

Solução numérica de um modelo OD-DBO considerando a dependência entre as equações

Alice Mara Ferreira da Conceição Santana
PPGEA
Universidade Federal do Paraná
Curitiba, Brasil
alicesantana@ufpr.br

Cynara de Lourdes da Nóbrega Cunha
PPGEA/PPGMNE
Universidade Federal do Paraná
Curitiba, Brasil
cynara@ufpr.br

Resumo—A redução das concentrações de oxigênio dissolvido em consequência da presença de matéria orgânica é um dos grandes problemas enfrentados na gestão dos recursos hídricos de países em desenvolvimento. A modelagem matemática pode ser uma importante ferramenta na solução deste transtorno, mas grande parte dos modelos OD-DBO não considera que a presença do oxigênio é indispensável para a decomposição da matéria orgânica. Neste trabalho foi realizada a modelagem numérica de um sistema unidimensional com lançamento contínuo de carga orgânica na fronteira, considerando esta dependência entre as substâncias. A validação do modelo proposto foi realizada comparando a solução numérica com a solução analítica de Streeter-Phelps para estuários. Os resultados mostraram que esta dependência altera de maneira significativa os resultados, e esta consideração permite mostrar um comportamento mais realista para a resposta do corpo d'água ao lançamento de carga orgânica.

Palavras-chave—Modelagem, qualidade da água, OD-DBO

I. INTRODUÇÃO

A manutenção da qualidade ambiental dos meios aquáticos está intrinsecamente ligada à presença do oxigênio dissolvido (OD). Dentre os fatores capazes de reduzir sua concentração nas massas líquidas, destaca-se a presença de matéria orgânica proveniente de esgotos domésticos, que necessita de oxigênio para ser estabilizada pelos microrganismos, e cujo potencial poluidor pode ser indiretamente medido pela demanda bioquímica de oxigênio (DBO). A relação entre as concentrações de OD e a presença de matéria orgânica em corpos d'água vem sendo amplamente utilizada nos estudos das Engenharias de Recursos Hídricos, Sanitária e Ambiental, especialmente pela medição relativamente simples dos mesmos, e a possibilidade de usar sua quantificação em modelos matemáticos [7].

A poluição das águas naturais por matéria orgânica e o consequente consumo do oxigênio dissolvido são, ainda, grandes problemas de poluição das águas no Brasil, ocasionados principalmente pelo crescimento populacional e pelo desenvolvimento industrial dissociados de mecanismos de controle de efluentes e gestão de recursos hídricos. Trata-se de um problema desafiador, para o qual a modelagem computacional se destaca como importante ferramenta de solução.

Os primeiros modelos OD-DBO desenvolvidos por Streeter e Phelps em 1925 marcaram um grande avanço nos estudos em Meio Ambiente e Saneamento Ambiental, servindo de base

para diversos modelos mais complexos usados nos dias atuais [7] - [3].

Buscando analisar a performance dos modelos OD-DBO comumente usados (Streeter- Phelps (1925), Camp (1963), Bhargava (1983), Thomann e Muller (1987) e Jolankai (1997)), [3] simularam o comportamento do rio Kali, um dos mais poluídos da Índia. Os resultados encontrados foram comparados com dados medidos em 22 estações de amostragem ao longo do rio entre março de 1999 e fevereiro de 2000. No mesmo trabalho, os autores propuseram um modelo complexo, com um grande número de variáveis físicas e dados de entrada, e o testaram como os outros modelos. Concluíram que os modelos comumente aplicados fazem aproximações adequadas, mas os valores de estimativa de erro, desvio padrão, correlação estatística e erro médio multiplicativo mostraram baixa performance dos mesmos. O modelo complexo desenvolvido descreveu melhor o comportamento do meio natural, tendo resultados mais próximos daqueles encontrados nas medições.

