MODELO COMPUTACIONAL PARA AJUSTE DE CURVAS DE DISTRIBUIÇÃO DE CONCENTRAÇÃO DE EFLUENTES

JARBAS H. MIRANDA[1], ALBERTO COLOMBO[2], PAULO L. LIBARDI[3]

[1] Engº Agrônomo, Prof. Dr., Departamento de Ciências Exatas, Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz",ESALQ/USP,Piracicaba-SP,(19)3429-4283-R:210,e-mail:jhmirand@esalq.usp.br
[2] Prof. Dr., Departamento de Engenharia, Universidade Federal de Lavras - UFLA, Lavras-MG
[3] Prof. Titular, Departamento de Ciências Exatas - ESALQ/USP

Escrito para apresentação no
XXXV Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola
31 de julho a 4 de agosto de 2006 - João Pessoa - PB

RESUMO: O conhecimento dos mecanismos de transporte de contaminantes em meios porosos é essencial para se projetar locais de deposição de resíduos e avaliar impactos sobre o ambiente, causados pela contaminação do solo e da água por substâncias químicas. Objetivou-se com o presente trabalho o desenvolvimento de um software (BTCFIT) que possibilite o ajuste de curvas da distribuição de concentração do efluente, obtendo-se os respectivos parâmetros de ajuste (parâmetros de transporte de solutos no solo), mediante soluções analíticas de observações experimentais, em diferentes tipos de solo. Os resultados obtidos mostraram que o software BTCFIT apresentou desempenho satisfatório quando comparado ao software CXTFIT. Com isso tem-se mais uma ferramenta computacional para prever o deslocamento de solutos aplicados ao solo via água de irrigação ou outros componentes químicos que possam vir a causar possíveis impactos ao ambiente.

PALAVRAS-CHAVE: dinâmica de solutos, parâmetros de transporte, modelagem computacional

COMPUTATIONAL MODEL APPLIED TO BREAKTHROUGH CURVE FIT

ABSTRACT: The knowledge about soil contaminant transport is important for designing waste disposal facilities and for environmental impact studies about soil and subsurface water contamination by chemical products. This study objective was to develop a software (BTCFIT) that allows breakthrough curve fitting by setting values to soil solute transport parameters. Soil transport parameters values are analytically determined by optimizing model parameter to experimental values. Results from the BTCFIT were compared to CXTFIT results showing a satisfactory performance. Results indicate that BTCFFIX is one more tool available for soil solute transport parameter fitting. BTCFIX can be used on computer models and research studies aiming to predict the transport of solutes applied thought irrigation water or the transport of other chemical products presenting potential environmental impact.

KEYWORDS: transport parameters, breakthrough curves, computer modeling

INTRODUÇÃO: Os altos custos/dificuldades envolvidos nas pesquisas de campo e os avanços computacionais estão fazendo com que os modelos matemáticos, aliados às técnicas numéricas, se constituam em aplicativos bastante viáveis, pois possibilitam uma predição do destino e do comportamento da água e dos solutos em solos sob irrigação. Dentro desse aspecto, pode-se encontrar uma vasta citação literária de rotinas computacionais que são utilizadas para tal objetivo. Alguns modelos podem ser citados, como MIDI (MIRANDA, 2001), utilizado para simular unidimensionalmente o deslocamento miscível (água e solutos) e o proposto por RIVERA (2004), de simulação bidimensional de água e solutos mediante aplicação por fontes puntiformes, dentre outros. Entretanto, para o sucesso da simulação e resolução das equações que permita predizer o deslocamento de solutos no solo, é necessário uma determinação realista dos parâmetros de transporte que influenciam a relação solo-soluto (MIRANDA, 2004). Dentre esses parâmetros pode-se citar: 1) a dispersividade que é um parâmetro obtido pela relação entre o coeficiente de dispersão e a velocidade da água no poro do respectivo solo; 2) o fator de retardamento que também é chamado de coeficiente de partição pois representa a razão entre a concentração dos solutos nas fases sólida e líquida. Para a obtenção de tais parâmetros, existem alguns modelos disponíveis, já preconizados. Dentre esses, pode-se citar: CXTFIT (TORIDE, 1999), desenvolvido pelo U.S. Salinity Laboratory – USDA – Riverside-CA, escrito em linguagem de programação FORTRAN, utilizado para a estimativa de parâmetros de transporte de solutos mediante concentrações obtidas em laboratório (chamado de problema inverso) ou para predizer concentrações de solutos em condições de escoamento permanente (chamado de problema direto) usando para isso as equações de convecção-dispersão. Outro modelo, para tais fins, trata-se do modelo DISP desenvolvido por Borges Júnior et al. (2002), utilizado para ajuste e estimativa de parâmetros de transporte de soluto no solo. Além dos modelos computacionais, há a possibilidade de desenvolvimento de uma "macro" (rotina de resolução numérica), pela planilha eletrônica Excel, conforme WRAITH (1998). Nesse sentido, o objetivo do presente trabalho é apresentar um novo modelo computacional capaz de auxiliar na obtenção de tais parâmetros de transporte de maneira prática, precisa e com grande aplicação na simulação computacional da dinâmica de solutos e compará-lo com os modelos CXTFIT e com a rotina proposta por WRAITH (1998) em planilha eletrônica (Excel).

