

QUALIDADECLS: UM MODELO PARA A DETERMINAÇÃO DAS CONCENTRAÇÕES DOS PARÂMETROS DE QUALIDADE DE ÁGUA EM RIOS

Celimar Azambuja Teixeira¹; André Schardong² & Rubem La Laina Porto³

Resumo - Atualmente, a escassez de água tem como uma das suas maiores causas o problema da deterioração da sua qualidade, originado pelos lançamentos inadequados de resíduos industriais e esgotos domésticos, principalmente nas grandes cidades. Dentro desse contexto, o modelo QualidadeCLS apresenta-se como uma ferramenta útil e versátil, capaz de determinar as concentrações de DBO, OD, coliformes totais, fósforo total, algas, nitrogênio orgânico, amônia, nitrito e nitrato em diversos pontos do rio. Tal modelo trabalha em conjunto com o AlocaLS, que é o modelo responsável pelo gerenciamento otimizado de quantidade de água em um bacia hidrográfica e foi desenvolvido por pesquisadores do LabSid (Laboratório de Suporte a Decisões – da Escola Politécnica da USP), sob a coordenação do Dr. Rubem La Laina Porto. Ambos os modelos estão conectados ao AcquaNet, utilizam o mesmo banco de dados e podem analisar integradamente os aspectos de quantidade e qualidade de água. O AcquaNet trata-se de um modelo de rede de fluxo, onde uma bacia hidrográfica pode ser configurada através de reservatórios, nós de passagem, nós de demanda e links (trechos do rio). Este trabalho tem por objetivo apresentar a metodologia do modelo QualidadeCLS, sua forma de aplicação e um exemplo demonstrativo.

Abstract - Nowadays, the water shortage has the water quality deterioration like one of the most relevant problem, because of the inadequate sources from the industry and urban wastes, mainly in the big cities. In this context, the QualidadeCLS model presents like a useful and versatile tool, it's capable to determine the concentrations about BDO, DO, total coliform, total phosphorus, algae, organic nitrogen, ammonia, nitrite and nitrate in several points in the river, this model works with the AlocaLS model, that is responsible by the optimized management about quantity water in a basin and it was developed by researchers of LabSid at Polytechnic School of the University of São Paulo, Dr. Rubem La Laina Porto is the supervisor of this model. Both the models are connected in the AcquaNet, share the same data base and they can analyze integrally quantity and quality water.

¹ EP-USP, PHD, Av. Prof. Luciano Gualberto nº 380, 05508-900, São Paulo-SP, celimar.azambuja@poli.usp.br

²EP-USP, PHD, Av. Prof. Luciano Gualberto nº 380, 05508-900, São Paulo-SP, (11) 3818-5403, andre.schardong@poli.usp.br

³EP-USP, PHD, Av. Prof. Luciano Gualberto nº 380, 05508-900, São Paulo-SP, (11) 3818-5403, rlporto@usp.br

AcquaNet model works with flux networks. So, a basin can be configured with points of reservoirs, passage points, demands and links (pieces of a river). This work has for objective to present the method about the QualidadeCLS model, its application form and a demonstrative example.

Palavras-chaves - AcquaNet, QualidadeCLS, AlocaLS, gerenciamento, qualidade e quantidade.

INTRODUÇÃO

A água é um importante recurso natural, talvez o mais precioso para a vida de todos os seres vivos. Por esse motivo, ela deve ser preservada e bem distribuída, a fim de garantir saúde e desenvolvimento a todos.

Com o crescimento dos centros urbanos ocorreu um aumento na demanda pela água. Além disso, o grande número de indústrias instaladas próximas às grandes cidades têm gerado e agravado os problemas relacionados à poluição. Do ponto de vista de qualidade da água, a proteção dos recursos hídricos depende de medidas disciplinadoras do uso do solo e do gerenciamento integrado de todas as atividades desenvolvidas na bacia.

Importantes bacias hidrográficas do contexto nacional vêm sofrendo com problemas relacionados a quantidade e a qualidade de suas águas, em virtude do conflito existente entre seus diversos usos: urbano, industrial, agrícola, recreação e também o uso destinado à produção de energia elétrica. Com esse novo cenário ambiental, torna-se necessário a aplicação de uma legislação que regulamente o uso da água e também o desenvolvimento e o incentivo de tecnologias, tanto para o tratamento dos resíduos como para o gerenciamento dos recursos hídricos.

A legislação vigente trata do enquadramento segundo a Resolução CONAMA n.º 20/86, que visa o estabelecimento do nível de qualidade (classe) a ser alcançado e/ou mantido em um segmento de corpo d'água ao longo do tempo. É um instrumento de planejamento que tem por objetivo assegurar a qualidade da água correspondente a uma classe estabelecida para um trecho do corpo hídrico.

O grande desafio para os próximos anos, na área de recursos hídricos, é o atendimento das demandas na quantidade necessária e com a qualidade apropriada, como também a preservação das águas superficiais, que vêm sofrendo grandes prejuízos em virtude da poluição descontrolada.

Procurando contribuir para o desenvolvimento econômico e para a qualidade de vida das pessoas, o objetivo deste trabalho científico consiste na apresentação de um modelo matemático que relaciona aspectos de quantidade e qualidade de água para o gerenciamento de bacias hidrográficas. O modelo aqui proposto pode ser usado como um instrumento de gestão e também para análise das condições ambientais de um rio, levando-se em conta as retiradas de água e os lançamentos de efluentes.

CONSIDERAÇÕES PRELIMINARES

O modelo AcquaNet está sendo desenvolvido por pesquisadores do LabSid (Laboratório de Sistemas de Suporte à Decisões) na Escola Politécnica da USP, sob a coordenação do Prof. Dr. Rubem La Laina Porto. Este modelo tem por objetivo gerar informações que contribuam aos engenheiros, pesquisadores e técnicos na área de recursos hídricos a tomarem decisões adequadas no complexo processo do gerenciamento de bacias hidrográficas.

O AcquaNet é capaz de tratar questões relativas a alocação de água, produção de energia elétrica e a determinação dos parâmetros de qualidade de água. Cada um desses aspectos está sendo tratado por um modelo específico, os quais estão denominados a seguir:

- AlocaLS: modelo de alocação de água – antigo modelo ModSimP32 ;
- QualidadeCLS: modelo de qualidade de água;
- EnergiaLS: modelo de produção de energia;

Os modelos QualidadeCLS e EnergiaLS ainda encontram-se em fase de testes.

Cada um desses modelos pode ser acionado através da barra de ferramentas do AcquaNet. Além disso uma bacia hidrográfica pode ser configurada através de nós de reservatório, nós de demandas, nós de passagem e links (trechos do rio). Como demonstra a figura seguinte.

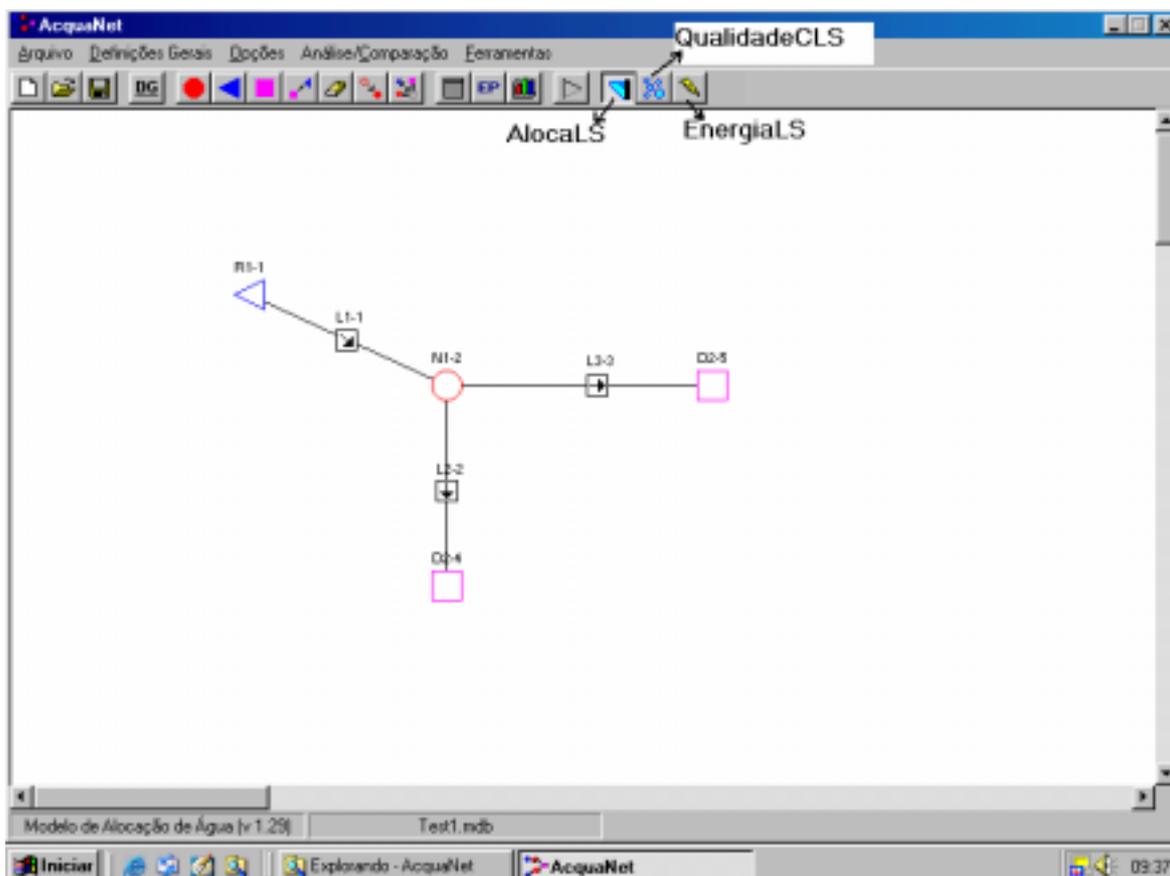


Figura 1: Exemplo de uma rede de fluxo do modelo AcquaNet e os botões de acesso aos modelos AlocaLS, QualidadeCLS e EnergiaLS.

