Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 6, n. 2, 2018.

Trabalho apresentado no XXXVIII CNMAC, Campinas - SP, 2018.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Determinação de Parâmetros do Modelo de Streeter Phelps

Vitor José Petry[1]
Curso de Matemática, UFFS, *Campus* Chapecó, SC
Pedro Augusto Pereira Borges[2]
Curso de Matemática, UFFS, *Campus* Chapecó, SC
Fernando Augusto Brancher[3]
Curso de Matemática, UFFS, *Campus* Chapecó, SC

Resumo. O monitoramento da contaminação de rios é feito através da coleta e análise de amostras de água, cujos dados possibilitam a determinação de parâmetros de modelos matemáticos. Neste trabalho são apresentados os resultados de simulações numéricas para a resolução do problema inverso, visando a determinação dos coeficientes do modelo de Streeter Phelps, a partir de dados experimentais obtidos na literatura. Esse modelo consiste em duas equações diferenciais parciais acopladas, que relacionam as variáveis concentração de oxigênio dissolvido e demanda bioquímica de oxigênio, em função do espaço unidimensional e o tempo. O problema direto foi resolvido implementando o modelo com um método em diferenças finitas, enquanto que o problema inverso foi resolvido pelo método de procura em rede. Os resultados indicam uma correlação satisfatória entre os dados experimentais e as simulações, para os valores dos parâmetros obtidos pelo método proposto.

Palavras-chave. Modelo de Streeter Phelps, determinção de parâmetros, problema inverso, simulação numérica.

1 Introdução

A questão ambiental vem adquirindo importância à medida que cresce a conscientização da sociedade sobre a extensão e gravidade dos problemas advindos de alterações ambientais devido às ações humanas. A água é um dos recursos naturais essencias para o desenvolvimento da vida no planeta, entretanto, sua poluição vem afetando os meios áquaticos e terrestre e colocando em risco a saúde e sobrevivência de diversas espécies. Quando um foco de poluição é lançado em um determinado rio, este tem uma capacidade própria de se recuperar ao longo do leito, de acordo com seu formato e vazão. O monitoramento da contaminação pode ser feito através de sondagem, com coleta de amostras e posterior análise em laboratório. Esse processo, normalmente, é de custo significativo e demorado. A técnica de simulação utilizando modelos matemáticos é uma alternativa de

[1]vitor.petry@uffs.edu.br
[2]pedro.boeges@uffs.edu.br
[3]fernando.brancher@hotmail.com

predição da concentração de poluentes em função do espaço e do tempo, desde que sejam conhecidos os parâmetros característicos (ou coeficientes do modelo utilizado) do meio em análise e dos elementos contaminantes.

O objetivo do presente trabalho é determinar os coeficientes do modelo de Streeter Phelps [1] a partir de dados experimentais obtidos na literatura [3], em um rio com características descritas pelo autor dos experimentos. As simulações foram realizadas a partir da implementação numérica das equações que compõe o modelo usando diferenças finitas, constituindo a determinação dos coeficientes, um problema inverso a ser resolvido pelo método de procura em rede.

2 Descrição do Modelo e Resolução Numérica

O modelo de autodepuração de Streeter Phelps foi desenvolvido por pesquisadores americanos em 1925 e busca determinar o tempo e/ou a distância de recuperação da qualidade da água, após a entrada de um efluente poluído à montante do rio. O modelo consiste num sistema de duas equações diferenciais parciais acopladas [1], mostradas nas equações (1) e (2):

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U\frac{\partial C}{\partial x} = D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_2(C_s - C) - K_1 L - D_B \tag{1}$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} + U\frac{\partial L}{\partial x} = D_x\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - (K_1 + K_3)L + L_R \tag{2}$$

com $x \in [0, X]$ e $t \in [0, T]$ e condições de contorno $C(0,t) = \Phi_1(t)$, $C(X,t) = \Psi_1(t)$, $L(0,t) = \Phi_2(t)$, $L(X,t) = \Psi_2(t)$. C é a concentração de oxigênio dissolvido (OD), C_s é a saturação da concentração de OD, x é a distância ao longo do rio, t é o tempo, U é a velocidade média do fluxo, D_x é o coeficiente de dispersão, D_B é um parâmetro que inclui o efeito da fotossíntese, respiração de plantas e remoção de oxigênio dissolvido no leito do rio, K_1 é o o coeficiente de desoxigenação, K_2 é o coeficiente de reaeração, K_3 é o coeficiente da taxa de remoção da DBO por sedimentação e adsorção, L é a demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e L_R é a taxa de adição de DBO ao longo do leito, incluindo a adição de DBO com escoamento, a difusão de resíduos parcialmente degradados do leito e a ressecção e ressuspensão dos depósitos do fundo. A partir desse modelo, inúmeros autores, dentre eles Sperling [4], sugeriram simplificações e adaptações empíricas na tentativa de obter soluções analíticas ou mesmo facilitar a obtenção de soluções numéricas para o problema.