MATERIAL E MÉTODOS: O modelo computacional proposto "BTCFIT" foi desenvolvido em linguagem de programação Visual Basic 6.0, no Departamento de Ciências Exatas da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", ESALQ/USP. Para sua avaliação, foram utilizados dados experimentais de WRAITH (1998) e para seu desenvolvimento foram levadas em conta, previamente, medidas da concentração de um efluente em uma coluna de solo, em experimento clássico de deslocamento miscível, considerando-se a eq. 1, por ser a mais adequada e por isso a mais utilizada:

$$R\frac{\partial C}{\partial t} = D\frac{\partial^2 C}{\partial X^2} - v\frac{\partial C}{\partial X} \tag{1}$$

em que:

R = fator de retardamento, adimensional;
C = concentração do soluto, M L^{-3};
t = tempo, T;
D = coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal, $L^2\,T^{-1}$ (Bear, 1972);
X = coordenada espacial (distância), L;
v = velocidade da água no poro (q/θ), L T^{-1}.

Soluções analíticas dessa equação têm sido desenvolvidas para um número específico de condições de contorno e para vários problemas importantes da ciência do solo, envolvendo estimativas de parâmetros de transporte baseados no ajuste de soluções ou em modelos alternativos para medir curvas da distribuição de concentração do efluente a partir de experimentos de deslocamento miscível.
A distribuição da concentração dos solutos em uma coluna de solo com uma concentração inicial uniforme sob equilíbrio dinâmico, a qual será substituída em um tempo "t" igual a zero, por uma solução de concentração constante, está apta para ser submetida a uma solução analítica. As condições inicial e de contorno são dadas por: $C(x,0) = c_i$; $C(0,t) = c_0$; $\frac{\partial c}{\partial x}(\infty,t) = 0$
A solução da equação de convecção-dispersão (1) sujeita a essas condições inicial e de é a eq. 2 (NIELSEN & BIGGAR, 1963; GENUCHTEN & WIERENGA, 1986):

$$\frac{c(x,t) - c_i}{c_0 - c_i} = \frac{1}{2}\operatorname{erfc}\left[\frac{RL - vT}{2(DRT)^{0,5}}\right] + \frac{1}{2}\exp\left(\frac{vL}{D}\right)\operatorname{erfc}\left[\frac{RL + vT}{2(DRT)^{0,5}}\right] \tag{2}$$

em que:

c_i = concentração inicial do soluto no solo da coluna, M L^{-3};
c_o = concentração constante, M L^{-3};

L = comprimento da coluna, L;

T = tempo relativo a cada volume de efluente coletado pelos frascos, T;

erfc = função erro complementar estimada pela eq. 3: $\mathrm{erfc} = 1 - \mathrm{erf} = 1 - \left(\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{VP} e^{-VP^2} \right)$ (3)