Este trabalho tem por objetivo apresentar a metodologia utilizada no modelo de qualidade de água e a sua forma de aplicação, portanto os tópicos seguintes tratam em especial do modelo QualidadeCLS.

REVISÃO DE LITERATURA

Do total da água contida no planeta, 0,62% encontram-se na forma de águas subterrâneas e 0,0091% nos lagos e rios, segundo FELTRE (1996). Portanto, a quantidade de água superficial disponível para suprir todas as necessidades é realmente muito limitada.

De acordo com MEYBECK, CHAPMAN & HELMER (1990) os corpos d'água se dividem em três tipos e apresentam propriedades hidrodinâmicas distintas, as quais são descritas a seguir:

- ✓ **Rios:** são caracterizados por uma corrente uni-direcional com velocidades médias relativamente altas, em torno de 0.1 a 1 m/s. O fluxo do rio é altamente variável no tempo e depende das características climáticas e dos padrões de drenagem. Em geral, a mistura perfeita é contínua e obtida no sentido vertical, devido a turbulência e as correntes predominantes. São denominados como ambientes lóticos.
- ✓ **Lagos ou Reservatórios:** são caracterizados pela baixa velocidade, em torno de 0.001 a 0.01 m/s em média. Além disso, o tempo de residência da água ou de seus elementos, pode variar de um mês a centenas de anos. As correntes dentro dos lagos são multi-direcional. Muitos lagos têm períodos de alternância do fenômeno de estratificação e mistura vertical, a periodicidade é regulada pelas condições climáticas e pela profundidade do lago. São denominados como ambientes lênticos.
- ✓ **Águas Subterrâneas:** são caracterizados pelo fluxo constante em termos de direção e velocidade. A velocidade média geralmente descoberta nos aquíferos é em torno de 10^{-10} a 10^{-3} m/s, são governados pela porosidade e permeabilidade do material geológico. Como consequência, a mistura é relativamente pobre e depende das características hidrogeológicas locais e a dinâmica das águas subterrâneas pode ser altamente variada.

Em se tratando de modelagem de qualidade de água e considerando as diferenças no comportamento dos diferentes corpos d'água, torna-se necessário o desenvolvimento de modelos específicos para análise diferenciada de reservatórios e de rios.

A velocidade e a profundidade do fluxo são as características que diferenciam o escoamento em rios, dos reservatórios e lagos. Os modelos de qualidade de água utilizados em rios são unidimensionais e representam o escoamento através da velocidade média na seção transversal, desprezando as variações nas outras direções. No caso dos reservatórios, onde as variações de densidade e temperatura são marcantes, torna-se necessário a utilização de modelos bidimensionais.

A modelagem de qualidade de água, normalmente não considera a zona de mistura. Portanto, quando um material entra no corpo d'água, ele imediatamente mistura com o escoamento do rio.

Vários modelos de qualidade de água, para serem utilizados em rios, já foram desenvolvidos, um dos mais conhecidos e utilizados por pesquisadores do mundo inteiro é o Qual2E, tal modelo foi originado a partir do Qual-I, desenvolvido por *F.D. Masch & Associates e pelo Texas Water Development Board*, mais tarde o modelo foi realçado pelo EPA – *Environmental Protection Agency*.

O modelo Qual2E tem a vantagem de simular 15 variáveis de qualidade. São elas: OD, DBO, temperatura, algas e clorofila, nitrogênio orgânico, amônia, nitrito, nitrato, fósforo orgânico, fósforo dissolvido, coliformes, 3 constituintes conservativos e mais um constituinte não conservativo arbitrário. Permite a incorporação de descargas pontuais, tributários, captações e incrementos relacionados às fontes difusas, é um exemplo de como um modelo de qualidade de água produz maiores funcionalidades.

Tal modelo baseia-se no princípio do balanço de massa que avalia as transferências de matéria e as transformações ocorridas dentro de um volume finito de água, cuja equação geral é:

$$V \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial \left(A_c E \frac{\partial c}{\partial x} \right)}{\partial x} dx - \frac{\partial (A_c U c)}{\partial x} dx + V \frac{dc}{dt} + S \quad (1)$$

Outro modelo de qualidade de água para rios é o OTIS (*One-Dimensional Transport with Inflow and Storage*), desenvolvido pelo USGS (*U. S. Geological Survey*). Esse modelo tem como relação principal a equação de advecção-dispersão com termos adicionais para quantificar o armazenamento transiente, afluxo lateral e o decaimento de primeira ordem.

O armazenamento transiente refere-se a detenção temporária de substâncias em pequenas bolsas de água parada, quando comparadas com o movimento mais rápido que acontece perto do centro do canal principal – RUNKEL (1998).

O modelo é formado pelas equações de balanço de massa para as duas áreas conceituais: o canal principal e a zona de armazenamento. O canal principal é definido como a porção do escoamento no qual os fenômenos de advecção e dispersão são os mecanismos dominantes do transporte, já a zona de armazenamento é definida como a porção do escoamento que contribui para o armazenamento transiente, que pode ser entendido como as bolsas de água estagnada (podre) e também as áreas porosas existentes no leito do escoamento.

Outros modelos de qualidade de água em rios, o ASM1, ASM2 e ASM3 foram desenvolvidos por pesquisadores europeus e também se baseiam nas equações de balanço de massa e incluem termos da variação longitudinal, vertical e da zona lateral, considerando também a variação

temporal. Dependendo da situação a ser simulada e dos parâmetros coletados, os modelos podem se apresentar como uni, bi ou tri-dimensionais. O grupo de pesquisadores dos modelos ASM reconhece que tais modelos são complexos devido não apenas a escassez de dados, mas também ao fato de que a determinação de certas variáveis e parâmetros pode ser um problema.

MATERIAIS E MÉTODOS

O AcquaNet é um modelo de rede de fluxo que engloba o gerenciamento de quantidade e qualidade de água para um sistema de rios, reservatórios e tributários, além da produção de energia elétrica. Tais aspectos podem trabalhar isoladamente ou de forma integrada, dependendo das necessidades do usuário. Sendo o modelo QualidadeCLS o responsável pelo gerenciamento de qualidade de água.

O QualidadeCLS é um modelo a ser utilizado em rios, capaz de considerar lançamentos pontuais, tais como a entrada de efluentes industriais e a descarga de esgotos doméstico, podendo simular as concentrações de DBO, OD, Coliformes Totais, Fósforo Total, Algas, Nitrogênio Orgânico, Amônia, Nitrito e Nitrato.

O QualidadeCLS surgiu da necessidade de acoplar um modelo de qualidade de água que fosse capaz de trabalhar integradamente com o modelo de quantidade de água – o AlocaLS, para que o objetivo proposto de desenvolver uma ferramenta computacional que propiciasse o gerenciamento integrado dos aspectos de quantidade e qualidade de água para uma bacia hidrográfica fosse alcançado.

Os modelos de qualidade de água já existentes, tal como o Qual2E e o OTIS, foram inicialmente analisados, mas devido as dificuldades de integração e a incompatibilidade de cenários em que tais modelos trabalham em relação ao de rede de fluxo em que trabalha o AlocaLS (antigo ModSimP32), tais modelos não puderam ser utilizados.

Embora o modelo QualidadeCLS tenha surgido a partir de uma necessidade física, o seu desenvolvimento trouxe algumas vantagens ao sistema, tais como; a obtenção, por parte dos pesquisadores, do conhecimento dos processos físicos, químicos e biológicos de qualidade de água, relacionados ao processo de modelagem. Além disso, o modelo de qualidade de água não será mais uma caixa preta e sim um código computacional aberto aos pesquisadores do projeto, sendo perfeitamente possível o refinamento das equações envolvidas, de acordo com a evolução das pesquisas em qualidade de água.

