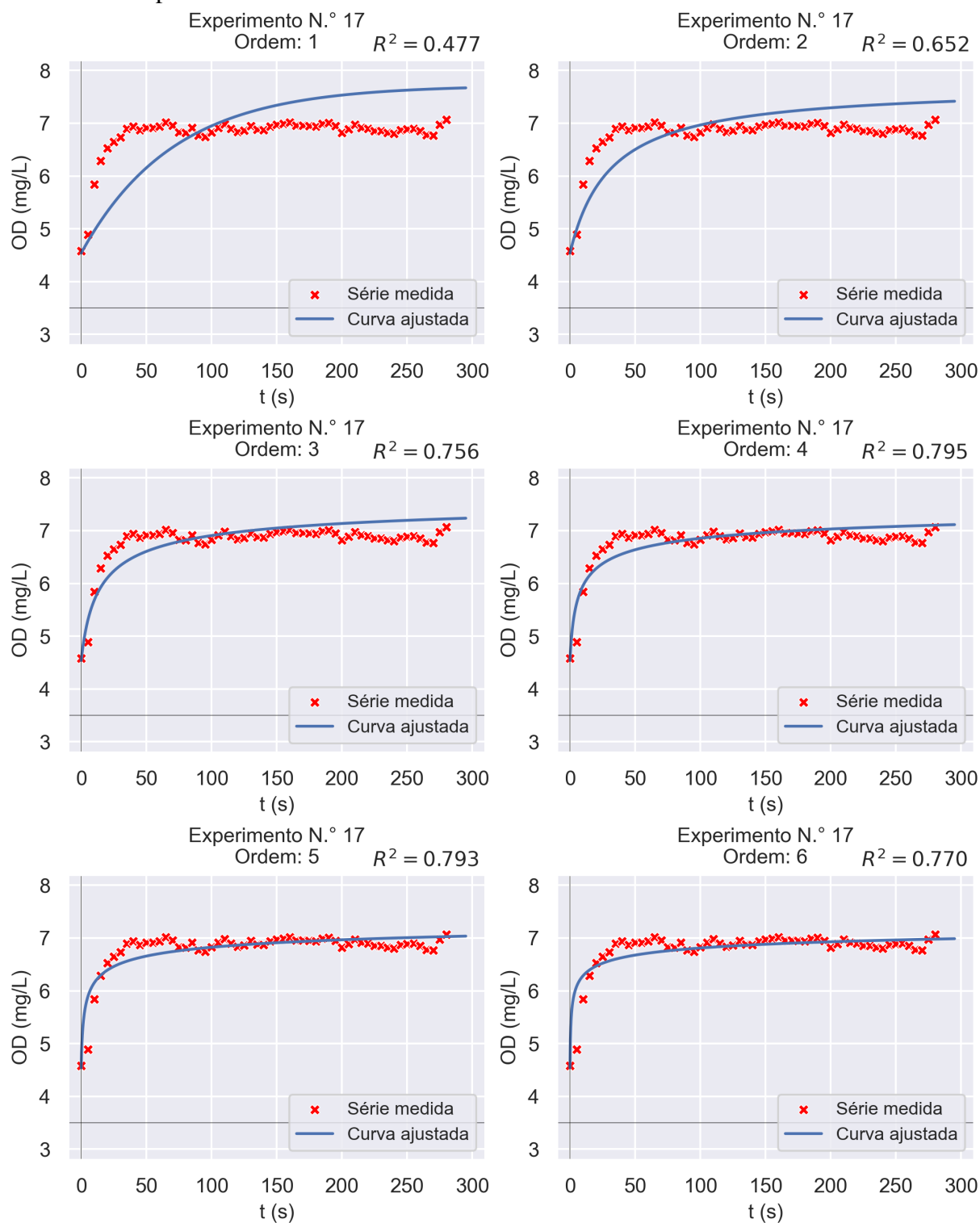
Figura 68 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 16



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

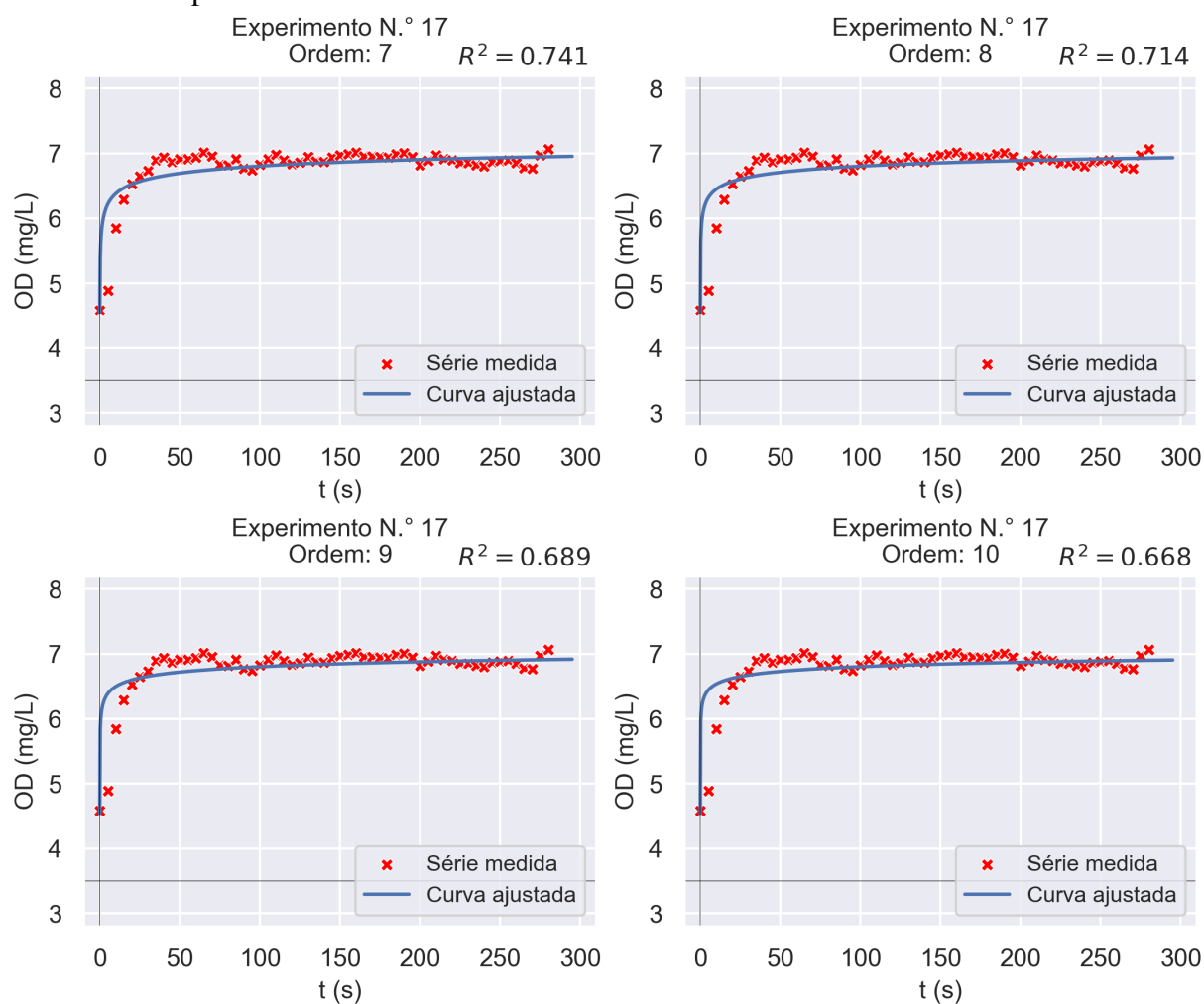
Figura 69 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 17



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

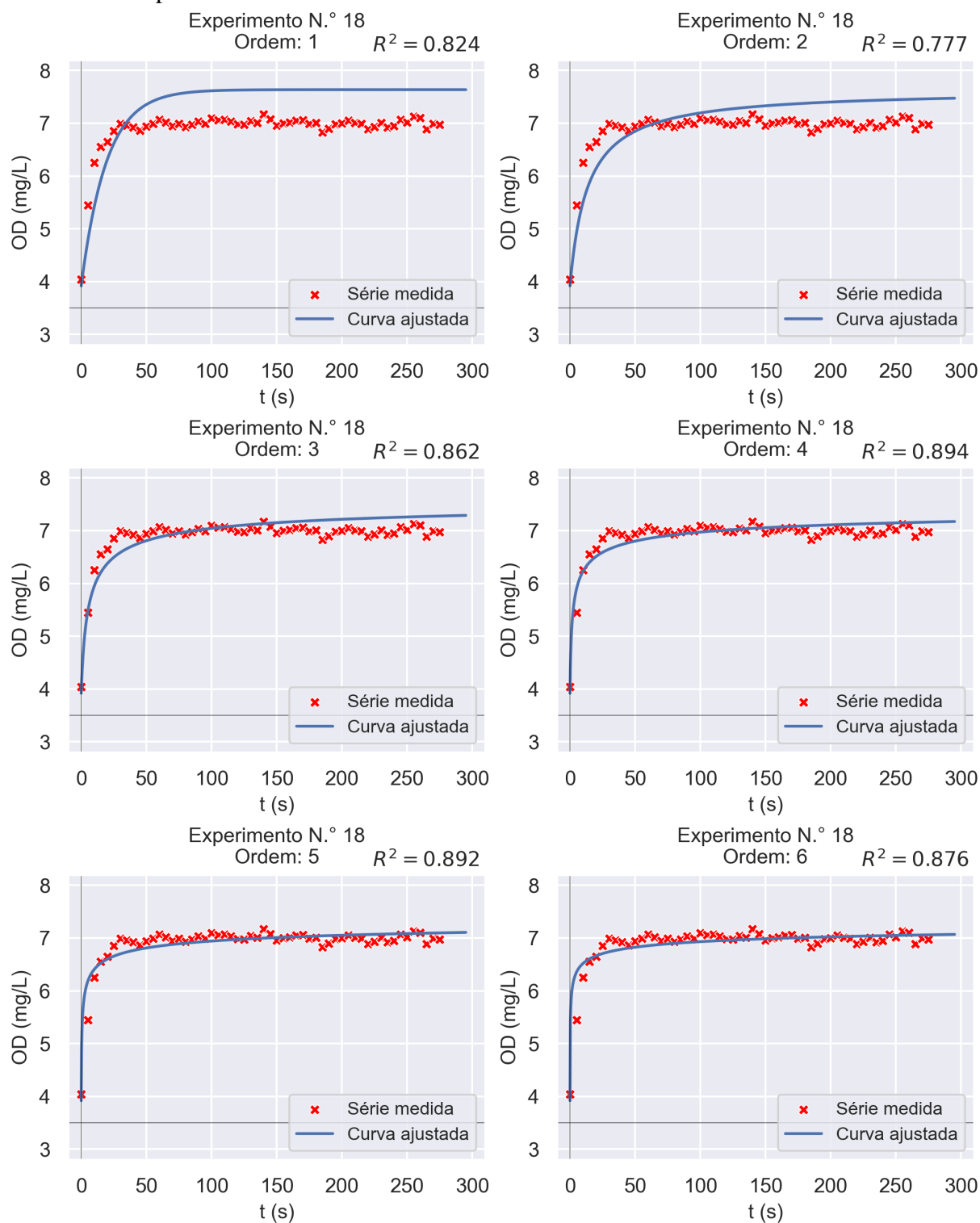
Figura 70 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 17



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 71 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 18

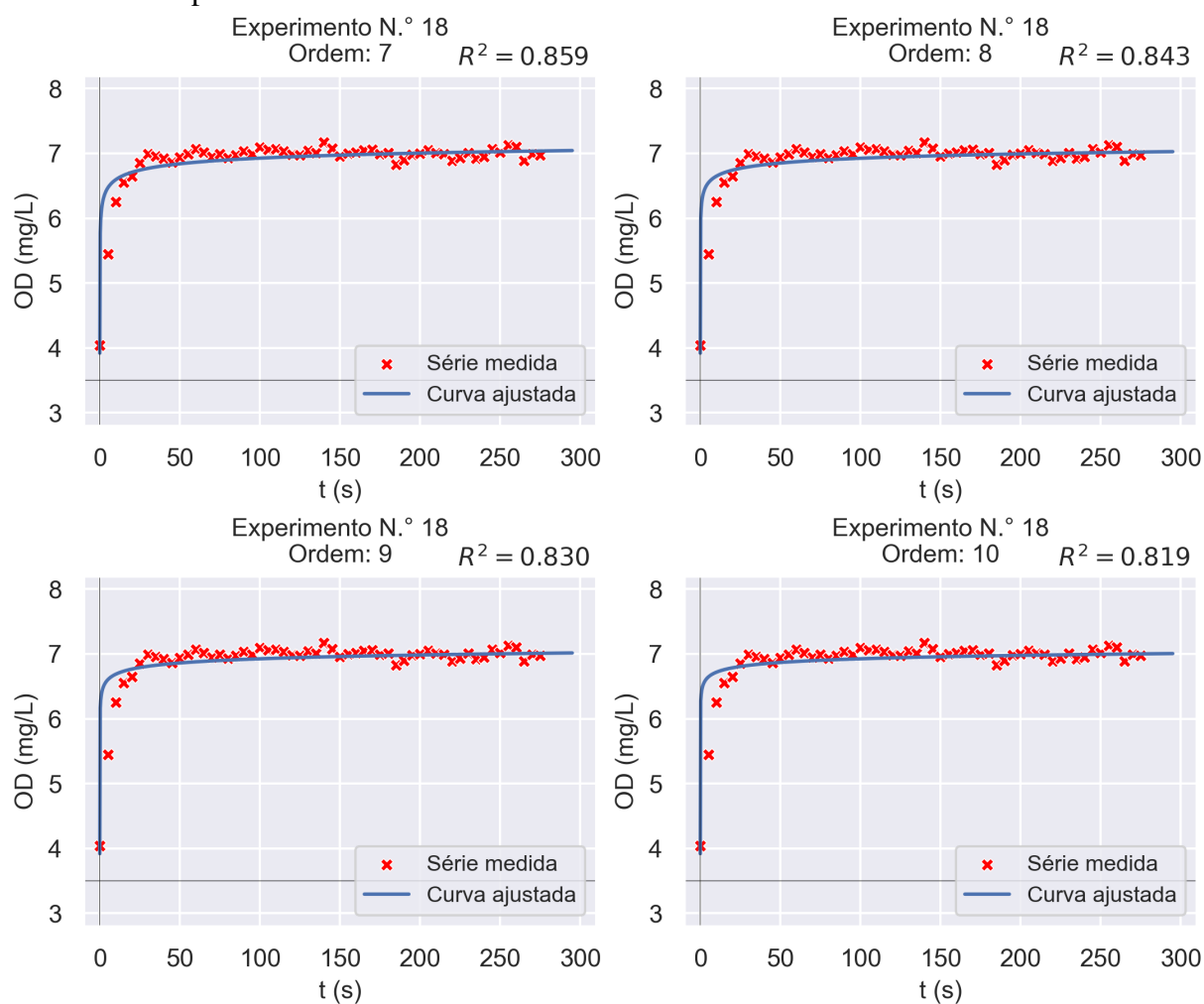


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



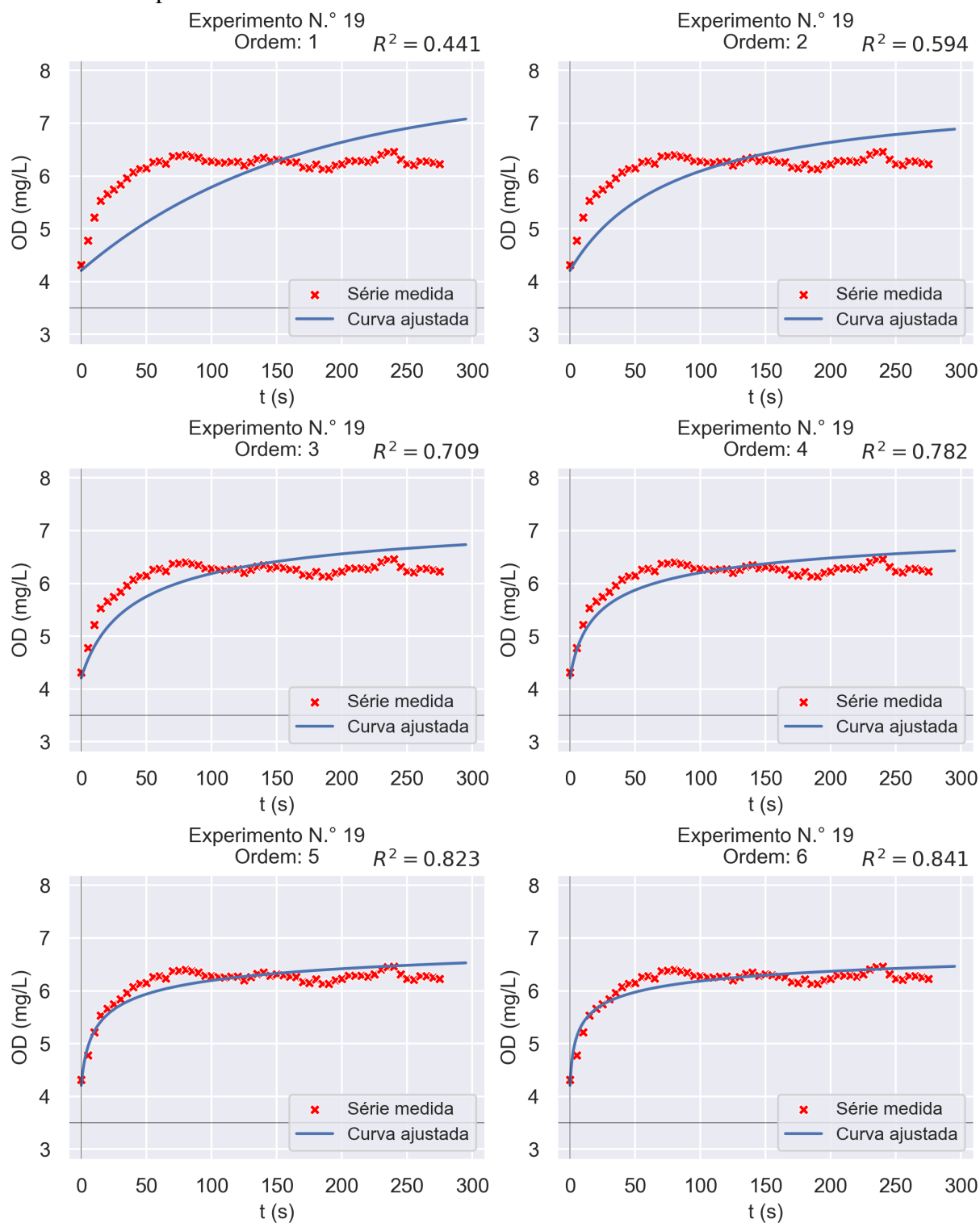
Figura 72 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 18



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

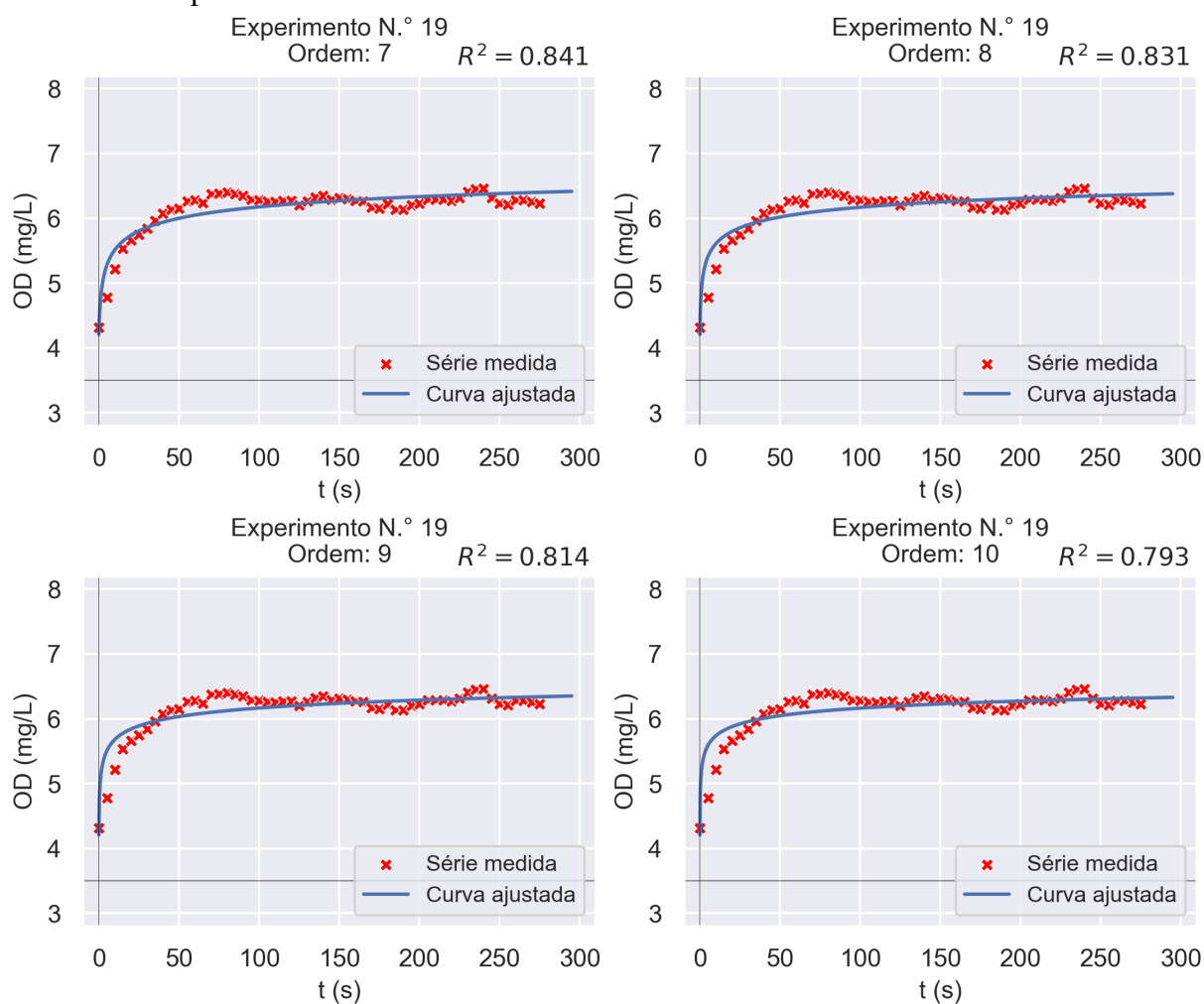
Figura 73 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 19



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

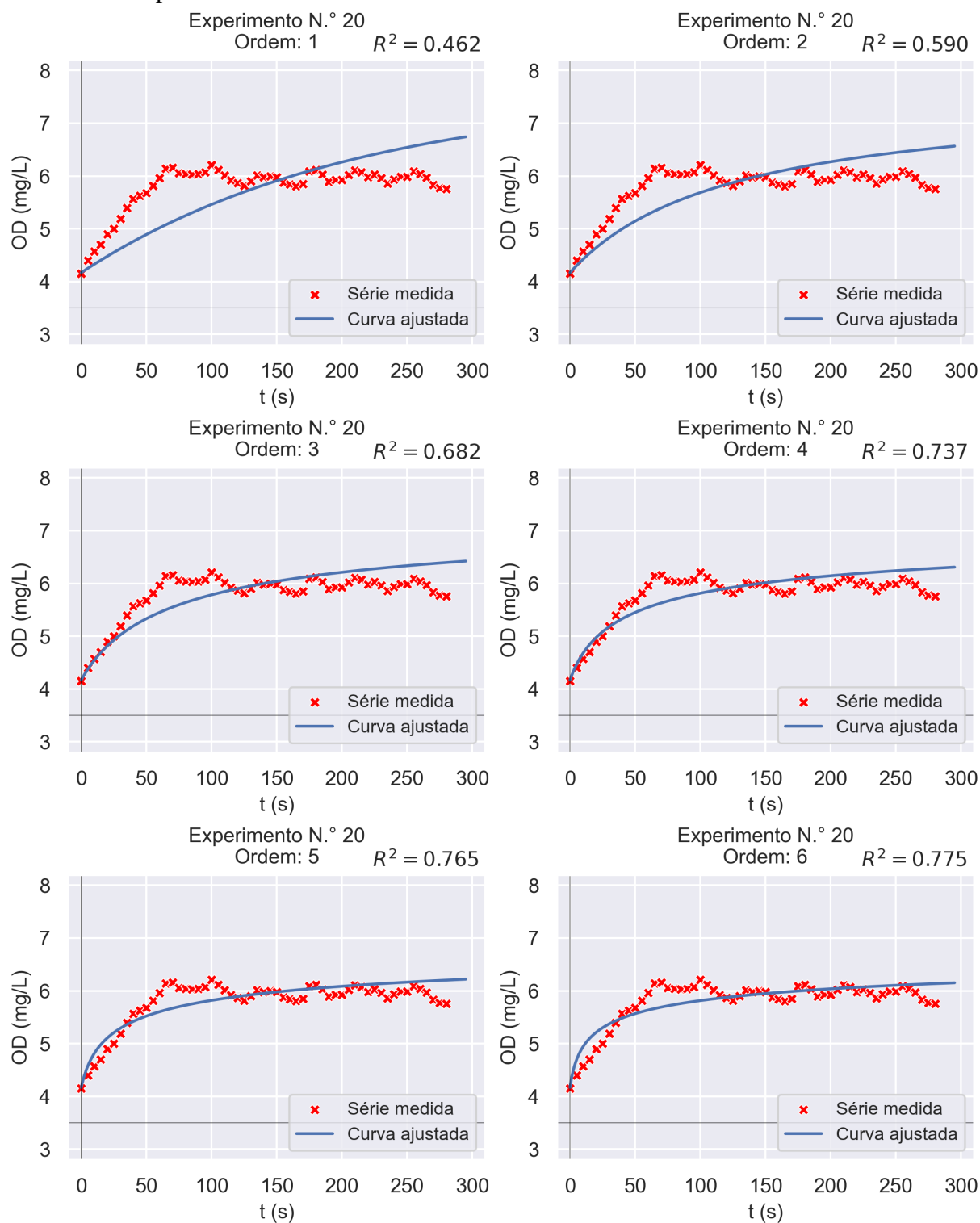
Figura 74 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 19



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

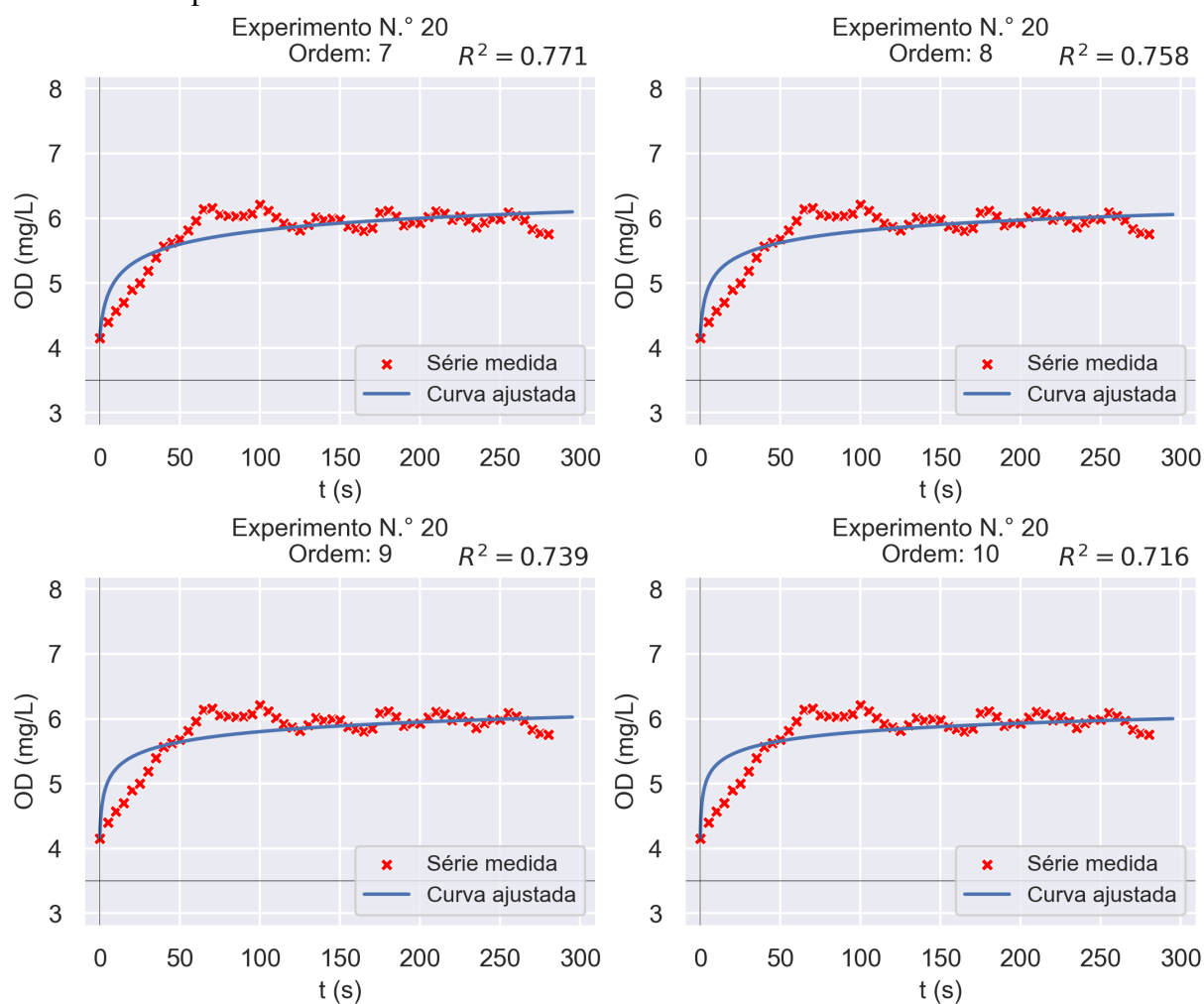
Figura 75 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 20



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

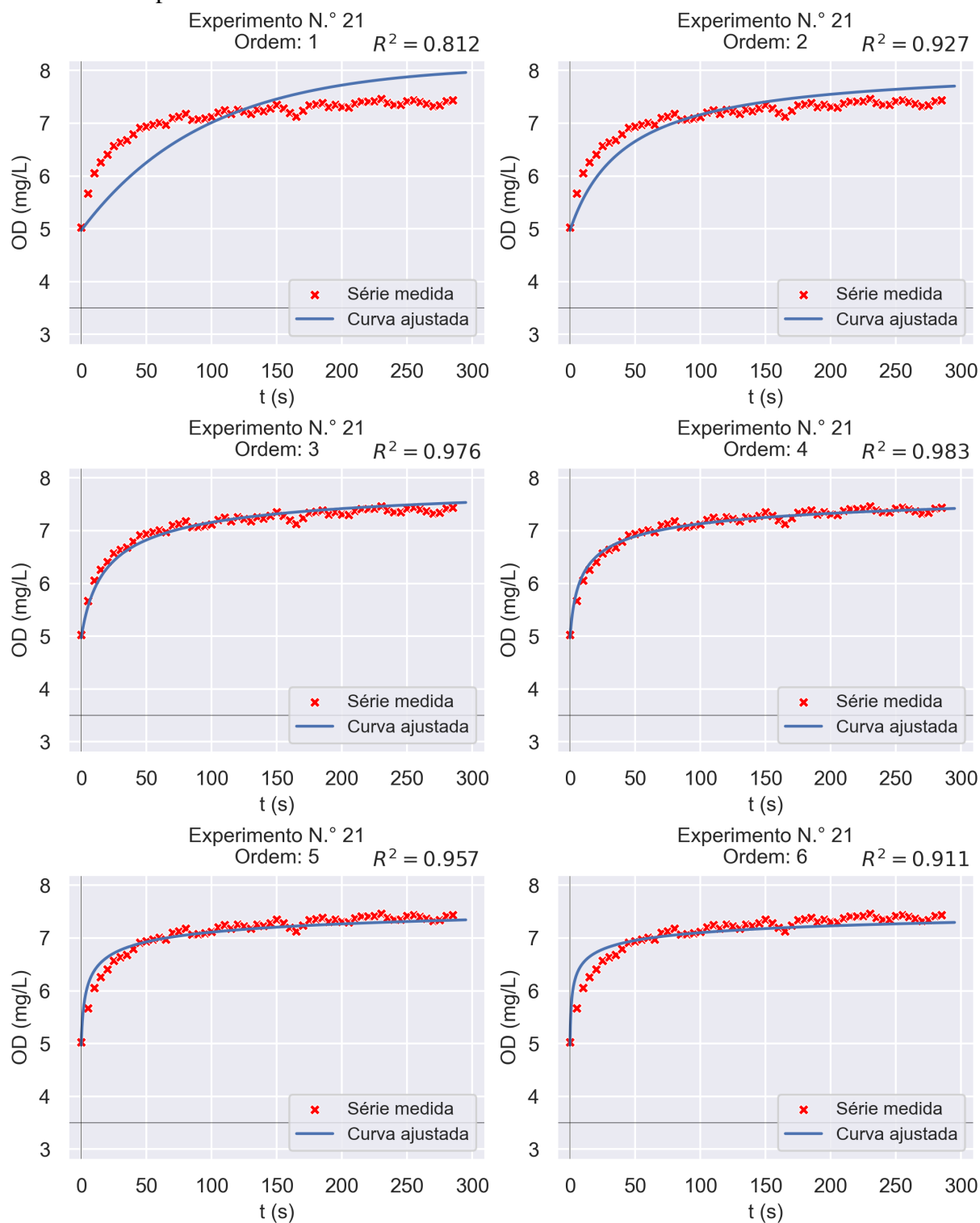
Figura 76 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 20



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

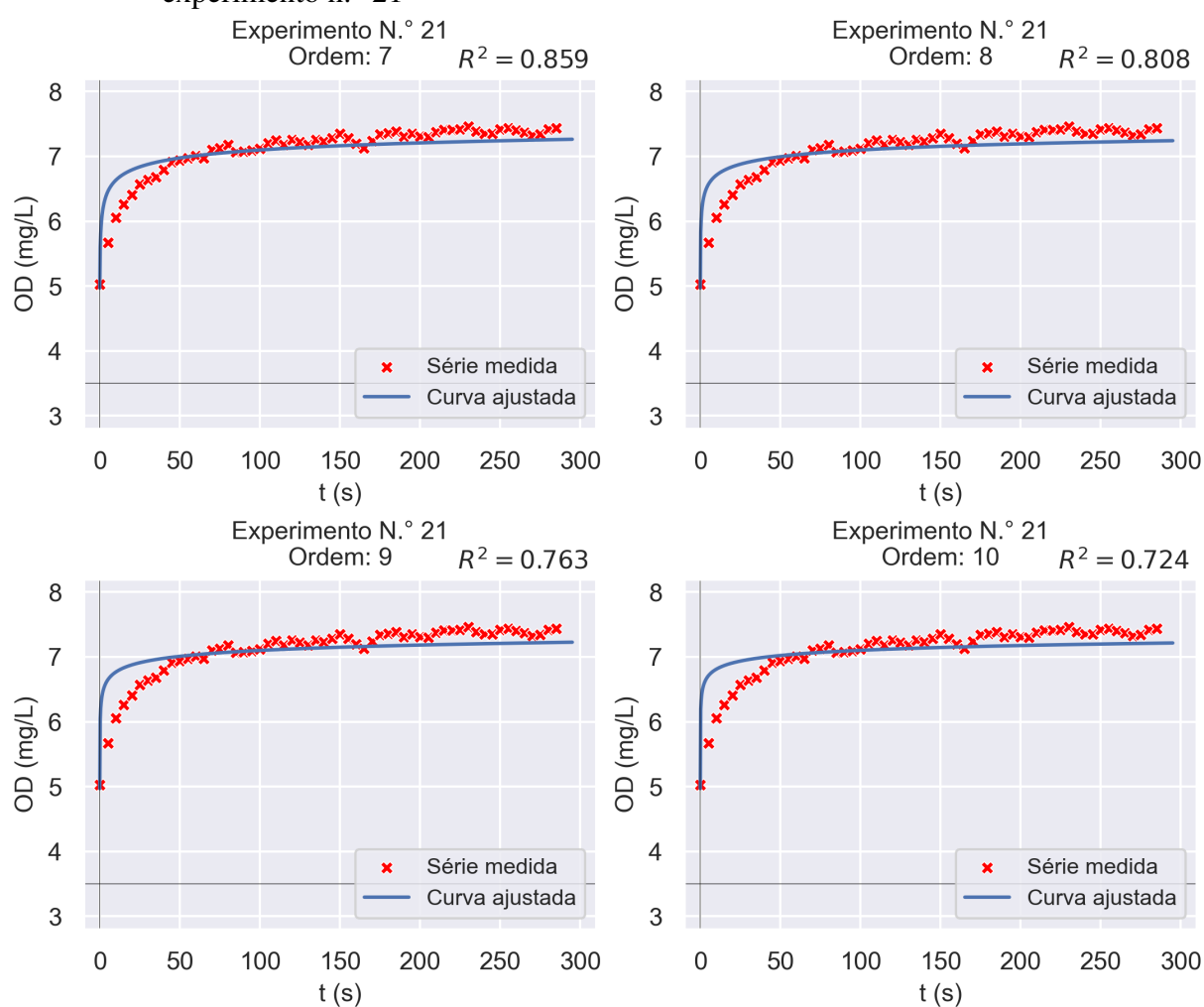
Figura 77 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 21



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

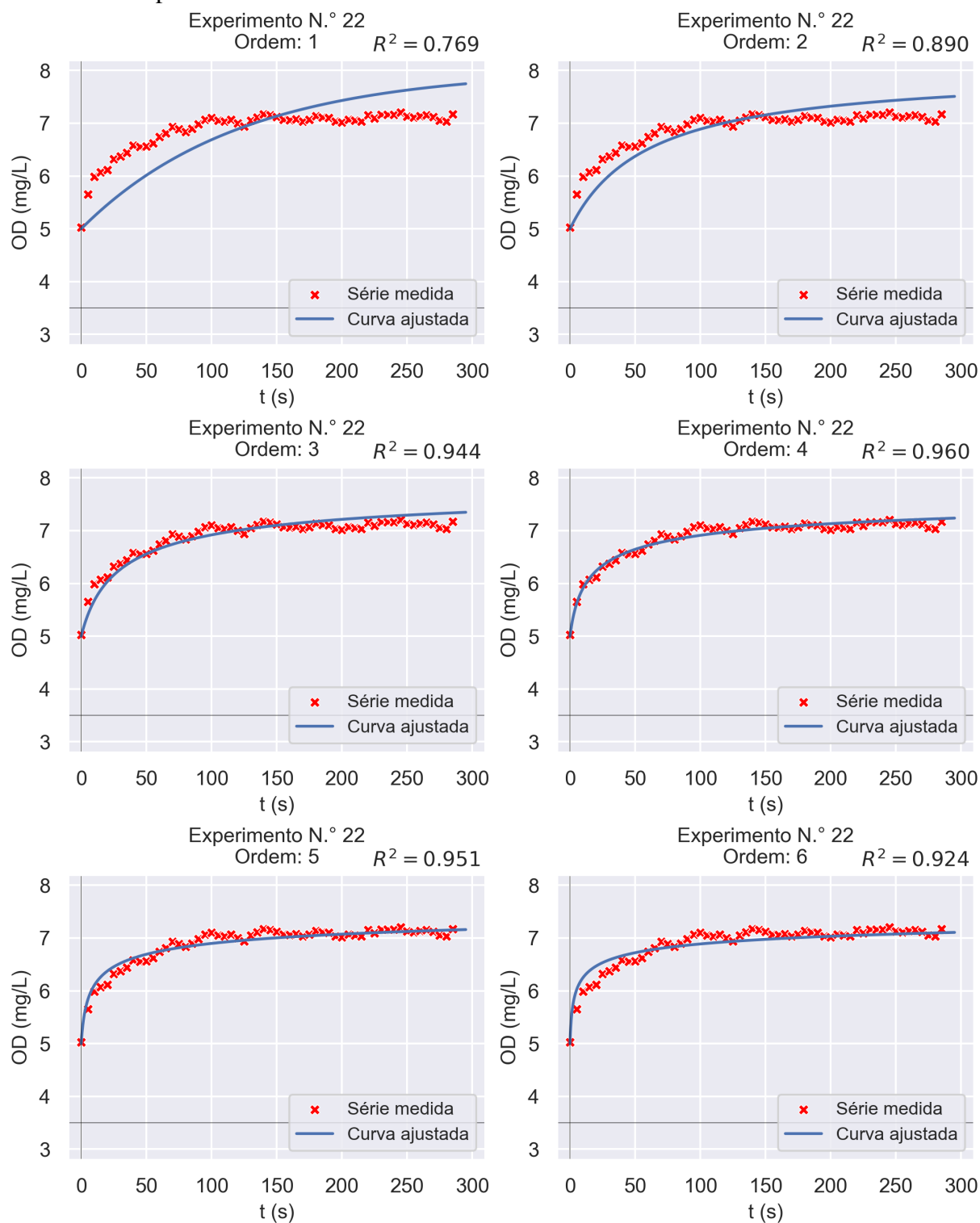
Figura 78 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 21



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 79 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 22

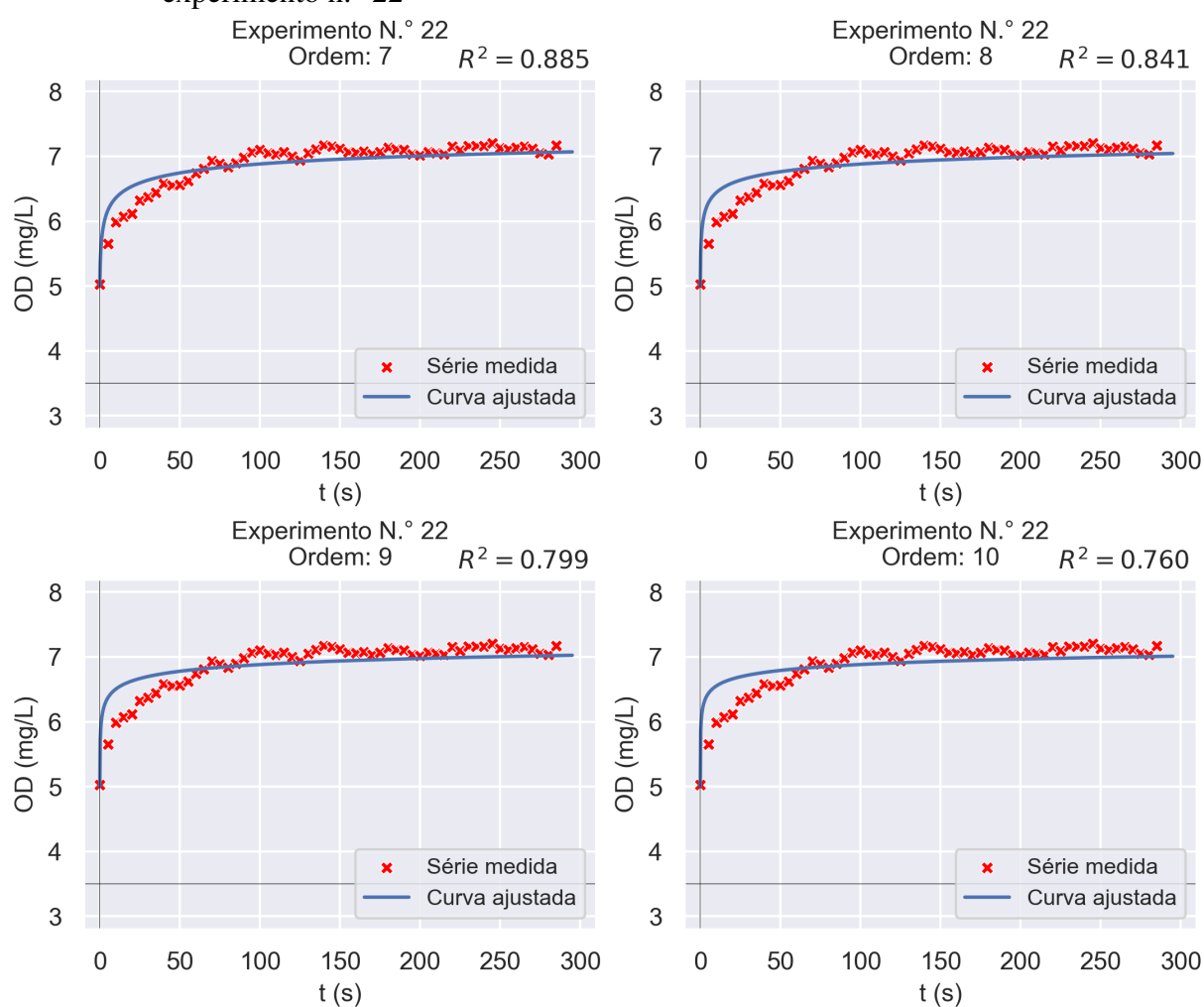


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



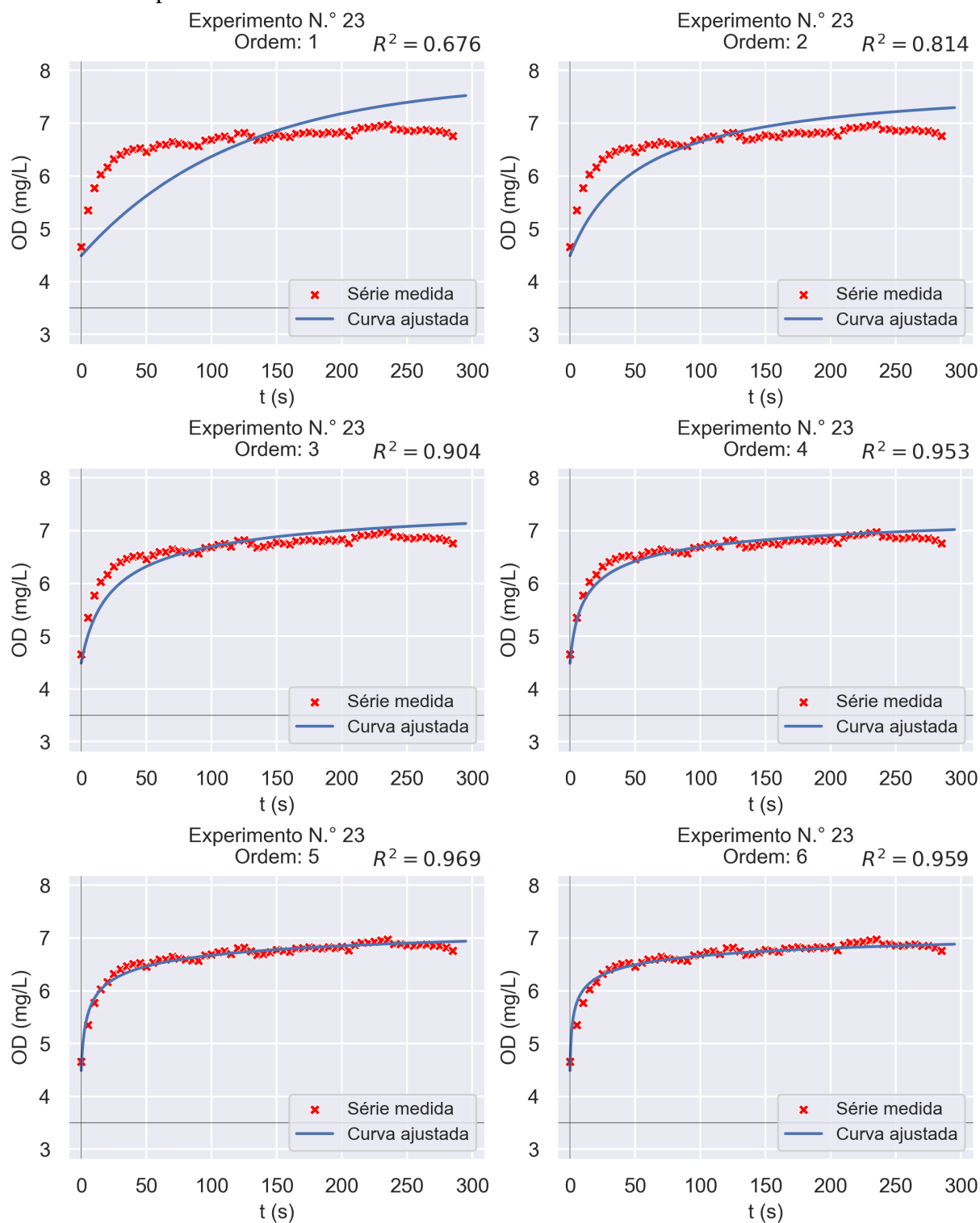
Figura 80 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 22



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

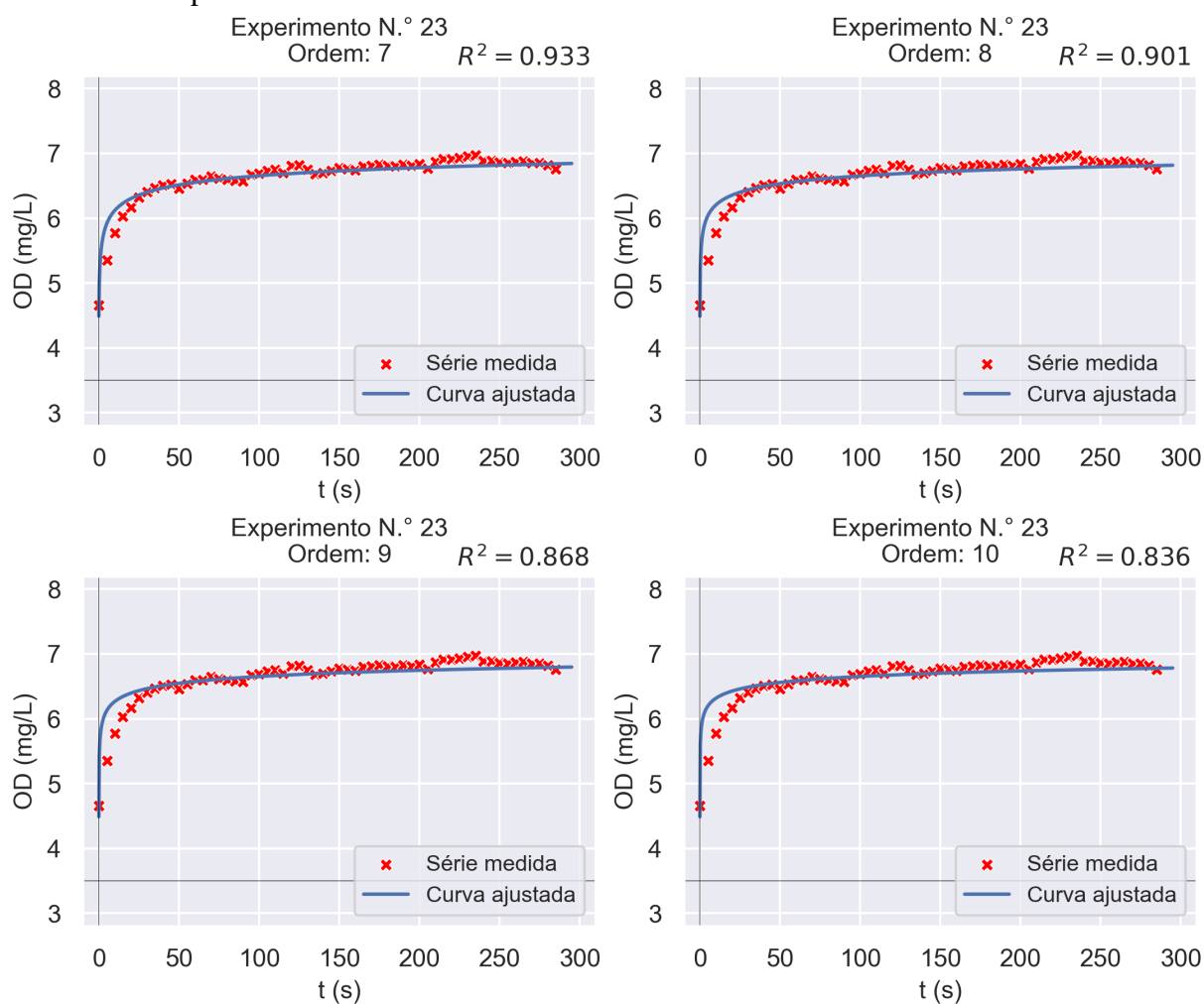
Figura 81 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 23



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

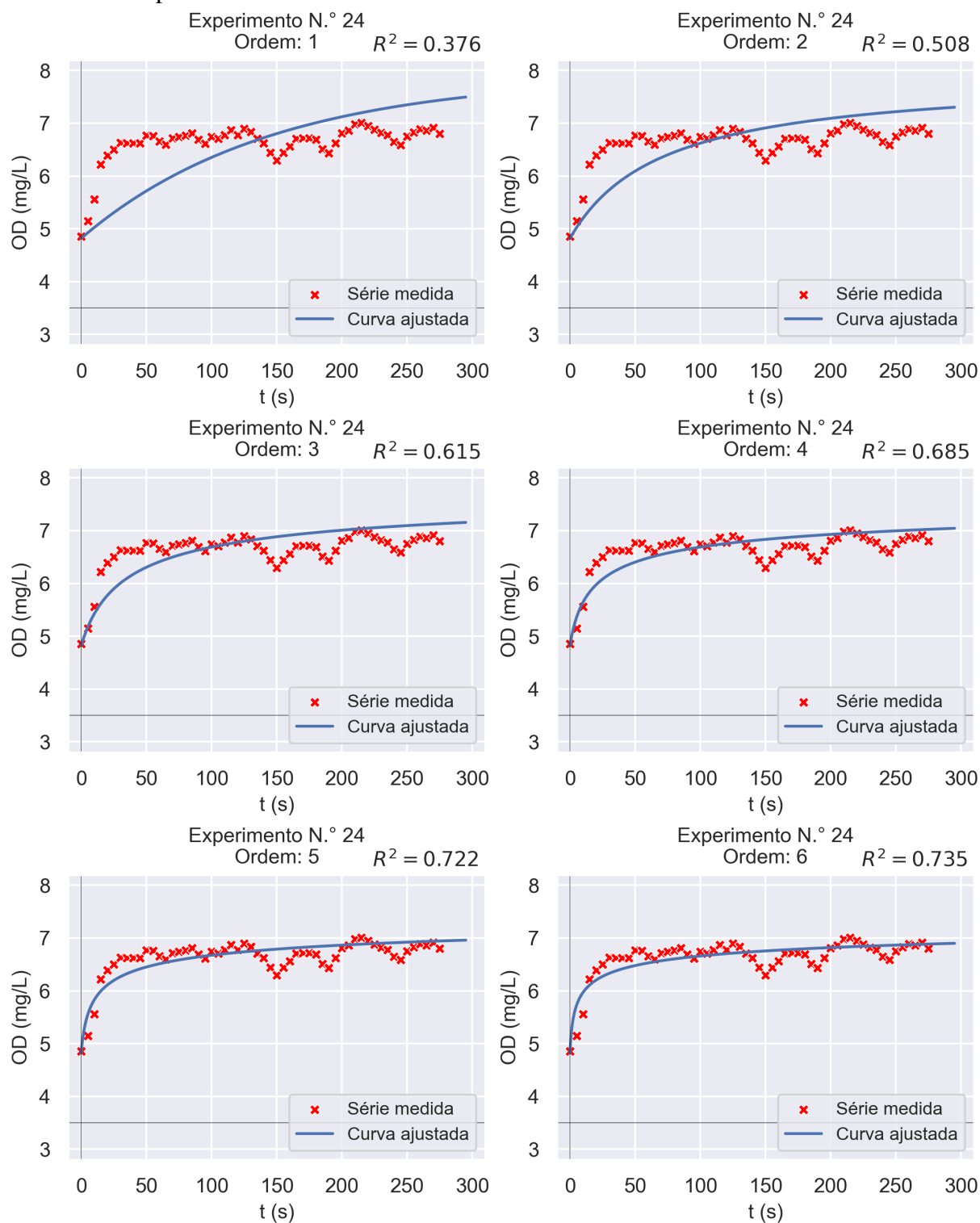
Figura 82 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 23



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

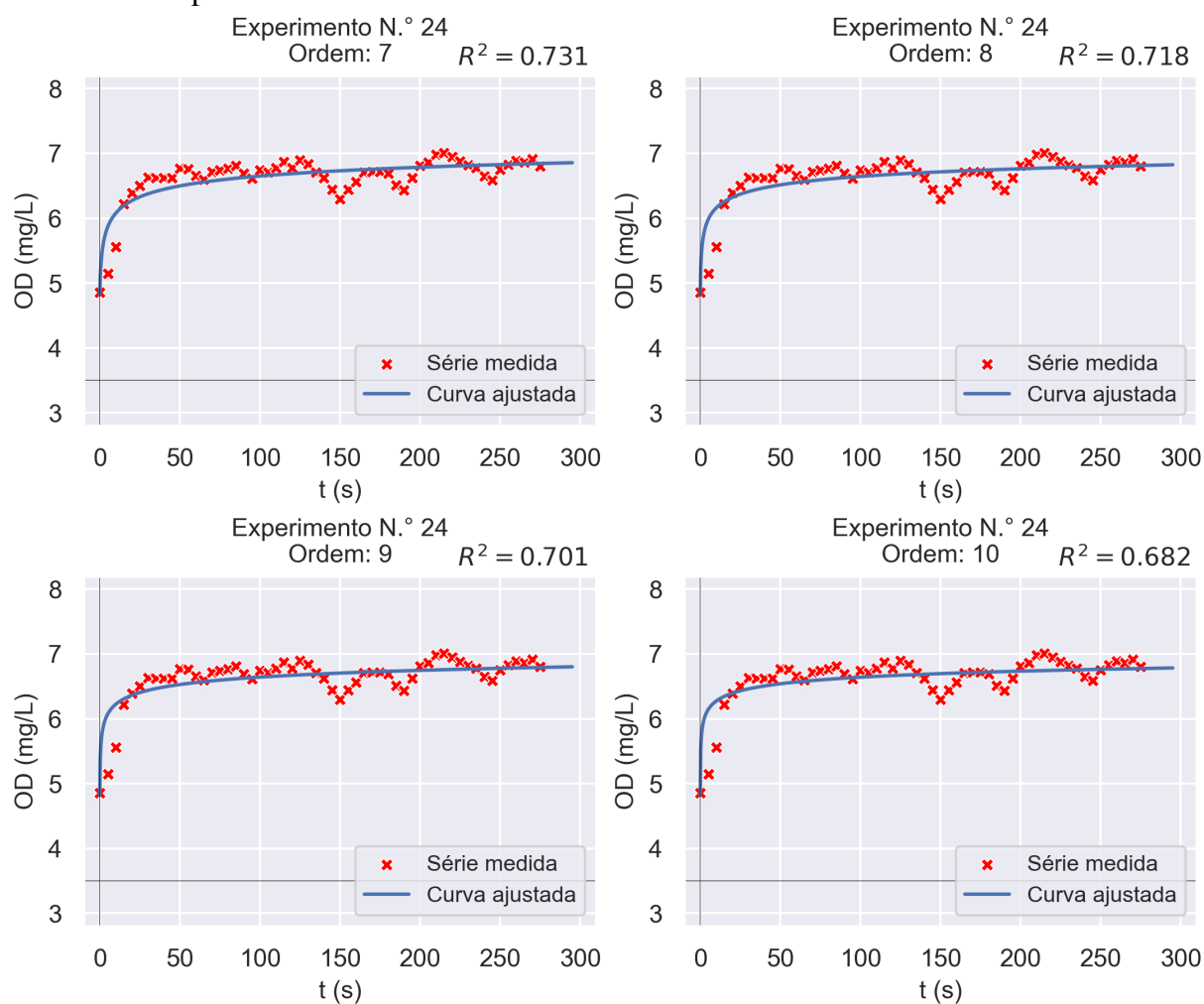
Figura 83 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 24



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

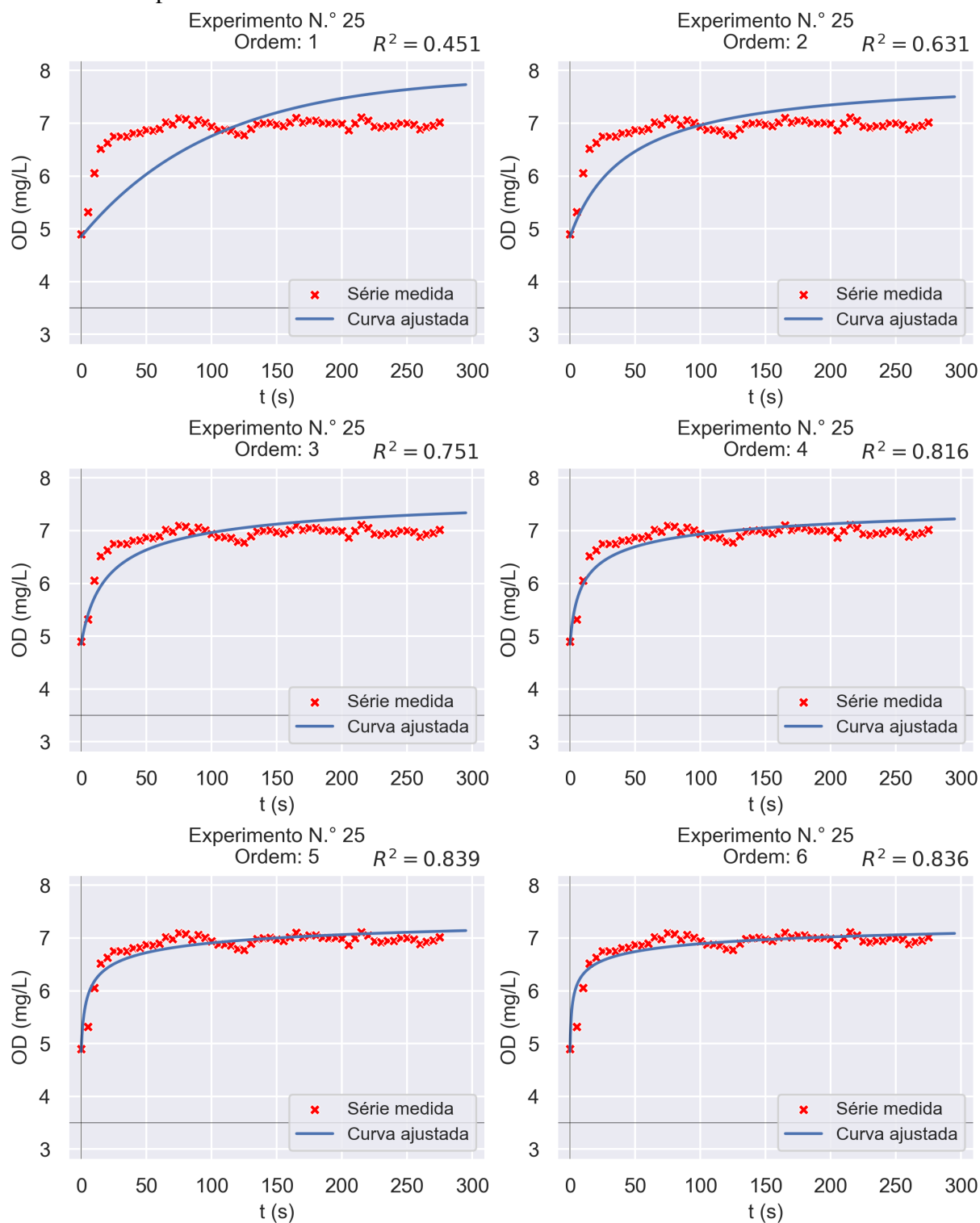
Figura 84 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 24



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

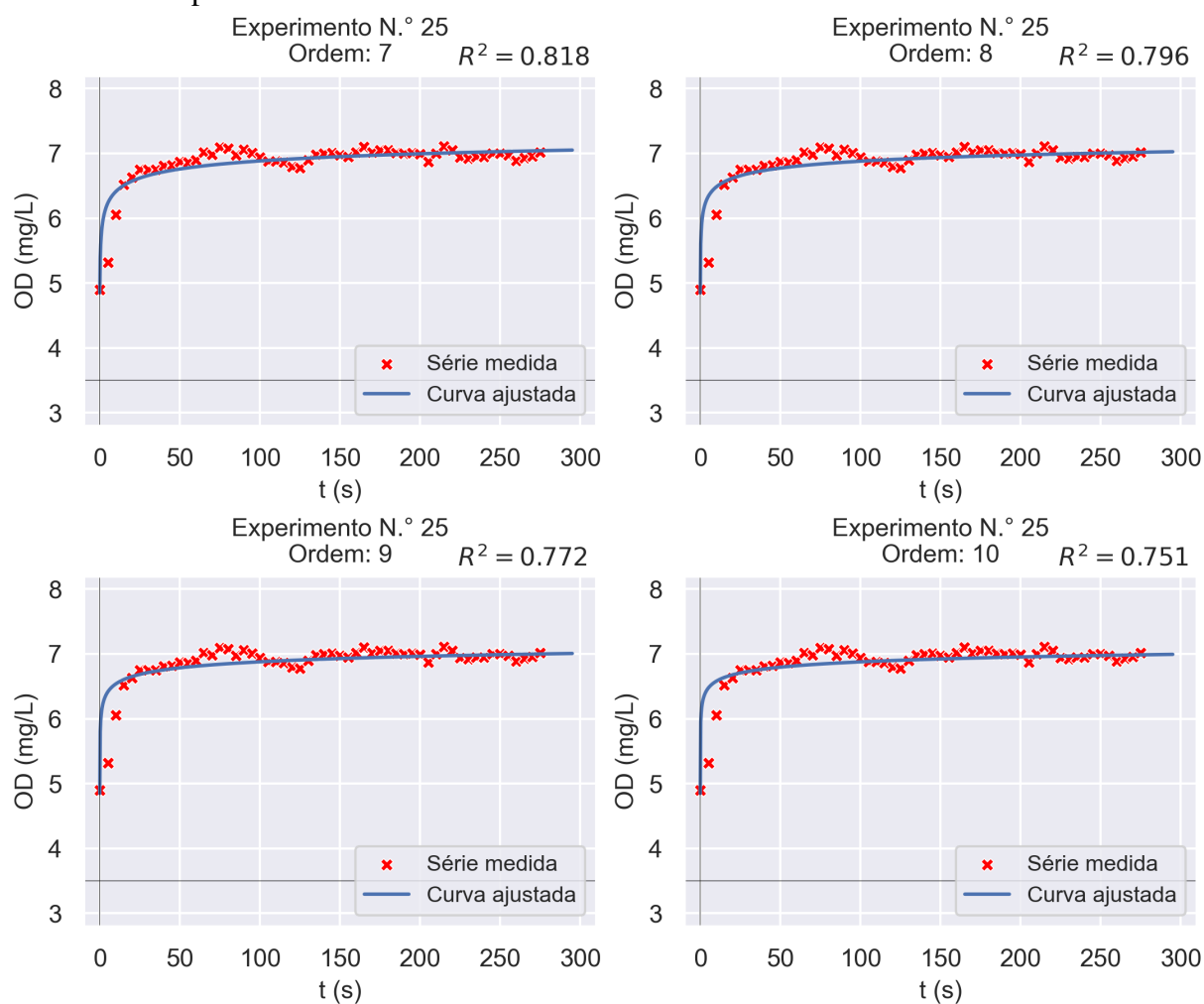
Figura 85 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 25



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

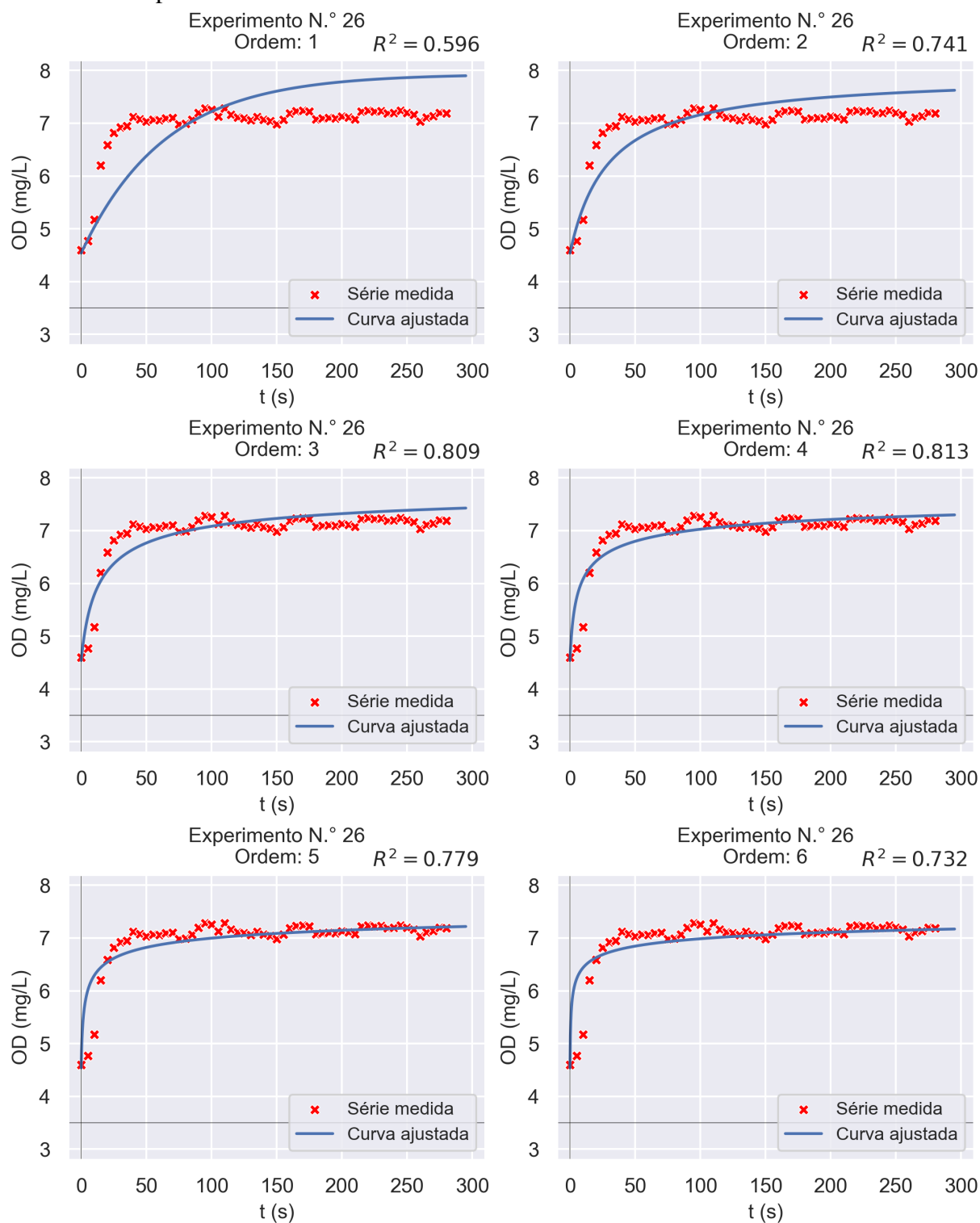
Figura 86 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 25



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 87 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 26

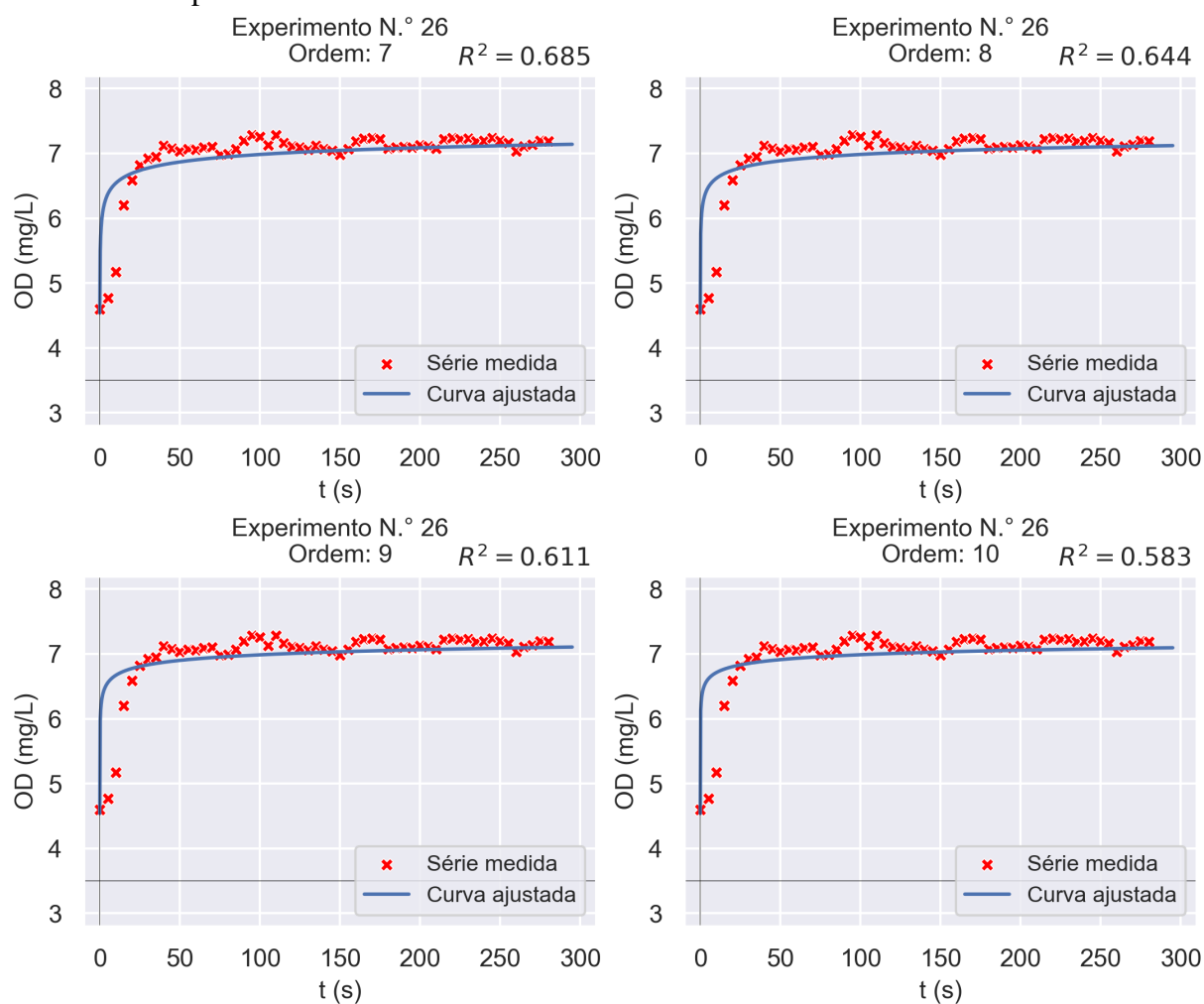


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



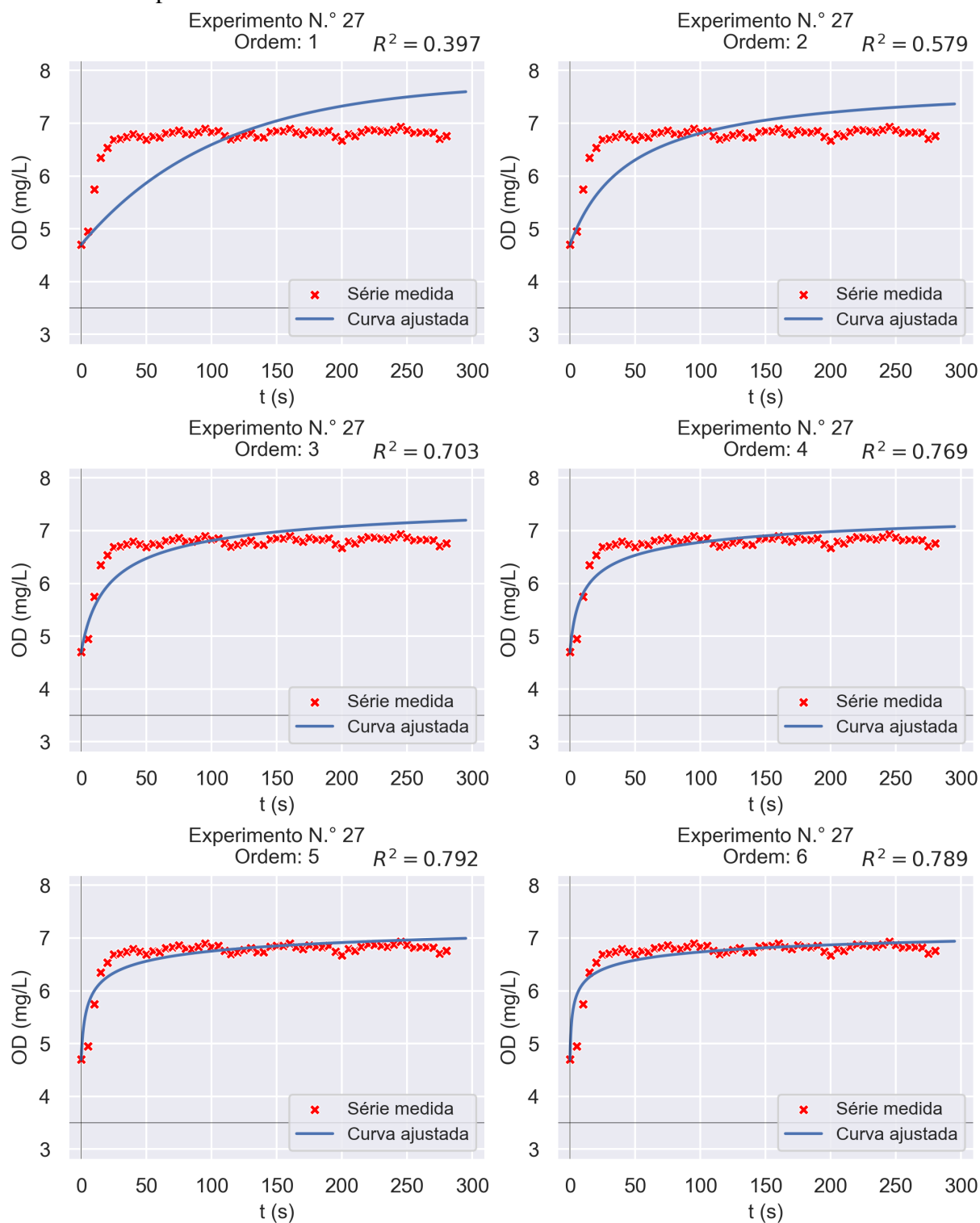
Figura 88 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 26