A presença de oxigênio é imprescindível para a decomposição da matéria orgânica, entretanto a maioria dos modelos OD-DBO não considera esta correlação, resolvendo as equações separadamente. [6] analisaram o efeito da aeração na decomposição da matéria orgânica, utilizando para isso um par acoplado de equações de advecção e difusão para OD e DBO. O sistema utilizado foi unidimensional e em regime permanente, e foram apresentadas soluções analíticas para casos simplificados, e uma aproximação numérica para o caso geral. Foi considerado que o rio sofre com poluição difusa, e recebe a mesma carga que aporta no rio Tai Chin, na Tailândia. As soluções mostraram que os resultados encontrados são satisfatórios e convergentes, capazes de ilustrar a influência da aeração na decomposição da matéria orgânica.

O presente trabalho resolve as equações do modelo OD-DBO de forma conjunta, e, visando quantificar a melhoria na acurácia da solução, os resultados são comparados com a solução analítica que não considera esta relação de dependência.

II. MATERIAIS E MÉTODOS

A. Modelo Matemático

No gerenciamento do problema de poluição das águas naturais por matéria orgânica, a aplicação de modelos tem grande importância no auxílio à decisão diante de situações

adversas, sendo o mais indicado para o caso em estudo o modelo de transporte advectivo-difusivo tipo Euleriano com reações cinéticas [5].

O modelo de transporte utiliza equações matemáticas capazes de traduzir fenômenos ambientais, utilizando parâmetros e dados observados e medidos em campo [8]. Estas equações assumem a forma de equações diferenciais parciais quando aplicadas a meios contínuos. Neste trabalho, o modelo de transporte é unidimensional (1D), e deve ser aplicado a corpos d'água sem grandes variações transversais e verticais. Este modelo considera a advecção e a dispersão como os processos capazes de provocar alterações nas concentrações das substâncias no meio líquido, além das reações cinéticas.

As substâncias em estudo são consideradas passivas, uma vez que a variação em suas concentrações não alteram a hidrodinâmica do processo. São também não conservativas, pois são produzidas e consumidas por meio de processos representados por reações cinéticas. Dentre todas as reações cinéticas que podem provocar variações nas concentrações do oxigênio dissolvido, neste trabalho foram consideradas aquelas provocadas pelos processos de reaeração, decomposição e a demanda de oxigênio pelo sedimento (3). Para a demanda bioquímica de oxigênio, foram consideradas as reações de decomposição aeróbia e sedimentação (4) [5]. As equações utilizadas pelo modelo são:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \pm \sum R_C \quad (1)$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} + U \frac{\partial L}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} \pm \sum R_L \quad (2)$$

Nas quais C e L representam as concentrações de OD e DBO; U é a velocidade do escoamento, admitida constante; D_L é o coeficiente de dispersão, admitido constante; e R_C e R_L representam as reações cinéticas, descritas como:

$$R_C = k_a(C_s - C) - k_d \left(\frac{C}{C + k_s} \right) L - \frac{SOD}{H} \quad (3)$$

$$R_L = -k_d \left(\frac{C}{C + k_s} \right) L - \frac{V_s(1 - f_D)}{H} L \quad (4)$$

Nestas, k_a , k_d e k_s são respectivamente os coeficientes de reaeração, desoxigenação e constante de meia saturação para o processo de desoxigenação. C_s é a concentração de saturação do OD, H é a profundidade do corpo d'água, SOD é a demanda de oxigênio no sedimento, V_s é a velocidade de sedimentação da matéria orgânica e f_D é a fração de DBO dissolvida na água.

1) *Condições de fronteira*: Considerou-se que a seção inicial do domínio tem condição de fronteira tipo *Dirichilet*, ou seja, são definidos valores para OD e DBO neste ponto. Na última seção do domínio, a condição de fronteira é do tipo *Neumann*, isto é, são especificados os fluxos que atravessam a fronteira. Para o problema em questão, considerou-se que os fluxos prescritos de OD e DBO são nulos.

