

RESSALVA

Atendendo solicitação do(a)
autor(a), o texto completo desta tese
será disponibilizado somente a partir
de 29/10/2023.



Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho"
Instituto de Biociências – Campus de Botucatu
Programa de Pós-graduação em Biometria



Biorremediação de efluentes por microalgas: uma análise matemática-estatística

Felipe Teles Barbosa

Botucatu
2021

Felipe Teles Barbosa

Biorremediação de efluentes por microalgas: uma análise matemática-estatística

Defesa de Doutorado apresentada ao Curso de Programa de Pós-graduação em Biometria da Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Doutor em Biometria.

Orientadora: Profa. Dra. Helenice de Oliveira Florentino Silva

Botucatu
2021

B238b Barbosa, Felipe Teles
 Biorremediação de efluentes por microalgas: uma análise
 matemática-estatística / Felipe Teles Barbosa. -- Botucatu, 2021
 112 p. : il., tabs.

 Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (Unesp),
 Instituto de Biociências, Botucatu
 Orientadora: Helenice de Oliveira Florentino Silva

 1. Equações diferenciais estocásticas. 2. Algas. 3. Biorremediação.
 4. Otimização matemática. 5. Sistemas dinâmicos diferenciais. I.
 Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca do Instituto de Biociências, Botucatu. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

Agradecimentos

À Professora Doutora Helenice de Oliveira Florentino Silva, pelos valiosos momentos que não podem ser resumidos a apenas trocas de conhecimento. Obrigado por sua confiança em meu trabalho e por permitir que minhas ideias se tornem realidade no papel. Minha admiração por sua pessoa é imensurável!

Ao Professor Doutor Gustavo Henrique Ribeiro da Silva e à Doutora Anna Patrícya Florentino, por cederem gentilmente o conjunto de dados utilizado neste trabalho.

Aos meus pais, Adair e Kilza, e a minha avó, Onilda, por me motivarem a alcançar meus sonhos e não medirem esforços para tê-los realizados.

Aos meus queridos amigos de Pós-Graduação, em especial, Fátima (Szalona), Magali Teresópolis, Eduardo (Avaré), Lucas Ragiotto, Jacqueline Domingues, Gabriela Colovati, Elizabete (Bete), Juliana Gualberto, Juliana Freitas e Camila de Lima. Vou sempre lembrar de vocês com um sorriso no rosto!

Aos Professores Paulo Mancera e Luzia Trinca, por me fazerem apaixonar por sistemas dinâmicos e por modelagem estatística.

Aos meus alunos de Iniciação Científica, Tales e Gabriel, por me motivarem a ser um bom orientador e pesquisador, por me fazerem refletir sobre pontos que eu achava trivial e, claro, pelas boas risadas.

A minha querida amiga Marta Helena, que caminha junto a mim desde 2012 no mundo da pesquisa. Obrigado por me apresentar este universo tão peculiar e cheio de maravilhas e por despertar em mim toda a paixão que tenho por modelagem matemática!

A minha querida amiga Lívia Paschoalino, por ser meu porto seguro. Sua amizade é um presente para a vida inteira!

As minhas amigas/irmãs Beatriz Reami, Letícia Cotinguiba, Letícia Del Conte, Gabriela Caroline e Nádia Braga por estarem sempre comigo, mesmo que a uma distância continental.

Ich möchte meiner jetzigen Forschungsgruppe, Bernd, Tina, Dani, Christian und Julian, für ihr Verständnis und ihre Geduld mit mir während des Abschlusses meiner Doktorarbeit danken.

Ich möchte mich auch bei meinem Freund, Daniel Pranjković, für die Unterstützung seit der Pandemie, insbesondere für den Umzug nach Österreich und den Abschluss meiner Doktorarbeit, bedanken.

O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Information is the resolution of uncertainty.
Claude Shannon

Resumo

O descarte incorreto de resíduos promove e/ou intensifica diversos problemas ambientais, tais como a eutrofização e a contaminação de recursos hídricos. Para reduzir os impactos destes e outros problemas de cunho ambiental, a biorremediação de efluentes por microalgas é uma biotecnologia sustentável frequentemente empregada com a finalidade de auxiliar na remoção de nutrientes, na redução da carga orgânica de um efluente e na absorção de metais pesados. Com o intuito de obter informações sobre o bioprocessamento em análise, propõe-se aqui um modelo matemático, que consiste em um Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias Estocásticas, para descrever a dinâmica da biorremediação de efluentes domésticos por microalgas. Também foi formulado um modelo matemático para determinar a razão nitrogênio/fósforo inicial ótima para maximizar a remoção de fósforo associada à biorremediação do efluente. Além disto, foi proposto um procedimento para estimar os parâmetros do modelo desenvolvido utilizando um conjunto de dados referente à biorremediação de um efluente doméstico contaminado com fármacos, sob a ação da microalga *Chlorella sorokiniana* em modo de condução batelada. Análises matemática-estatísticas e simulações numéricas do modelo matemático proposto neste trabalho, implementado com os valores dos parâmetros estimados, evidenciaram o potencial das metodologias desenvolvidas nesta pesquisa para a descrição da biorremediação de efluentes domésticos contaminados com fármacos, auxiliando nas tomadas de decisão acerca do planejamento, da predição de cenários, da otimização e do controle do bioprocessamento.

