

Autodepuração de cursos d'água: um programa de modelagem Streeter Phelps com calibração automática e correção de anaerobiose

(Self-depuration in watercourses: a program for Streeter Phelps modeling with automatic calibration and correction for anaerobic conditions)

Iury Steiner de Oliveira Bezerra

*Graduado. Membro do grupo de Inteligência Computacional Aplicada da PUC - Rio de Janeiro
E-mail: iurysteiner@yahoo.com.br*

Luiz Alberto Ribeiro Mendonça

*Dr., Professor Adjunto do Curso de Engenharia Civil da UFC - Campus Cariri
E-mail: larm@ufc.br*

Horst Frischkorn

*Dr., Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da UFC
E-mail: cariri@ufc.br*

Resumo

Foi desenvolvido um programa usando Object Pascal e Matlab, para o modelo de Streeter Phelps de autodepuração. Foram incorporadas condições de contorno, sugeridas por Chapra, que propiciam: a simulação do perfil de OD e DBO_5 considerando várias entradas de efluentes ao longo do curso d'água e a correção para condições de anaerobiose, condições estas que contribuem com o surgimento de concentrações negativas de OD e conduzem a previsões errôneas. Foi, também, incorporada uma metodologia de calibração automática, baseada na minimização dos erros quadráticos entre as concentrações calculadas e observadas, para obtenção e escolha dos valores dos coeficientes de desoxigenação e reaeração. Para o teste do programa, foram feitas várias simulações: uma para testar o método de calibração automática e outras duas para testar as condições de contorno. Em todos os casos, os resultados obtidos produziram bons desempenhos. O aplicativo executável servirá como ferramenta auxiliar no meio acadêmico, como recurso didático, em aulas de saneamento ambiental, e como ferramenta de gestão da qualidade das águas.

Palavras-chave: Modelo Streeter Phelps, calibração, anaerobiose.

Abstract

Using Object Pascal and Matlab, a program was developed for Streeter Phelps modeling of self-purification. Boundary conditions suggested by Chapra were incorporated that permit the simulation of DO and BOD_5 profiles considering multiple point sources along the flow path and a correction for conditions of anaerobiosis, which lead to negative DO and erroneous previsions in Streeter Phelps modeling. A method of automatic calibration, based on minimizing square deviations between simulated and observed concentrations, for obtaining the coefficients of deoxygenation and reaeration, was incorporated also. Various simulations for testing the program were performed: one for automatic calibration and two for boundary conditions. In all cases a good performance was obtained. The program may serve equally as a teaching instrument in environmental sciences classes and as a working tool in water quality management.

Keywords: Streeter Phelps modeling, calibration, anaerobiosis.

1. Introdução

Precursor de modelos numéricos de qualidade de água, o modelo de Streeter Phelps foi, primeiramente, aplicado em 1925, em um estudo no Rio Ohio, com o objetivo de aumentar a eficiência das ações a serem tomadas no controle da poluição (Streeter & Phelps, 1925).

Ele contribuiu para o surgimento de inúmeros modelos numéricos utilizados em aplicativos computacionais. São exemplos os modelos QUAL I e II das décadas de 70 e 80. A partir de modificações no QUAL II, surgiram as versões QUAL-2E (Fischer, 1995) e QUAL-2K (Chapra et alii, 2006). Esses modelos, derivados das equações clássicas de Streeter e Phelps, têm sido largamente utilizados, não só no controle da qualidade das águas, mas, também, para prognosticar danos decorrentes da implantação de empreendimentos.

O modelo de Streeter Phelps é constituído, de forma genérica, por duas equações diferenciais ordinárias: uma modela a oxidação da parte biodegradável da matéria orgânica e outra, o fluxo de oxigênio proveniente da dinâmica da reaeração atmosférica. Essas equações são nomeadas de, respectivamente, equações de demanda bioquímica de oxigênio e de reaeração.