Os parâmetros empíricos (R e D) foram estimados minimizando a soma dos quadrados dos desvios em relação à concentração relativa (C/Co). Teoricamente, a condição de mínimo é determinada pelas condições: $\chi^2(a) = \sum_{i=1}^{m} \left[y_i - y((x_i ; a_1 \cdots a_m) \right]^2$. Em que: $a = a_1, \cdots a_m$, trata-se do vetor de parâmetros a serem ajustados, relativos a cada modelo. Podemos reescrever da seguinte forma (eq. 4):

$$F(R,D) := \sum_{i=1}^{m} \left(Y_i - \frac{1}{2} \cdot \mathrm{erfc}\left(\frac{R \cdot L - v \cdot X_i}{\sqrt{4 \cdot D \cdot R \cdot X_i}} \right) \right)^2 \qquad (4)$$

Diante disso, o modelo irá buscar a redução do erro, até atingir uma condição imposta pelo usuário (SQE < 0,002). As iterações do modelo foram feitas mediante a obtenção dos incrementos a serem efetuados aos parâmetros a serem ajustados (R e D). Portanto, utilizando uma série de Taylor truncada, foi possível aproximar o valor dessas duas funções, para desenvolver expressões necessárias para o cálculo das correções (ΔR e ΔD) a serem aplicadas nas estimativas atuais de R e D (eqs. 4 e 5):

$$f1(R+\Delta R, D+\Delta D) = f1(R,D) + \left[\Delta R \cdot \left(\frac{\partial f1(R,D)}{\partial R} \right)_{R,D} + \Delta D \cdot \left(\frac{\partial f1(R,D)}{\partial D} \right)_{R,D} \right] \quad \text{onde } f1(R,D) = \partial F(R,D) / \partial R \qquad (5)$$

$$f2(R+\Delta R, D+\Delta D) = f2(R,D) + \left[\Delta R \cdot \left(\frac{\partial f2(R,D}{\partial R} \right)_{R,D} + \Delta D \cdot \left(\frac{\partial f2(R,D)}{\partial D} \right)_{R,D} \right] \quad \text{onde } f2(R,D) = \partial F(R,D) / \partial D$$

$$\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial f1(R,D)}{\partial R} \right)_{R,D} & \left(\frac{\partial f1(R,D)}{\partial D} \right)_{R,D} \\ \left(\frac{\partial f2(R,D)}{\partial R} \right)_{R,D} & \left(\frac{\partial f2(R,D)}{\partial D} \right)_{R,D} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta R \\ \Delta D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f1(R,D) \\ -f2(R,D) \end{pmatrix} \qquad (6)$$

Diante dos incrementos e comparando-se com a minimização do desvio (entre os valores simulados e os obtidos em laboratório), o modelo apresenta um arquivo de saída (com os valores de tempo acumulado (min), valores da concentração relativa, número de iterações e os valores observados e estimados), disposto em forma de tabela, com os valores ajustados dos parâmetros R e D,

RESULTADOS E DISCUSSÃO: Os resultados obtidos evidenciaram que após o ajuste realizado pelos modelos BTCFIT e CXTFIT e comparando-se com os valores dos parâmetros ajustados de R e D, obtidos por WRAITH (1998), o modelo computacional proposto, apresentou um ajuste muito próximo daqueles obtidos por esses modelos, com um valor da minimização da soma dos quadrados dos desvios em torno de 0,0017 e do modelo CXTFIT em torno de 0,0014. Em termos dos valores do parâmetro fator de retardamento (R), o modelo BTCFIT apresentou um valor muito próximo da rotina proposta por WRAITH (1998) e superior 5% ao valor apresentado pelo modelo CXTFIT. Em relação ao coeficiente de dispersão (D), os modelos apresentaram valores muito próximos evidenciando um ótimo desempenho para o ajuste desse coeficiente.

CONCLUSÕES: Pode-se concluir que o modelo BTCFIT apresentou simulação satisfatória na obtenção do ajuste dos parâmetros de transporte e com grande aplicabilidade nos estudos de deslocamento miscível.

AGRADECIMENTOS: À FAPESP - Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo pelo apoio financeiro à pesquisa.