B. Modelo Numérico

1) *Solução Numérica*: O método numérico de diferença finitas é tradicionalmente utilizado para solucionar problemas de valor de contorno ou valor inicial de escoamento de fluidos [4], e este foi o método escolhido para resolver as equações do modelo OD-DBO. A aproximação em diferenças finitas foi feita para o tempo e para o espaço, com a equação de DBO discretizada como:

$$\begin{aligned} \frac{L_i^{n+1} - L_i^n}{\Delta t} + U \left(\frac{L_{i+1}^{n+1} - L_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) &= D_L \\ \left(\frac{L_{i+1}^{n+1} - 2L_i^{n+1} + L_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) - \underbrace{k_d \left(\frac{C_i^{n+1}}{C_i^* + k_s} \right)}_{\theta} L_i^{n+1} &= \\ - K_2 L_i^{n+1} \end{aligned} \quad (5)$$

A equação de OD foi discretizada como:

$$\begin{aligned} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} + U \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - C_{i-1}^{n+1}}{2\Delta x} \right) &= D_L \\ \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) - & \\ - k_a C_i^{n+1} - \underbrace{k_d \left(\frac{L_i^{n+1}}{C_i^* + k_s} \right)}_{\theta} C_i^* + K_1 & \end{aligned} \quad (6)$$

Os termos K_1 e K_2 representam as constantes agrupadas, sendo:

$$K_1 = k_a C_s - \frac{SOD}{H} \quad (7)$$

$$K_2 = \frac{V_s(1 - f_D)}{H} \quad (8)$$

C_i^* é a concentração extrapolada de OD no tempo $n + \Delta t$, calculada como [2]:

$$C_i^* = 1.875C^{(n)} - 1.25C^{(n-1)} + 0.375C^{(n-2)} \quad (9)$$

A posição temporal dos termos utilizados para calcular a icógnita em estudo envolve os estados atual (n) e posterior ($n+1$), dando origem a um sistema de equações que formam uma matriz tridiagonal, caracterizando o método implícito. Neste modelo, a matriz foi resolvida pelo método linha por linha, utilizando o algoritmo de Thomas (TDMA), em linguagem computacional FORTRAN.

Observa-se que em 5 e 6 o termo θ , que acompanha coeficiente de desoxigenação k_d , e que tira a linearidade das equações. Sendo assim, o sistema é calculado a partir dos seguintes procedimentos:

- i) A primeira concentração a ser calculada no modelo é a de DBO no tempo ($n+1$), cujo resultado depende da concentração de OD no mesmo instante;

- **ii)** A concentração de OD em $(n+1)$ necessária ao cálculo de DBO é extrapolada através de 9;
- **iii)** O resultado da DBO calculado com a concentração de OD extrapolada retorna para o cálculo de OD no instante $(n+1)$;
- **iv)** Os resultados de OD são comparados com as concentrações extrapoladas no mesmo instante, a fim de averiguar a convergência entre elas.

A convergência entre os valores extrapolados com os valores reais de oxigênio dissolvido foi verificada através do erro relativo entre eles, buscando encontrar valores menores do que 5%.

Por fim, chegam-se às seguintes equações:

$$\begin{aligned} L_i^{n+1} & \left(1 - k_2 \Delta t + \frac{2D_L \Delta t}{\Delta x^2} + k_d \Delta t \left(\frac{C_i^{n+1}}{C_i^* + k_s} \right) \right) \\ & + L_{i+1}^{n+1} \left(\frac{U \Delta t}{2\Delta x} - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) \\ & + L_{i-1}^{n+1} \left(-\frac{U \Delta t}{2\Delta x} - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) = L_i^n \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} C_i^{n+1} & \left(1 - k_1 \Delta t + \frac{2D_L \Delta t}{\Delta x^2} + k_a - k_d \Delta t \left(\frac{C_i^{n+1}}{C_i^* + k_s} \right) \right) \\ & + C_{i+1}^{n+1} \left(\frac{U \Delta t}{2\Delta x} - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) \\ & + C_{i-1}^{n+1} \left(-\frac{U \Delta t}{2\Delta x} - \frac{D_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) = C_i^n \end{aligned} \quad (11)$$

2) *Solução Analítica:* Para fins de validação da solução numérica, foi utilizada a solução analítica de Streeter-Phelps para estuários [1], dada por:

$$U \frac{\partial L}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + k_d L \quad (12)$$

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + k_d L - k_a C \quad (13)$$