Matematicamente a cinética do déficit é representada como:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (1)$$

$$\frac{dD}{dt} = -K_1 L + K_2 D \quad (2)$$

e a concentração de oxigênio no tempo é dado por:

$$C(t) = C_s - D(t), \quad (3)$$

onde:

L é a DBO última (mg/L); D é o déficit de oxigênio (mg/L); t é o tempo (dia); K_1 e K_2 são os coeficientes de, respectivamente, desoxigenação e de reaeração (dia^{-1}); $C(t)$ é a concentração de OD no tempo (mg/L); C_s é a concentração de saturação de OD (mg/L); e $D(t)$ é o déficit de oxigênio no tempo.

Considerando $t = x/v$, onde x é a posição em relação ao ponto de descarga do efluente (m) e v a velocidade média do fluxo da água (m/s), as soluções das equações 1 e 2, introduzidas na equação 3, resultam em

$$C(x) = C_s - \left[\frac{K_1 \cdot L_0}{K_2 - K_1} \cdot \left(e^{-\frac{K_1 \cdot x}{v}} - e^{-\frac{K_2 \cdot x}{v}} \right) + (C_s - C_0) \cdot e^{-\frac{K_2 \cdot x}{v}} \right], \quad (4)$$

onde: L_0 é a DBO última inicial (mg/L) e C_0 é a concentração inicial de OD do rio (mg/L).

As condições de contorno, no modelo de Streeter Phelps, são fundamentais para a modelagem de um caso real, especificamente, a anaerobiose e a contribuição de múltiplas fontes de efluentes lançados pontualmente num único rio (Chapra, 1997).

Segundo Gundelach e Castillo (1970), sob condições anaeróbicas, o modelo perde a validade, pois prevê níveis de oxigênio negativos.

A escolha de K_1 e K_2 implica, diretamente, a seleção da curva integral que melhor representa a realidade do sistema, não existindo, porém, nenhum método de determinação que forneça valores que se ajustem, precisamente, à realidade de um corpo hídrico qualquer.

Na literatura, encontram-se alguns métodos de estimativa de K_1 e K_2 que fornecem aproximações razoáveis, dentro de limites predefinidos. Mas, devido a não linearidade desses coeficientes, não se conseguiu, ainda, uma formulação para casos genéricos.

Para Nuvolari (2003), K_1 representa a sedimentação e a decomposição da matéria orgânica, sendo expresso por uma equação que é função dos coeficientes de desoxigenação e de sedimentação, sendo este último função da velocidade de sedimentação do poluente e da profundidade média do leito do rio.

Para Sperling (1996), K_2 pode ser estimado, numa faixa restrita de aplicação, pelas equações de O'Connor e Dobbins, Churchill e Owens, que são funções da velocidade média do fluxo na seção transversal do rio e da profundidade média do mesmo.

Nesse trabalho, foi desenvolvido e testado um programa, na linguagem Object Pascal e Matlab, onde foram adaptadas condições de contorno no modelo de Streeter Phelps, representando anaerobiose e contribuições de múltiplas fontes pontuais de efluentes, sugeridas por Chapra (1997), além de uma metodologia de calibração automática.

2. Metodologia

2.1 Condições de contorno

2.1.1 Anaerobiose

Em condições de anaerobiose, o consumo de oxigênio não mais pode proceder à taxa de $K_1 L$ (taxa de desoxigenação), sendo limitado apenas pela taxa de reoxigenação da água, isto é:

$$\frac{dL}{dt} = -K_2 C_s \quad (5)$$

Chapra (1999) mostra que, ao se resolver essa equação diferencial, o comportamento da DBO, no modelo, será descrito pela equação:

$$L = L_i - K_2 C_s (t - t_i) \quad (6)$$

onde: t_i é o tempo de início da atividade anaeróbica; L_i é o nível da DBO última em t_i ; e C_s é o nível de oxigênio de saturação.

De acordo com a equação 6, a redução da DBO não mais obedece a uma lei exponencial, e, sim, a uma linearidade.

Para aplicação da equação proposta, tem-se que prever o tempo t_p , que representa o início da atividade anaeróbica, a partir da equação 4, expressa em função do tempo.