O modelo QualidadeCLS utiliza a formulação apresentada na literatura atual e vem a coincidir com o equacionamento dos modelos de qualidade de água em rios já existentes.

No processo de modelagem, os rios podem ser considerados como escoamentos unidimensionais e estão sujeitos principalmente aos fenômenos de conservação de massa e de reações cinéticas. Podendo, o rio ser dividido em trechos, como na figura a seguir.

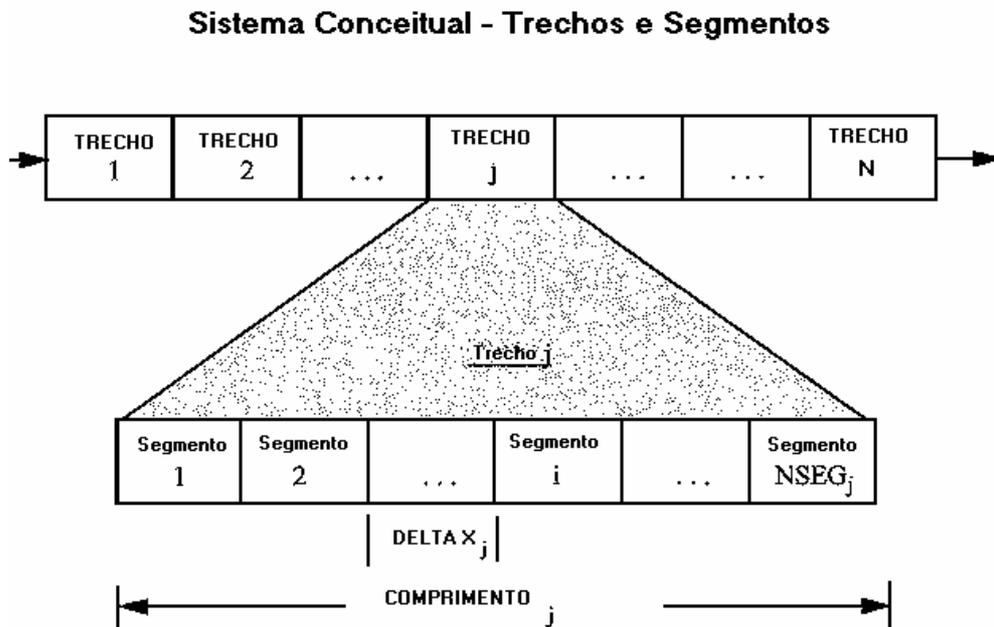


Figura 2: Subdivisão de um trecho do rio em segmentos – Fonte RUNKEL (1998).

Cada trecho, deverá apresentar parâmetros constantes, como por exemplo: área da seção, declividade, velocidade, vazão, altura média da lâmina d'água, entre outros. Cada segmento representa um volume de controle sobre o qual as equações que governam o balanço de massa serão aplicadas. Para um dado trecho, haverá um determinado número de segmentos de comprimento ΔX . A maioria dos modelos de qualidade de água, utilizam essa divisão do rio em trechos e segmentos, como exemplo pode-se citar os modelos QUAL2E e OTIS.

A equação de balanço de massa relacionando a conservação de massa e as reações cinéticas é a seguinte:

$$V \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial \left(A_c E \frac{\partial c}{\partial x} \right)}{\partial x} dx - \frac{\partial (A_c U c)}{\partial x} dx + V \frac{dc}{dt} + S \quad (2)$$

Acumulação = Dispersão - Advecção + Reações Cinéticas + Fontes Externas

Onde: V: volume; A_c : Área do canal; E: coeficiente de dispersão; c: concentração do poluente; U: velocidade média; x: distância; S: fontes externas.

Com o objetivo de simplificar a eq. (2), o termo V (volume) será eliminado da equação, lembrando também que $V = A_c \cdot dx$, então a equação resultante será a seguinte:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = E \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - U \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{dc}{dt} + \frac{S}{V} \quad (3)$$

Lembrando que U (velocidade) = Q/A, portanto a equação resulta em:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = E \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{Q}{A} \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{dc}{dt} + \frac{S}{V} \quad (4)$$

O termo $\frac{dc}{dt}$ das equações (2), (3) e (4) refere-se aos processos cinéticos a que os diversos poluentes a serem analisados estão sujeitos, cada um deles apresenta um comportamento diferente, tais equações são demonstradas no tópico seguinte deste trabalho, denominado Reações Cinéticas.

A equação geral de balanço de massa permite que o termo relacionado às reações cinéticas possa ser dividido em dois termos separados, como está demonstrado a seguir:

$$\frac{dc}{dt} = kc \quad (5)$$

Onde k é a taxa de decaimento da variável em questão. Portanto, a equação geral de balanço de massa também pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = E \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - \frac{Q}{A} \frac{\partial c}{\partial x} + kc + \frac{S}{V} \quad (6)$$

O módulo de qualidade de água pode apresentar duas formas para solução do problema: *Estado Constante* ou *Variando no tempo*.

O tipo de solução de estado constante é a mais apropriada para o módulo de qualidade, isso porque os modelos de quantidade e qualidade devem trabalhar integradamente e o AlocaLS otimiza as vazões para um intervalo mensal. Portanto, o QualidadeCLS poderá tratar das concentrações dos poluentes também para um período mensal. Dessa forma, é correto assumir que para cada mês e em cada link da rede de fluxo (correspondente a um trecho do rio), tem-se um resultado de vazão e que esse valor poderá ser um dado de entrada para o módulo de qualidade, ou seja, a vazão permanecerá constante num determinado tempo (no mês) e num dado espaço (no link).

Finalmente, pode-se concluir que no QualidadeCLS a variação das concentrações será espacial (ao longo do rio – variando nos diversos links da rede de fluxo) e que a variação temporal está embutida através da utilização do AlocaLS, que trabalha com a variação mensal de vazão.

A solução para o estado constante considera que não existe variação da concentração em relação ao tempo, portanto:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0 \quad (7)$$

A equação de balanço de massa também pode ser chamada de equação de advecção-dispersão-reações e também pode ser escrita da seguinte forma

$$0 = -U \frac{\partial c}{\partial x} + E \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - kc \quad (8)$$

Considerando que as diferenciais parciais podem ser substituídas por derivadas parciais, então:

$$0 = -U \frac{dc}{dx} + E \frac{d^2c}{dx^2} - kc \quad (9)$$

O termo E refere-se ao coeficiente de dispersão, tal parâmetro é muito significativo em escoamentos dispersivos, tais como os estuários. No caso dos rios, o fenômeno da advecção (parcela referente a velocidade) é o que tem maior importância. Baseando-se nesse princípio, a parcela referente a dispersão pode ser eliminada na equação (9), e portanto para os rios assume-se que:

$$0 = -U \frac{dc}{dx} - kc \quad (10)$$

Para solucionar tal equação, pode-se recorrer ao processo numérico, ou seja, o rio deve ser dividido em trechos, em que as características hidrogeométricas do canal sejam iguais, e que cada um desses trechos sejam subdivididos em segmentos também denominados de volumes de controle, como demonstra a figura 2. A partir daí a equação (10) deverá ser aplicada para cada um desses volumes de controle.

A aproximação numérica no processo de modelagem de um poluente para um sistema de estado constante pode provocar uma discrepância entre os resultados numéricos e analíticos, isso ocorre devido ao fato de que o método numérico se baseia no processo das diferenças finitas, portanto quanto menor o comprimento dos volumes de controle menor será a dispersão dos resultados.

Isso quer dizer que, para minimizar a dispersão numérica, torna-se necessário que o rio seja subdividido em inúmeros volumes de controle, por outro lado, isso acarretará em grandes matrizes

para o sistema, exigindo um enorme esforço computacional para que os resultados possam convergir.

Além disso, dispersão numérica ocasionada pelo método numérico acaba resultando em um erro acumulativo que vai passando de um segmento para outro.

Outra forma de resolver o problema é através da integração da equação (10), em que se chega numa solução analítica para a questão.

Assumindo que a velocidade (U) deve ser constante no trecho do rio (um determinado link na rede de fluxo do modelo QualidadeCLS) e que essa velocidade corresponde a um ΔX (distância para que uma partícula de água saia de um ponto e chegue a outro) por um Δt (intervalo de tempo).