Palavras-chave: Biorremediação; *Chlorella sorokiniana*; Sistema de Equações Diferenciais Ordinárias Estocásticas; Estimativa de Parâmetros; Análise de Estabilidade.

Abstract

The improper discharge of residuals leads and/or intensifies several environmental problems, such as eutrophication and water sources contamination. To reduce the impacts of these and other environmental problems, bioremediation of effluents via microalgae is a sustainable biotechnology frequently employed to assist in the recovery of nutrients, the decreasing of organic load in water resources and the absorption of heavy metals. In order to provide insights with respect to this bioprocess, here it is proposed a mathematical model, consisted of a System of Stochastic Ordinary Differential Equations, that describes the dynamics of bioremediation of a domestic effluent via microalgae. It was also proposed a mathematical model to determine the optimal initial nitrogen/phosphorus ratio to maximize phosphorus removal associated with bioremediation of domestic wastewater. Moreover, it was proposed a procedure to estimate the parameters values of the proposed model from a data set concerning the bioremediation of domestic effluents contaminated with pharmaceuticals, mediated by *Chlorella sorokiniana* and carried out in batch mode. Mathematical-statistical analyses and numerical simulations of the proposed model, implemented with the estimated parameters values, highlighted the potential of the developed methodologies here to describe the bioremediation of domestic effluent contaminated with pharmaceuticals, assisting in the decision-making process in regards to planning, prediction of scenarios, optimization and control of the bioprocess.

Keywords: Bioremediation; *Chlorella sorokiniana*; System of Stochastic Ordinary Differential Equations; Parameter Estimation; Stability Analysis.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
2	FUNDAMENTOS DE BIORREMEDIAÇÃO E PRODUÇÃO DE BIOHIDROGÊNIO	3
2.1	Princípios de Biorremediação	3
2.2	Produção de Biohidrogênio por Microalgas	7
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	10
3.1	Biorremediação	10
3.2	Propriedades qualitativas do modelo proposto	17
3.2.1	Não-negatividade das soluções do modelo adimensionalizado	17
3.2.2	Propriedades estatísticas do modelo proposto	23
3.2.2.1	Esperança	23
3.2.2.2	Matriz de Variâncias e Covariâncias	25
3.2.2.3	<i>Skewness</i>	27
3.2.3	Soluções do modelo uniformemente limitadas	28
3.3	Soluções de equilíbrio do modelo proposto e análise de estabilidade	32
3.3.1	Abordagem I: estabilidade parcial do modelo proposto	36
3.3.1.1	Ausência de fármacos	37
3.3.1.2	Presença de fármacos	38
3.3.2	Abordagem II: estabilidade dos momentos condicionais do modelo proposto	39
3.3.2.1	Ausência de fármacos	39
3.3.2.2	Presença de fármacos	41
3.3.3	Abordagem III: estabilidade dos momentos condicionais do modelo perturbado	42
3.3.3.1	Ausência de fármacos	43
3.3.3.2	Presença de fármacos	45
3.4	Representatividade do modelo proposto	49
4	ANÁLISE DE DADOS DE BIORREMEDIAÇÃO	51
4.1	Conjunto de Dados	51
4.2	Análise dos Dados	52
4.2.1	Colinearidade	53
4.2.2	Modelos de Regressão Linear	55
4.2.2.1	Relação entre pH e oxigênio dissolvido	56

4.2.2.2	Relação entre concentrações de clorofila-a e células	57
4.2.2.3	Relação entre os diferentes compostos nitrogenados	58
4.2.3	Análises de Homocedasticidade	59
	5 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS DO MODELO PROPOSTO . .	64
5.1	Estimação de Parâmetros	64
5.2	Simulações Computacionais	69
	6 MODELO DE OTIMIZAÇÃO	80
6.1	Maximização da remoção de fósforo no bioprocessos	80
6.2	VNS	82
6.3	Experimentos computacionais	83
	7 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS	87
	REFERÊNCIAS	88
	APÊNDICES	96
	APÊNDICE A – CÁLCULO DOS PONTOS DE EQUILÍBRIO DO MO- DELO PROPOSTO	97