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

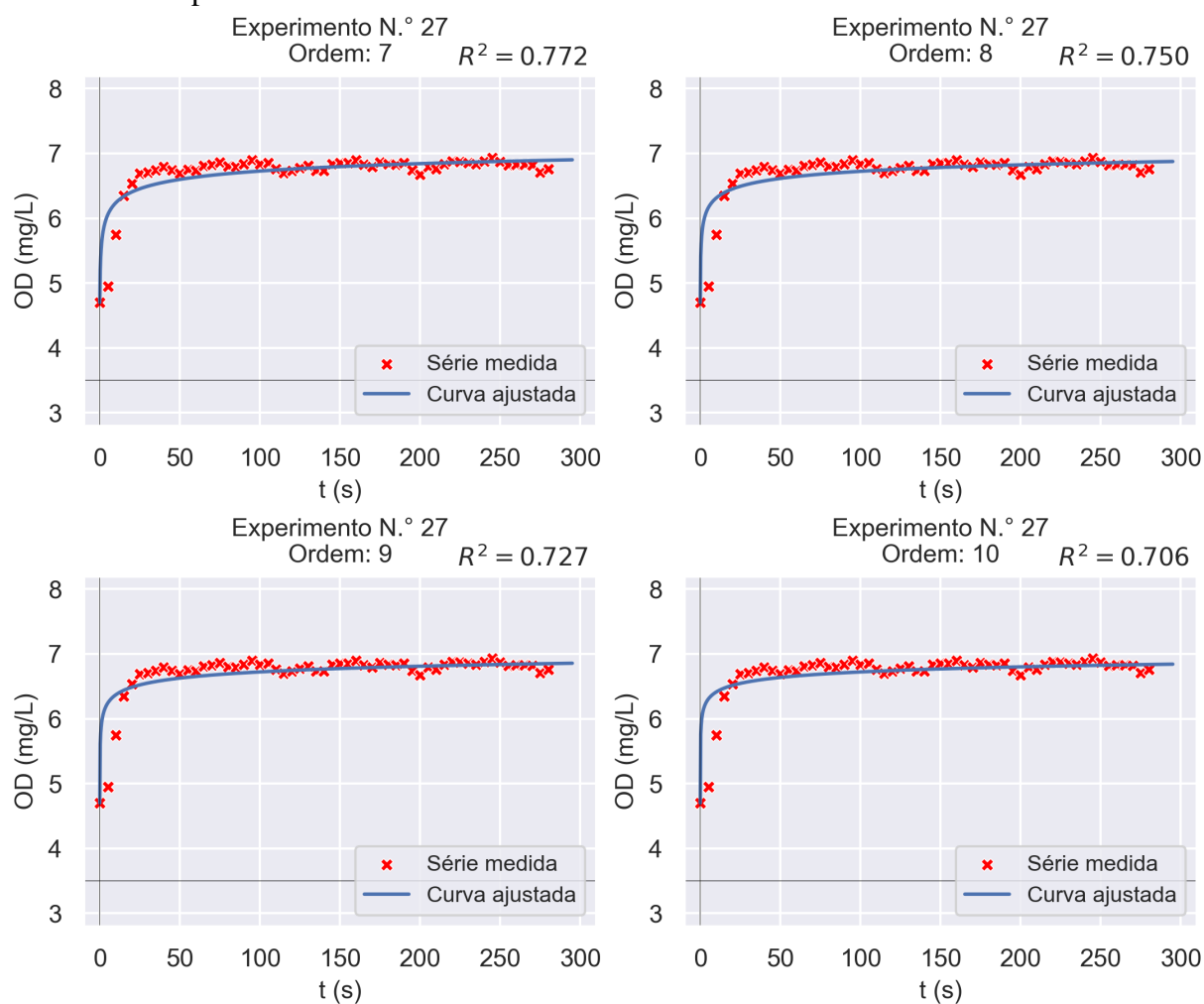
Figura 89 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 27



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

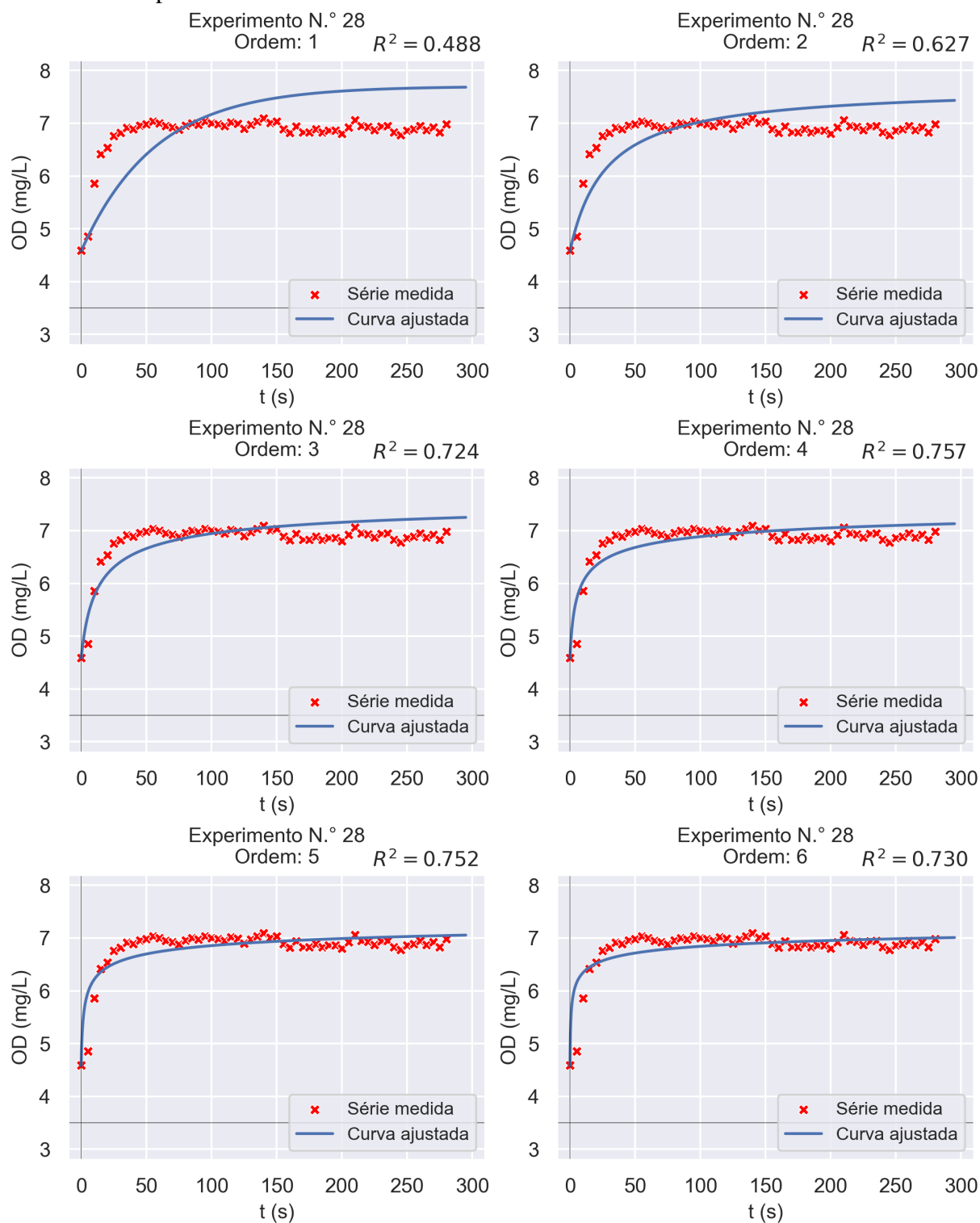
Figura 90 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 27



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

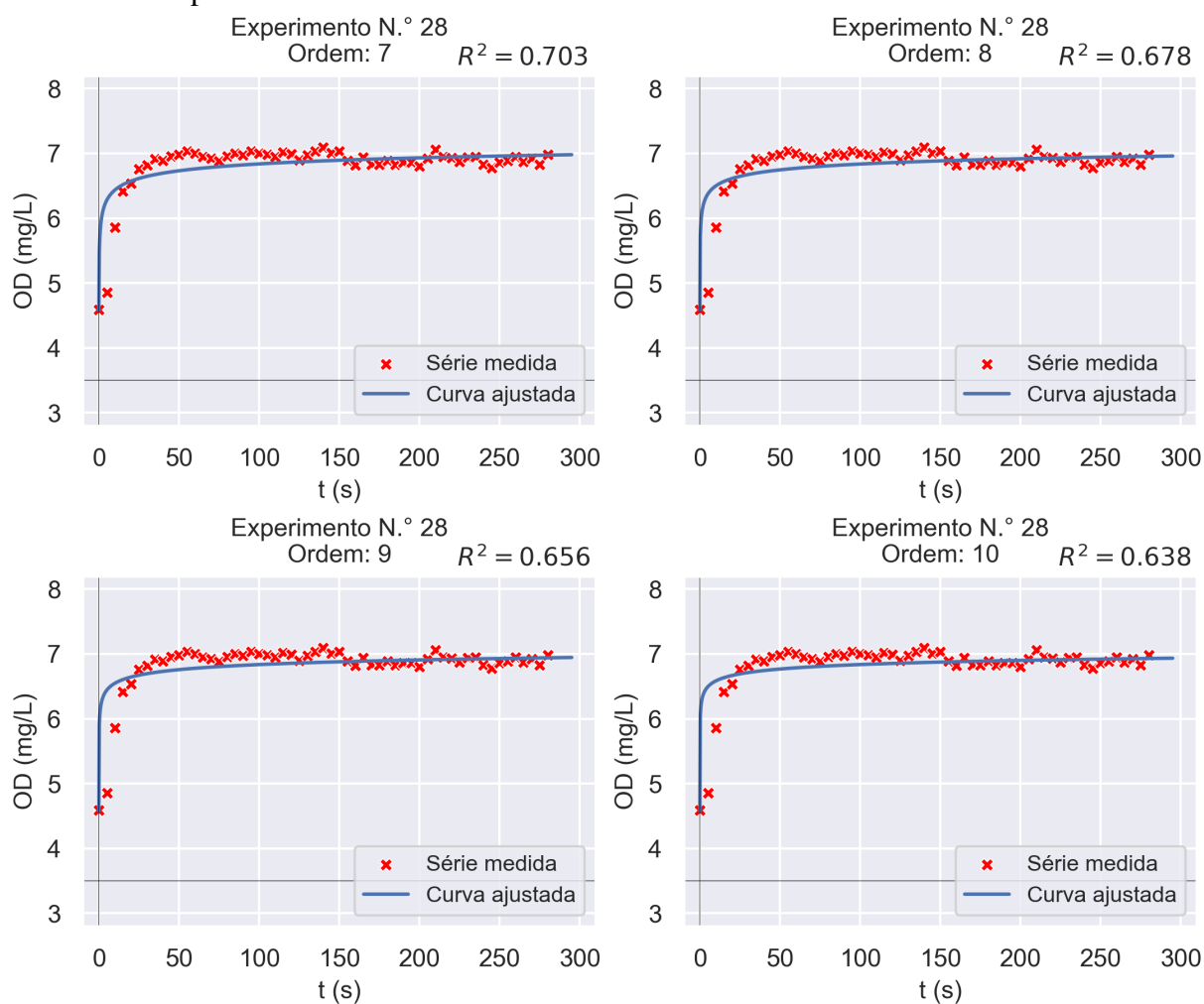
Figura 91 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 28



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

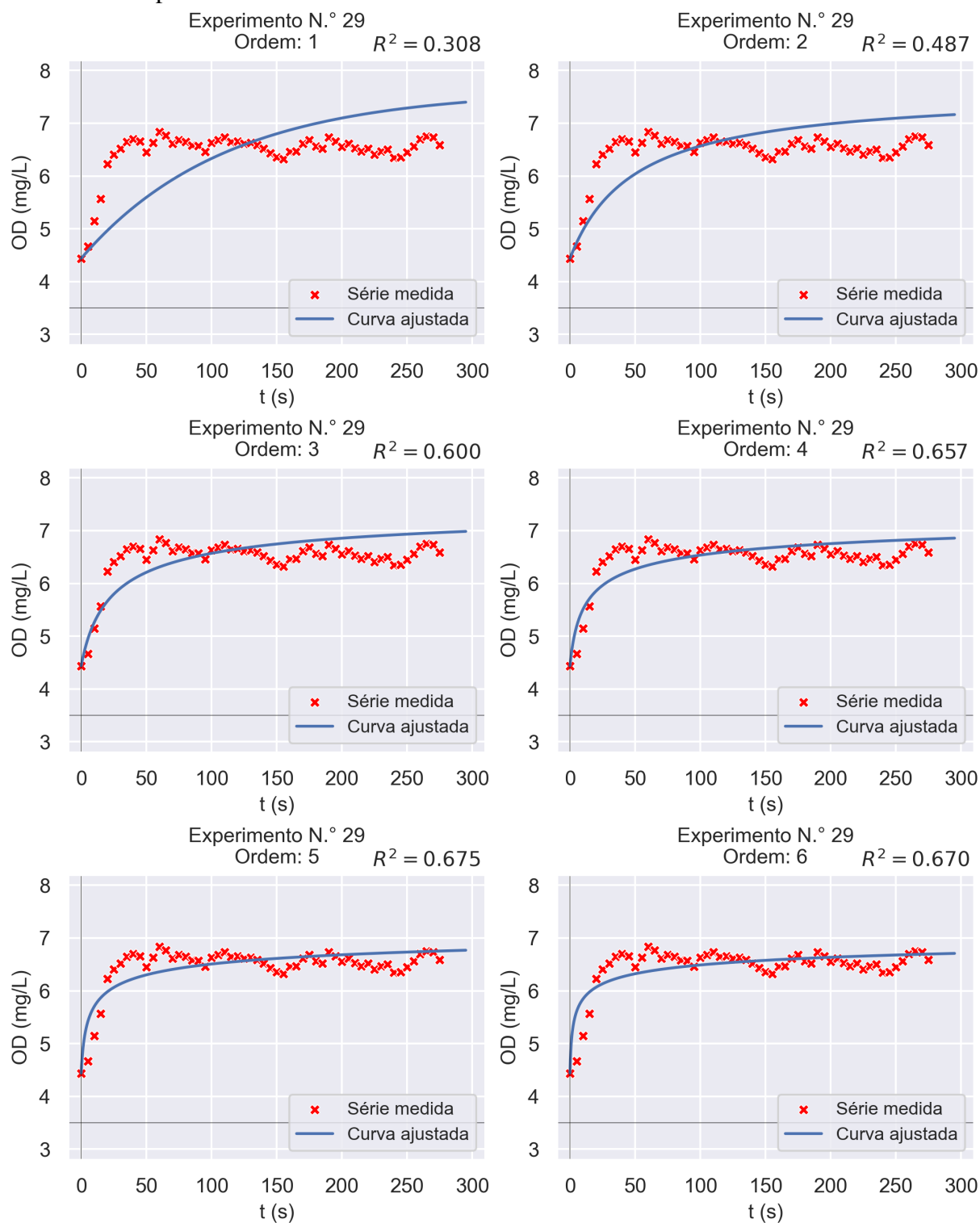
Figura 92 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 28



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

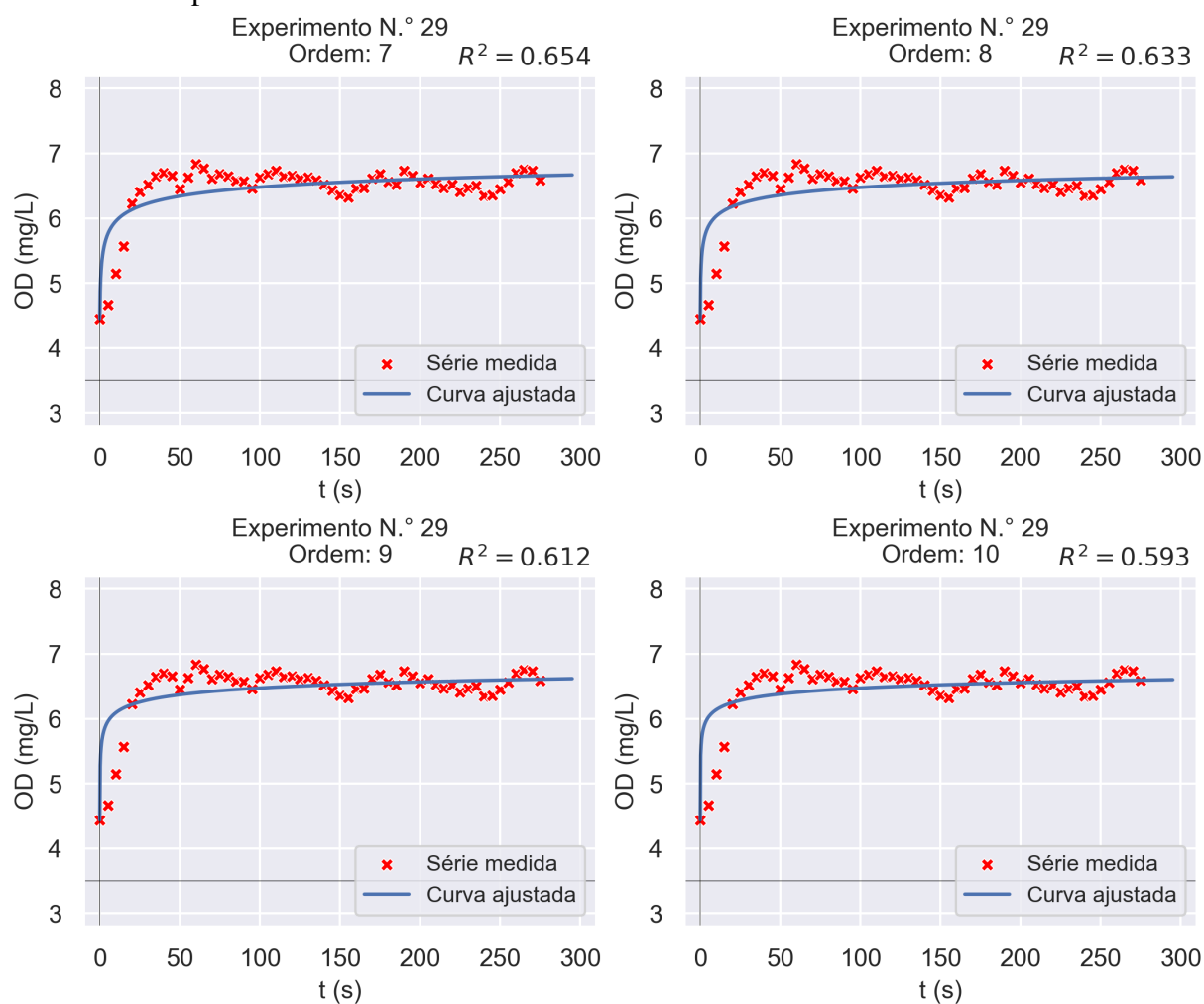
Figura 93 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 29



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

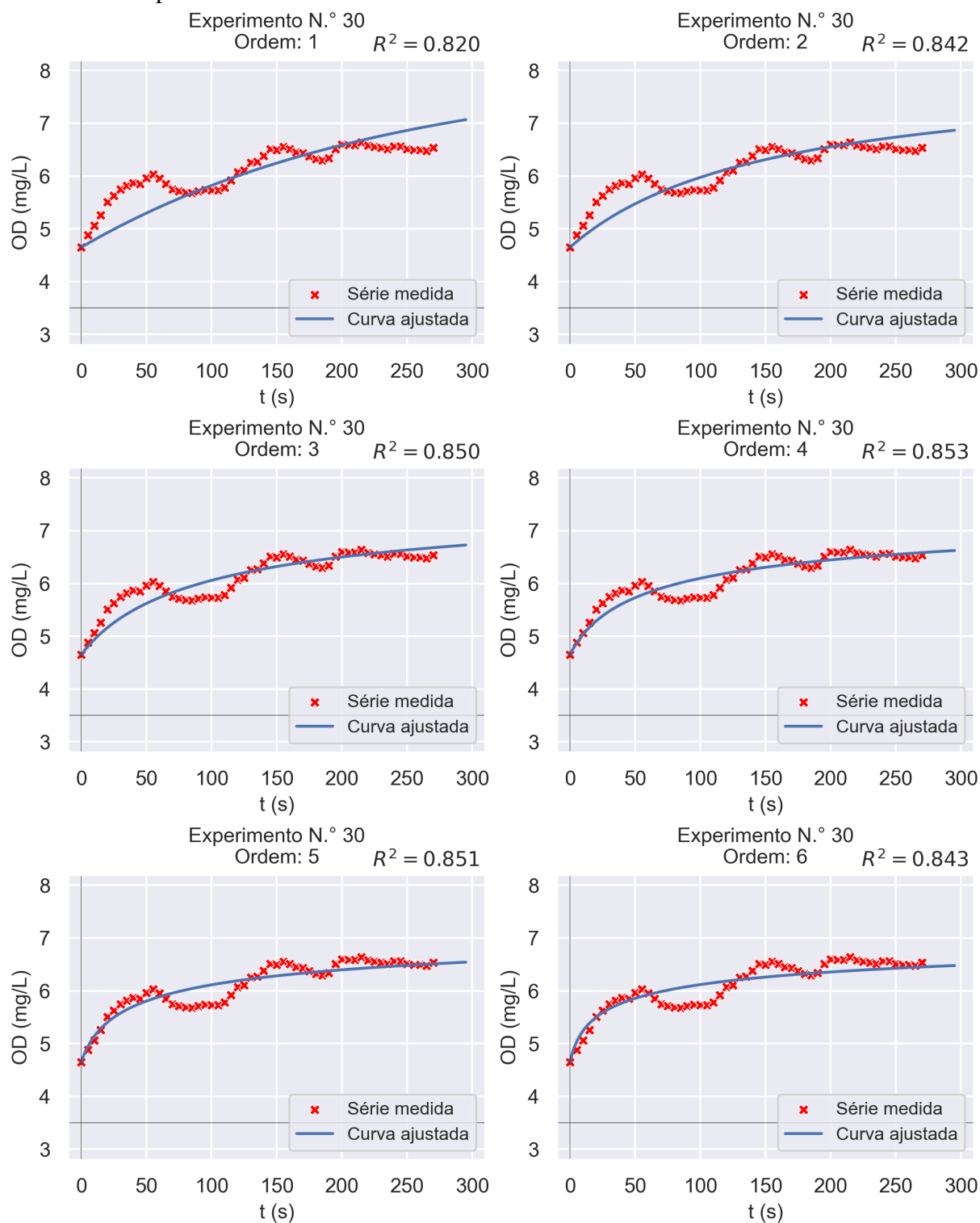
Figura 94 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 29



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 95 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 30

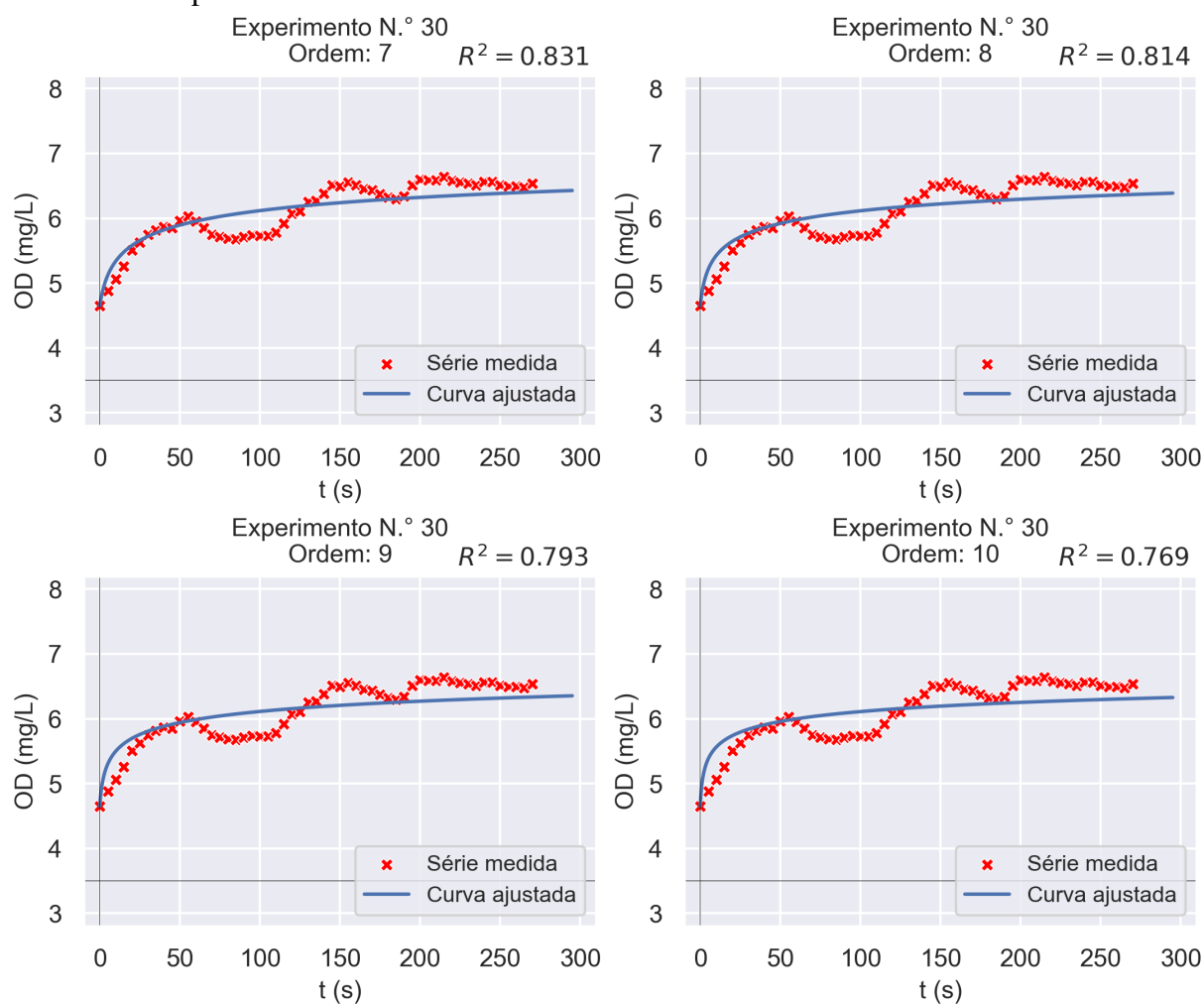


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



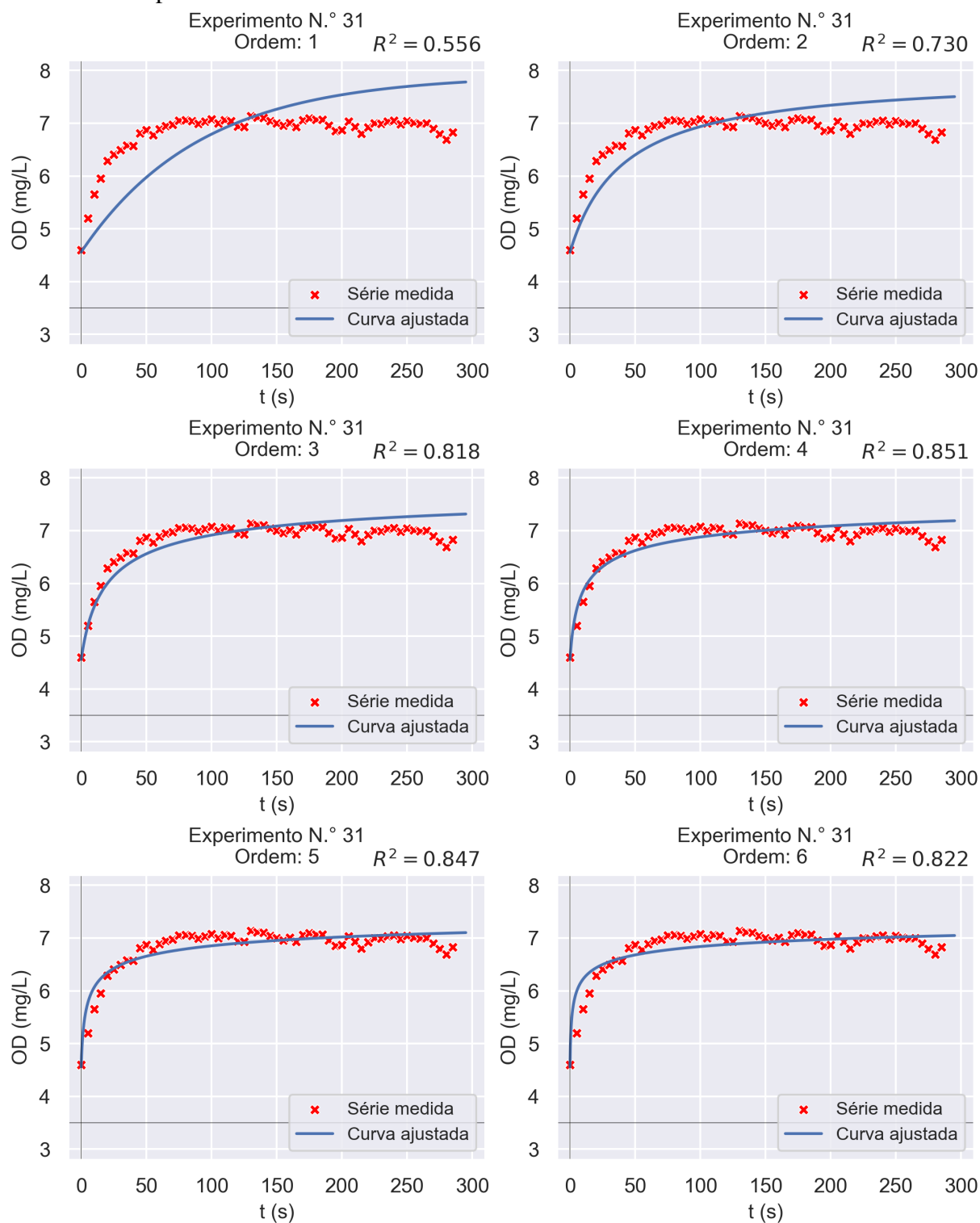
Figura 96 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 30



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

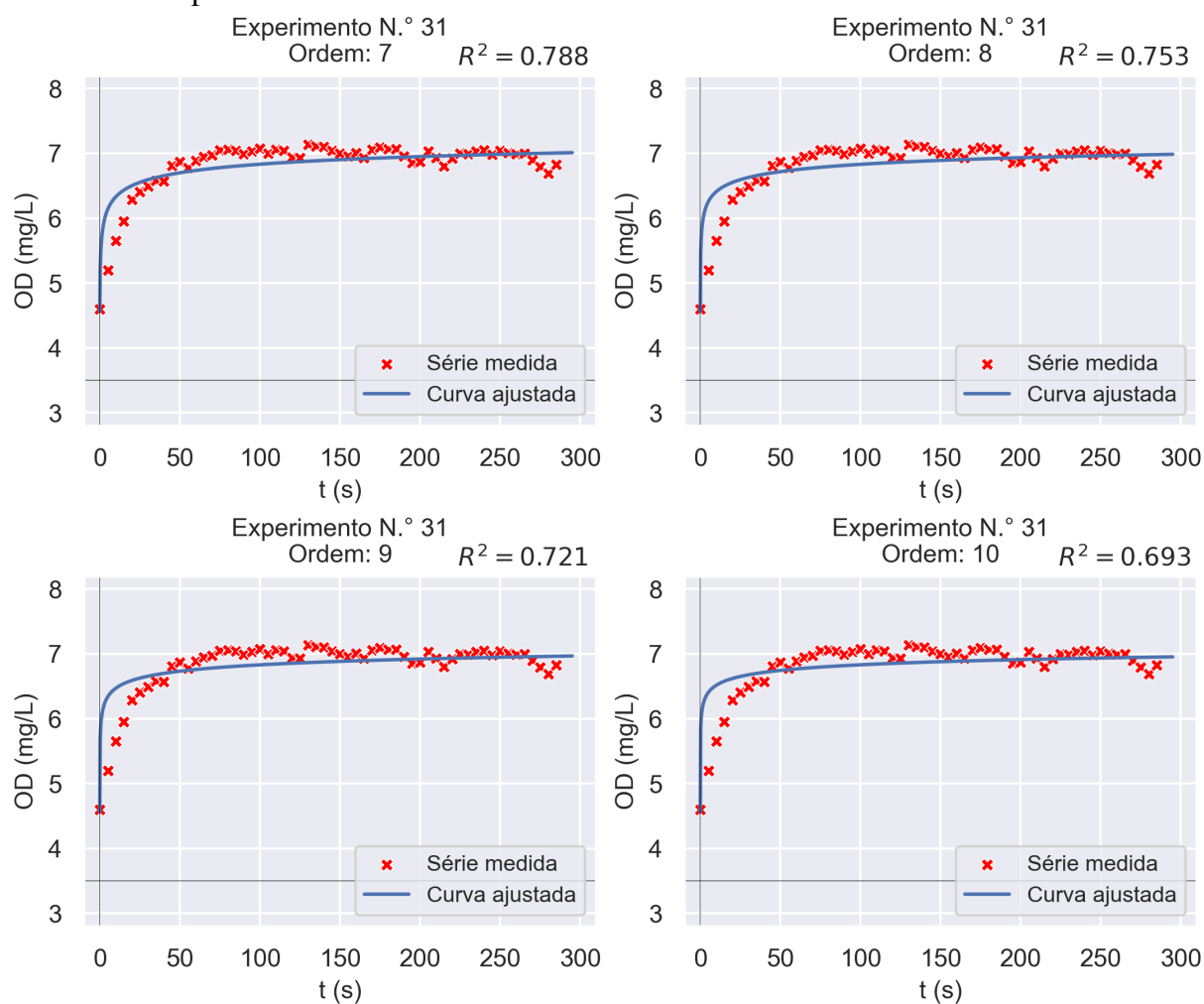
Figura 97 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 31



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

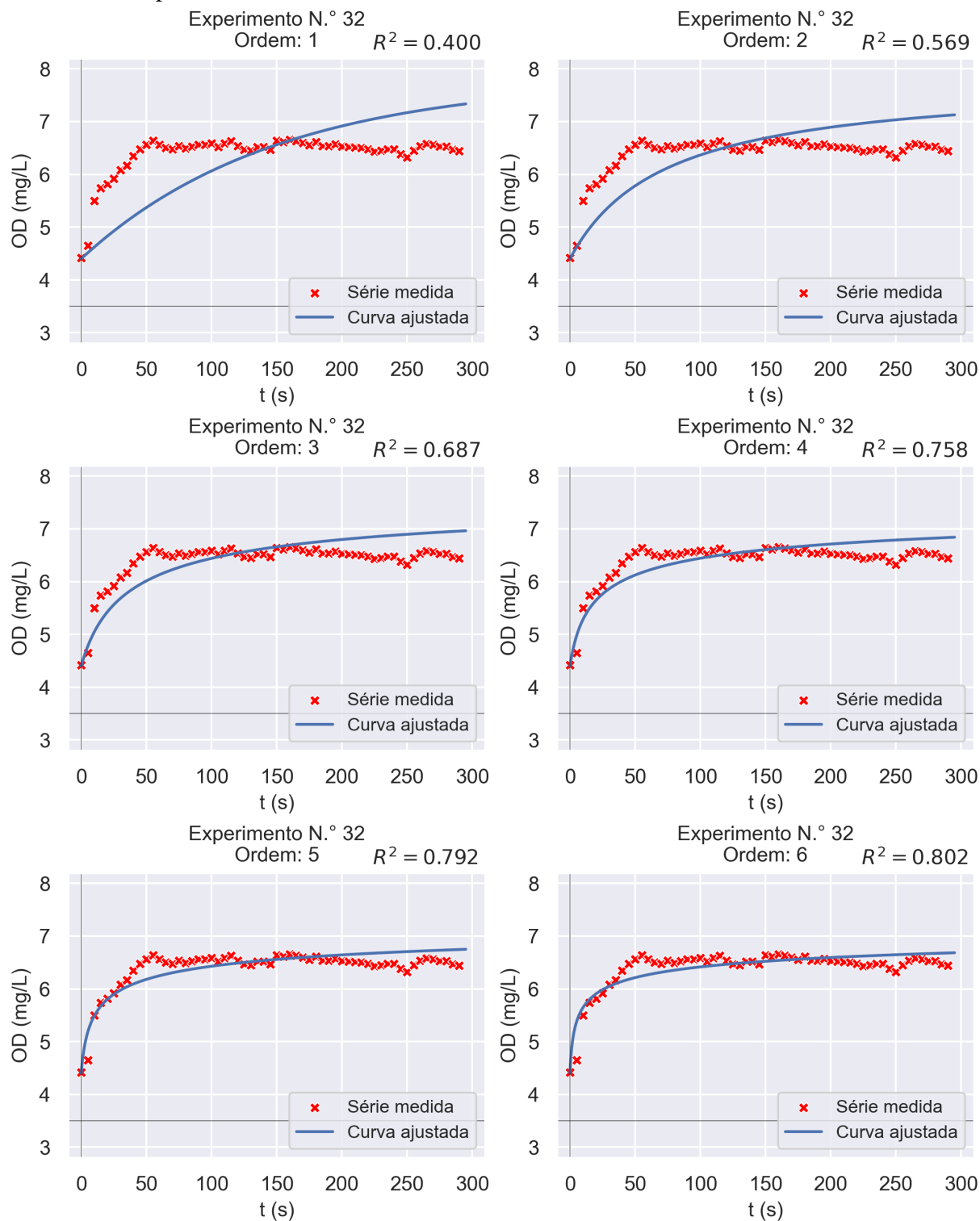
Figura 98 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 31



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

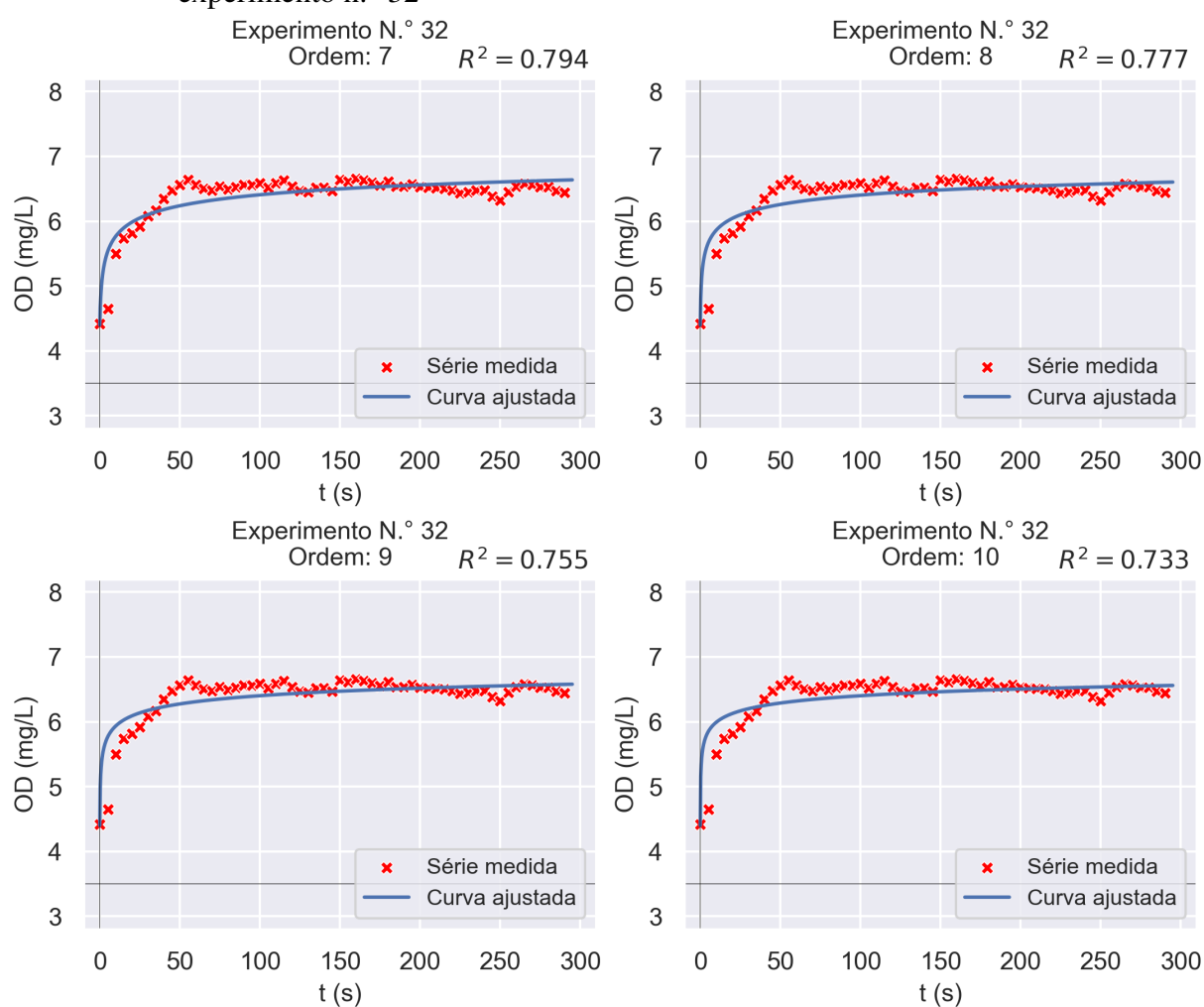
Figura 99 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 32



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

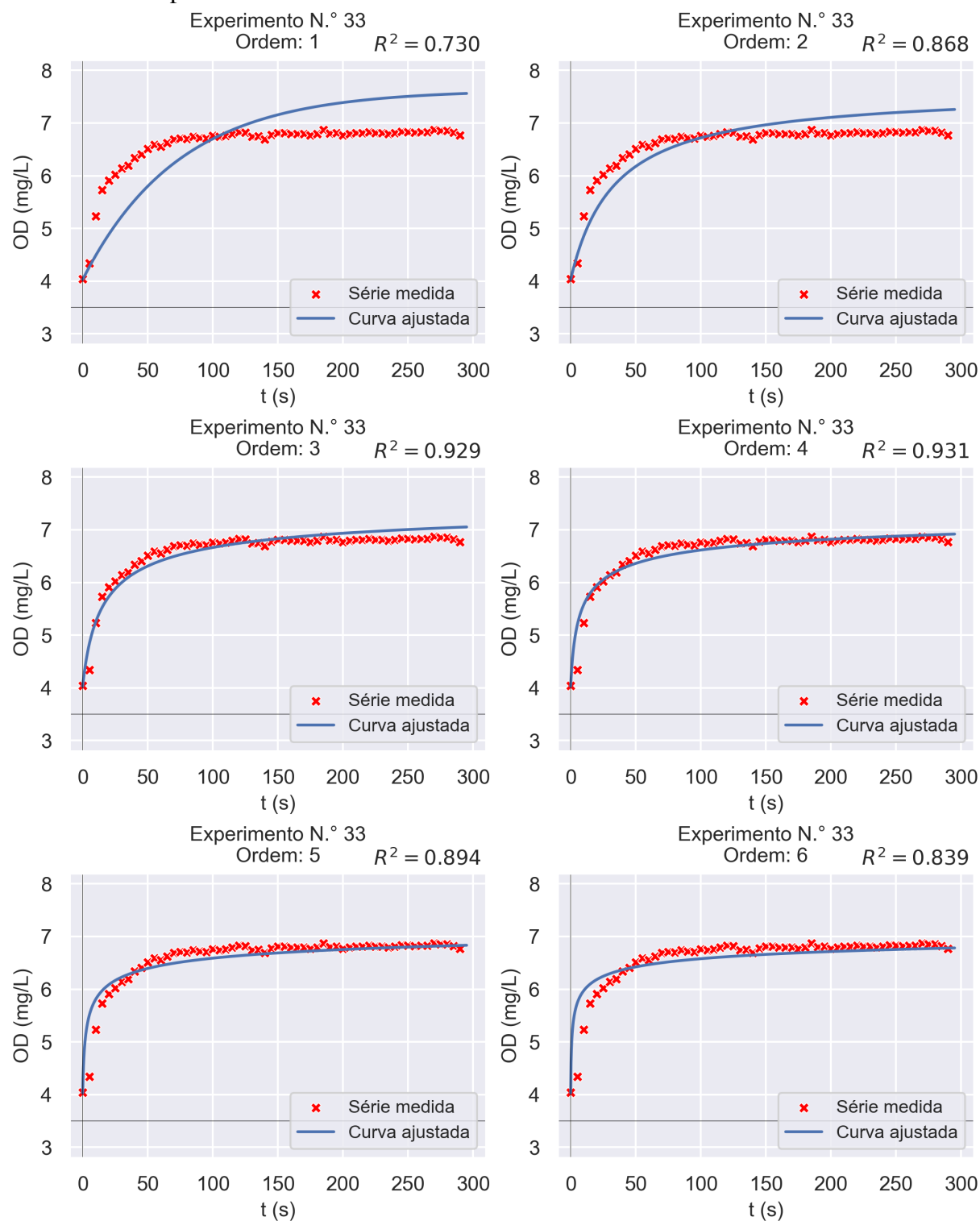
Figura 100 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 32



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

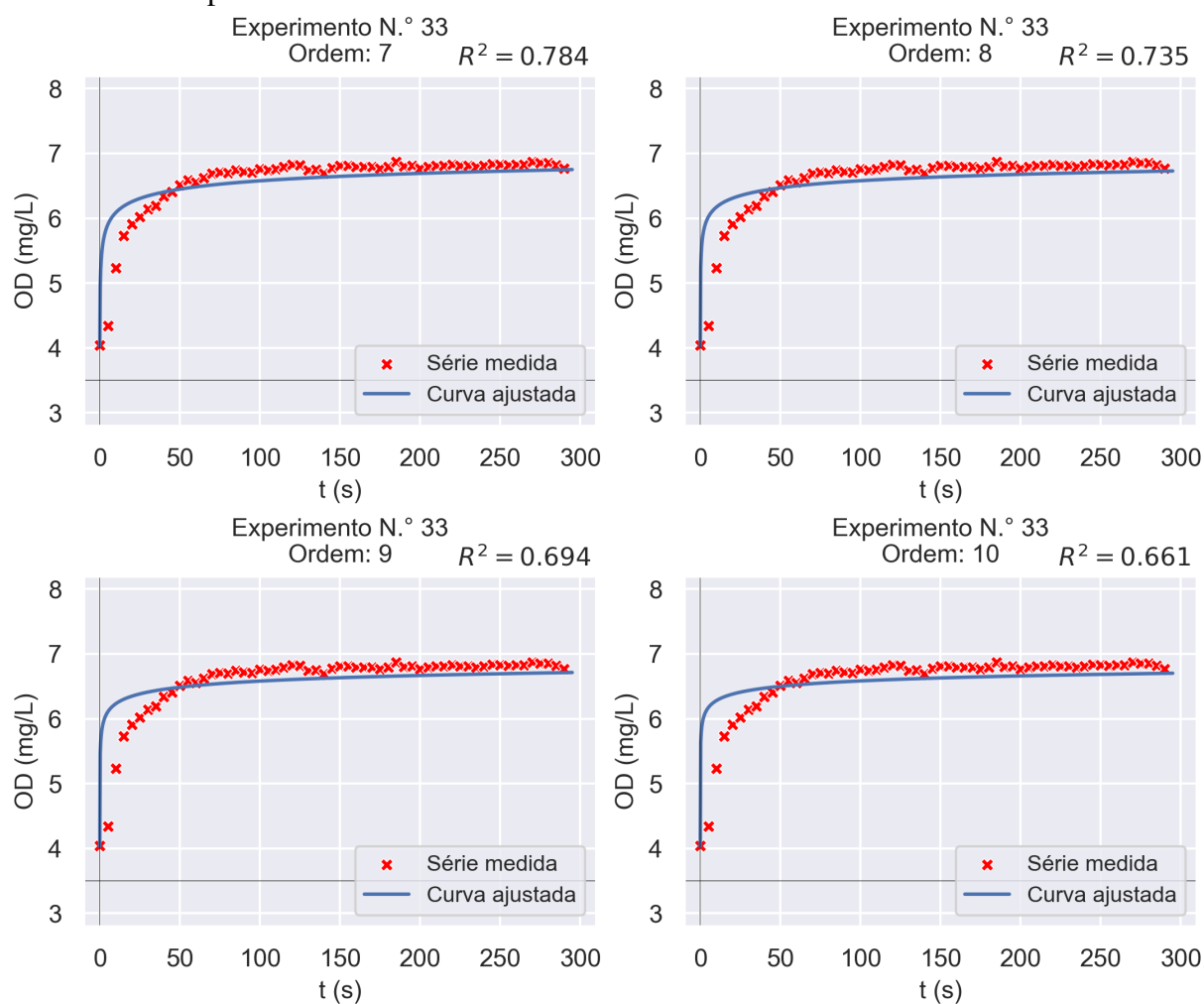
Figura 101 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 33



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

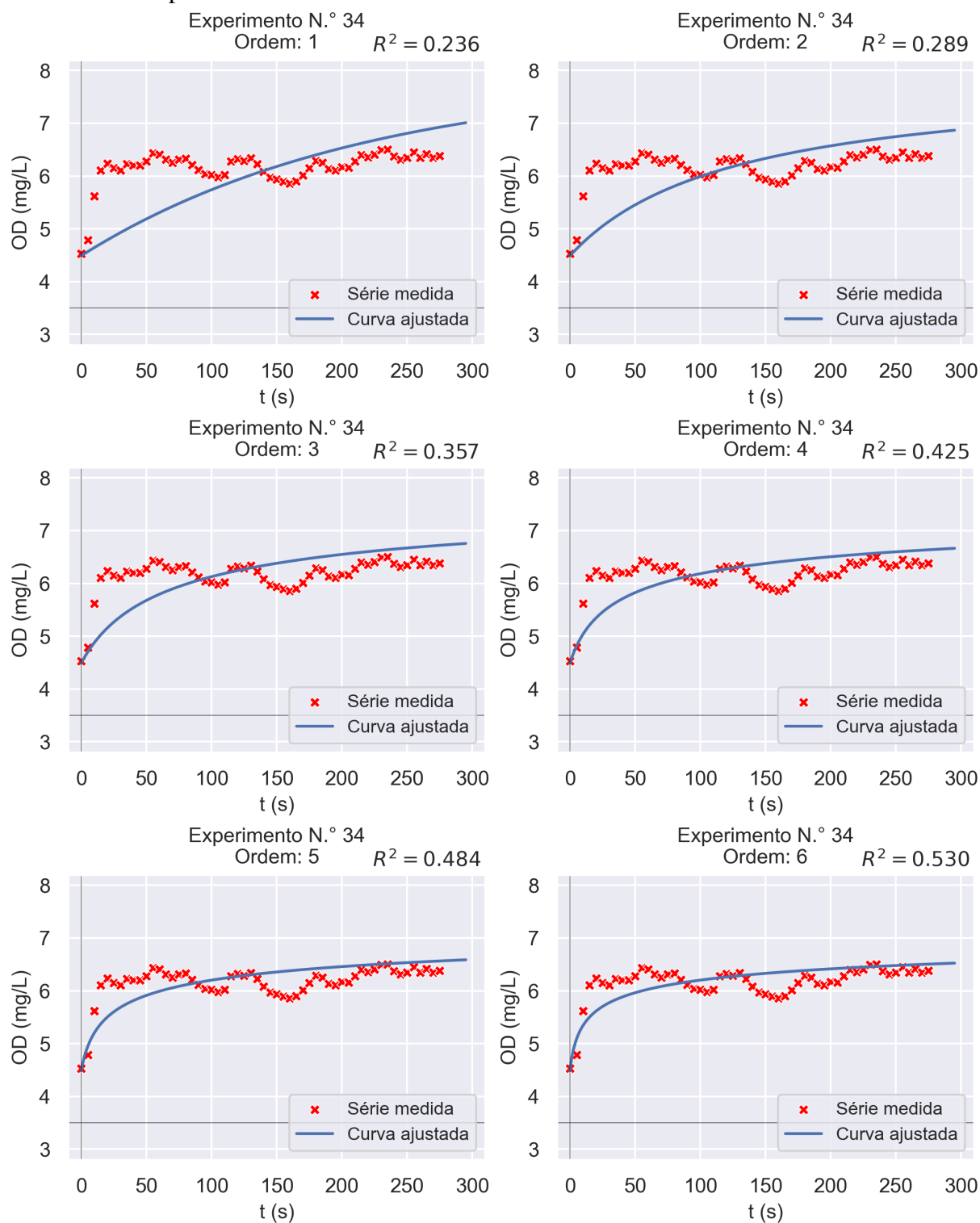
Figura 102 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 33



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 103 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 34

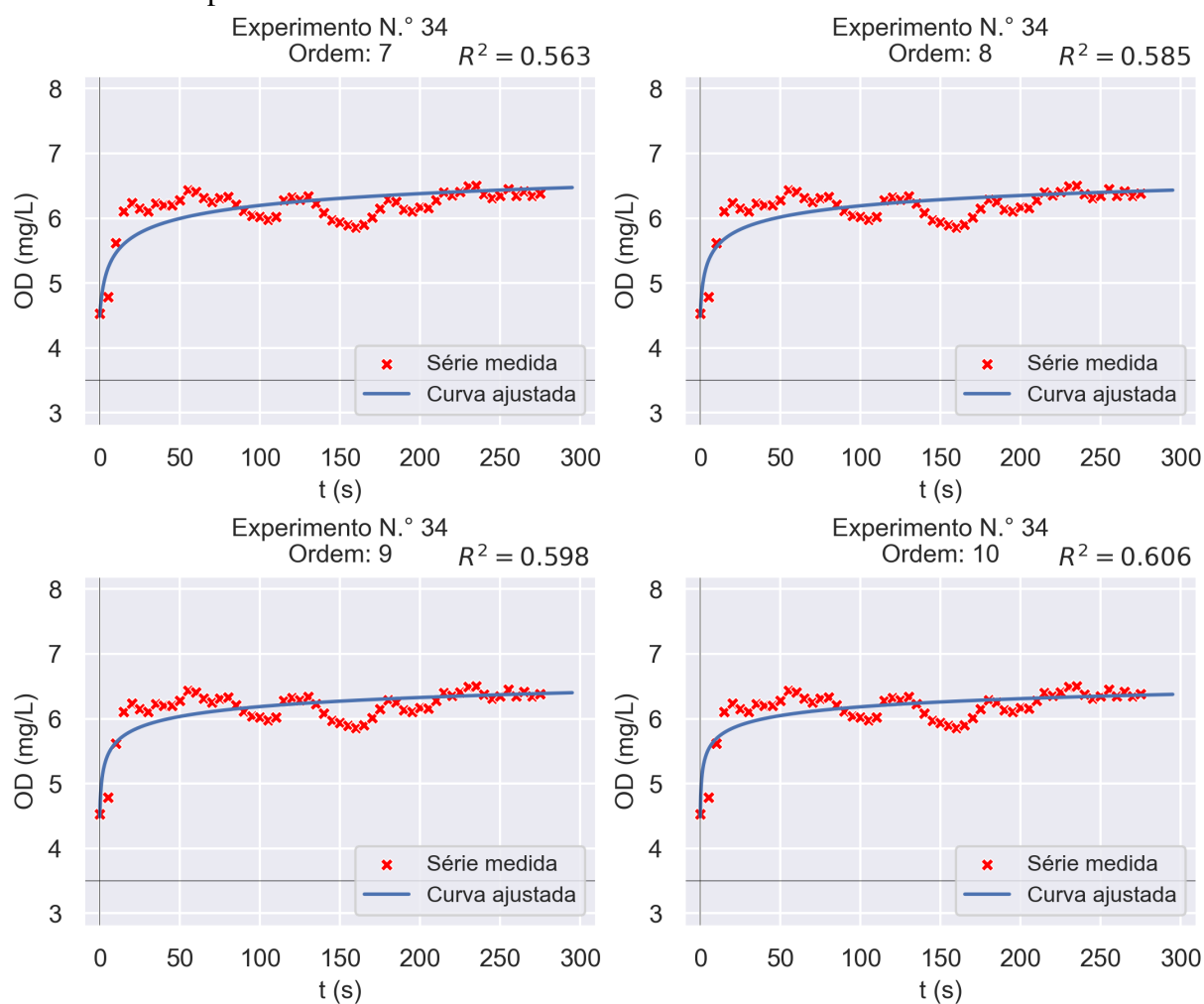


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



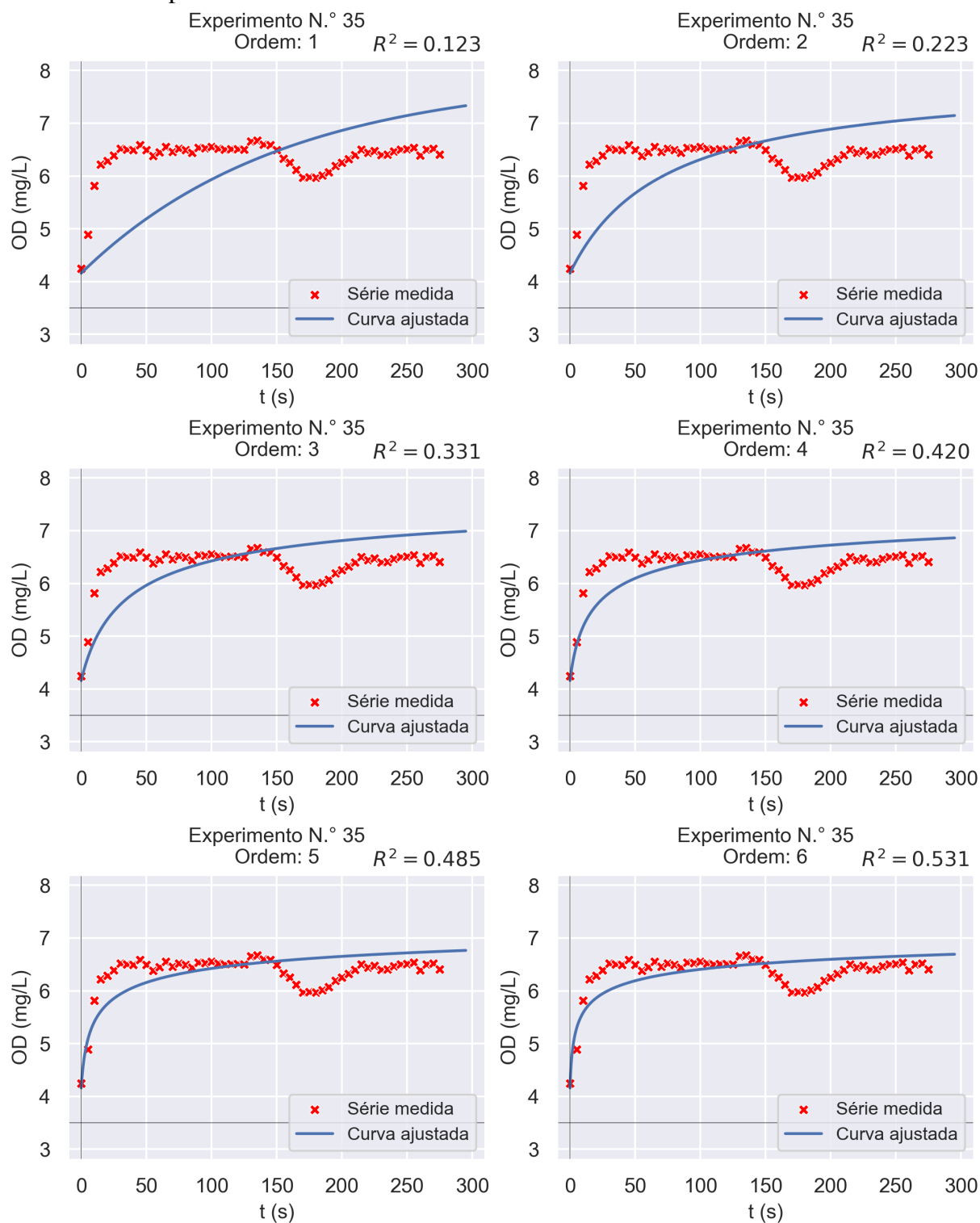
Figura 104 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 34



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

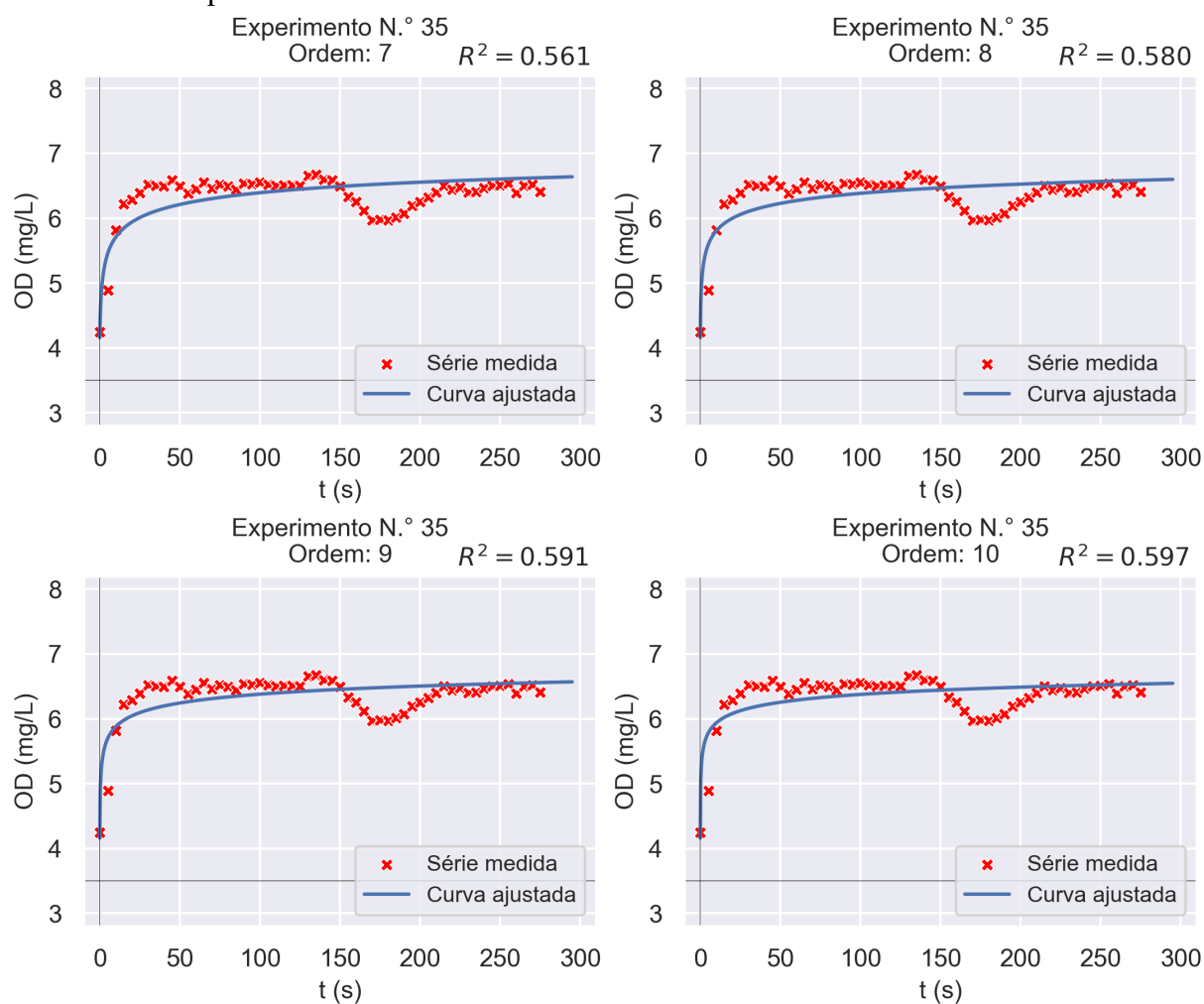
Figura 105 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 35



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

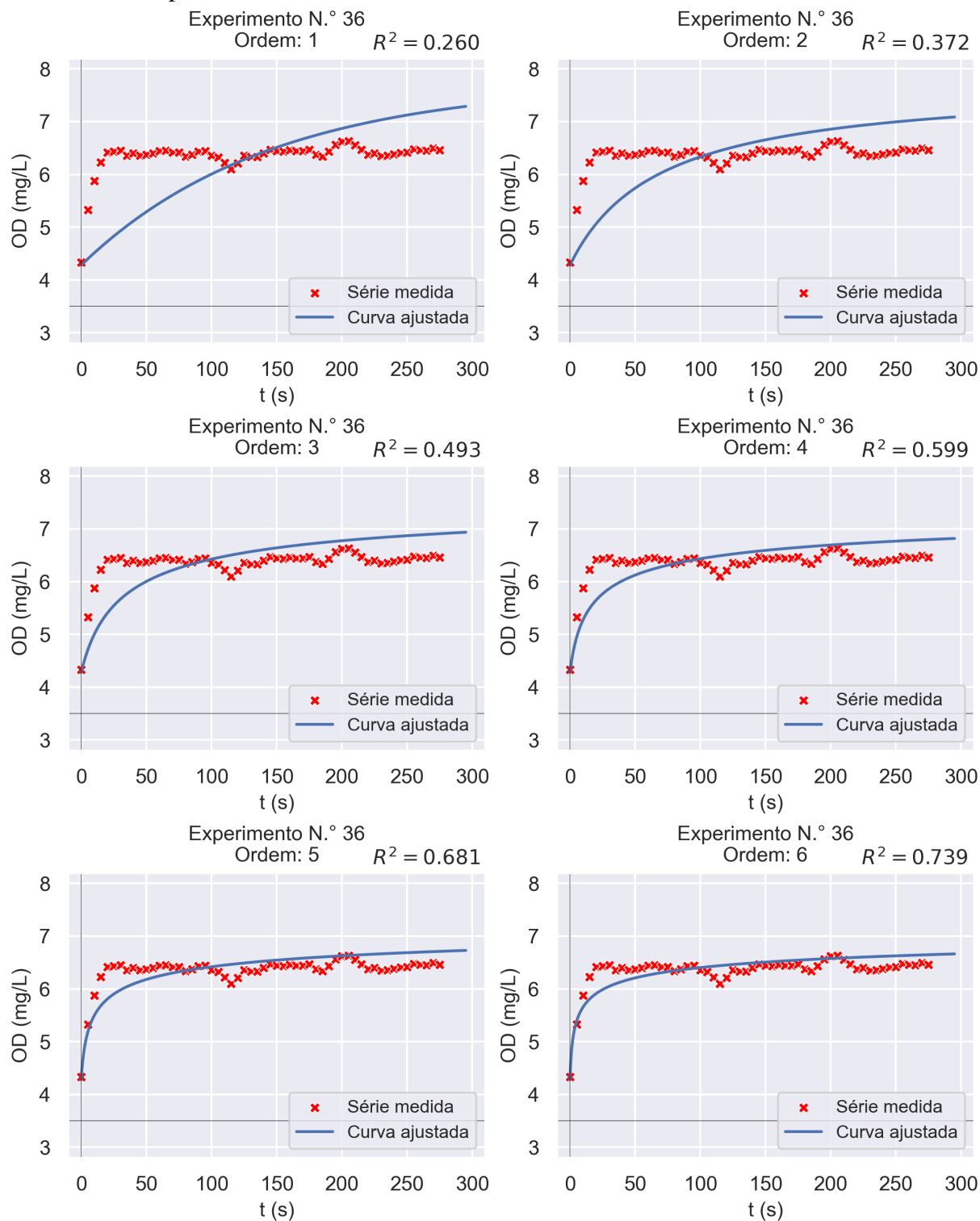
Figura 106 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 35



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

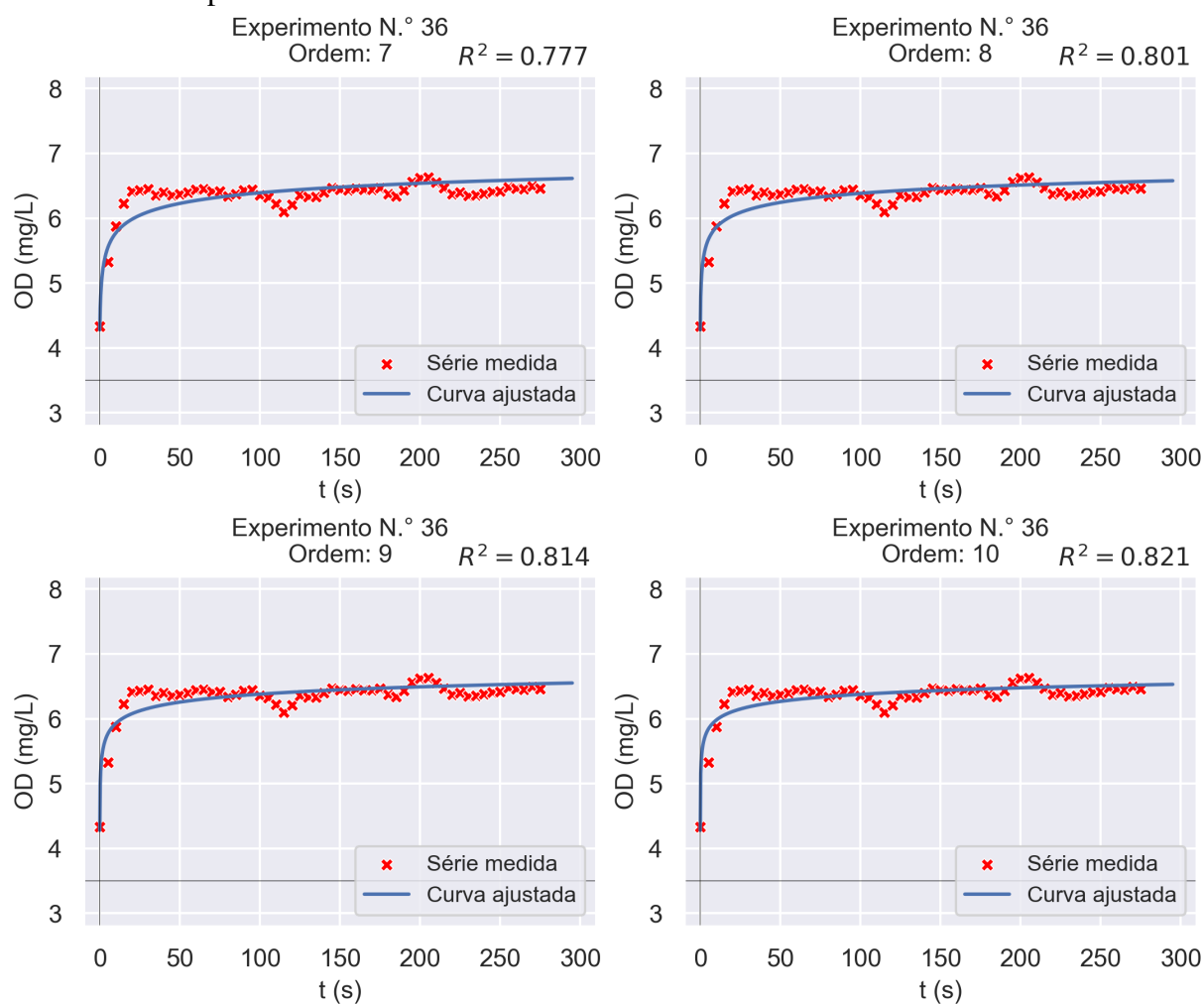
Figura 107 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 36



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

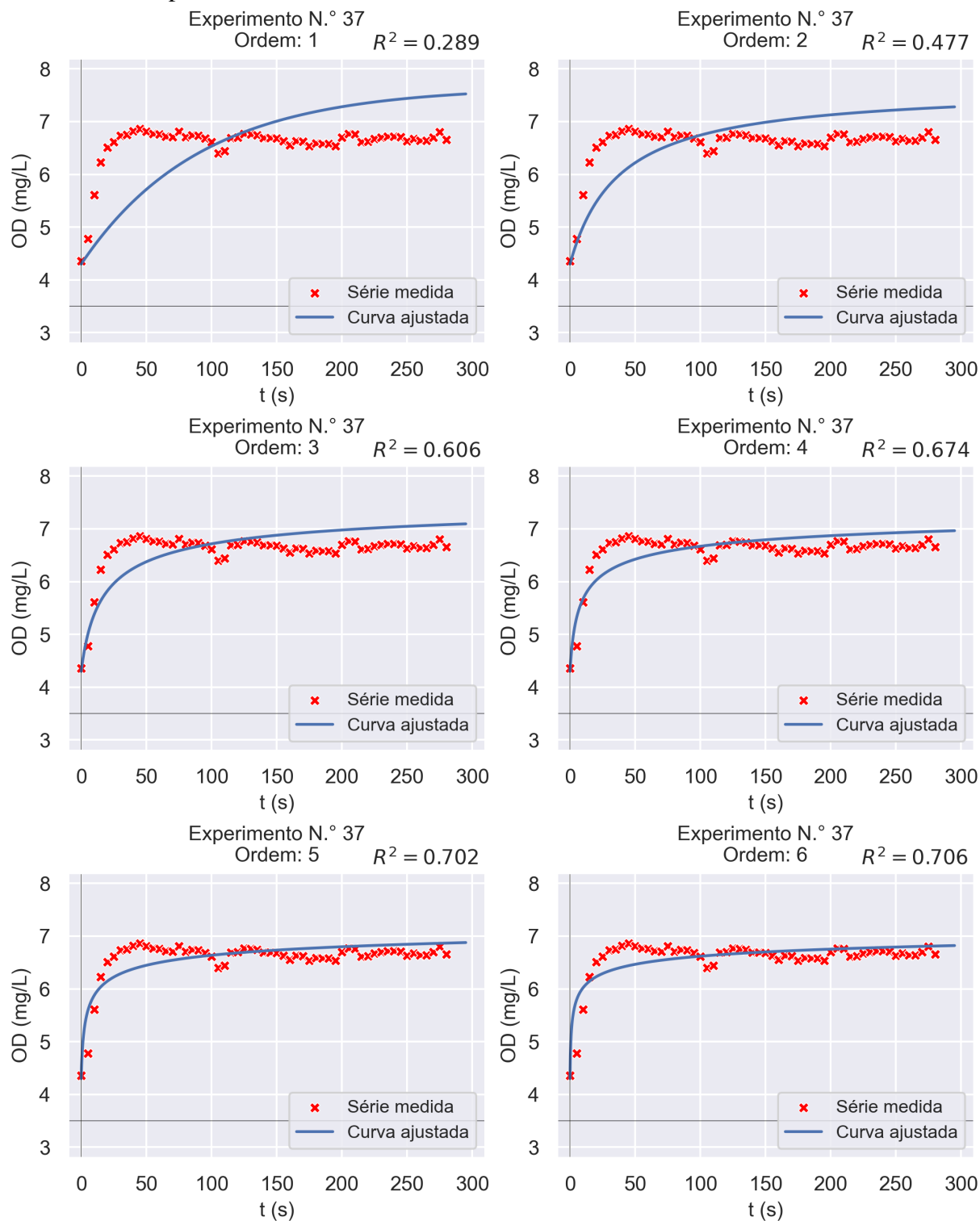
Figura 108 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 36



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

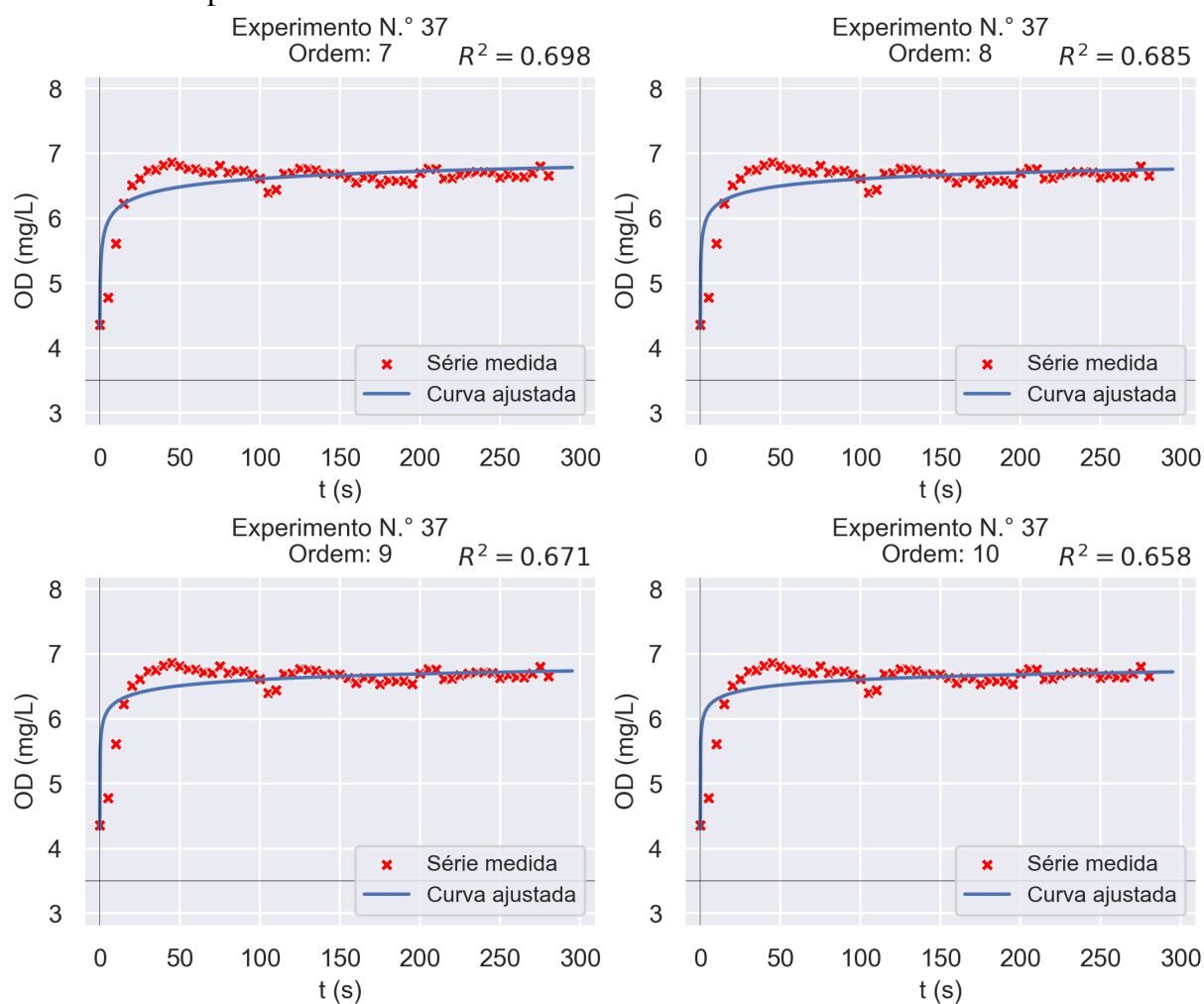
Figura 109 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 37