Portanto:

$$U = \frac{dx}{dt} \quad (11)$$

Considerando a forma geral para um determinado decaimento, considerando a simplificação da velocidade e integrando sua equação, tem-se que:

$$U \frac{dc}{dx} = -kc \quad (12)$$

$$\frac{dx}{dt} \frac{dc}{dx} = -kc \quad \text{portanto} \quad \frac{dc}{dt} = -kc \quad \text{e} \quad \frac{dc}{c} = -kdt \quad (13)$$

Integrando essa equação tem-se que:

$$\int \frac{dc}{c} = -k \int dt \quad \ln|c| = -kt + \bar{c} \quad (14)$$

Portanto:

$$c = c_0 e^{-kt} \quad (15)$$

Assumindo que o t (tempo) é a distância pela velocidade, então:

$$c = c_0 e^{-k \frac{x}{U}} \quad (16)$$

Isso significa dizer que, um volume de controle percorre um determinado trecho (link da rede de fluxo), com as mesmas características hidrogeométricas e com uma velocidade constante U.

A obtenção da solução de cada um dos diversos poluentes considerados no modelo QualidadeCLS, se dá a partir do termo $\frac{dc}{dt}$ para os respectivos equacionamentos descrito nas fórmulas (17) a (25).

REAÇÕES CINÉTICAS

Os constituintes considerados no modelo QualidadeCLS são: DBO, OD, nitrogênio orgânico, amônia, nitrito, nitrato, fósforo total, algas e coliformes totais.

As reações cinéticas dos constituintes de água, relacionadas no módulo de qualidade, podem ser representadas matematicamente pelas expressões a seguir. Cada uma dessas equações é resultado de um complexo processo químico e biológico que o constituinte presente no corpo d'água está sujeito.

$$\rightarrow \text{Algas (A):} \quad \frac{dA}{dt} = k_g A - k_{ra} A - \frac{\sigma_1}{H} A \quad (17)$$

$$\rightarrow \text{Nitrogênio Orgânico (N}_o\text{):} \quad \frac{dN_o}{dt} = a_{na} k_{ra} A - k_{oa} N_o - \sigma_4 N_o \quad (18)$$

$$\rightarrow \text{Amônia (N}_a\text{):} \quad \frac{dN_a}{dt} = k_{oa} N_o - k_{ai} N_a + \frac{\sigma_3}{H} - F a_{na} k_g A \quad (19)$$

$$\rightarrow \text{Nitrito (N}_i\text{):} \quad \frac{dN_i}{dt} = k_{ai} N_a - k_{in} N_i \quad (20)$$

$$\rightarrow \text{Nitrato (N}_n\text{):} \quad \frac{dN_n}{dt} = k_{in} N_i - (1 - F) a_{na} k_g A \quad (21)$$

$$\rightarrow \text{Fósforo Total (P):} \quad \frac{dP}{dt} = k_p P \quad (22)$$

$$\rightarrow \text{DBO (L):} \quad \frac{dL}{dt} = -k_d L - k_s L \quad (23)$$

$$\rightarrow \text{OD (o):} \quad \frac{do}{dt} = k_a (o_s - o) - k_d L - \frac{SOD}{H} + (P k_g - R k_{ra}) A - r_{oa} k_{ai} N_a - r_{oi} k_{in} N_i \quad (24)$$

$$\rightarrow \text{Coliformes Totais (Coli):} \quad \frac{dColi}{dt} = -k'_b Coli \quad (25)$$

Quanto ao OD (oxigênio dissolvido), pode-se dizer que a sua respectiva equação relaciona a demanda de oxigênio referente a DBO e a NDBO (DBO referente ao nitrogênio oxidável, que é a concentração do nitrogênio orgânico somada a da amônia), além dos efeitos de crescimento e

respiração das algas relacionados a fotossíntese em função dos parâmetros de luz e do nutriente limitante.

Além disso, o modelo corrige internamente todas as taxas (os ks) para a temperatura de 20°C.

Todos os parâmetros das eqs. (17) a (25) estão identificados a seguir:

k_d : taxa de decomposição da DBO [d^{-1}];

k_a : taxa de reaeração, diversos autores propõem fórmulas para sua determinação, o modelo QualidadeCLS traz as fórmulas de Churchill et al., O'Connor e Dobbins, Owens et al. e Langbien e Durum [d^{-1}];

k_s : taxa de sedimentação da DBO [d^{-1}];

SOD : demanda de oxigênio no sedimento pela DBO [$g\ m^{-2}\ d^{-1}$];

o : concentração do oxigênio dissolvido presente no corpo d'água [$mg\ L^{-1}$];

o_s : concentração de saturação do oxigênio dissolvido, obtido em função da temperatura [$mg\ L^{-1}$];

k_g : taxa de crescimento das algas [d^{-1}];

k_{ra} : taxa de perda de biomassa de algas devido o processo de respiração [d^{-1}];

σ_1 : demanda de oxigênio no sedimento pela algas [$g\ m^{-2}\ d^{-1}$];

σ_2 : demanda de oxigênio no sedimento pelo fósforo [$g\ m^{-2}\ d^{-1}$];

σ_3 : demanda de oxigênio no sedimento pela amônia [$g\ m^{-2}\ d^{-1}$];

σ_4 : taxa de sedimentação do nitrogênio orgânico [d^{-1}];

σ_5 : taxa de sedimentação do fósforo orgânico [d^{-1}];

H : profundidade média do rio no trecho considerado, obtida pela equação de Manning [m];

k_p : taxa de decaimento do fósforo [d^{-1}];

k'_b : taxa das perdas totais dos coliformes [d^{-1}];

F : fator de limitação do nutriente (nitrogênio);

a_{na} : razão estequiométrica do nitrogênio com relação as algas (clorofila) [$gN\ mg-Chla^{-1}$];

a_{pa} : razão estequiométrica do fósforo em relação as algas (clorofila) [$gP\ mg-Chla^{-1}$];

r_{oa} : razão estequiométrica do oxigênio em relação a amônia [$gO\ gN^{-1}$];

r_{oi} : razão estequiométrica do oxigênio em relação ao nitrito [$gO\ gN^{-1}$];

r_{on} : razão estequiométrica do oxigênio em relação a nitrogênio total [$gO\ gN^{-1}$];

r_{oA} : razão estequiométrica do oxigênio em relação as algas definida pela clorofila A [$gO\ mgChla^{-1}$];

P : razão de fotossíntese;

R : razão de respiração.

k_{oa} : taxa de transformação de nitrogênio orgânico em amônia;

k_{ai} : taxa de transformação de amônia em nitrito;

k_{in} : taxa de transformação de nitrito em nitrato;

Os parâmetros k_{oa} , k_{ai} e k_{in} são multiplicados internamente no modelo pelo fator de nitrificação (f_{nitr}), obtido através da seguinte equação:

$$f_{nitr} = 1 - e^{-k_{nitr} \cdot o} \quad (26)$$

onde k_{nitr} = coeficiente de primeira ordem referente a inibição da nitrificação ($\approx 0,6$), é considerado igual a 1 para concentrações de OD maiores que 3 mg/l.

A questão do gerenciamento de recursos hídricos envolve grandes sistemas que acabam resultando em grandes redes de fluxo, com muitos reservatórios, nós de passagem, links e demandas. A quantidade de dados envolvida na modelagem é enorme, visto que os dados se configuram na forma de séries temporais.

Pensando nisso, os pesquisadores procuraram um equacionamento que apresentasse bons resultados e que tivesse um tempo de processamento satisfatório. A solução mais conveniente foi a de utilizar a solução analítica, tanto no que diz respeito a qualidade dos resultados, quando comparados aos fornecidos pelo Qual2E, visto que essa solução não apresenta a dispersão numérica. Além disso, o tempo de processamento é significativamente menor, quando comparado com a utilização do método numérico.

EXEMPLO DEMONSTRATIVO

Com o objetivo de apresentar a versatilidade e a forma de aplicação do modelo QualidadeCLS, a seguir é demonstrada uma rede de fluxo contendo dois reservatórios que abastecem três nós de demanda. Conforme apresentado a seguir:

