

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Estimativa dos Coeficientes de Desoxidação e Reaeração Via Equações de Streeter-Phelps e Inferência Bayesiana na Praia das Palmeiras em Cabo Frio

Maiquison dos Santos Friguis¹

Maria Trindade Gago Guimarães²

Gessé Pereira Ferreira³

Instituto Federal Fluminense, Campus Cabo Frio, Cabo Frio, RJ

Resumo. O oxigênio dissolvido na água (OD) promove a respiração branquial dos peixes e possibilita a oxidação do material orgânico presente na água. A demanda biológica de oxigênio (DBO), quando elevada, gera a necessidade de grandes taxas de OD para oxidação, prejudicando a respiração dos peixes. Portanto, é fundamental o monitoramento do OD, pois este é condição predominante para a preservação da vida em um ambiente aquático. Este trabalho propôs ajustar os coeficientes da equação de Streeter e Phelps, através de inferência Bayesiana, a fim de que o modelo se adequasse as condições encontradas na Praia das Palmeiras, localizada no Estado do Rio de Janeiro. A estimativa obtida para os coeficientes do modelo se comportou de forma compatível com problemas dessa natureza.

Palavras-chave. Qualidade da Água, Oxigênio Dissolvido, Streeter-Phelps, Inferência Bayesiana.

1 Introdução

Localizada ao leste do estado do Rio de Janeiro na Região dos Lagos, a Lagoa de Araruama é considerada uma das maiores lagoas hipersalinas do mundo banhando cinco municípios desta região, tornando-se, dessa forma, um importante local turístico além de ser responsável por uma grande produção de pescados. Diante disto, o monitoramento da qualidade da água é de extrema importância visto que o ecossistema de toda a lagoa é deteriorado com a captação de esgoto.

A praia das Palmeiras, localizada na cidade de Cabo Frio, é um dos pontos que pode-se observar com clareza o acúmulo de algas e o mal cheiro proveniente do despejo de esgoto, o que torna-se preocupante visto que a única ligação entre o oceano e a lagoa é um canal que desemboca exatamente nas águas que banham essa praia.

Duas grandeza de grande importância no monitoramento da qualidade da água são a demanda bioquímica de oxigênio e a concentração de oxigênio dissolvido no meio. Neste

¹maiquison@hotmail.com

²mariatgguimaes@hotmail.com

³gesseperreira@gmail.com

sentido, é de extrema relevância o monitoramento contínuo dessas grandezas [8]. Assim, este trabalho tem como objetivo principal utilizar um modelo matemático que possa descrever a demanda bioquímica de oxigênio e a concentração de oxigênio dissolvido nas águas que banham a Praia das Palmeiras, e estimar os parâmetros desse modelo utilizando um conjunto de dados experimentais .

2 Problema Direto

A demanda bioquímica de oxigênio está relacionada com a desoxigenação da matéria orgânica remanescente (DBO remanescente) e pode ser expressa por uma equação diferencial ordinária de primeira ordem [6]:

$$\frac{dL}{dt} = -k_1L \quad (1)$$

onde L é a concentração de DBO remanescente no instante t e k_1 é o coeficiente de desoxigenação. Conhecendo a condição inicial $L(t = 0) = L_0$ pode-se expressar a solução da equação acima por:

$$L = L_0e^{-k_1t} \quad (2)$$

com L_0 dado por [8]:

$$L_0 = \frac{Q_E \cdot C_E + Q_L \cdot C_L}{Q_E + Q_L} \quad (3)$$

onde C_E é a concentração de DBO da fonte poluidora, C_L é a concentração de DBO no corpo hídrico, Q_E é a vazão da fonte e Q_L a vazão do corpo.

Para obtenção da concentração de oxigênio dissolvido, deve-se levar em consideração o déficit dessa grandeza em relação ao tempo [7]:

$$\frac{dD}{dt} = k_1L - k_2D \quad (4)$$

onde k_2 é coeficiente reaeração.

Uma vez conhecida a condição inicial $D(t = 0) = D_0$, que neste trabalho foi aproximada por meio da técnica de mínimos quadrados aplicados diretamente aos dados experimentais, obtêm-se:

$$D = \frac{k_1}{k_1 - k_2} L_0 \left(e^{-k_1t} - e^{-k_2t} \right) + D_0 e^{-k_2t} \quad (5)$$

Conhecendo o déficit de oxigênio calcula-se a concentração de oxigênio dissolvido em qualquer instante t com:

$$C = C_s - D \quad (6)$$

onde C_s representa a concentração de oxigênio saturado, neste trabalho, uma função da temperatura e salinidade [8].