Segundo Chapra (1997), o oxigênio começara a surgir depois de um tempo t_f determinado pela equação:

$$t_f = t_i + \frac{1}{K_1} \frac{K_1 L_i - K_2 C_s}{K_2 C_s} \quad (7)$$

onde: t_f é o tempo de término da anaerobiose; t_i é o tempo de início da anaerobiose; K_1 é o coeficiente de desoxigenação; K_2 é o coeficiente de reoxigenação; L_i é a DBO última no momento em que anaerobiose ocorre; C_s é a concentração de oxigênio de saturação do rio.

Determinados os parâmetros t_i , t_f e L_p , calcula-se L_j a partir da aplicação de t_f na equação 6.

Saindo das condições de anaerobiose em t_p , aplica-se Streeter Phelps em sua forma original.

2.1.2 Múltiplas fontes de efluentes

Um rio pode ser tratado como sendo uma série de trechos ligados por condições de contorno. Dessa forma, a simulação de um trecho a jusante de uma nova fonte de efluente inicia-se logo após a o trecho simulado da fonte anterior, aplicando-se, novamente, Streeter Phelps em sua forma original.

2.2 Calibração do modelo

A calibração do modelo de Streeter Phelps depende, essencialmente, da escolha dos coeficientes K_1 e K_2 . Esses coeficientes são, muitas vezes, estimados por fórmulas empíricas e, às vezes, requerem ajustes por parte do especialista que estuda o fenômeno.

Certamente, trata-se da parte mais difícil da modelagem, devido à existên-

cia de grande quantidade de combinações possíveis, que aumenta conforme a precisão exigida.

O programa desenvolvido apresenta uma metodologia de estimativa para a determinação de K_1 e K_2 , através da variação dos mesmos, de acordo com a precisão e limites predefinidos pelo usuário.

Cada combinação possível dessas constantes será responsável por uma curva integral, que é uma solução particular do modelo de Streeter Phelps.

No processo de calibração automática, busca-se selecionar a curva (equação 4) que melhor represente os dados observados. Para cada curva integral, é calculado o erro médio quadrático (e_{rms}) entre valores modelados e observados. Os valores de K_1 , K_2 e e_{rms} são plotados num gráfico tridimensional, correspondendo, respectivamente, às coordenadas x, y e z, gerando uma superfície. O par (K_1 , K_2) que minimiza representa a melhor escolha. Para a minimização da função de erro quadrático, utilizou-se o algoritmo dos mínimos quadráticos.

2.3 Apresentação do programa

Como com a utilização do programa resolve-se, numericamente, a equação de Streeter e Phelps para um tempo determinado, existe a possibilidade de configuração do passo de resolução, também chamado de “passo de cálculo”, que é o principal responsável pela obtenção das resoluções discretas da equação em estudo. Esse passo de cálculo, junto às outras particularidades da equação, tais como métodos de determinação do oxigênio de saturação e do coeficiente K_2 , é, inicialmente, requerido para a execução do modelo.

Nessa etapa de execução, o programa fornece as seguintes opções para a determinação do OD de saturação e do K_2 :

- “automática”, utilizando as equações sugeridas por Chapra (1997).
- “manual”, mediante escolha do usuário.

- “especificação do método”, por meio da escolha das equações apresentadas em Chapra (1997) e Sperling (1996).

Após isso, o programa solicita as características do curso d’água e do efluente em duas janelas distintas.

Para o curso d’água é solicitado:

- “extensão” do trecho, medida em campo.
- “profundidade”, medida em campo.
- “OD”, determinado em laboratório ou medido em campo.
- “OD_Saturação”.
- “DBO₅”, determinado em laboratório ou estimada a partir da literatura.
- “velocidade” do fluxo no percurso considerado, medida em campo.
- “vazão” no trecho considerado, medida em campo.
- “temperatura” da água, medida em campo.
- Coeficiente de desoxigenação “ K_1 ”, determinado em laboratório ou estimado a partir da literatura.
- Coeficiente de reaeração “ K_2 ”, obtido mediante a utilização das equações de O’Connor-Dobbins, Owens-Gibbs ou Churchill.