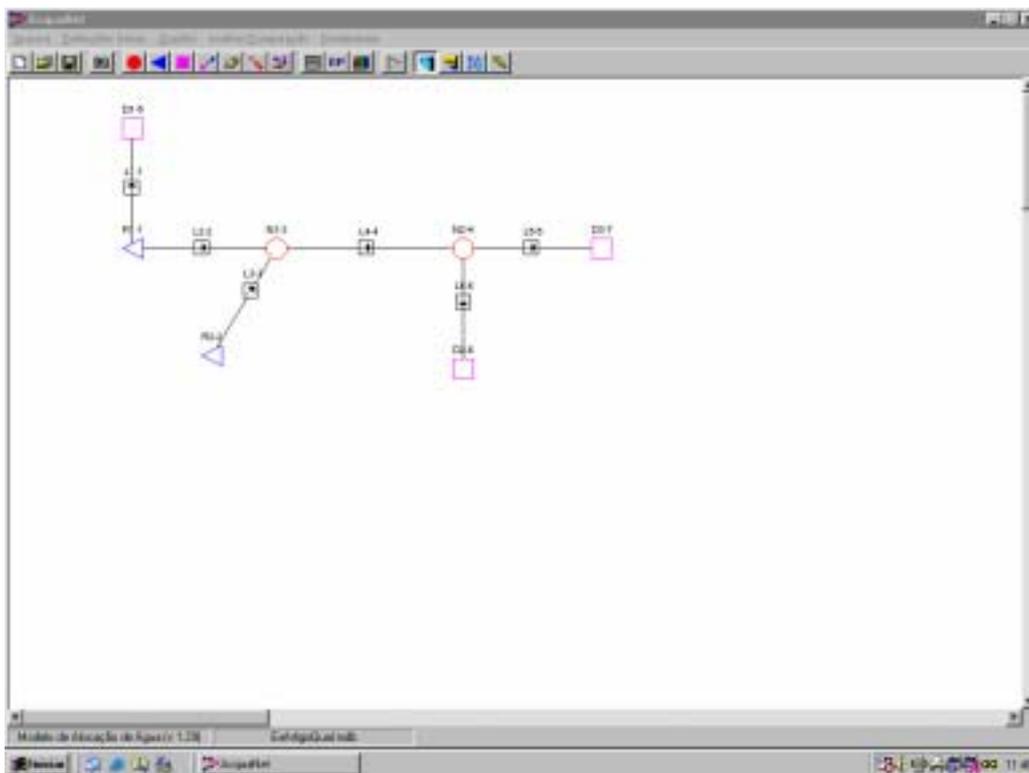


Figura 3: Rede de Fluxo do exemplo demonstrativo.

Para a utilização do modelo QualidadeCLS, primeiramente torna-se necessário a simulação dos aspectos de quantidade através do modelo AlocaLS, onde o atendimento às demandas e os valores otimizado das vazões nos links são determinados. A partir daí, quando o ícone correspondente ao QualidadeCLS é acionado, o modelo de qualidade de água estará apto a calcular as concentrações dos parâmetros de DBO, OD, coliformes totais, fósforo total, algas, nitrogênio orgânico, amônia, nitrito e nitrato e a influência da temperatura sobre a taxa de saturação de oxigênio.

No exemplo apresentado, os nós D1-5, D2-6 e D3-7 com valores de demandas mensais respectivamente iguais a $0,2 \text{ m}^3/\text{s}$, $1 \text{ m}^3/\text{s}$ e $1 \text{ m}^3/\text{s}$, foram integralmente abastecidas pelos reservatórios R1-1 e R2-2, que por sua vez apresentaram volumes suficientes para satisfazer tais demandas durante o período de simulação correspondente a 1 ano.

A integração dos dois modelos, se dá a partir do compartilhamento do banco de dados. Isso significa dizer que, o AlocaLS otimiza a quantidade de água e guarda tais resultados no banco. Então o modelo QualidadeCLS busca os valores das vazões nos respectivos links da rede de fluxo e os admite como dados de entrada.

Para a simulação dos aspectos de qualidade de água, se faz necessário a entrada de informações específicas em cada um dos links e dos nós (reservatórios, nós de demanda e nós de passagem). A tela de entrada de dados referente aos links é a seguinte:

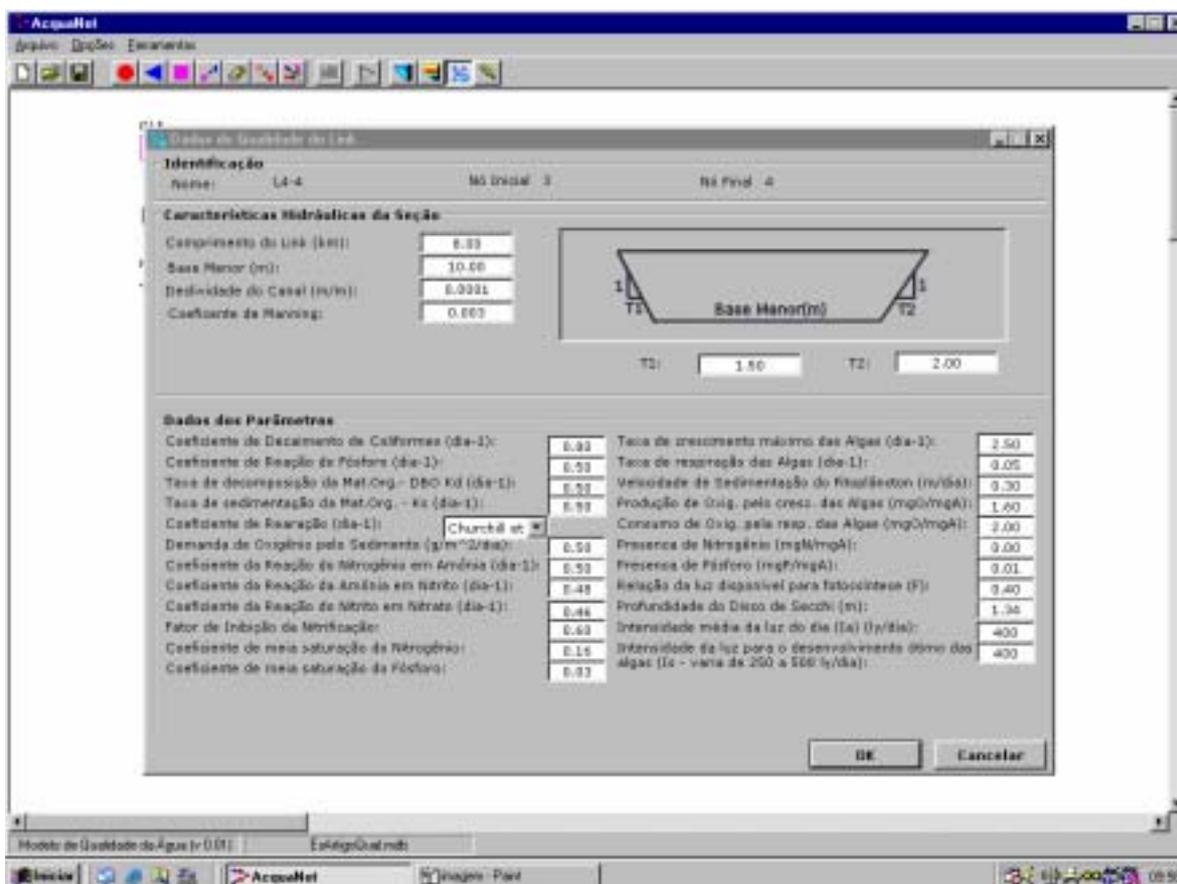


Figura 4: Tela de entrada de dados dos links da rede de fluxo.

Nesta tela do modelo, basicamente torna-se necessário a entrada das características hidráulicas da seção e os coeficientes e parâmetros referente aos constituintes de qualidade de água considerados na simulação.

A entrada de efluentes no sistema, pode ser feita através da criação de um nó de passagem ou de demanda. Acessando o referido nó, o usuário deve informar o quanto esta sendo lançado no rio, através das tabelas correspondente a cada um dos poluentes. Conforme demonstrado na figura 5.

No exemplo demonstrativo existe um lançamento de 5 mg/l de DBO, que foi feito através do nó de passagem N1-3 da rede de fluxo da figura 3, com uma vazão de lançamento igual a 0,20 m³/s, sendo os valores iguais para todos os meses simulados. Embora o modelo esteja apto a considerar a influência de um tratamento sanitário. A entrada do efluente no nó N1-3 está na sua forma bruta, não recebendo nenhum tratamento.

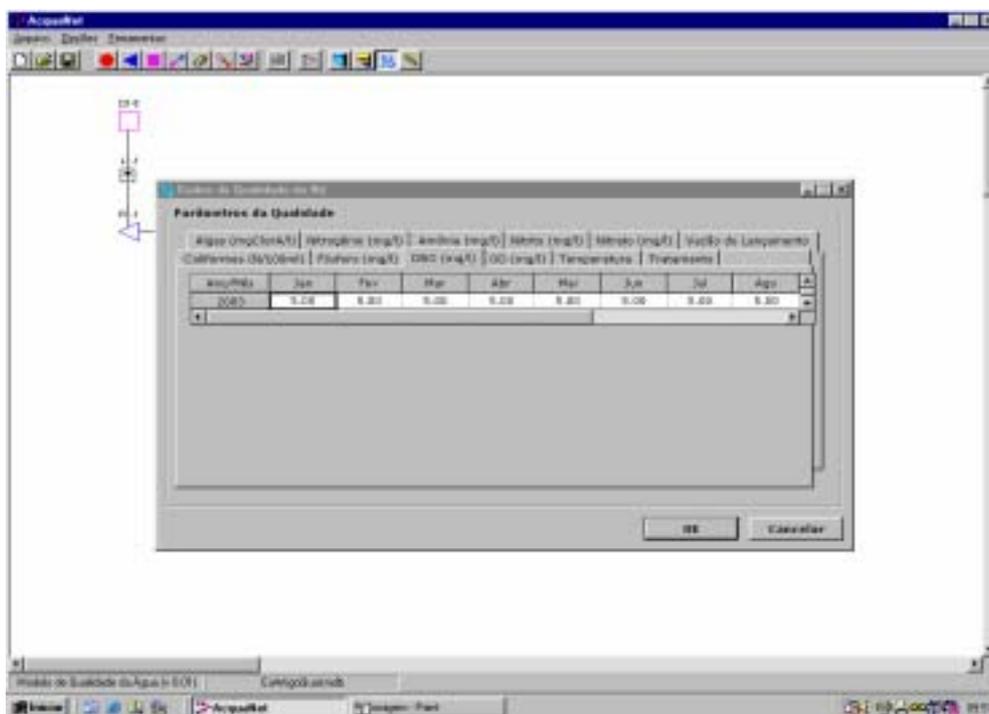


Figura 5: Tela correspondente a descarga de resíduos no sistema.