Onde:

$$C = C_S - D \quad (14)$$

D é o déficit de oxigênio dissolvido gerado pela redução dos teores de OD através dos processos de estabilização da matéria orgânica, calculado na solução analítica por:

$$D = \frac{k_d}{k_a - k_r} \frac{W}{Q} \left(\frac{e^{xj_{2r}}}{\alpha_r} - \frac{e^{xj_{2a}}}{\alpha_a} \right) \quad (15)$$

Na qual:

$$\frac{W}{Q} = L_0 \alpha_r \quad (16)$$

$$\alpha_r = \sqrt{1 + \frac{4k_r D_L}{U^2}} \quad (17)$$

$$\alpha_a = \sqrt{1 + \frac{4k_a D_L}{U^2}} \quad (18)$$

$$j_{2r} = \frac{U}{2D_L} (1 - \alpha_r) \quad (19)$$

$$j_{2a} = \frac{U}{2D_L} (1 - \alpha_a) \quad (20)$$

A solução para DBO é dada por:

$$L = L_0 e^{xj_{2r}} \quad (21)$$

É importante destacar que a solução analítica está em regime permanente, ao tempo que a solução numérica não está. Logo, para que seja possível compará-las, é necessário adotar na modelagem numérica um tempo de simulação suficientemente longo para que o sistema atinja o regime permanente. Nota-se que esta solução apresenta k_d constante, sem nenhuma dependência das concentrações de OD.

III. RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação foi feita em um canal de 30km de extensão, representando um escoamento unidimensional. O tempo total de simulação foi de 20 dias (1728000 segundos), e os parâmetros utilizados estão definidos na Tabela I.

Tabela I
PARÂMETROS: DESCRIÇÃO, UNIDADES E VALORES ADOTADOS [5]

Parâmetro	Informações		
	Descrição	Unidade	Valor adotado
C	Concentração OD	mg/L	-
L	Concentração DBO	mg/L	-
D_L	Coefficiente de dispersão	-	25.0
U	Velocidade de escoamento	m/s	0.2
k_a	Coefficiente de reaeração	d^{-1}	1.38
k_d	Coefficiente de desoxigenação	d^{-1}	0.4 / 0.9
k_s	Constante de meia saturação para desoxigenação	mgO_2/L	0.5
k_r	Taxa de decaimento da matéria orgânica	d^{-1}	0.4025 / 0.9025
C_S	Concentração de saturação (OD)	mg/L	9.022
SOD	Demanda de oxigênio pelo sedimento do fundo	d^{-1}	1.0
H	Profundidade	m	4.0
V_s	Velocidade de sedimentação da biomassa	m/d	0.15
f_D	Fração de DBO dissolvida	-	0.5

As condições iniciais definidas para DBO e OD foram:

$$L(x, t = 0) = 0.0 mg/L \quad (22)$$

$$C(x, t = 0) = 7.0 mg/L \quad (23)$$

A equação 22 mostra que a concentração de DBO do rio antes do lançamento da carga orgânica é nula; trata-se, portanto, de uma água de boa qualidade. Pela mesma razão, a equação 23 mostra que a concentração inicial de oxigênio dissolvido é de cerca de 80% da concentração de saturação do oxigênio para a temperatura de 20°C.

As condições de contorno adotadas foram:

$$L(x = 0, t) = 20.0 mg/L \quad (24)$$

Na simulação numérica feita após a validação do modelo, foi considerado um valor inicial de DBO de 100.0mg/L.

$$C(x = 0, t) = 4.0mg/L \quad (25)$$

A equação 24 representa a carga de DBO lançada continuamente em $x = 0m$. Neste caso considera-se que ocorre uma mistura completa e instantânea na seção transversal do rio. Em 25 considera-se a concentração de oxigênio após esta mistura.

Foram realizadas 3 simulações, cujos diferentes parâmetros estão definidos na Tabela II.