7 Considerações Finais e Perspectivas

Neste trabalho propôs-se o desenvolvimento de um modelo matemático para descrever a biorremediação de efluentes domésticos por uma população de microalgas da espécie *Chlorella sorokiniana*, em dois cenários, a saber, na ausência e na presença de fármacos dissolvidos no efluente. Além disto, propôs-se um modelo matemático para determinar as concentrações iniciais ótimas de nitrogênio e fósforo visando maximizar a remoção de fósforo associada à biorremediação.

O Modelo (3.17) proposto nesta tese conseguiu representar bem a dinâmica das variáveis envolvidas na biorremediação de um efluente doméstico, tanto na ausência, quanto na presença de fármacos dissolvidos no meio de cultura, mostrando que tal modelo possui potencial para ser utilizado para o estudo da dinâmica e do controle do bioprocessos. O Modelo (6.3), por sua vez, conseguiu determinar condições iniciais ótimas que promovem a máxima remoção de fósforo em diferentes cenários, independente da presença de ruídos no biorreator.

Neste sentido, os modelos propostos evidenciam o potencial da metodologia desenvolvida neste trabalho para auxiliar na promoção de uma economia sustentável, da geração de fontes renováveis de energia e na recuperação de áreas ambientais contaminadas.

Como perspectivas para trabalhos futuros, cita-se:

1. Estimar os parâmetros do Modelo (3.17) para os outros conjuntos de dados disponibilizados pelo Departamento de Engenharia Civil e Ambiental (Faculdade de Engenharia - UNESP, Bauru);
2. Investigar outras metodologias para solucionar o Modelo (6.3);
3. Propor um modelo de otimização para determinar as condições iniciais que favorecem a maximização da produção de clorofila durante o bioprocessos, como uma medida auxiliar para a maximização da produção de biohidrogênio associada à biorremediação.

Referências

- ADAMS, G. O. et al. Bioremediation, biostimulation and bioaugmentation: a review. *International Journal of Environmental Bioremediation & Biodegradation*, Citeseer, v. 3, n. 1, p. 28–39, 2015. 10
- ALLEN, E. *Modeling with Itô stochastic differential equations*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2007. v. 22. 18
- ALMEIDA, G. et al. Programação por Metas para Ajuste Não Linear. *TEMA (São Carlos)*, scielo, v. 21, p. 249 – 259, 08 2020. ISSN 2179-8451. Disponível em: <http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S2179-84512020000200249&nrm=iso>. 66
- ARASHIRO, L. T. et al. Natural pigments and biogas recovery from microalgae grown in wastewater. *ACS sustainable chemistry & engineering*, ACS Publications, v. 8, n. 29, p. 10691–10701, 2020. 4, 6
- ARDABILI, S. F. et al. Computational intelligence approach for modeling hydrogen production: a review. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, Taylor & Francis, v. 12, n. 1, p. 438–458, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/19942060.2018.1452296>>. 2
- ASLAN, S.; KAPDAN, I. K. Batch kinetics of nitrogen and phosphorus removal from synthetic wastewater by algae. *Ecological Engineering*, v. 28, n. 1, p. 64 – 70, 2006. ISSN 0925-8574. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925857406000759>>. 6
- BALACHANDAR, G. et al. Biological hydrogen production via dark fermentation: A holistic approach from lab-scale to pilot-scale. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.09.006>>. 8
- BATES, D. M.; WATTS, D. G. *Nonlinear regression analysis and its applications*. [S.l.]: Wiley New York, 1988. v. 2. 65, 66, 67
- BENEDITO, A. dos S.; SANTOS, F. L. P. dos. A novel technique to estimate biological parameters in an epidemiology problem. In: SPRINGER. *International Work-Conference on Artificial Neural Networks*. [S.l.], 2017. p. 112–122. 66
- BERGMAN, T. L. et al. *Fundamentals of heat and mass transfer*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2011. 11, 33
- BHATTACHARYA, S. et al. On stochastic differential equations and equilibrium distribution: a conditional moment approach. *Environmental and ecological statistics*, Springer, v. 18, n. 4, p. 687–708, 2011. 34, 35, 36
- BHOWMICK, A. R. et al. A simple approximation of moments of the quasi-equilibrium distribution of an extended stochastic theta-logistic model with non-integer powers. *Mathematical Biosciences*, v. 271, p. 96–112, 2016. ISSN 0025-5564. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0025556415002230>>. 42
- BRAUMANN, C. A. *Introduction to stochastic differential equations with applications to modelling in biology and finance*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2019. 18