Neste trabalho é obtida uma solução numérica do modelo completo, buscando ajustar os coeficientes das equações do sistema pela solução do problema inverso pelo Método de Procura em Rede. O problema direto foi resolvido pela discretização das equações (1) e (2) e suas respectivas condições de contorno, usando diferenças finitas progressivas de 1ª ordem na variável temporal e centradas de 2ª ordem na variavel espacial. As condições de contorno foram obtidas por um ajuste polinomial de dados experimentais da literatura.

Após a discretização (considerando I intervalos espaciais e N intervalos temporais) e a aplicação das condições de contorno, o sistema dado pelas equações (1) e (2) resulta nas

DOI: 10.5540/03.2018.006.02.0269

equações matriciais acopladas:

$$\mathbf{C}^{n+1} = \mathbf{A}.\mathbf{C}^n + \mathbf{B}^n \tag{3}$$

$$\mathbf{L}^{n+1} = \mathbf{D}.\mathbf{L}^n + \mathbf{E}^n \tag{4}$$

Os vetores $\mathbf{C}^n$ e $\mathbf{L}^n$ representam o valor da concentração de OD e da DBO, respectivamente no instante $t = n.\Delta t$, (com $n = 0,\ 1,\ 2, ..., N-1$) em cada posição do domínio e são dados por:

$\mathbf{C}^n = \left[\begin{array}{ccccc} C_1^n & C_2^n & C_3^n & \cdots & C_{I-1}^n \end{array}\right]^T$ e $\mathbf{L}^n = \left[\begin{array}{ccccc} L_1^n & L_2^n & L_3^n & \cdots & L_{I-1}^n \end{array}\right]^T$.

A matriz $\mathbf{A}$ de ordem $(I-1)$ é dada por (5):

$$A = \begin{pmatrix} d_1 & (\delta-\gamma) & & & & \\ \delta+\gamma & d_1 & \delta-\gamma & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \delta+\gamma & d_1 & \delta-\gamma \\ & & & & (\delta+\gamma) & d_1 \end{pmatrix} \tag{5}$$

Já a matriz $\mathbf{D}$ tem o mesmo formato de $\mathbf{A}$, substituindo nesta, os elementos da diagonal principal por d_2. Os demais elementos continuam iguais. Temos nestas matrizes que $\delta = D_x\dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$, $\gamma = U\dfrac{\Delta t}{(2\Delta x)}$, $d_1 = 1 - 2\delta - K_2\Delta t$, $d_2 = 1 - 2\delta - (K_1 + K_3)\Delta t$.

O vetor $\mathbf{B}^n$ é dado por:

$$\mathbf{B}^n = \left[\begin{array}{ccccc} \Delta t F_1^n + (\delta+\gamma)\Phi_1^n & \Delta t F_2^n & \cdots & \Delta t F_{I-2}^n & \Delta t F_{I-1}^n + (\delta-\gamma)\Psi_1^n \end{array}\right]^T \tag{6}$$

sendo $F_i^n = K_2.C_s - K_1.L_i^n - D_B$, enquanto Φ_1 e Ψ_1 são as funções ajustadas referente aos valores da OD das condições de contorno.

O vetor $\mathbf{E}^n$ é dado por:

$$\mathbf{E}^n = \left[\begin{array}{ccccc} \Delta t L_R + (\delta+\gamma)\Phi_2^n & \Delta t L_R & \cdots & \Delta t L_R & \Delta t L_R + (\delta-\gamma)\Psi_2^n \end{array}\right]^T \tag{7}$$

sendo Φ_2 e Ψ_2 as funções ajustadas referente aos valores da DBO das condições de contorno.