Tabela II
CARACTERÍSTICAS DAS SIMULAÇÕES 1, 2 E 3

Simulação	$k_d(1/dia)$	$k_s(1/dia)$	$C_0(mg/L)$
1	0.4	0.4025	20.0
2	0.9	0.9025	20.0
3	0.4	0.4025	100.0

Na simulação 1, foram calculas as concentrações de OD e DBO no ponto à distância de 10000m do lançamento de efluente, e a Fig. 1 mostra estas concentrações durante todo o tempo de simulação. Observa-se que, após um curto período, o modelo atinge regime permanente, permitindo assim a comparação da aproximação numérica transiente com a solução analítica permanente.

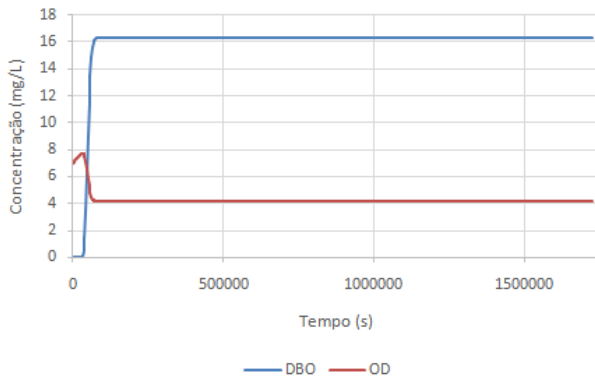


Figura 1. Soluções de OD e DBO obtidas numericamente na Simulação 1 para distância de 10000m do lançamento.

Os erros relacionados à extrapolação foram superiores a 5% apenas nos dois primeiros pontos no instante $t = 0$, numa fase de "aquecimento" da simulação.

É possível perceber pela Fig. 3 que o modelo simula de forma satisfatória a curva de depleção de OD. As Fig. 2 e 3 representam as comparações entre as soluções numéricas e a solução analítica de DBO e OD respectivamente, mostrando a concordância entre os gráficos. A solução numérica, apesar de considerar mais termos que podem causar a redução da concentração de OD, superestima a concentração deste componente na água em relação ao resultado da solução analítica, o que também acontece com a DBO em todo o trecho simulado. Entretanto, para o OD, a estimativa tende a coincidir com a solução analítica no fim do canal. Isto mostra que na solução

numérica o OD aumenta mais rapidamente em virtude do consumo mais lento de matéria orgânica à medida que esta vem sendo degradada.

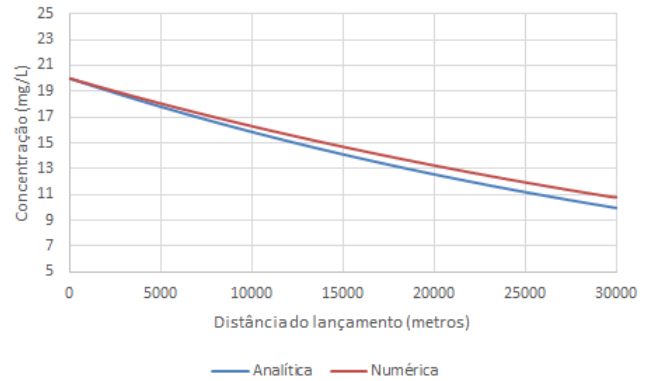


Figura 2. Concentrações de DBO obtidas numericamente e analiticamente na Simulação 1 (L).

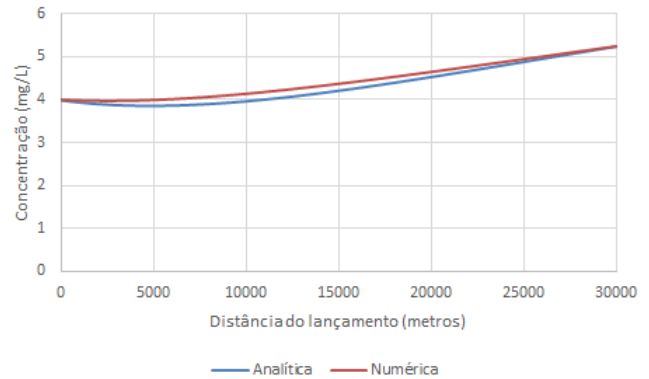


Figura 3. Concentrações de OD obtidas numericamente e analiticamente na Simulação 1 (C).