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

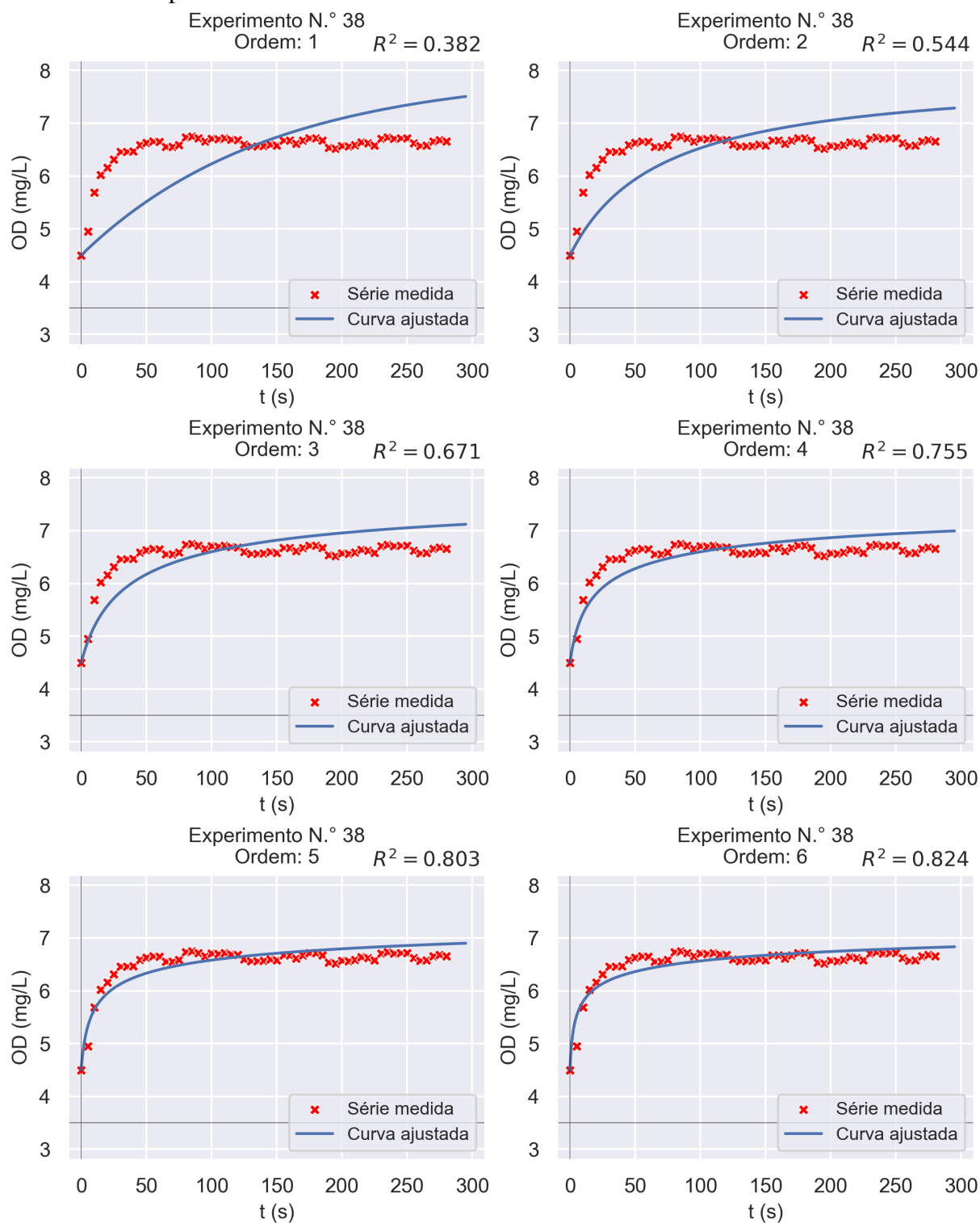
Figura 110 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 37



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 111 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 38

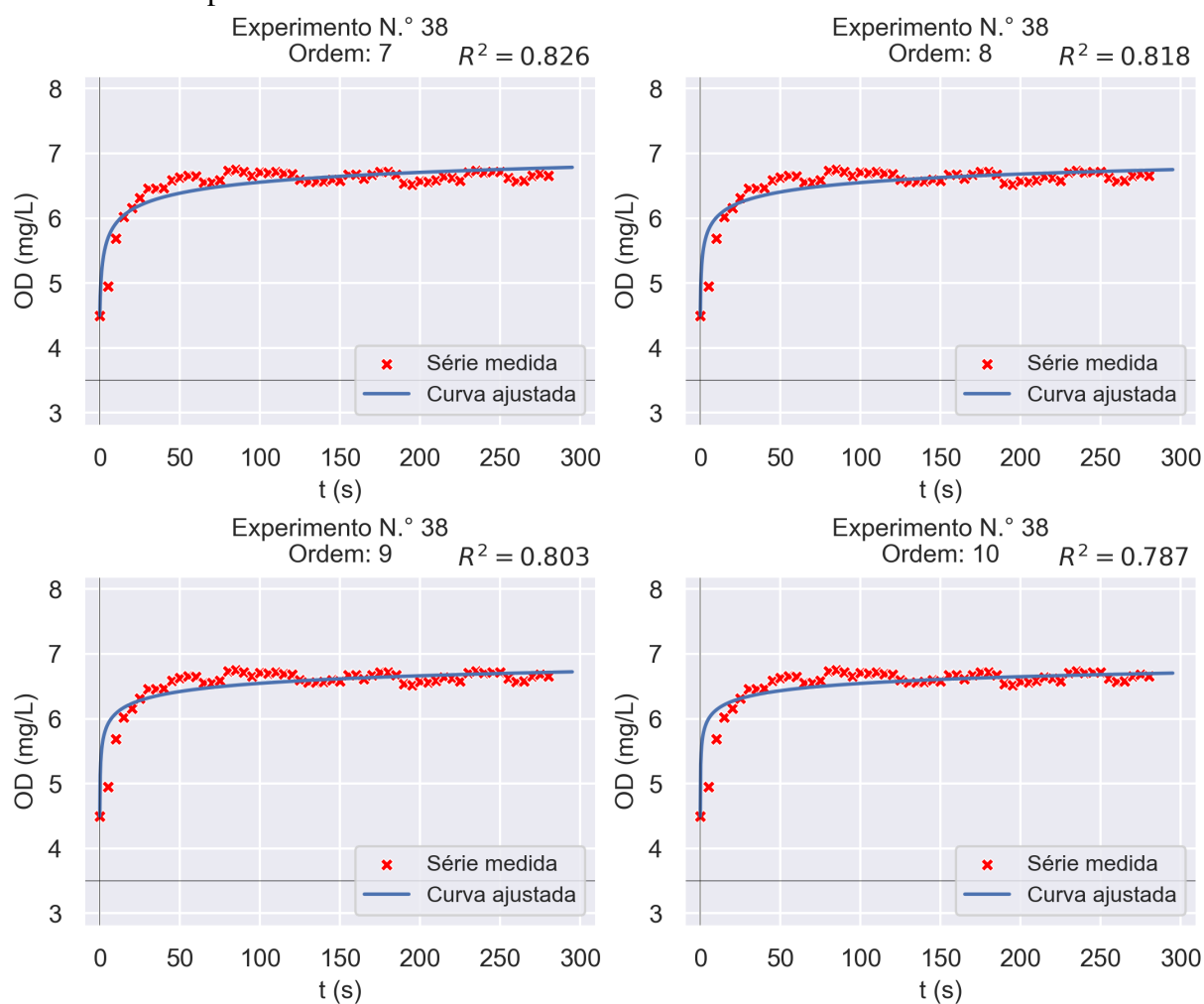


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



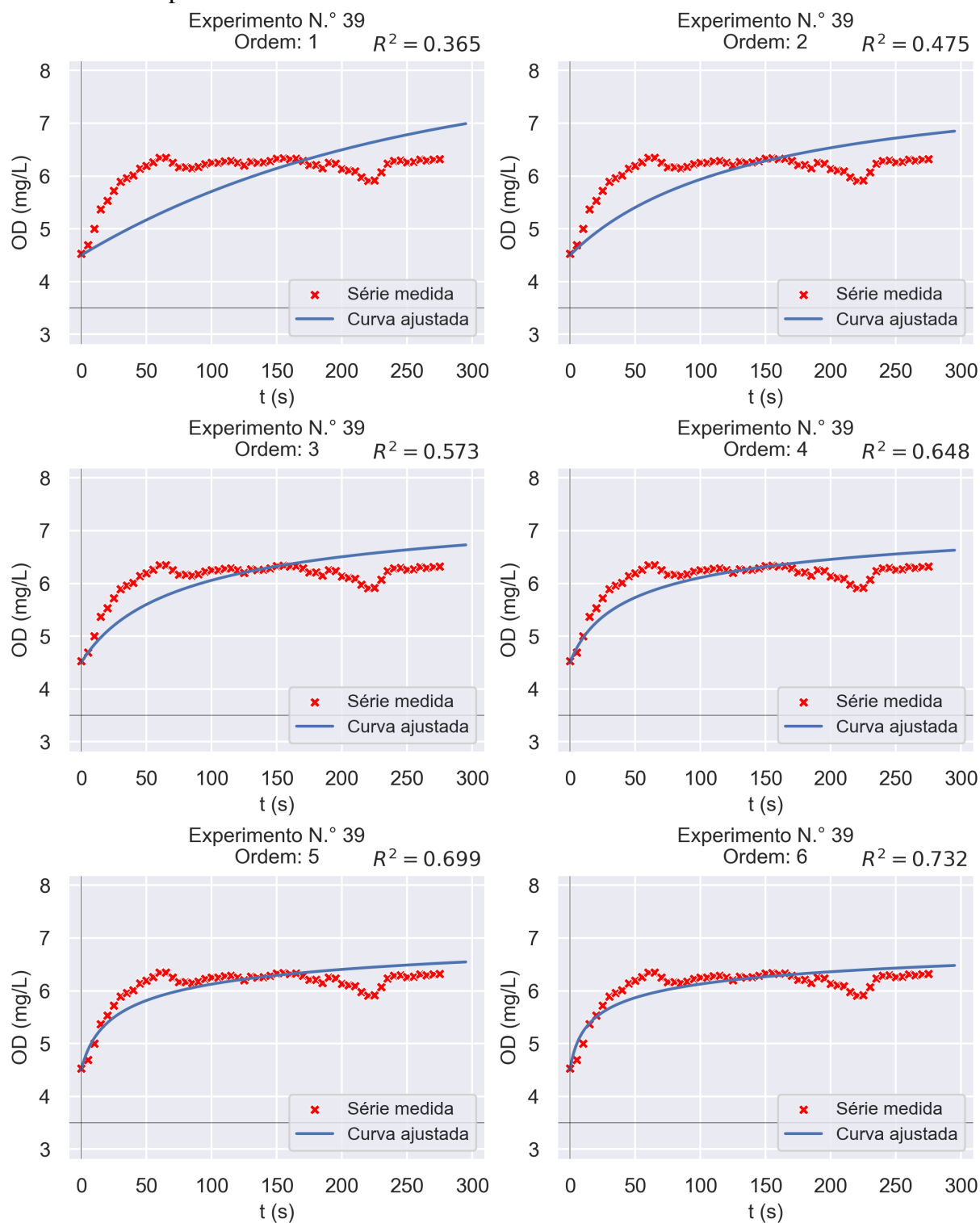
Figura 112 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 38



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

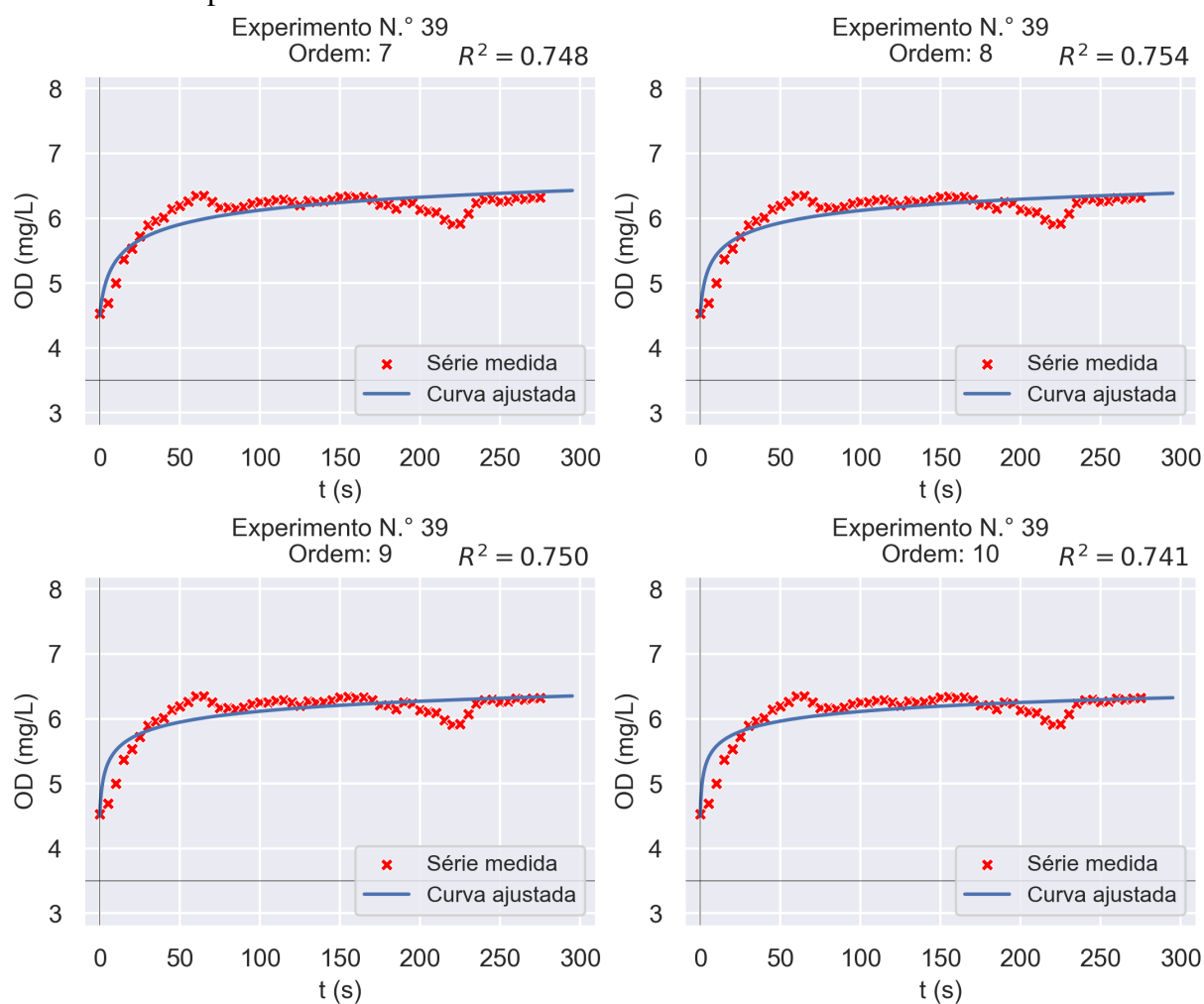
Figura 113 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 39



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

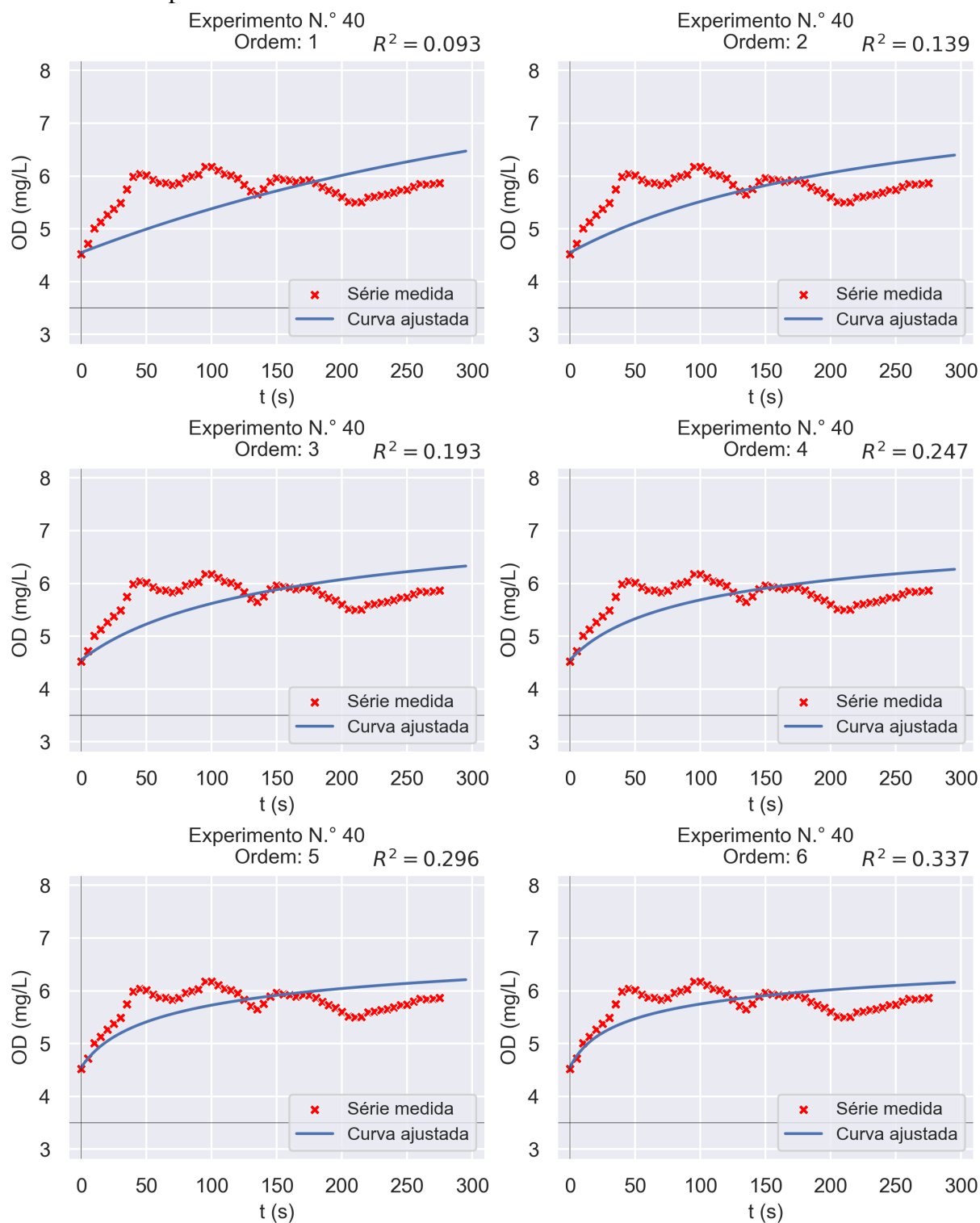
Figura 114 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 39



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

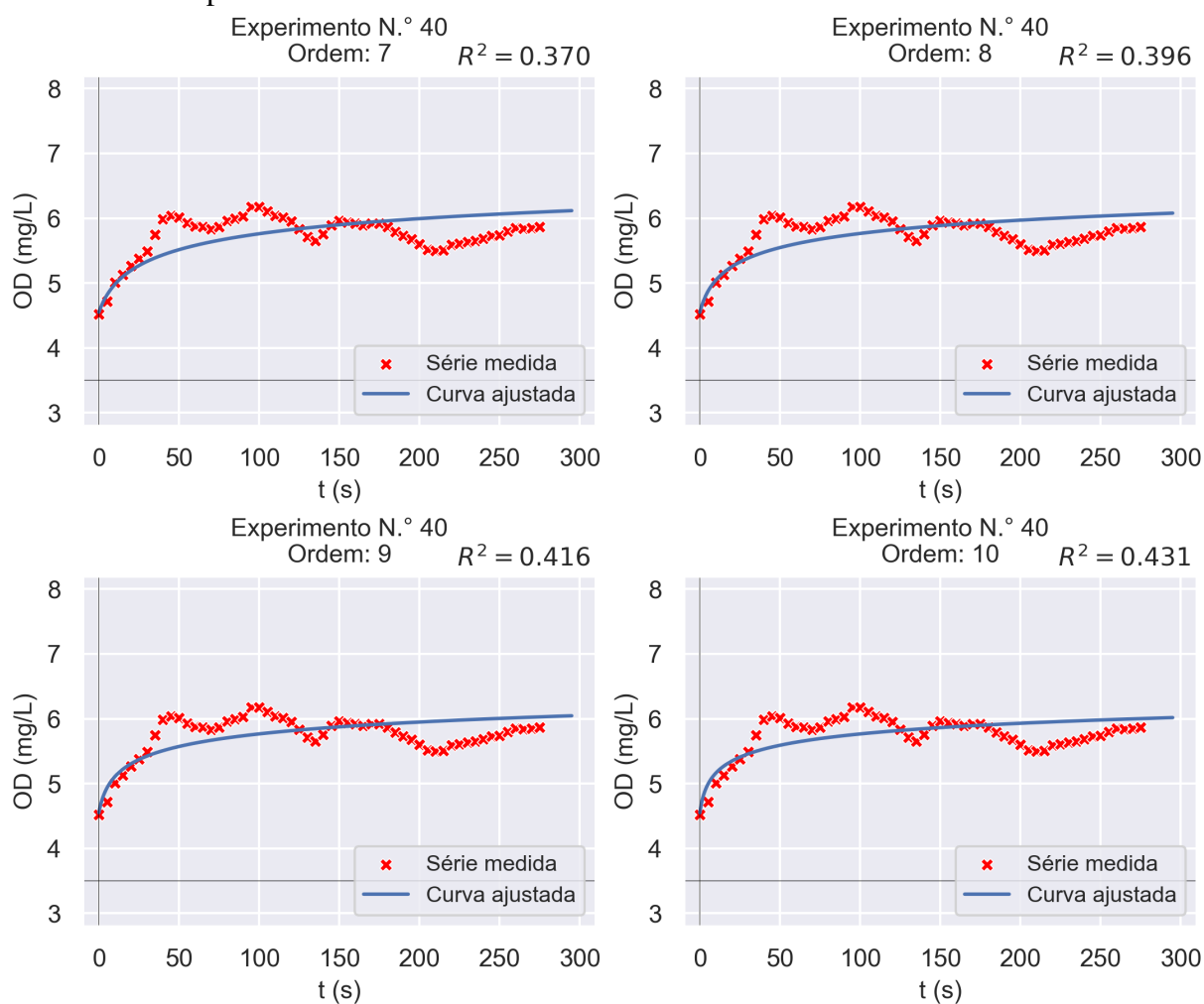
Figura 115 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 40



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

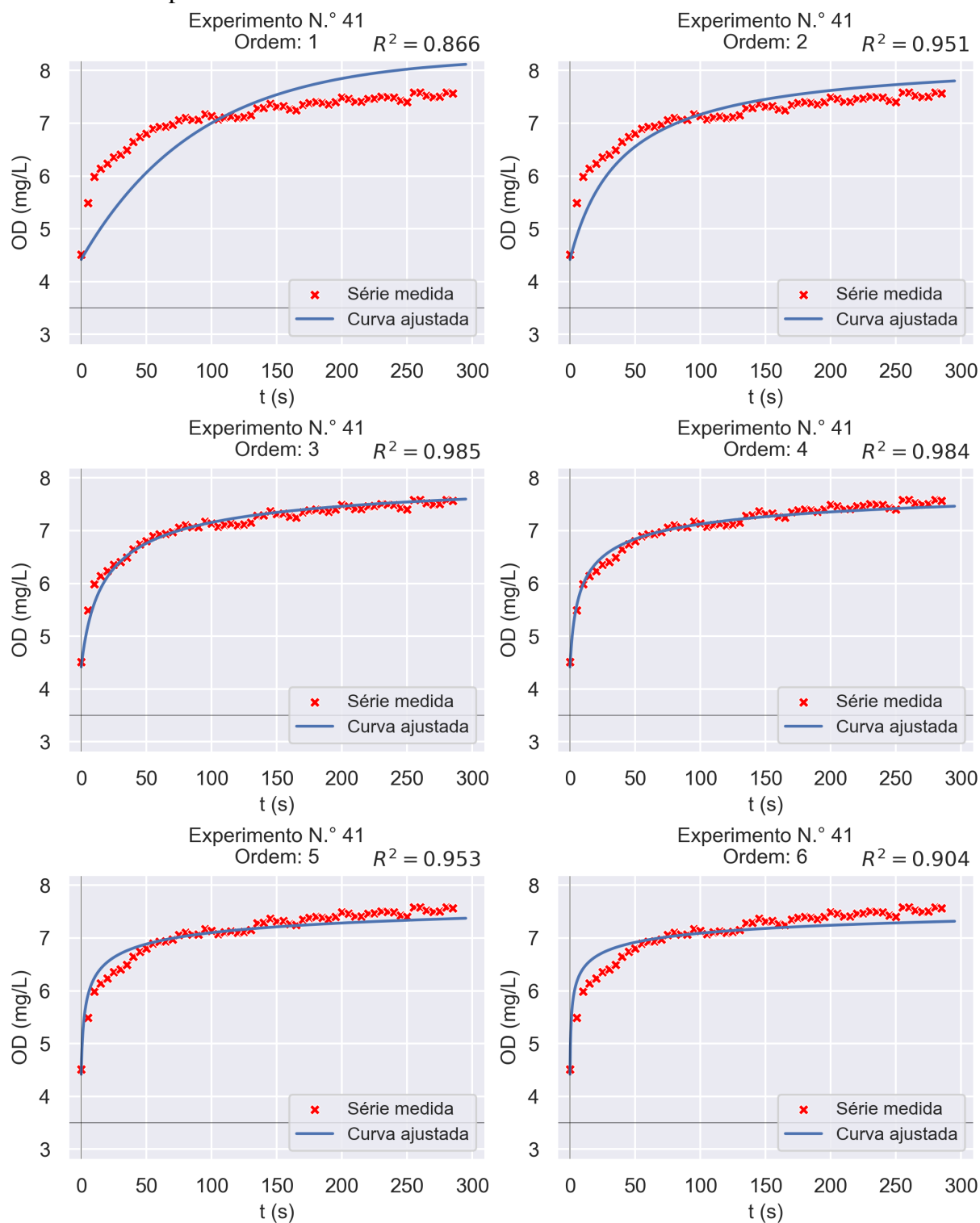
Figura 116 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 40



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

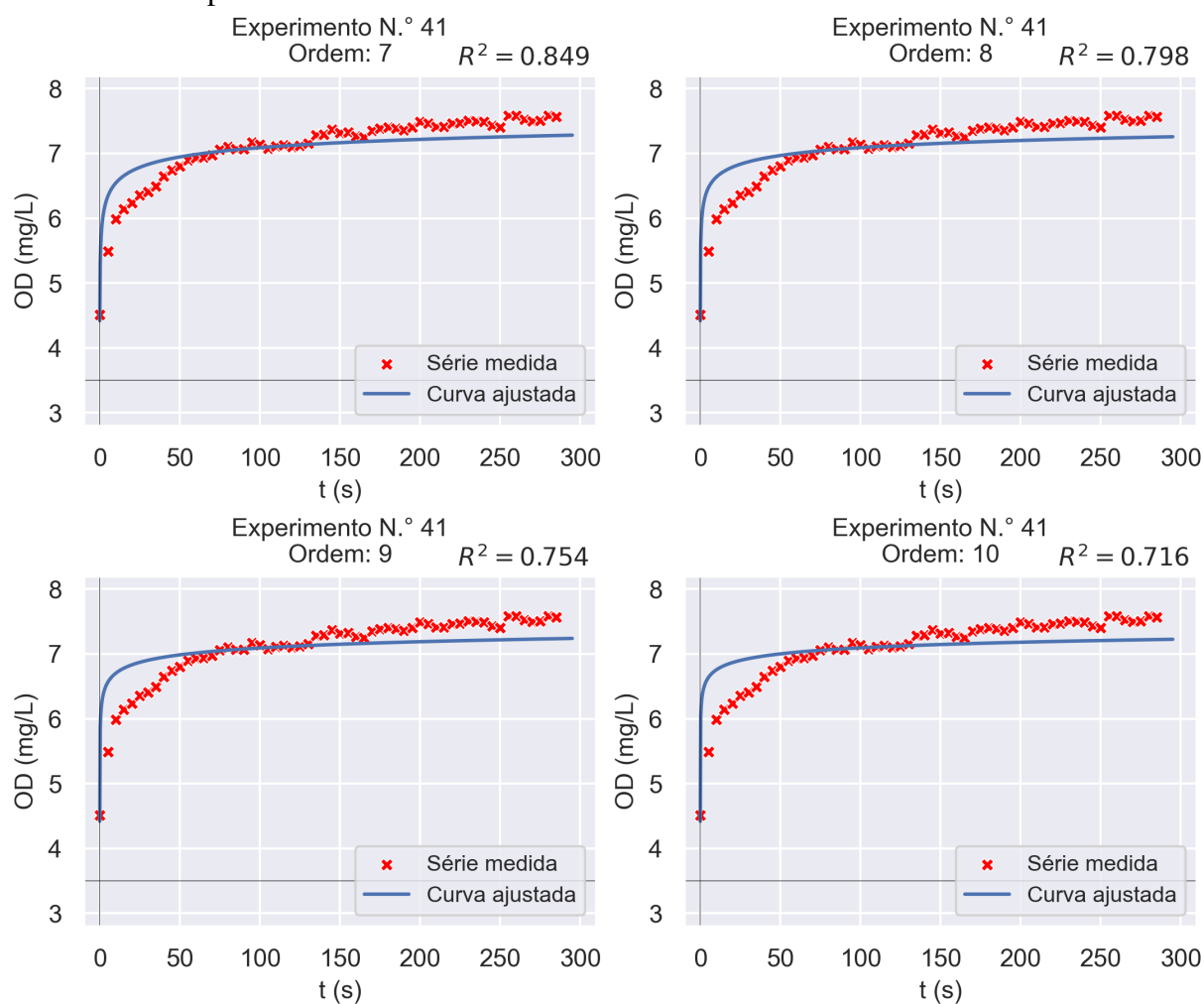
Figura 117 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 41



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

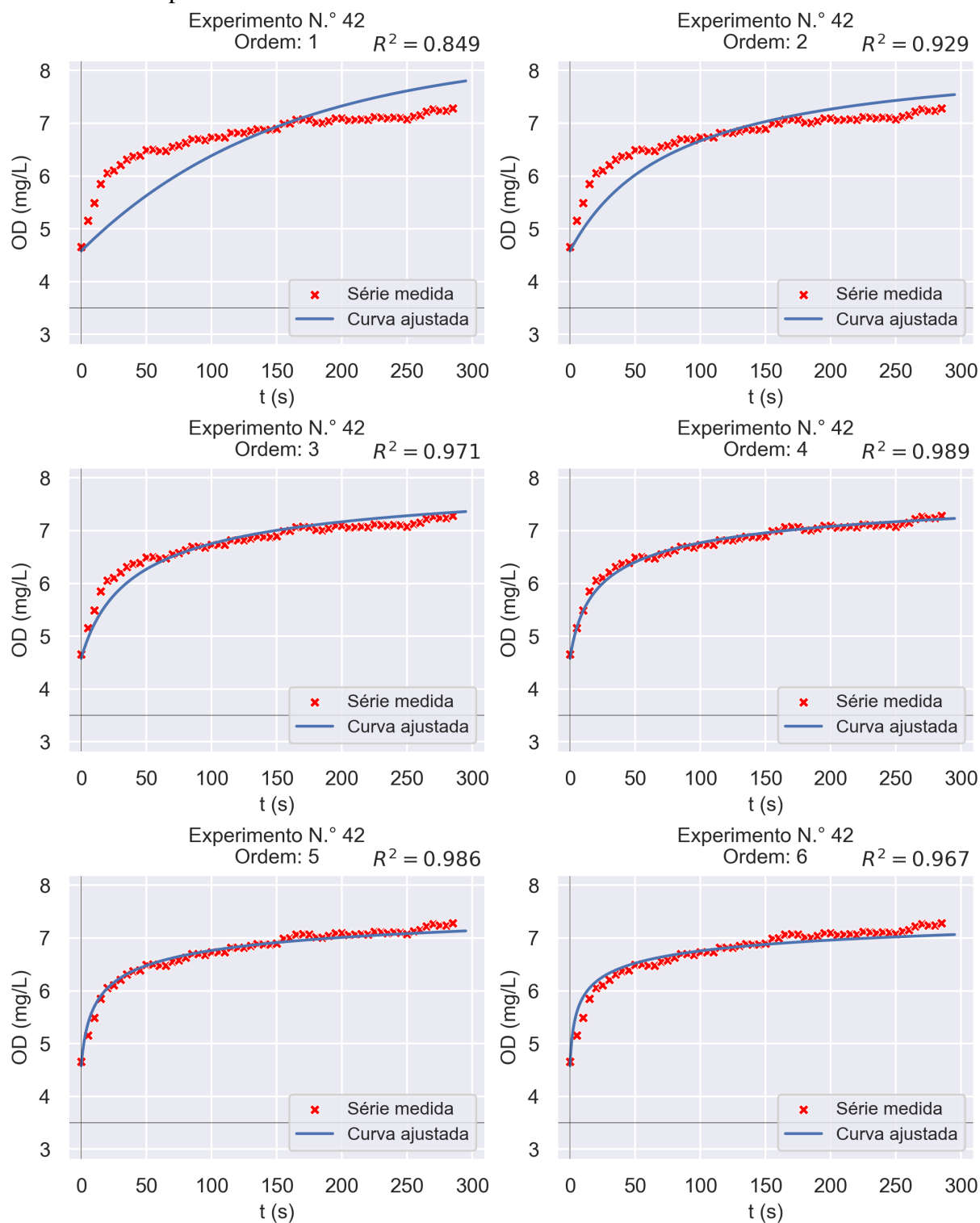
Figura 118 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 41



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 119 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 42

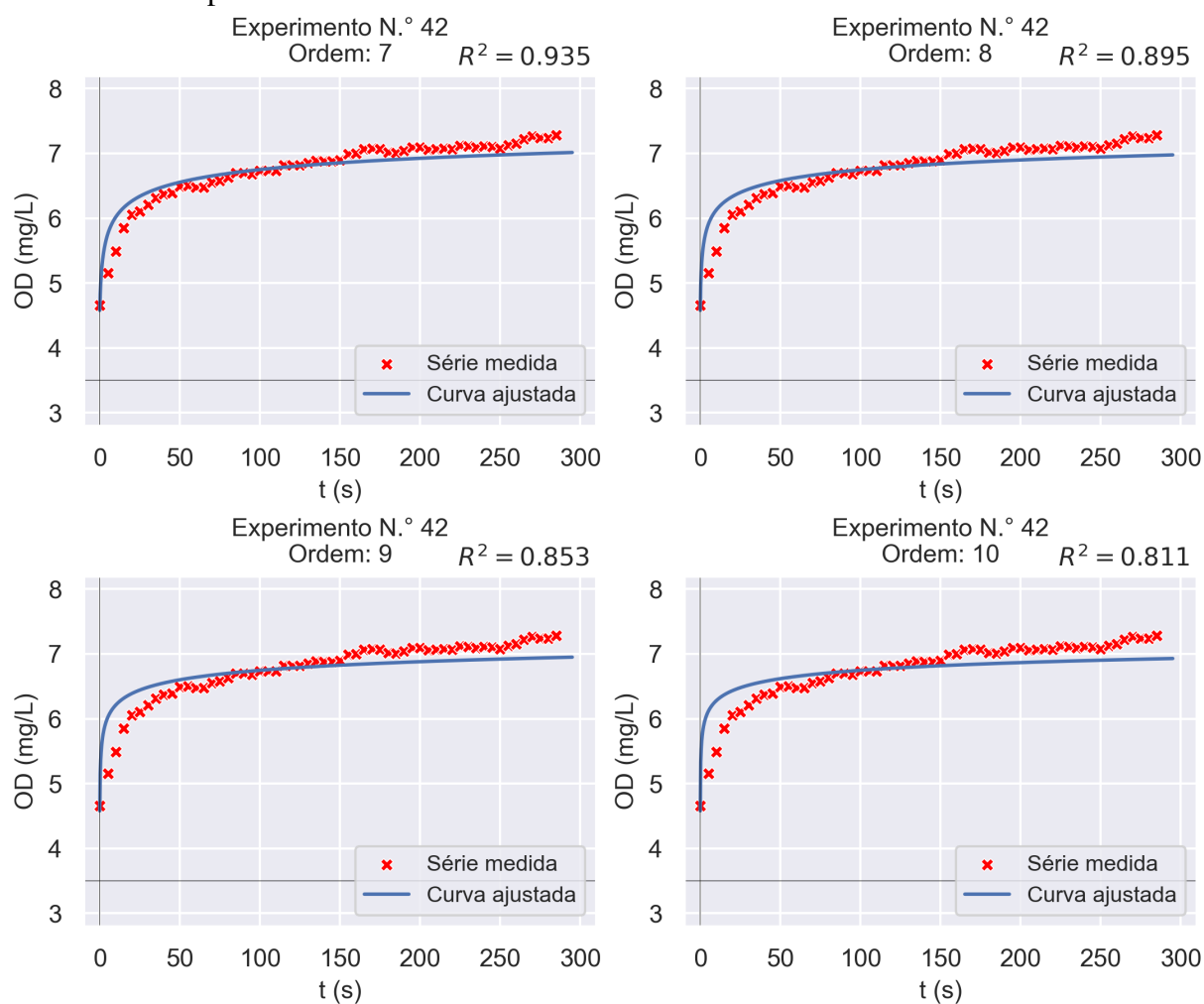


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



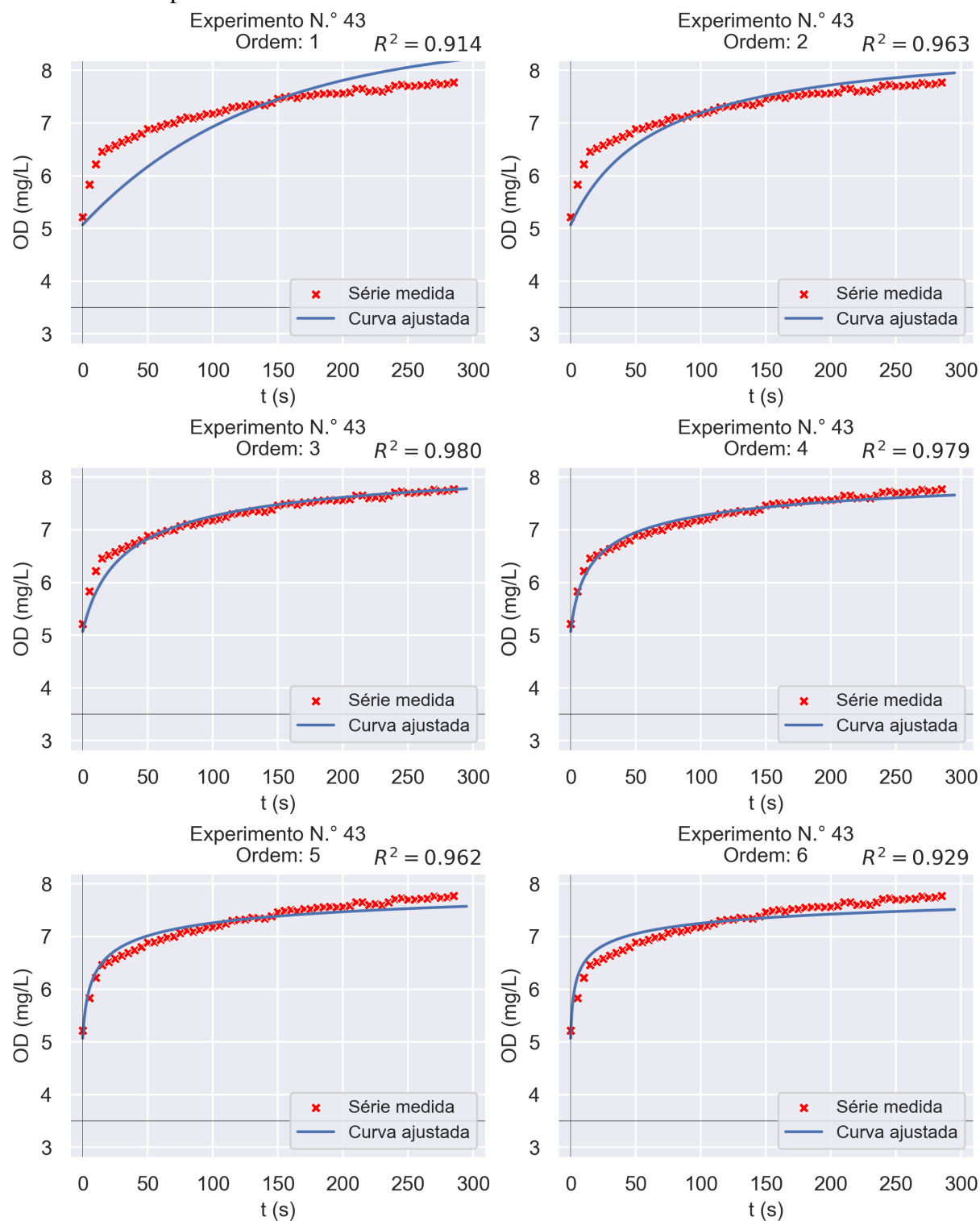
Figura 120 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 42



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

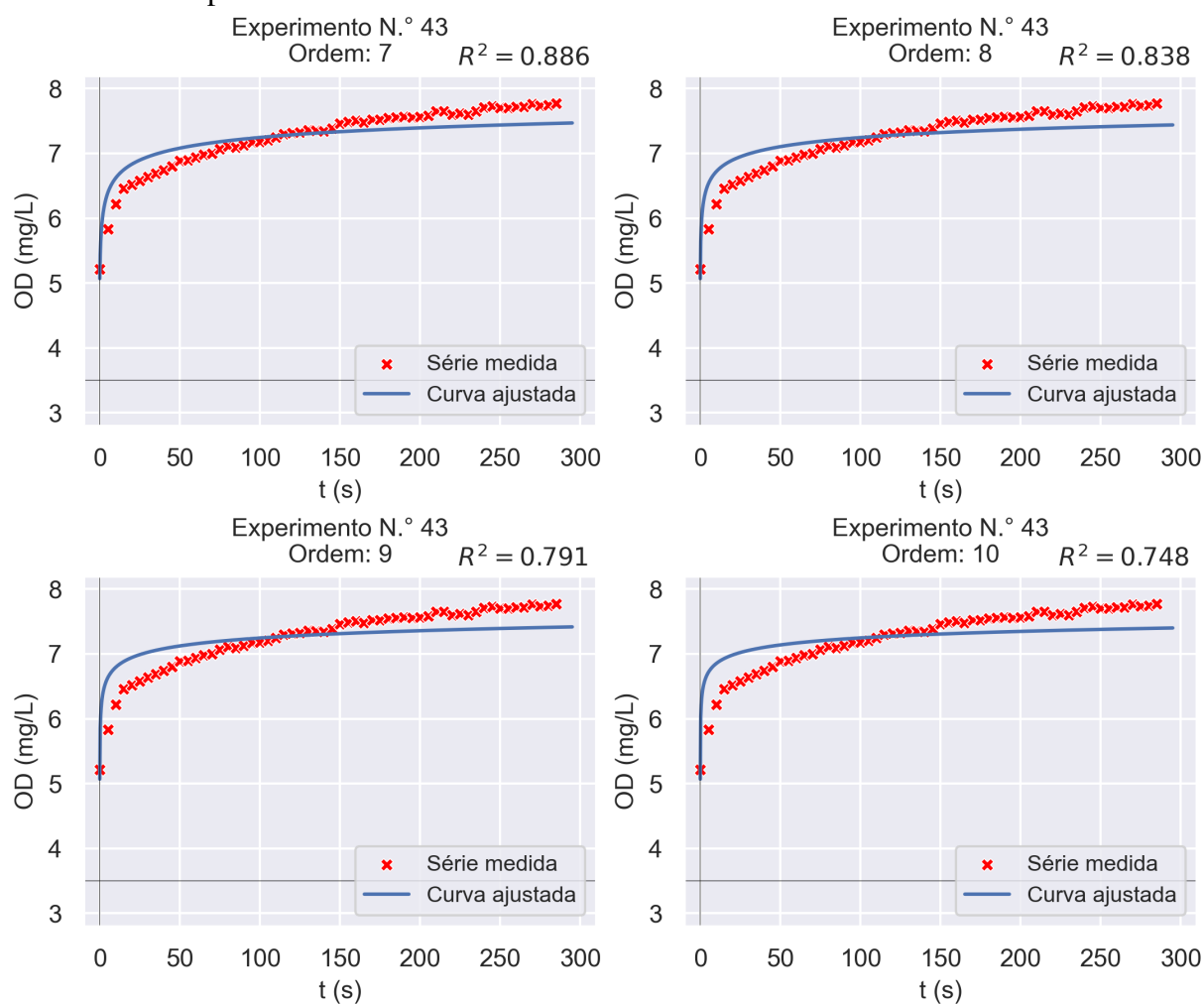
Figura 121 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 43



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

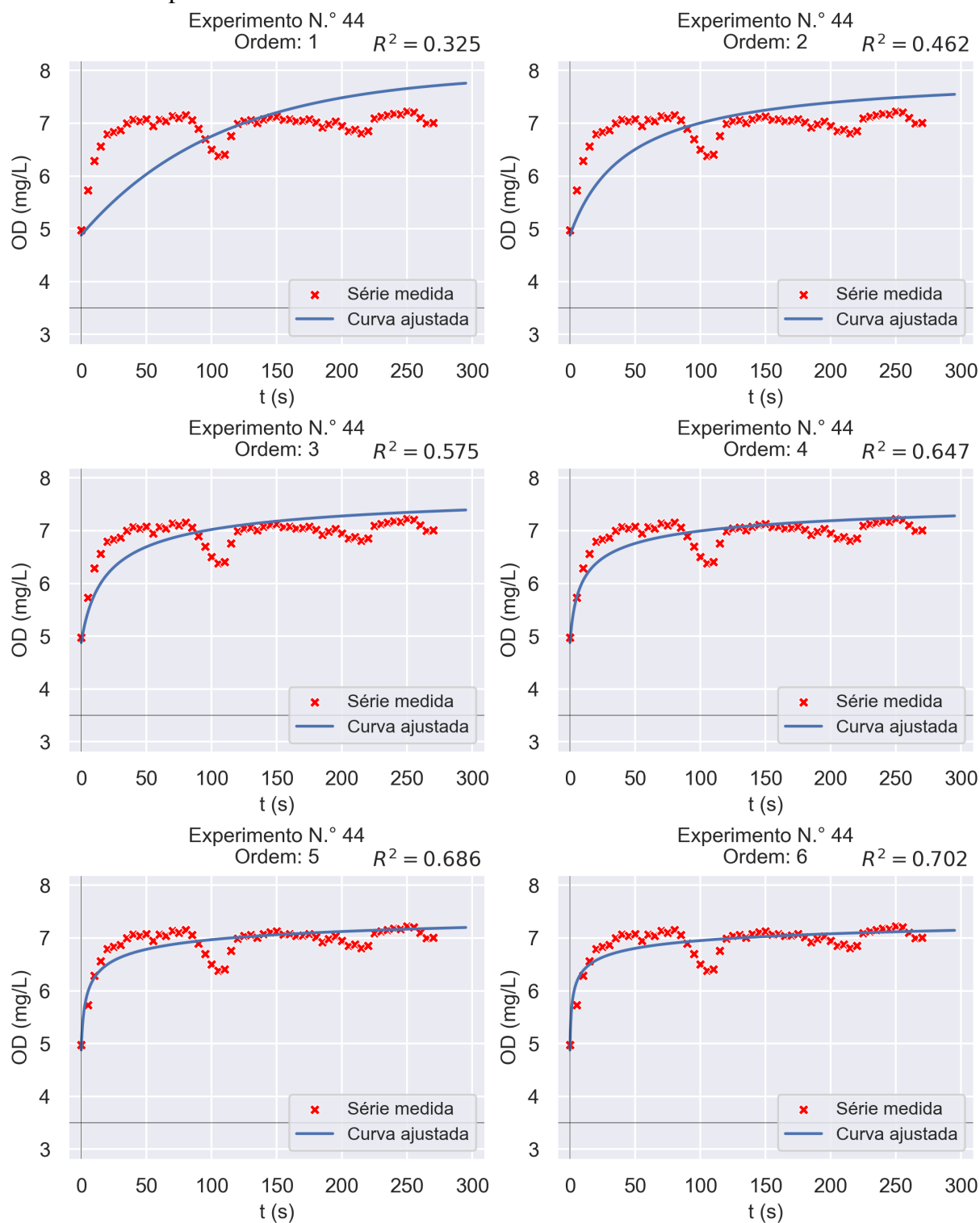
Figura 122 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 43



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

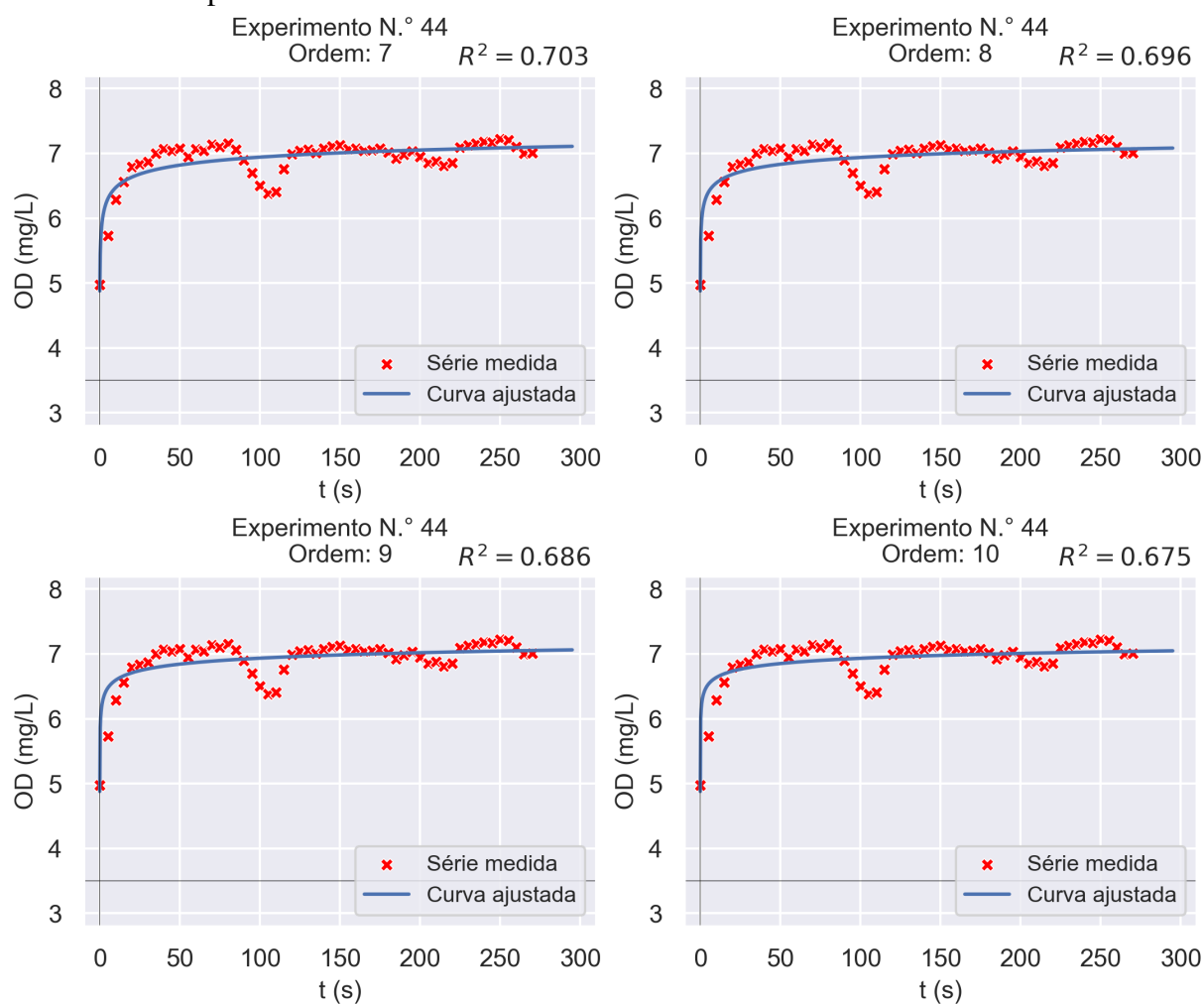
Figura 123 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 44



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

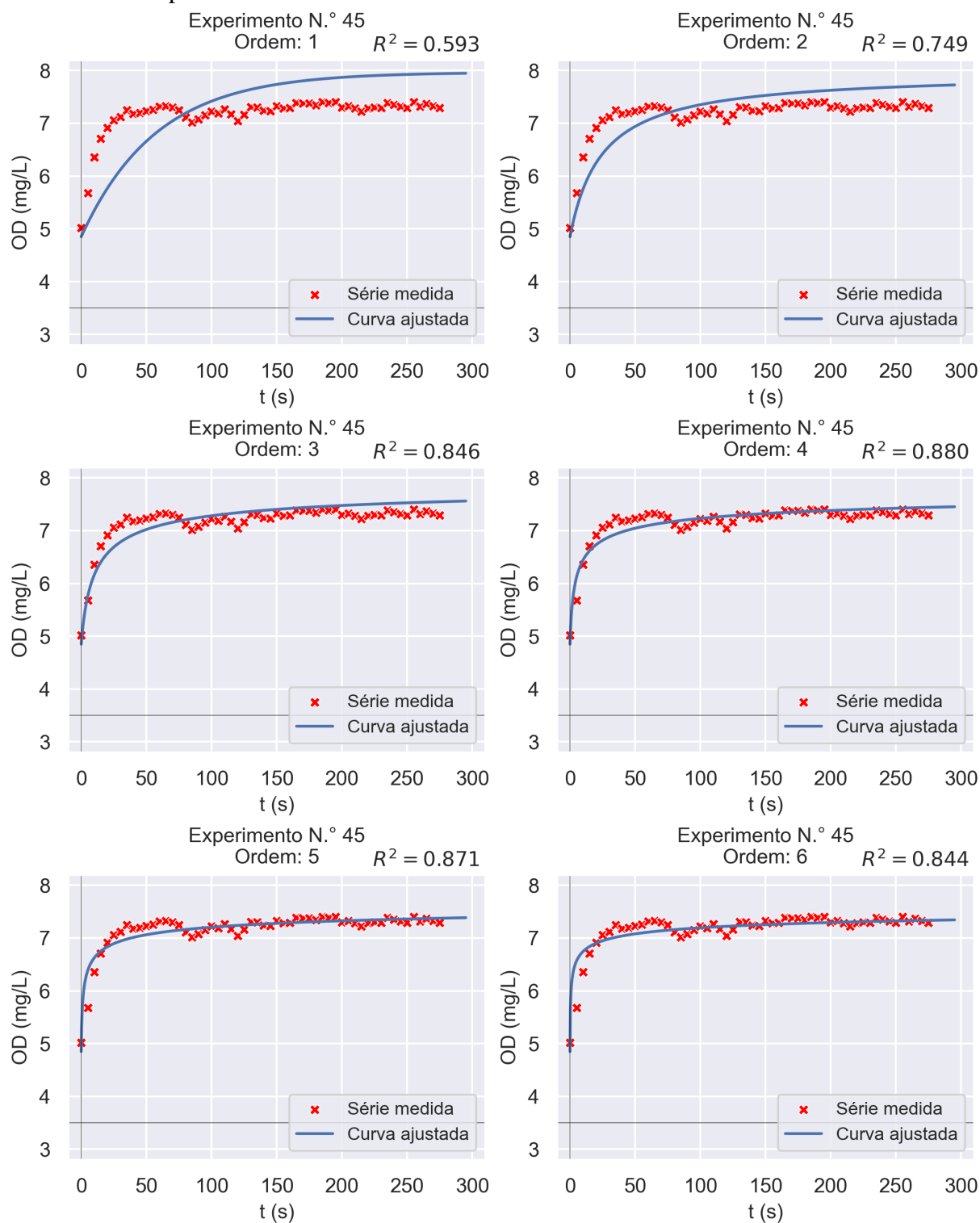
Figura 124 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 44



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

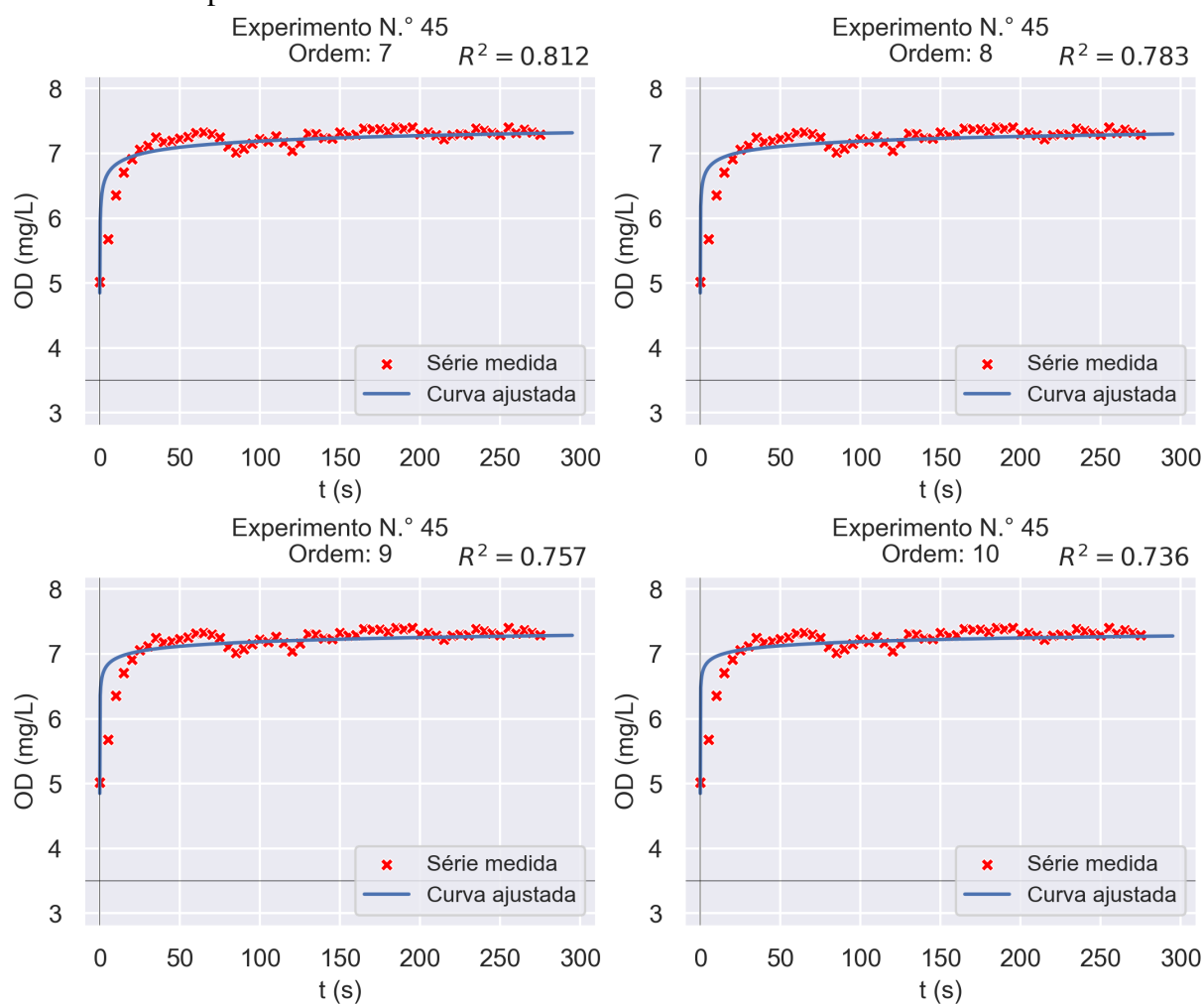
Figura 125 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 45



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

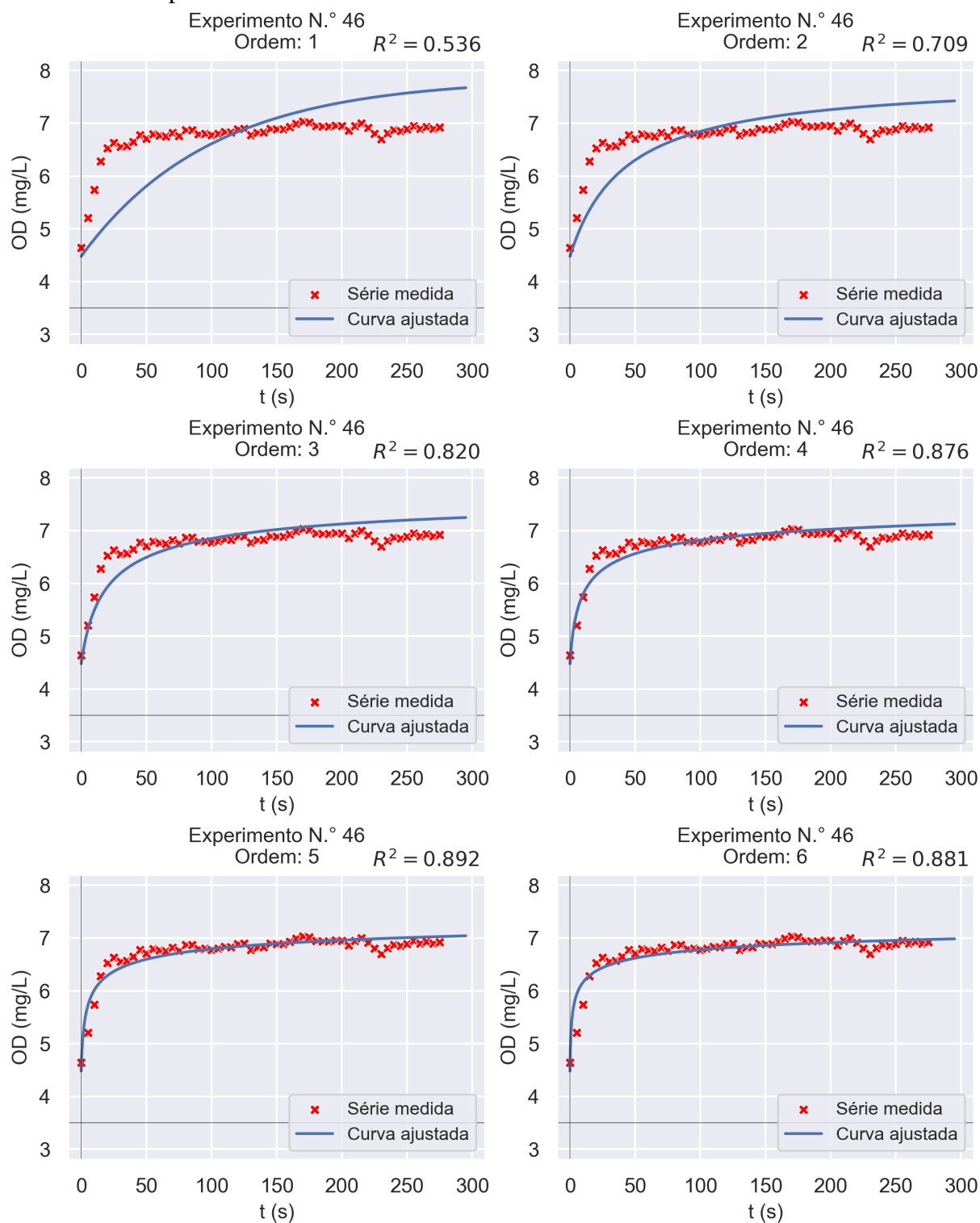
Figura 126 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 45



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 127 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 46

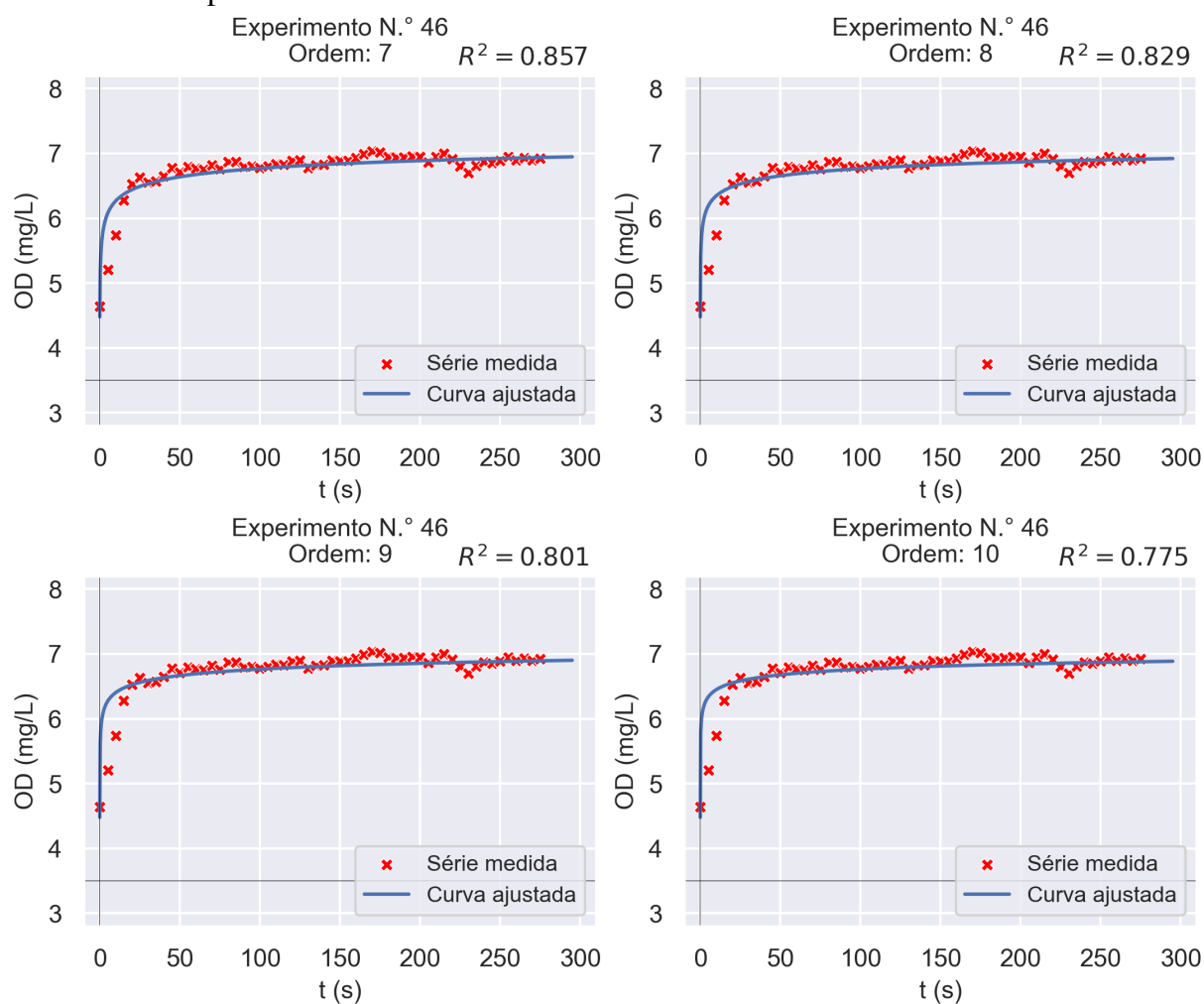


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



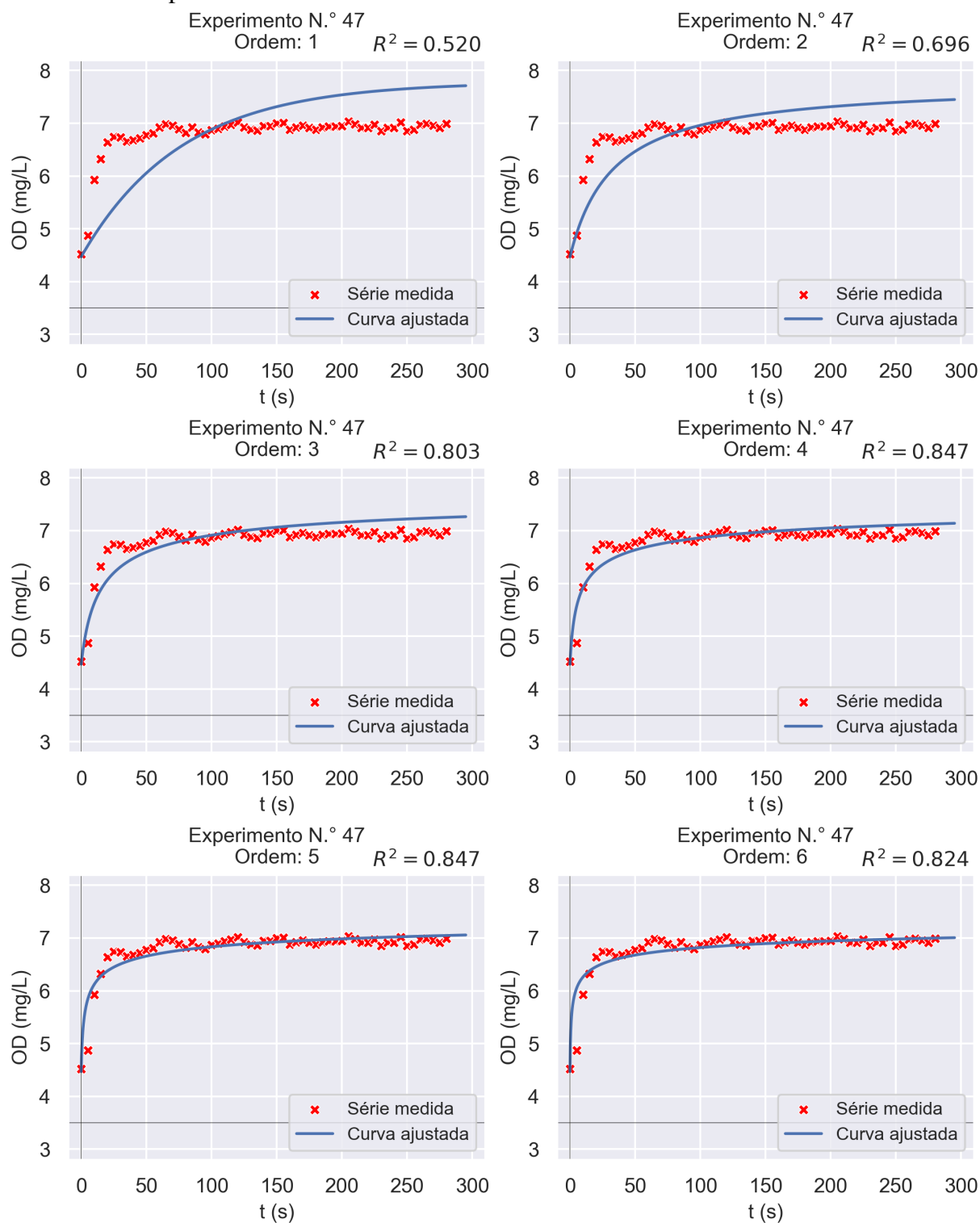
Figura 128 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 46



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

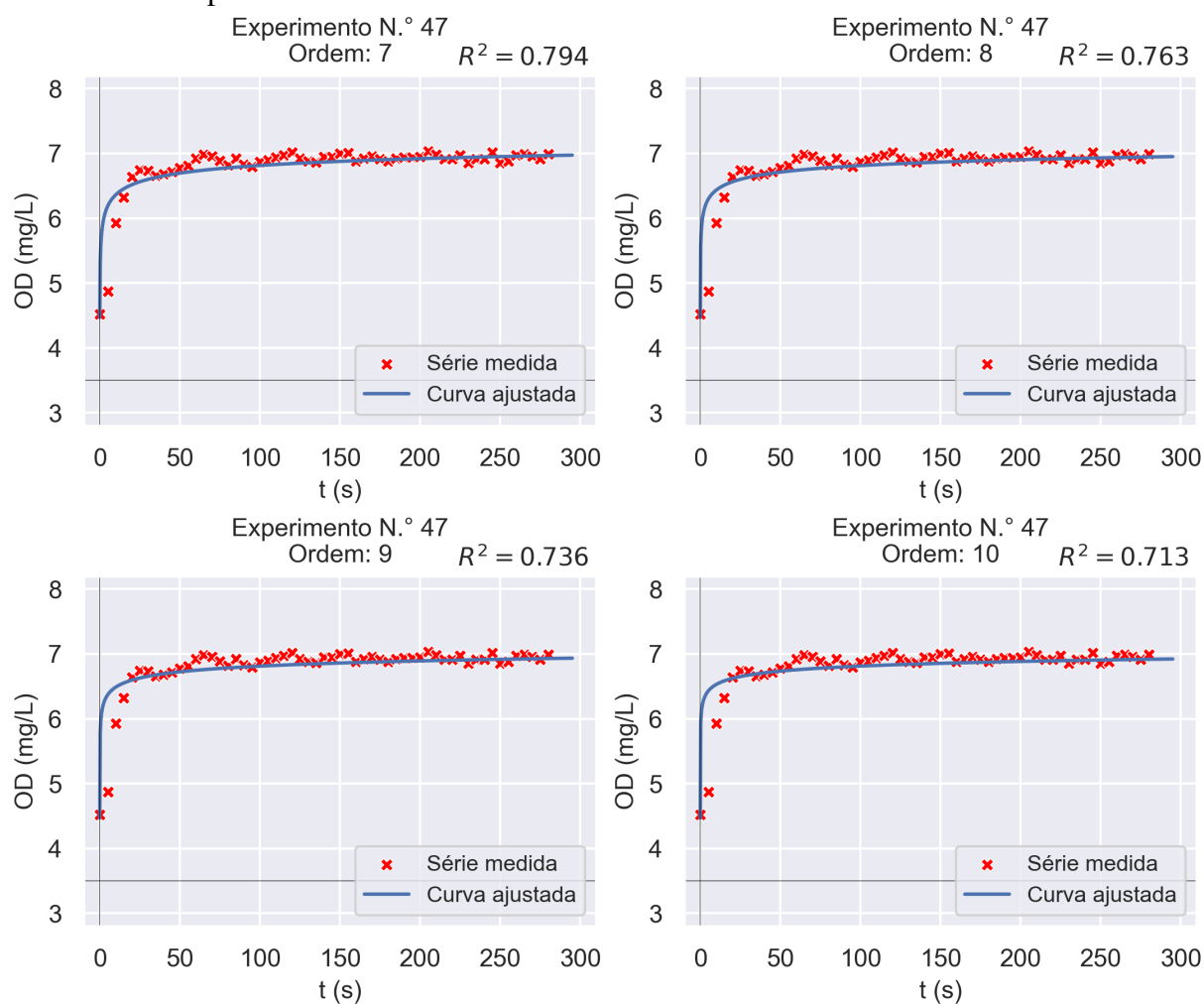
Figura 129 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 47