Para o ajuste dos coeficientes foram usados os dados exprimentais da literatura apresentados por Formentini [3]. Dentre diversos experimentos desenvolvidos em seu trabalho, Formentini apresenta valores da concentração de oxigênio dissolvido (OD) e da demanda bioquímica de oxigênio (DBO) em três posições distintas do Rio Vacacaí Mirim, em Santa Maria, RS ao longo de vinte dias. De acordo com o referido trabalho, as coletas foram feitas nas posições D_1 (de coordenadas geográficas $29^o\ 40'\ 54,54$" S e $53^o\ 46'\ 53,51$" O), D_2 (de coordenadas geográficas $29^o\ 41'\ 51,23$" S e $53^o\ 42'\ 31,91$" O) e D_3 (de coordenadas geográficas $29^o\ 41'\ 51,23$" S e $53^o\ 42'\ 31,91$" O), onde o fluxo do rio se dá na direção D_1 para D_3. A distância do ponto D_1 até o ponto D_2, considerando a trajetória da água pelo leito do rio foi estimada em $10,88\ km$ e entre os pontos D_2 e D_3 em $6,58\ km$.

DOI: 10.5540/03.2018.006.02.0269

Para a solução do problema considerou-se os valores de OD e DBO nos pontos D_1 e D_3 como condições de contorno de entrada e saída respectivamente, enquanto que os valores em D_2 foram usados para ajustar os parâmetros, considerando como melhor solução a que resultasse no menor erro médio para as duas grandezas medidas. Devido as características da disposição dos dados experimentais em um gráfico de dispersão, optou-se por um ajuste polinomial dos valores da OD e da DBO para as condições de contorno, conforme mostrado na Figura 1. Já a condição inicial foi aproximada por interpolação entre dois pontos consecutivos.

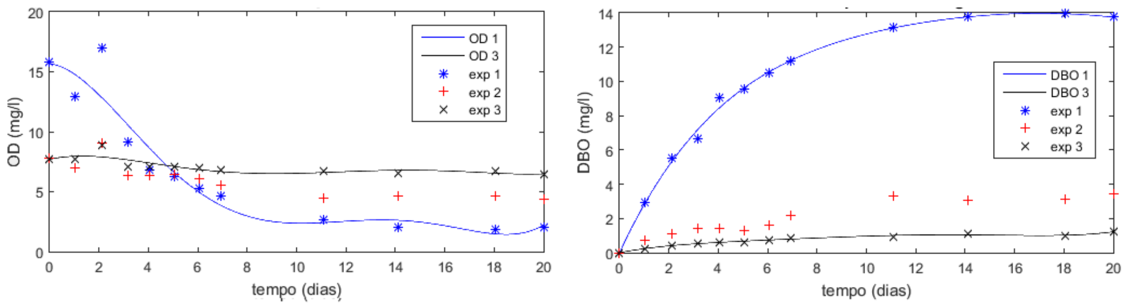

Figura 1: Dados experimentais da literatura [3] para OD (esquerda) e para DBO (direita) nas posições D_1, D_2 e D_3 e ajuste polinomial das condições de contorno.

Para a solução do problema inverso, adotou-se o Método de Procura em Rede proposto por Borges, Cervi e Vione [2] que consiste em definir para cada parâmetro a ser estimado um intervalo que supostamente contenha um valor ótimo do parâmetro em questão, construindo então uma rede de intervalos particionados (um intervalo particionado para cada parâmetro). Com essa rede o problema direto é resolvido com todas as combinações possíveis dos valores que compõe a rede, fazendo a busca pelo menor erro de acordo com o critério estabelecido.

3 Resultados

A partir da implementação numérica das equações que compõe o problema proposto foram realizadas as simulações na busca dos coeficientes visando a otimização do modelo. O problema foi resolvido para $x \in [0, X]$ e $t \in [0, T]$, com $X = 17,46\ km$ e $T = 20$ dias, conforme condições dos dados experimentais e velocidade média de fluxo $U = 5,616\ km.d^{-1}$. O intervalo espacial foi particionado em $I = 30$ subintervalos e o temporal em $T = 400$ subintervalos de forma a garantir a estabilidade do método numérico, considerando as possíveis variações dos parâmetros que possam influenciar a estabilidade. Durante as simulações identificou-se a necessidade de variar o valor do parâmetro L_R ao longo do tempo. Pelas características da contribuição desse parâmetro no resultado do ajuste optou-se em escrever esse parâmetro na forma:

$$L_R = a_0 \ln(1 + a_1 t) + a_2 \qquad (8)$$

DOI: 10.5540/03.2018.006.02.0269

sendo a_0, a_1 e a_2 também parâmetros a serem determinados. A inclusão desses parâmetros permitiu um ajuste mais refinado, com erro de aproximação significativamente menor em relação às simulações em que considerou-se L_R um parâmetro constante. A escolha dessa função se deu pelo tipo de comportamento da curva ao observar a necessidade de menor influência do parâmetro L_R no início das simulações com gradativo aumento dessa influência ao longo do tempo, o que está bem descrito no comportamento da função dada na equação (8). Do ponto de vista físico, essa equação sugere gradativa elevação na taxa de adição de DBO no fundo do leito ao longo do tempo. Observou-se ainda que para os parâmetros D_x e D_B, variações dentro do "intervalo ótimo" no particionamento inicial (intervalos mais espaçados) produziam efeitos desprezíveis nos resultados das simulações, o que permitiu fixar seus valores (Tabela 1), diminuindo dessa forma a quantidade de parâmetros a serem ajustados nos refinamentos mais finos.