- CARDOSO, V. et al. Hydrogen production by dark fermentation. *Chem Eng Trans*, v. 38, p. 481–486, 2014. 2, 8
- CHANDRA, R.; Venkata Mohan, S. Microalgal community and their growth conditions influence biohydrogen production during integration of dark-fermentation and photo-fermentation processes. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 36, n. 19, p. 12211 – 12219, 2011. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319911016235>>. 8, 9
- CHELLABOINA, V.; HADDAD, W. M. A unification between partial stability and stability theory for time-varying systems. *IEEE Control Systems Magazine*, v. 22, p. 66–75, 2002. 36
- CHEW, K. W. et al. Microalgae biorefinery: high value products perspectives. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 229, p. 53–62, 2017. 1, 4, 7
- CHOI, H. J.; LEE, S. M. Effect of the n/p ratio on biomass productivity and nutrient removal from municipal wastewater. *Bioprocess and biosystems engineering*, Springer, v. 38, n. 4, p. 761–766, 2015. 82
- CHOJNACKA, K. Biosorption and bioaccumulation – the prospects for practical applications. *Environment International*, v. 36, n. 3, p. 299 – 307, 2010. ISSN 0160-4120. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0160412009002396>>. 5
- CRAGG, J. Estimation and testing in time-series regression models with heteroscedastic disturbances. *Journal of Econometrics*, v. 20, n. 1, p. 135 – 157, 1982. ISSN 0304-4076. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304407682901063>>. 61
- DAS, D.; VEZIROĞLU, T. Hydrogen production by biological processes: a survey of literature. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 26, n. 1, p. 13 – 28, 2001. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319900000586>>. 1, 8
- DORAN, P. M. *Bioprocess engineering principles*. Second. [S.l.]: Elsevier, 2013. 1, 4, 11, 12
- DRAPER, N. R.; SMITH, H. *Applied regression analysis*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1998. v. 326. 53, 55, 56, 64, 65, 66
- DZIOŃEK, A.; WOJCIESZYDSKA, D.; GUZIK, U. Natural carriers in bioremediation: A review. *Electronic Journal of Biotechnology*, scielocl, v. 19, p. 28 – 36, 09 2016. ISSN 0717-3458. 1, 4
- EKER, S.; SARP, M. Hydrogen gas production from waste paper by dark fermentation: Effects of initial substrate and biomass concentrations. *International Journal of Hydrogen Energy*, Elsevier, v. 42, n. 4, p. 2562–2568, 2017. 1, 4
- EZE, V. C. et al. Kinetic modelling of microalgae cultivation for wastewater treatment and carbon dioxide sequestration. *Algal Research*, v. 32, p. 131 – 141, 2018. ISSN 2211-9264. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211926417309840>>. 2, 3, 15
- FARAHANI, S. S. et al. A hydrogen-based integrated energy and transport system: The design and analysis of the car as power plant concept. *IEEE Systems, Man, and Cybernetics Magazine*, IEEE, v. 5, n. 1, p. 37–50, 2019. 8
- FERGOLA, P.; TENNERIELLO, C. Partial stability of large scale systems via comparison method. *IFAC Proceedings Volumes*, v. 12, n. 16, p. 323–327, 1983. 36