Para o efluente lançado pontualmente no início de um dado trecho é solicitado:

- “OD”, determinado em laboratório ou no campo.
- “DBO₅”, determinado em laboratório.
- “vazão”, medida em campo.
- “temperatura”, medida em campo.

Após as etapas anteriores, o programa apresenta os resultados finais da simulação numa tela posterior.

Para o curso d’água, no ponto de mistura completa com o efluente, são mostrados:

- “tempo de percurso”, que é o tempo necessário para que uma partícula no curso d’água percorra o trecho simulado advectivamente.

- “vazão”, “temperatura”, “OD inicial” e “DBO inicial”, simulados a partir do processo de mistura.

- “ K_1 ” e “ K_2 ”, após a correção aplicada, que são funções da temperatura, como descrito em Chapra (1997), com coeficientes de temperatura (θ) fixos de 1,047 para K_1 e de 1,024 para K_2 .

Para o caso de anaerobiose, são mostradas as seguintes notificações:

- Na caixa de edição sem rótulo, aparecerá o status da anaerobiose, indicando se a mesma foi detectada ou não.

- Nas caixas rotuladas, respectivamente, de “acontecida à” e “finalizada à”, aparecerá a posição da ocorrência e da extinção da anaerobiose no curso d'água.

- Na caixa rotulada de “acontecida em”, aparecerá o tempo de percurso de uma partícula no curso d'água, do ponto de mistura completa até o início da anaerobiose.

- Na caixa de edição rotulada de “finalizada em”, aparecerá o tempo de percurso de uma partícula no curso d'água do início da anaerobiose até a extinção.

- Nas caixas rotuladas, respectivamente, de “DBO início (Ana)” e “DBO final (Ana)”, aparecerá o DBO no início e no final da anaerobiose.

Para simular o processo de autodepuração, clica-se sobre o botão rotulado de “Simular”.

Para acrescentar nova entrada de efluente ao processo de simulação, clica-se sobre o botão rotulado de “Acrescentar efluente”. Em seguida surgirá novamente uma janela. A localização do novo lançamento será a posição final da simulação anterior.

Para apresentação dos perfis de OD, déficit de oxigênio e DBO, seleciona-se uma das opções disponíveis rotuladas de “Oxigênio dissolvido”, “déficit de OD” e “demanda bioquímica de oxigênio”.

Os algoritmos do programa poderão ser obtidos via E-mail do autor principal.

2.4 Exemplos utilizados no teste do programa

2.4.1 Calibração automática

No teste da calibração automática, utilizaram-se dados, adaptados de Gomes (2004), num trecho de 50 km do rio Salgado, município de Juazeiro do Norte.

Os dados reais do curso d'água utilizados na simulação foram: profundidade média de 0,66 m; OD de 2,3 mg/L, no início do trecho; DBO₅ de 40,3 mg/L, no início do trecho; velocidade média do fluxo de 0,30 m/s; vazão média de 1,5 m³/s; e temperatura média da água de 30°C.

Para a temperatura dada, de acordo com Sperling (1996), utilizou-se a concentração do oxigênio de saturação de 7,5 mg/L.

Os dados sintéticos utilizados para ajuste no teste da calibração automática do modelo encontram-se na Tabela 1.

2.4.2 Anaerobiose

Para simulação da anaerobiose, criou-se um efluente de alta carga orgânica, com dados: para o rio e o efluente, respectivamente, OD de 6,8 e 0,0 mg/L, DBO de 0,5 e 600,0 mg/L, vazão de 0,71 e 0,10 m³/s, temperatura média de 25°C; para o rio, velocidade média do fluxo de 0,35 m/s e coeficientes K_1 e K_2 de, respectivamente, 0,60 e 2,33 d⁻¹ (exemplo adaptado de Chapra, 1997).

2.4.3 Múltiplas fontes de efluentes

Para a simulação com introdução de múltiplas fontes de efluentes, consideraram-se o lançamento de dois efluentes e a contribuição de um afluente, de forma conjunta, no mesmo curso d'água. O pri-

meiro efluente, com características orgânicas, é lançado no início do curso d'água. A 10 km a jusante desse lançamento, ocorre a contribuição de um afluente de água limpa proveniente de uma nascente. A 60 km a jusante dessa contribuição, ocorre o lançamento do segundo efluente, também com características orgânicas. A contribuição do efluente de água limpa foi adaptada a um exercício proposto por Sperling (1996).