Os resultados obtidos a partir dos ajustes efetuados são apresentados na Tabela 1. Considera-se o melhor ajuste o que fornece o menor valor do erro absoluto médio entre a solução obtida na simulação pelo modelo e os dados experimentais para as duas grandezas calculadas nos doze momentos de coleta apresentados na literatura [3]. O valor desse erro médio na obtenção dos parâmetros mostrados na Tabela 1 foi de $1,59.10^{-2}$. O tempo de processamento para a solução do problema inverso quando considerada uma rede com dez intervalos para cada parâmetro ajustado no refinamento foi de 10 horas e 33 minutos. Nas Figuras 2 e 3 são mostrados os resultados da solução das equações do modelo (equações (1) e (2)) com os coeficientes ajustados para os valores da OD e DBO, respectivamente ao longo do tempo em diferentes posições do rio, sendo D_2 a posição em que foram obtidos os dados experimentais.

Tabela 1: Parâmetros ajustados na resolução do problema inverso.

Coeficiente	K_1	K_2	K_3	D_x	D_B	a_0	a_1	a_2
Valor	1,10	1,25	0,05	2,25	0,00	0,50	0,45	0,70

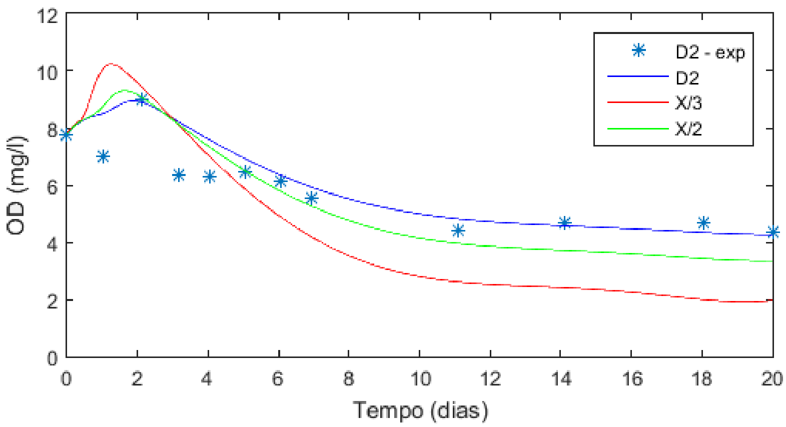

Figura 2: Curvas da OD em função do tempo nas posições D_2, $\frac{X}{2}$ e $\frac{X}{3}$ do leito do rio e dados experimentais da OD na posição D_2.

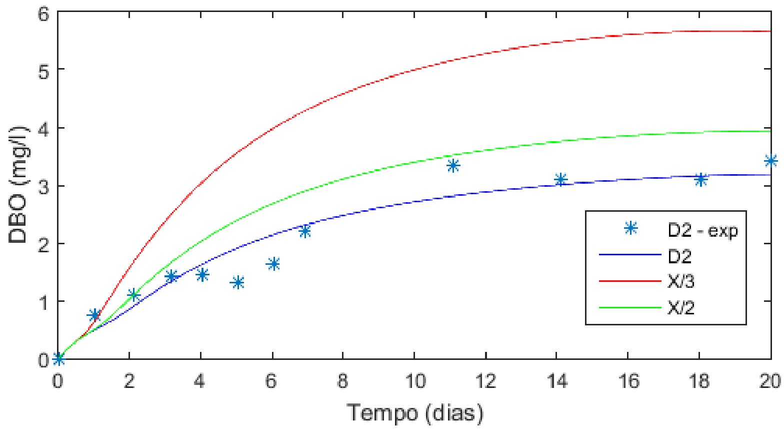

Figura 3: Curvas da DBO em função do tempo nas posições D_2, $\frac{X}{2}$ e $\frac{X}{3}$ do leito do rio e dados experimentais da DBO na posição D_2.