Confirmada a concordância entre as soluções numérica e analítica, outra simulação foi feita, alterando o valor de k_d para 0.9. Os resultados encontrados podem ser vistos nas Fig. 4 e 5.

A Fig. 6 mostra o erro relativo percentual entre as soluções numérica e analítica para as duas simulações. É possível perceber que, na simulação 2 ($k_d = 0.9$), os erros são significativamente maiores do que quando foi usado $k_d = 0.4$, especialmente no caso do oxigênio dissolvido, por tratarem de baixas concentrações. Conclui-se que o termo que acompanha o k_d neste processo (θ) exerce significativa influência na solução do modelo.

Retornando ao valor de k_d para 0.4, foi realizado um novo teste, considerando a concentração inicial de DBO (L_0) de 100mg/L. Neste caso, a quantidade de matéria orgânica despejada no rio foi tal que o corpo d'água atingiu condições anóxicas, isto é, o oxigênio teve valores muito próximos de zero, e a solução analítica em questão não deve

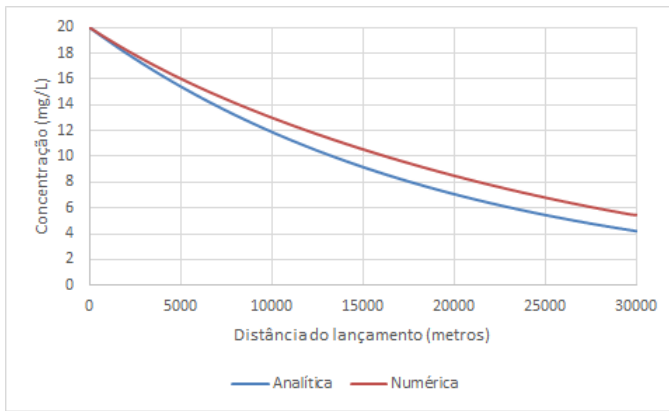


Figura 4. Concentrações de DBO obtidas numericamente e analiticamente na Simulação 2 (L).

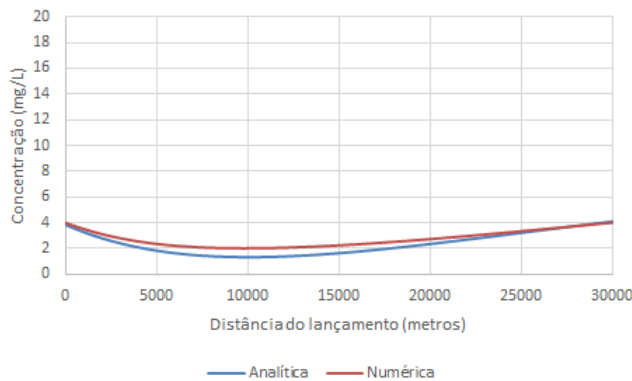


Figura 5. Concentrações de OD obtidas numericamente e analiticamente na Simulação 2 (C).

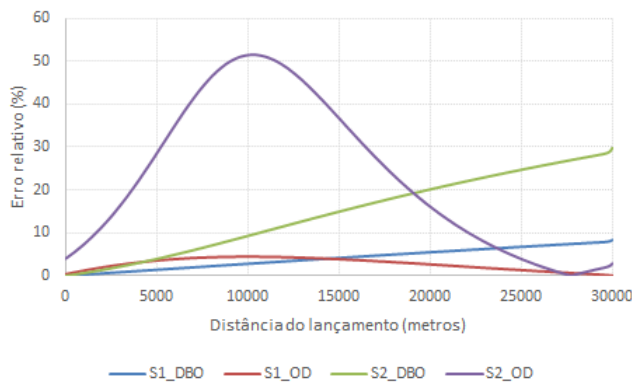


Figura 6. Erros relativos percentuais para as simulações 1 ($k_d = 0.4$) e 2 ($k_d = 0.9$)

ser usada sob estas condições, motivo pelo qual apresenta-se somente a solução analítica para DBO.