- FERNANDO, I. P. S. et al. Algal polysaccharides: Potential bioactive substances for cosmeceutical applications. *Critical Reviews in Biotechnology*, Taylor & Francis, v. 39, n. 1, p. 99–113, 2019. 4
- GODOS, I. D. et al. Coagulation/flocculation-based removal of algal–bacterial biomass from piggery wastewater treatment. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 102, n. 2, p. 923–927, 2011. 5
- GRIGORIU, M. *Stochastic systems: uncertainty quantification and propagation*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2012. 17
- GURUBEL, K. J. et al. Chapter 7 - artificial neural networks based on nonlinear bioprocess models for predicting wastewater organic compounds and biofuel production. In: ALANIS, A. Y.; ARANA-DANIEL, N.; LÓPEZ-FRANCO, C. (Ed.). *Artificial Neural Networks for Engineering Applications*. Academic Press, 2019. p. 79 – 96. ISBN 978-0-12-818247-5. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780128182475000162>>. 1, 61, 62
- HANNEMANN, F. et al. Cytochrome p450 systems—biological variations of electron transport chains. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - General Subjects*, v. 1770, n. 3, p. 330 – 344, 2007. ISSN 0304-4165. P450. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304416506002133>>. 1, 5, 6
- HANSEN, P.; MLADENOVIĆ, N. Variable neighborhood search: Principles and applications. *European journal of operational research*, Elsevier, v. 130, n. 3, p. 449–467, 2001. 82
- HECKE, T. V. The levenberg-marquardt method to fit parameters in the monod kinetic model. *Journal of Statistics and Management Systems*, Taylor & Francis, v. 20, n. 5, p. 953–963, 2017. 66
- JAMMAZI, C. On a sufficient condition for finite-time partial stability and stabilization: applications. *IMA Journal of Mathematical Control and Information*, v. 27, p. 29–56, 2010. 36
- KALIRAJAN, K. A test for heteroscedasticity and non-normality of regression residuals: A practical approach. *Economics Letters*, v. 30, n. 2, p. 133 – 136, 1989. ISSN 0165-1765. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0165176589900505>>. 61
- KHAN, F.; SAEED, A.; ALI, S. Modelling and forecasting of new cases, deaths and recover cases of covid-19 by using vector autoregressive model in pakistan. *Chaos, Solitons & Fractals*, v. 140, p. 110189, 2020. ISSN 0960-0779. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960077920305853>>. 61, 62
- KHAN, M. A. et al. Biohydrogen production from anaerobic digestion and its potential as renewable energy. *Renewable Energy*, Elsevier, v. 129, p. 754–768, 2018. 8
- KIM, K. B. et al. Stochastic modeling of chlorophyll-a for probabilistic assessment and monitoring of algae blooms in the lower nakdong river, south korea. *Journal of Hazardous Materials*, v. 400, p. 123066, 2020. ISSN 0304-3894. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389420310554>>. 2
- KIM, S. et al. Growth rate, organic carbon and nutrient removal rates of chlorella sorokiniana in autotrophic, heterotrophic and mixotrophic conditions. *Bioresource Technology*, v. 144, p. 8 – 13, 2013. ISSN 0960-8524. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852413009875>>. 6, 15

- KOSOUROV, S. et al. Sustained hydrogen photoproduction by *chlamydomonas reinhardtii*: effects of culture parameters. *Biotechnology and bioengineering*, Wiley Online Library, v. 78, n. 7, p. 731–740, 2002. 1, 8
- KRUSE, O.; HANKAMER, B. Microalgal hydrogen production. *Current Opinion in Biotechnology*, v. 21, n. 3, p. 238 – 243, 2010. ISSN 0958-1669. Energy biotechnology – Environmental biotechnology. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0958166910000546>>. 1, 4
- KWAK, H. S. et al. Synergistic effect of multiple stress conditions for improving microalgal lipid production. *Algal research*, Elsevier, v. 19, p. 215–224, 2016. 4
- KYZAS, G. Z. et al. Emerging nanocomposite biomaterials as biomedical adsorbents: an overview. *Composite Interfaces*, Taylor & Francis, v. 25, n. 5-7, p. 415–454, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/09276440.2017.1361716>>. 5
- LAPIN, K. S. Partial uniform boundedness of solutions of systems of differential equations with partly controlled initial conditions. *Differential Equations*, v. 50, p. 305–311, 2014. 28
- LARSEN, C. et al. Mechanisms of pharmaceutical and personal care product removal in algae-based wastewater treatment systems. *Science of The Total Environment*, v. 695, p. 133772, 2019. ISSN 0048-9697. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969719337131>>. 5
- LEE, E.; JALALIZADEH, M.; ZHANG, Q. Growth kinetic models for microalgae cultivation: A review. *Algal Research*, v. 12, p. 497 – 512, 2015. ISSN 2211-9264. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211926415300783>>. 2, 4, 6, 15
- LIN, J.-G.; WEI, B.-C. Testing for heteroscedasticity in nonlinear regression models. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Taylor & Francis, v. 32, n. 1, p. 171–192, 2003. Disponível em: <<https://doi.org/10.1081/STA-120017806>>. 61
- LIN, J.-G.; WEI, B.-C. Testing for heteroscedasticity and/or autocorrelation in longitudinal mixed effect nonlinear models with ar(1) errors. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Taylor & Francis, v. 36, n. 3, p. 567–586, 2007. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/03610920601001816>>. 61
- LIRAN, O. et al. Microoxic niches within the thylakoid stroma of air-grown *chlamydomonas reinhardtii* protect [fefe]-hydrogenase and support hydrogen production under fully aerobic environment. *Plant Physiology*, American Society of Plant Biologists, v. 172, n. 1, p. 264–271, 2016. ISSN 0032-0889. Disponível em: <<http://www.plantphysiol.org/content/172/1/264>>. 6
- LIU, L.-M. et al. *Forecasting and time series analysis using the SCA statistical system*. [S.l.: s.n.], 1992. v. 1. 61
- MATHIMANI, T.; PUGAZHENDHI, A. Utilization of algae for biofuel, bio-products and bio-remediation. *Biocatalysis and agricultural biotechnology*, Elsevier, v. 17, p. 326–330, 2019. 4
- MOAL, M. L. et al. Eutrophication: a new wine in an old bottle? *Science of the Total Environment*, Elsevier, v. 651, p. 1–11, 2019. 1, 3
- MOOD, A. M. Introduction to the theory of statistics. McGraw-hill, 1950. 19