3 Problema Inverso

A formulação e solução do problema inverso é etapa fundamental quando pretende-se aplicar um modelo computacional em uma situação real. Neste trabalho o problema inverso é formulado como um problema de estimativa de parâmetros (k_1 e k_2), onde para investigar a solução deste problema considera-se um conjunto de dados experimentais medidos no local de estudo e a técnica Bayesiana de Monte Carlo via Cadeias de Markov.

3.1 Inferência Bayesiana

Na abordagem Bayesiana é feita uma tentativa de utilizar todas as informações disponíveis com o objetivo de reduzir as incertezas presentes numa inferência. Nesse tipo de abordagem deve-se considerar que: (i) todas as variáveis no modelo são modeladas como aleatórias; (ii) a aleatoriedade descreve o grau de informação sobre a realização da amostragem; (iii) a informação sobre parâmetros é expressa por distribuições de probabilidade; (iv) a distribuição de probabilidade a posteriori é a solução do problema inverso [4].

Considerando conhecida alguma informação sobre os parâmetros do modelo, descrita por uma densidade de probabilidade $\pi(\mathbf{P})$ a distribuição de probabilidade a posteriori pode ser calculada segundo teorema de Bayes. A distribuição a posteriori pode ser explorada usando técnicas de amostragem sobre um conjunto de parâmetros, este trabalho realizou essa tarefa através do método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, utilizando o processo de passeio aleatório (random walk) para gerar os candidatos \mathbf{P}' de modo que $\mathbf{P}' = \mathbf{P} + \eta$, onde η foi definida como uma distribuição normal. A construção dos intervalos com 99% de confiança levaram em conta os quantis ordenados ocupando as posições $W(\alpha/2)$ e $W(1 - \alpha/2)$, onde $1 - \alpha = 99\%$ é o nível de confiança pretendido e W o número total de amostras geradas [2, 4, 5].

3.2 Coleta de Dados

A coleta de dados na Praia das Palmeiras foi realizada em dezembro de 2015. Partindo de um ponto distante 30m do lançamento direto do efluente às águas da Praia (A), até cerca de 550m da origem do lançamento do esgoto sanitário (E), na zona de mistura [1] conforme esquema apresentado na Figura 1. Destaca-se que a equação apresentada anteriormente tem comportamento transiente e não espacial, desta forma faz-se necessária a mudança de variáveis considerando $t = S/U$ onde t e S são respectivamente o tempo e a posição de coleta de cada dado experimental e U é a velocidade média do corpo hídrico.

Para efetuar a coleta de dados foi usada a sonda HI9828. Este instrumento possui um sistema de registro multiparâmetros portátil, que monitoriza parâmetros de qualidade de água. Além dos apresentados na Tabela 1, exceto distância, a sonda permite a medição de parâmetros como: pH, ORP, turbidez, condutividade, cloreto, nitrato e amônio, através de um multissensor inteligente com microprocessador. A sonda pode ficar imersa por até 30 minutos numa profundidade de 1 metro [3].



Figura 1: Esquema aproximado dos pontos de coleta (Praia das Palmeiras)

Tabela 1: Dados coletados com medidor HI 9829

Ponto de localização	Distância da origem (m)	Oxigênio Dissolvido (mg/l)	Salinidade	Temperatura (°C)
A	30	2,75	4,15	26,50
B	100	3,40	4,28	27,47
C	250	4,70	4,19	27,25
D	400	4,95	4,09	26,87
E	550	5,10	4,05	26,71

4 Resultados e Discussões

Para simulação utilizada na tarefa de estimar os coeficientes de desoxigenação e re-eração foram utilizados os valores apresentados na Tabela 2. A vazão para o corpo hídrico em estudo foi considerada $v = 0,005m/s$, uma vez que a área analisada está inserida em um lago. Ainda em relação a região de estudo, foram considerados largura e profundidade constantes iguais a $1m$ e desconsiderados efeitos provocados pelos ventos, marés e qualquer fator externo. Além dos valores apresentados na tabela a seguir, utilizou-se também regressão polinomial de segundo grau para o déficit de oxigênio obtendo:

$$D(t) = 0,1382t^2 - 1,2397t + 5,6109, \quad R^2 = 0,9873 \quad (7)$$

obtendo $D_0 = 5,6109$.