Na simulação, consideraram-se os seguintes dados: para o primeiro e o segundo efluente e para o afluente, respectivamente, DBO₅ de 341, 500 e 1 mg/L e vazões médias de 0,14, 0,10 e 0,30 m³/s; para os dois efluentes e para o curso d'água, respectivamente, OD de 0 e 7 mg/L; para o curso d'água, altitude de 1000 m, temperatura da água de 25°C, profundidade média de 1,0 metro e vazão no início do primeiro trecho do curso d'água de 0,71 m³/s.

3. Resultados e discussão

3.1 Teste da calibração automática

A Figura 1 mostra a superfície gerada pela variação de K_1 e K_2 em função do e_{rms} (a) e as curvas sem e com calibração automática (b).

A curva sem calibração automática foi obtida adotando K_1 de 0,5 d⁻¹, obtido de Chapra (1997) para esgoto doméstico e K_2 de 4,0 d⁻¹, obtido da equação de O'Connor-Dobbins.

Para gerar a superfície no processo de calibração automática, utilizou-se uma precisão de 0,1 e limites máximos de 2 e 10 d⁻¹ para K_1 e K_2 , respectivamente. Entre zero e esses limites máximos encontram-se K_1 e K_2 adotados na simulação sem calibração automática.

Tabela 1 - Dados sintéticos utilizados para ajuste no teste da calibração automática do modelo.

Distância (km)	10	15	20	25	30	35	40	45	50
OD (mg/L)	1,0	1,5	3,0	3,9	4,2	5,0	5,2	5,5	6,0