- MOTA, F. S. B.; SPERLING, M. von. *Projeto PROSAB - Nutrientes de esgoto sanitário: utilização e remoção*. Rio de Janeiro, Brasil: ABES, 2009. 1–428 p. 3, 6, 14, 58
- MURWANASHYAKA, T. et al. Kinetic modelling of heterotrophic microalgae culture in wastewater: Storage molecule generation and pollutants mitigation. *Biochemical Engineering Journal*, Elsevier, v. 157, p. 107523, 2020. 36
- NASR, N. et al. Application of artificial neural networks for modeling of biohydrogen production. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 38, n. 8, p. 3189 – 3195, 2013. ISSN 0360-3199. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0360319912028443>>. 2
- NICOLETTI, G. et al. A technical and environmental comparison between hydrogen and some fossil fuels. *Energy Conversion and Management*, v. 89, p. 205–213, 2015. 8
- NUNES, N. S. P. et al. Analysis of functional relationships between the cell quantification variables in the microalgae *Chlorella sorokiniana*. *Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais*, v. 12, n. 1, 2020. 54
- OKSENDAL, B. *Stochastic differential equations: an introduction with applications*. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2013. 17
- PENG, L. et al. A novel mechanistic model for nitrogen removal in algal-bacterial photo sequencing batch reactors. *Bioresource Technology*, v. 267, p. 502 – 509, 2018. ISSN 0960-8524. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852418310228>>. 15
- POLLET, B. G.; KOCHA, S. S.; STAFFELL, I. Current status of automotive fuel cells for sustainable transport. *Current Opinion in Electrochemistry*, v. 16, p. 90 – 95, 2019. ISSN 2451-9103. *Electrochemical Materials and Engineering • Sensors and Biosensors*. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2451910319300651>>. 8
- R Core Team. *R: A Language and Environment for Statistical Computing*. Vienna, Austria, 2019. Disponível em: <<https://www.R-project.org/>>. 51, 83
- RAHMATI, M.; ALIPANAHI, Z.; MOZAFARI, M. Emerging biomedical applications of algal polysaccharides. *Current Pharmaceutical Design*, Bentham Science Publishers, v. 25, n. 11, p. 1335–1344, 2019. 4
- RANGANATHAN, A. The levenberg-marquardt algorithm. *Tutorial on LM algorithm*, v. 11, n. 1, p. 101–110, 2004. 66
- RICHMOND, A. *Handbook of microalgal culture: biotechnology and applied phycology*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2008. 3, 6
- RIO-CHANONA, E. del et al. Review of advanced physical and data-driven models for dynamic bioprocess simulation: Case study of algae-bacteria consortium wastewater treatment. *Biotechnology and Bioengineering*, v. 116, 11 2018. 36
- RODGERS, J. L.; NICEWANDER, W. A. Thirteen ways to look at the correlation coefficient. *The American Statistician*, Taylor & Francis, v. 42, n. 1, p. 59–66, 1988. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/00031305.1988.10475524>>. 53
- ROMAN, M.; SELIȘTEANU, D. Modeling of microbial growth bioprocesses—equilibria and stability analysis. *International Journal of Biomathematics*, World Scientific, v. 9, n. 05, p. 1650067, 2016. 36

