

143^a DEFESA DE TESE EM ENGENHARIA INDUSTRIAL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI



JÚLIA CAROLINA BRAZ DE FREITAS BIJOS



pei@ufba.br



www.pei.ufba.br



@peiufba



@peiufba



PEI TV

Orientadores:

- Profa. Karla Esquerre (PEI-UFBA);
- Prof. Luciano Mattos Queiroz (UFBA).

Banca Examinadora:

- Profa. Karla Esquerre (PEI-UFBA);
- Prof. Luciano Mattos Queiroz (UFBA);
- Profa. Ana Isabel Cerqueira de Sousa Gouveia Carvalho – (IST Portugal);
- Prof. Enrique Droguett (UCLA – USA);
- Prof. Idelfonso Bessa dos Reis Nogueira (NTNU);
- Profa Ariuska Karla Barbosa Amorim (UNB);
- Profa Silvia Maria Alves Corrêa Oliveira (UFMG).

Título: “*PREDIÇÃO DA OCORRÊNCIA DE FÁRMACOS EM EFLUENTE DE ETE POR CLASSIFICADORES BOOSTING.*”

Data: 11 de fevereiro de 2025 **Horário:** 13h

Local: https://conferenciaweb.rnp.br/webconf/pei_epufba

Resumo:

As Estações de Tratamento de Esgoto são consideradas a principal rota de emissão de concentrações de fármacos em água superficial, o que pode ofertar riscos a espécies aquáticas e a saúde humana. A partir de dados da quantidade de medicamentos comercializada, é possível estimar as concentrações de fármacos que atingem os cursos d’água após o tratamento realizado pelas estações. Nesse sentido, os métodos de aprendizado de máquina apresentam capacidade de aprendizado e, por isso, podem ser uma ferramenta relevante para a proposição de uma nova abordagem de modelos confiáveis e robustos para a predição da ocorrência de fármacos. Esta pesquisa teve por objetivo geral propor um mecanismo de modelagem de classificação capaz de prever o nível das concentrações de alguns fármacos nos efluentes de estações de tratamento de esgoto. Para tal, foram utilizados dados de comercialização de fármacos para os municípios brasileiros referentes ao período de 2014 a 2020, registros de população e vazão afluente de esgotos municipais e, registros de concentrações de ocorrência de antibióticos, anti-inflamatórios e drogas psiquiátricas em estações de tratamento. O software RStudio foi utilizado para a manipulação dos dados de comercialização de fármaco e obtenção da massa anual comercializada, que foi utilizada posteriormente, para o cálculo da concentração afluente (ng. L-1) de fármacos para tratamento. Três métodos de classificação Boosting foram implementados na linguagem Python, executados para três níveis: 100 ng. L-1, 500 ng. L-1 e 1000 ng. L-1, a fim de prever a classe da concentração de saída dos fármacos para Carbamazepina e para antibióticos selecionados. Em ambas as abordagens, o modelo XGBoost atingiu o maior desempenho em todos os níveis. Para a abordagem de Carbamazepina os modelos XGBoost atingiram F1-score de 63%, 91% e 90%. Para a abordagem com antibióticos o modelo XGBoost obteve F1-score de 99%, 90% e 85% para os limites 1000 ng. L-1, 500 ng. L-1 e 100 ng. L-1, respectivamente. Para ambas as abordagens foi possível obter modelos de desempenho satisfatório. No entanto, o limite de corte de 1000 ng. L-1 demonstrou ser o mais desafiador, dado que gerou amostras de teste com classes altamente desbalanceadas, enquanto os limites de corte de 500 ng. L-1 e 100 ng. L-1 possibilitaram a construção de modelos mais viáveis. Os ajustes construídos revelaram que o uso dos classificadores Boosting apresenta potencial como alternativa de monitoramento e controle de fármacos no esgoto sanitário. A utilização de dados de acesso livre disponibilizados pela ANVISA pode fornecer uma reflexão dos potenciais e das limitações para futuros estudos, visto que até o momento ainda não houve uma ampla exploração em pesquisas. Adicionalmente, a base de dados de ocorrência de fármacos em ETE, construída para esta pesquisa, poderá compor as atividades investigativas de outros pesquisadores, a partir da agregação de novos dados, verificação de outras técnicas de modelagem ou realização de outros tipos de análises.

Palavras chave: Ocorrência de fármacos. Efluentes. Esgoto Sanitário. Aprendizado de Máquina.