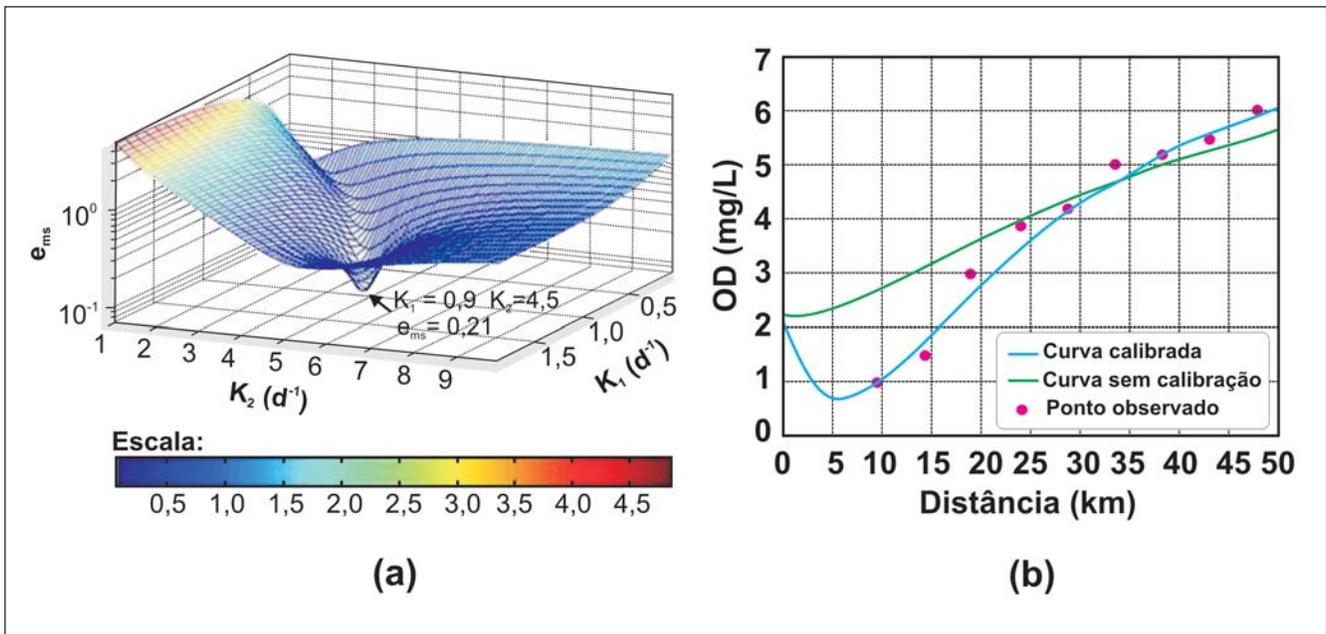


Figura 1 - Superfície gerada pela variação de K_1 e K_2 em função do e_{rms} (a) e curvas sem (K_1 determinado em laboratório e K_2 obtido pelas equações propostas por Chapra) e com calibração automática (b) para o rio Salgado.

A Figura 2 mostra o gráfico de correlação entre o OD observado (Tabela 1) e o OD calculado com calibragem automática.

Observa-se o êxito do aplicativo quanto à previsão das concentrações de OD ao longo de 50 km do curso d'água estudado, após efetuar a calibração automática. A Figura 1a mostra a seleção dos coeficientes K_1 e K_2 corrigidos para a temperatura de 30°C de, respectivamente, 0,9 e 4,5 d^{-1} , com erro médio quadrático mínimo de 0,21. O valor de K_1 corrigido encontra-se próximo ao limite máximo para esgoto doméstico e o de K_2 , próximo ao valor obtido pela equação de O'Connor-Dobbins. Esses valores estão coerentes por se tratar de um curso d'água poluído e de baixa profundidade.

As Figuras 1b e 2 mostram o bom ajuste com a utilização do modelo de calibração automático, com coeficientes de determinação 0,9836, angular 1,0 e linear 0,048.

Na Figura 1b, verificam-se um decréscimo na concentração de oxigênio dissolvido e uma recuperação gradativa ao longo do trecho simulado. O curso d'água somente apresentará OD mínimo

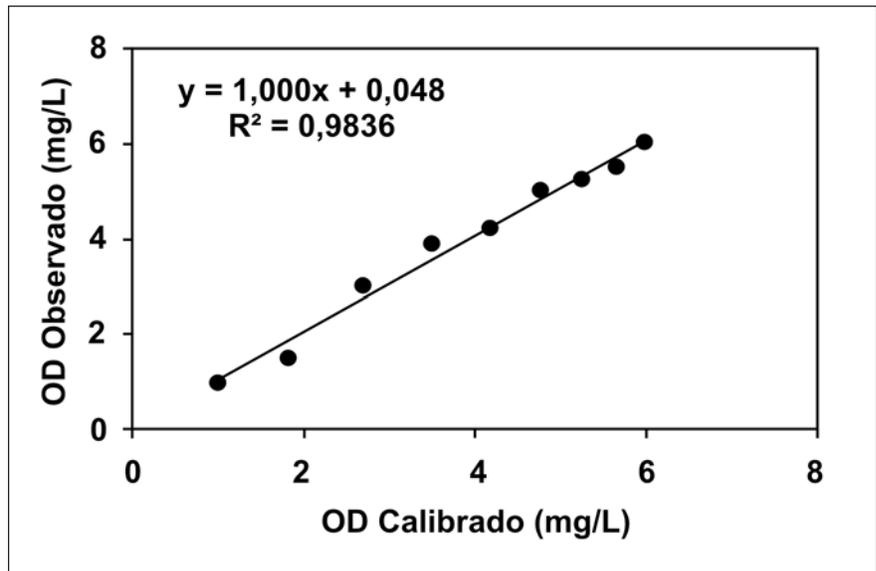


Figura 2 - Gráfico de correlação entre o OD observado e o OD calculado com calibragem automática.

de 5 mg/L, exigido pela resolução CONAMA 357/05, a uma distância de aproximadamente 36 km do ponto inicial, isto, se não houver nenhuma contribuição de efluentes e/ou afluentes ao longo do curso d'água.

3.2 Simulação com anaerobiose

A Figura 3 ilustra a evolução da autodepuração em condições de anaerobiose.