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

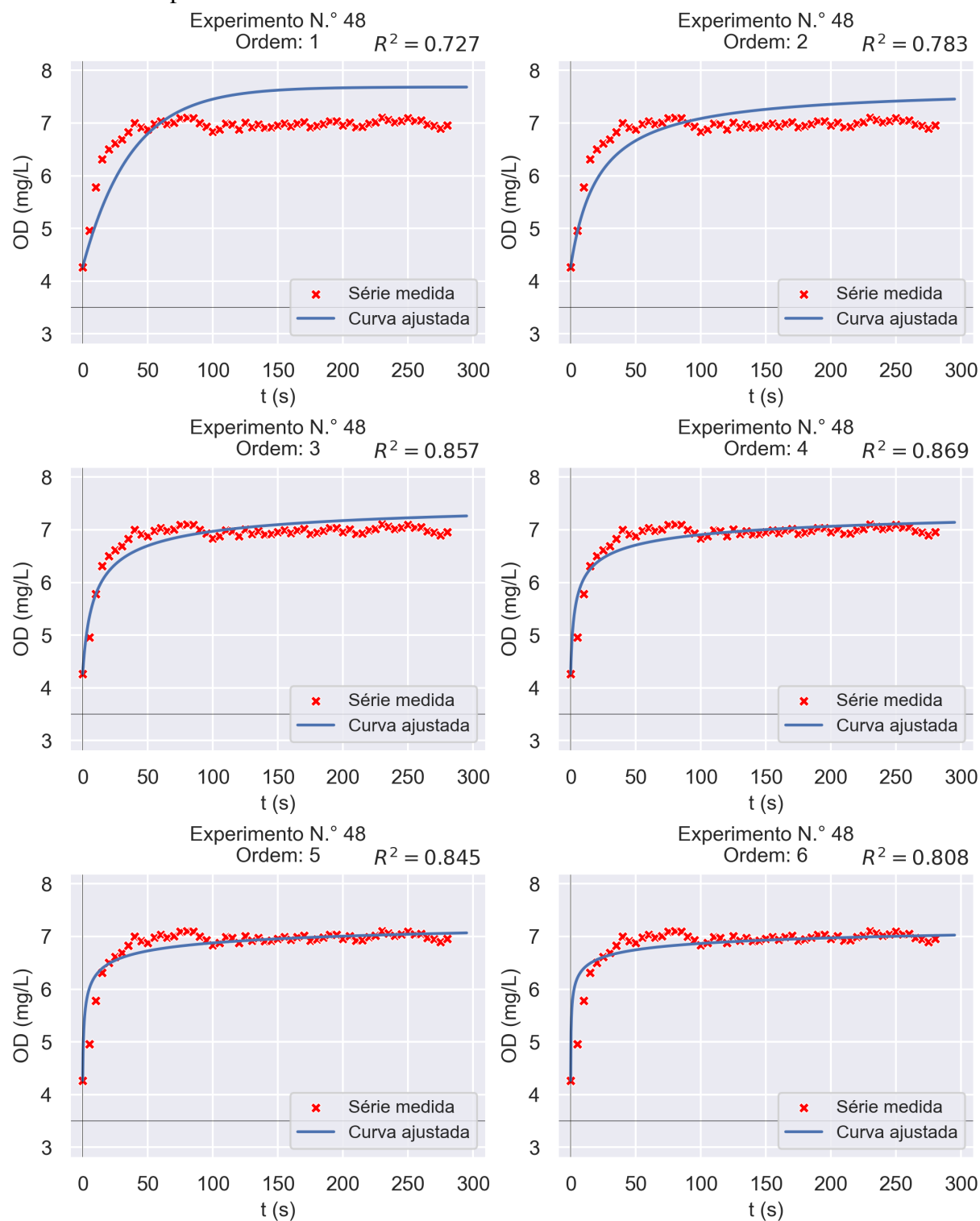
Figura 130 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 47



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

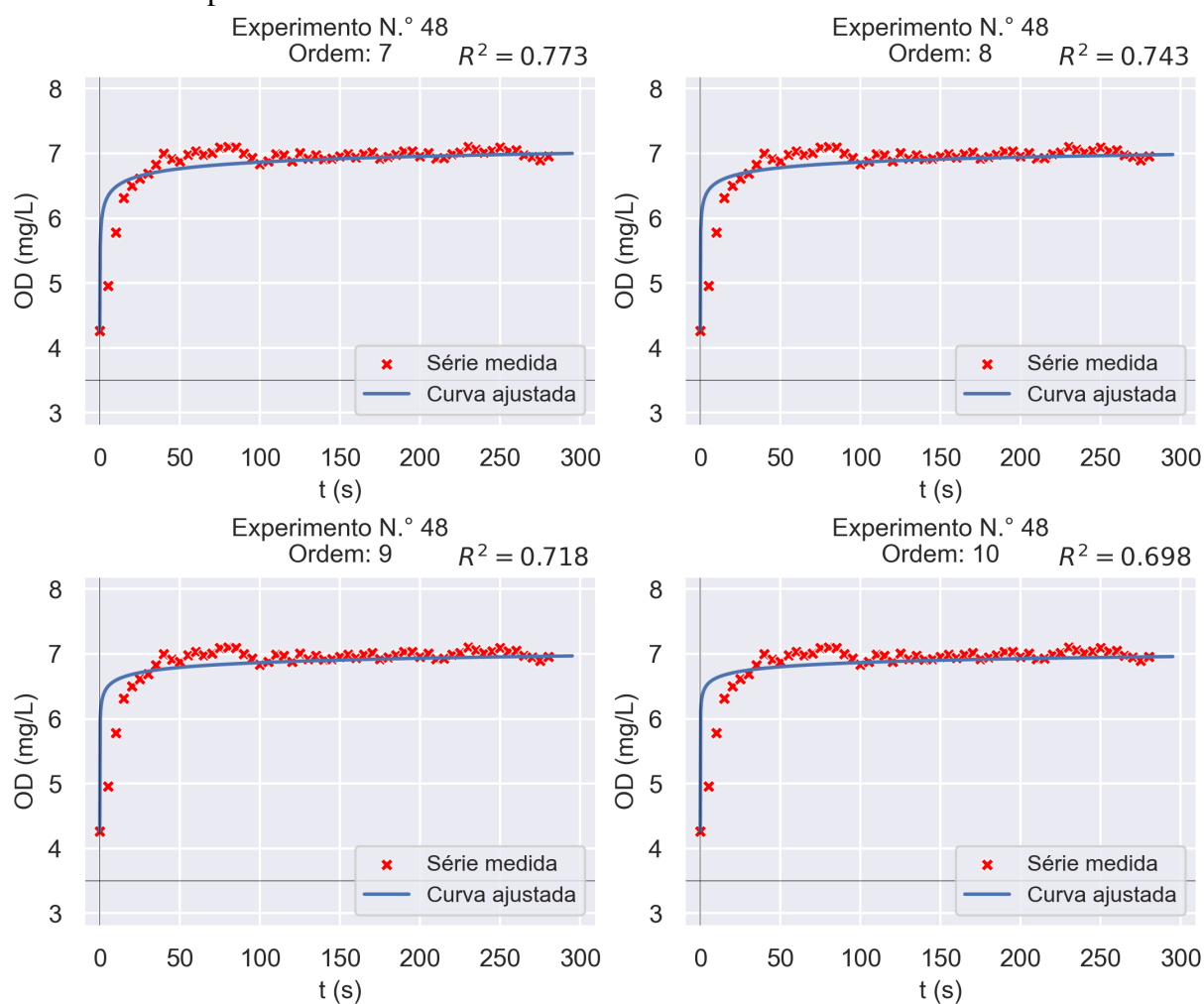
Figura 131 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 48



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

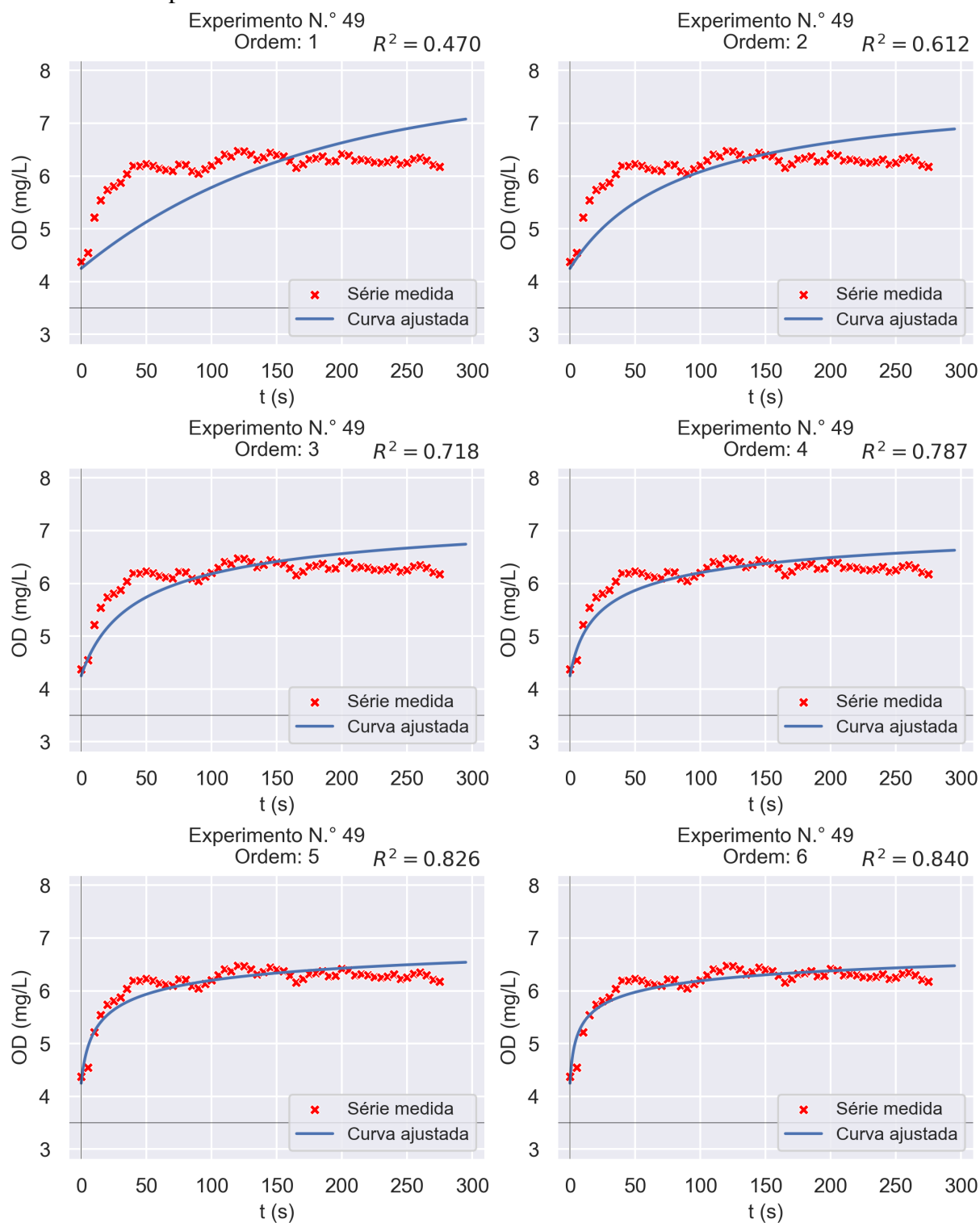
Figura 132 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 48



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

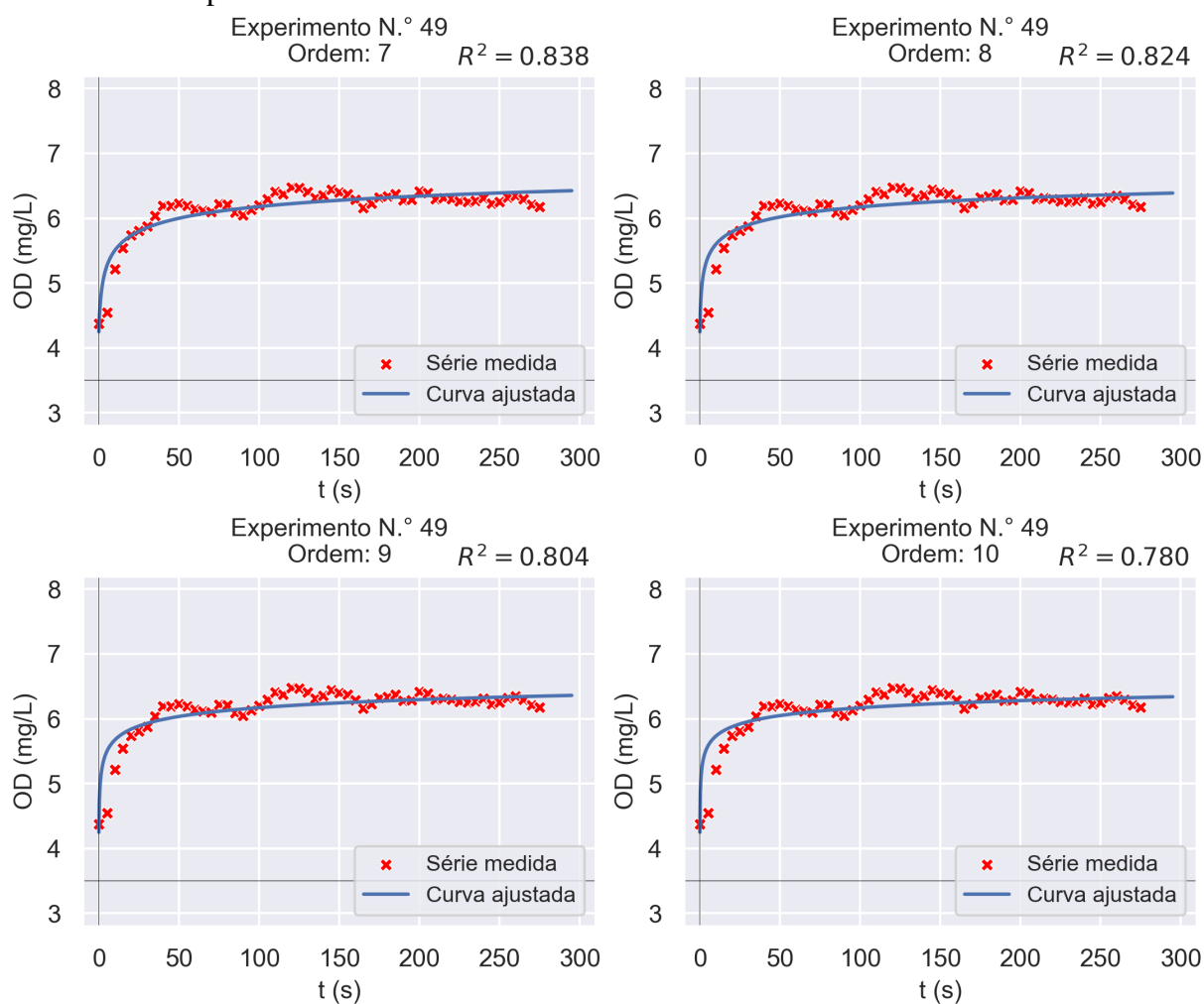
Figura 133 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 49



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

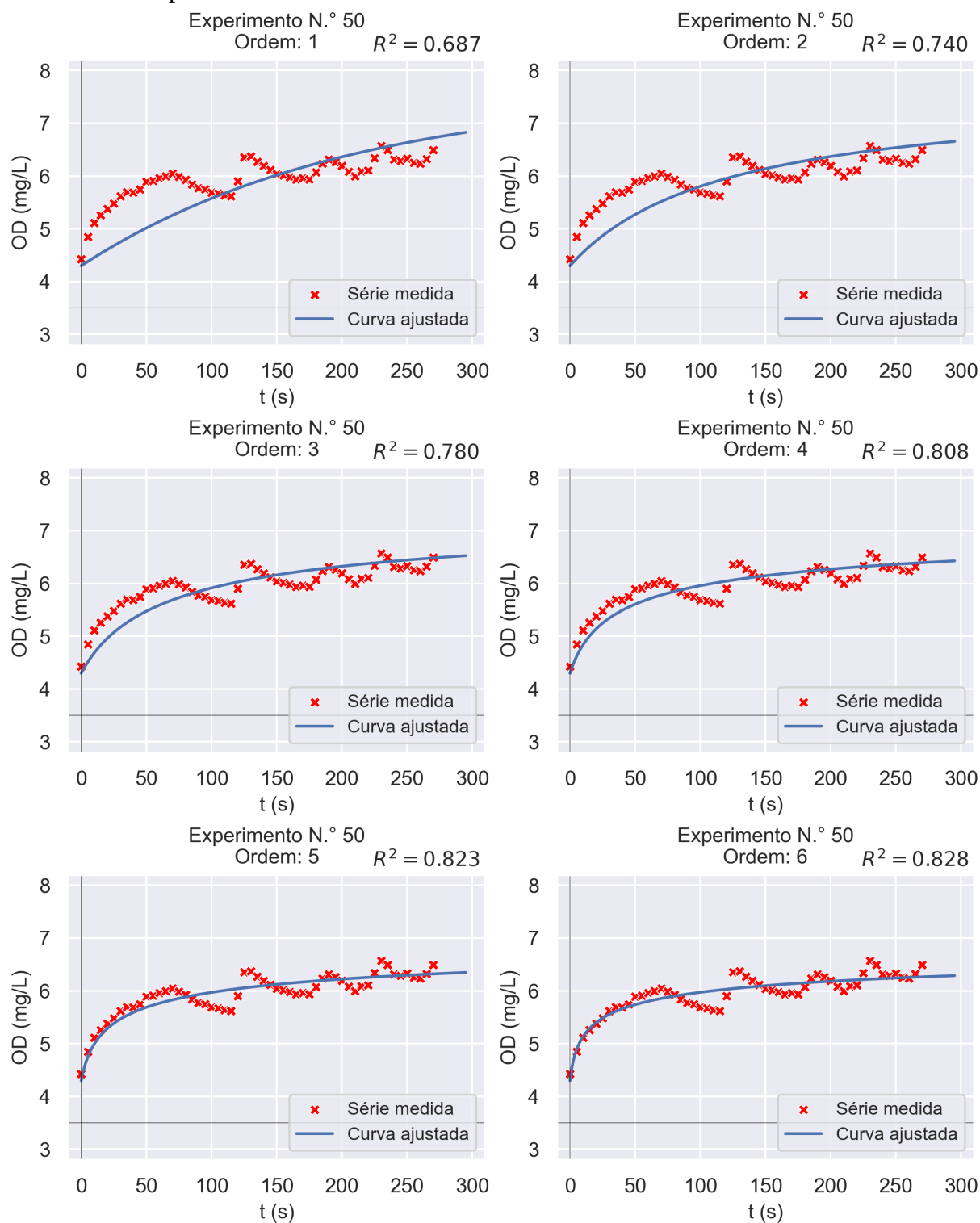
Figura 134 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 49



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 135 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 50

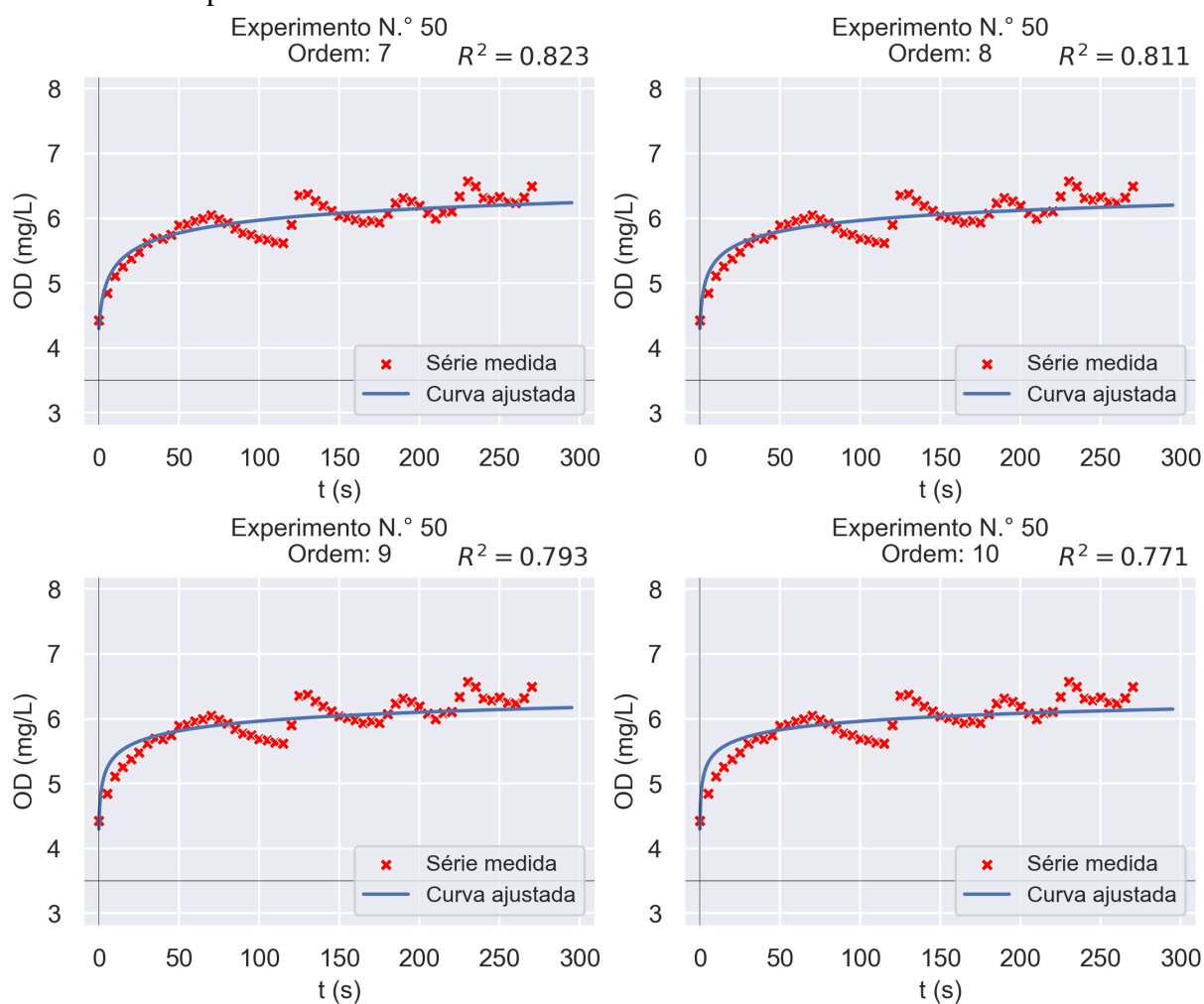


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



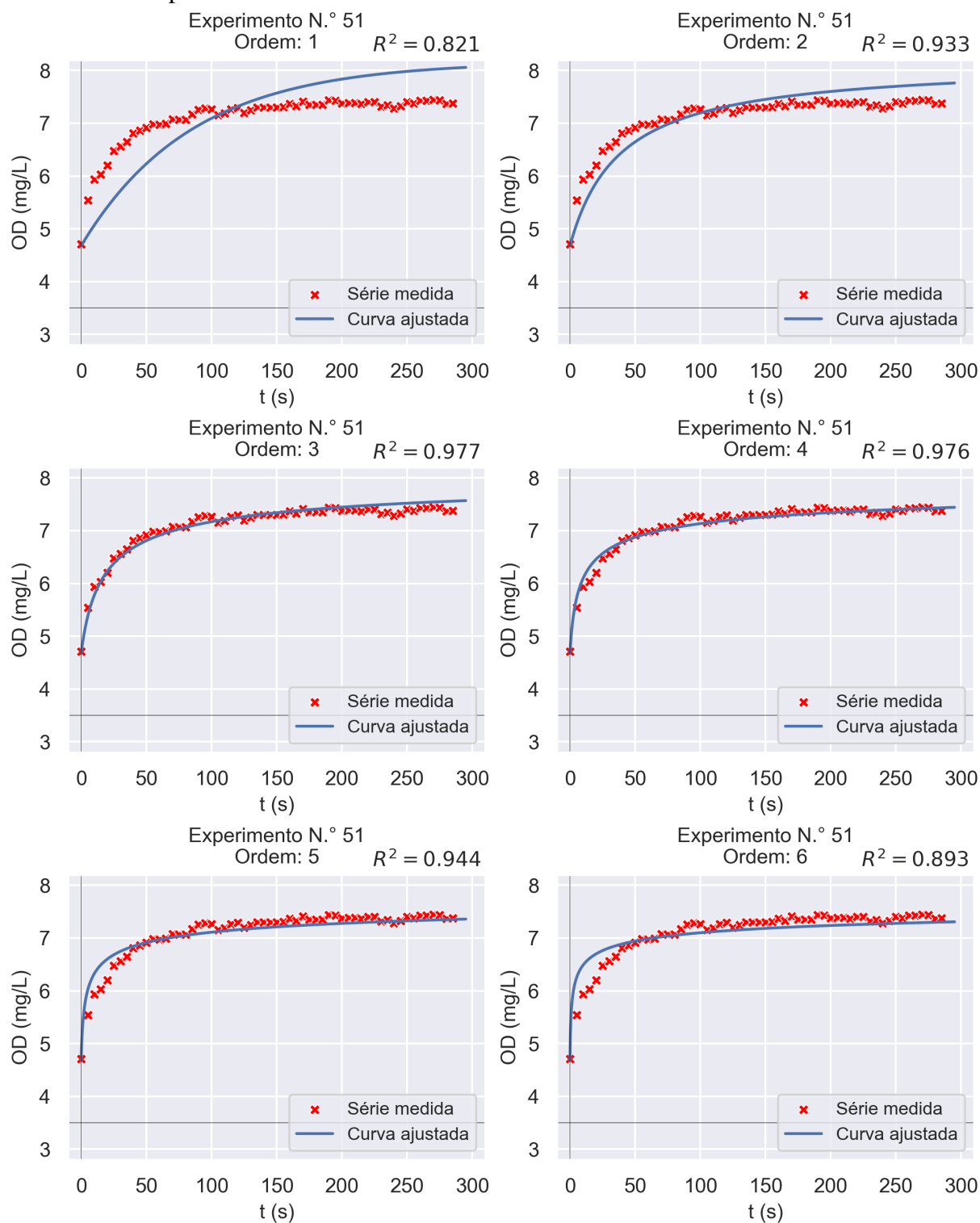
Figura 136 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 50



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

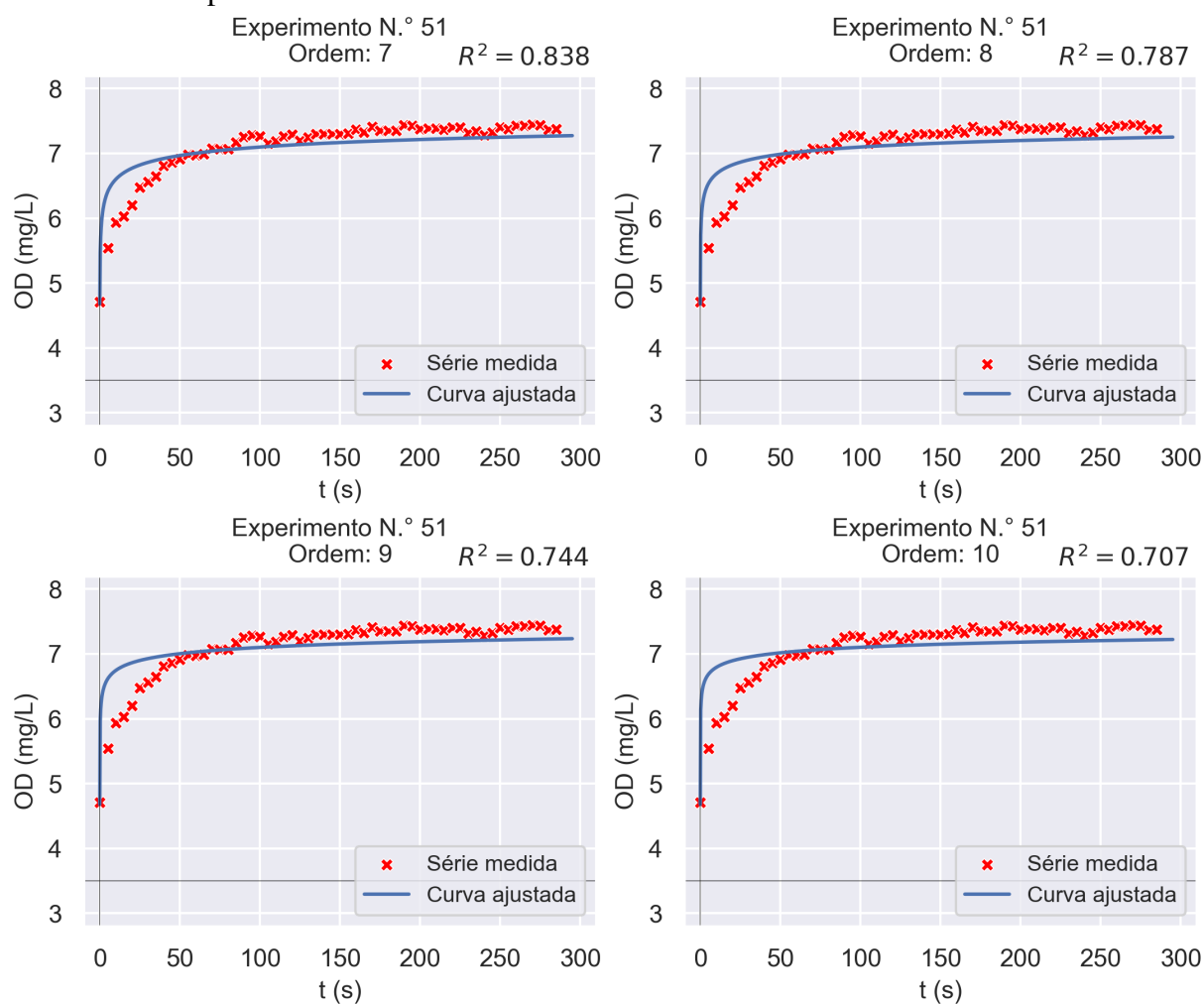
Figura 137 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 51



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

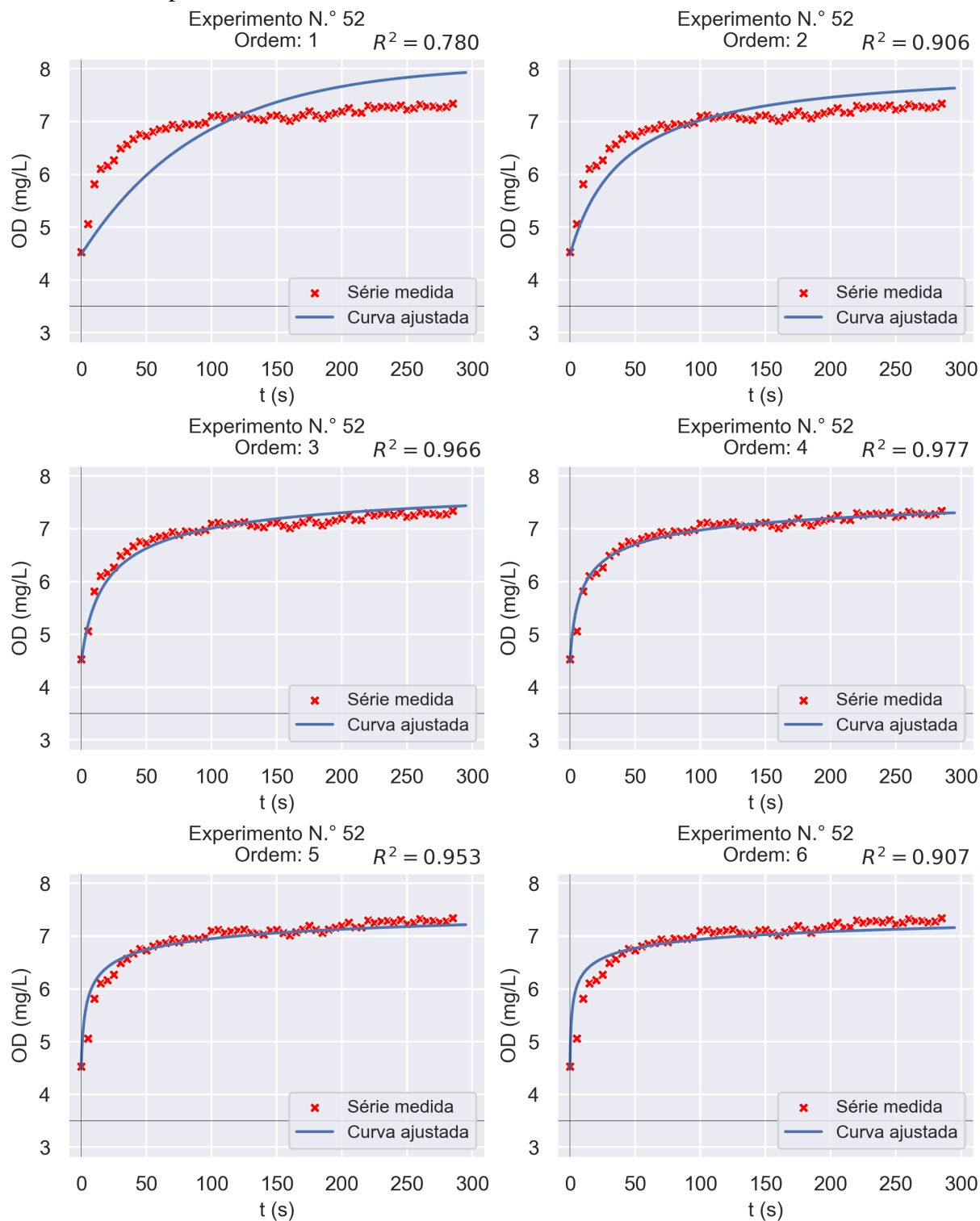
Figura 138 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 51



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

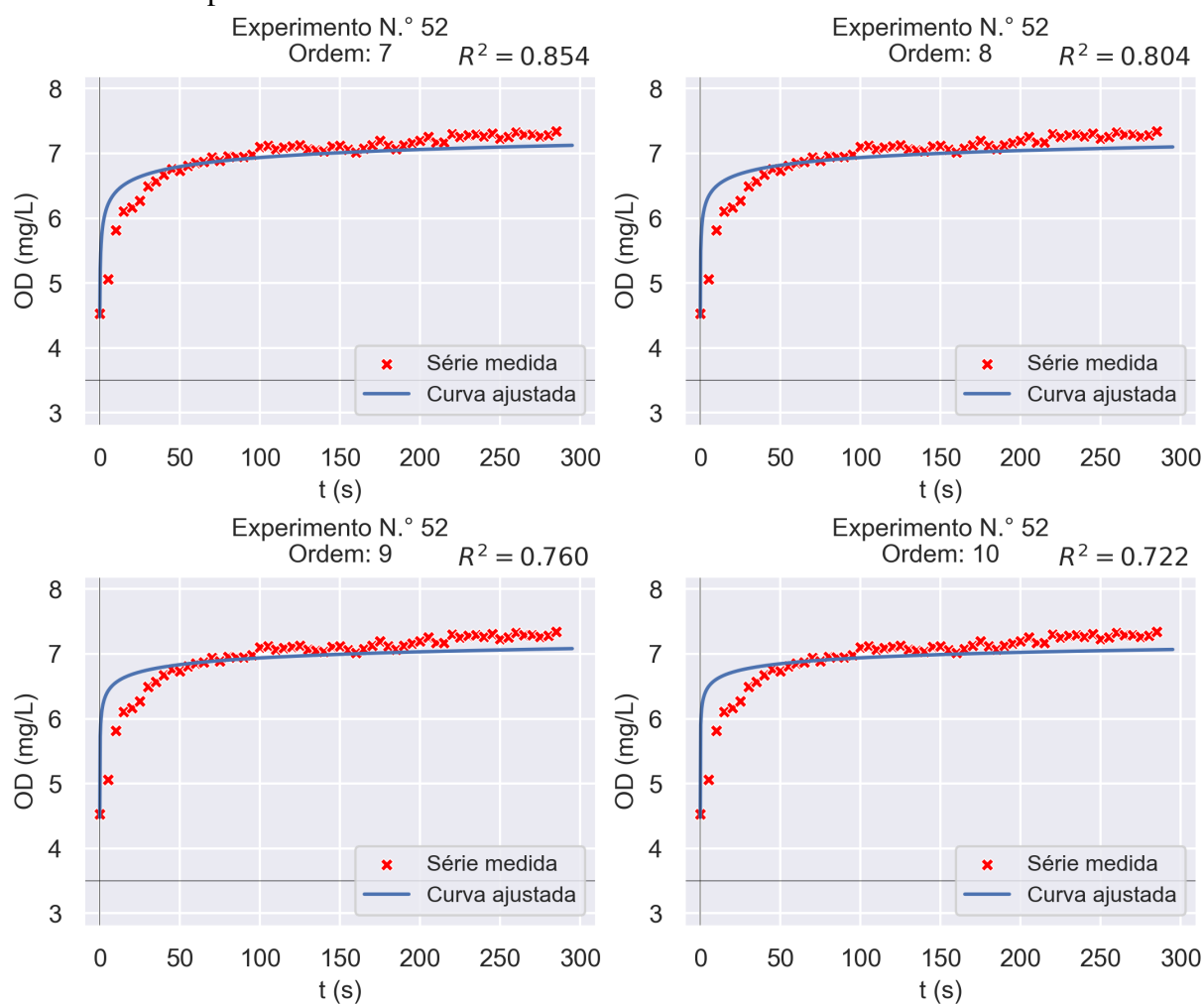
Figura 139 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 52



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

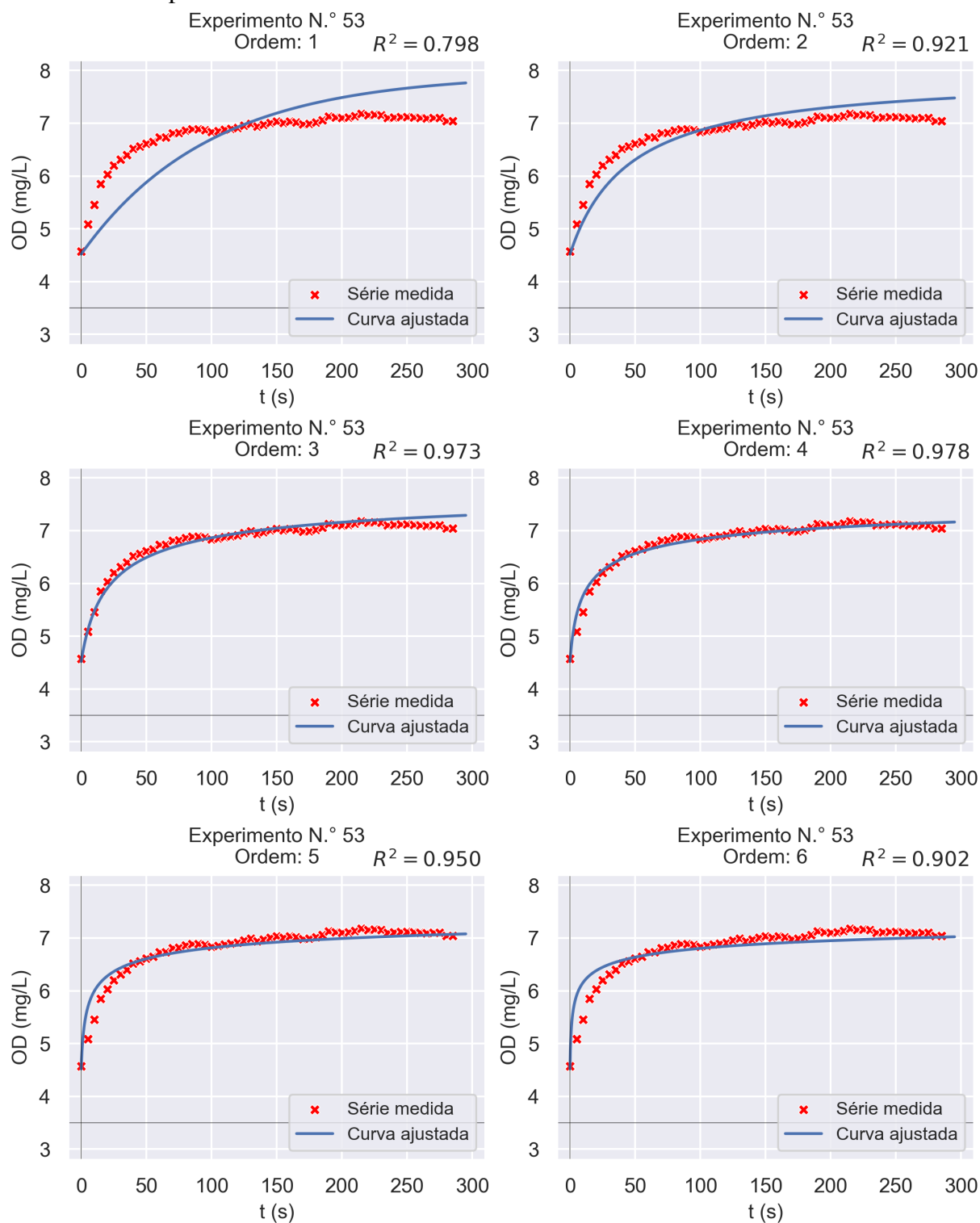
Figura 140 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 52



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

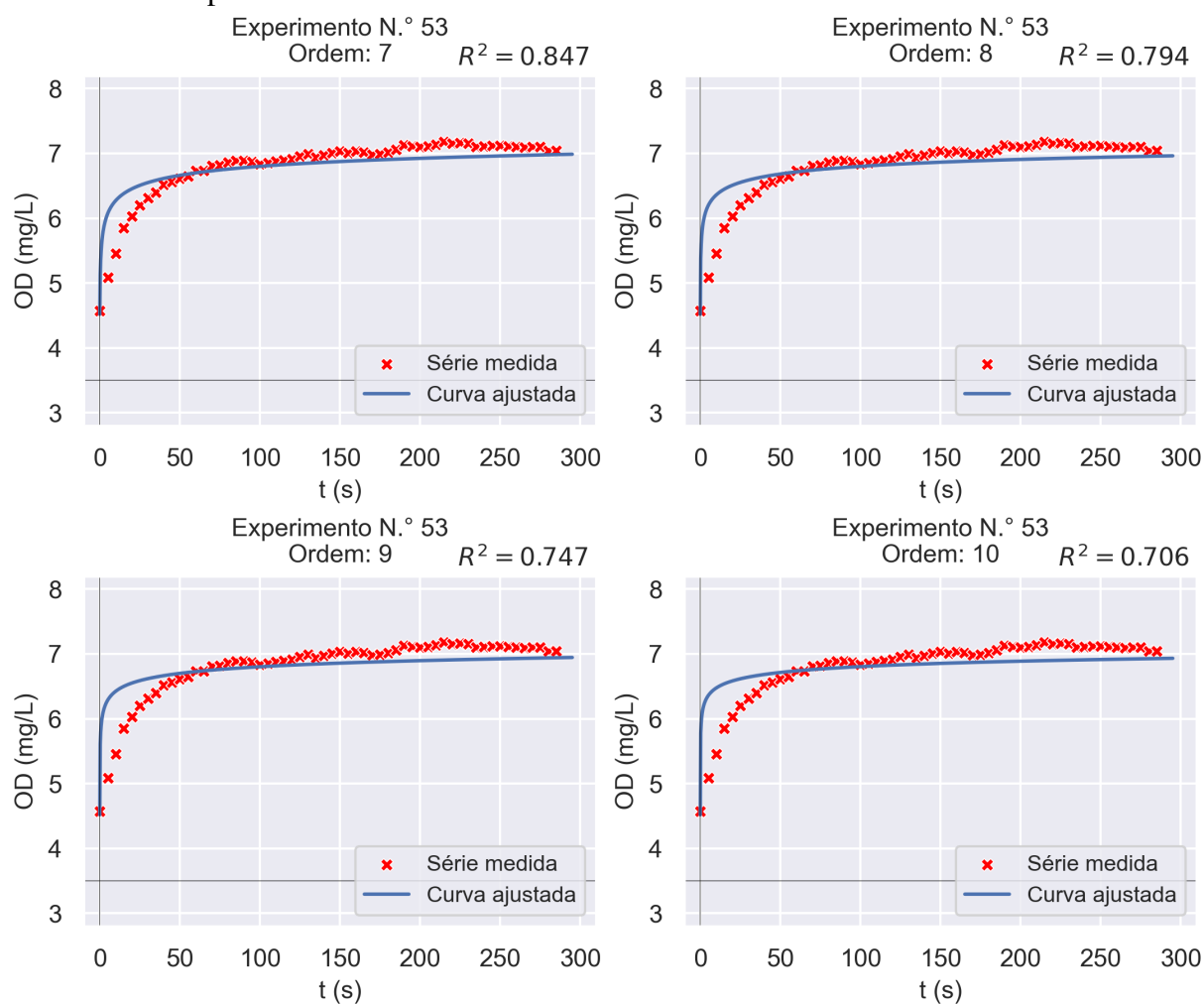
Figura 141 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 53



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

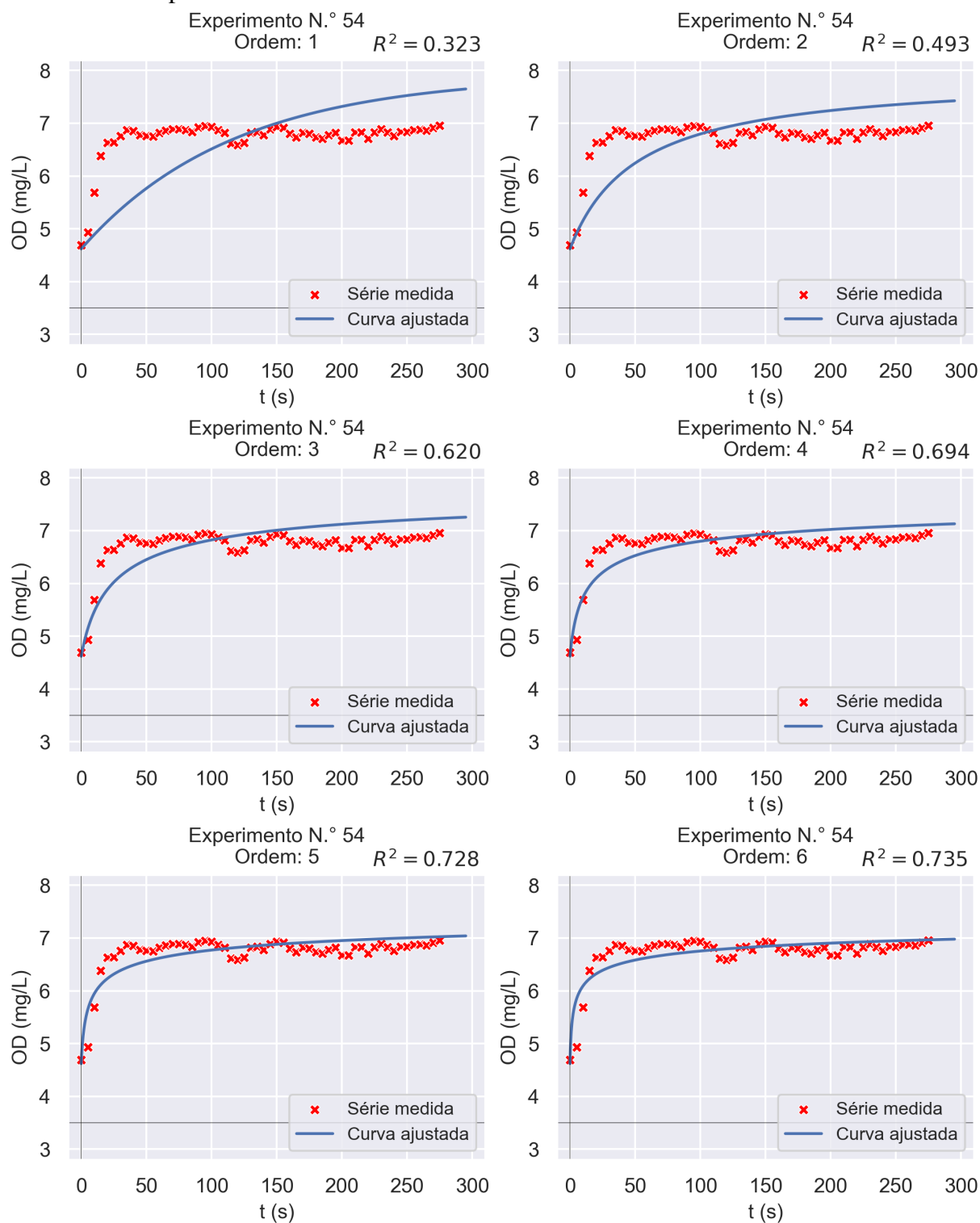
Figura 142 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 53



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 143 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 54

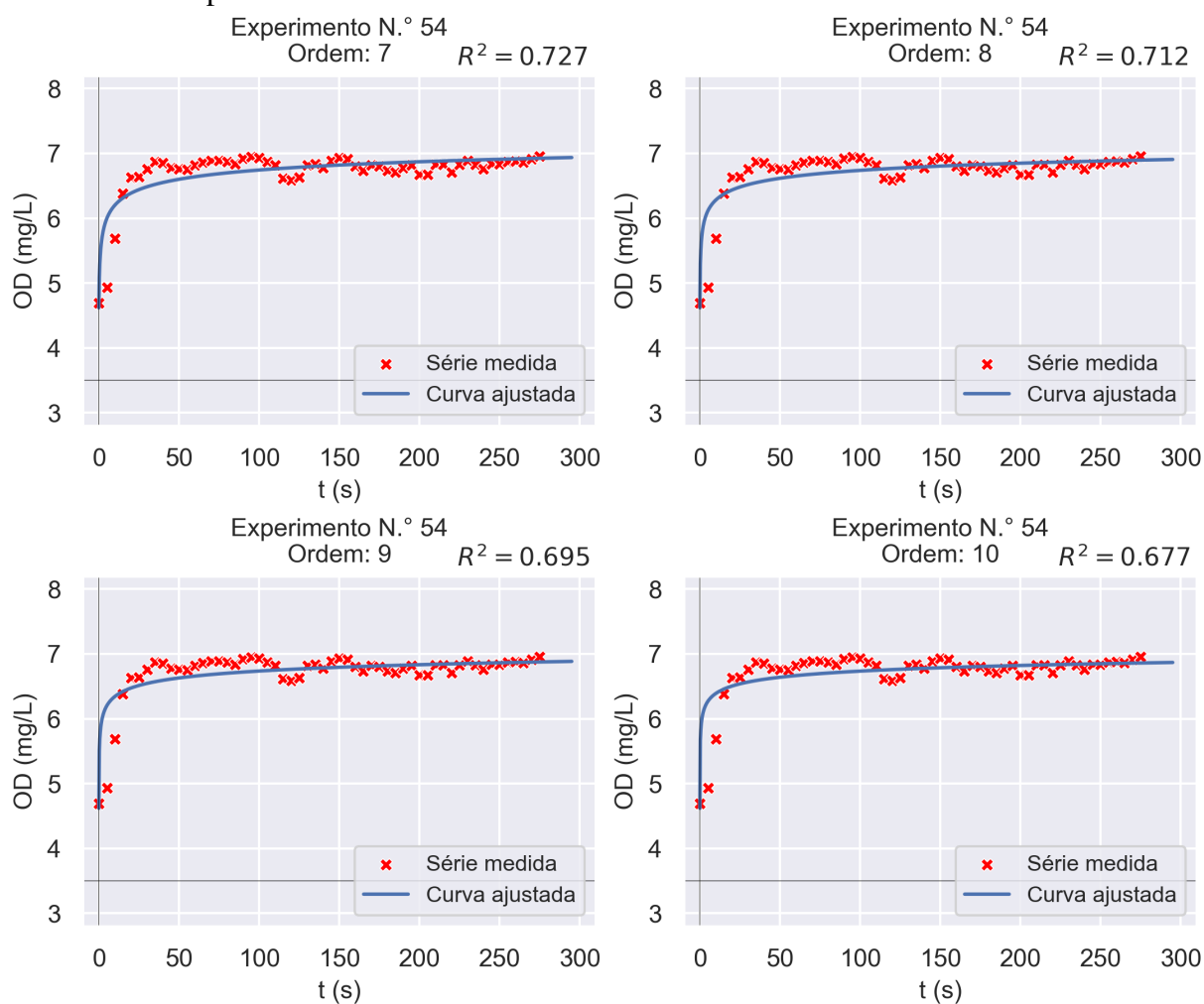


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



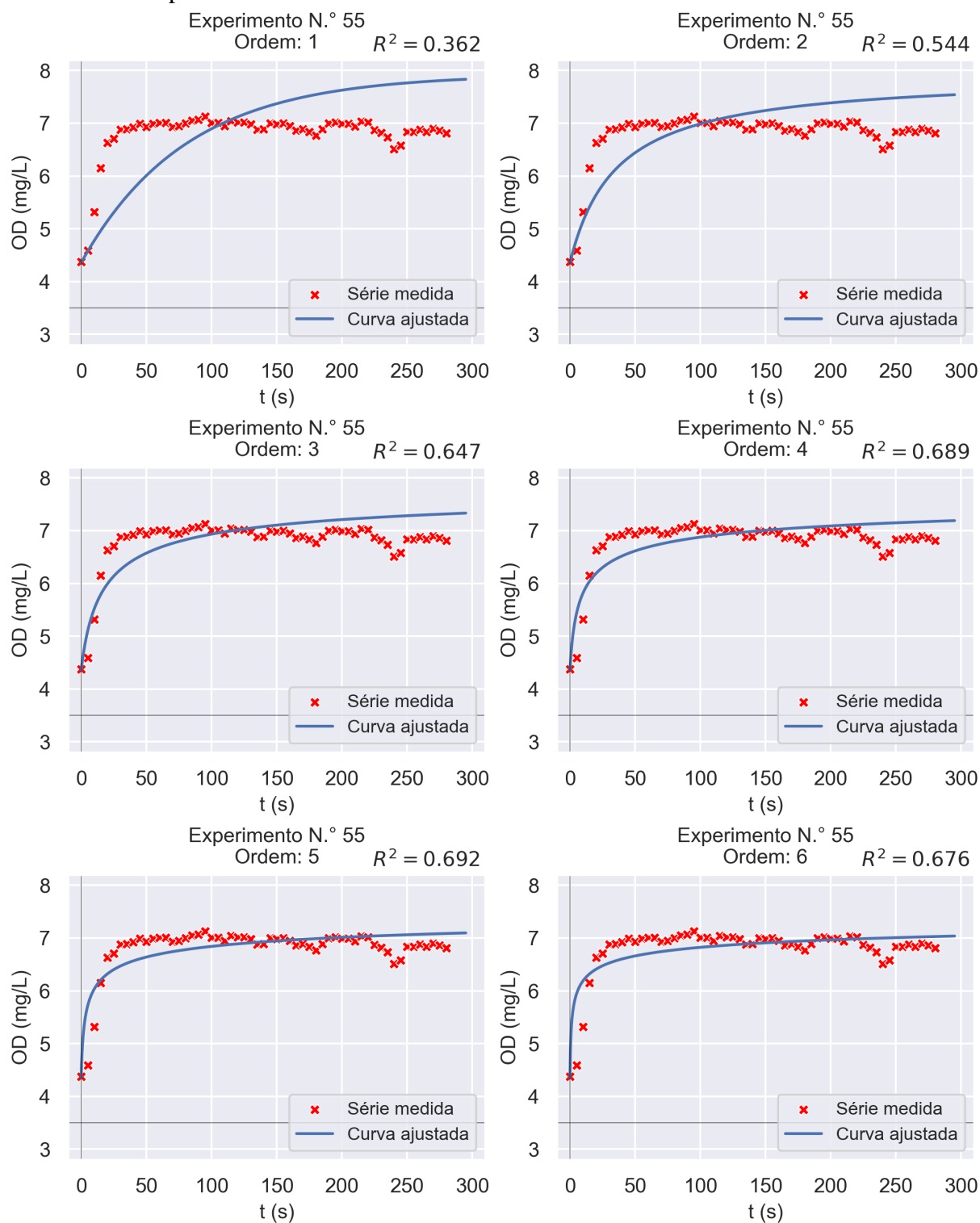
Figura 144 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 54



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

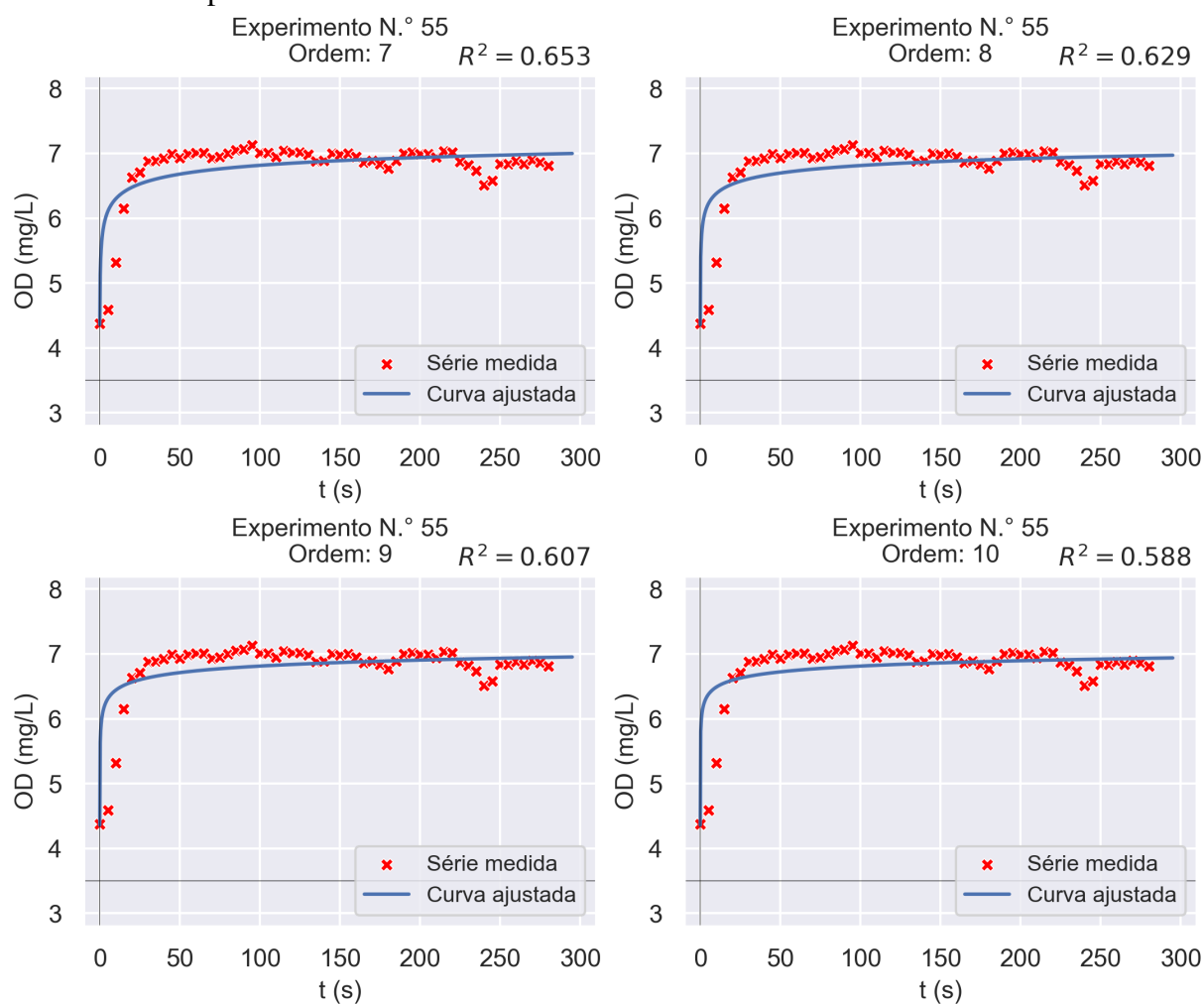
Figura 145 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 55



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

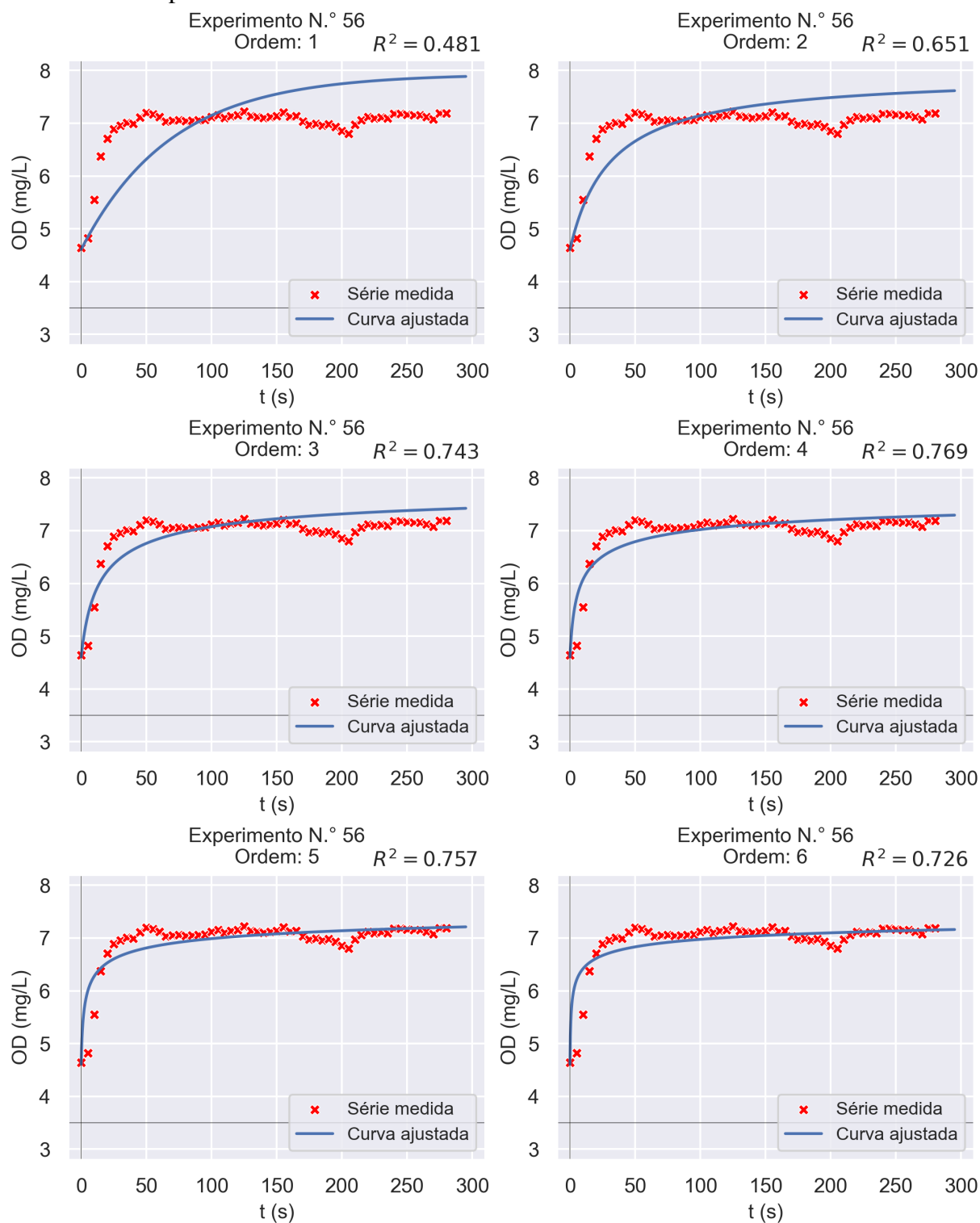
Figura 146 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 55



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

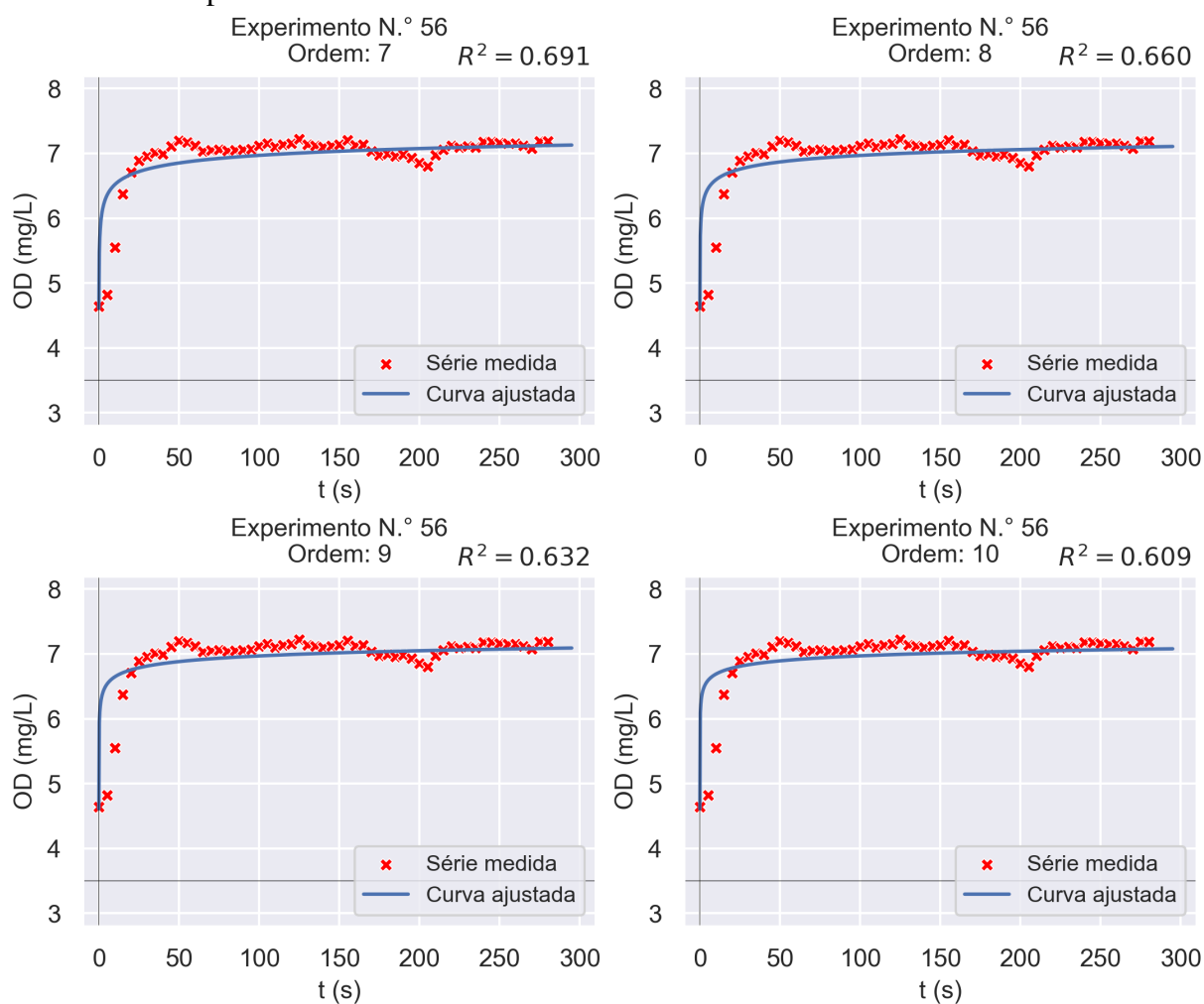
Figura 147 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 56



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

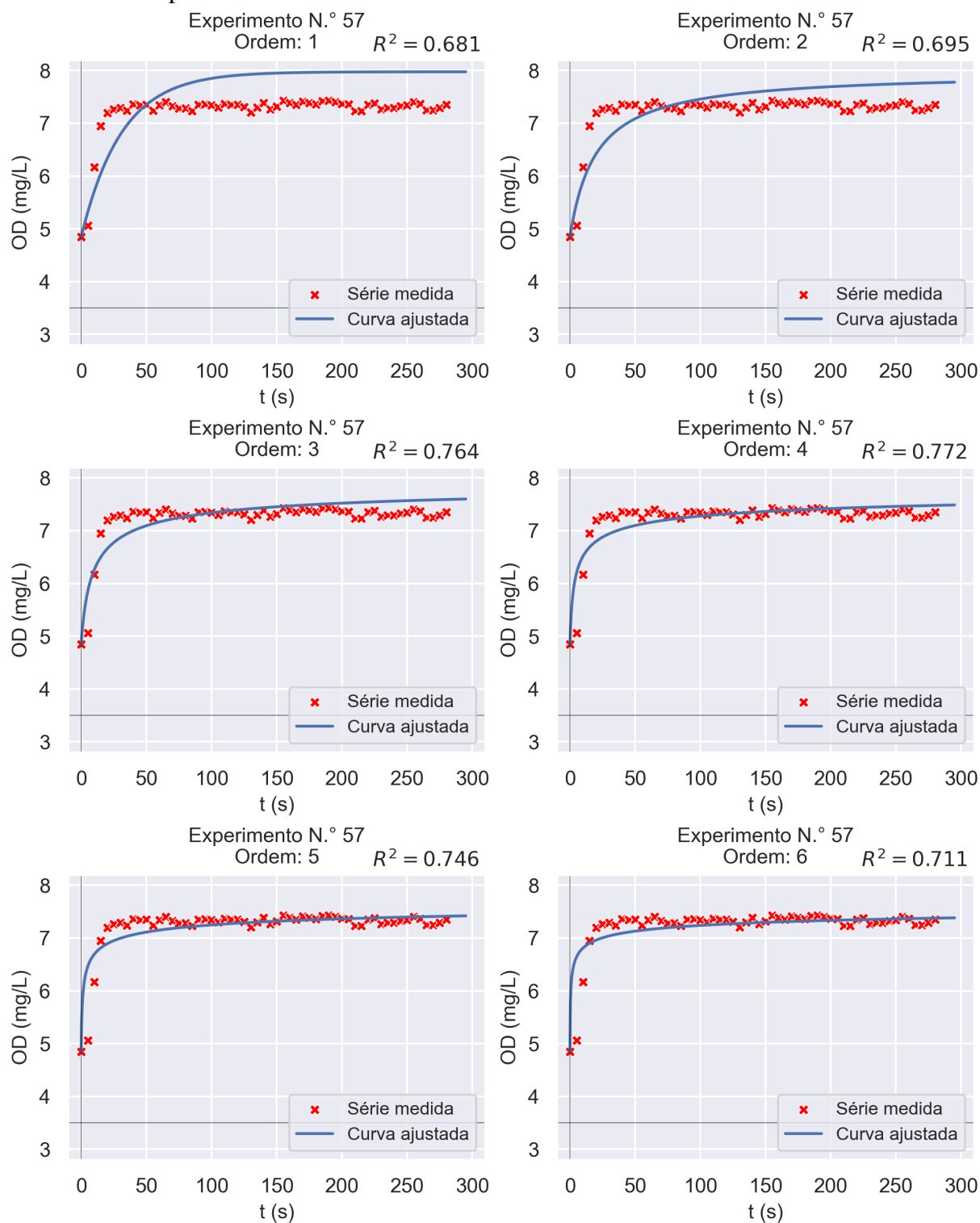
Figura 148 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 56



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

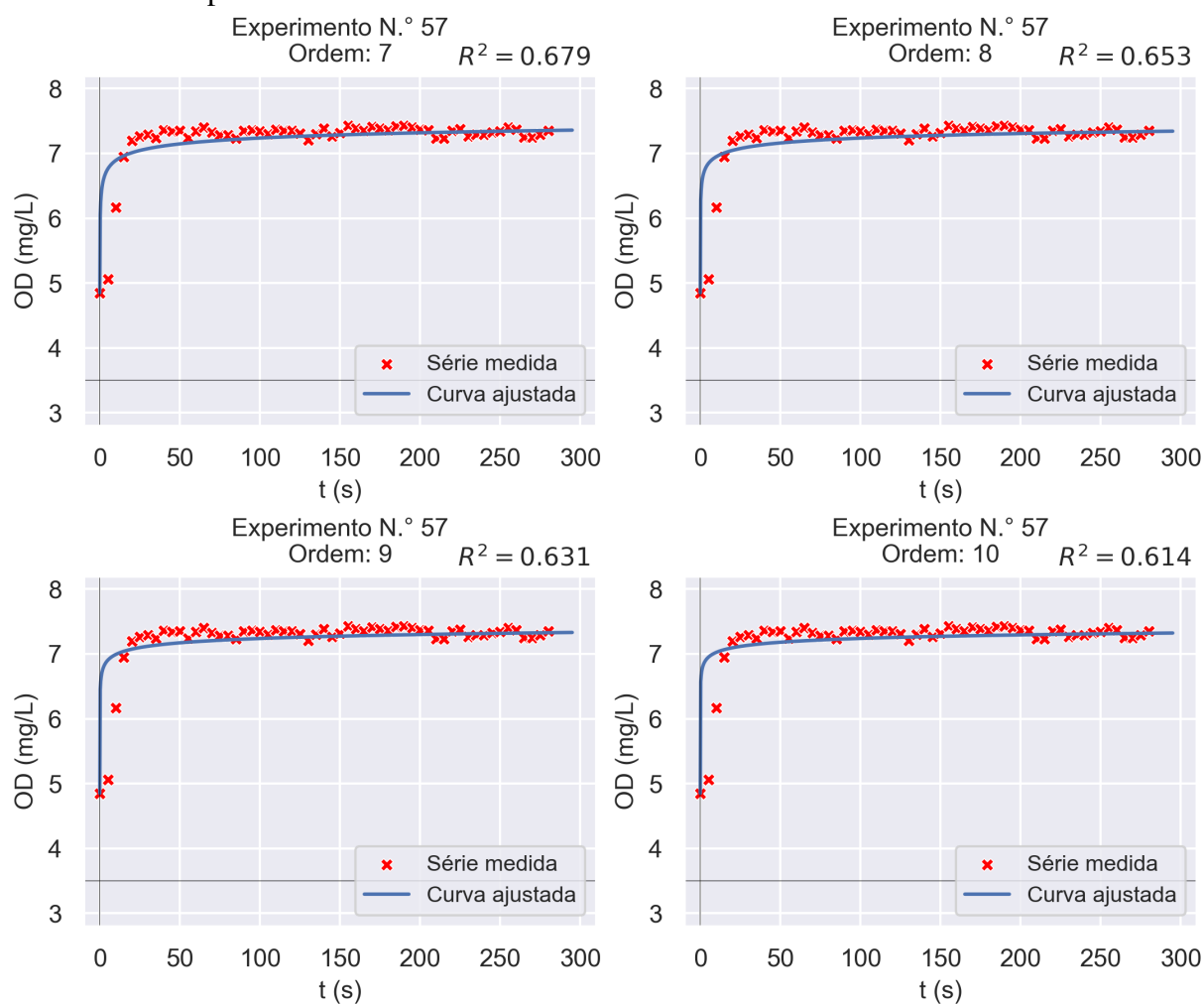
Figura 149 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 57



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

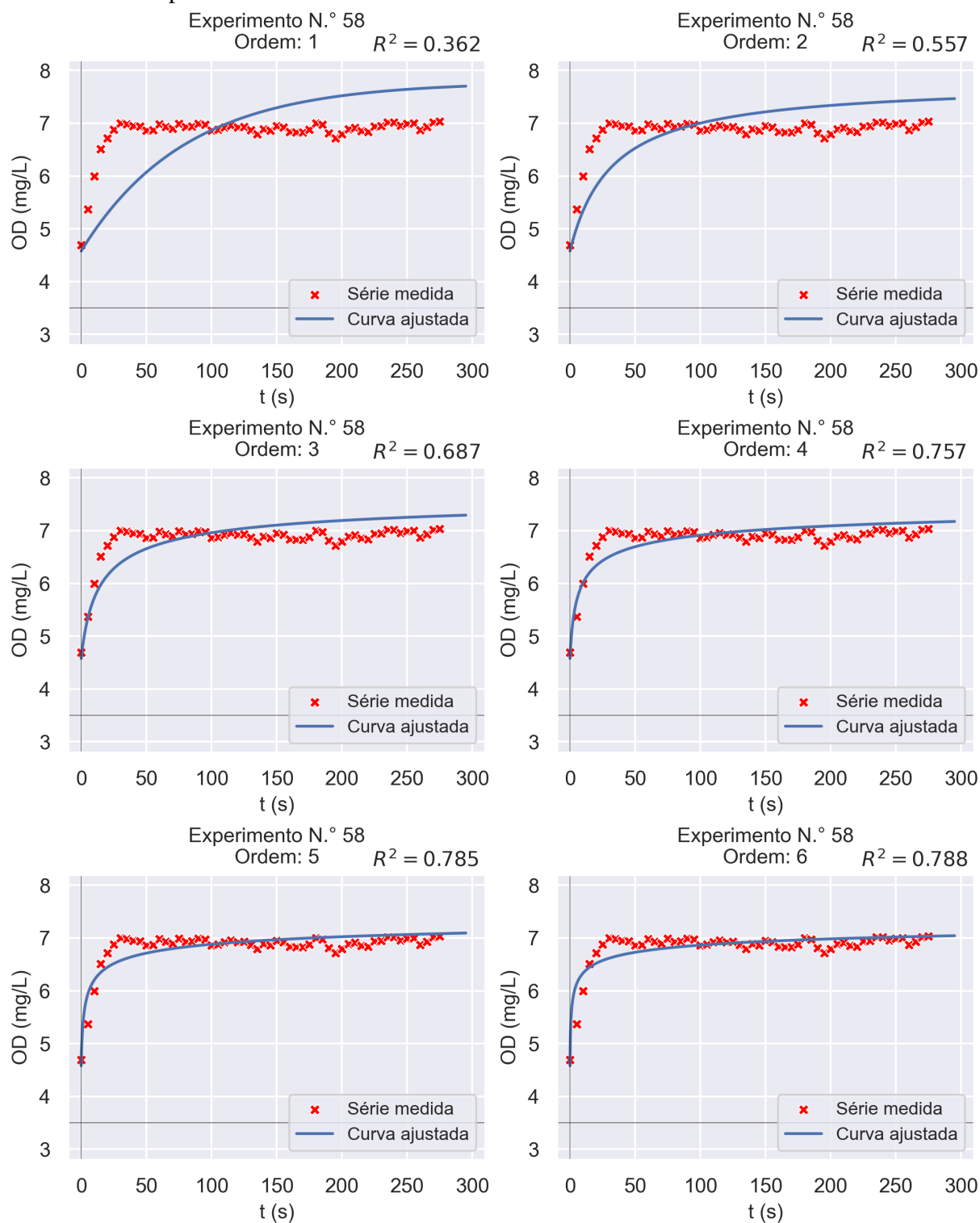
Figura 150 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 57



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 151 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 58