O QualidadeCLs é um modelo de qualidade de água específico para ser usado em rios. A versão atual do modelo não é capaz de simular os processos que regem a qualidade de água dos reservatórios. Portanto, torna-se necessário que o usuário informe ao modelo, com que concentração a água esta deixando o lago. Clicando com o botão direito do mouse sobre o nó de reservatório, o usuário terá acesso a duas tabelas: “Condição Inicial” e “Lançamentos”. Na “Condição Inicial”, o usuário deve entrar com as concentrações para o primeiro mês de simulação e na outra tabela ele pode extrapolar os dados para todo o período da simulação, ou informar outros valores.

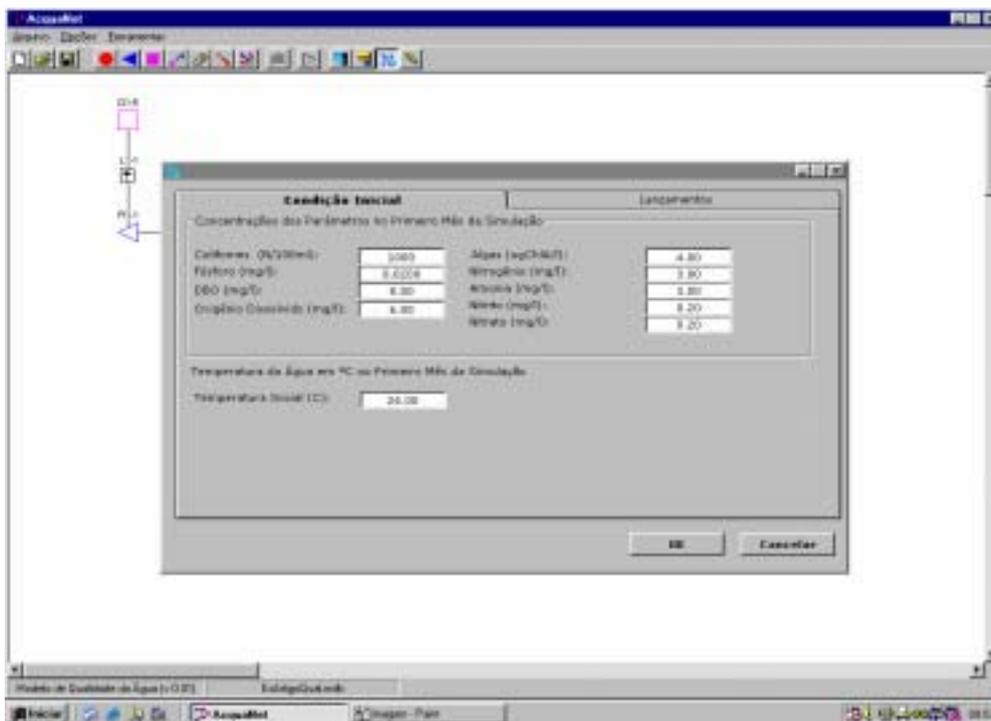


Figura 6: Tela correspondente a entrada de dados dos reservatórios.

No exemplo, a água que está saindo do reservatório R1-1 tem no primeiro mês 1000 coliformes/100 ml; 0,020 mg/l de fósforo total; 8 mg/l de DBO; 6 mg/l de OD; 4 µg Clor.A/l; 3mg/l de nitrogênio orgânico; 3 mg/l de amônia; 0,20 mg/l de nitrito e 0,20 mg/l de nitrato. Conforme demonstrado na figura 6.

RESULTADOS

Após a entrada dos dados e dos coeficientes nas respectivas telas do modelo e apertando o botão “Calcular”, o modelo emite a seguinte mensagem: “Simulação de Qualidade Concluída com Êxito!”. Então o botão dos resultados será ativado e o usuário poderá visualizá-los a a partir da seguinte tela:

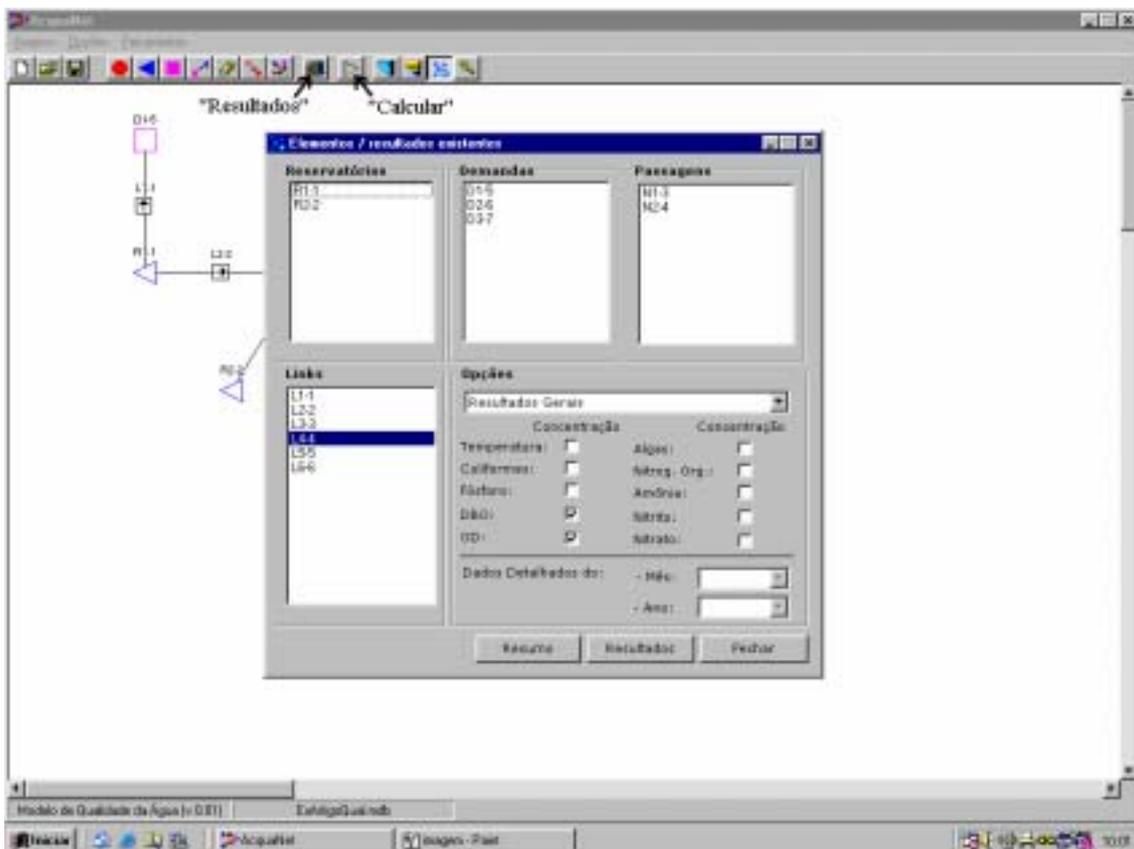


Figura 7: Tela de seleção de links e nós de interesse, para posterior visualização dos seus resultados.

O modelo apresenta duas opções: Resultados Gerais e Links Detalhados. Na primeira opção, o usuário deve selecionar os nós e links que deseja visualizar e os constituintes de qualidade de água de seu interesse. Nesta opção, são mostradas as concentrações pontuais em relação aos meses.

Na segunda opção, o usuário deve escolher os constituintes de interesse, o link que deseja visualizar, além do mês e do ano, ou seja, um valor de vazão dentro do período simulado, podendo analisar o impacto de períodos secos e chuvosos. Nesta última opção, serão mostrados os comportamentos dos poluentes escolhidos ao longo do link em questão.

Em qualquer uma das opções; “Resultados Gerais” ou “Links Detalhados”, os resultados são apresentados na forma de tabelas e gráficos, de acordo com os constituintes de qualidade de água escolhidos pelo usuário.