Verifica-se que as curvas possuem o mesmo comportamento das curvas apresentadas por Chapra (1997), comprovando a correta implementação da condição de

contorno. As curvas “OD sem correção” e “DBO sem correção” representam, respectivamente, o OD e o DBO_5 pela metodologia tradicional proposta por Streeter e Phelps, onde se verifica o aparecimento de concentrações negativas de OD durante o processo anaeróbico. As curvas “OD corrigido” e “DBO corrigida” representam, respectivamente, o DBO_5 e o OD com as correções propostas por Chapra (1997).

Os tempos de ocorrência da anaerobiose e as concentrações de DBO_5 , início e fim, fornecidos pelo programa, após o lançamento do efluente de alta carga orgânica, foram, respectivamente, de 0,1 e 2,5 dias e 68,65 e 24,68 mg/L.

3.3 Simulação com introdução de múltiplas fontes de efluentes

Na Figura 4, mostra-se o perfil de OD gerado pela simulação na extensão de 100 km.

As mudanças bruscas dos níveis de OD indicam os lançamentos dos efluentes e a contribuição do aflente. Logo após o lançamento do primeiro efluente, verifica-se um decréscimo de OD, devido à atividade aeróbia efetuada para oxidação da matéria orgânica. Após o pico mais baixo, a 10 km, a uma distância aproximada onde o OD atingiria a concentração mínima, há um aumento brusco na concentração de OD pela contribuição de água limpa, seguido de um aumento gradual representado por um segmento da curva que obedece à formulação proposta por Streeter e Phelps, até o próximo lançamento, situado a 60 km do ponto inicial. No lançamento do segundo efluente, nota-se, de novo, um decréscimo brusco na concentração de OD. Seguindo o curso d'água, se não existirem fontes significativas de contribuição, o curso d'água alcançará a concentração de saturação de OD.

4. Conclusões

Por meio da modelagem matemática, utilizando-se o modelo de Streeter

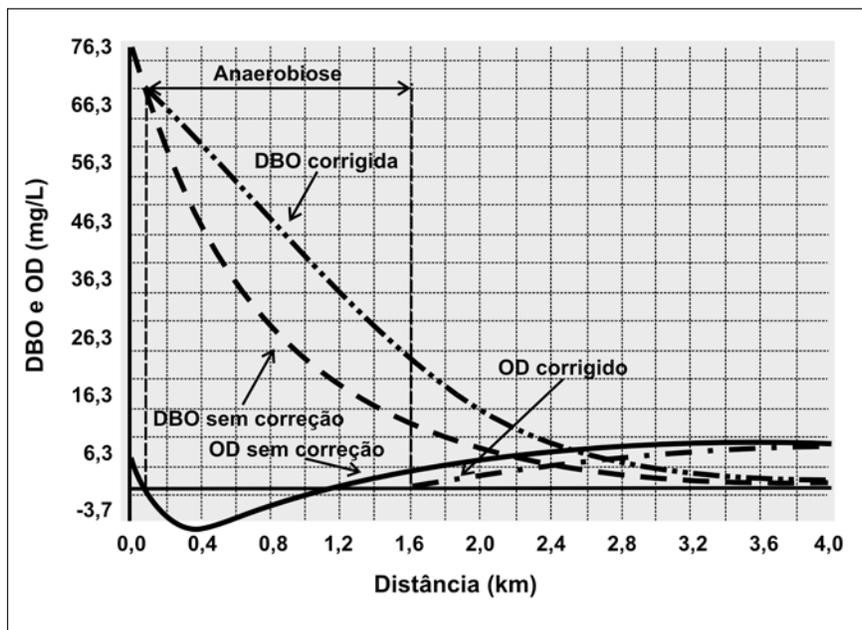


Figura 3 - Curvas geradas na simulação de anaerobiose.