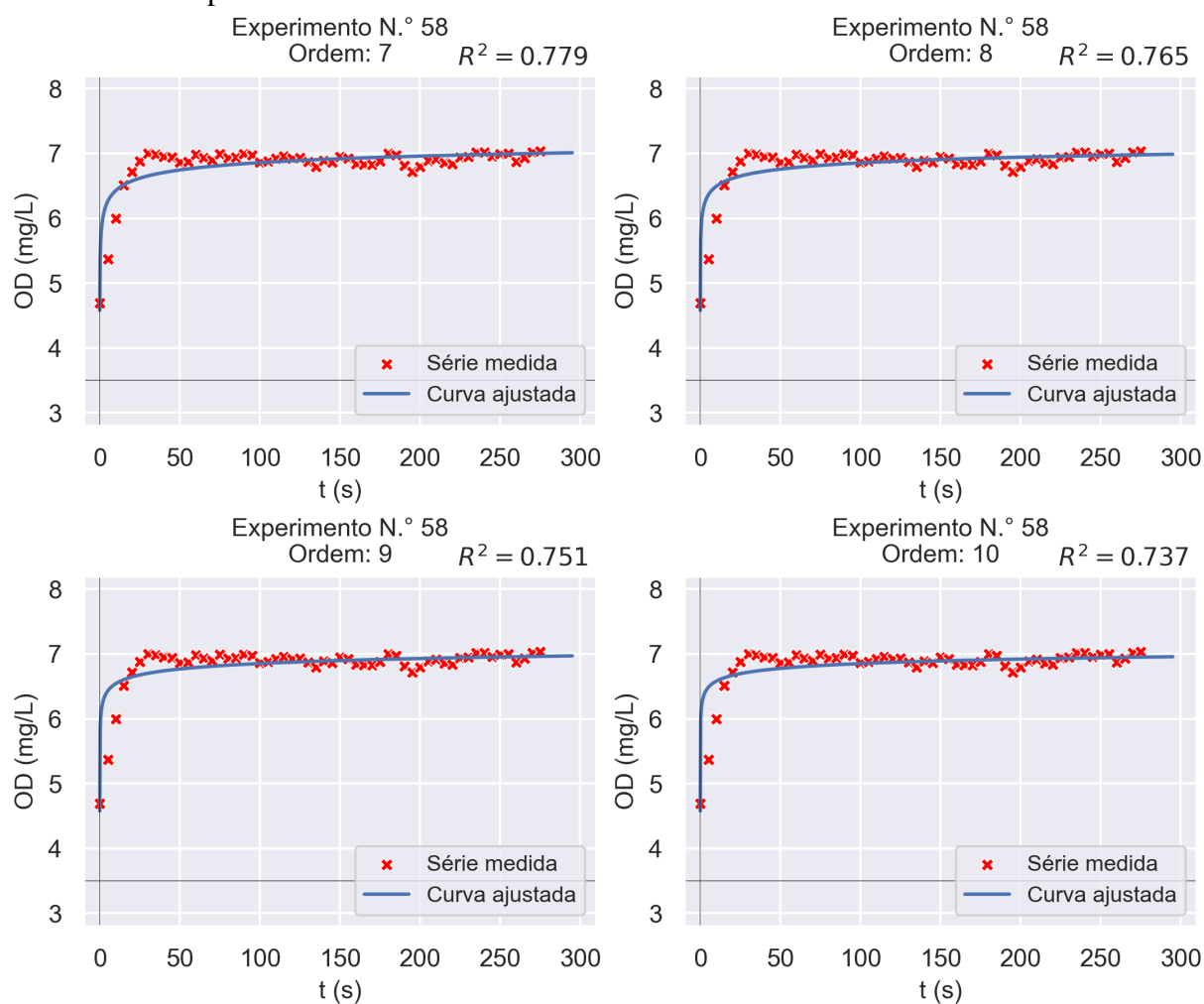


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



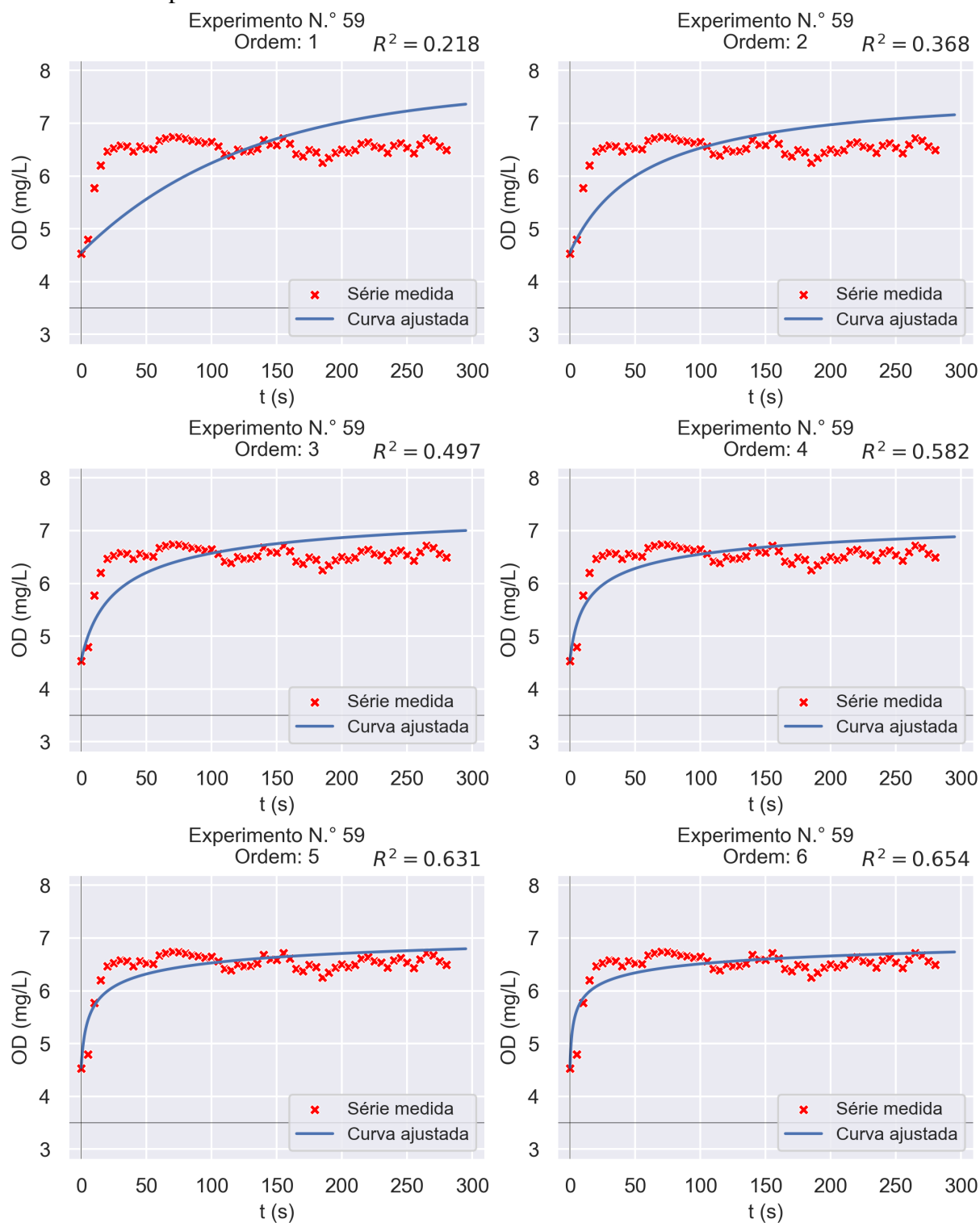
Figura 152 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 58



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

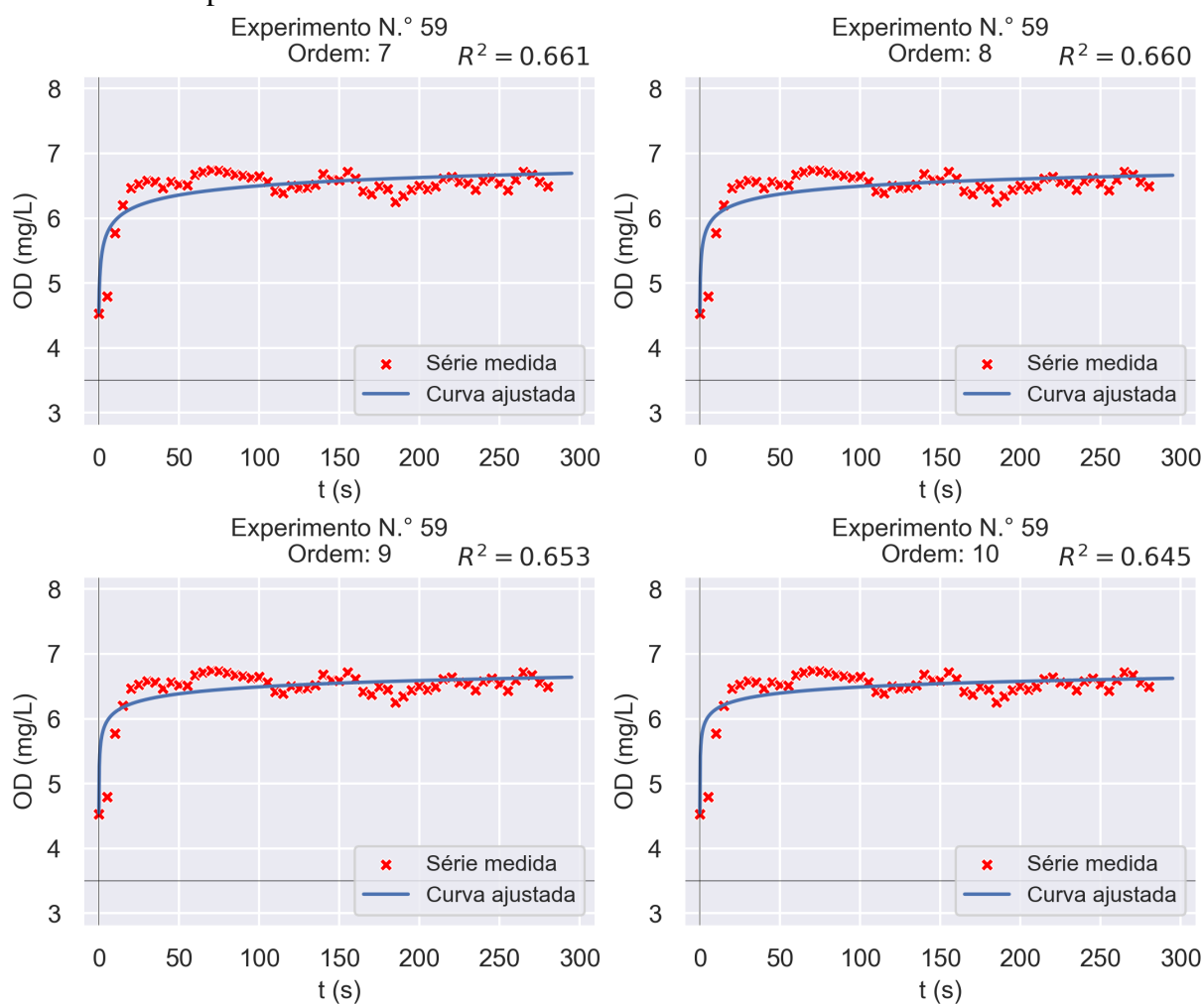
Figura 153 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 59



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

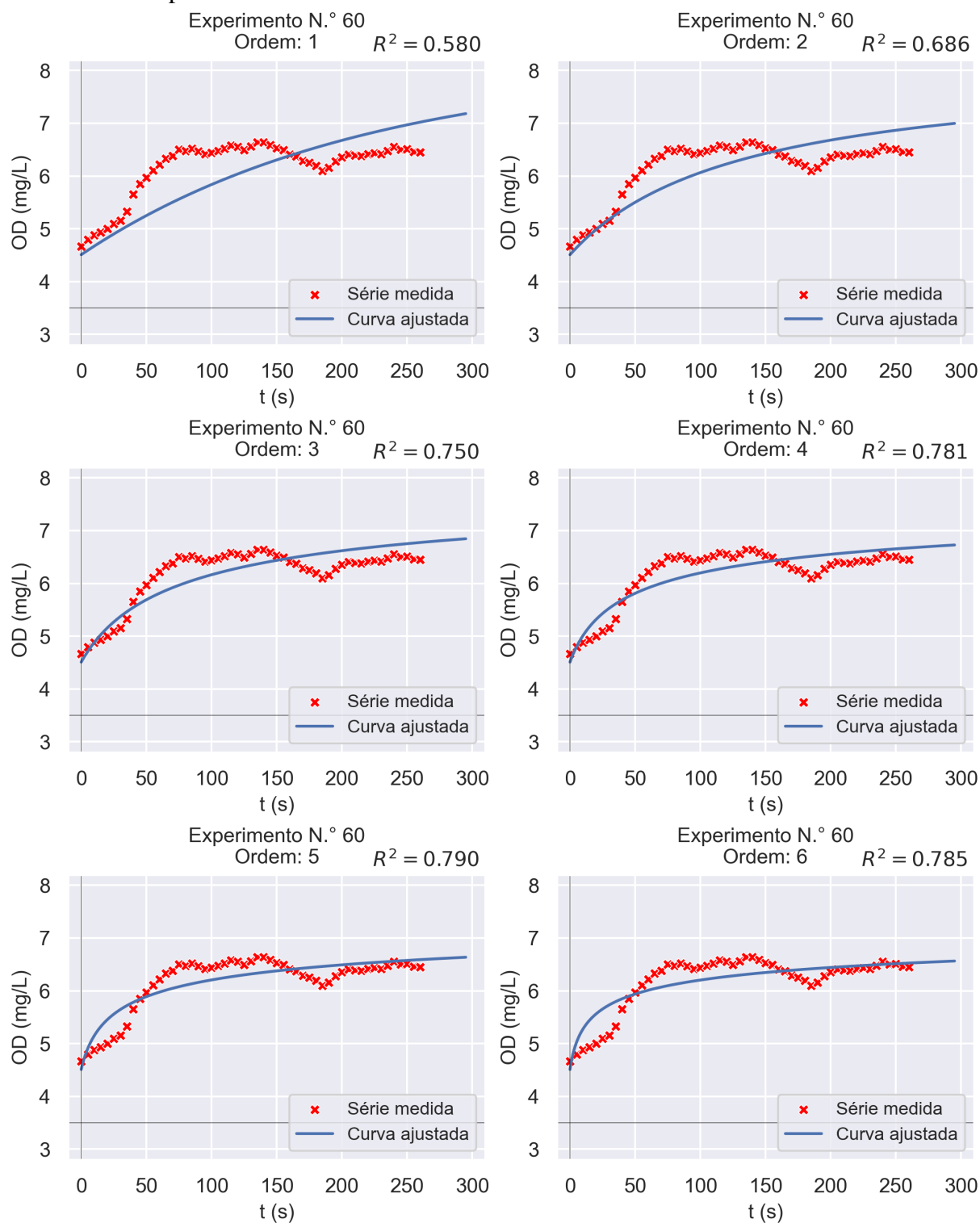
Figura 154 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 59



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

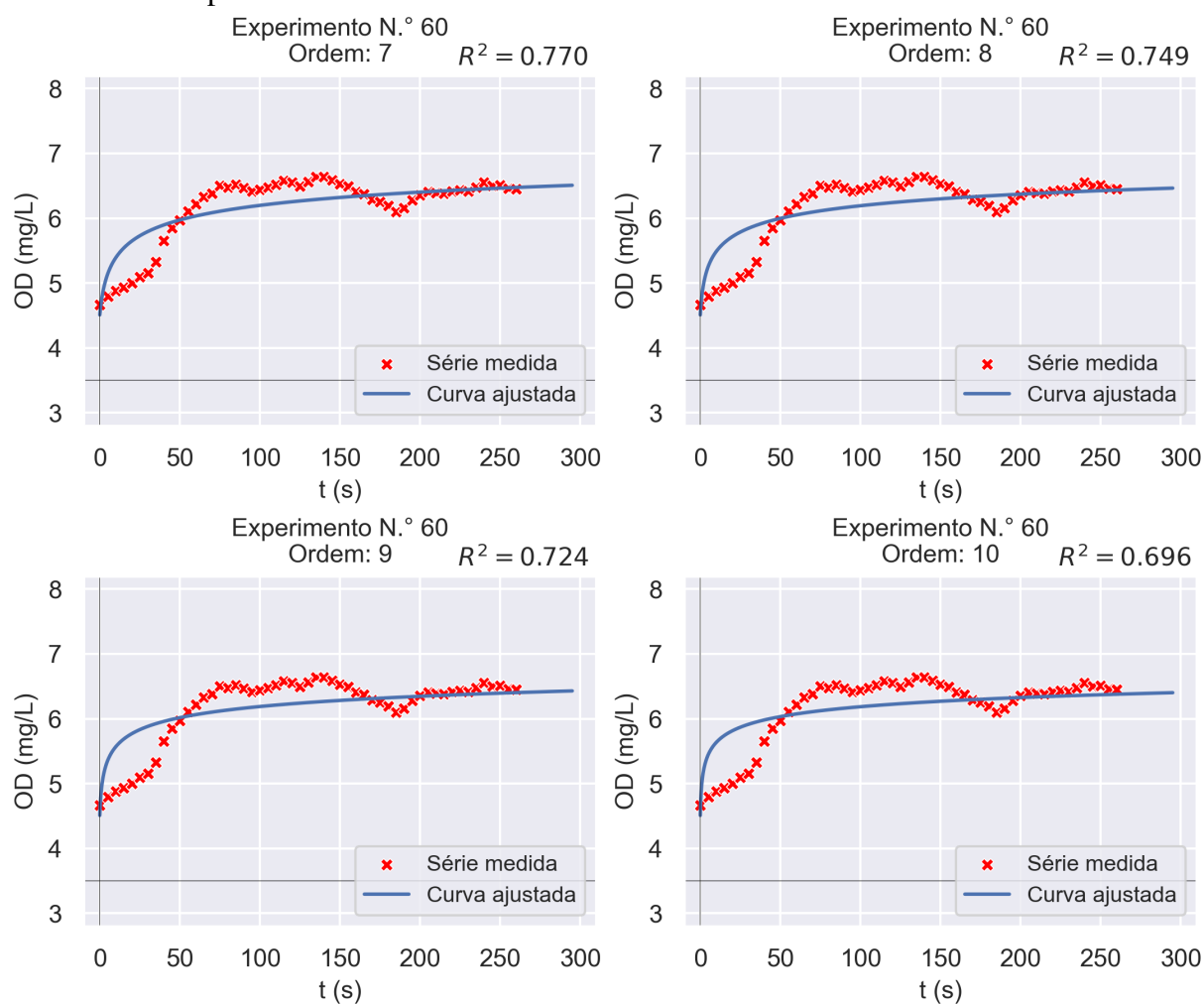
Figura 155 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 60



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

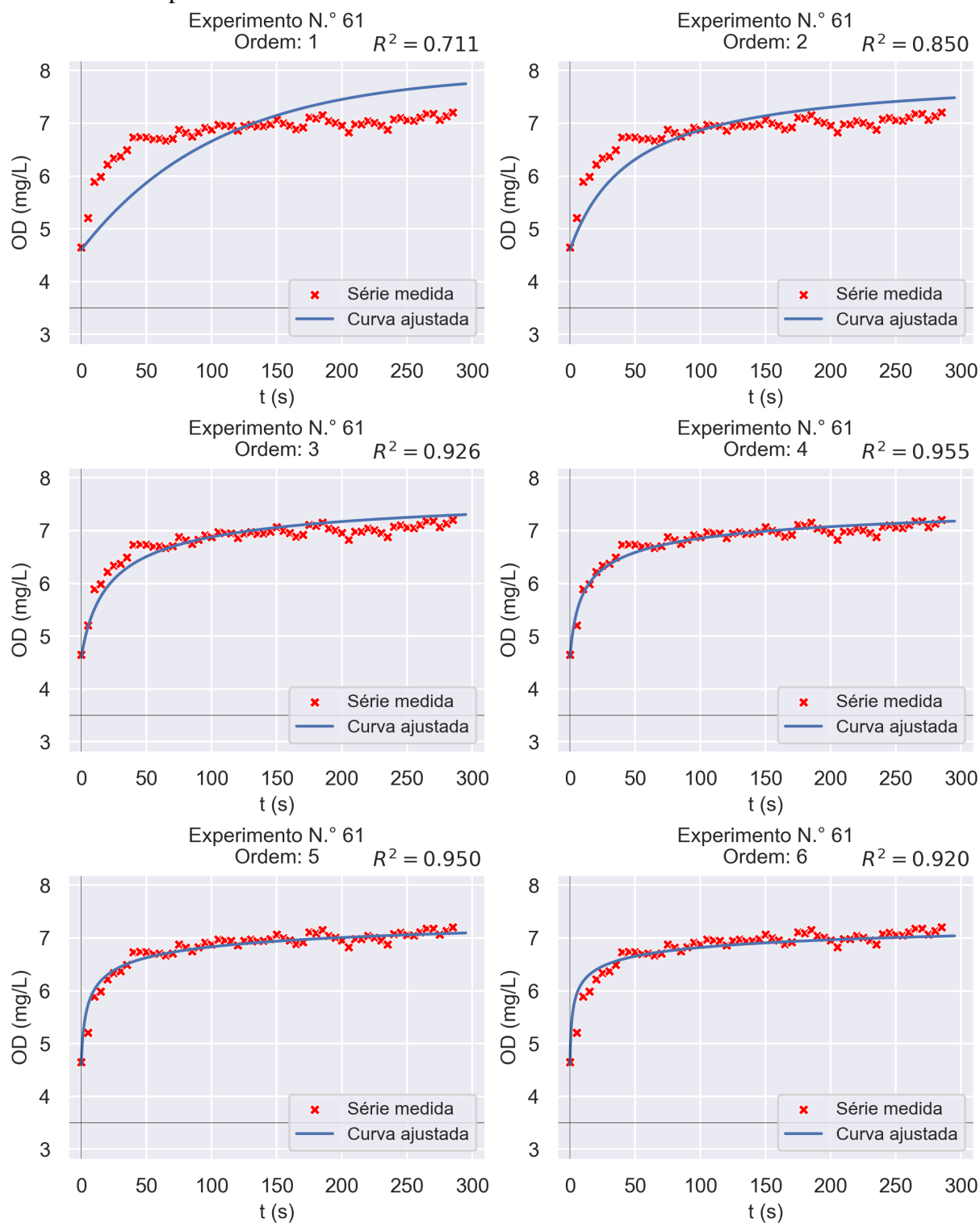
Figura 156 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 60



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

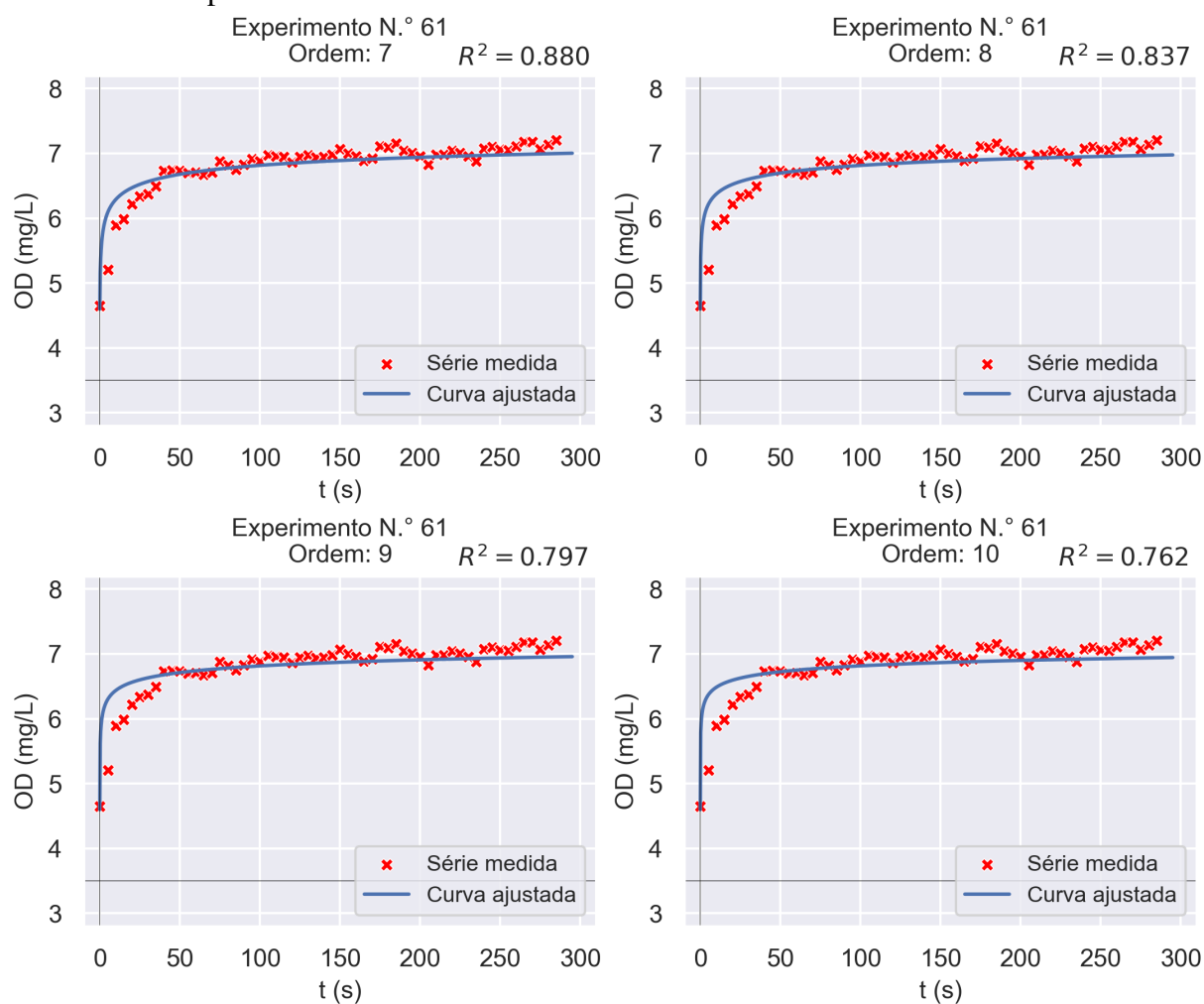
Figura 157 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 61



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

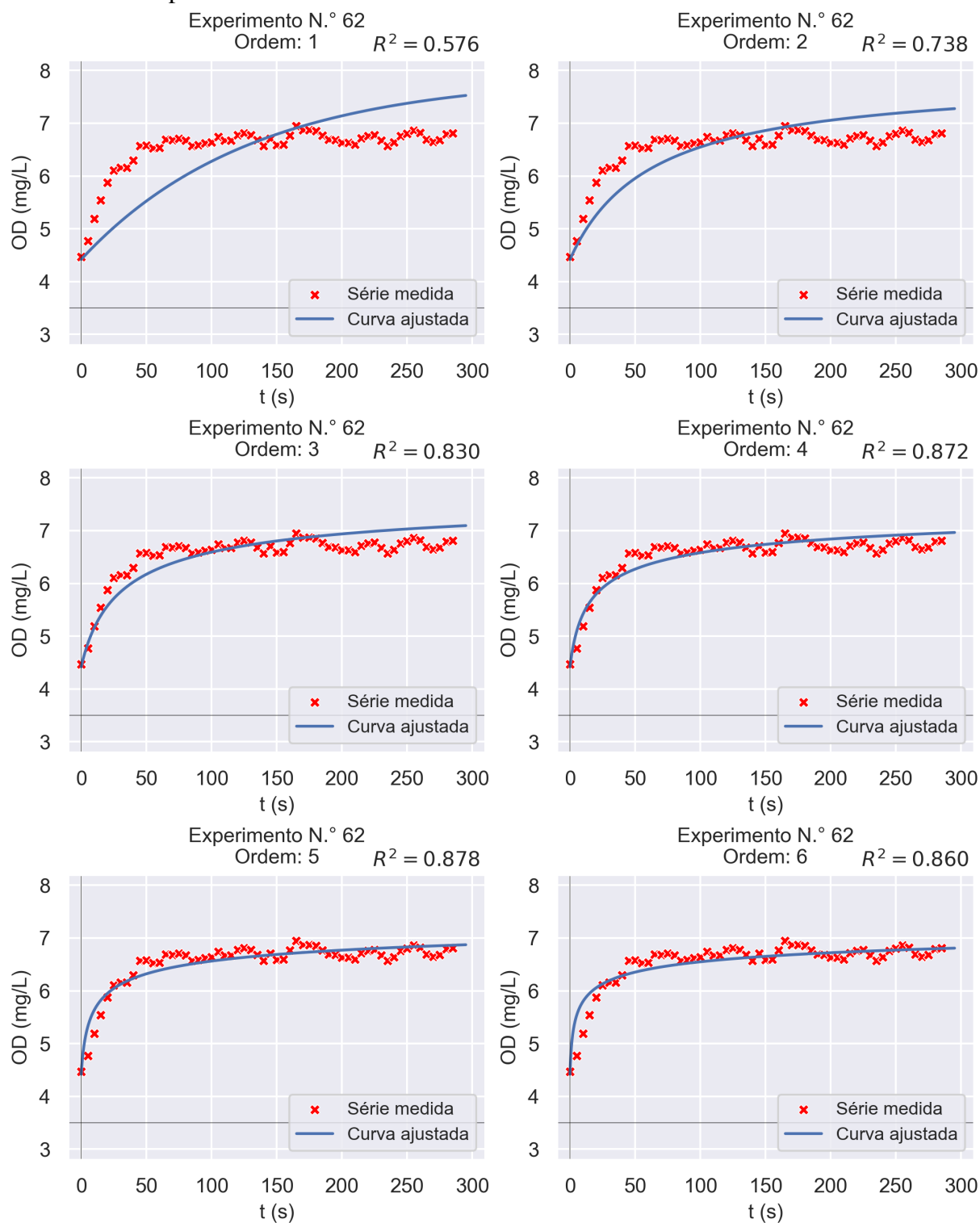
Figura 158 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 61



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 159 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 62

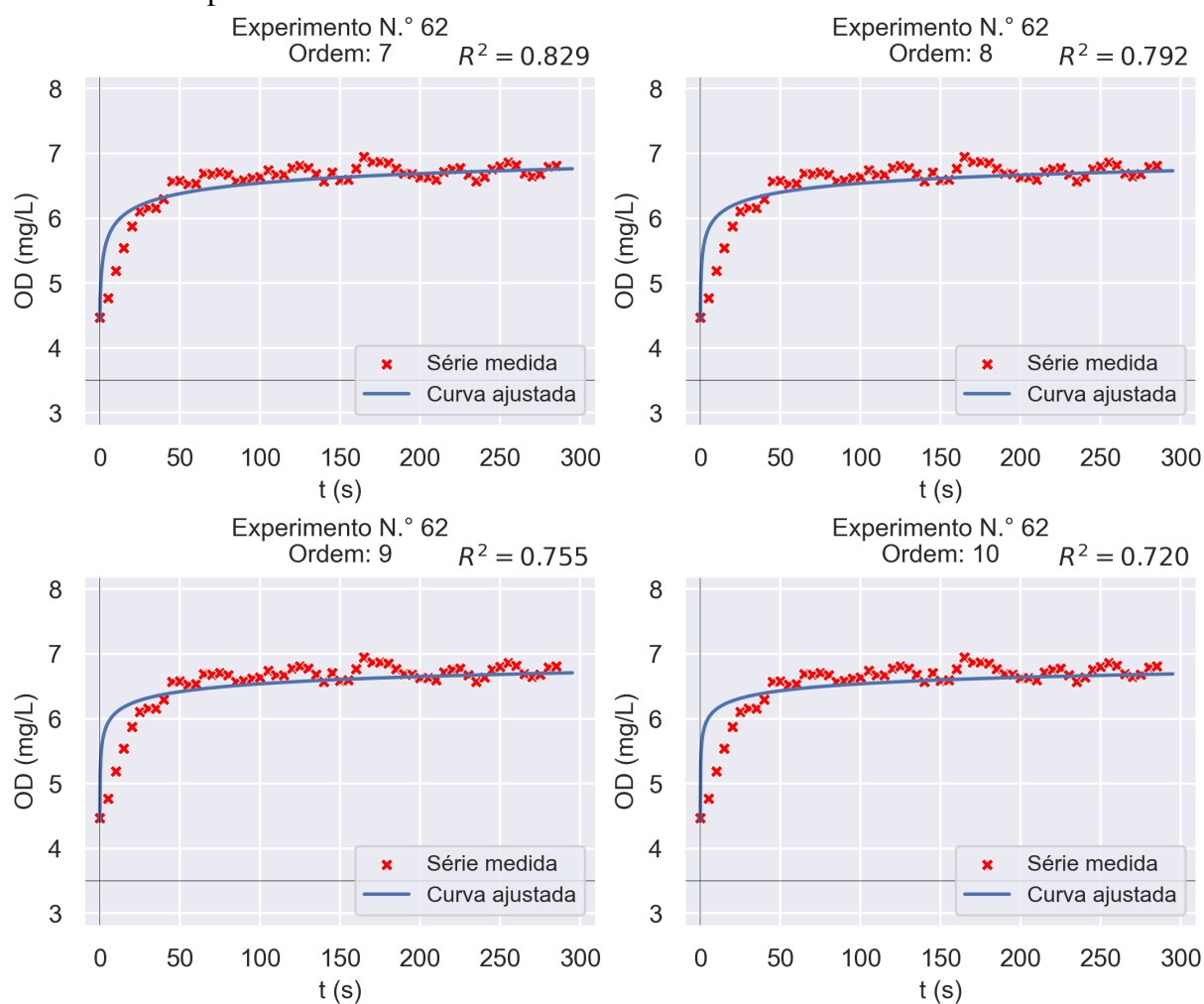


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



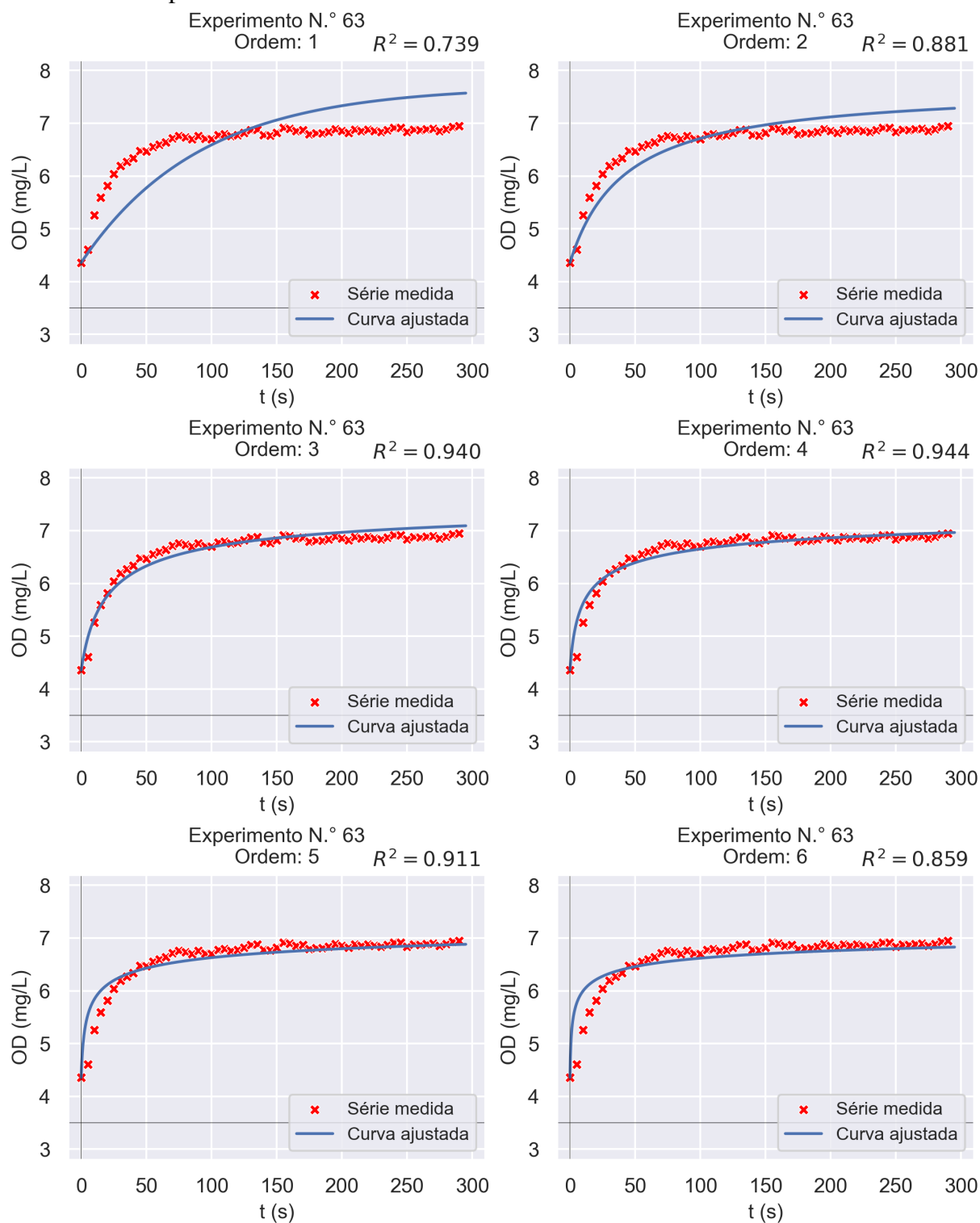
Figura 160 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 62



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

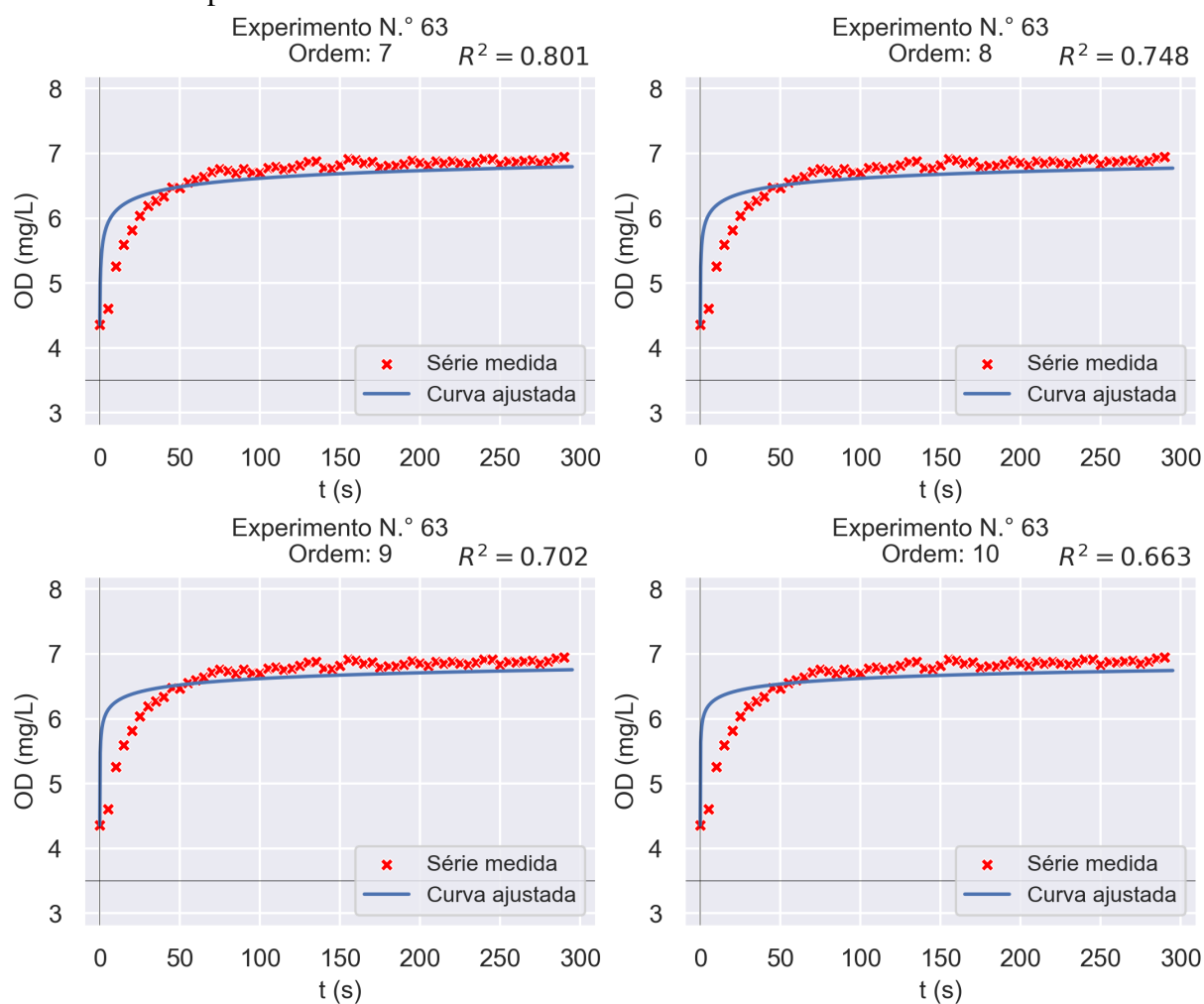
Figura 161 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 63



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

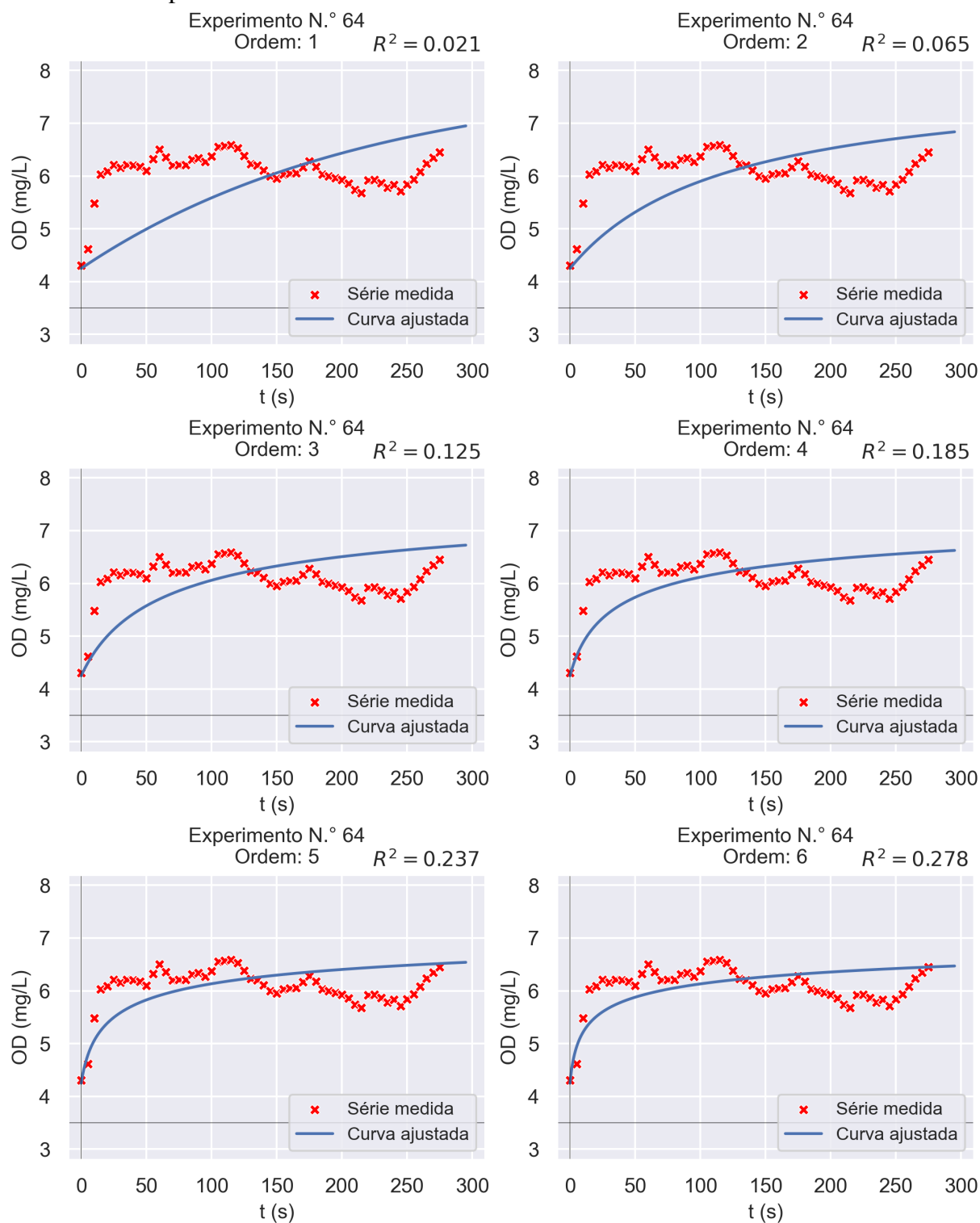
Figura 162 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 63



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

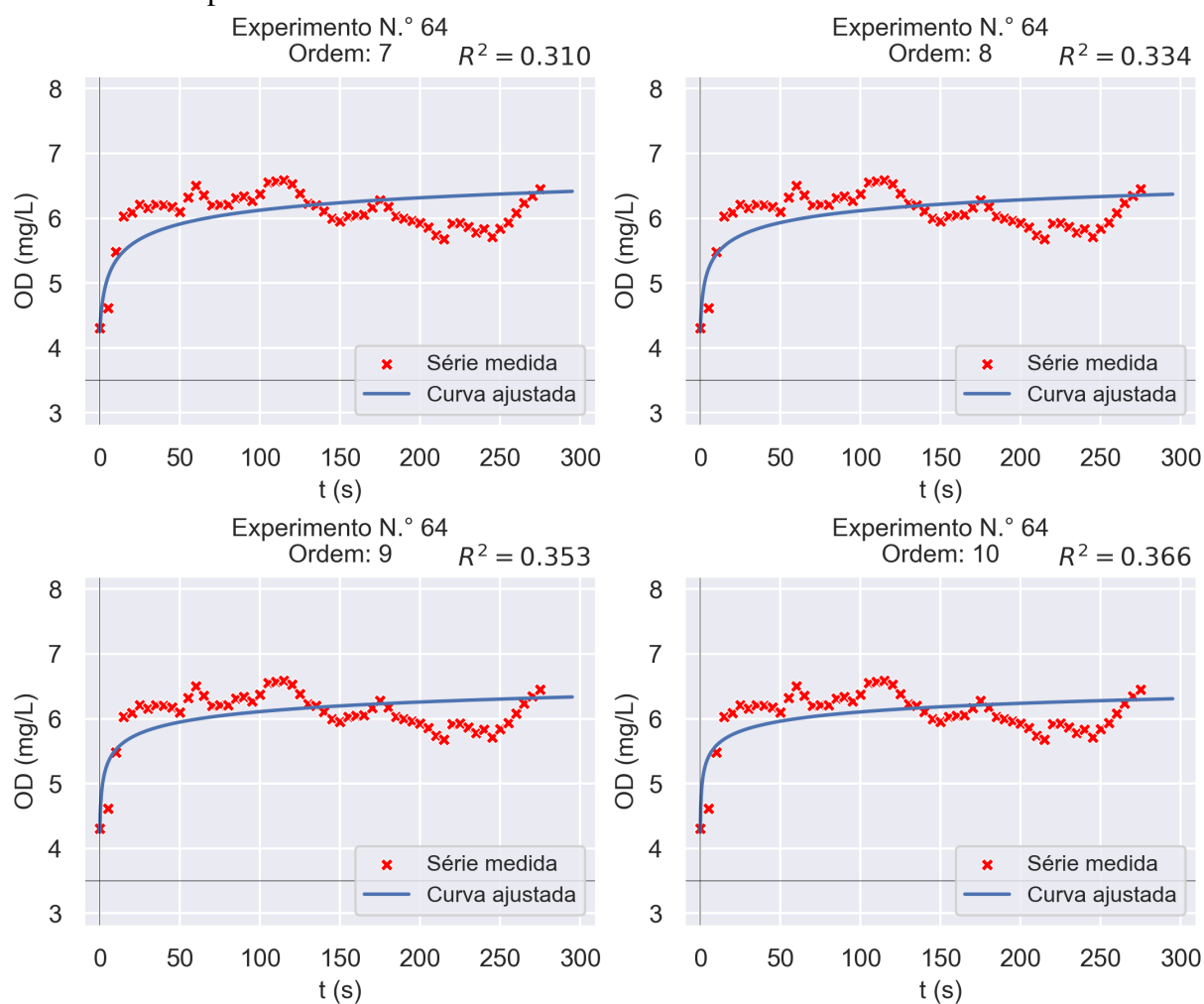
Figura 163 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 64



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

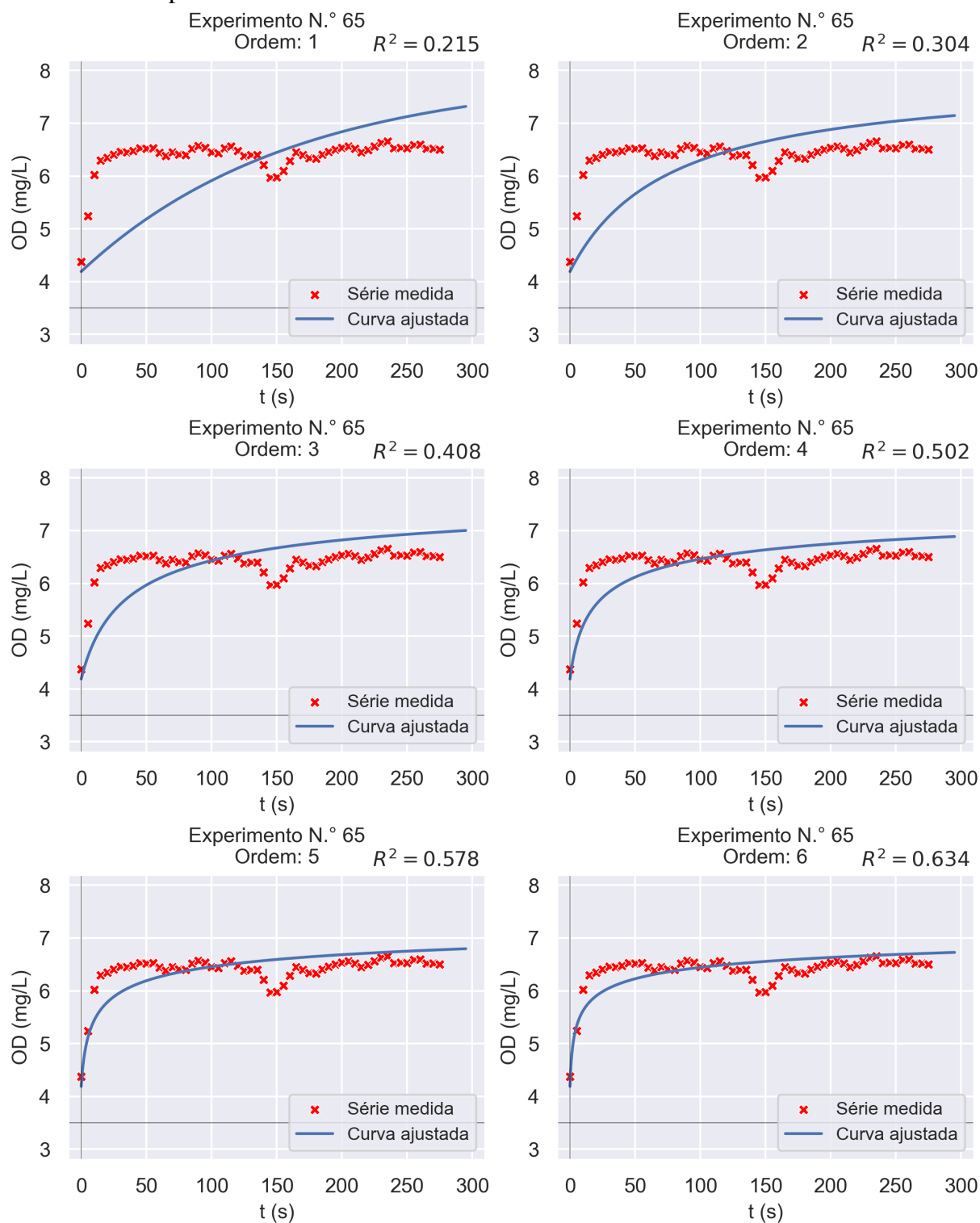
Figura 164 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 64



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

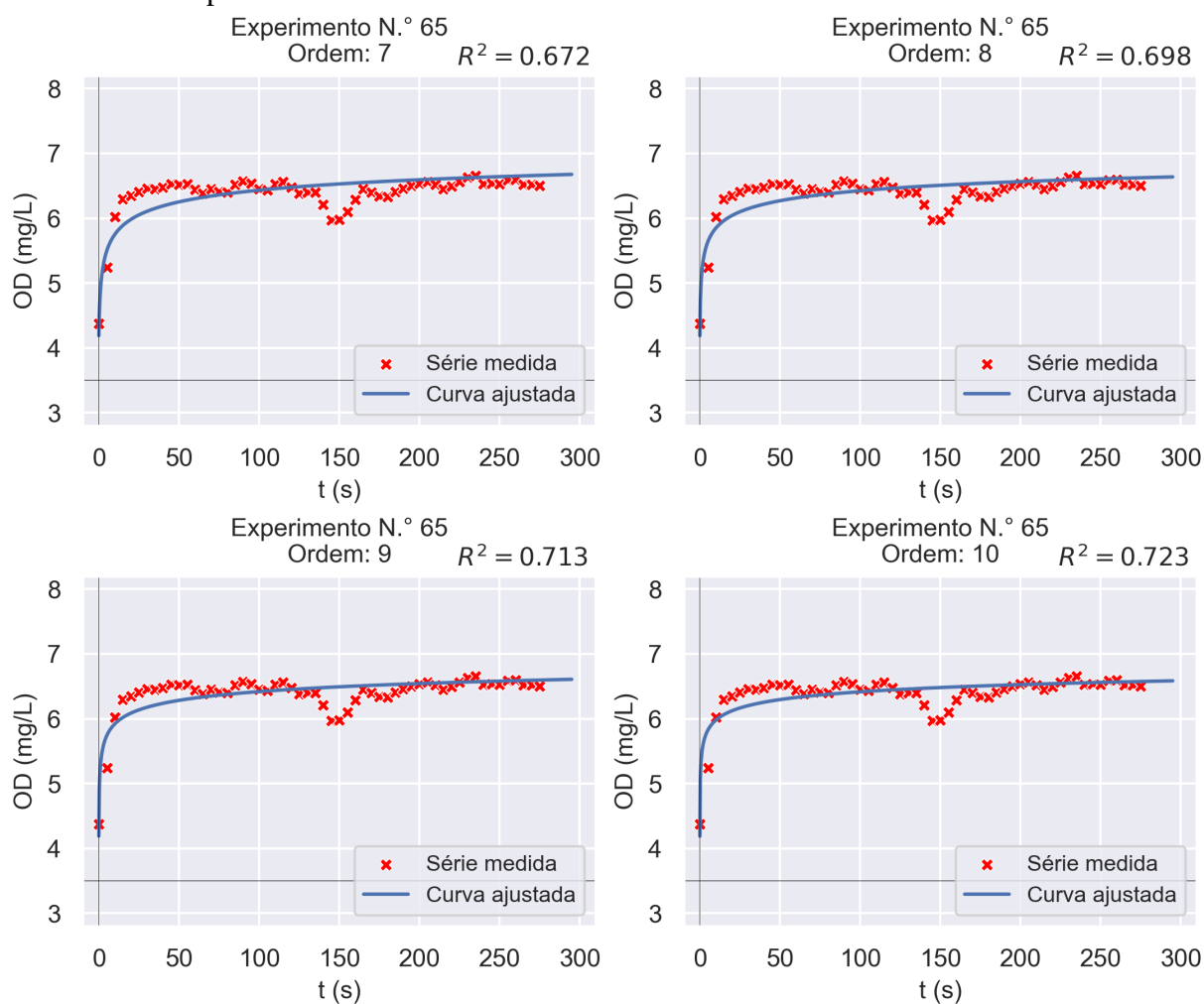
Figura 165 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 65



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

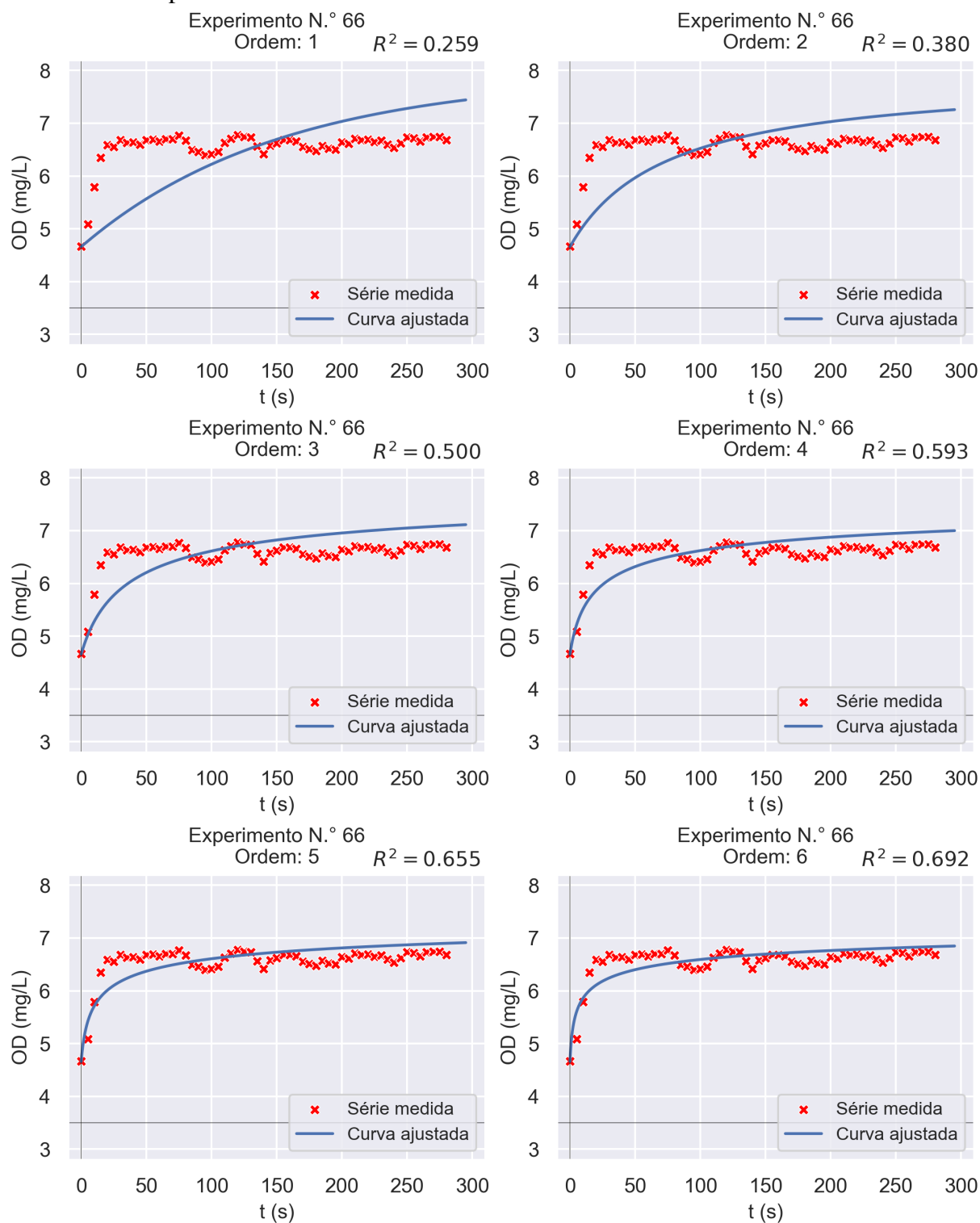
Figura 166 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 65



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 167 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 66

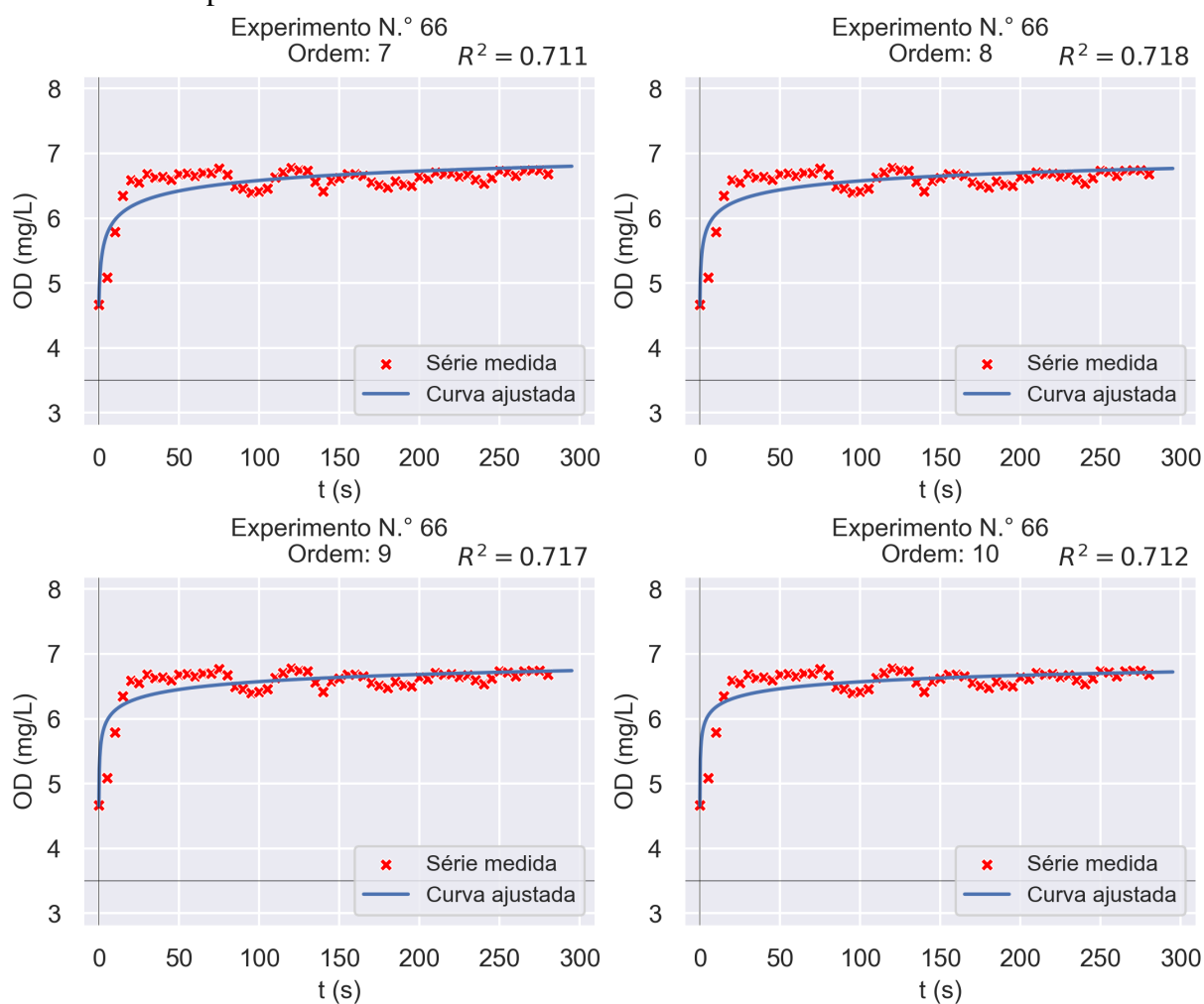


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



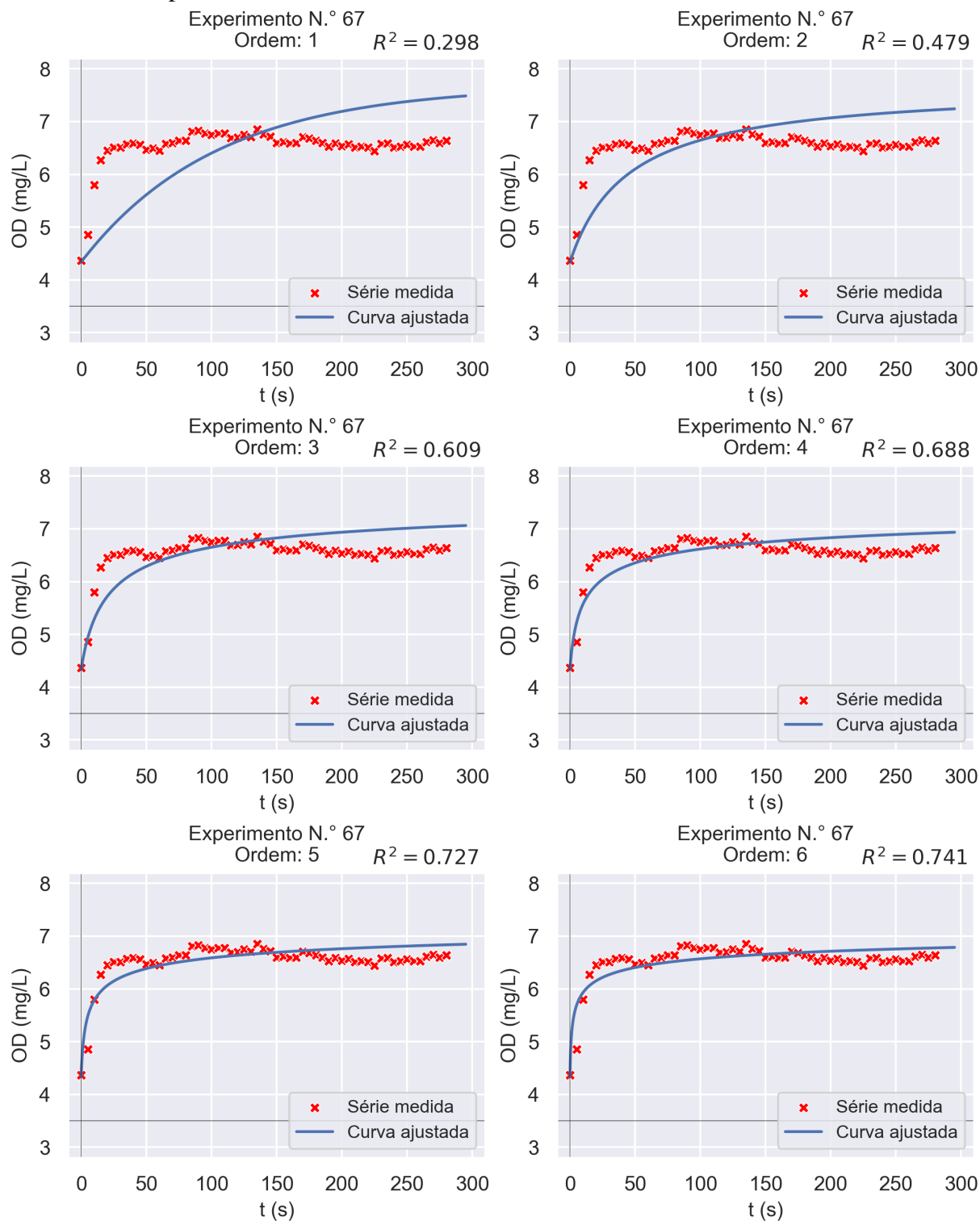
Figura 168 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 66



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

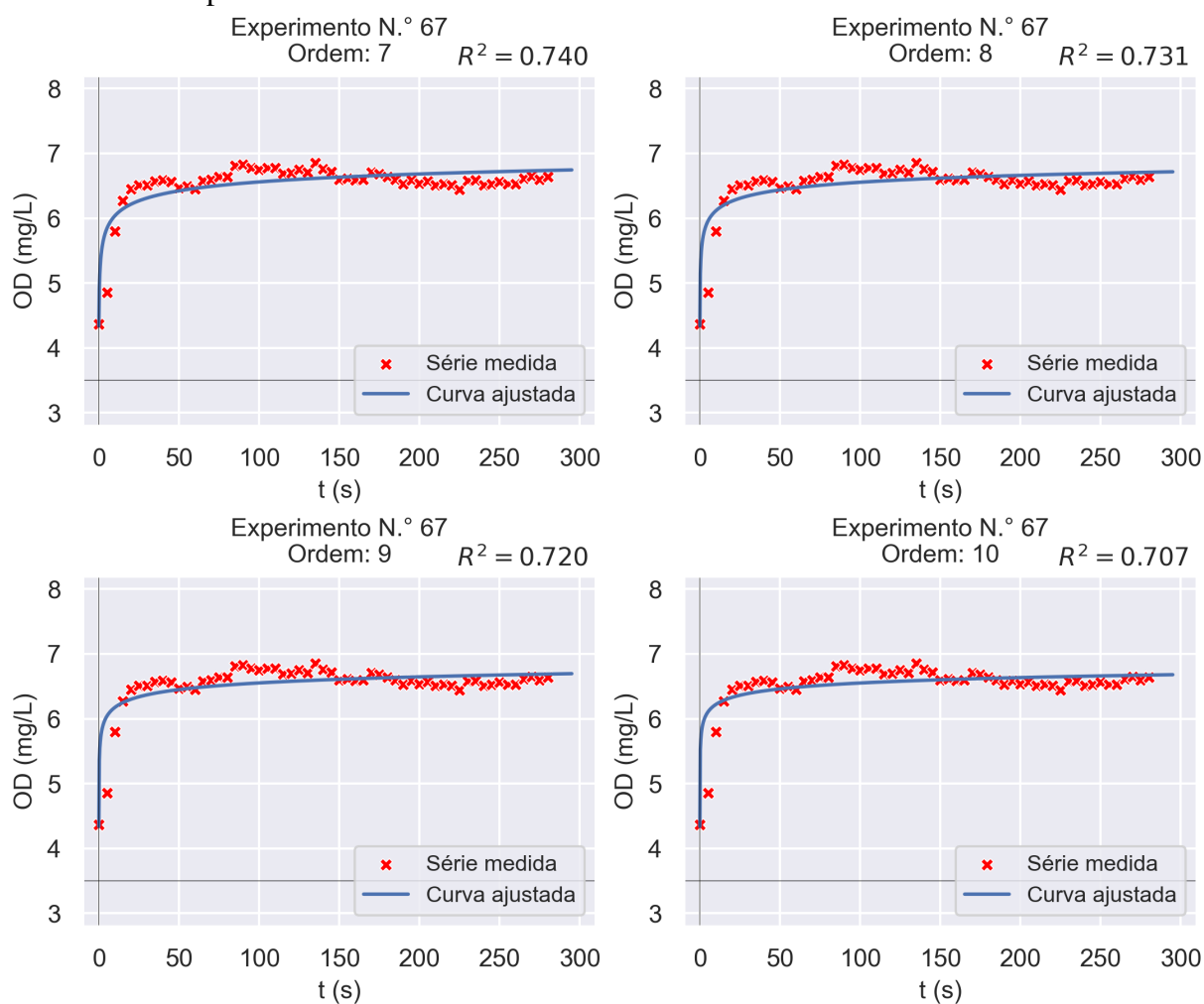
Figura 169 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 67



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

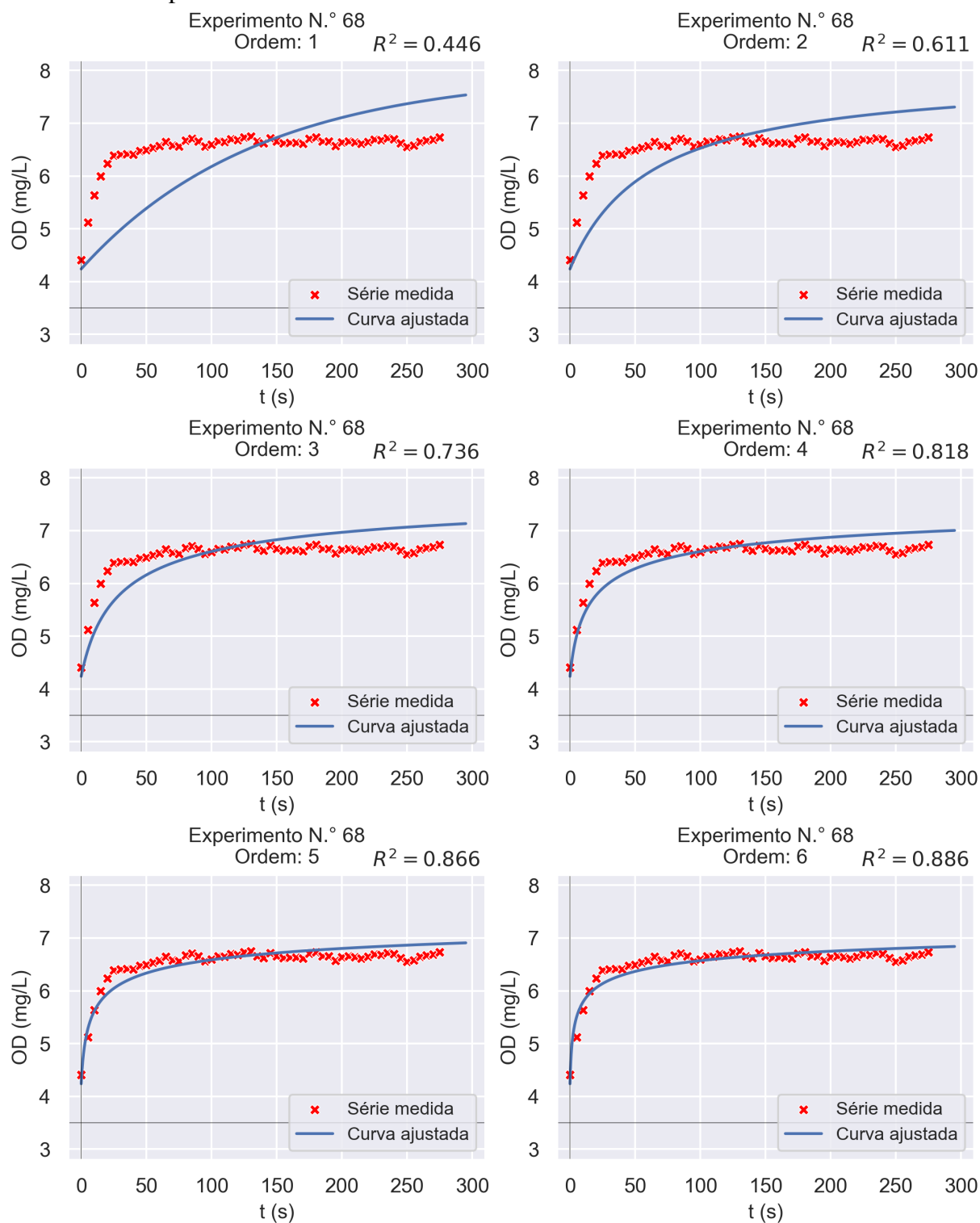
Figura 170 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 67



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

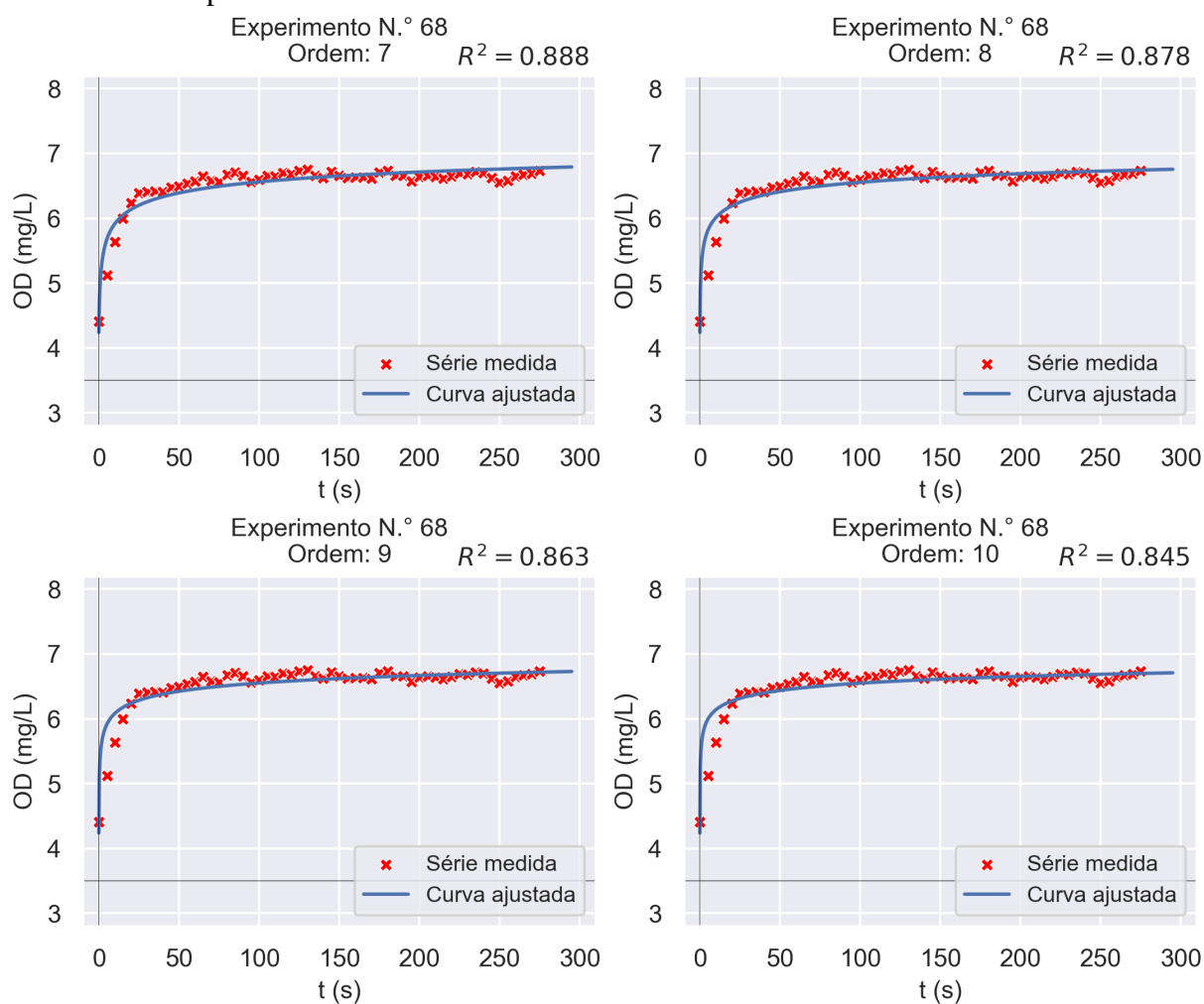
Figura 171 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 68