Na Fig. 7 é possível perceber que a solução numérica para DBO superestima o resultado apontado pela solução analítica de maneira mais pronunciada do que na primeira simulação, quando foi utilizado um lançamento de uma carga orgânica

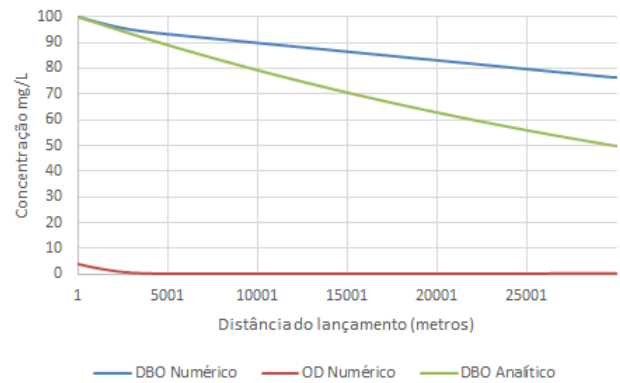


Figura 7. Concentrações de OD e DBO obtidas numericamente e analiticamente na Simulação 3

menor. É possível perceber que o decaimento da matéria orgânica no modelo numérico é uma reta, o que significa que o termo que acompanha o k_d tem seu valor significativamente reduzido, e o decaimento acontece somente majoritariamente pela sedimentação. Uma vez que não há oxigênio disponível no meio para que as bactérias estabilizem a matéria orgânica, este é o comportamento esperado, mostrando que o modelo numérico traz um retrato mais realista do que acontece no meio líquido neste caso, diferente do decaimento mostrado pela solução analítica, que é bastante acentuado para um corpo d'água em condição anóxica.

IV. CONCLUSÃO

O modelo apresentado simulou um lançamento contínuo de diferentes cargas de DBO num canal unidimensional. As comparações com a solução analítica mostraram que considerar a dependência entre as equações de OD e DBO resultam numa significativa influência no resultado do modelo, trazendo uma representação mais realista do que acontece no sistema hídrico. Especialmente no lançamento de elevada carga, a consideração de k_d em função das concentrações de oxigênio dissolvido aproxima os resultados simulados do que acontece no meio ambiente.

Tal análise, integrada à fundamentação legal e outras questões econômicas e sociais, tem potencial no auxílio à decisão de gestores de recursos hídricos diante de situações adversas. Dada a capacidade do modelo de aumentar a compreensão sobre os impactos causados pelo lançamento de carga orgânica em corpos d'água, o mesmo pode ser usado ainda para outras finalidades (como por exemplo estimar as consequências de um possível incremento de carga), aumentando sua capacidade de prognosticar os efeitos do lançamento de poluentes orgânicos nos corpos d'água.

REFERÊNCIAS

- [1] S. C. Chapra, *Surface water-quality modeling*. Boston, United States: WBC McGraw-Hill Companies Inc., 1997.
- [2] C. L. N. Cunha, P. C. C. Rosman, A. P. Ferreira and T. C. N. Monteiro, *Hydrodynamics and water quality models applied to Sepetiba Bay*. Continental Shelf Research, 26:1940–1953, 2006b.

- [3] R. Jha, C. S. Ojha and K. K. Bhatia, *Development of refined BOD and DO models for highly polluted Kali River in India*. Journal of Environmental Engineering, v. 133, n. 8, p. 839-852, 2007.
- [4] C. R. Maliska, *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. Rio de Janeiro, Brasil: Editora LPC, 1995.
- [5] P. Rosman, *Referência técnica do SisBAHIA - sistema base de hidrodinâmica ambiental*. Programa COPPE: Engenharia Oceânica, Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica, UFRJ, 2015.
- [6] B. Pimpunchat, W. L. Sweatman, G. C. Wake, W. Triampo and A. Parshottam, *A mathematical model for pollution in a river and its remediation by aeration*. Applied Mathematics Letters, n. 22, p. 304-308, 2009.
- [7] M. V. Sperling, *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento dos esgotos*, 3rd ed. Belo Horizonte, Brasil: Editora UFMG, 2005.
- [8] M. V. Sperling, *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*, 1st ed. Belo Horizonte, Brasil: Editora UFMG, 2007.