- ROMÃO, B. et al. Biohydrogen production through dark fermentation by a microbial consortium using whey permeate as substrate. *Applied biochemistry and biotechnology*, Springer, v. 172, n. 7, p. 3670–3685, 2014. 1, 8
- RUCKSTUHL, A. Einführung in die nichtlineare regression. *Institut für Datenanalyse und Prozessdesign, Zürcher Hochschule für Angewandte Wissenschaften, Stand: Juni, 2012.* 64, 67
- SAMPAIO, R.; LIMA, R. de Q. *Modelagem estocástica e Quantificação de Incertezas*. [S.l.]: São Carlos: Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional, 2012. 18
- SCHMIDELL, W. et al. *Biotecnologia industrial-vol. 2: engenharia bioquímica*. [S.l.]: Editora Blucher, 2001. v. 2. 4, 6, 11, 13, 15
- SEBER, G. A.; WILD, C. J. Nonlinear regression. *New Jersey: John Wiley & Sons*, v. 62, p. 63, 2003. 66
- SHAABAN, H. et al. Environmental contamination by pharmaceutical waste: assessing patterns of disposing unwanted medications and investigating the factors influencing personal disposal choices. *J Pharmacol Pharm Res*, v. 1, n. 1, p. 003, 2018. 4, 6
- SHAH, A.; SHAH, M. Characterisation and bioremediation of wastewater: A review exploring bioremediation as a sustainable technique for pharmaceutical wastewater. *Groundwater for Sustainable Development*, v. 11, p. 100383, 2020. ISSN 2352-801X. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352801X19302607>>. 4
- SILVA, A. et al. The use of algae and fungi for removal of pharmaceuticals by bioremediation and biosorption processes: A review. *Water*, MDPI AG, v. 11, n. 8, p. 1555, Jul 2019. ISSN 2073-4441. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3390/w11081555>>. 5
- SILVA, M. I. d.; BORTOLI, Á. L. D. Modelagem e simulação do processo de formação do biogás. *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics. São José dos Campos: SBMAC, 2017, 2018.* 2
- SINGER, J. M.; ANDRADE, D. d. Análise de dados longitudinais. *SIMPÓSIO NACIONAL DE PROBABILIDADE E ESTATÍSTICA*, Embrapa São paulo, v. 7, 1986. 61, 64, 68
- SINGH, A. K. et al. A review on standard methods for identification of bga, growth factors of bga, culture of algal biofertilizer, n2 fixation by bga, rural production technology of bga on the habitat of sidhi region (mp). 2016. 54, 57
- SIVAKUMAR, G. et al. Integrated green algal technology for bioremediation and biofuel. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 107, p. 1–9, 2012. 4
- SLOMPO, N. D. M. et al. Nutrient and pathogen removal from anaerobically treated black water by microalgae. *Journal of Environmental Management*, v. 268, p. 110693, 2020. ISSN 0301-4797. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0301479720306253>>. 1, 4, 5, 54
- SMIRNOVA, A.; SIRB, B.; CHOWELL, G. On stable parameter estimation and forecasting in epidemiology by the levenberg–marquardt algorithm with broyden’s rank-one updates for the jacobian operator. *Bulletin of mathematical biology*, Springer, v. 81, n. 10, p. 4210–4232, 2019. 66

SOETAERT, K.; PETZOLDT, T. et al. Inverse modelling, sensitivity and monte carlo analysis in r using package fme. *Journal of statistical software*, v. 33, n. 3, p. 1–28, 2010. 66, 67, 69

SONG, W. et al. Biohydrogen production by immobilized chlorella sp. using cycles of oxygenic photosynthesis and anaerobiosis. *Bioresource Technology*, Elsevier, v. 102, n. 18, p. 8676–8681, 2011. 8

STROGATZ, S. H. *Nonlinear dynamics and chaos with student solutions manual: With applications to physics, biology, chemistry, and engineering*. [S.l.]: CRC press, 2018. 33, 36

SULEIMAN, A. K. A. et al. From toilet to agriculture: Fertilization with microalgal biomass from wastewater impacts the soil and rhizosphere active microbiomes, greenhouse gas emissions and plant growth. *Resources, Conservation and Recycling*, v. 161, p. 104924, 2020. ISSN 0921-3449. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921344920302421>>. 1, 4, 5, 6

SUN, C. et al. Degradation and transformation of furfural derivatives from hydrothermal pre-treated algae and lignocellulosic biomass during hydrogen fermentation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Elsevier, v. 131, p. 109983, 2020. 9

TELES, F. *Modelagem Matemática e Otimização da Produção de Biohidrogênio via Fermentação Escura*. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho” - Campus Botucatu, 2019. 2

VILLAR-NAVARRO, E. et al. Removal of pharmaceuticals in urban wastewater: High rate algae pond (hrap) based technologies as an alternative to activated sludge based processes. *Water Research*, v. 139, p. 19 – 29, 2018. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135418302689>>. 5

VINÇON-LEITE, B.; CASENAVE, C. Modelling eutrophication in lake ecosystems: A review. *Science of The Total Environment*, v. 651, p. 2985 – 3001, 2019. ISSN 0048-9697. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004896971833777X>>. 3

VOROTNIKOV, V. I. *Partial Stability and Control*. [S.l.]: Birkhäuser Basel, 1998. 430 p. 36