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

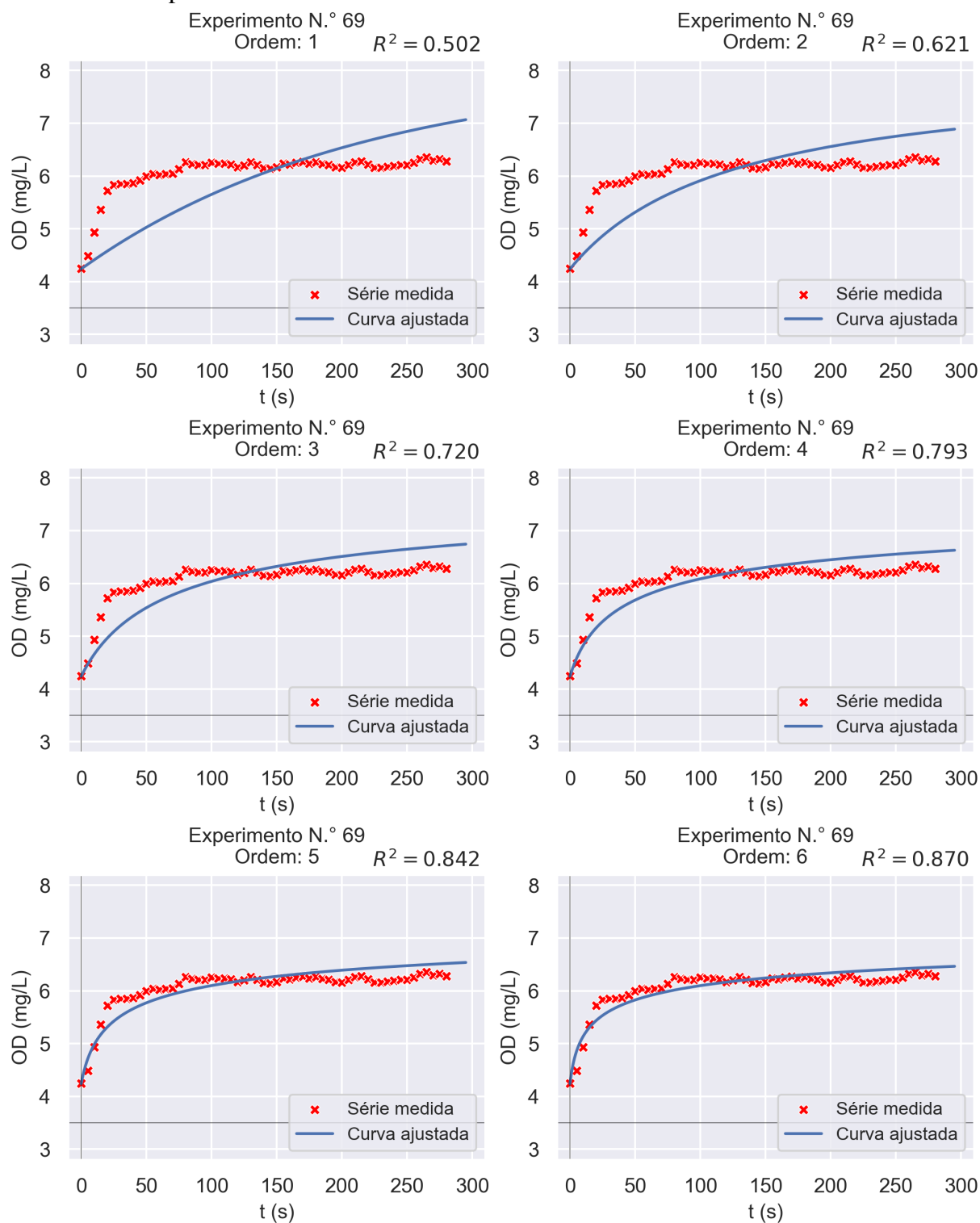
Figura 172 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 68



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

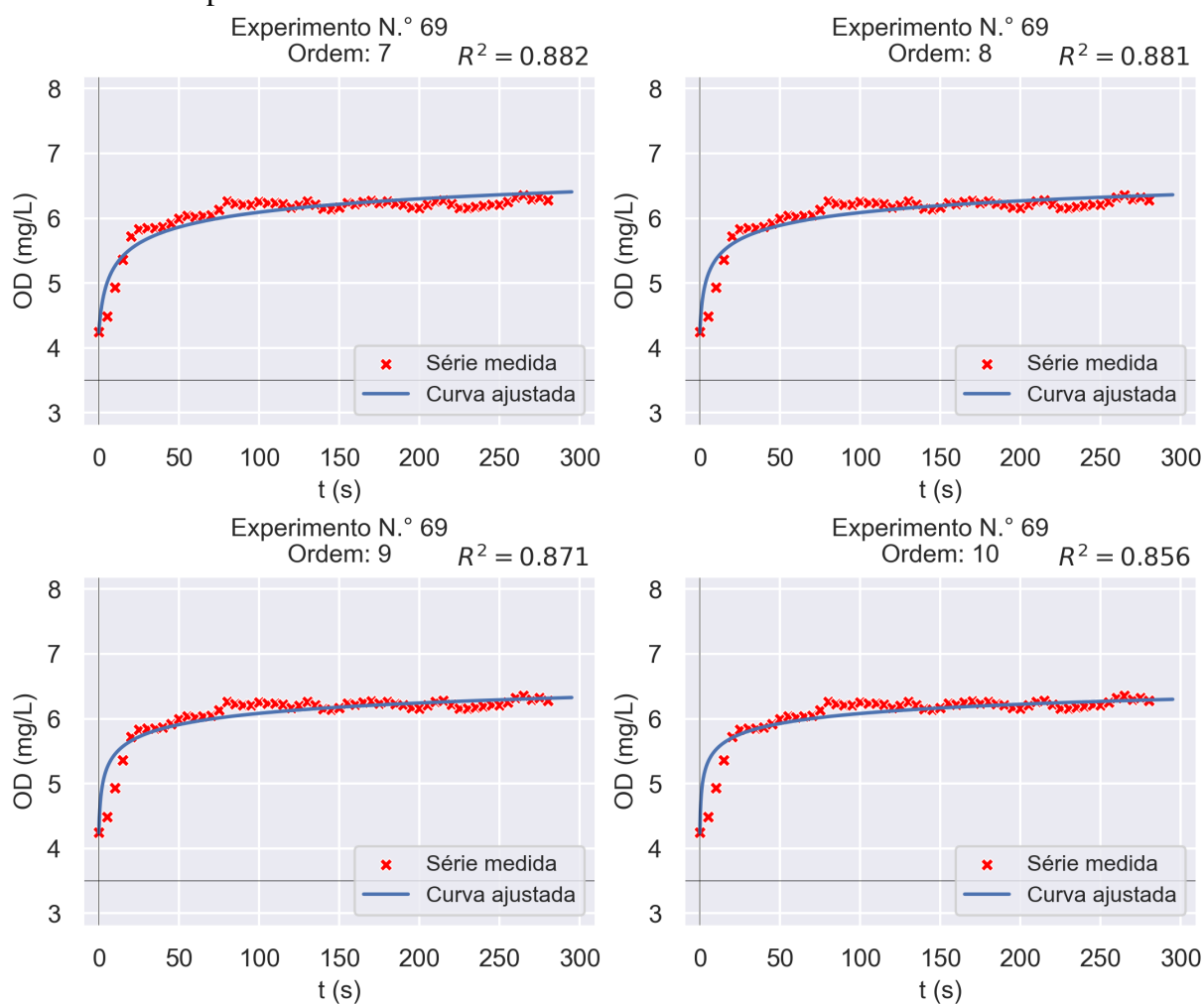
Figura 173 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 69



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

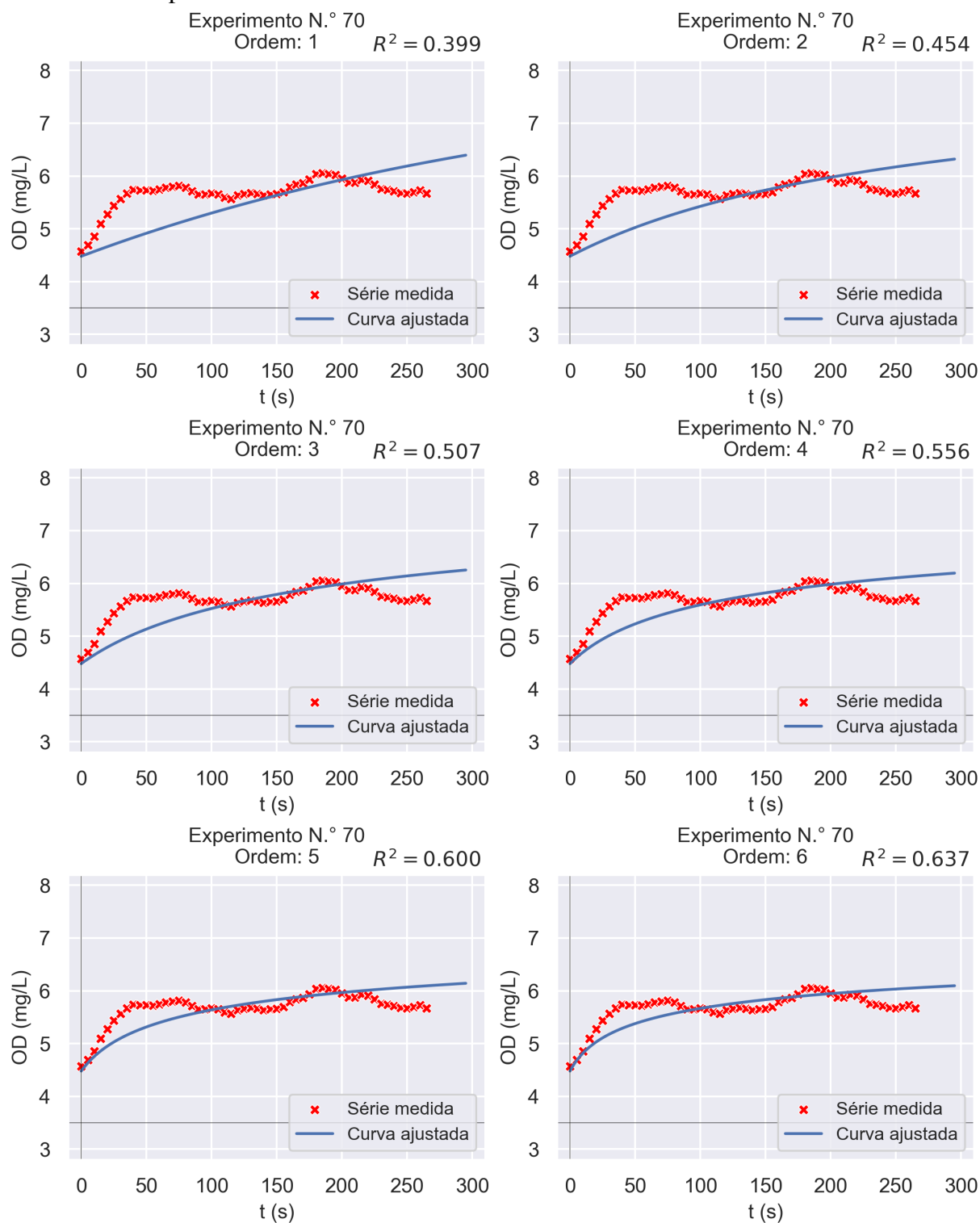
Figura 174 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 69



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 175 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 70

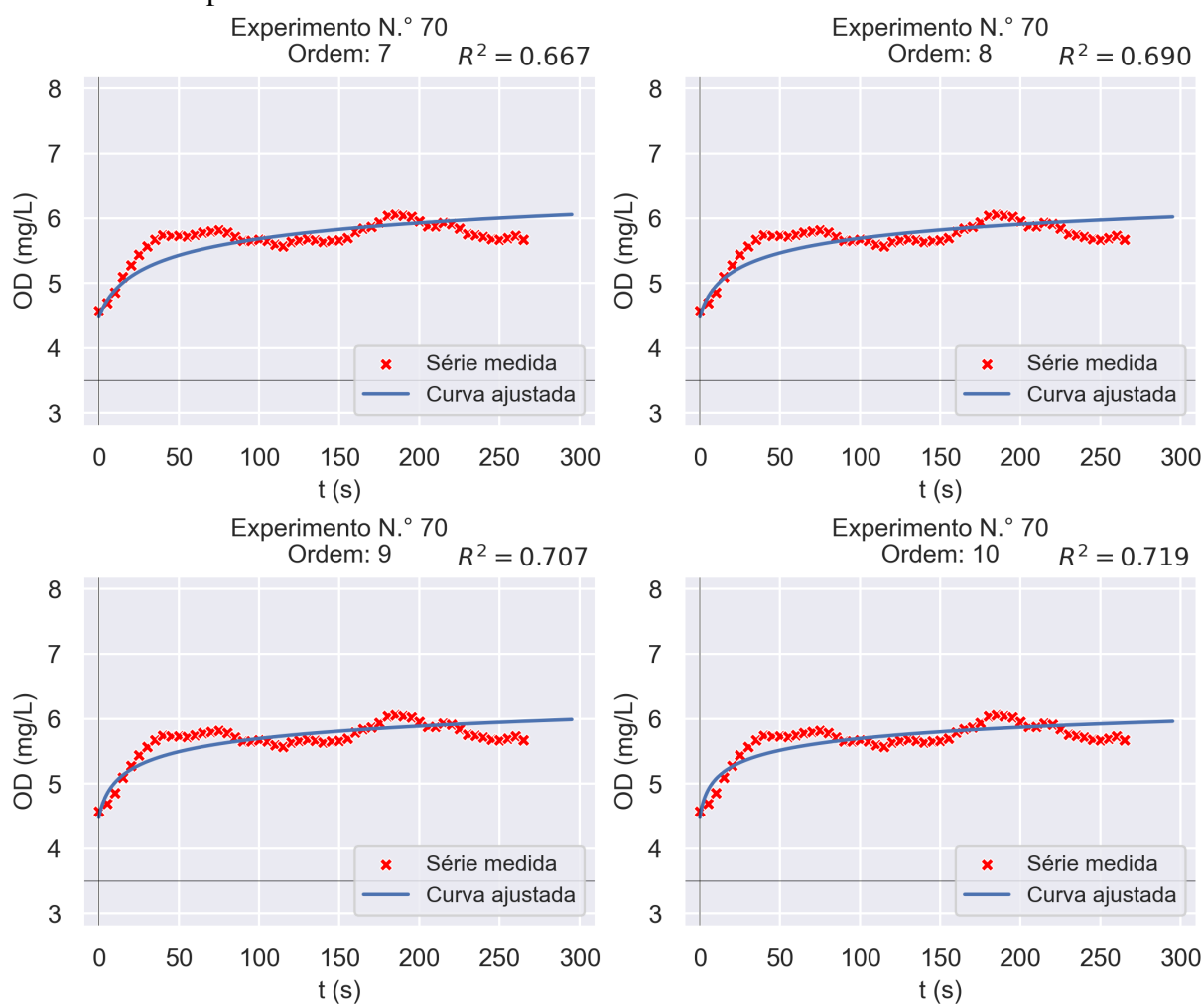


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



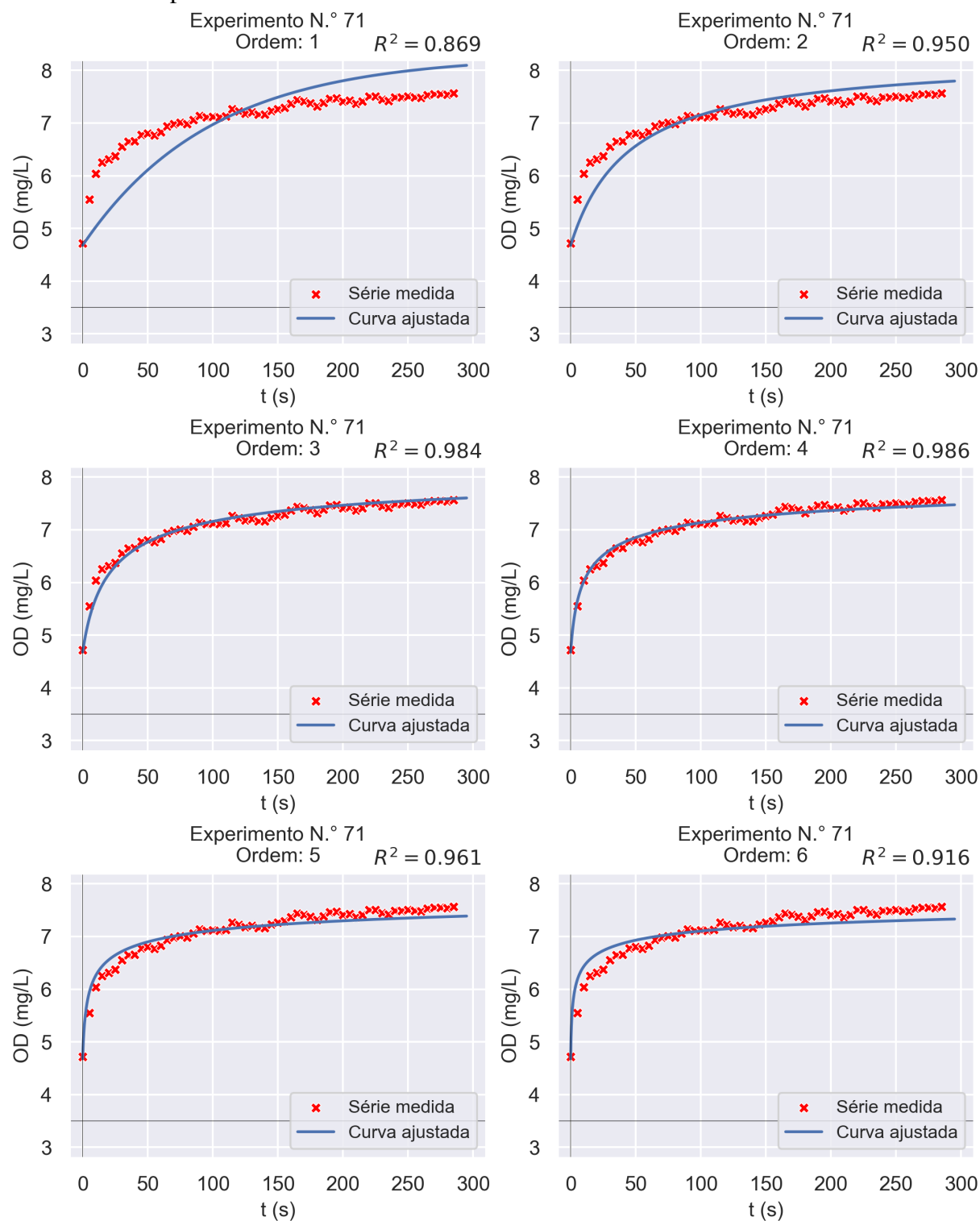
Figura 176 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 70



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

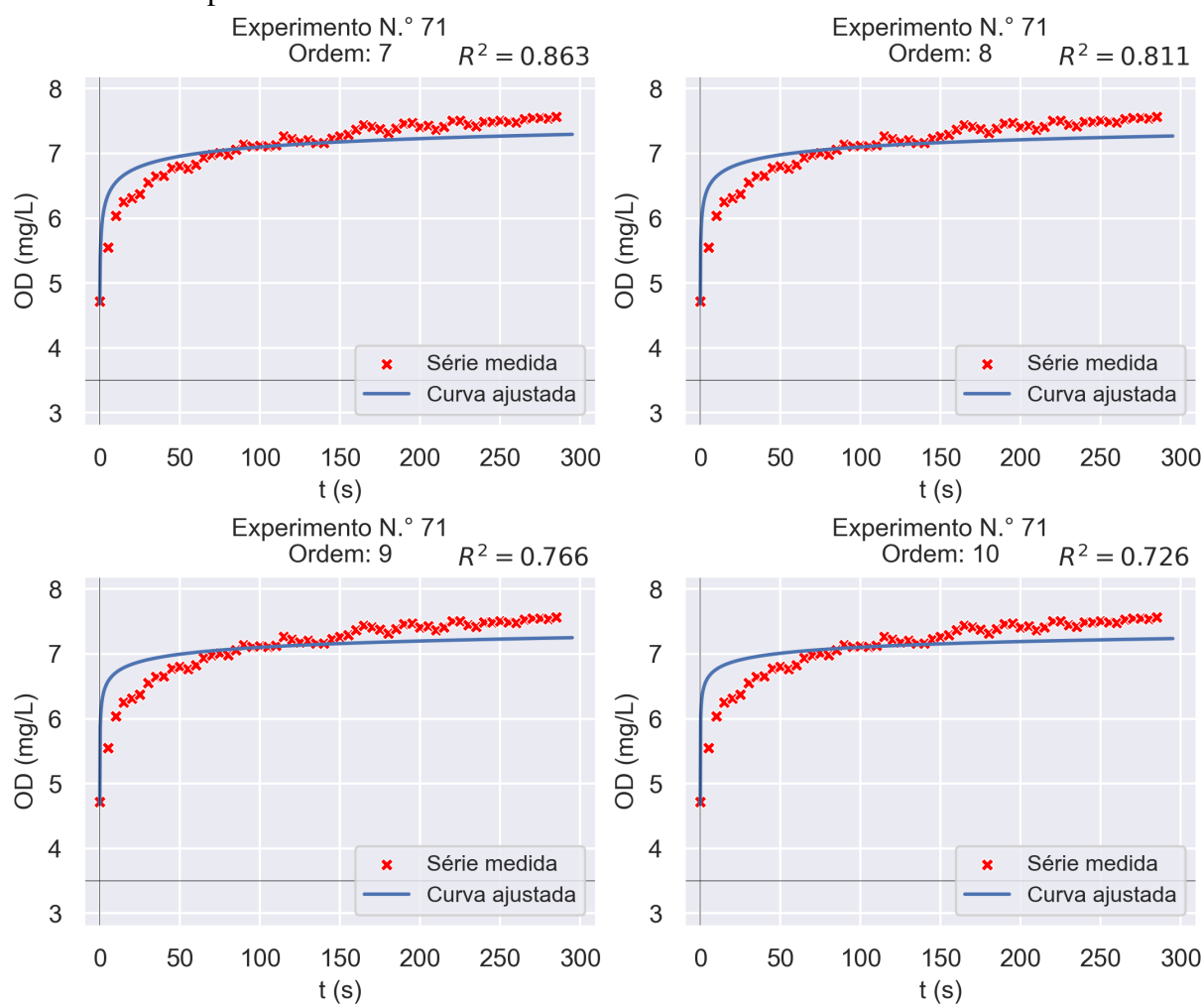
Figura 177 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 71



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

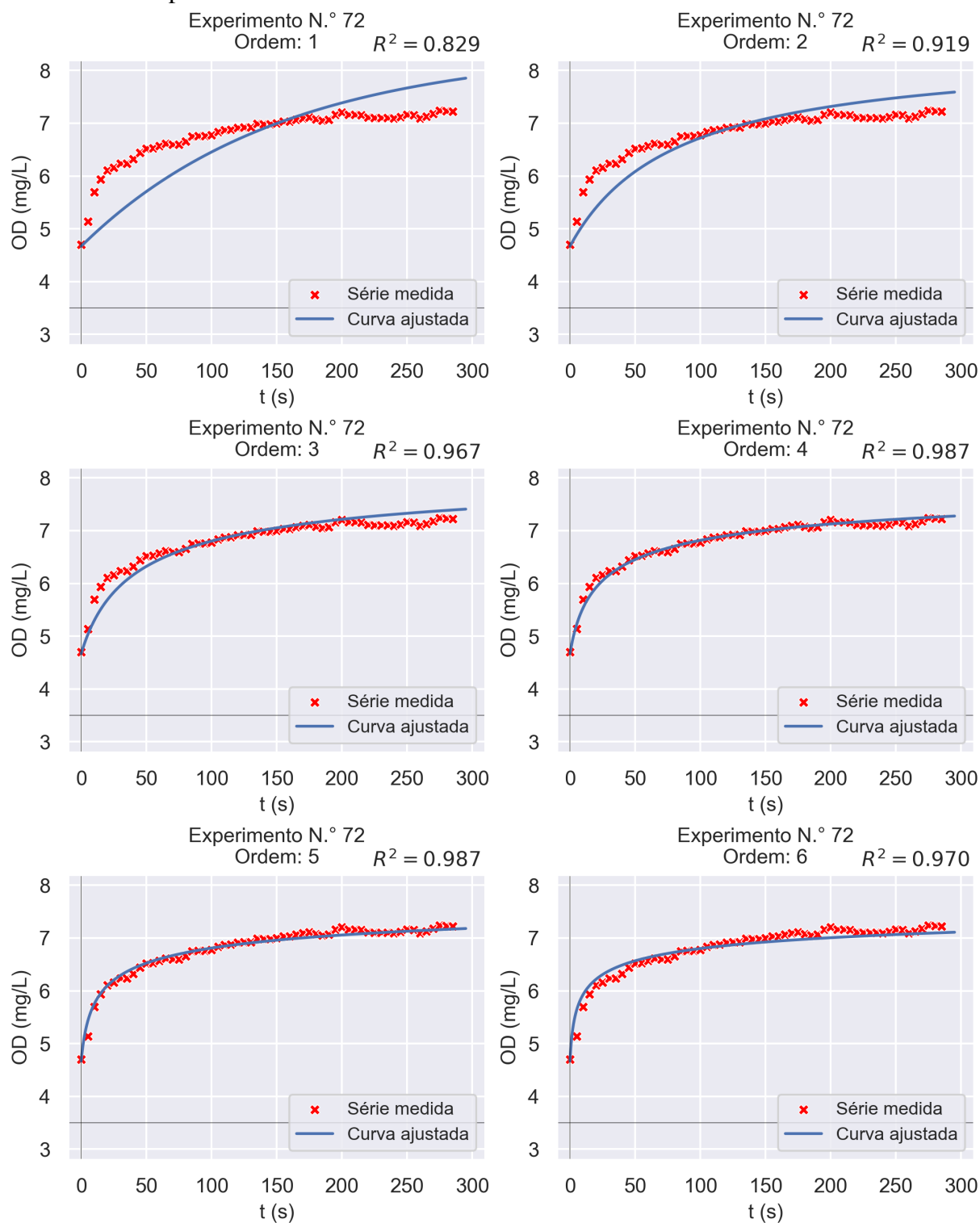
Figura 178 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 71



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

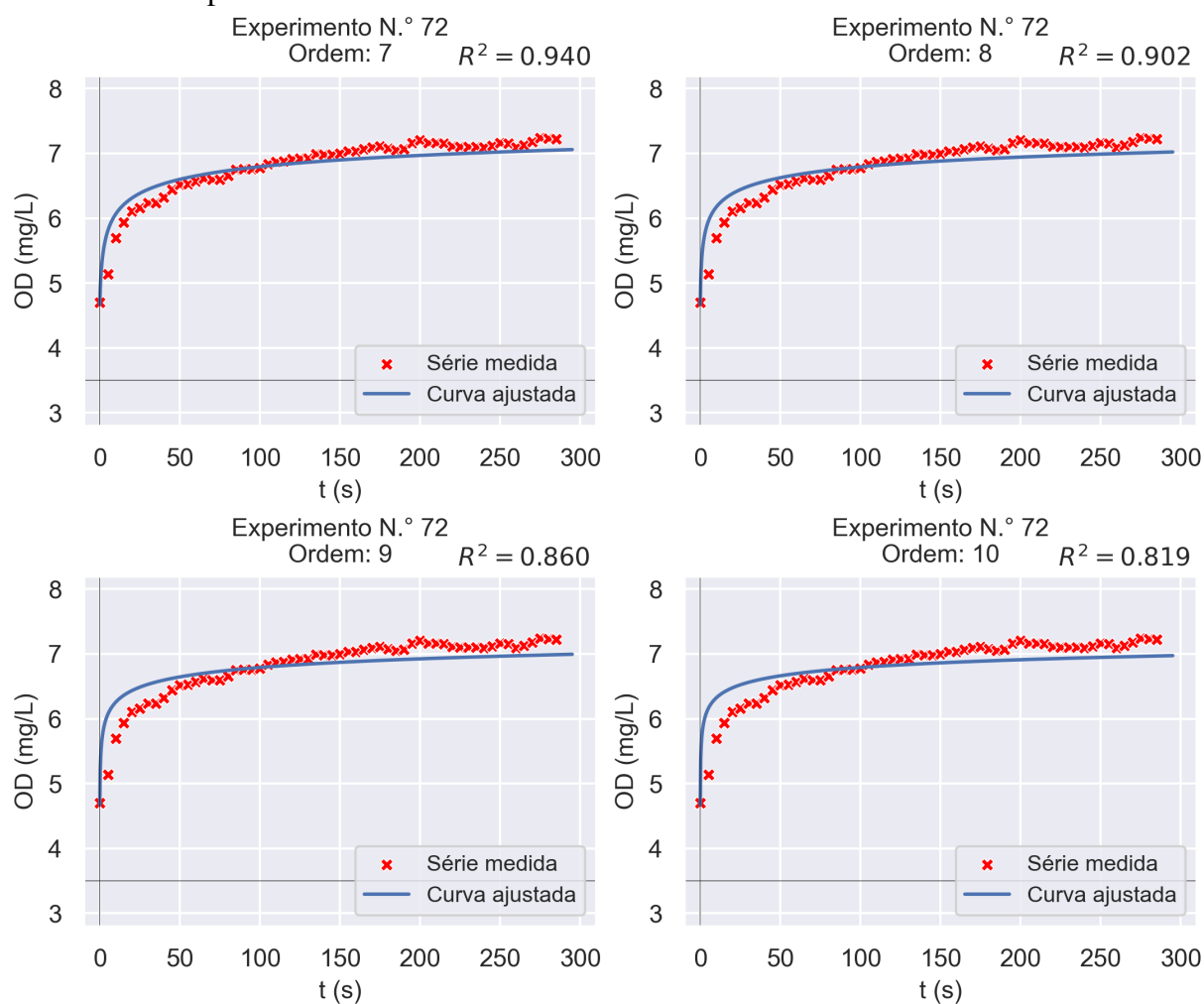
Figura 179 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 72



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

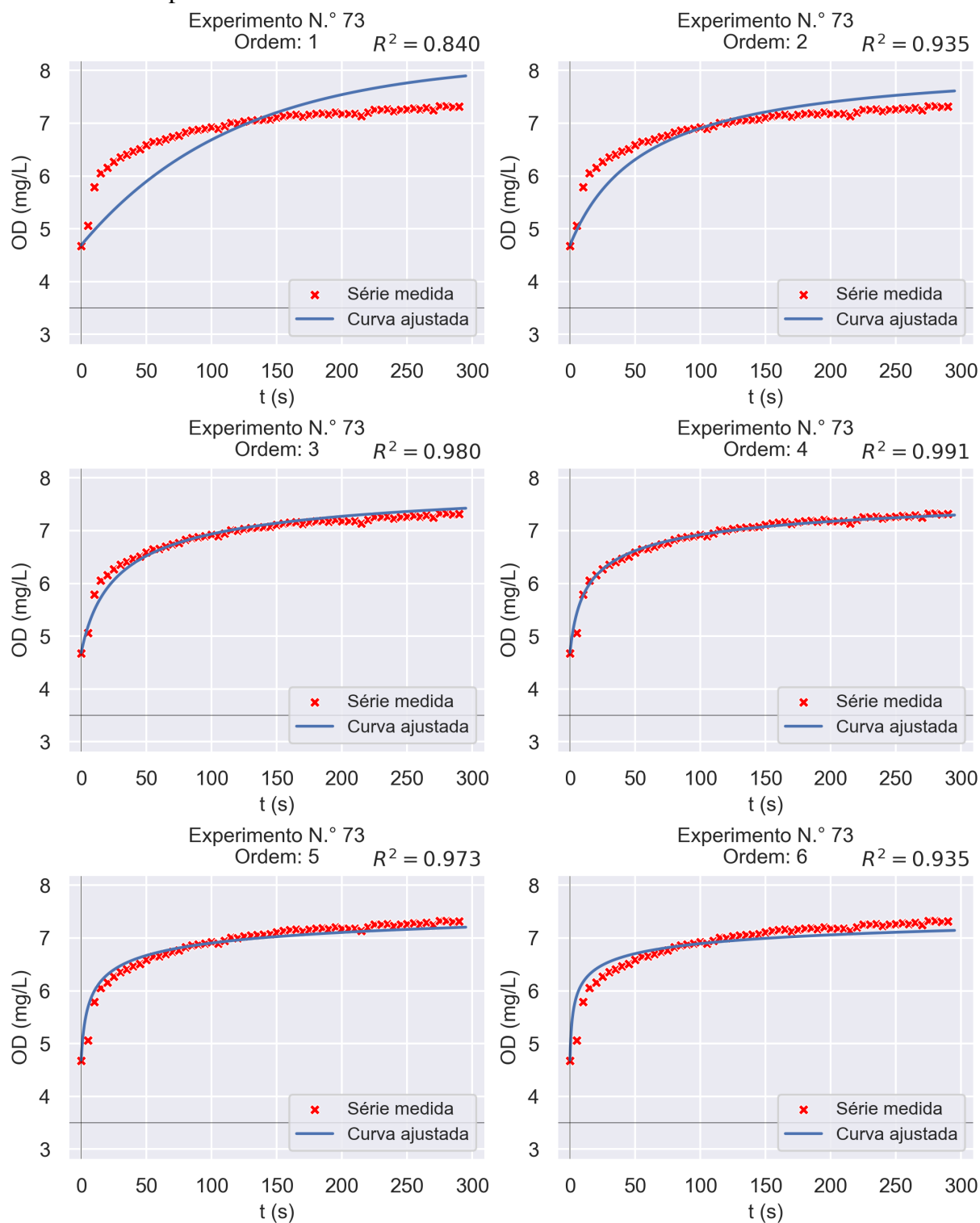
Figura 180 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 72



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

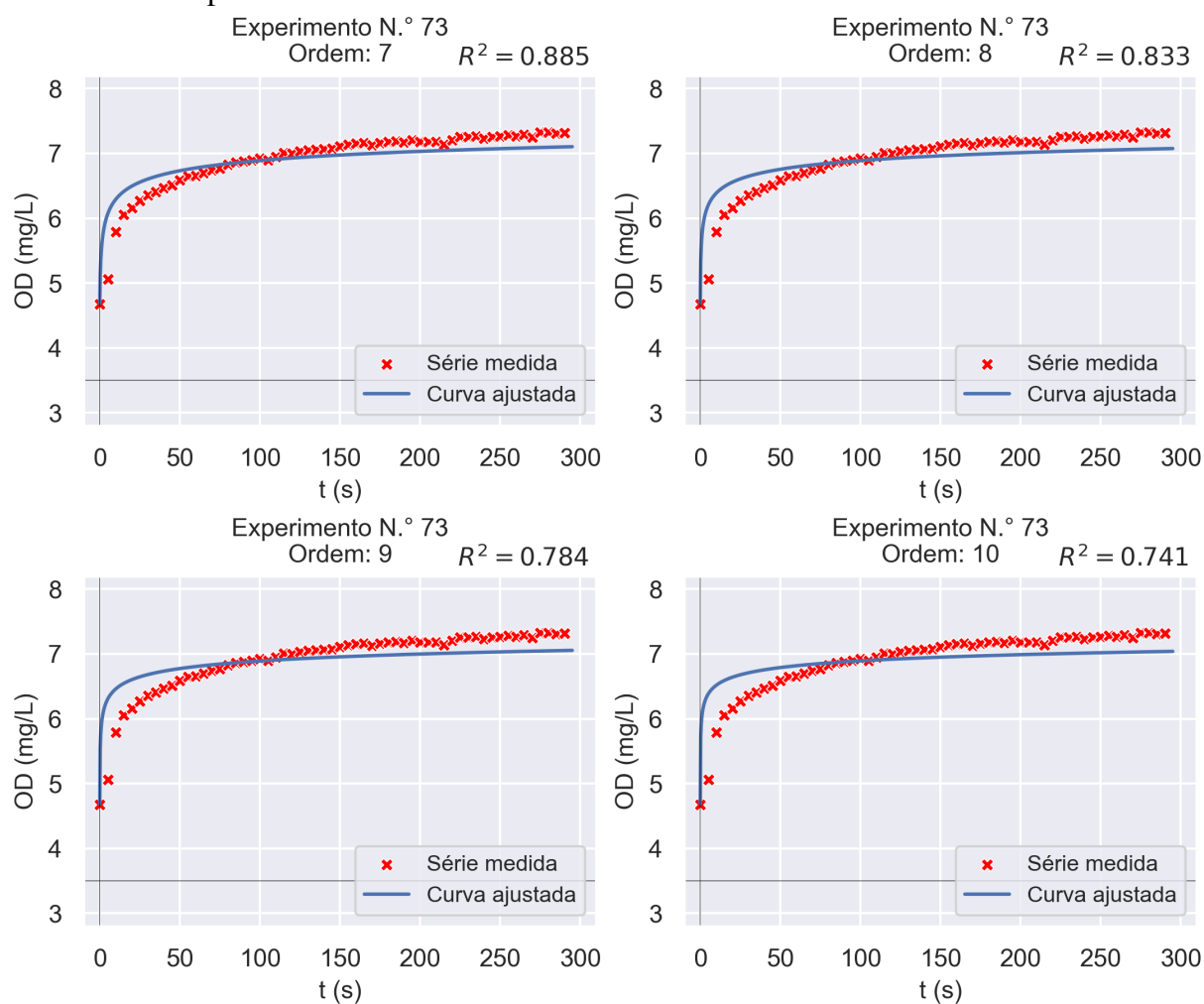
Figura 181 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 73



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

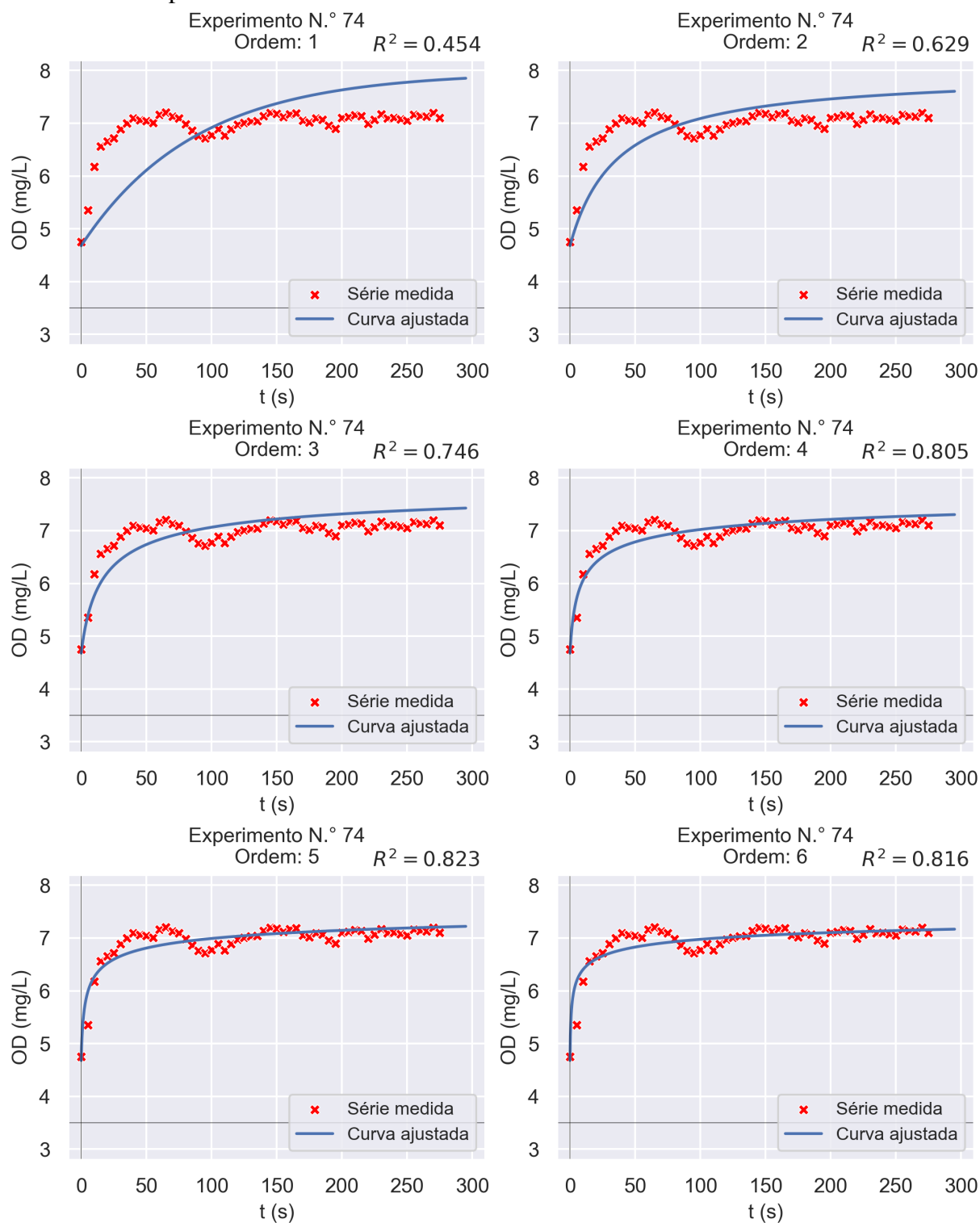
Figura 182 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 73



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 183 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 74

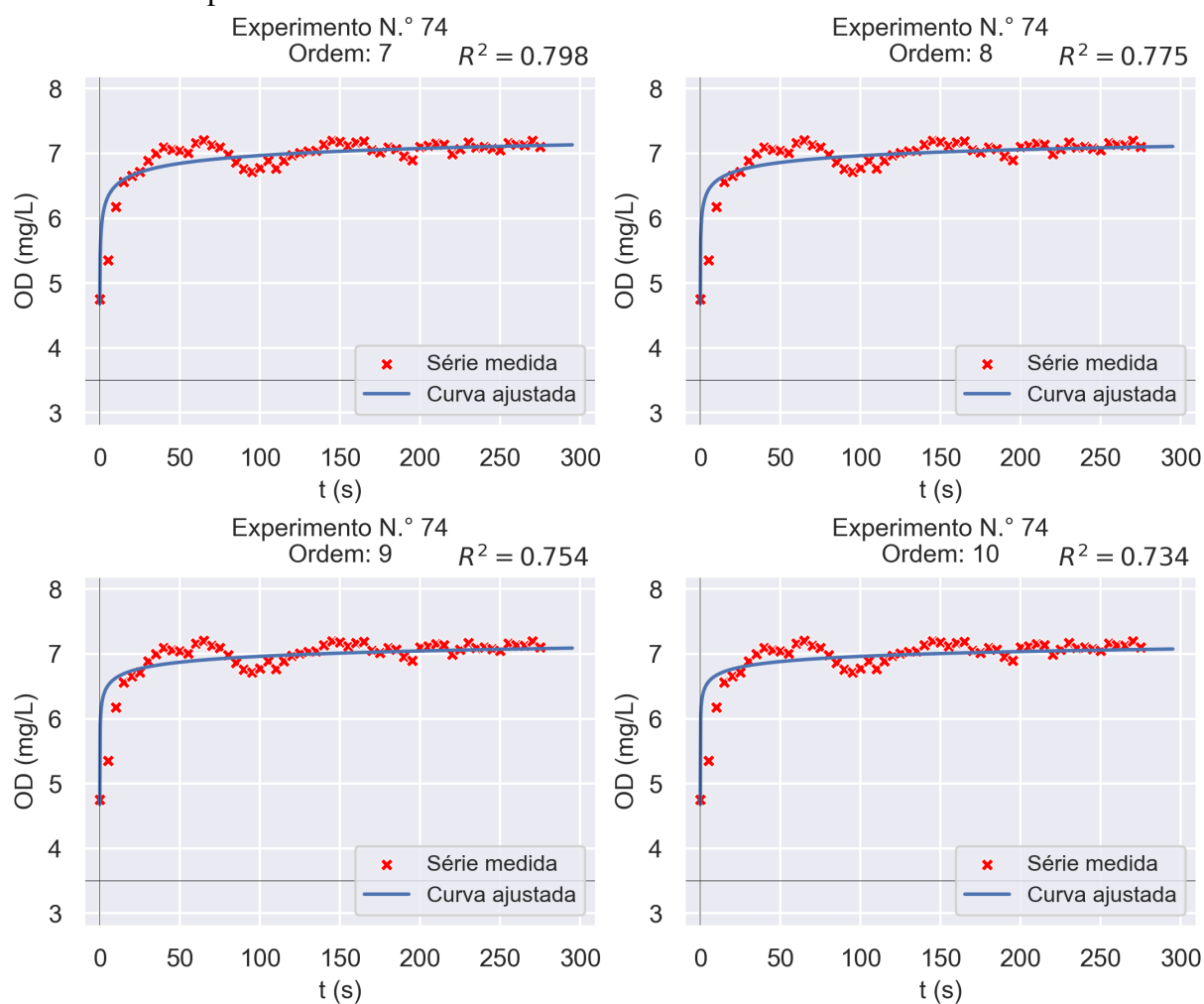


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



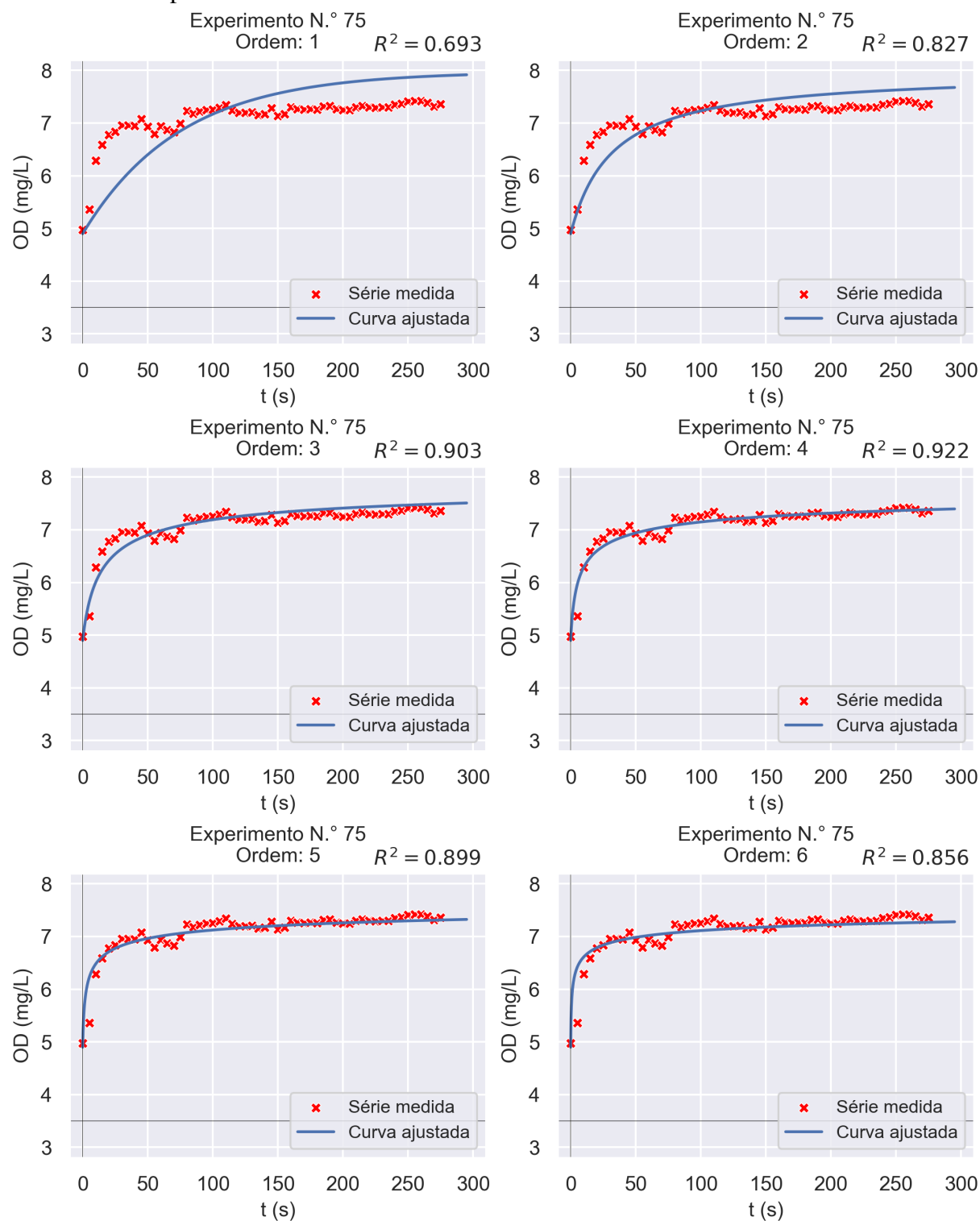
Figura 184 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 74



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

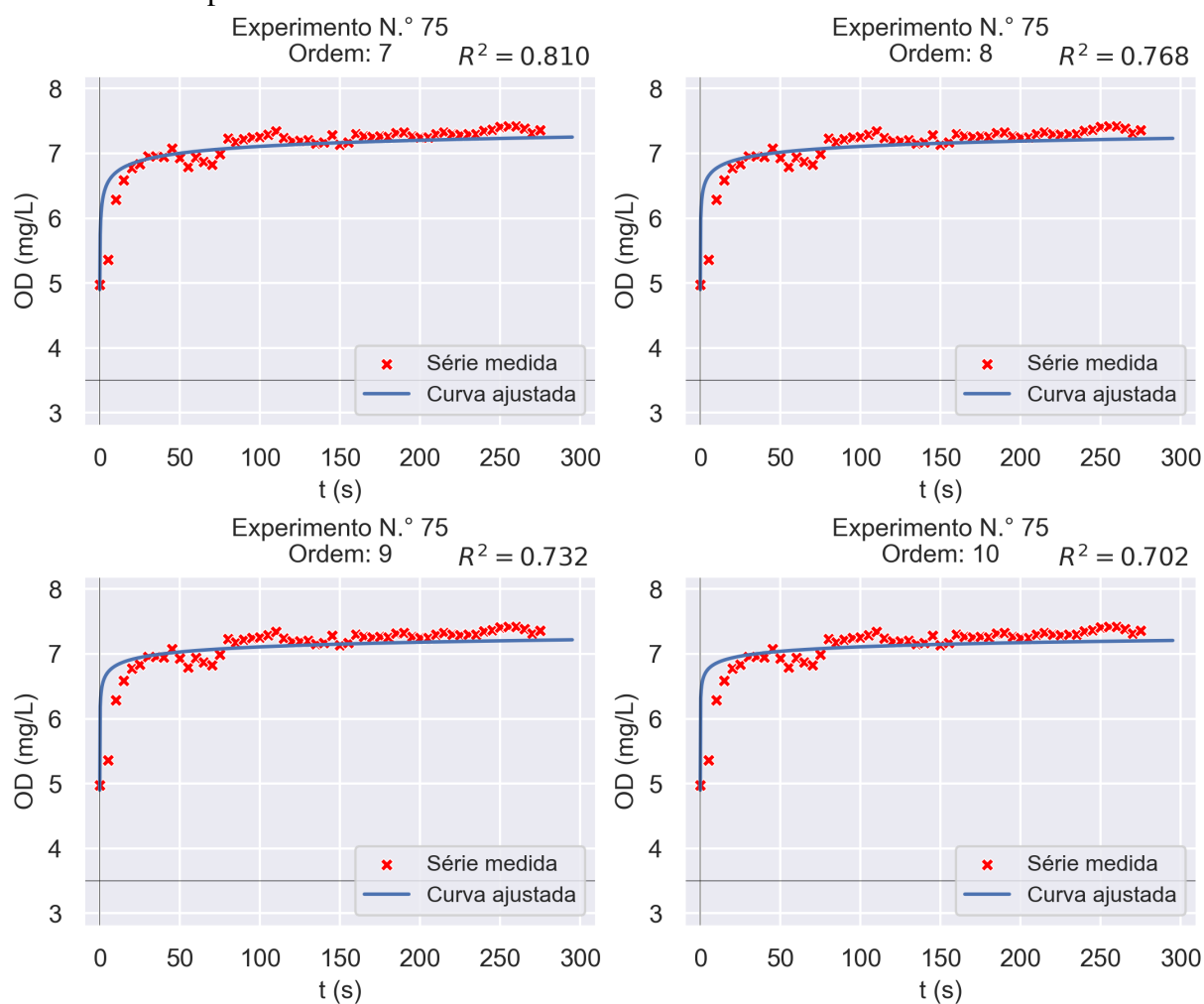
Figura 185 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 75



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

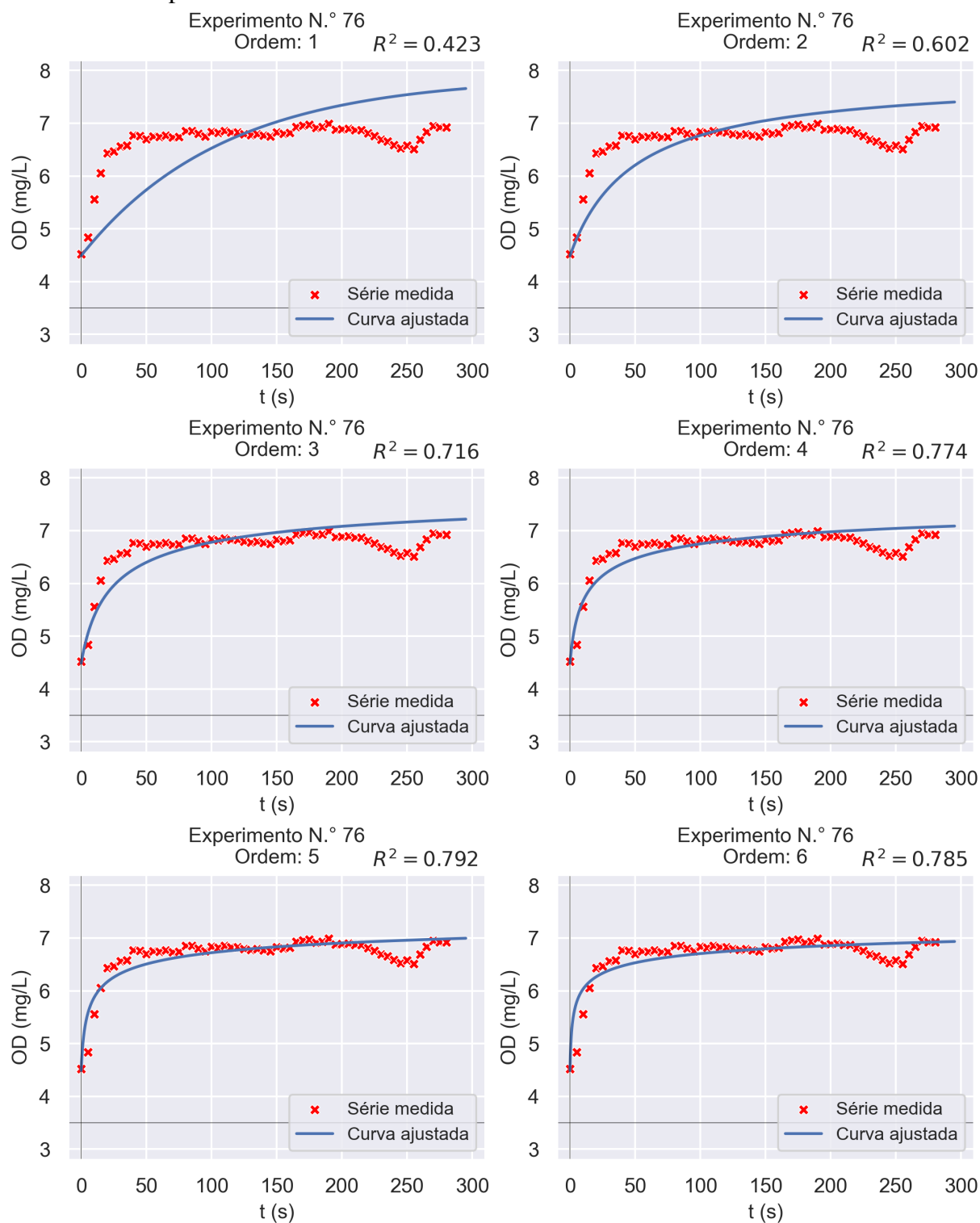
Figura 186 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 75



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

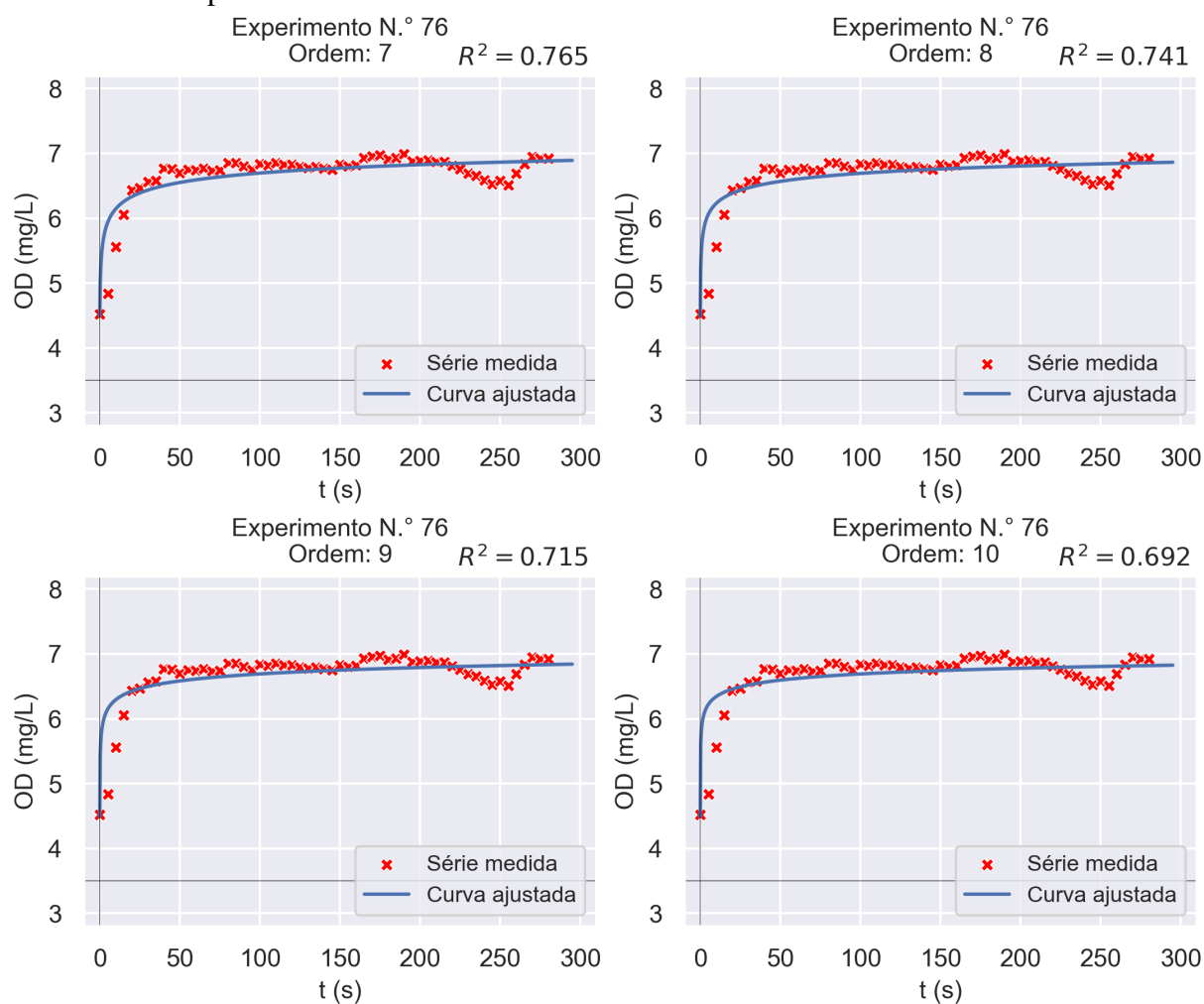
Figura 187 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 76



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

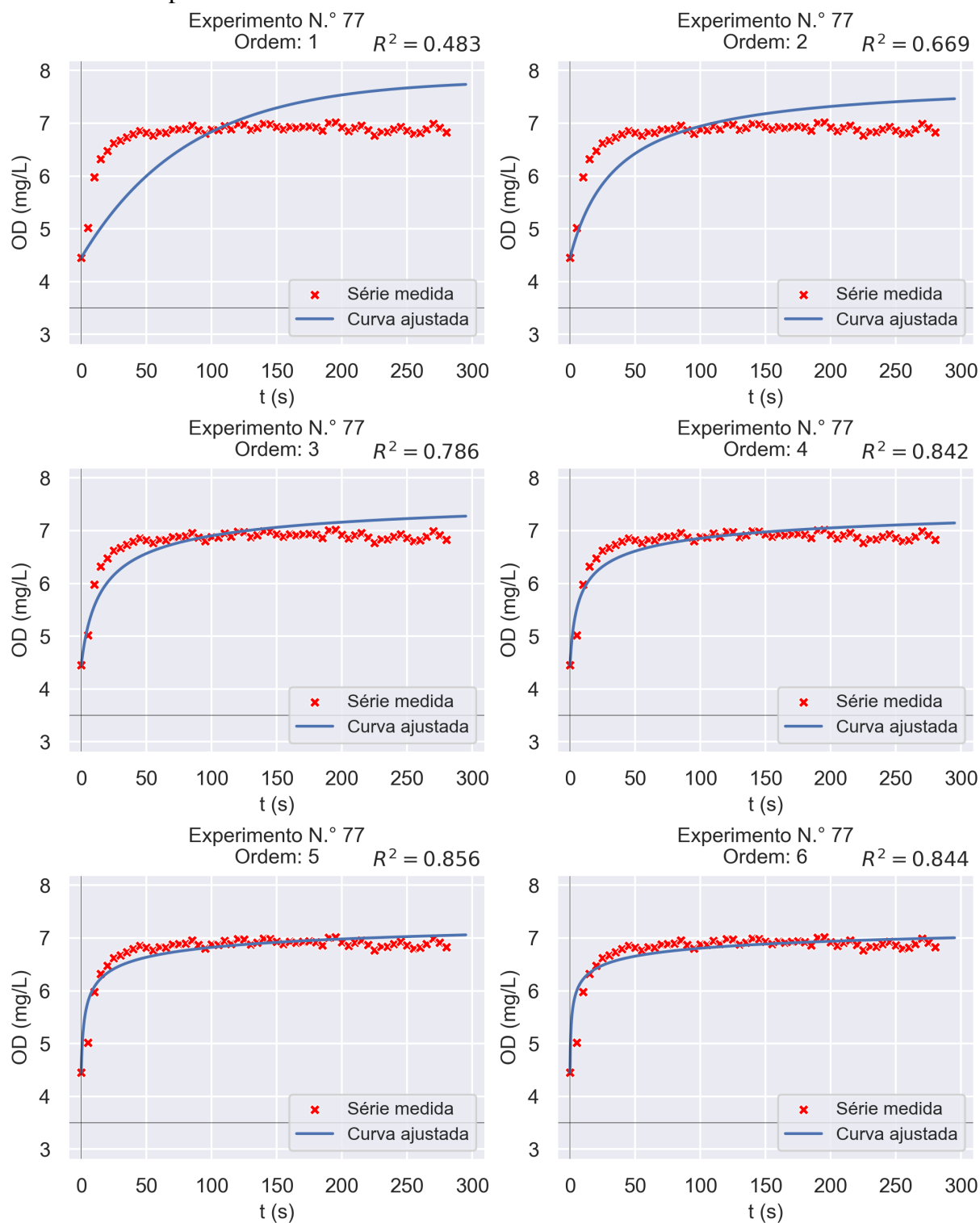
Figura 188 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 76



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

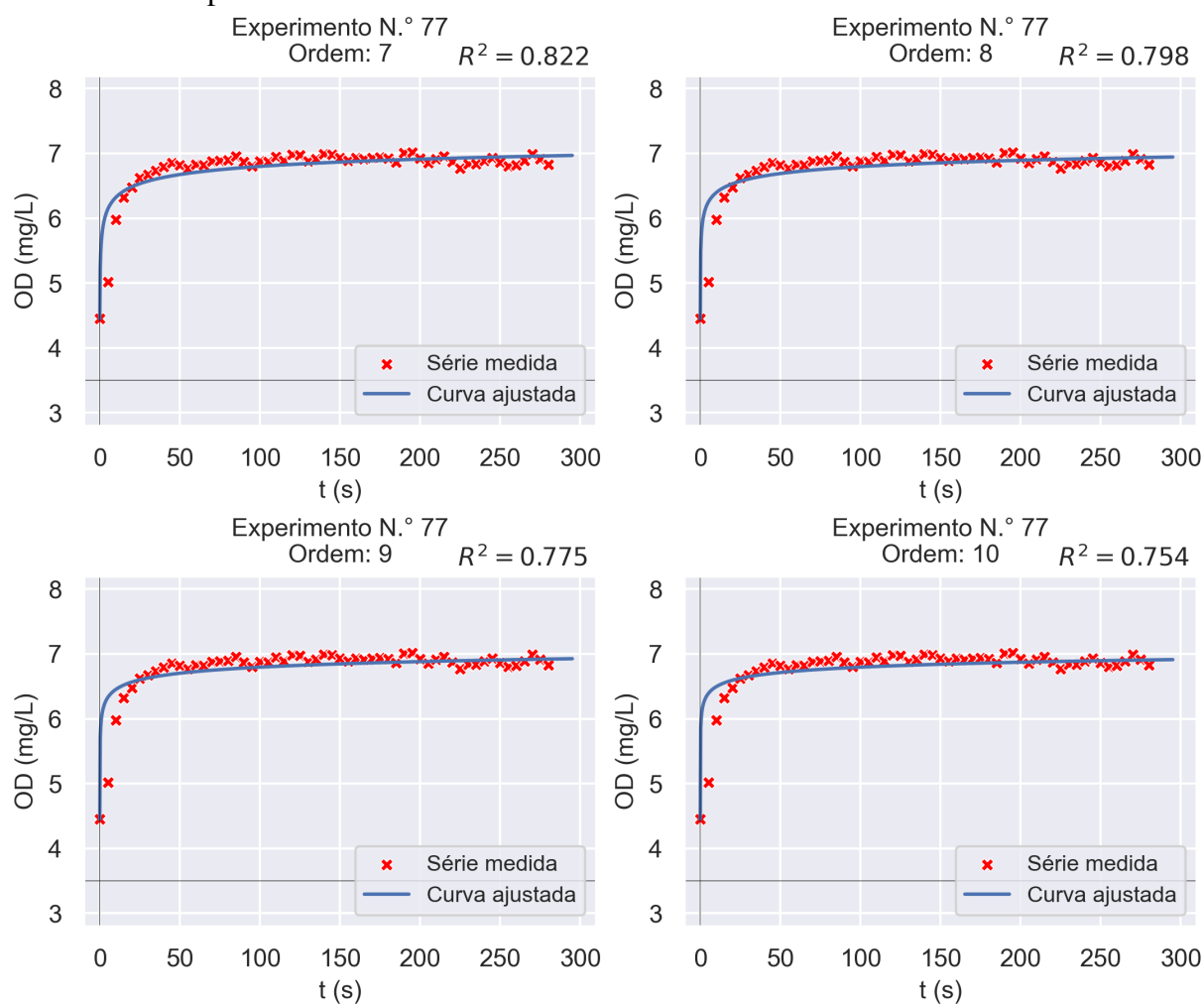
Figura 189 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 77



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

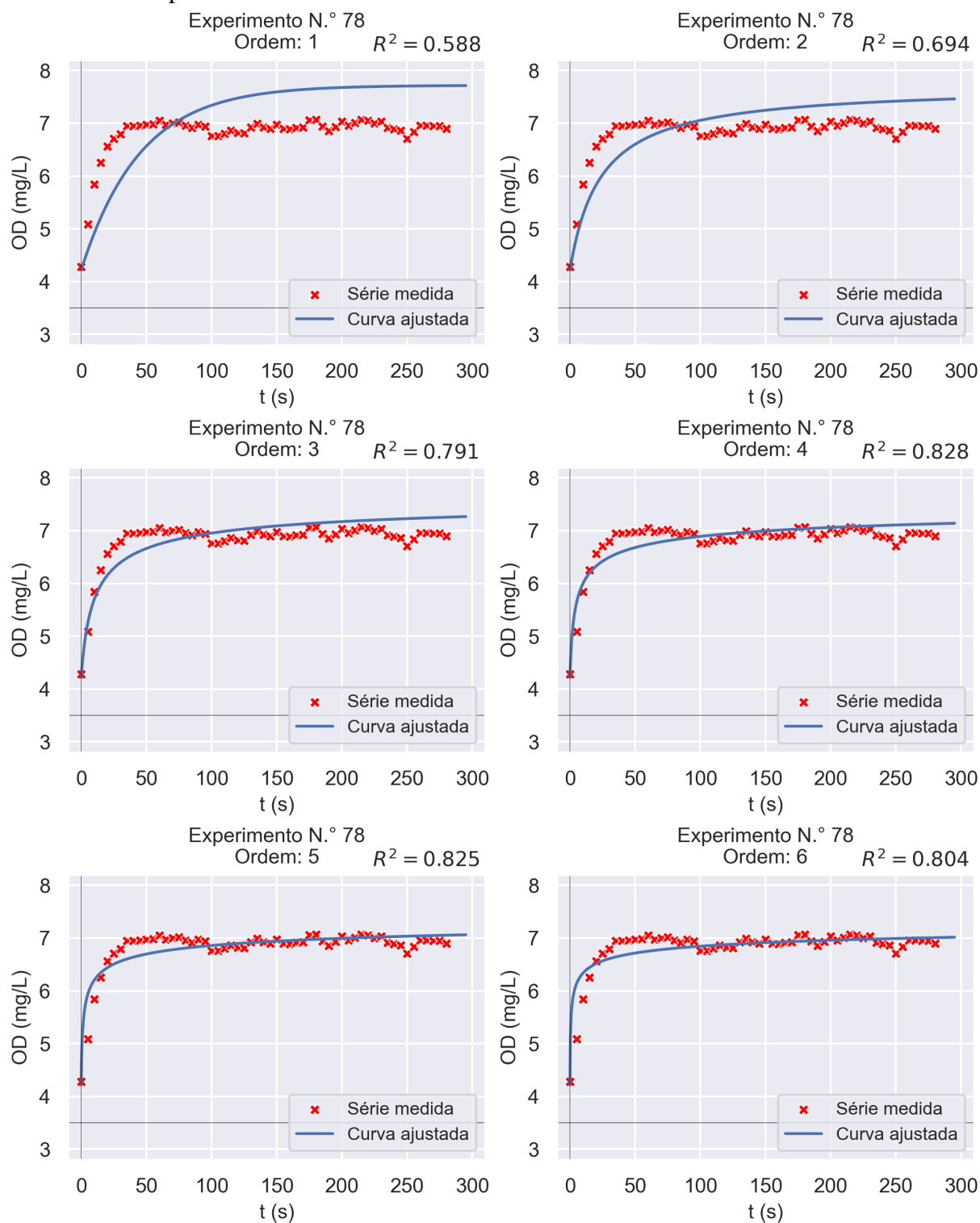
Figura 190 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 77



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 191 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 78

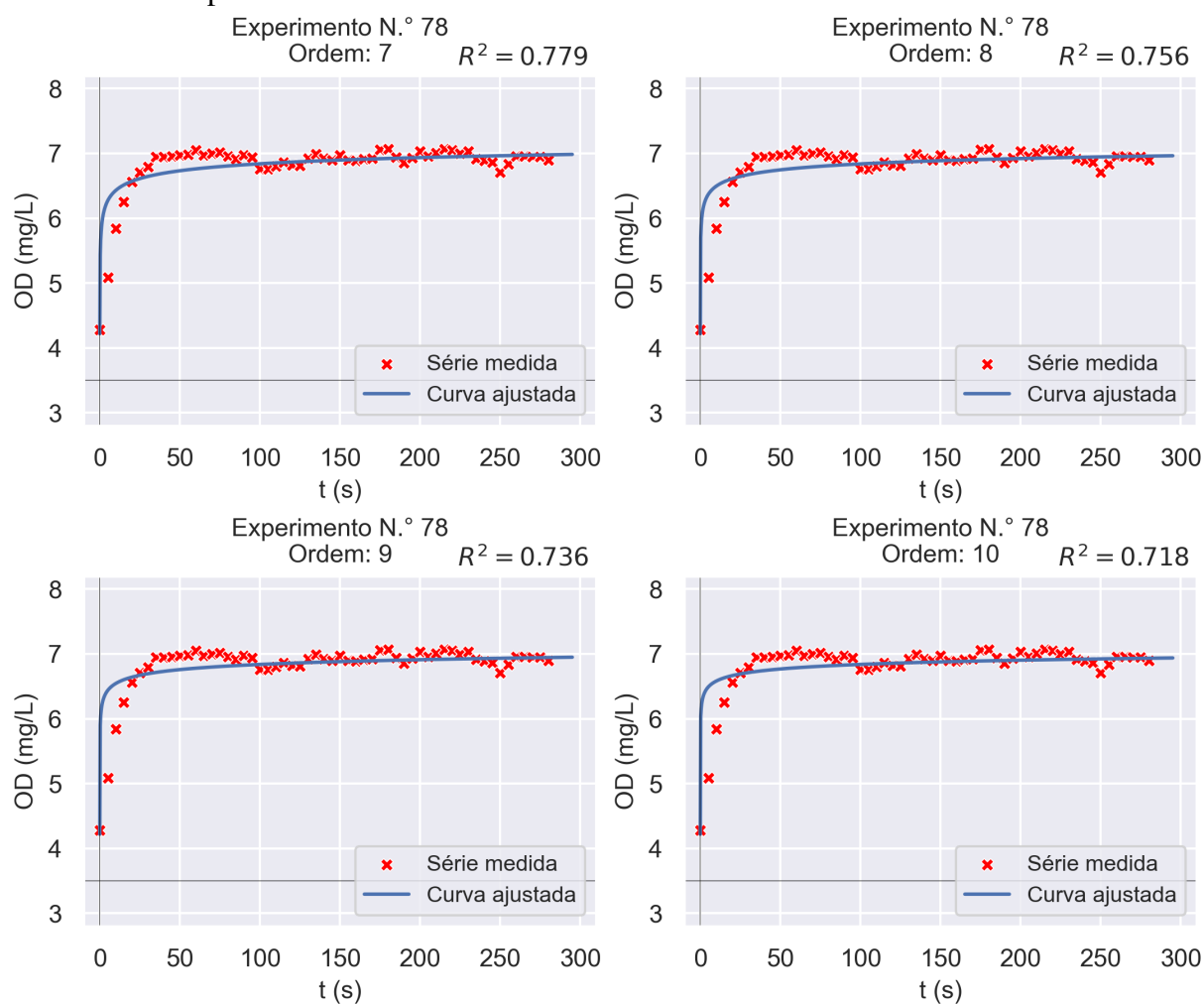


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



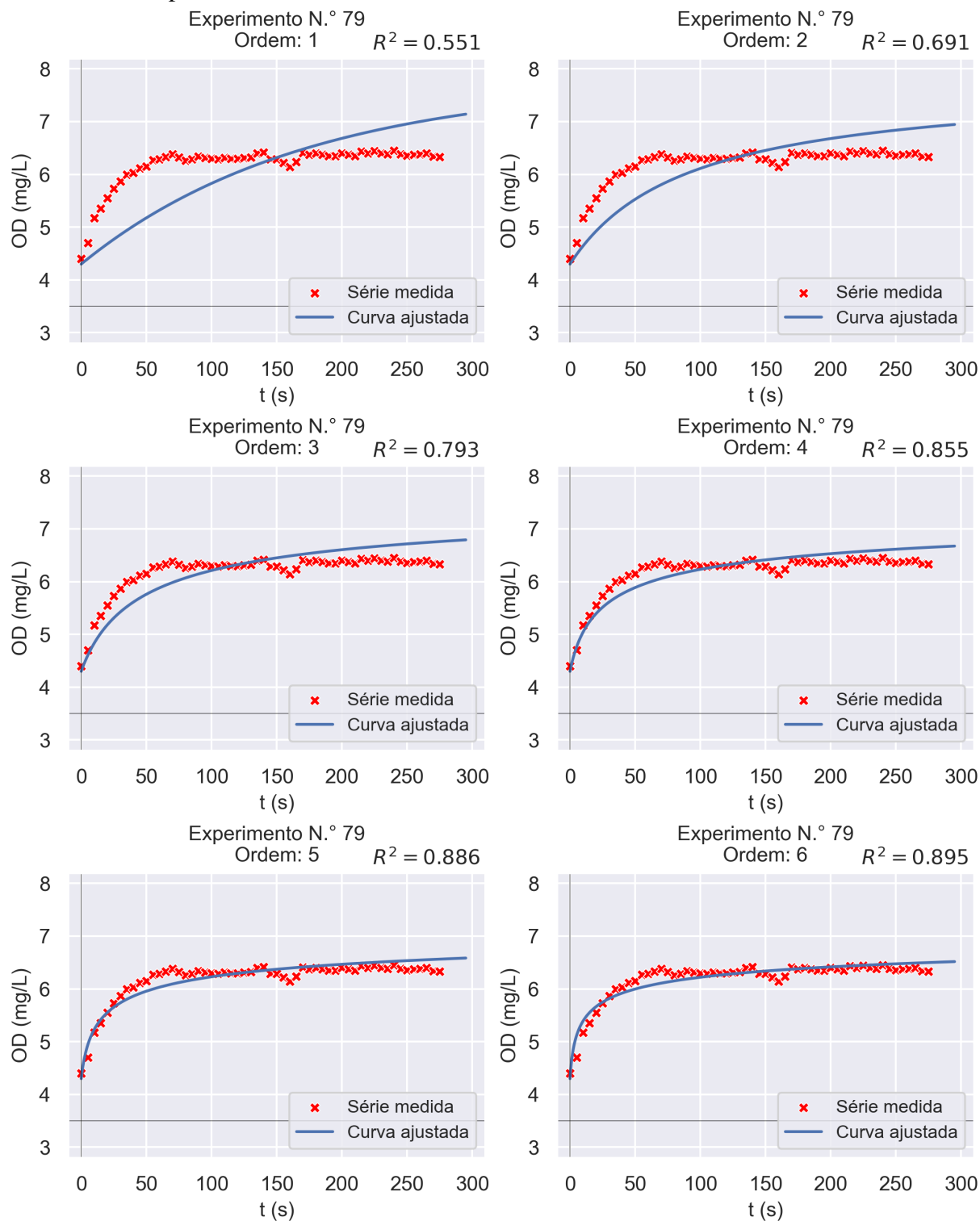
Figura 192 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 78