A figura apresentada a seguir refere-se a apresentação dos resultados referentes a opção de “Resultados Gerais”, nessa tabela estão sendo mostrados os resultados do Link5-5, para cada um dos meses do período simulado. Os valores apresentados referem-se ao ponto inicial e final de cada link de acordo com os diversos poluentes que foram selecionados.

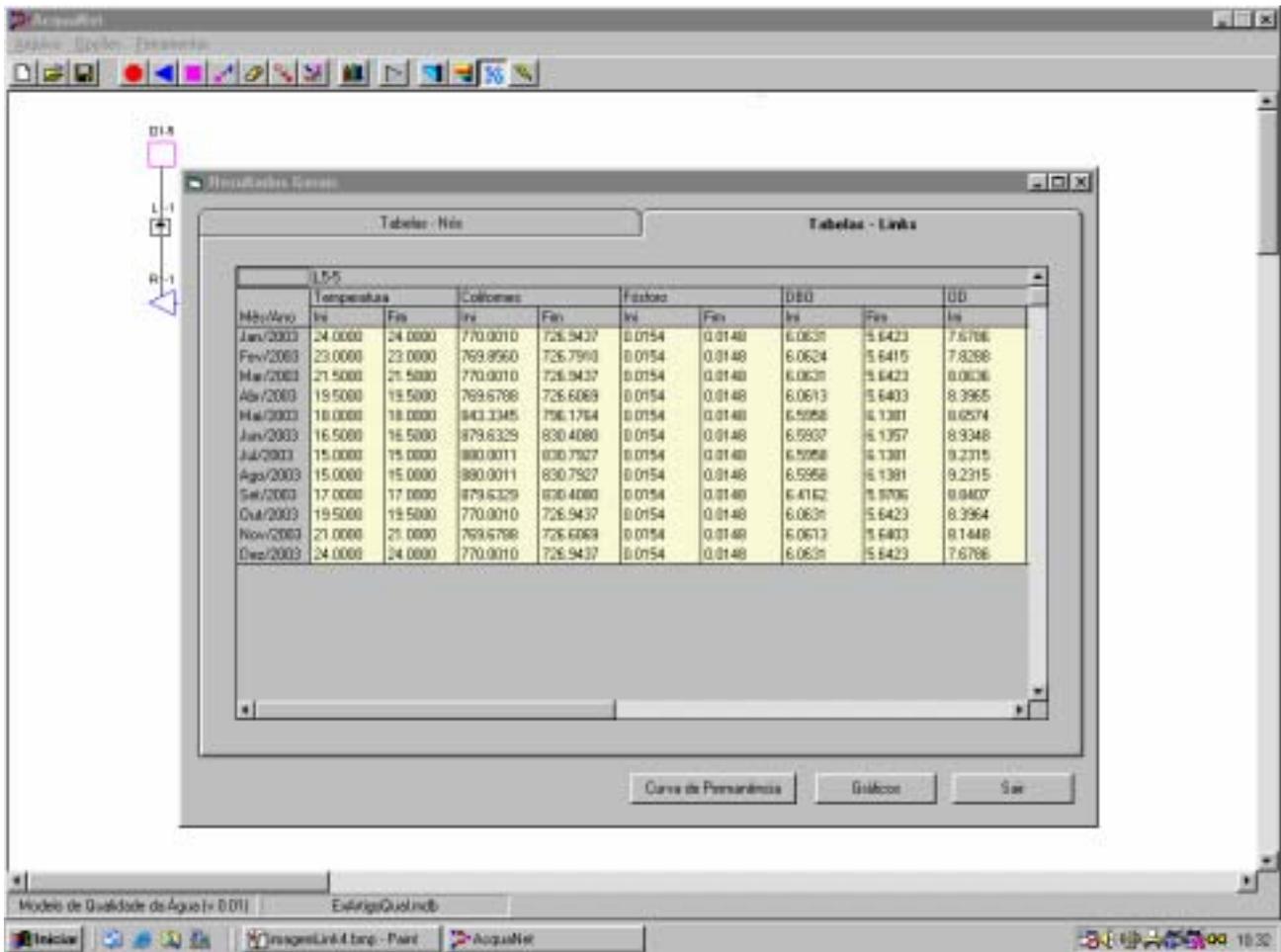


Figura 8: Tela de apresentação dos resultados a partir da opção “Resultados Gerais”.

No caso dos nós (Reservatórios, nós de demanda e nós de passagem), os valores apresentados correspondem a situação pontual de qualidade de água em relação a todos os meses do período de simulação.

No caso da opção “Links Detalhados”, em que o usuário do modelo deve escolher um link, variáveis de qualidade de água de interesse e um determinado mês, ou seja um cenário de vazão. Então, ele poderá analisar o decaimento dos poluentes ao longo do trecho do rio (link escolhido).

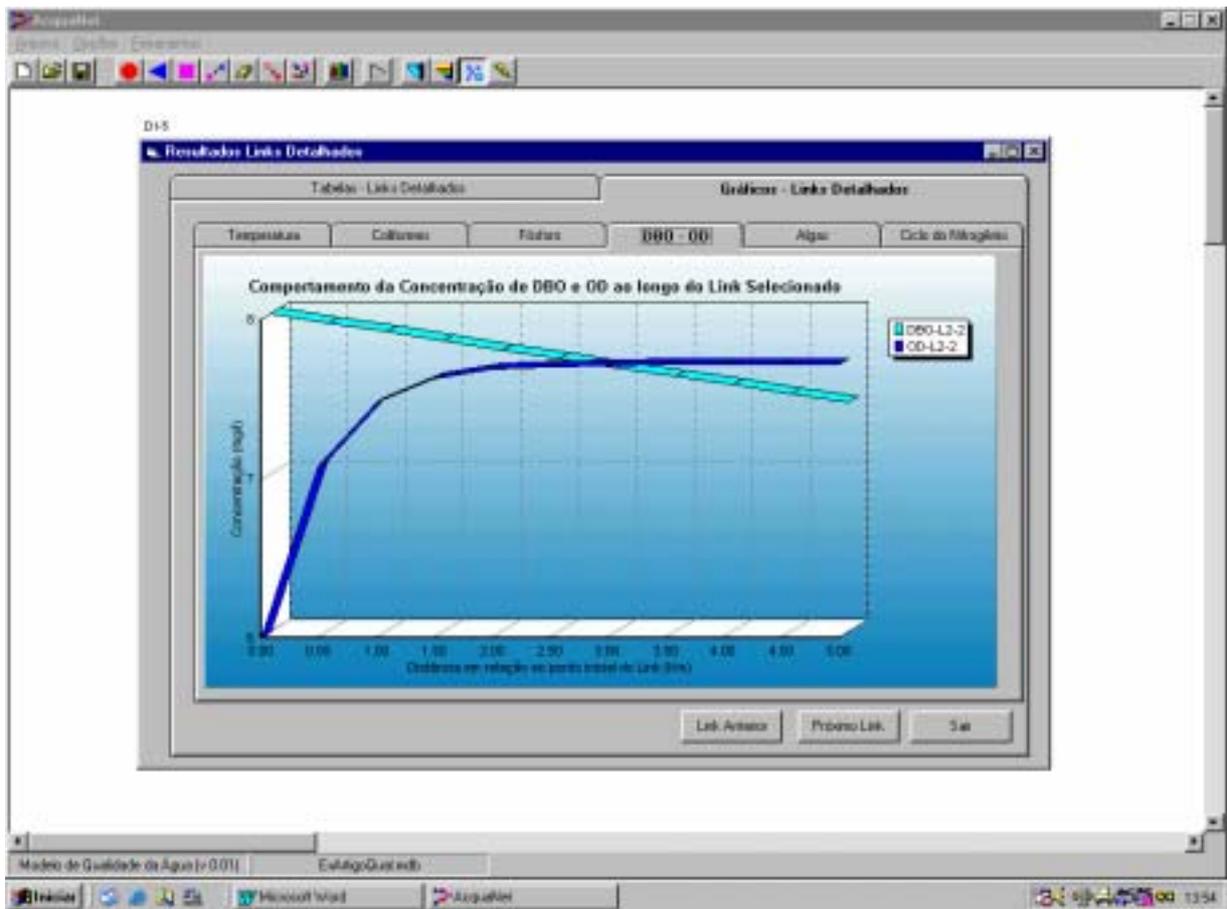


Figura 9: Tela de apresentação dos resultados do Link L2-2 a partir da opção “Links Detalhados”.