Antes da Solução do problema inverso realizou-se a análise de sensibilidade do modelo em relação aos parâmetros de entrada, para prever possíveis dificuldades na tarefa de estimar os parâmetros, nesta análise considerou-se os coeficientes de sensibilidade reduzidos dados por:

$$X_i = k_i \frac{\partial C}{\partial k_i}, \quad i = 1, 2 \quad (8)$$

O comportamento dos coeficientes de sensibilidade reduzidos nos instantes considerados na formulação do problema pode ser visto na Figura 2, prevendo uma maior dificuldade

Tabela 2: Parâmetros utilizados na simulação

Parâmetros	Valores	Unidade	Parâmetros	Valores	Unidade
Prof. média do Corpo	1	m	Largura do Corpo	1	m
Vazão do Corpo	0,05	m^3/s	Vazão da Fonte	0,17	m^3/s
DBO do Corpo	3,0	mg/l	DBO da Fonte	40	mg/l
L_0	31,591	mg/l			

para estimar o parâmetro k_2 devido a menor amplitude da sensibilidade relacionada a esse parâmetro, porém essa dificuldade não se confirmou na simulação levando em conta as prioris utilizadas.

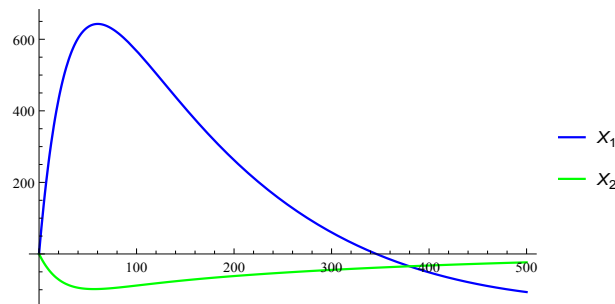


Figura 2: Coeficientes de sensibilidade reduzidos

A solução do problema inverso considerou um conjunto com cinco dados experimentais referentes a concentração de oxigênio dissolvido na Praia das Palmeiras com erro experimental de $\pm 0,2mg/l$, na simulação do método de Monte Carlo via Cadeias de Markov, utilizou-se prioris modeladas por distribuições normais com média a priori $\mu_{k_1} = 0,5$, $\mu_{k_2} = 0,4$ e desvio padrão $\sigma = 5 \times 10^{-3}$, utilizou-se ainda como “passo de procura” $\sigma_P = 10^{-8}$. A convergência foi verificada com 80000 estados como pode-se ver na Figura 2, onde nota-se uma boa convergência após os 20000 primeiros estados, desta forma optou-se por usar os 20000 anteriores a convergência como estados de aquecimento (burn-in) e descartá-los na inferência estatística que é apresentada na Tabela 3, mostrando que mesmo para um estado inicial relativamente afastado da zona de convergência, o método não teve problema de estabilidade. Na Figura 3 estão apresentadas as distribuições marginais a posteriori onde observa-se que ambos parâmetros apresentam forma gaussiana uma vez que priori e verossimilhança foram consideradas normais.

Mesmo com uma extensa bibliografia sobre o assunto, não foi possível encontrar valores de referência para k_1 e k_2 que pudessem ser usados nas condições do problema estudado, para isso utilizou-se o ajuste entre o modelo com os parâmetros estimados e o dados experimentais e o respectivo resíduo .

Tabela 3: Resultados Problema Inverso

Parâm.	Inicial	Estimado	Média	Desvio Padrão	Int. Conf.(99%)
k_1	0,5	0,0032046	0,0031594	0,00004577	[0,003046, 0,003275]
k_2	0,4	0,0326985	0,0325598	0,00029862	[0,031831, 0,033293]