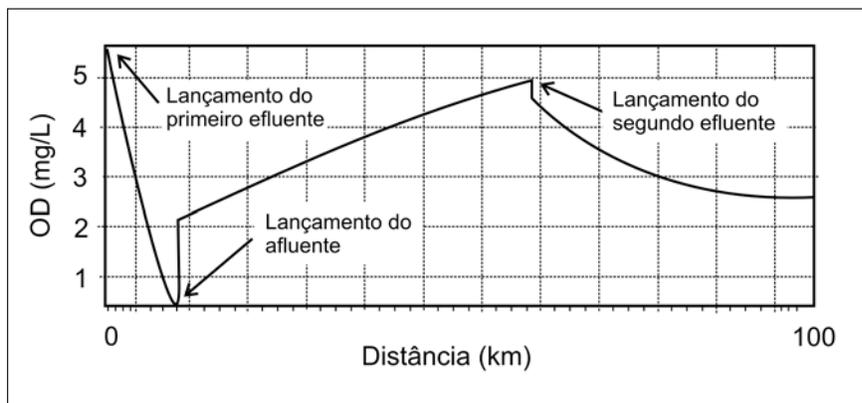


Figura 4 - Perfil de OD gerado pela simulação considerando múltiplas contribuições.

Phelps, avaliou-se o processo de autodepuração de cursos d'água, em um caso real e em dois casos hipotéticos, adaptados da literatura.

Os resultados dos casos propostos sugerem que o modelo desenvolvido pode ser utilizado na projeção de cenários futuros em cursos d'água poluídos, subsidiando, assim, medidas que poderão ser tomadas em termos de tratamentos requeridos para o atendimento de padrões ambientais.

A calibração automática dos coeficientes de desoxigenação e reaeração, baseada na minimização dos erros qua-

dráticos, demonstrou ser eficaz na calibração do modelo.

A implementação da condição de contorno para a ocorrência de anaerobiose foi efetuada com sucesso, corrigindo as concentrações de OD e DBO_5 do curso d'água, durante e após o processo.

A implementação da condição de contorno para múltiplas fontes de poluição pontual, também, foi desenvolvida com sucesso, mostrando as alterações nas concentrações de OD do curso d'água, após o lançamento de efluentes de características orgânicas, bem como após as contribuições de águas limpas.

5. Agradecimentos

À Faculdade de Tecnologia, unidade do Cariri (FATEC) e à Companhia de Gestão dos Recursos Hídricos do Estado do Ceará (COGERH), pelo acolhimento e incentivo na elaboração desse trabalho.

6. Referências bibliográficas

CHAPRA, S. C. et alii. *A modeling framework for simulating river and stream water quality*. QUAL-2K, version 2.04: documentation and user's manual.

- Washington: Environmental Protection Agency, Tufts University, the Washington Dept. of Ecology, 2006.
- CHAPRA, S. C. *Surface water quality modeling*. McGraw-Hill, 1997.
- FISCHER, E. G. *Determinação de contaminação do ribeirão do Feijó através de levantamento de dados e modelo matemático de qualidade da água*. São Carlos: Escola de Engenharia de São Carlos - Universidade de São Paulo, 1995. (Dissertação de Mestrado).
- GOMES, L. A. *Avaliação da capacidade de autodepuração do rio Salgado, município de Juazeiro do Norte - CE, através da modelagem computacional QUAL-2E*. Juazeiro do Norte: Centro Federal de Ensino Tecnológico, 2004. (Monografia).
- GUNDELACH, J. M., CASTILLO, J. E. Natural stream purification under anaerobic conditions. *J. Water Poll. Contr. Fed.*, v. 48, n. 7, p. 1753-1758, 1970.
- NUVOLARI, A. *Esgoto sanitário: coleta, transporte, tratamento e reúso agrícola*. São Paulo: Edgard Blücher, 2003.
- SPERLING, M. von. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos (princípios do tratamento biológico de águas residuárias)*. Minas Gerais: ABES, 1996. v. 1.
- STREETER, H. W., PHELPS, E. B. *A study of the natural purification of the Ohio River*. Public Health Bulletin 146, U.S. Washington: Public Health Service, 1925.

Artigo recebido em 25/05/2007 e aprovado em 11/03/2008.

Descubra as muitas informações da:
**Geologia, Mineração,
Metalurgia & Materiais
e Engenharia Civil.**



**Assine e
publique
na Rem**

Conheça o nosso novo site: **www.rem.com.br**