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

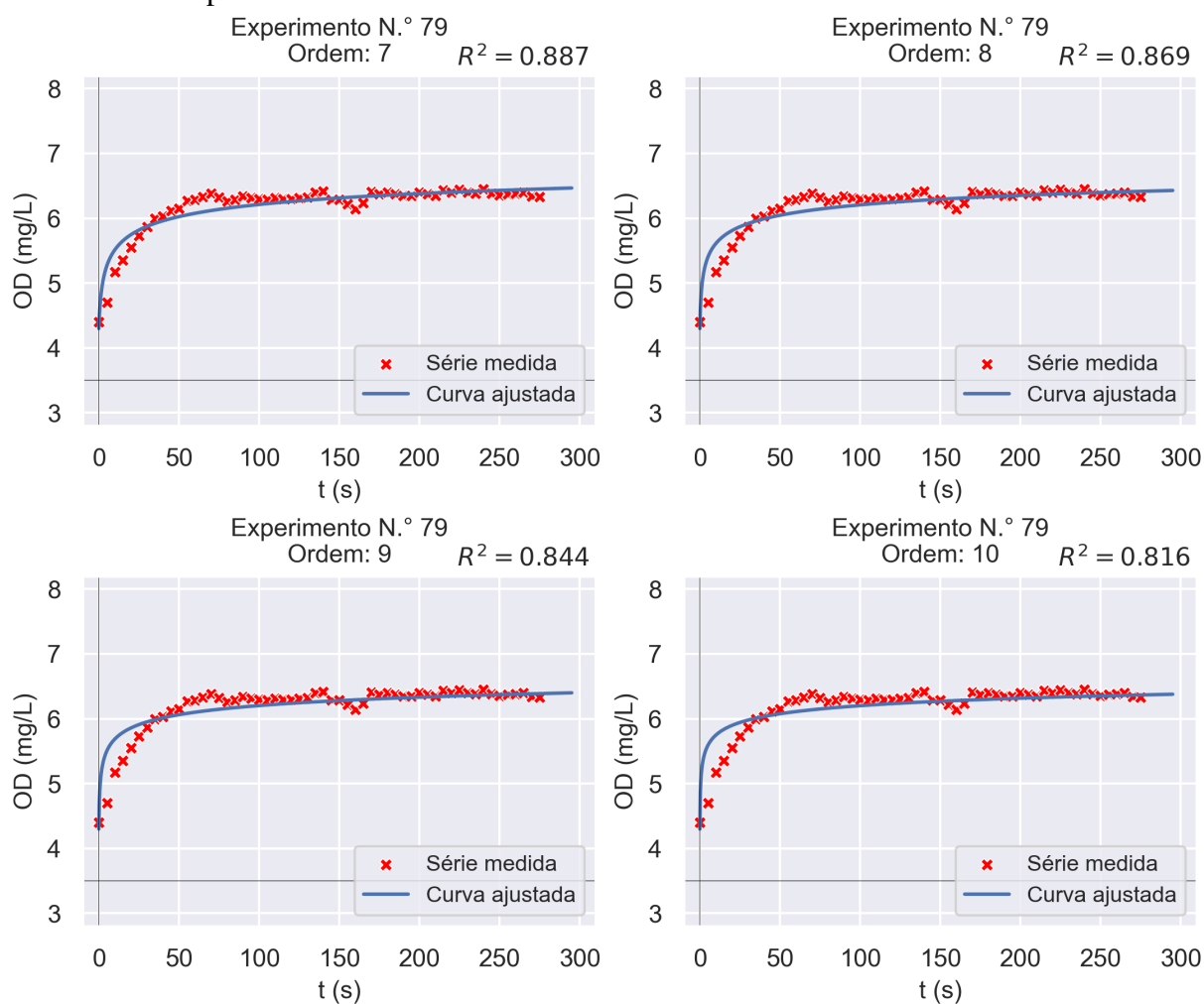
Figura 193 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 79



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

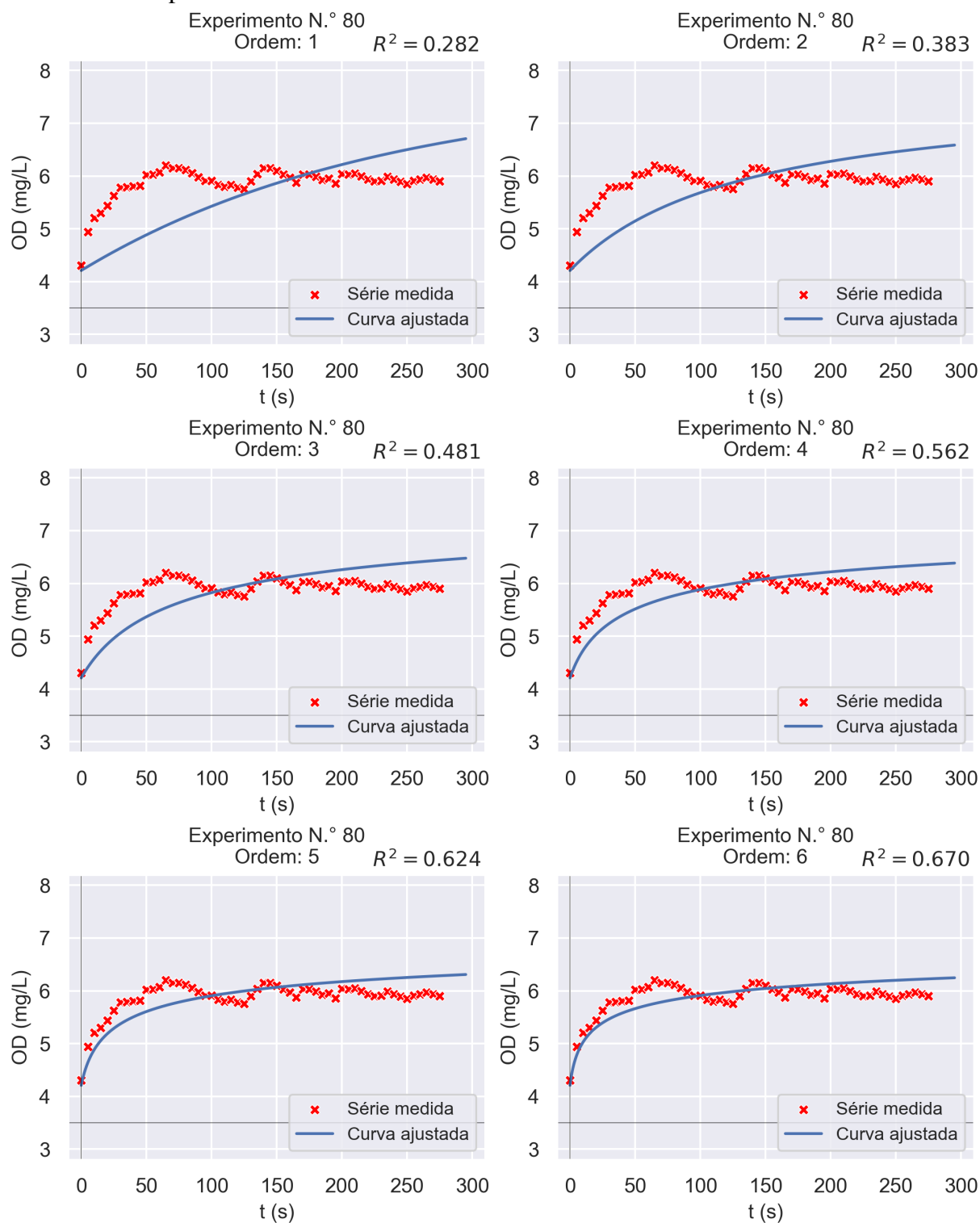
Figura 194 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 79



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

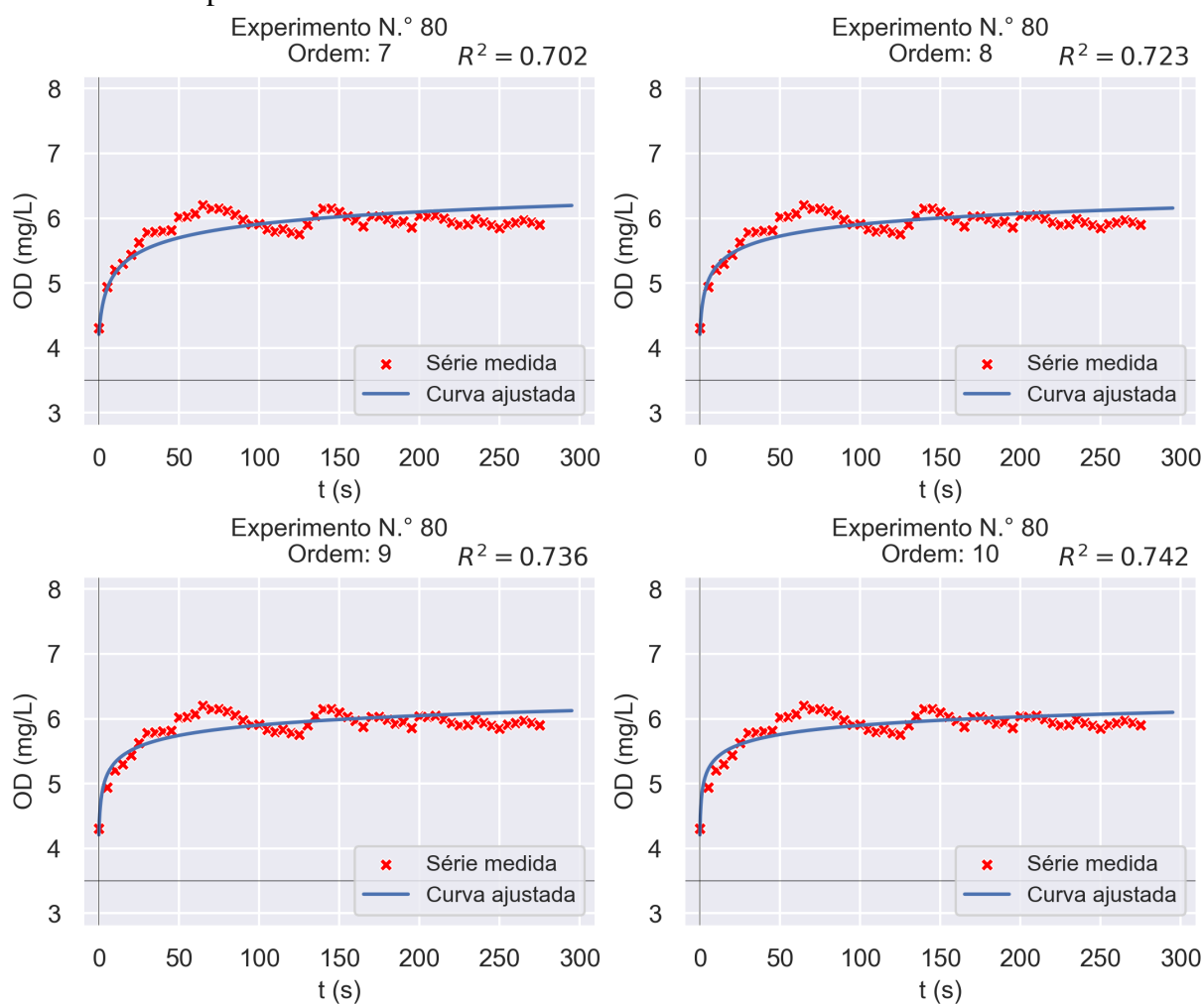
Figura 195 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 80



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

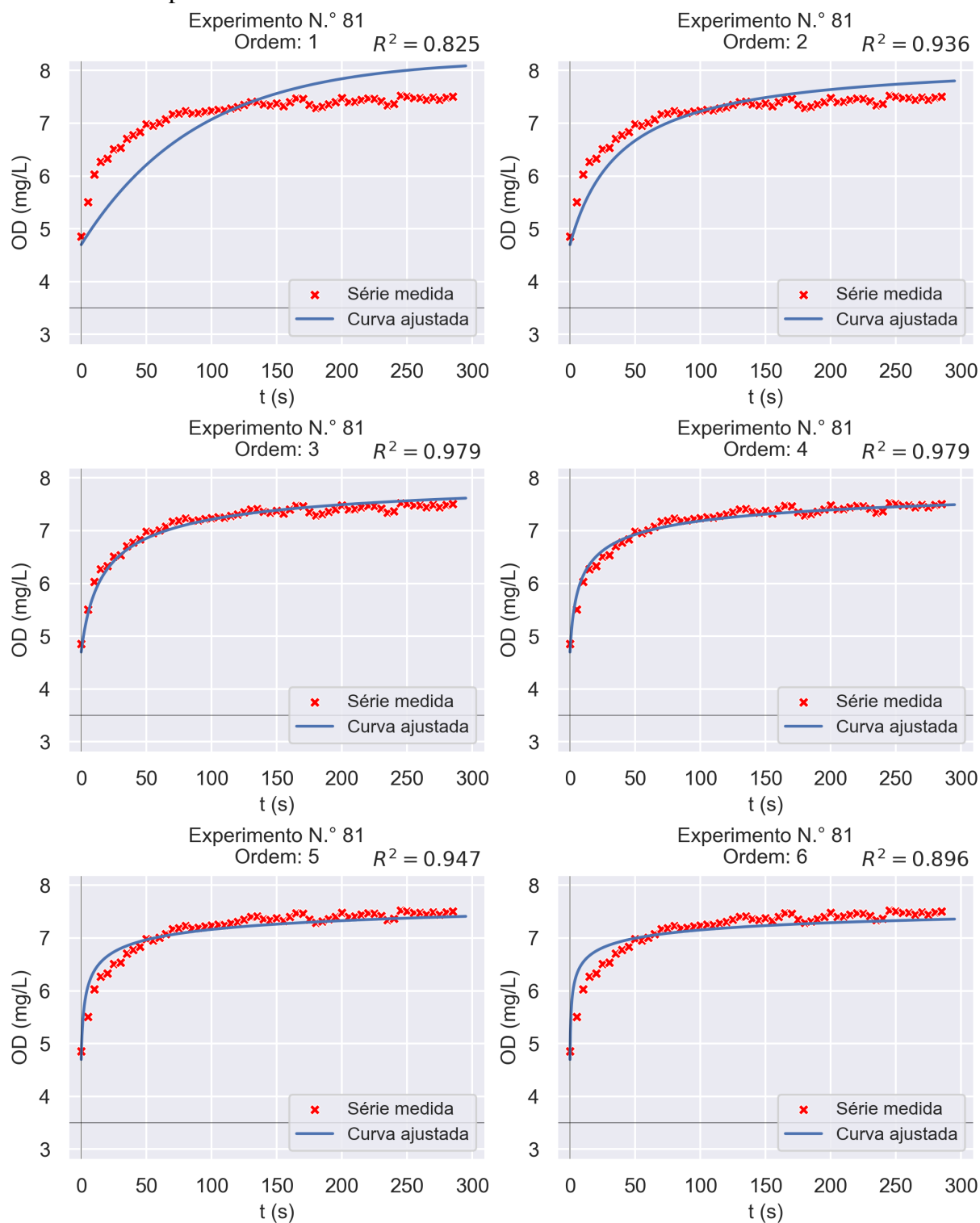
Figura 196 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 80



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

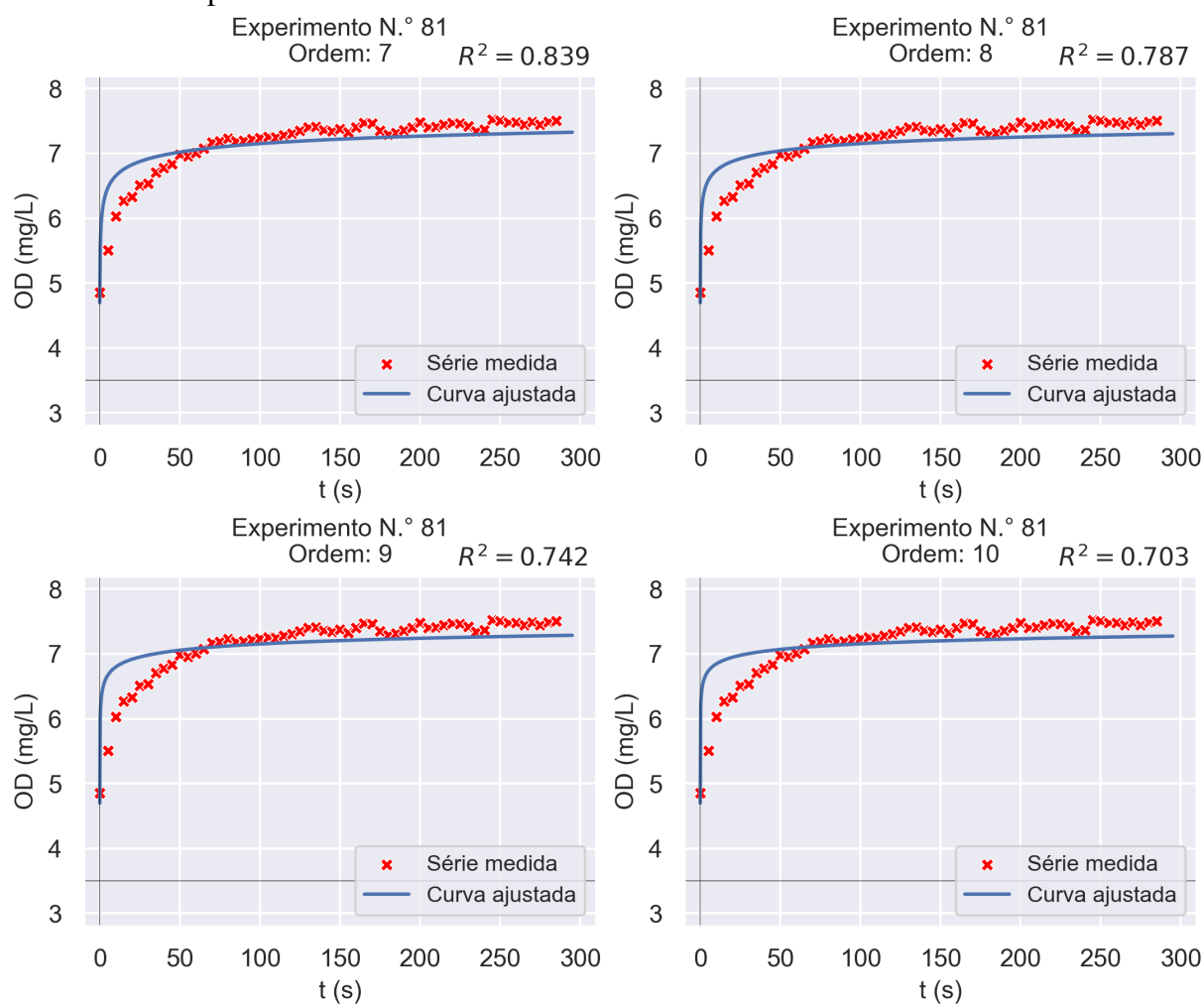
Figura 197 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 81



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

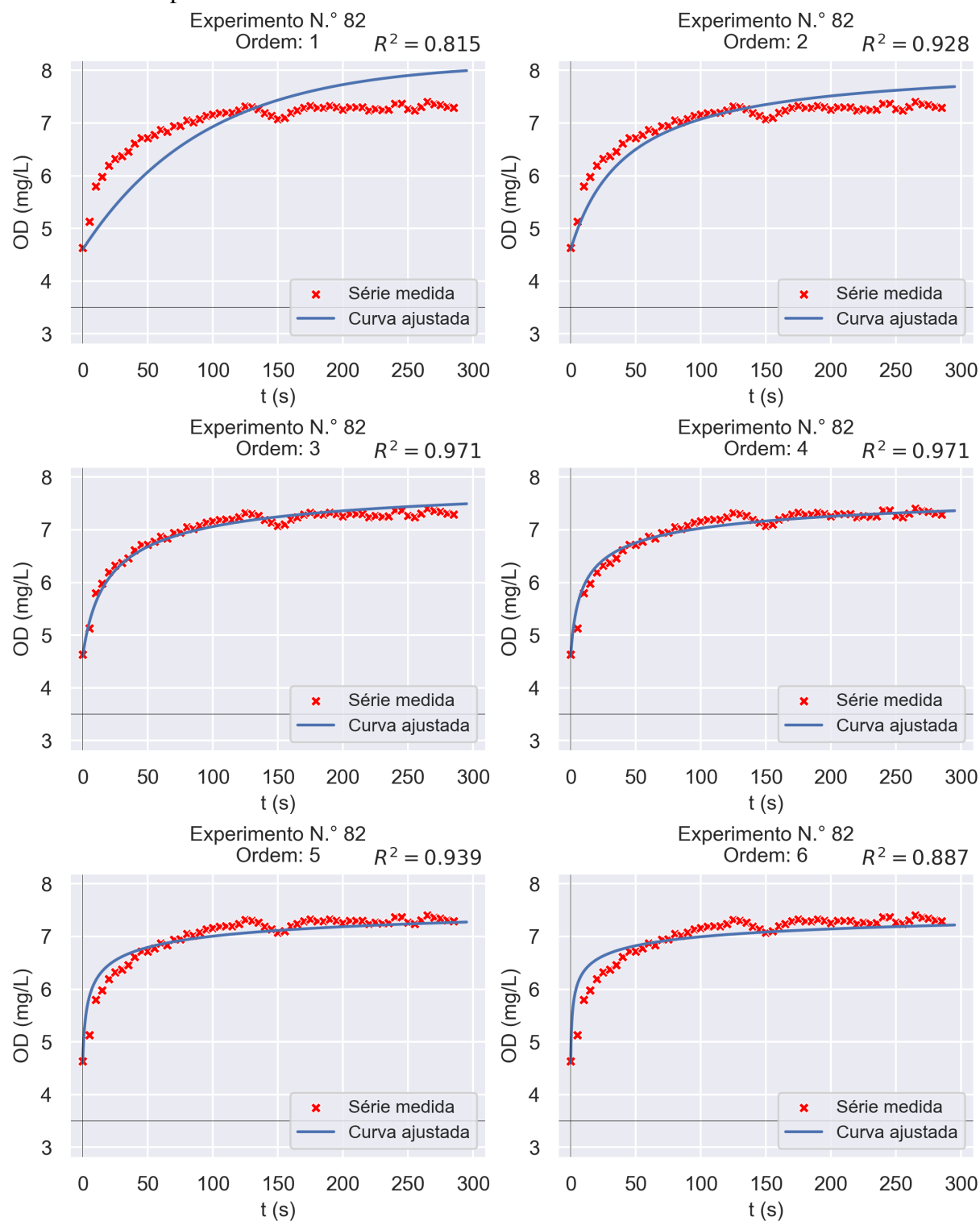
Figura 198 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 81



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 199 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 82

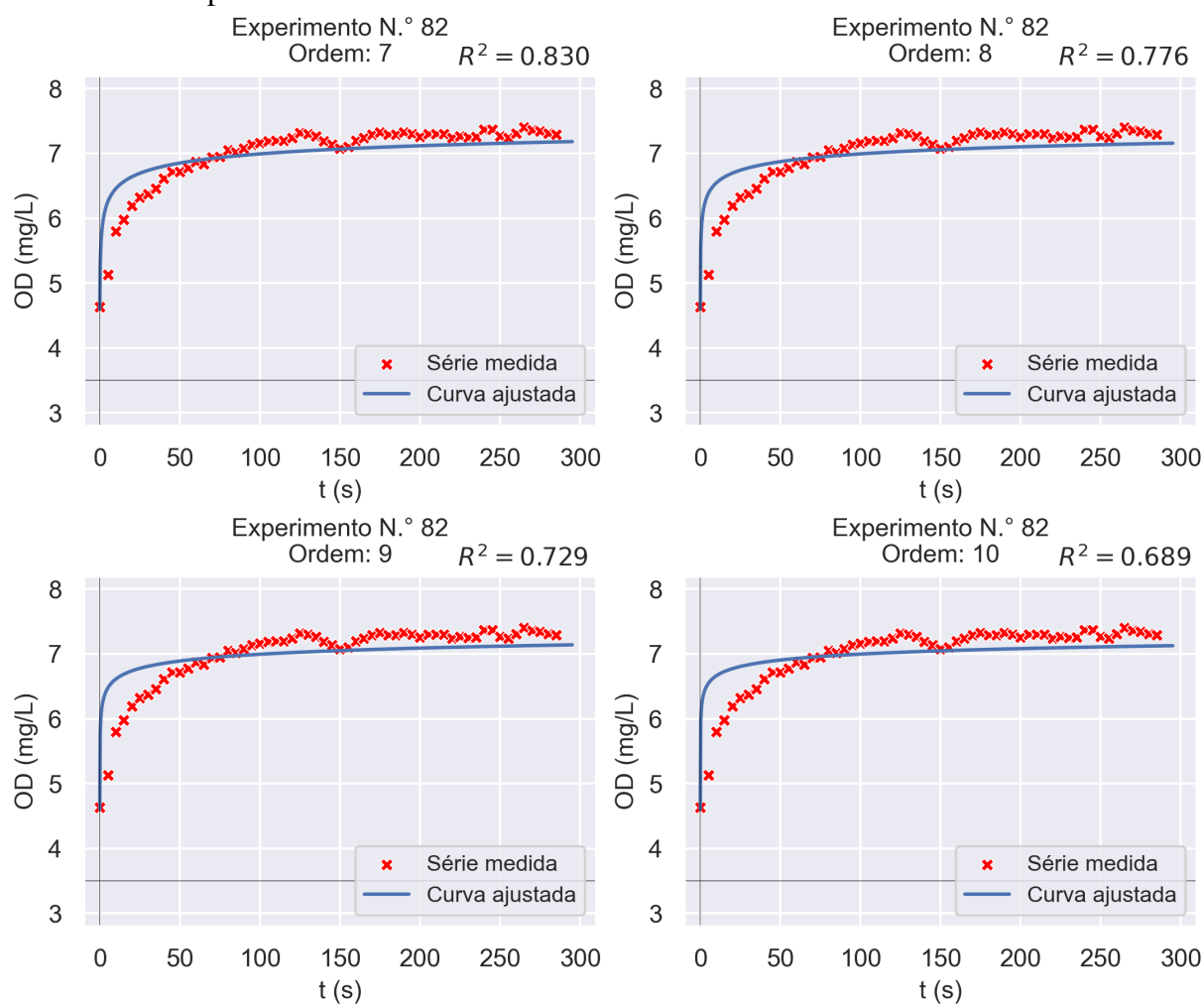


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



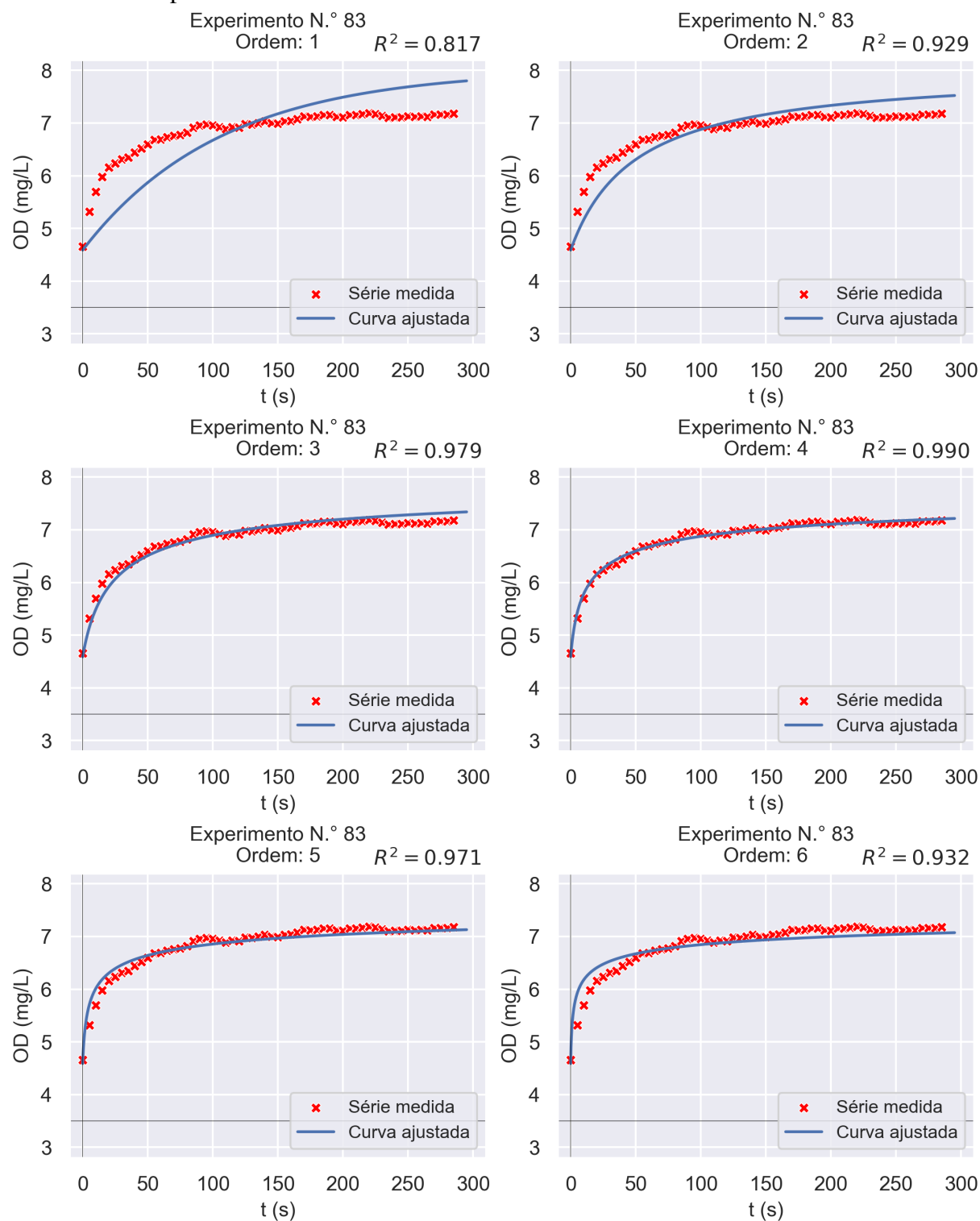
Figura 200 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 82



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

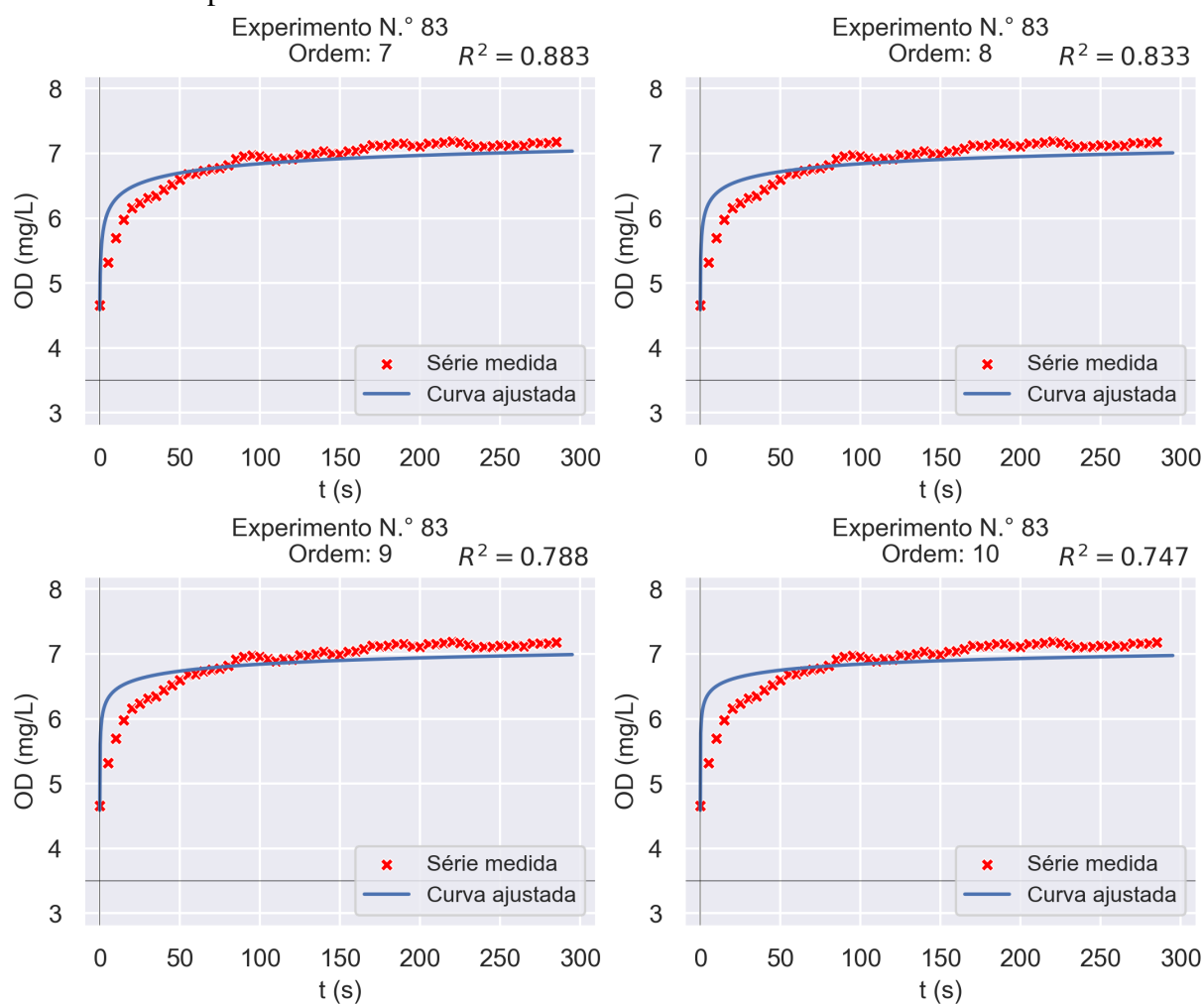
Figura 201 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 83



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

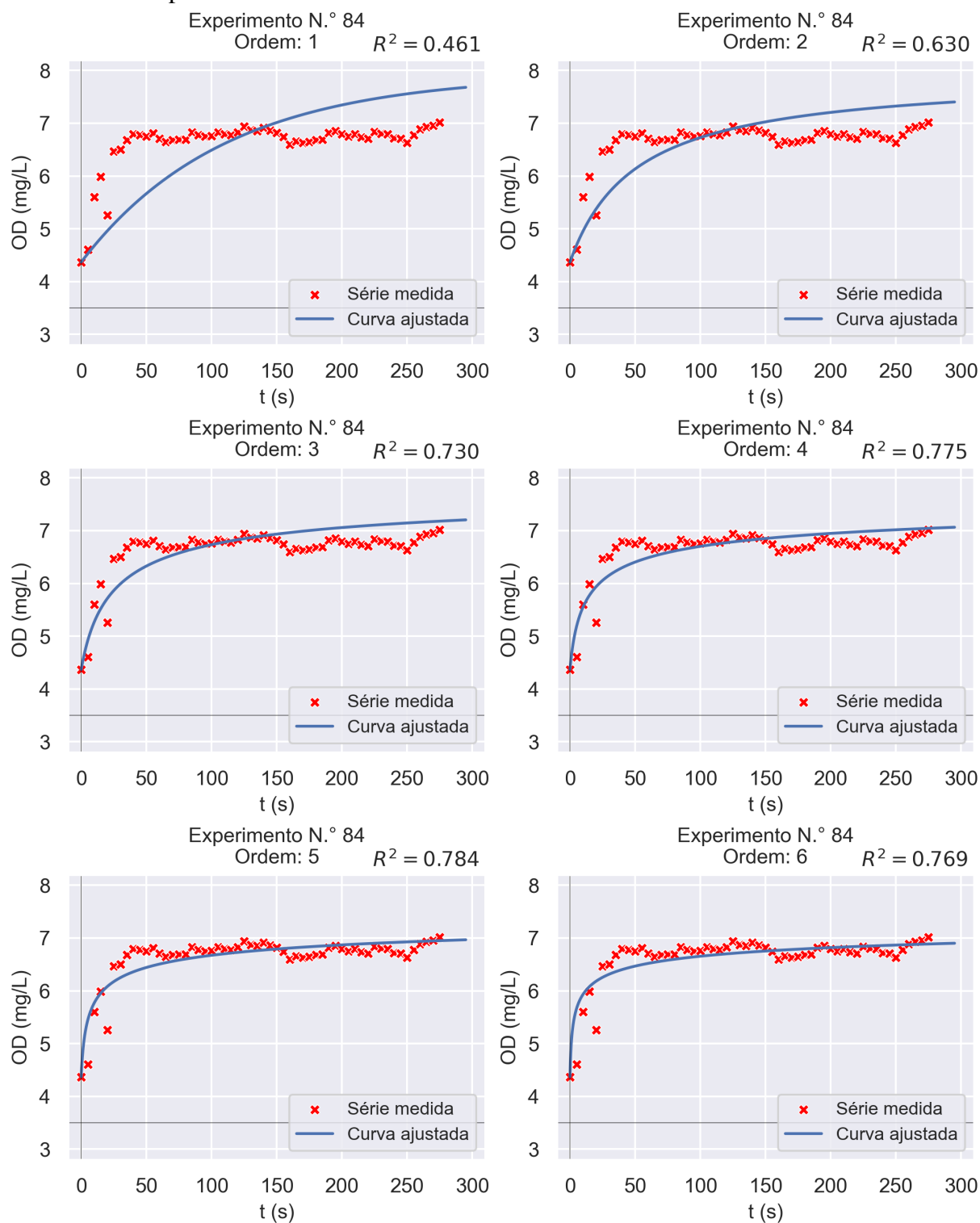
Figura 202 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 83



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

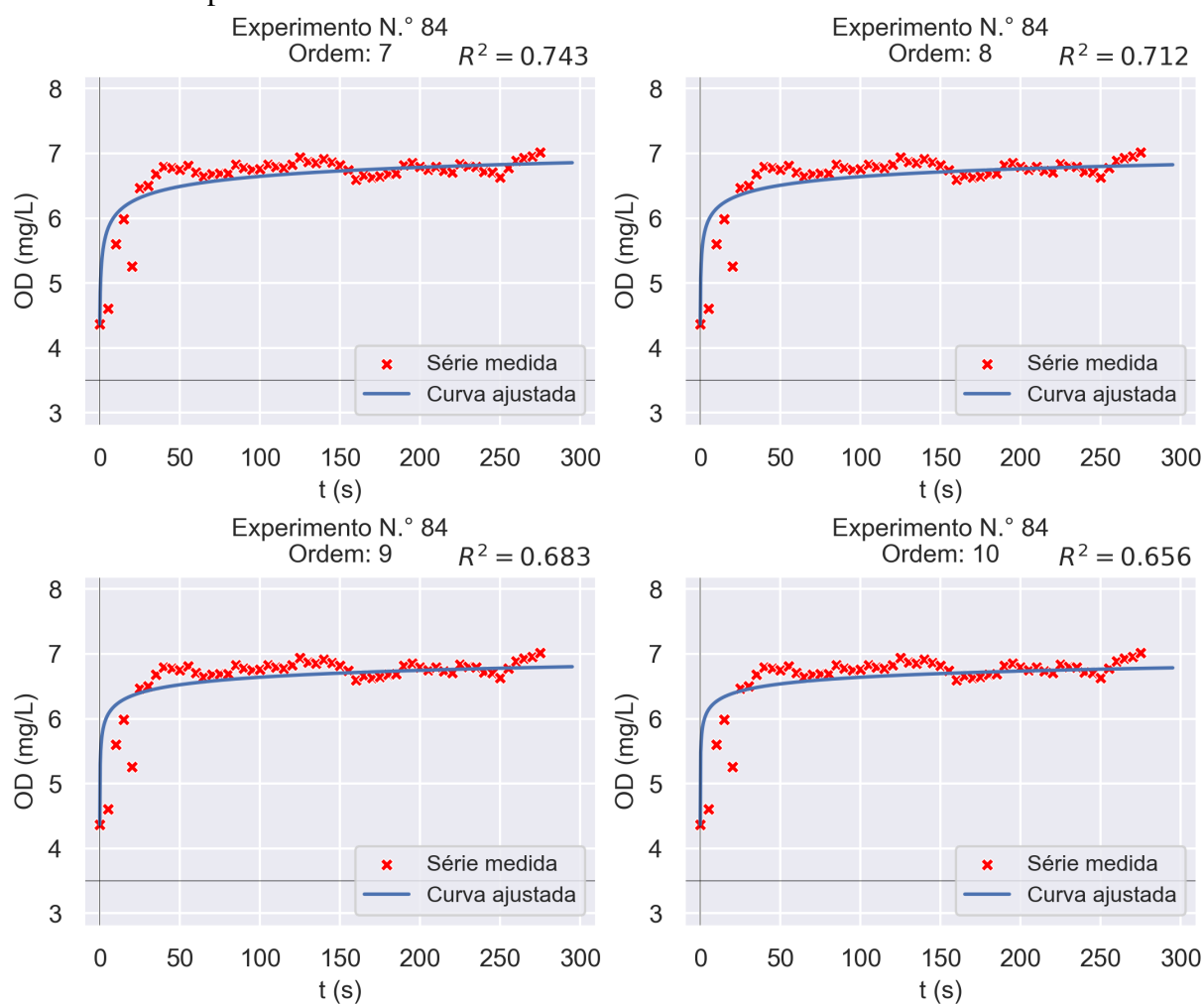
Figura 203 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 84



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

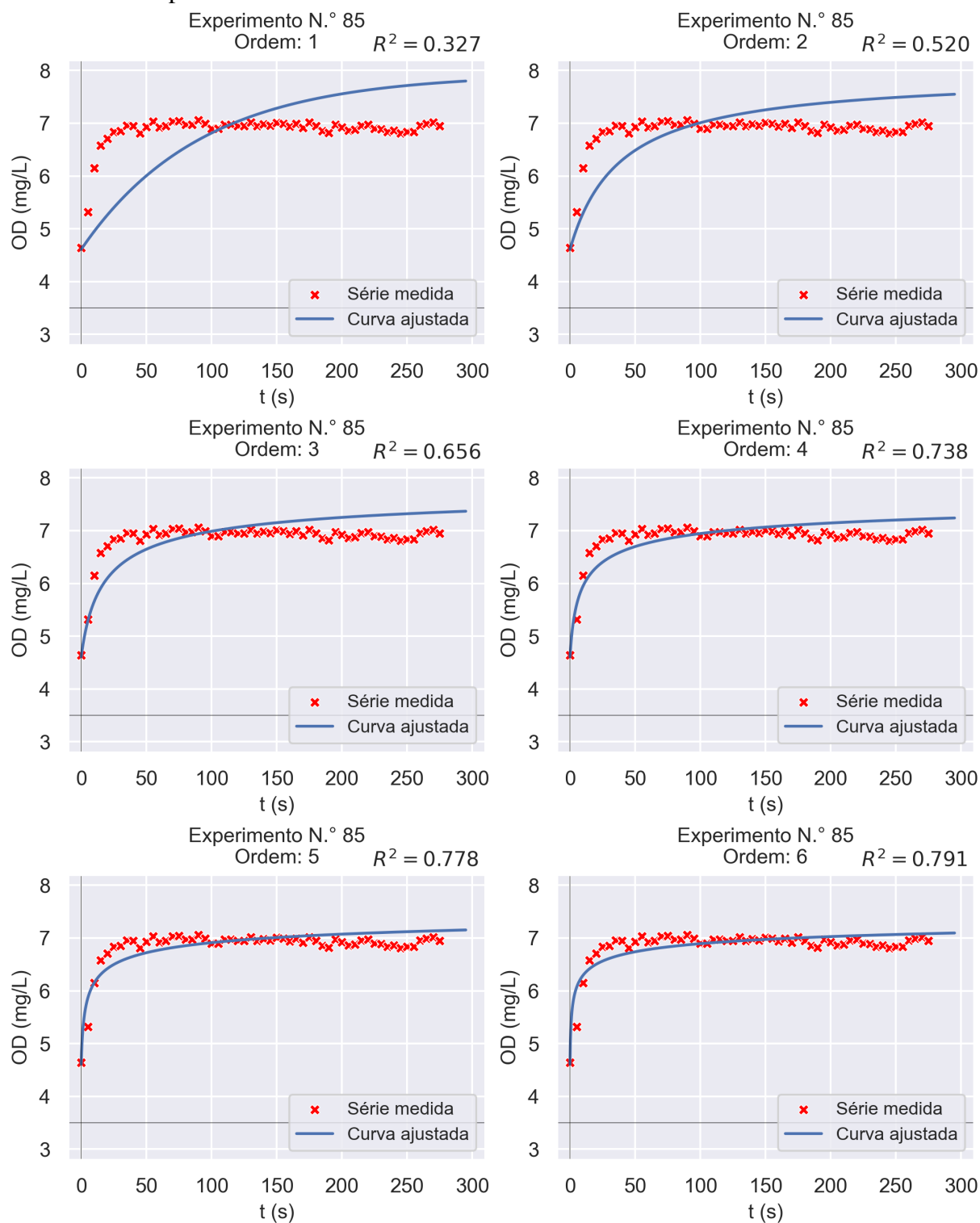
Figura 204 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 84



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

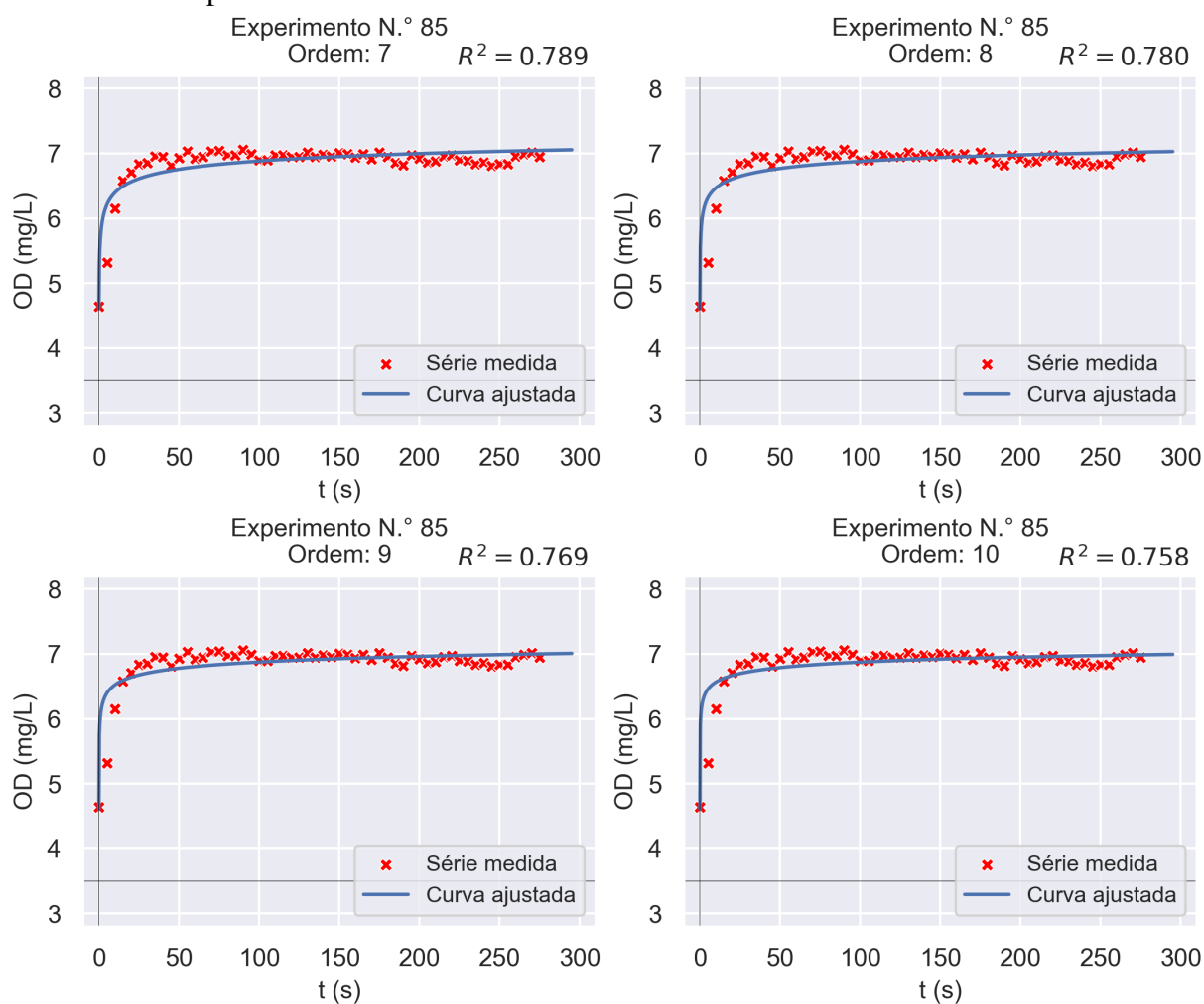
Figura 205 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 85



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

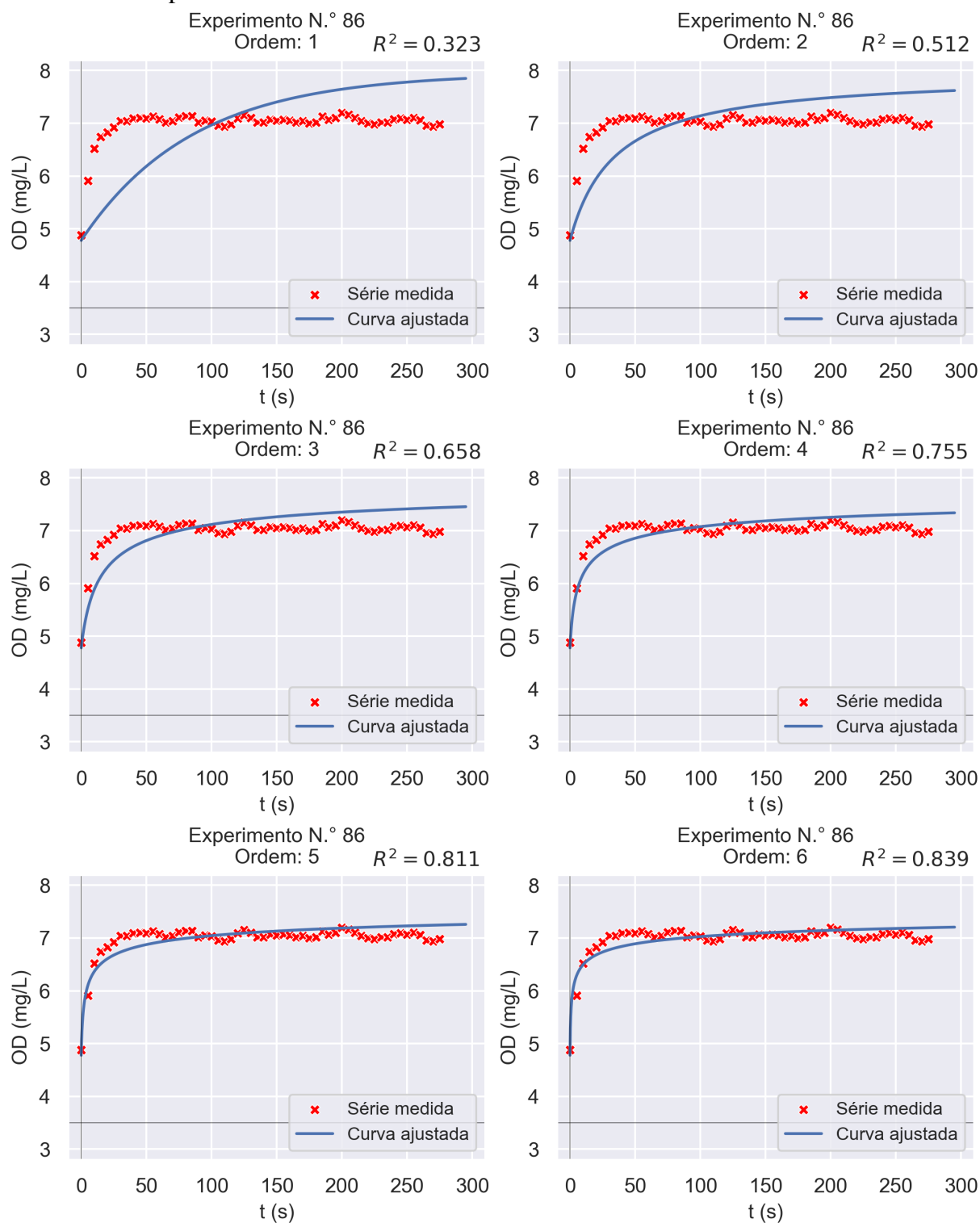
Figura 206 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 85



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 207 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 86

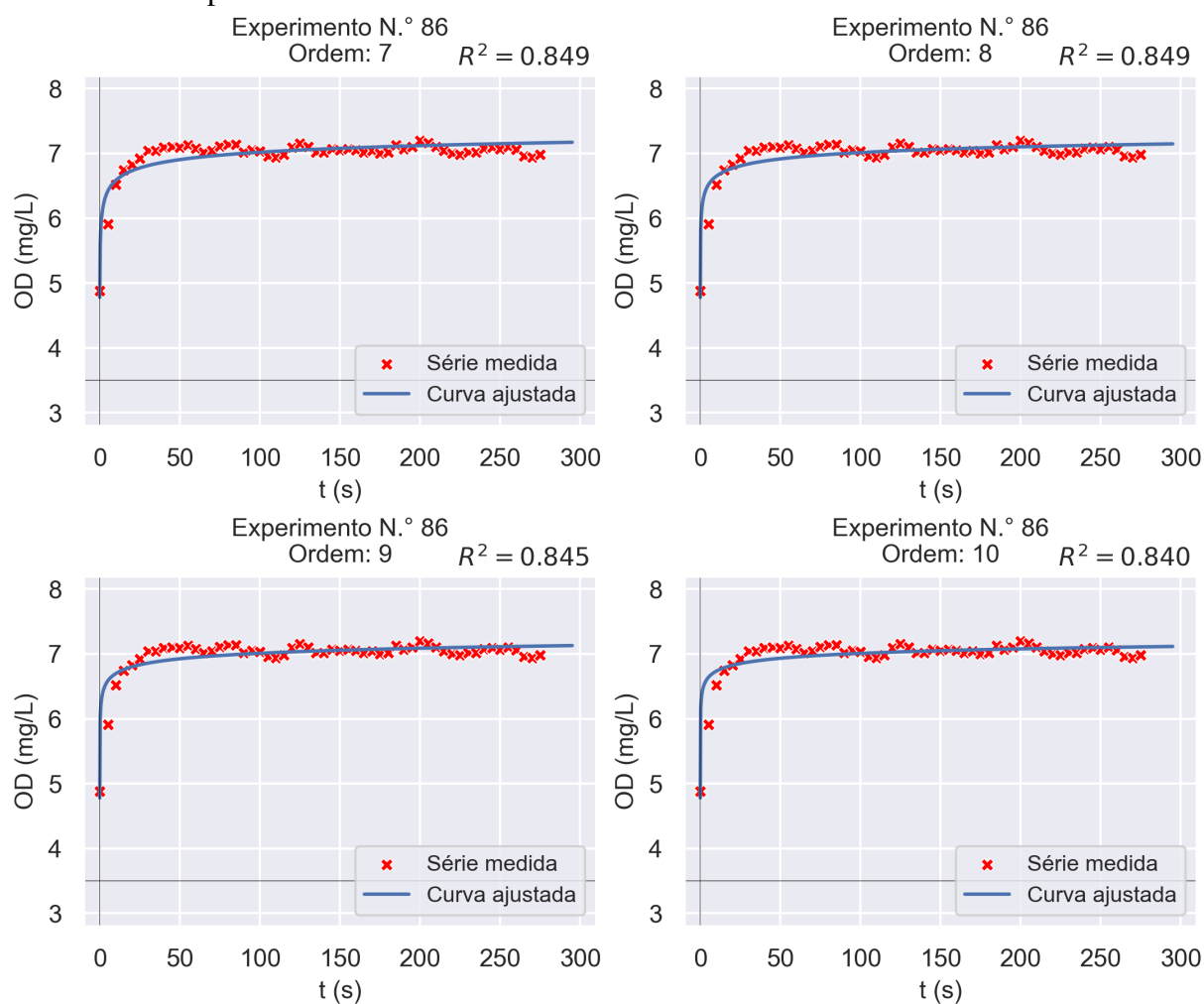


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



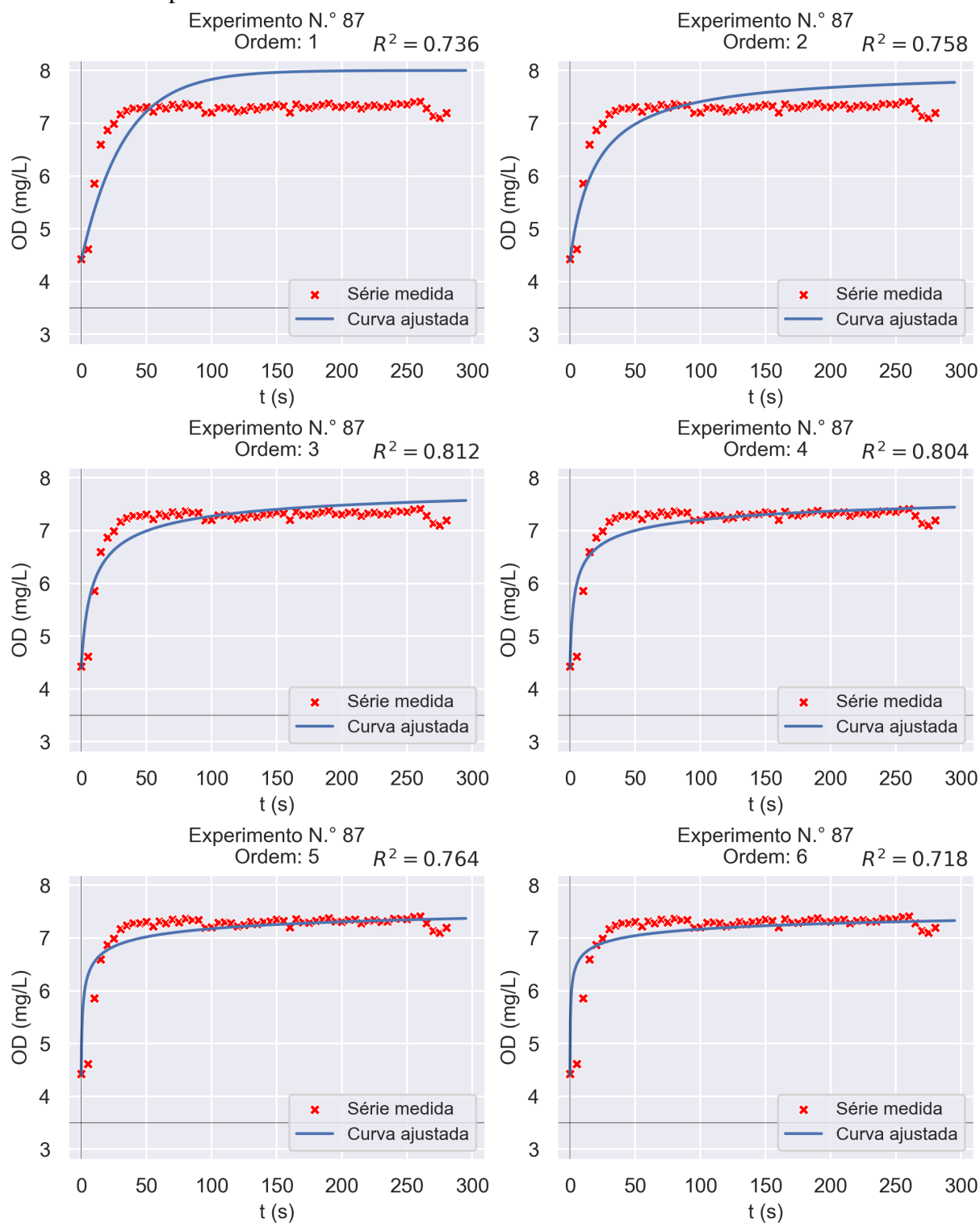
Figura 208 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 86



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

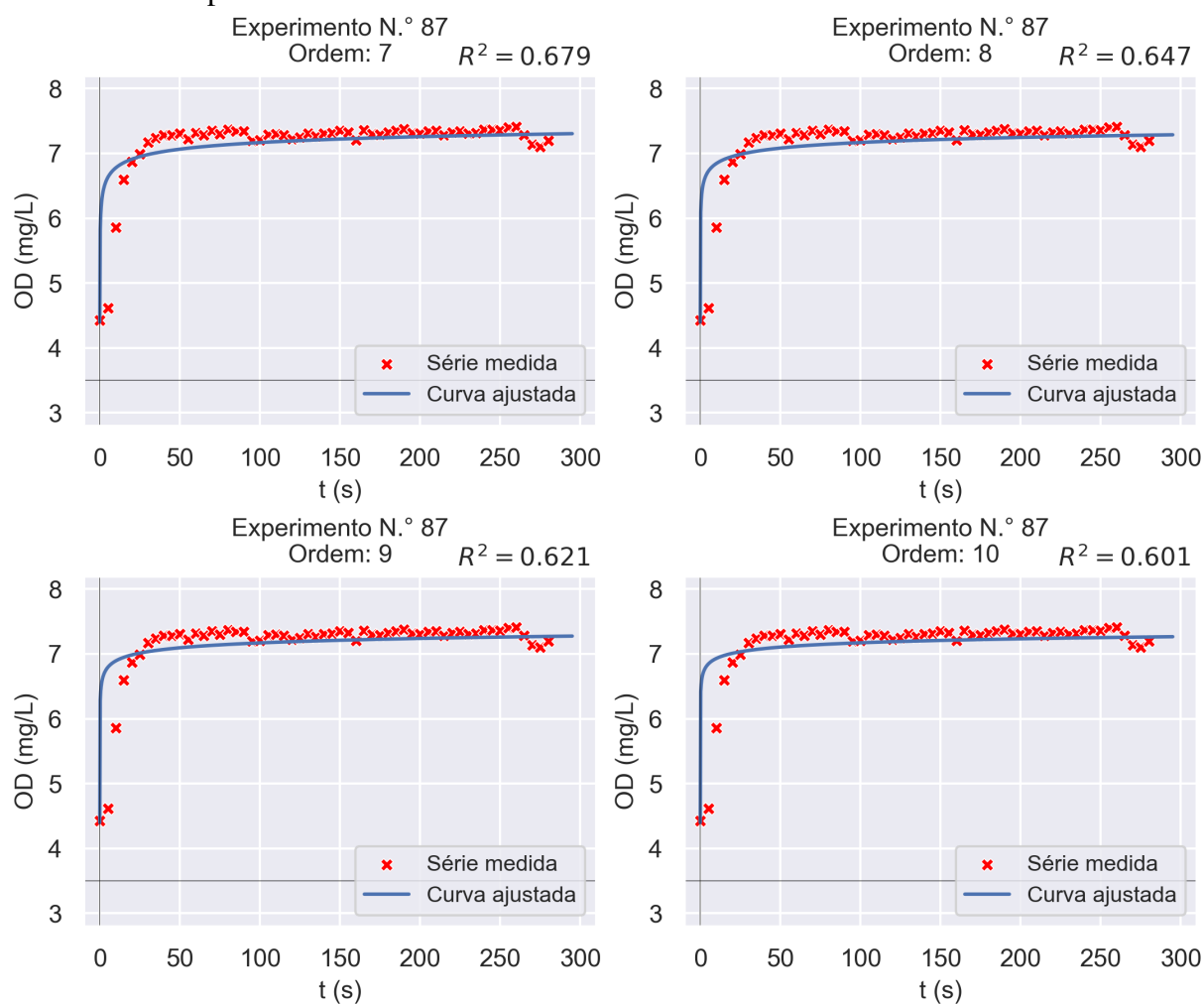
Figura 209 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 87



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

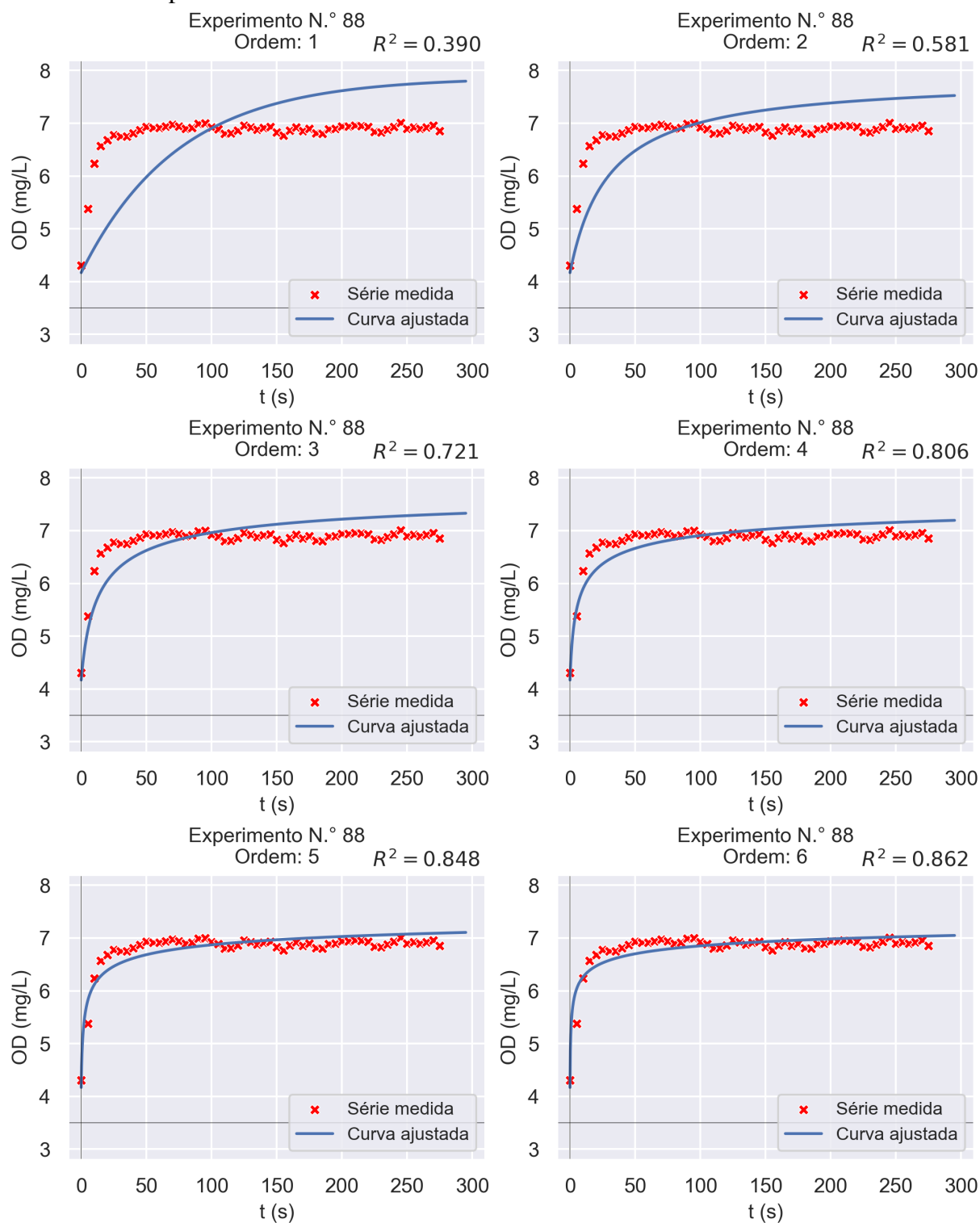
Figura 210 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 87



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

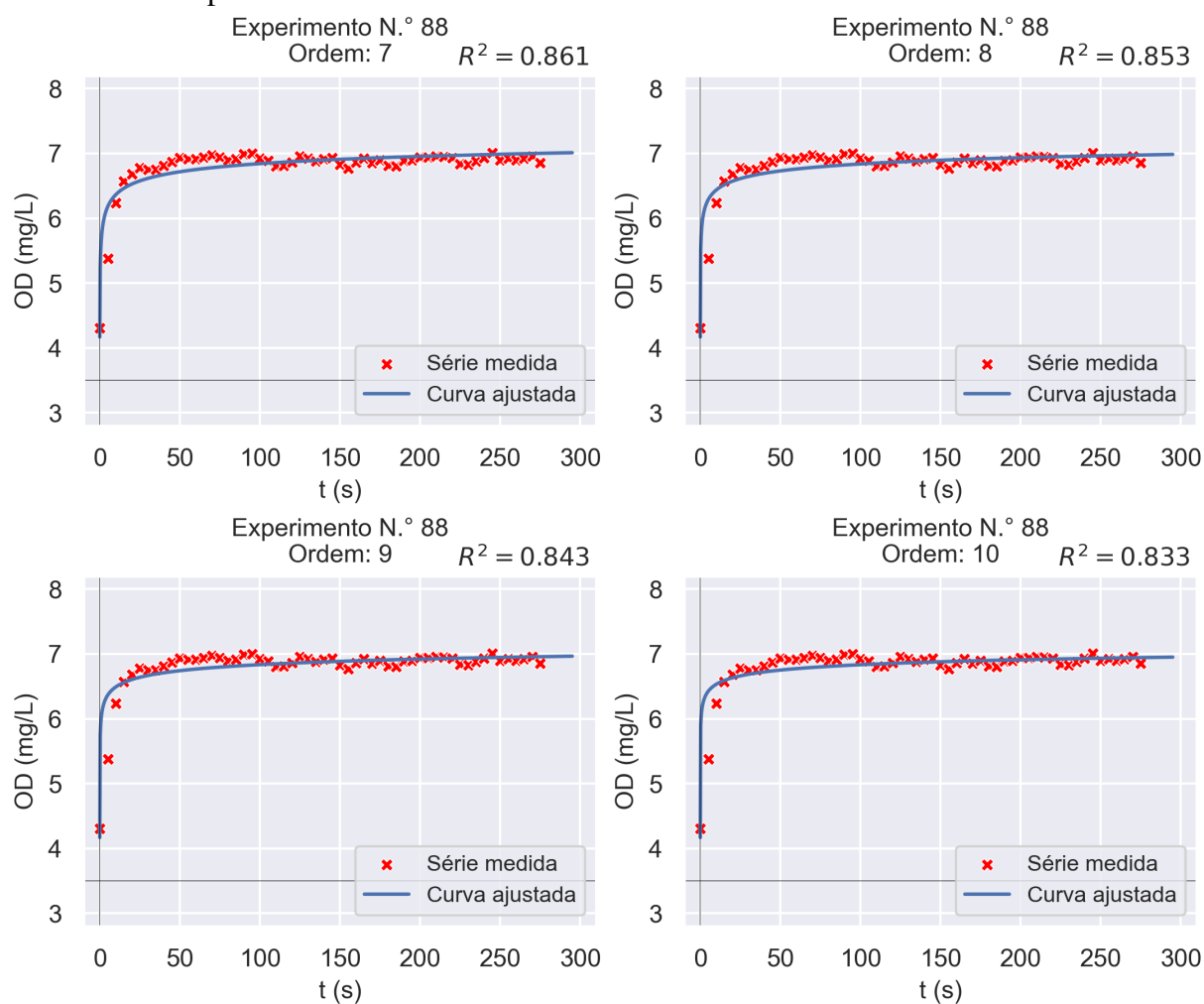
Figura 211 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 88



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

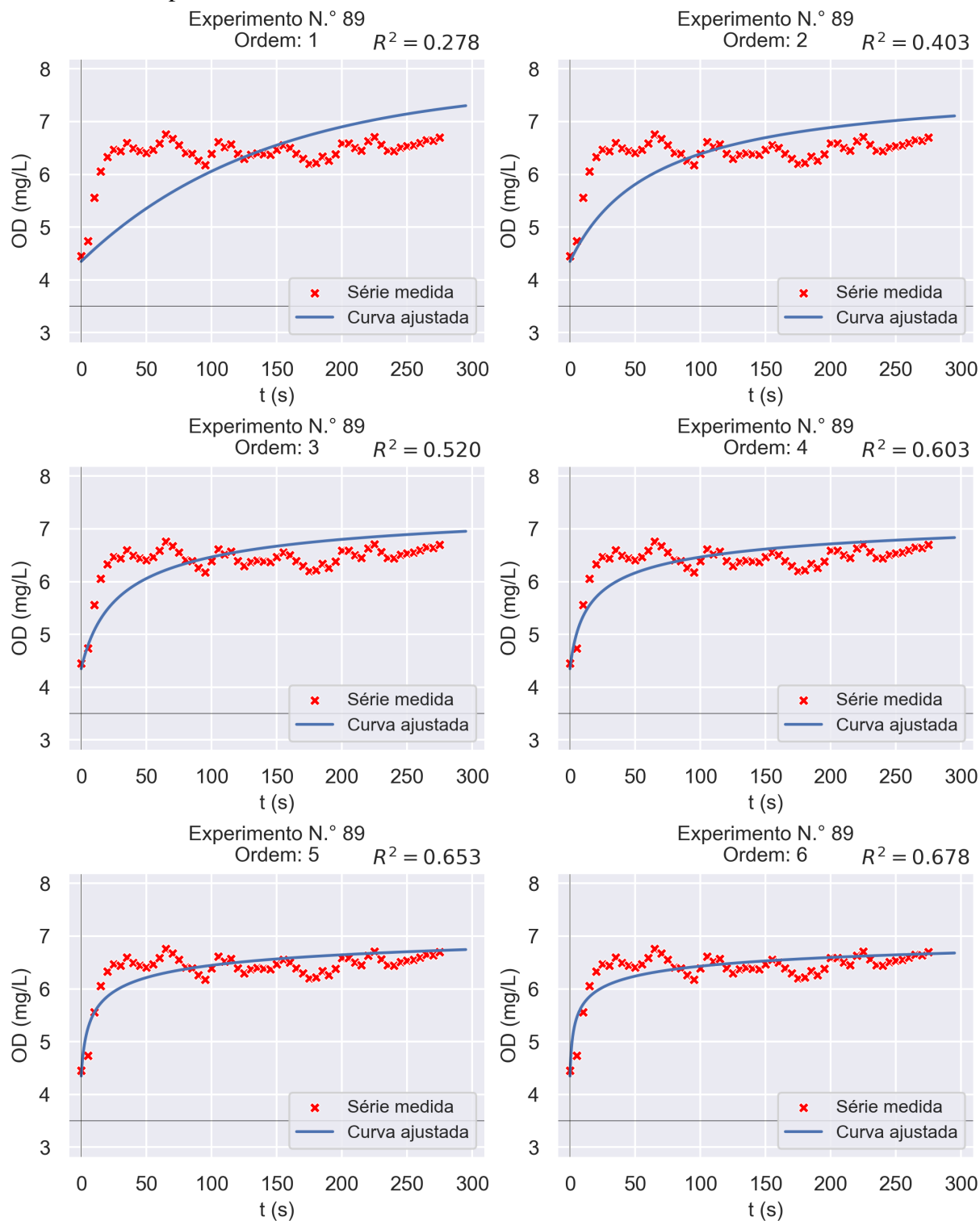
Figura 212 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 88