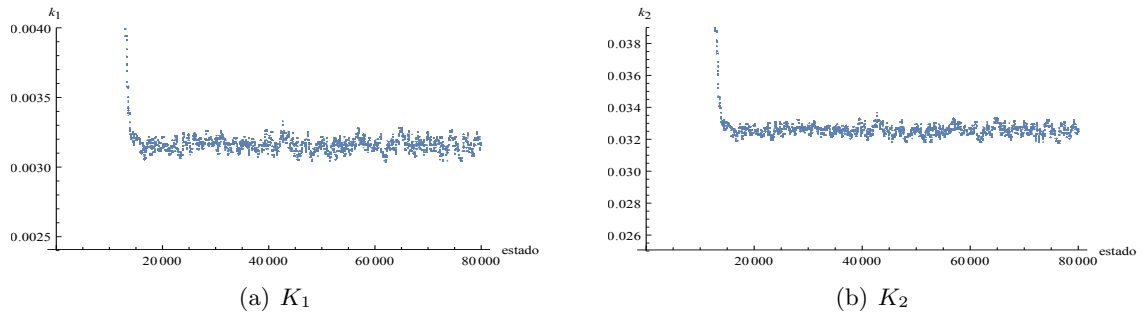


Figura 3: Cadeia de Markov para o Problema Inverso

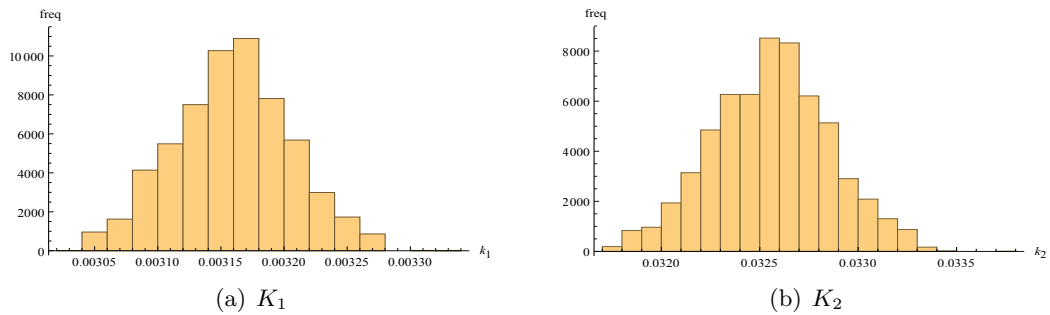


Figura 4: Distribuições Marginais a Posteriori para o Problema Inverso

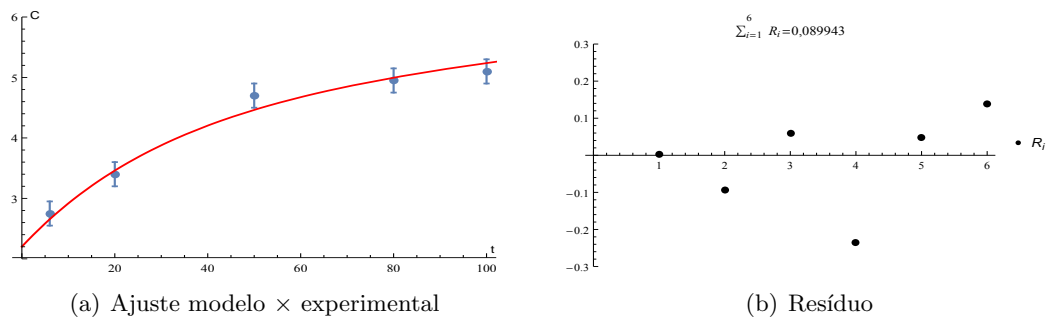


Figura 5: Ajuste e Resíduos

5 Conclusões

A demanda bioquímica de oxigênio e a concentração de oxigênio dissolvido são grandezas de grande interesse quando o assunto é qualidade da água. Essas grandezas quando

descritas pelas equações de Streeter-Phelps levam em consideração os coeficientes de deoxigenação e reaeração do corpo hídrico em estudo. Neste trabalho estimou-se esses coeficientes utilizando inferência Bayesiana pelo método de Monte Carlo via Cadeias de Markov. Mesmo não contando com valores de referência para validar o método quando aplicado a esse problema, o ajuste aos dados experimentais se mostrou satisfatório levando em consideração a interpretação gráfica. Vale destacar que esse estudo está em fase inicial e alguns fenômenos foram desconsiderados para simplificar o modelo, futuramente pretende-se considerar outros fenômenos que possam interferir no problema. O modelo de Streeter-Phelps se mostrou promissor para o cenário estudado mesmo sendo um modelo extremamente simples.

Agradecimentos

Os autores agradecem aos professores Manildo Marcião de Oliveira e José Carlos Amaral Gevú, pela assistência prestada na coleta de dados, e ao Instituto Federal Fluminense campus Cabo Frio, por viabilizar o uso da sonda HI9828.

Referências

- [1] Conselho Nacional do Meio Ambiente. *Resolução 430*. Diário Oficial da União, Brasília, 2011.
- [2] D. Gamerman and H. F. Lopes. *Markov chain Monte Carlo: stochastic simulation for Bayesian inference*. Chapman&Hall, Florida, 2006.
- [3] Hanna Instruments. *Multiparameter meter HI928 instruction Manual*. Highland Industrial Park, Woonsocket, 2013
- [4] J. P. Kaipio and E. Somersalo. *Computational and statistical methods for inverse problems*. Applied mathematical sciences, Springer Verlag, Berlin, 2004.
- [5] A. T. Silva, M. Naghettini and M. M. Portela. Sobre a estimação de intervalos de confiança para os quantis de variáveis aleatórias hidrológicas, *Recursos Hídricos* 32:63-76, 2011. DOI:10.5894/rh32n2-6.
- [6] M. V. Sperling. *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*. UFMG, Belo Horizonte, 2007.
- [7] H. W. Streeter, E. B. Phelps, *A study of the pollution and natural purification of the Ohio River III*. Public Health Service, Washington, 1958.
- [8] R. V. Thomann, Bioaccumulation model of organic chemical distribution in aquatic food chains. *Environmental science and technology*, 23:699-707, 1989. DOI:10.1021/es00064a008