Observa-se nestas figuras boa aproximação das curvas obtidas nas simulações numéricas com os dados experimentais, o que sugere que o modelo descreve de forma satisfatória o fenômeno físico retratado nos dados. Ao analisarmos a Figura 2, percebemos que na sequência de dados experimentais na posição D_2, o terceiro ponto difere significativamente do restante da sequência ("ponto fora da curva") o que também é observado nas condições de fronteira no mesmo dia (Figura 1). Embora não conhecendo o que motivou essa alteração na obtenção do dado experimental, observamos que o modelo foi sensível a essa alteração, o que mostra sua capacidade de adequação aos dados fornecidos no momento do ajuste dos parâmetros. Um reflexo desse fenômeno também é observado de forma suave na curva relativa à DBO na posição D_2 da Figura 3 na vizinhança do segundo dia do experimento.

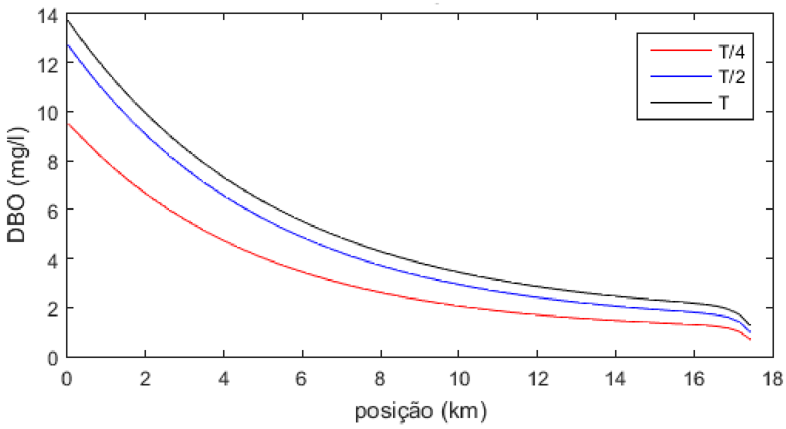

Figura 4: Curvas da DBO em função da posição no leito do rio relativo aos tempos $\frac{T}{4}$, $\frac{T}{24}$ e T.

Na Figura 4 são apresentadas as curvas da DBO em função da posição ao longo do leito do rio para três “cortes” na variável temporal. Observa-se um caimento acentuado próximo à posição final, possivelmente pela necessidade da curva se ajustar à condição de contorno neste local. Isto nos sugere a importância de se aumentar os pontos de coleta de dados ao longo do rio para conseguir maior segurança na descrição dos dados pelo modelo para o caso em que se pretende fazer projeções a partir do modelo. Observa-se que além das condições de contorno, havia a disposição de dados experimentais apenas para uma posição intermediária, o que justifica esse tipo de comportamento observado nas curvas.

4 Considerações Finais

O modelo de Streeter Phelps mostrou-se bastante adequado para descrever o problema proposto na tentativa de prever as concentração de oxigênio dissolvido e da demanda bioquímica de oxigênio, elementos fundamentais para a determinação da qualidade da água em um rio. Observa-se que com a disponibilidade atual de recursos computacionais já é possível trabalhar com o modelo completo, sem a necessidade de realizar excessivas simplificações ou geração de modelos totalmente empíricos. Por outro lado, ressalta-se a importância de coletar dados em mais posições do rio, a fim de garantir que os parâmetros ajustados descrevam com maior segurança as situações reais ao longo de todo o domínio, quando da utilização do modelo para previsões a serem usadas no planejamento de ações de cunho ambiental.

Agradecimentos

O desenvolvimento desta pesquisa teve o apoio da FAPESC através do projeto de pesquisa aprovado no Edital de Chamada Pública 07/2015.

Referências

[1] J. P. Bennett and R. E. Rathbun. *Reaeration in Open-Channel Flow.* U.S. Government Printing Office, Washington, 1972.

[2] P. A. P. BORGES, A. CERVI,M. T. VIONE. Determinação dos parâmetros da equação de Van Genutchen usando problema inverso em um problema de evaporação. *In: VIII ERMAC*, Pelotas, Rio Grande do Sul, Brasil, 2008.

[3] T. A. Formentini. Coeficientes de desoxigenação e de reaeração superficial em trechos do rio Vacacaí Mirim, Dissertação de Mestrado em Engenharia Civil, UFSM, 2010.

[4] M. V. Sperling. *Estudo e modelagem da qualidade da água dos rios.* UFMG, Belo Horizonte, 2005.