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

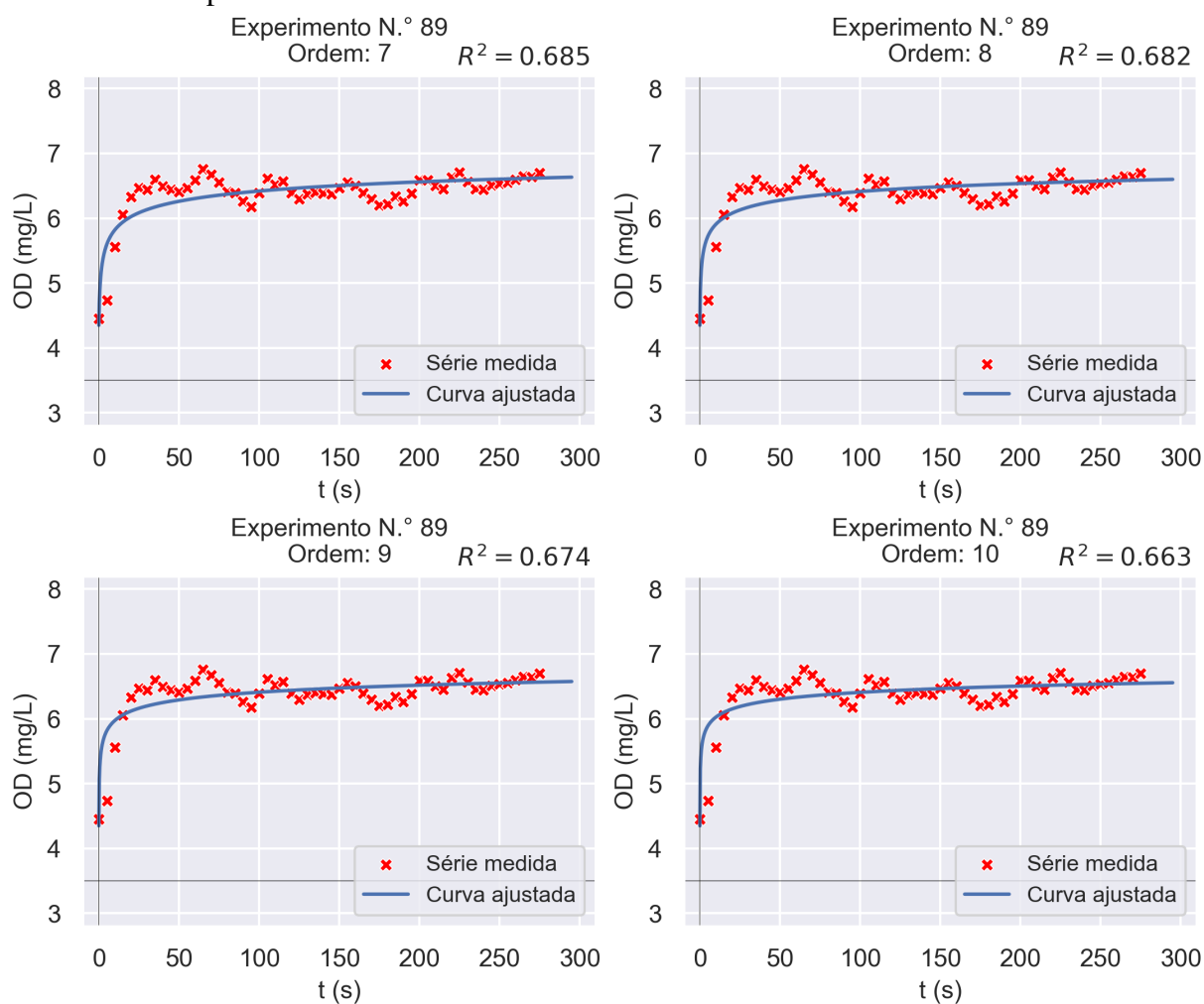
Figura 213 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 89



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

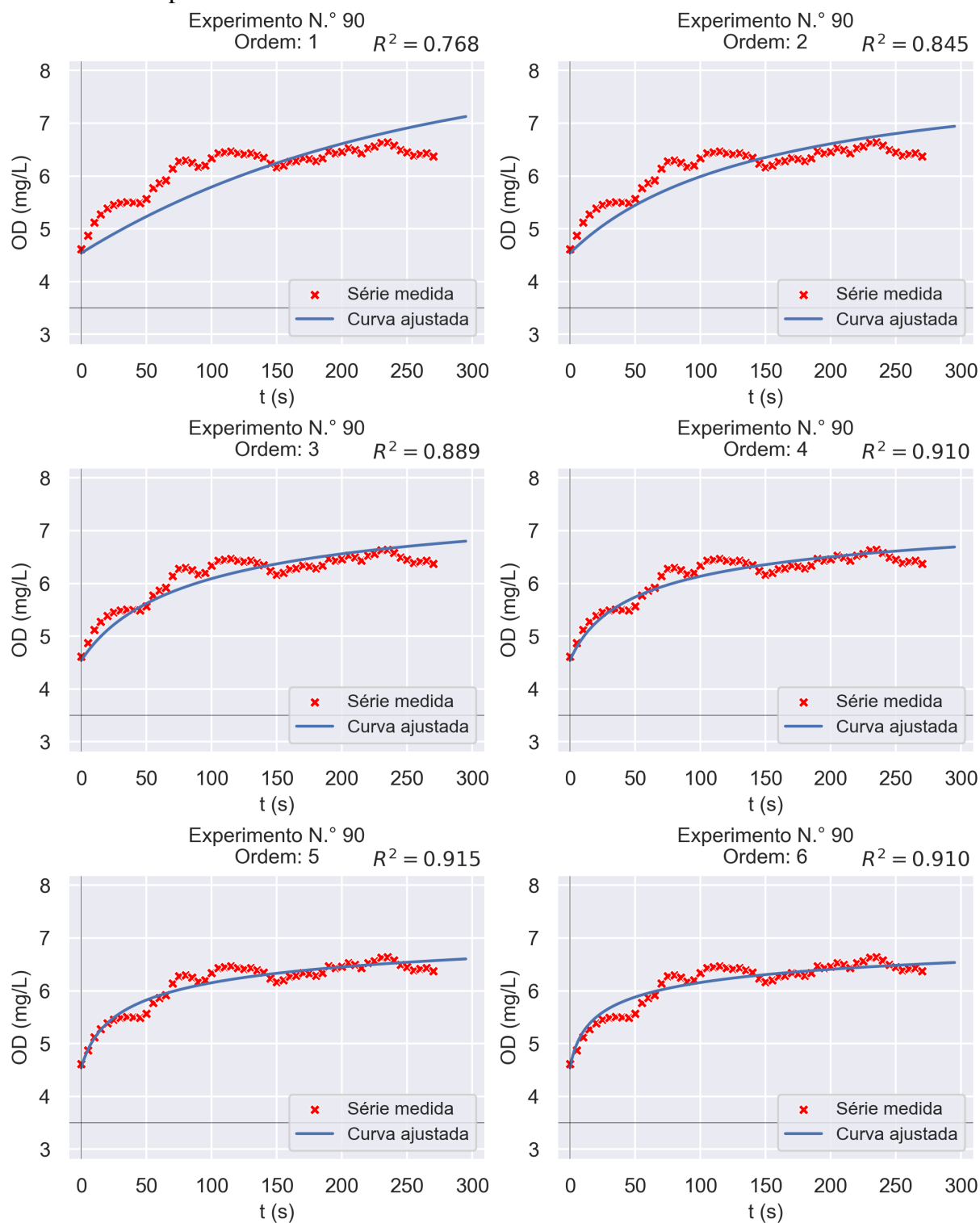
Figura 214 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 89



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 215 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 90

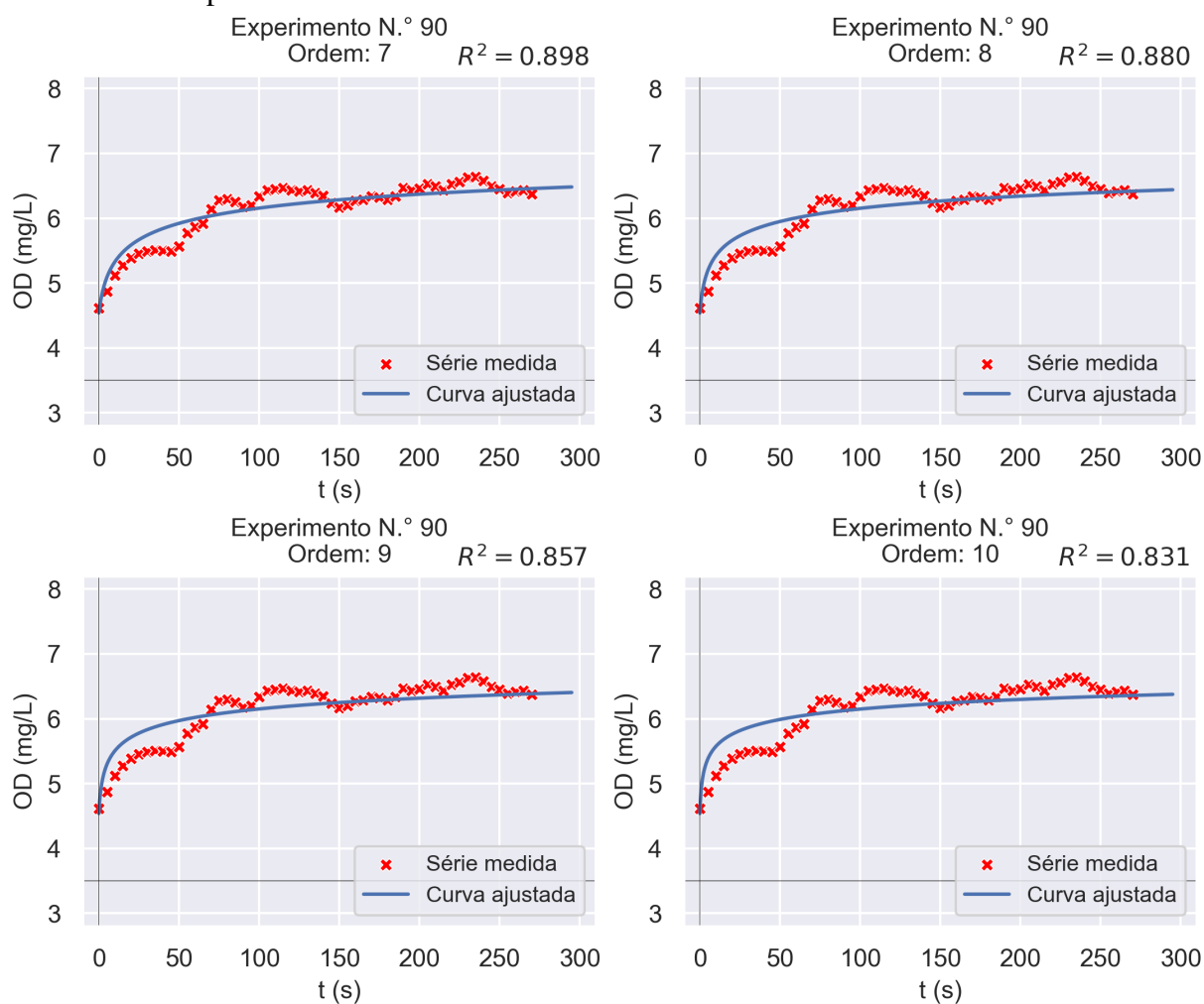


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



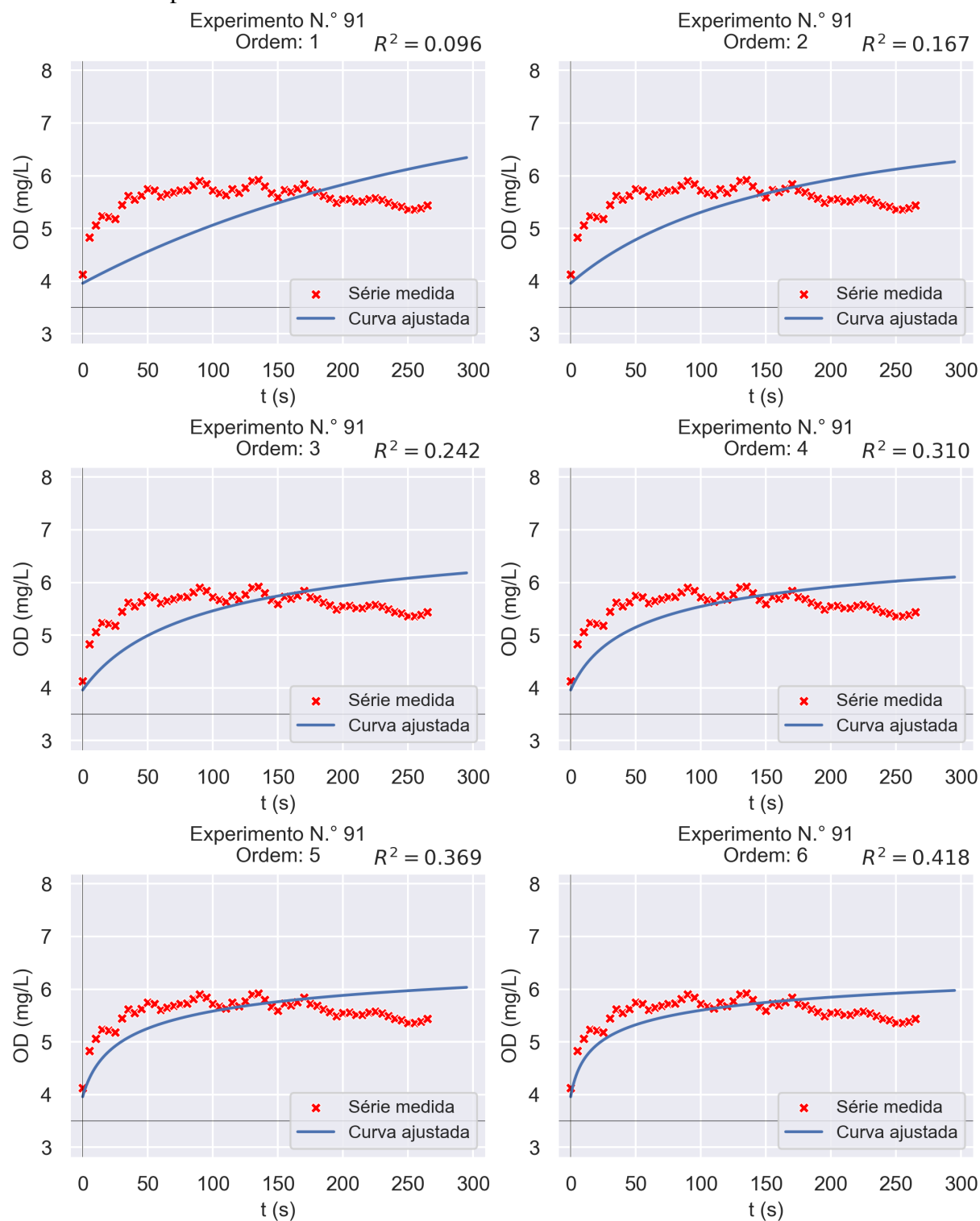
Figura 216 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 90



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

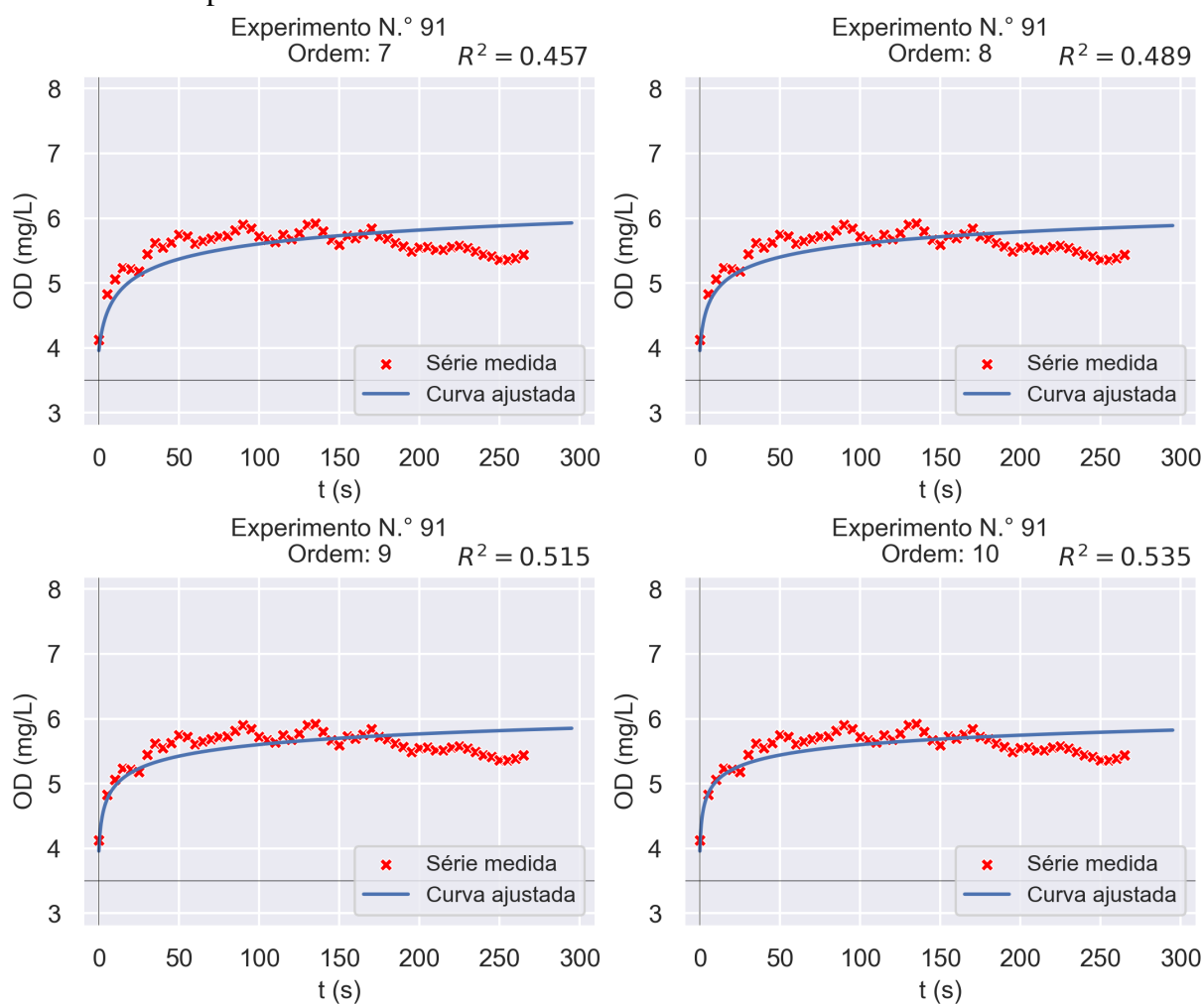
Figura 217 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 91



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

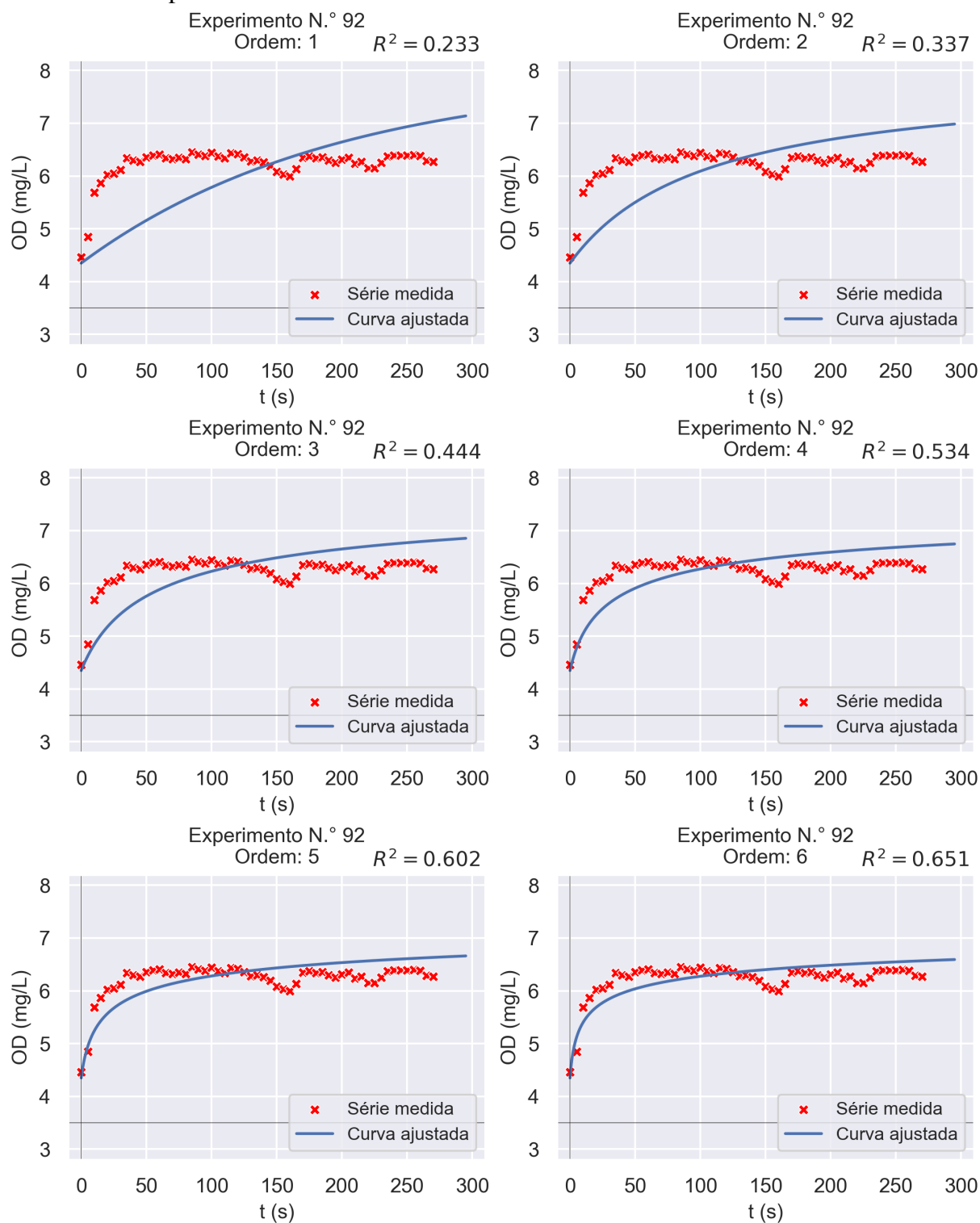
Figura 218 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 91



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

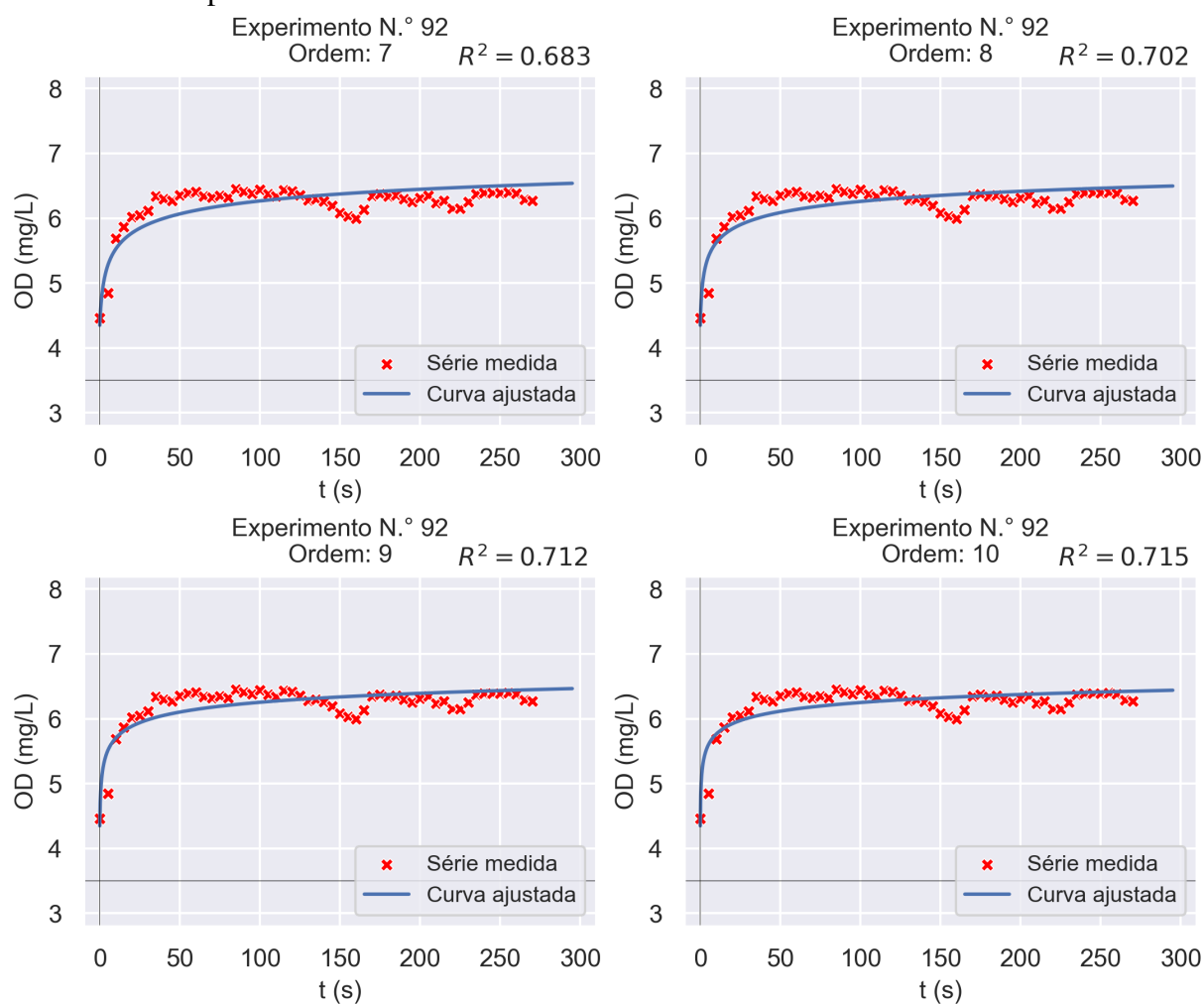
Figura 219 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 92



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

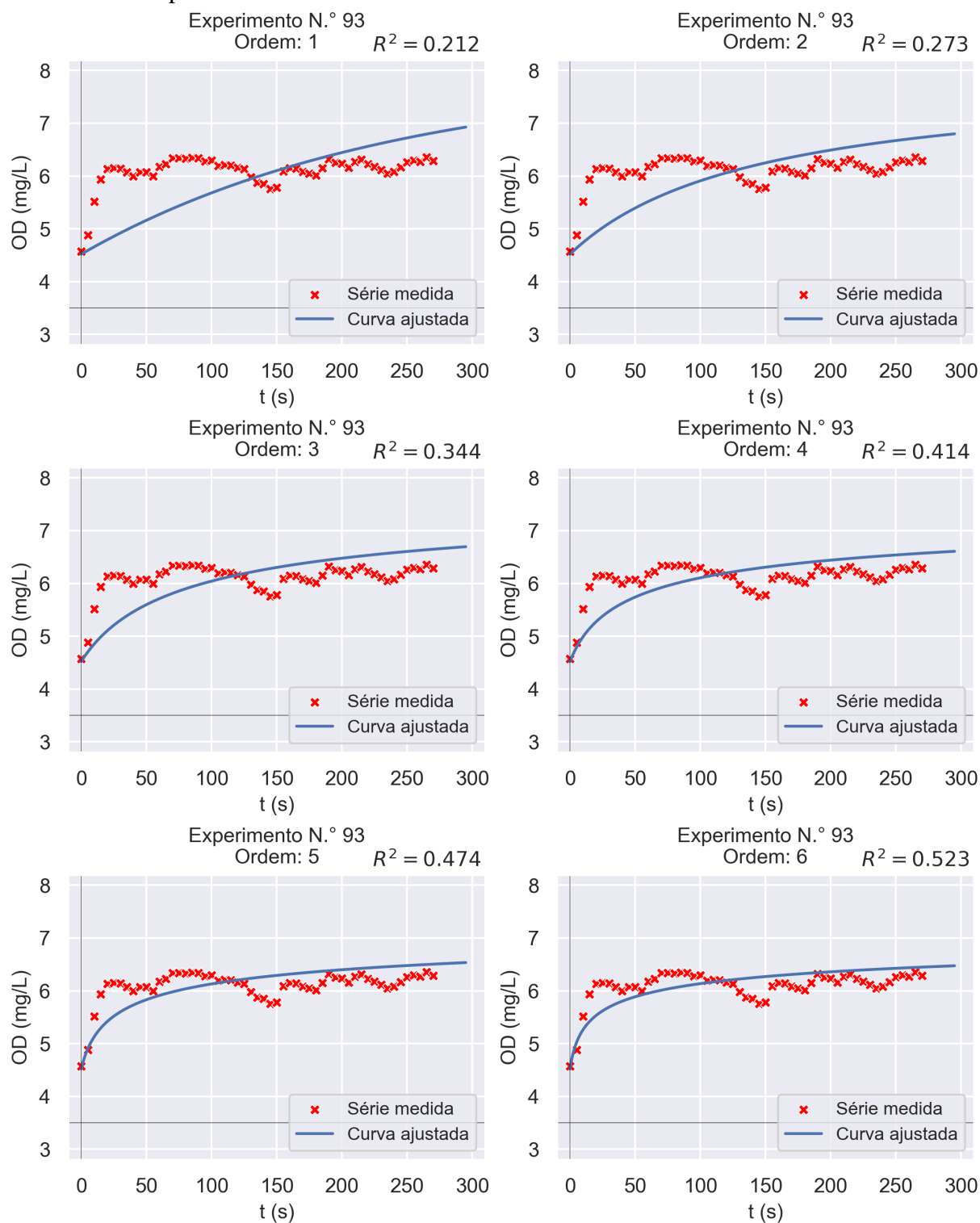
Figura 220 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 92



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

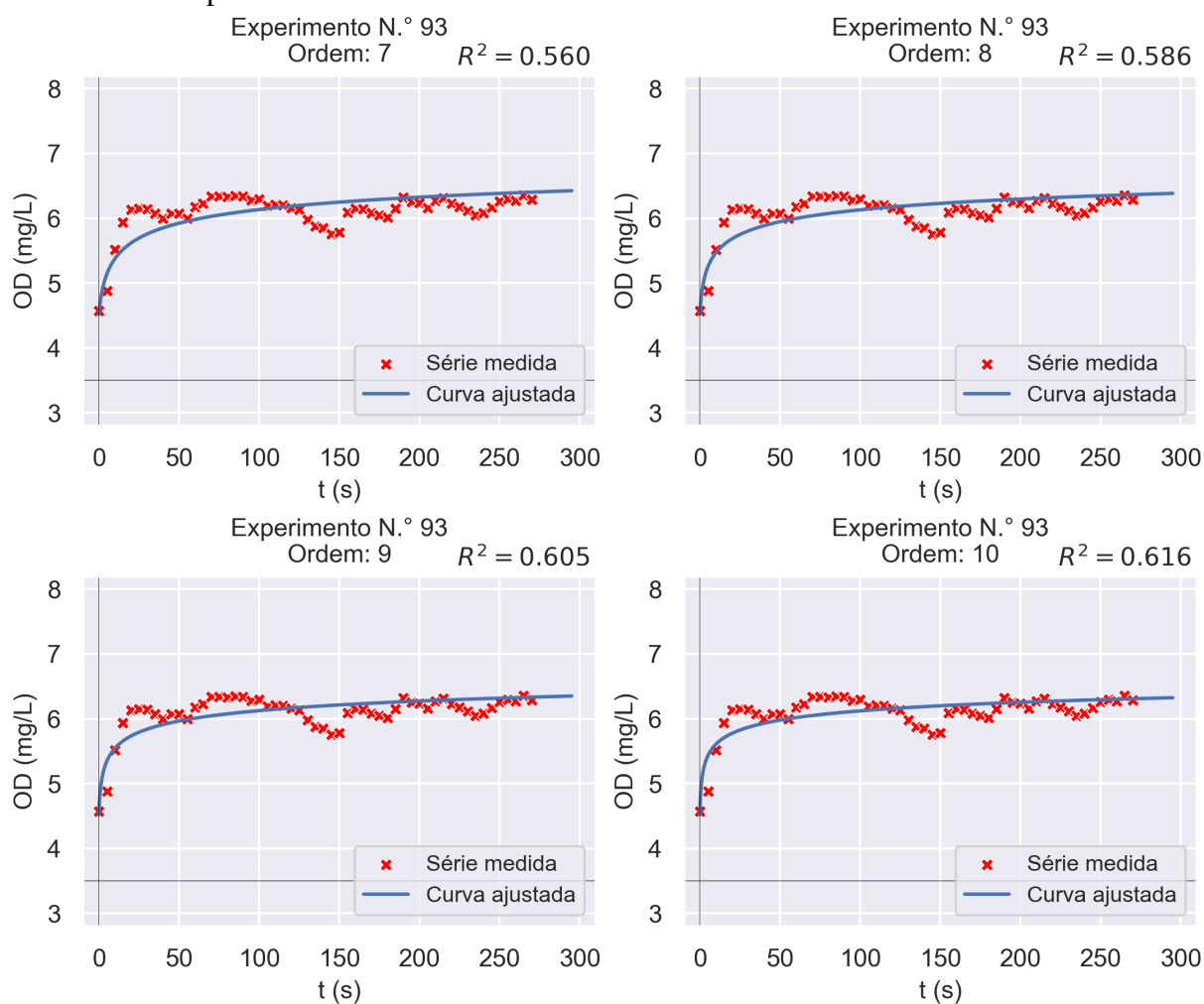
Figura 221 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 93



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

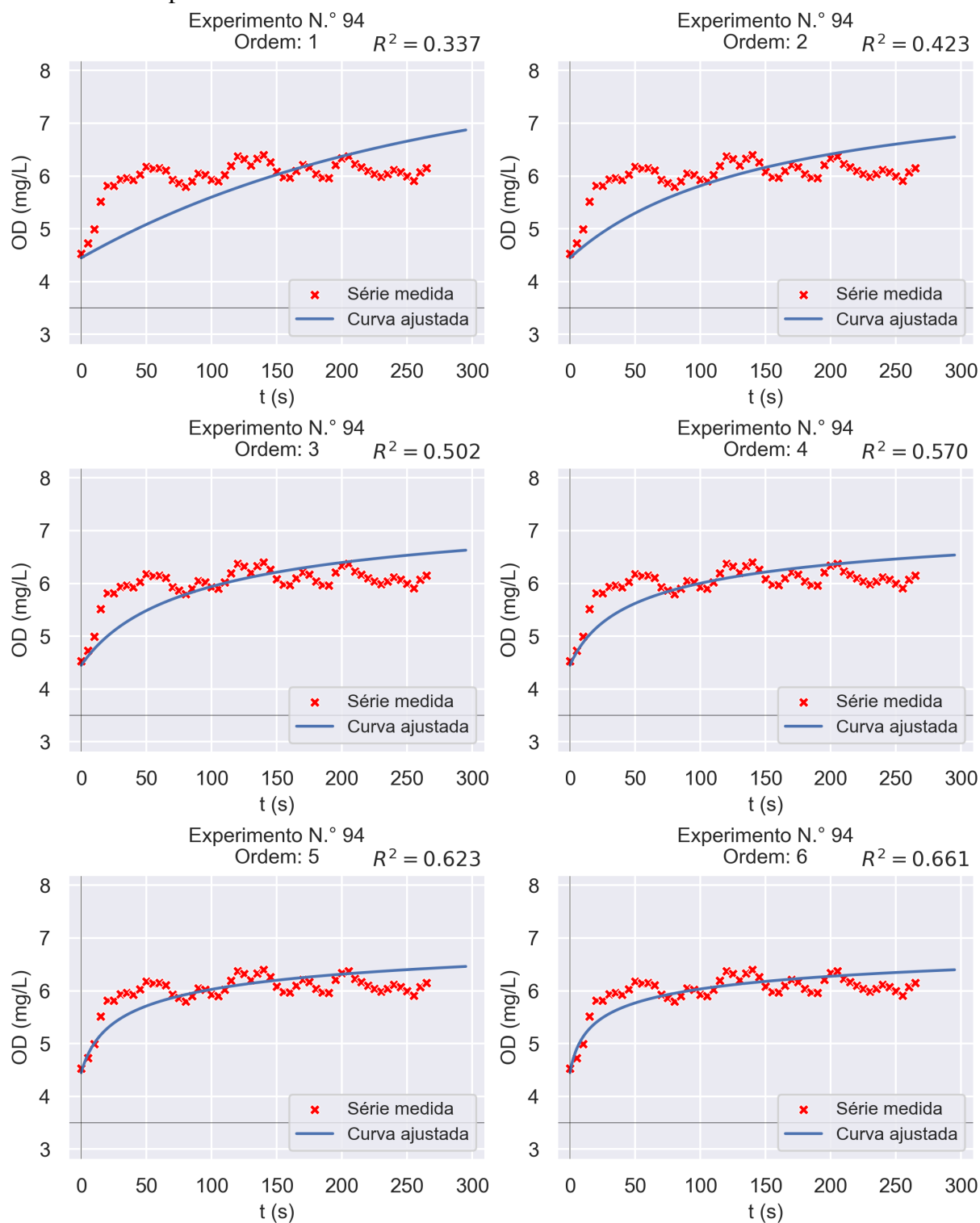
Figura 222 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 93



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 223 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 94

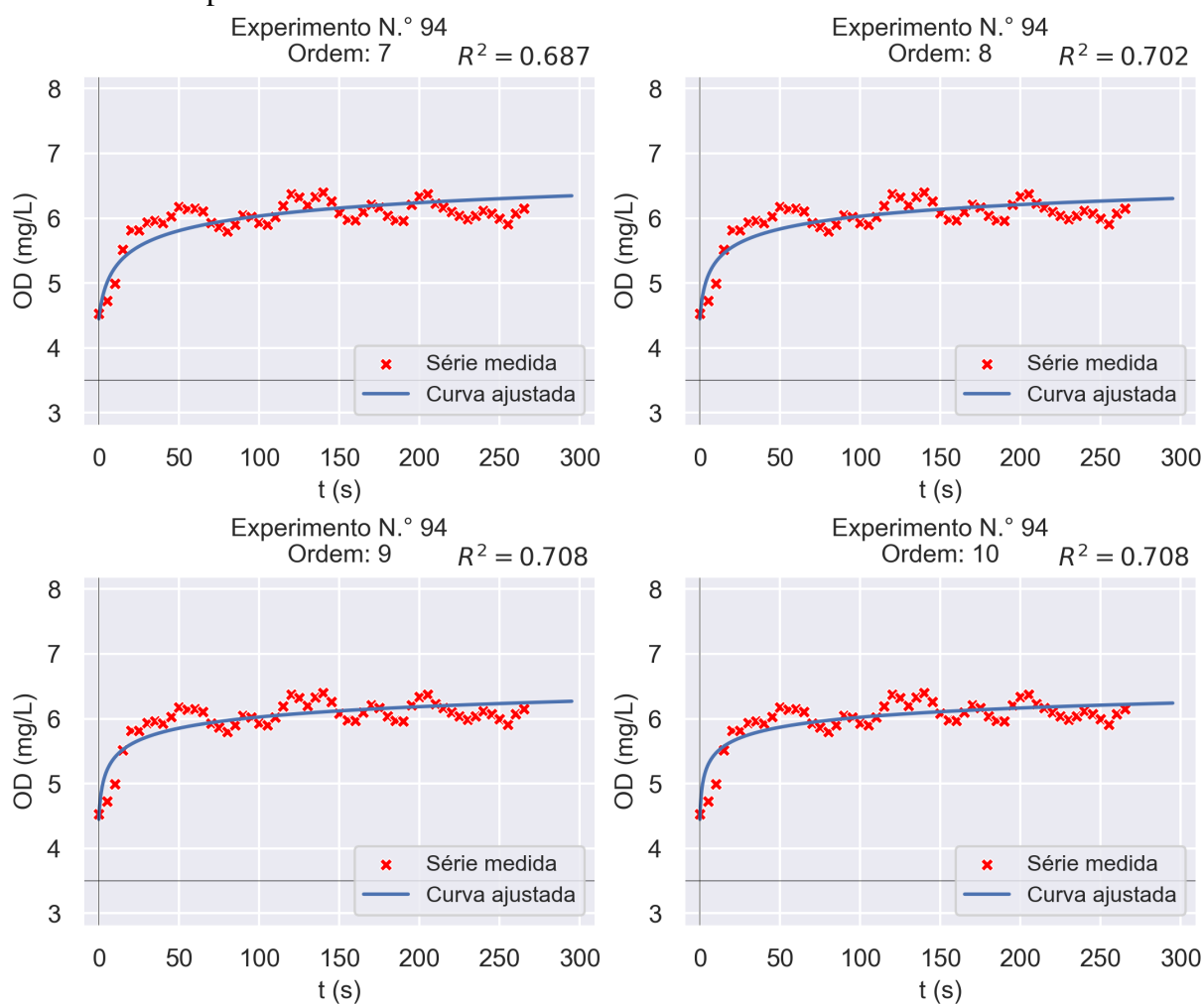


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



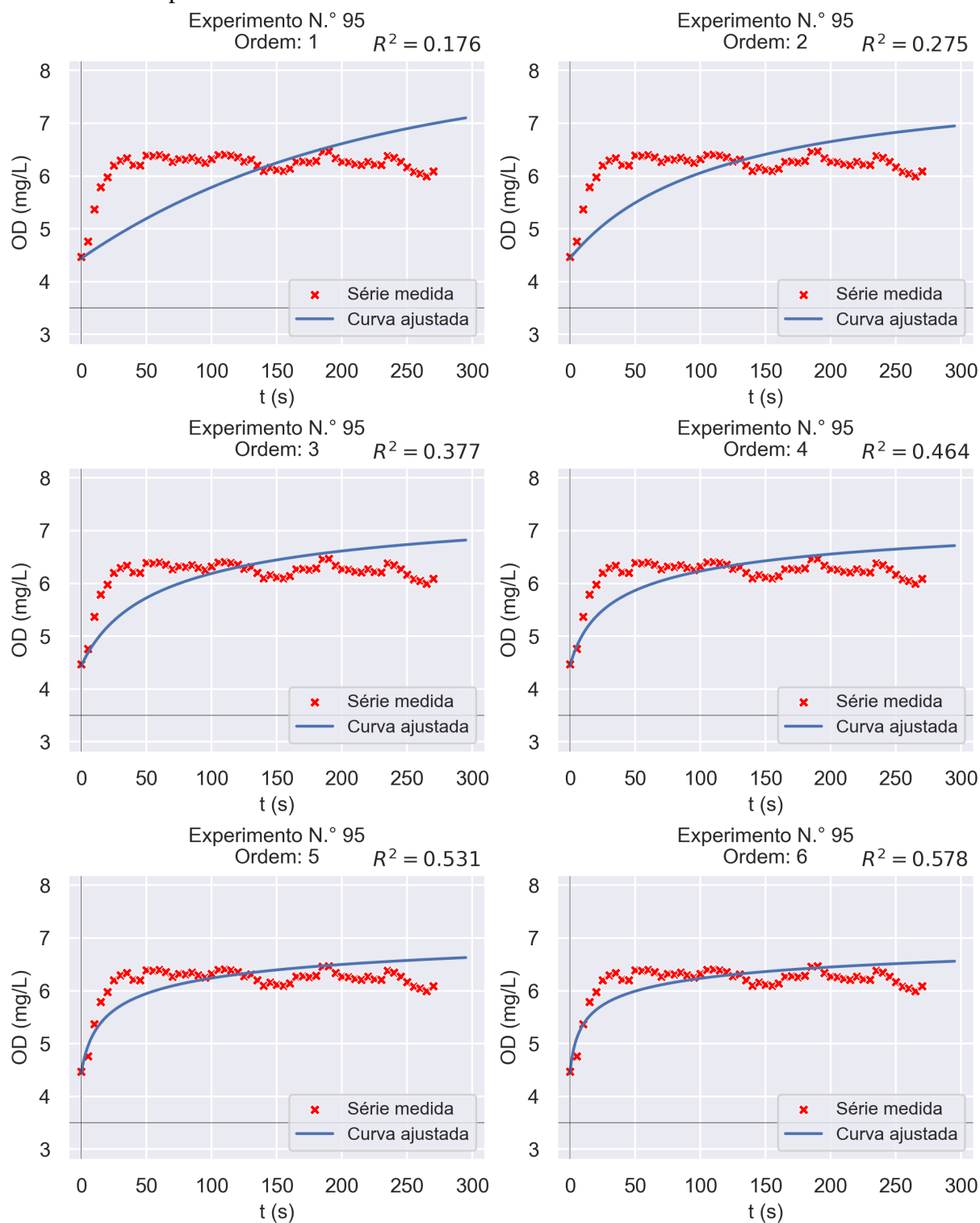
Figura 224 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 94



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

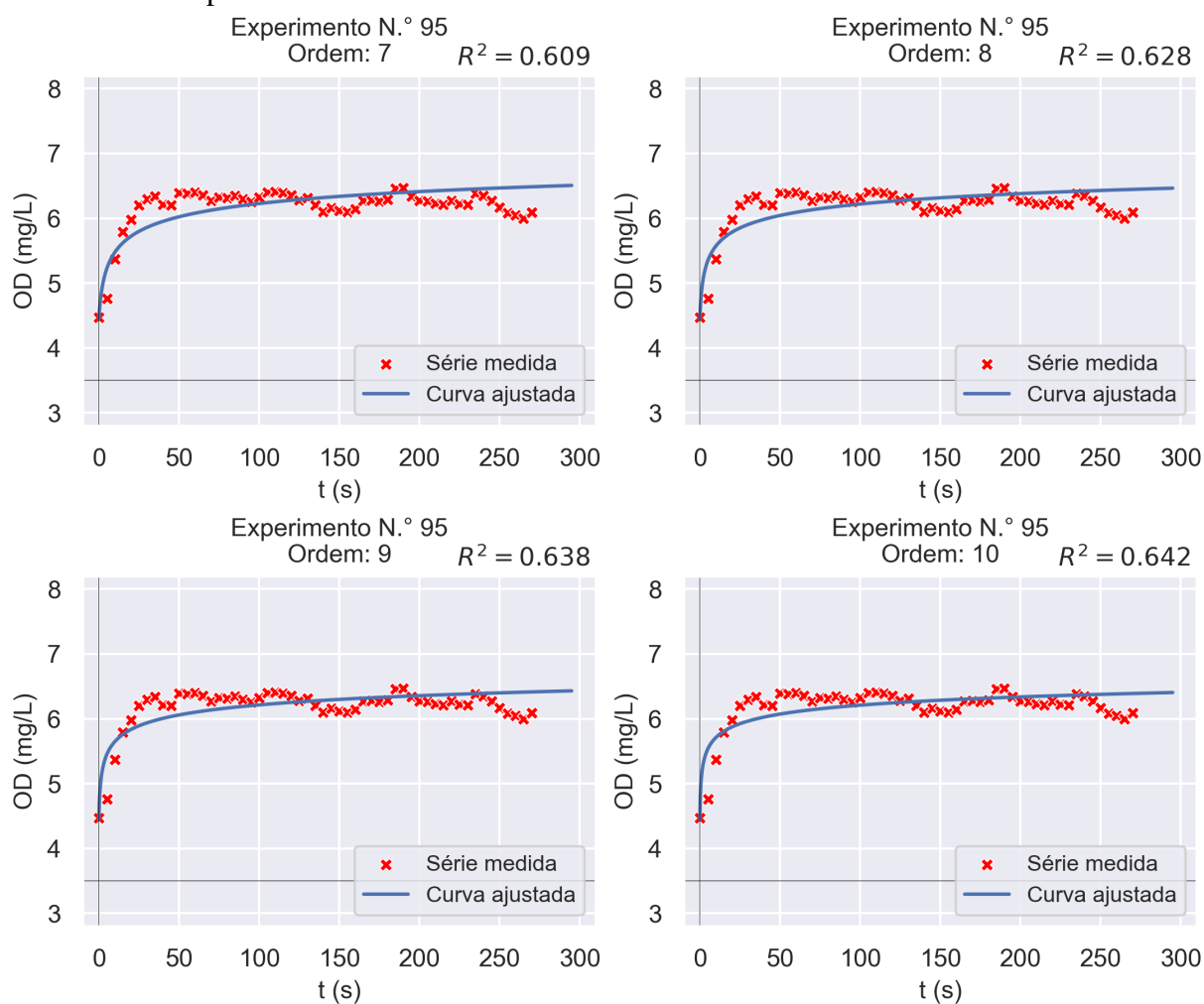
Figura 225 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 95



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

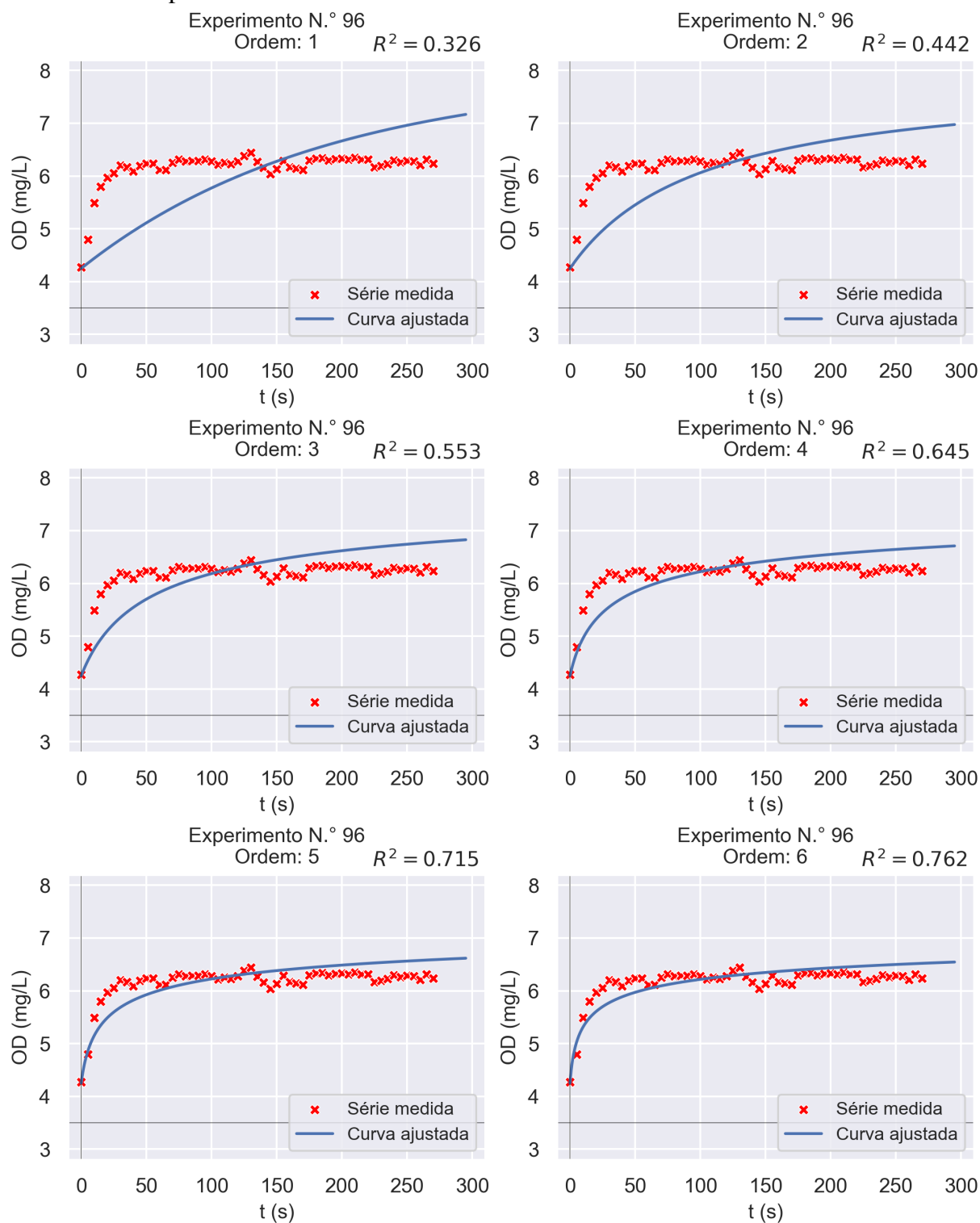
Figura 226 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 95



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

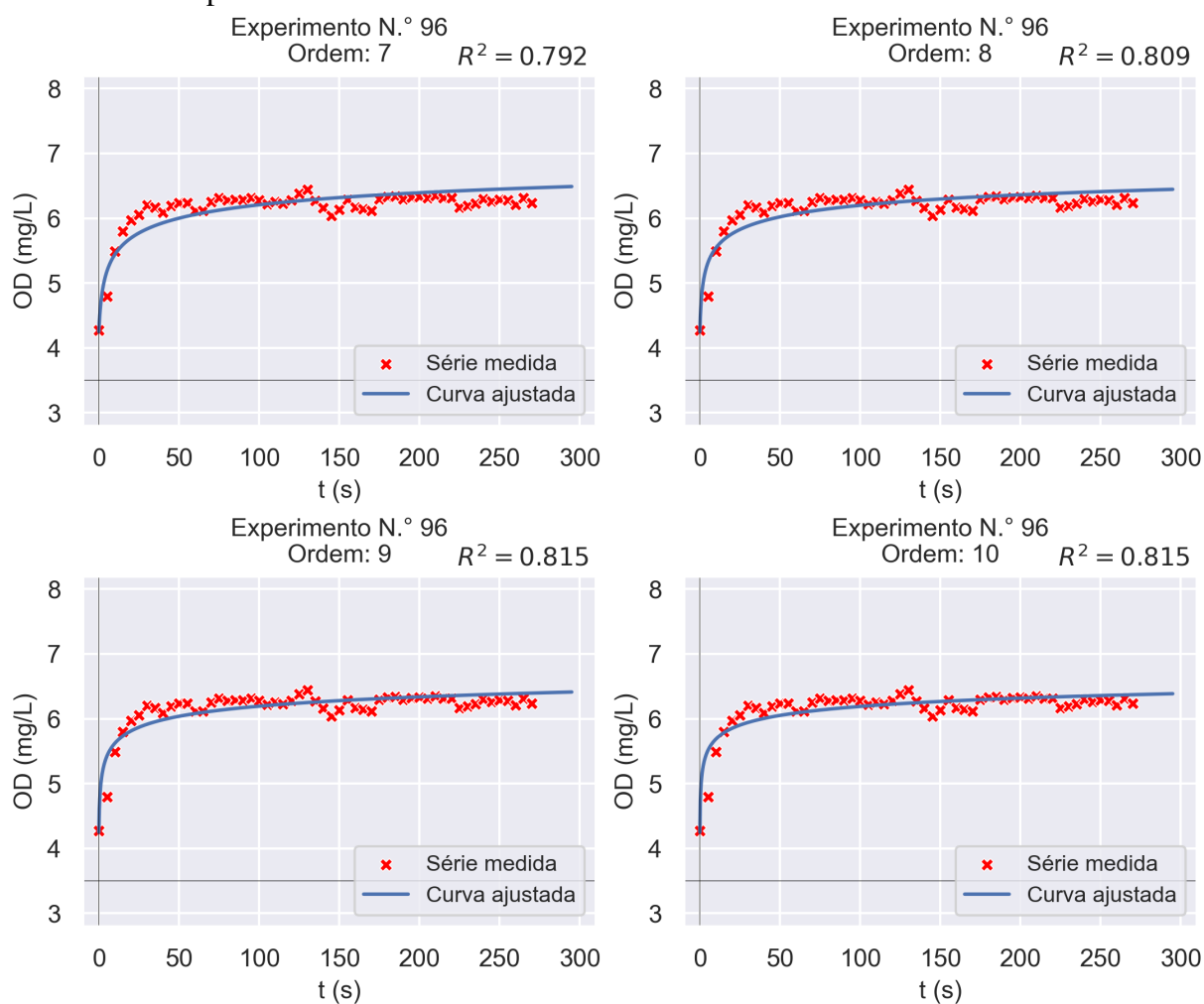
Figura 227 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 96



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

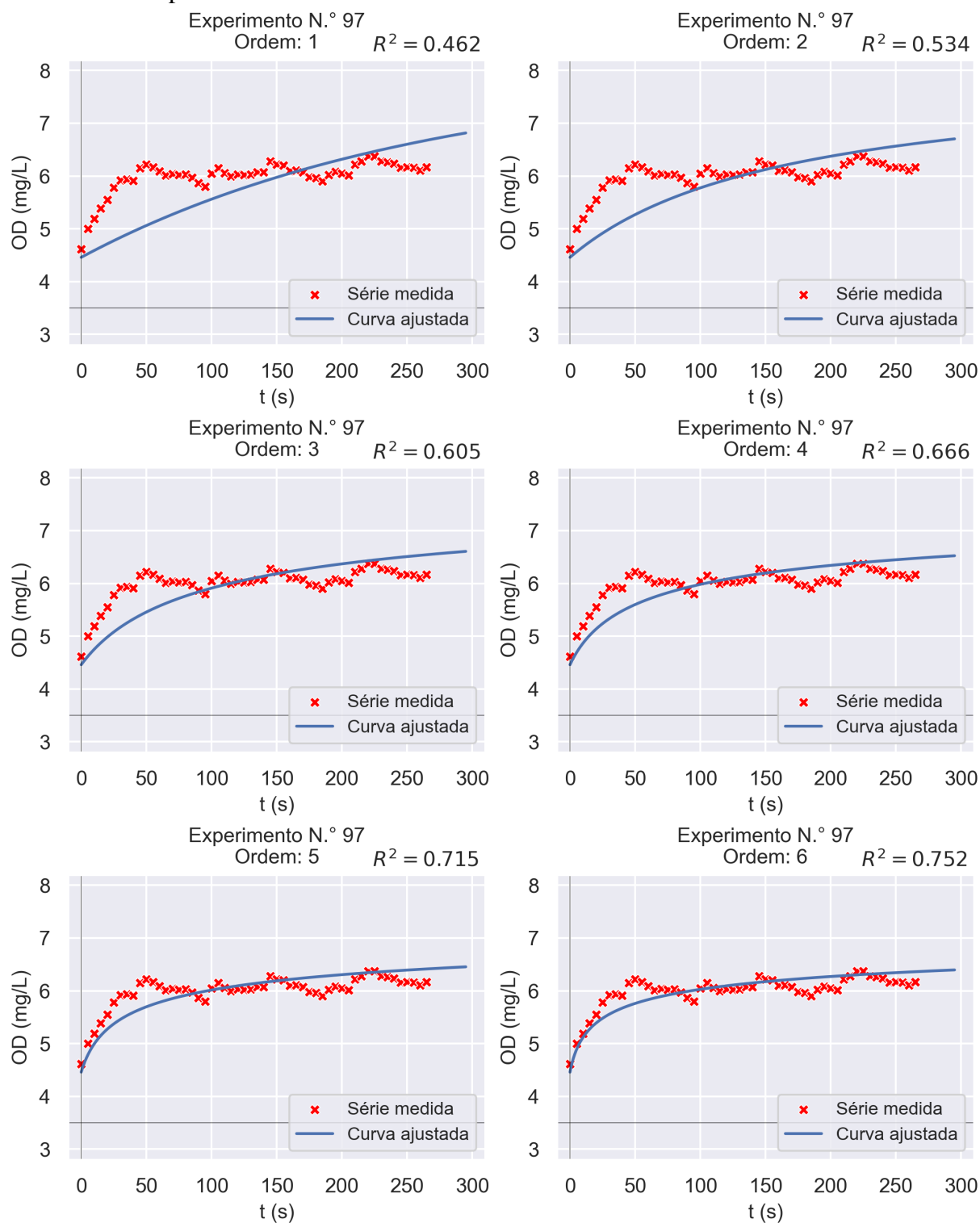
Figura 228 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 96



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

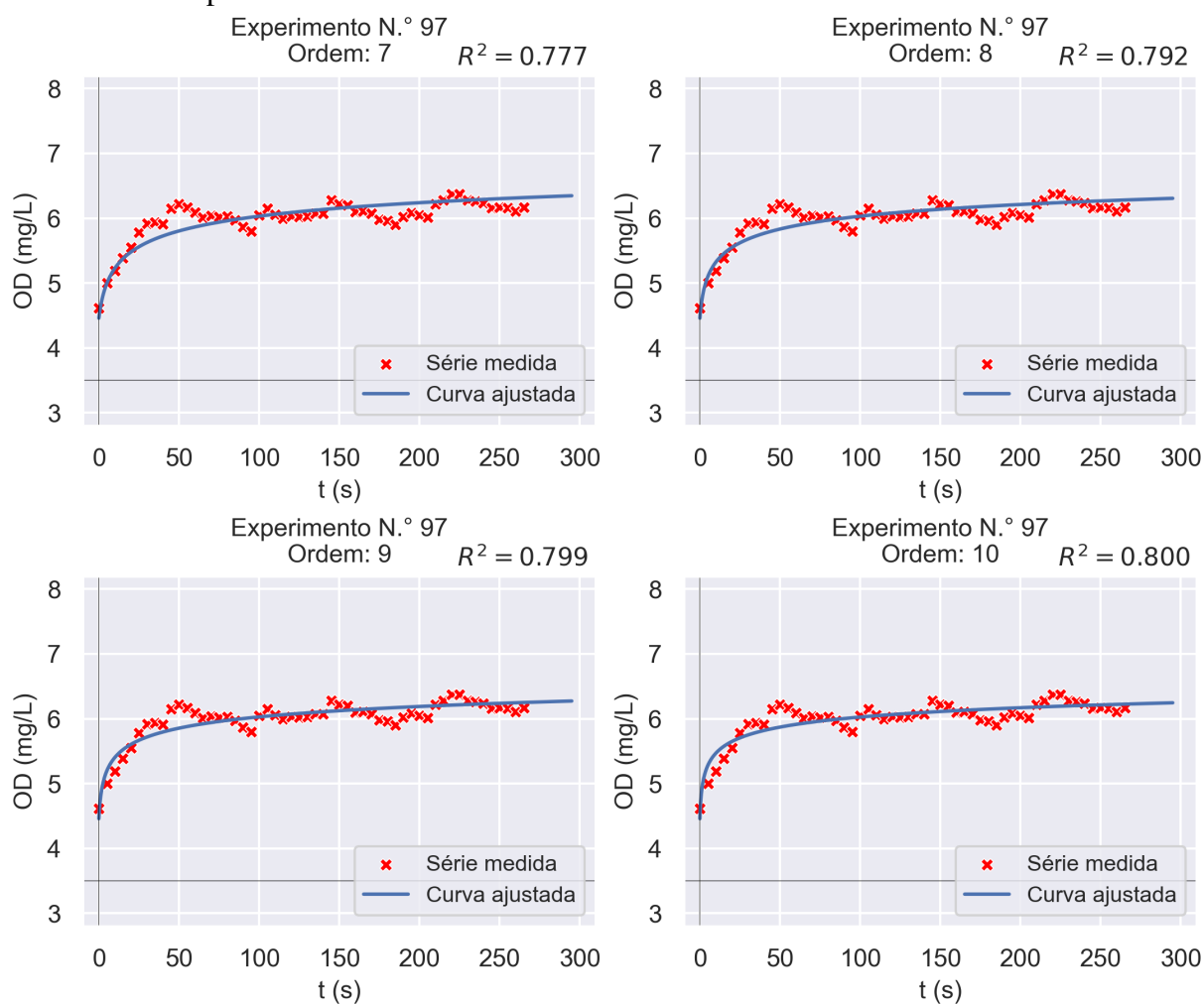
Figura 229 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 97



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

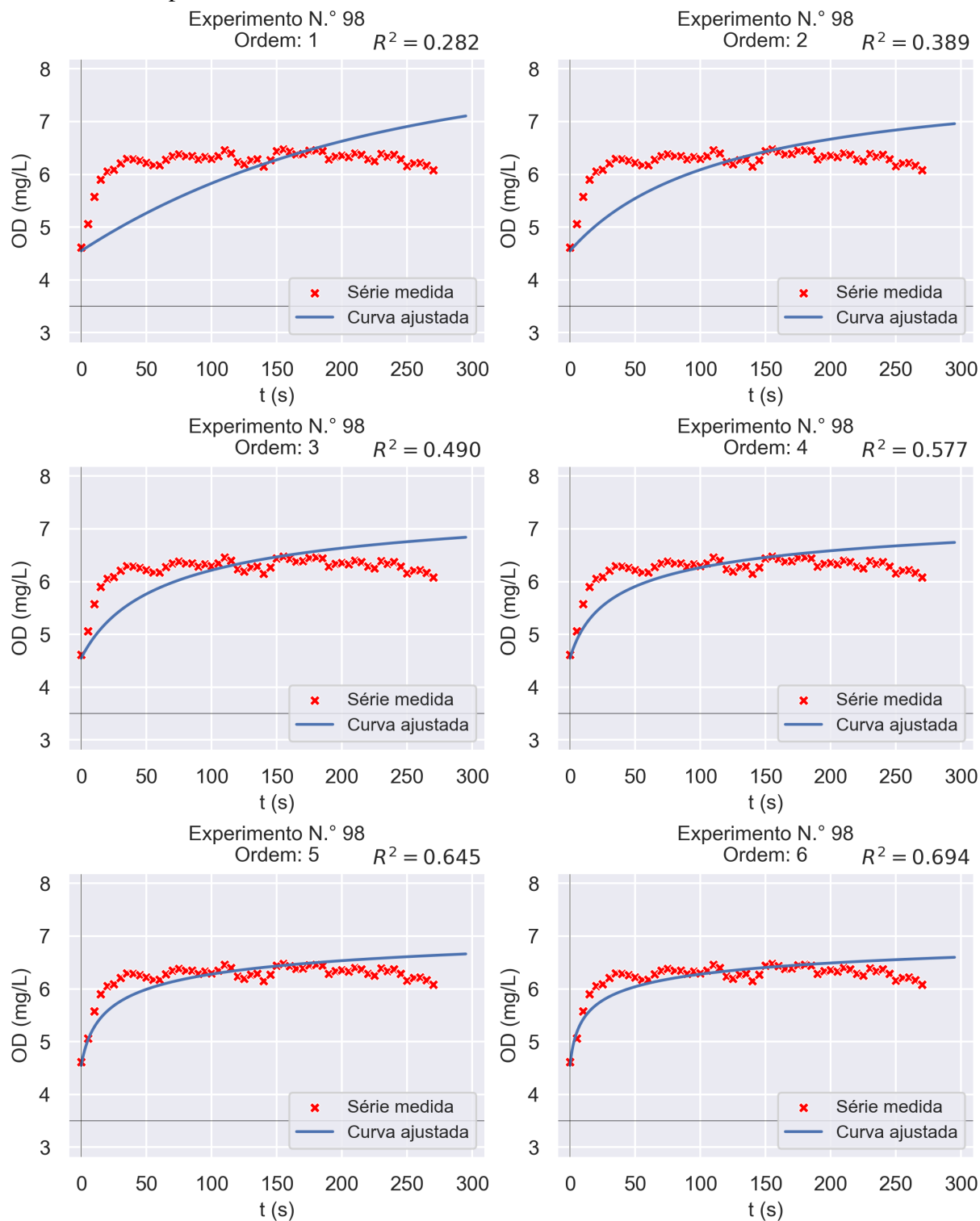
Figura 230 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 97



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 231 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 98

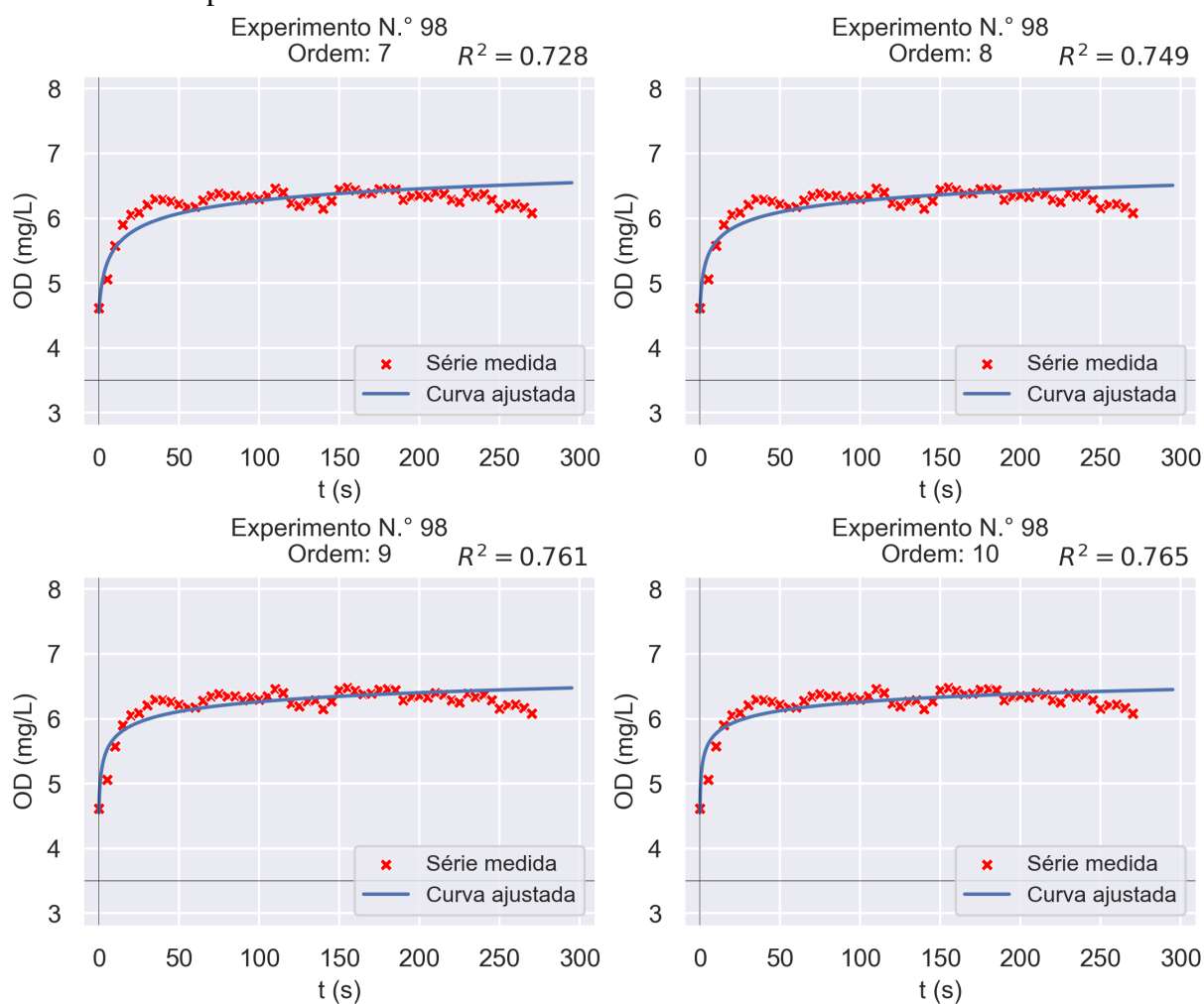


Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).



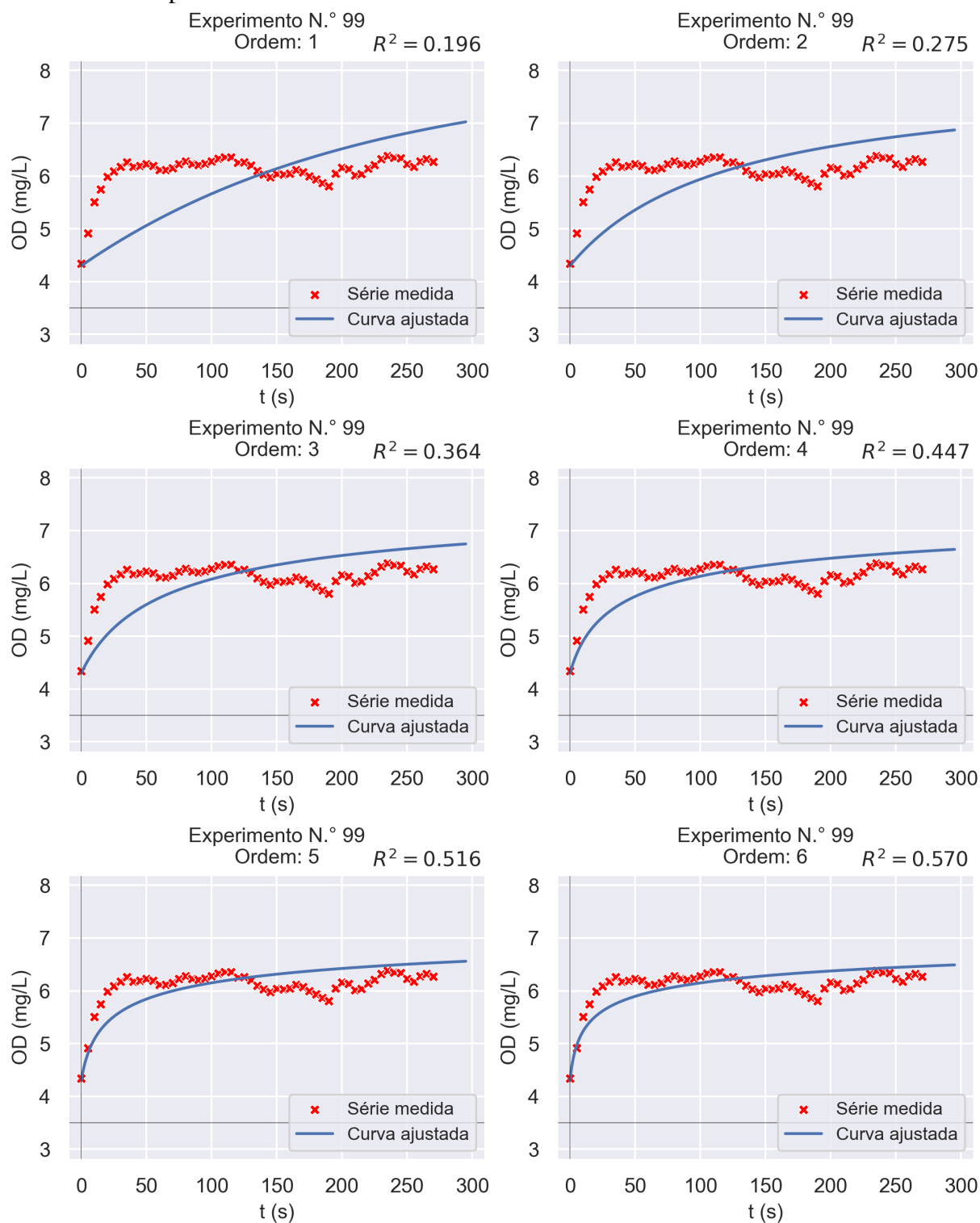
Figura 232 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 98



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

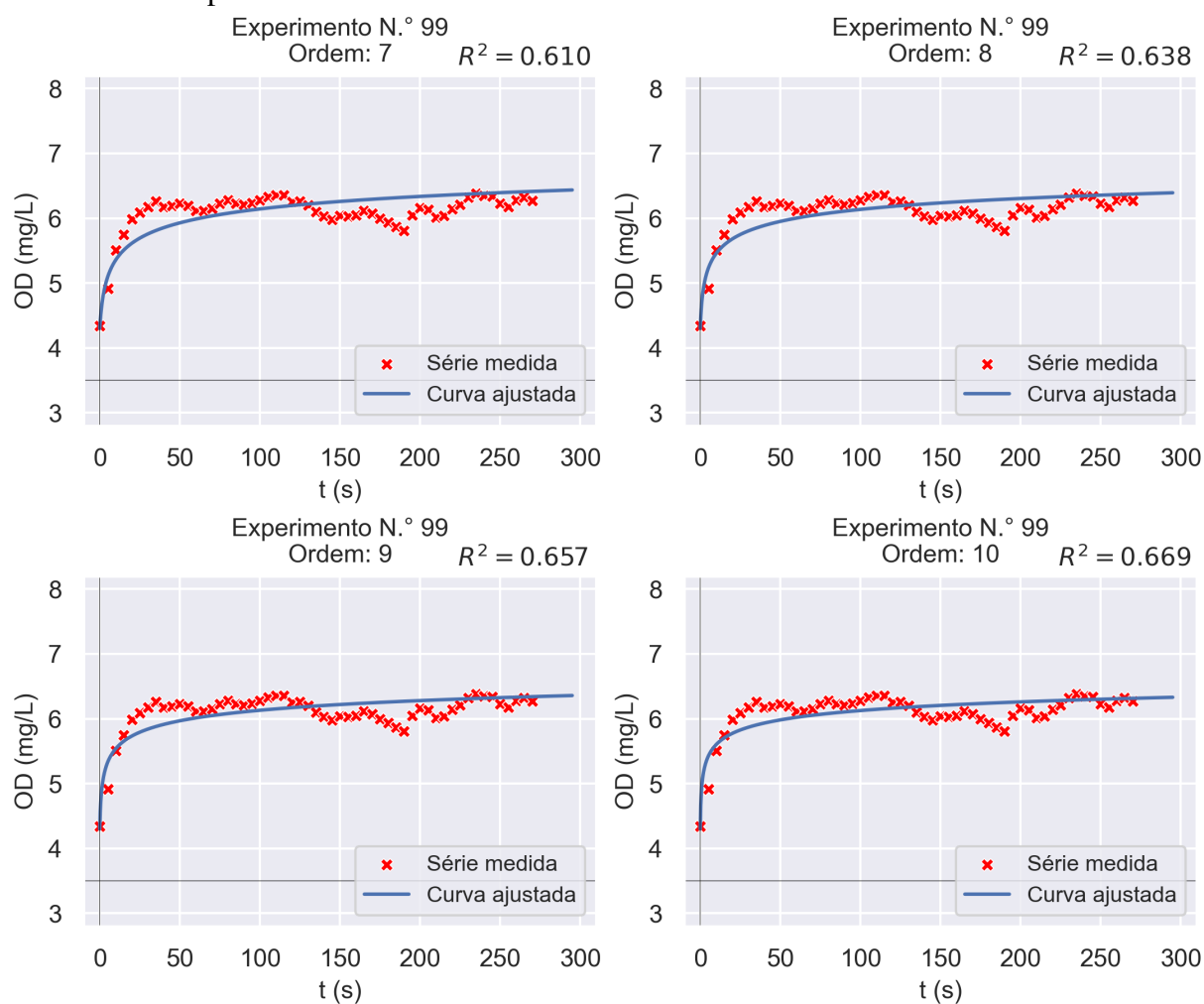
Figura 233 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 1 à 6 e o experimento n.º 99



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).

Figura 234 – Gráficos dos ajustes às séries temporais de OD considerando as ordens 7 à 10 e o experimento n.º 99



Fonte: Elaborada pelo autor;

Obs.: O coeficiente  $R^2$  dos ajustes é o quadrado do coeficiente de correlação de *Pearson*, não o coeficiente de determinação definido na subseção 3.4.2 (Equação 3.10).