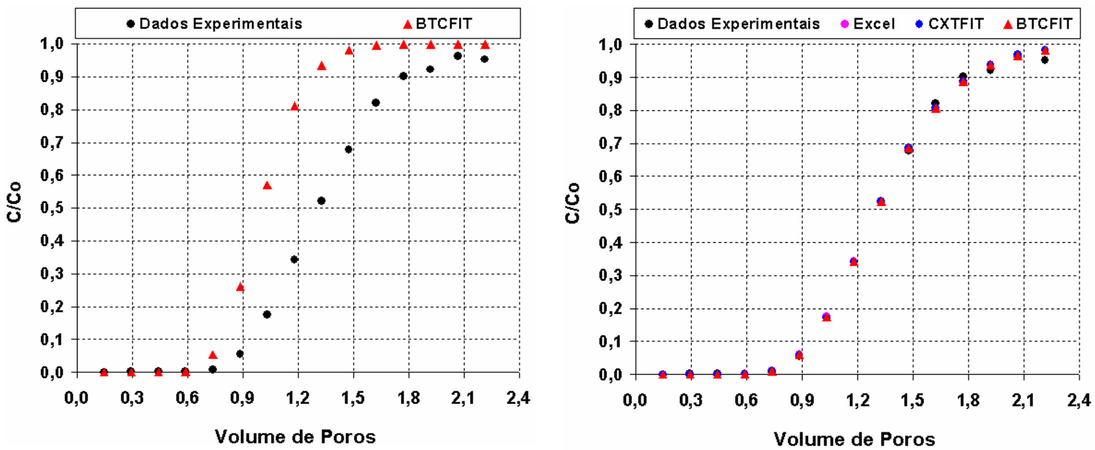

Figura 1. Respresentação esquemática do ajuste dos parâmetros de transporte

Tabela 1. Valores ajustados dos parâmetros de transporte (R e D), obtidos pelos modelos computacionais BTCFIT, CXTFIT e pela "macro" proposta por WRAITH (1998).

Software	**Parâmetros de transporte**		**SQE**
	R	**D**	
BTCFIT	1,3085	1,7746	0,0017
CXTFIT	1,246	1,704	0,0014
Excel	1,308675	1,812263	0,0017

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

BEAR, J. Dynamics of fluids in porous media. New York: American Elsevier, 1972. 764 p.

BORGES JÚNIOR, J.C.F.; FERREIRA, P.A. Programa computacional para cálculo de parâmetros do transporte de solutos em deslocamento de fluidos miscíveis. In: XXXI CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA AGRÍCOLA, 2002, Salvador-BA. CD-Rom XXXI Congresso Brasileiro de Engenharia Agrícola. Jaboticabal-SP:: SBEA - Associação Brasileira de Engenharia Agrícola, 2002. p. 1-4.

GENUCHTEN, M. T.; WIERENGA, P.J. Solute dispersion coefficients and retardation factors. In: BLACK, C.A. (Ed.) Methods of soil analysis. Madison: Soil Science Society of America, 1986. pt. 1: Physical and mineralogical methods: p.1025-1054. (American Society of Agronomy, 9).

MIRANDA, J.H. Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não saturado. Piracicaba, 2001. 79p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

MIRANDA, J.H.; DUARTE, S.N.; LIBARDI, P.L.; FOLEGATTI, M.V. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não saturado. Engenharia Agrícola, Jaboticabal-SP, v. 25, n. 3, p. 677-685, 2005.

NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. Miscible displacement: V. Exchange processes. Soil Science Society American Proceedings, v.27, p.623-627, 1963.

RIVERA, R.N.C. Modelagem da dinâmica da água e do potássio na irrigação por gotejamento superficial. Piracicaba, 2004. 89p. Tese (Doutorado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

TORIDE, N., F. J. LEIJ, M. TH. van GENUCHTEN. The CXTFIT Code for Estimating Transport Parameters from Laboratory or Field Tracer Experiments, Version 2.1. Research Report No.137, U.S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California, 119 p., 1999.

WRAITH, J.M.; OR, D. Nonlinear parameter estimation using spreadsheet software. Journal of Natural Resources and Life Sciences Education, v.27, p.13-19, 1998.