WALLACE, J.; CHAMPAGNE, P.; HALL, G. Multivariate statistical analysis of water chemistry conditions in three wastewater stabilization ponds with algae blooms and ph fluctuations. *Water Research*, v. 96, p. 155 – 165, 2016. ISSN 0043-1354. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0043135416301737>>. 54

WEI, L.; LI, H.; LU, J. Algae-induced photodegradation of antibiotics: a review. *Environmental Pollution*, p. 115589, 2020. ISSN 0269-7491. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0269749120362771>>. 5

WHITE, H. A heteroskedasticity-consistent covariance matrix estimator and a direct test for heteroskedasticity. *Econometrica*, [Wiley, Econometric Society], v. 48, n. 4, p. 817–838, 1980. ISSN 00129682, 14680262. Disponível em: <<http://www.jstor.org/stable/1912934>>. 61, 66

WILT, A. de et al. Micropollutant removal in an algal treatment system fed with source separated wastewater streams. *Journal of hazardous materials*, Elsevier, v. 304, p. 84–92, 2016. 5, 6

XIA, S. et al. A critical review on bioremediation technologies for cr (vi)-contaminated soils and wastewater. *Critical reviews in environmental science and technology*, Taylor & Francis, v. 49, n. 12, p. 1027–1078, 2019. 4

- XIONG, J.-Q.; KURADE, M. B.; JEON, B.-H. Can microalgae remove pharmaceutical contaminants from water? *Trends in biotechnology*, Elsevier, v. 36, n. 1, p. 30–44, 2018. 4, 5
- YACOBY, I. et al. Photosynthetic electron partitioning between [fefe]-hydrogenase and ferredoxin:nadp⁺-oxidoreductase (fnr) enzymes in vitro. *Proceedings of National Academy of Sciences of United States of America*, v. 108, n. 23, p. 9396–9401, 2011. 8
- YANG, J.; LI, Q.; LI, Y. Enhanced biodegradation/photodegradation of organophosphorus fire retardant using an integrated method of modified pharmacophore model with molecular dynamics and polarizable continuum model. *Polymers*, MDPI AG, v. 12, n. 8, p. 1672, Jul 2020. ISSN 2073-4360. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.3390/polym12081672>>. 5
- YANG, J. et al. Mathematical model of chlorella minutissima utex2341 growth and lipid production under photoheterotrophic fermentation conditions. *Bioresource Technology*, v. 102, n. 3, p. 3077–3082, 2011. ISSN 0960-8524. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0960852410017050>>. 36
- YAO, X. et al. A bibliometric review of nitrogen research in eutrophic lakes and reservoirs. *Journal of Environmental Sciences*, Elsevier, v. 66, p. 274–285, 2018. 3, 6
- ZAMBRANO, J. et al. A simple model for algae-bacteria interaction in photo-bioreactors. *Algal Research*, v. 19, p. 155–161, 2016. ISSN 2211-9264. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211926416302570>>. 33
- ZANG, C. et al. Comparison of relationships between ph, dissolved oxygen and chlorophyll a for aquaculture and non-aquaculture waters. *Water, Air, & Soil Pollution*, Springer, v. 219, n. 1-4, p. 157–174, 2011. 54
- ZERBE, G. O. Randomization analysis of the completely randomized design extended to growth and response curves. *Journal of the American Statistical Association*, Taylor & Francis, v. 74, n. 365, p. 215–221, 1979. 68, 69
- ZHANG, L. et al. Methane yield enhancement of mesophilic and thermophilic anaerobic co-digestion of algal biomass and food waste using algal biochar: Semi-continuous operation and microbial community analysis. *Bioresource technology*, Elsevier, v. 302, p. 122892, 2020. 4
- ZHAO, S.; YUAN, S.; WANG, H. Threshold behavior in a stochastic algal growth model with stoichiometric constraints and seasonal variation. *Journal of Differential Equations*, v. 268, n. 9, p. 5113–5139, 2020. ISSN 0022-0396. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022039619305327>>. 2
- ZOUBOULIS, A.; MOUSSAS, P. Groundwater and soil pollution: Bioremediation. In: NRIAGU, J. (Ed.). *Encyclopedia of Environmental Health*. Burlington: Elsevier, 2011. p. 1037 – 1044. ISBN 978-0-444-52272-6. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/B9780444522726000350>>. 1, 4
- ÇELİK, R. Rcev heteroscedasticity test based on the studentized residuals. *Communications in Statistics - Theory and Methods*, Taylor & Francis, v. 48, n. 13, p. 3258–3268, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1080/03610926.2018.1475566>>. 61