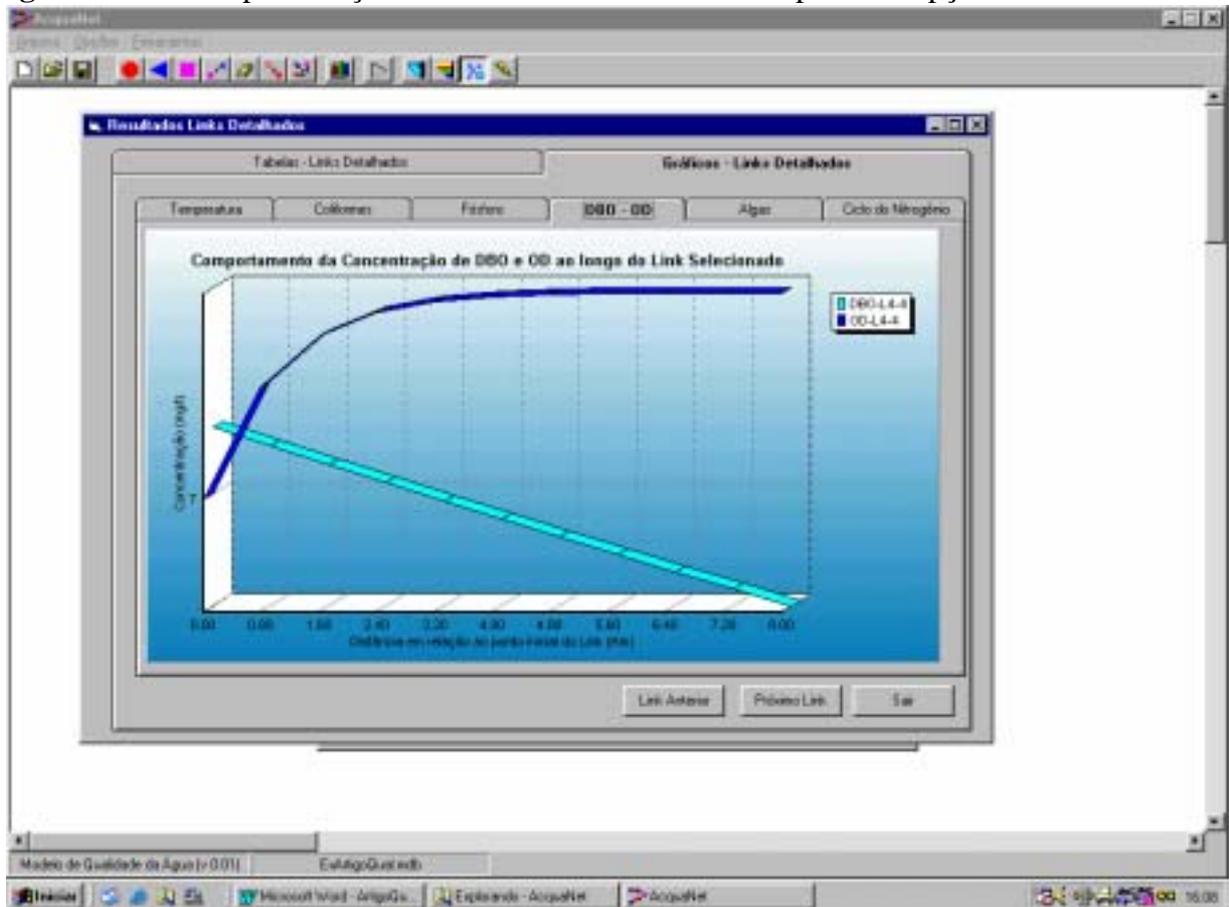


Figura 10: Tela de apresentação dos resultados do Link L4-4 a partir da opção “Links Detalhados”.

A partir da figura 9, pode-se observar que o Link L2-2 que corresponde ao trecho subsequente ao reservatório R1-1, que por sua vez liberando água com a concentração de 6 mg/l de OD e 8 mg/l de DBO e considerando os valores de vazões para o primeiro mês da simulação. Então, conclui-se que houve um decaimento da DBO ao longo desse link, chegando ao final com uma concentração igual a 7,45 mg/l. Com relação ao Oxigênio Dissolvido, pode-se concluir que ao final dos cinco quilômetros do Link L2-2, a concentração passou de 6 para 7,72 mg/l, verificando com isso a recuperação do corpo d'água, que por sua vez buscou alcançar o nível de saturação de oxigênio.

O link L4-4 que corresponde ao trecho subsequente ao nó N1-3, onde existe uma descarga de 5 mg/l de DBO com uma vazão de lançamento igual a 0,20 m³/s. Além disso, este ponto também recebe a água que sai do reservatório R1-1 e percorre o link L2-2 e também recebe a vazão efluente do reservatório R2-2, que por sua vez percorre o link L3-3. Portanto, no nó N1-3 o modelo faz um balanço de massa correspondente aos lançamentos que ocorrem neste ponto. Observando a figura 10, pode-se concluir que no início do link L4-4 a concentração de DBO é de 7,27 mg/l e ao final do link a concentração decaiu até o nível de 6,61 mg/l. Para o Oxigênio Dissolvido, verifica-se que a concentração inicial é da ordem de 7 mg/l e chega a 7,76 mg/l ao final do comprimento do link L4-4, verificando uma melhora nos padrões ambientais neste trecho do rio.

A modelagem de qualidade de água requer o processo de calibração, onde o ajuste dos coeficientes deve ser feito de forma adequada, para assegurar a confiabilidade dos resultados. Essa é uma tarefa delicada, que requer sensibilidade do usuário dos modelos de qualidade de água.

Os resultados fornecidos pelo modelo QualidadeCLS têm acompanhado de forma muito significativo os resultados fornecidos pelo Qual2E, que é um modelo já consagrado pelo uso.

O modelo QualidadeCLS permite que um lançamento de uma carga poluidora feita em um nó da rede de fluxo, possa receber ou não um determinado grau de tratamento.

Dessa forma, o usuário poderá analisar o impacto de diferentes tratamentos que possivelmente sejam atribuídos aos resíduos lançados no corpo d'água, podendo então analisar se um trecho do rio ou todo ele corresponde aos padrões estabelecidos pelo CONAMA 20 de acordo com a sua classificação. Então, o usuário poderá buscar quais são os tratamentos necessários que os diversos efluentes devam receber, para que o rio seja enquadrado dentro dos padrões ambientais.

CONCLUSÕES

O QualidadeCLS surgiu da necessidade de se utilizar um modelo de qualidade de água que fosse capaz de trabalhar de forma integrada com o modelo de quantidade, formando assim um sistema que pudesse auxiliar os responsáveis pelo gerenciamento integrado de recursos hídricos.

Para que os dois aspectos (quantidade-qualidade) fossem analisados de forma integrada, a solução escolhida foi a de criar um banco de dados com informações que pudessem ser acessadas tanto pelo modelo de quantidade como pelo de qualidade.

Então, criou-se o modelo AcquaNet, que é o responsável pela criação da rede de fluxo, que pode, de forma generalizada, configurar uma bacia hidrográfica e é o responsável também pelo gerenciamento das informações contidas no banco de dados. O modelo ModSimP32 sofreu algumas modificações e passou a se chamar AlocaLS, é o modelo responsável pelo gerenciamento otimizado de quantidade de água. Para tratar as questões ambientais de qualidade de água, os autores desenvolveram o modelo QualidadeCLS.

O modelo de qualidade de água têm se mostrado eficiente em relação ao propósito inicial, é uma ferramenta capaz de determinar as concentrações dos poluentes nos diversos pontos de uma rede de fluxo de forma rápida, podendo relacionar níveis de tratamento para os lançamentos de efluentes descarregados no corpo d'água.

Vários testes foram realizados utilizando o modelo QualidadeCLS e um modelo de qualidade de água mundialmente conhecido – o Qual2E, os resultados fornecidos pelo QualidadeCLS, em todos os exemplos testados, coincidiram ou chegaram muito próximo aos resultados fornecidos pelo Qual2E. As maiores diferenças nos resultados dos dois modelos foram verificadas nas concentrações de OD e foram da ordem de 3%, isso ocorreu devido ao fato de que a determinação das taxas de oxigênio dissolvido envolve um número maior de parâmetros do que os demais constituintes de qualidade de água. Essa pequena diferença tem pouca importância, quando analisa-se o processo de calibração.

Portanto, conclui-se que o modelo Qualidade CLS pode ser perfeitamente utilizado como uma ferramenta para auxiliar no processo de gerenciamento de recursos hídricos.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPESP (Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo) pelo apoio financeiro para o desenvolvimento desta pesquisa.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CHAPRA, S. C., “Surface Water Quality Modelling” – University of Colorado at Boulder, 1997;
FELTRE, R., “Fundamentos da Química” Segunda Edição – São Paulo – 1996;
MEYBECK, M.; CHAPMAN, D. e HELMER, R. “Global Freshwater Quality: a first assessment”
– Oxford, UK e Cambridge, Mass – 1990;

RUNKEL, R. L., “One-Dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS): A Solute Transport Model for Streams and River”, USGS – Denver, Colorado – 1998.

THOMANN, R.V. e MUELLER, J. A. ., “*Principles of Surface Water Quality Modeling and Control* 1987.