QUALIDADE DA ÁGUA DA BACIA DO RIO IGUAÇU: Diferenças conceituais entre os modelos QUAL2E e QUAL2K

Heloise G. Knapik [1]; Karine Bassanesi[2] & Cristovão V. S. Fernandes[3]

RESUMO --- Para a implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, conforme instituído pela Lei Federal que estabeleceu o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos, muito esforço tem se apresentado para consolidar conjunto de ferramentas técnicas que permitam avançar no entendimento dos complexos conceitos associados aos instrumentos em destaque. Notadamente o modelo matemático de qualidade da água QUAL2E, ganhou destaque com sua utilização mundialmente difundida pelo fato de ser um software de domínio público, com código fonte aberto e interface amigável. Este artigo apresenta uma análise comparativa crítica entre este modelo e o mais recente difundido pelo EPA, QUAL2K, com o firme propósito de destacar que são concepções completamente diferentes com algumas características similares.

ABSTRACT --- In order to consolidate the water resources planning and management instruments, as defined by the Federal law that established the Water Resources Management National System, a lot of effort hás been spent to consolidate the technical tools that will allow the understanding of the complex concepts linked to the mentioned instruments. Clearly, the water quality mathematical model QUAL2E from EPA, achieved highly importance for being world wide used as consequence of being public domain, open source and friendly used. This paper presents a critical analysis between this model and the most recent presented by EPA, Qual2K, with the main goal of of emphasizing that these two models have different concepts with some common characteristics.

Palavras – chave: QUAL2E, QUAL2K, Modelagem Matemática da Qualidade da Água.

[1] Aluna de Mestrado pela UFPR, Centro Politécnico s/n, Bloco 5, Cx. Postal 19011, 81531, Curitiba – PR. E-mail: heloise.dhs@ufpr.br
[2] Bolsista de Iniciação Científica - UFPR, Centro Politécnico s/n, Bloco 5, Cx. Postal 19011, 81531, Curitiba – PR. E-mail: eng.kah@ufpr.br
[3] Professor Adjunto III da UFPR, Departamento de Hidráulica e Saneamento, Curitiba – PR. E-mail: cris.dhs@ufpr.br

1. INTRODUÇÃO

A modelagem matemática consiste em representar, de maneira simplificada, diferentes sistemas e interações que ocorrem em um ambiente, através de hipóteses estabelecidas sobre a estrutura ou sobre o comportamento de um meio físico. É realizada com base em dois componentes básicos: equações para representar o escoamento, e equações de transporte de massa, que retratam a variação da concentração da variável de qualidade de água. Nesse contexto, o conhecimento da capacidade de autodepuração do corpo receptor, assim como do processo de sedimentação e da retirada de massa do poluente no sistema é importante para se entender a dinâmica da poluição no ambiente aquático.

Em termos do processo de implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, a simulação da qualidade da água deve ser entendida como uma importante etapa de apoio. Nesse contexto, um modelo matemático de qualidade da água é uma ferramenta metodológica básica, pois permite identificar o comportamento atual da dinâmica de diferentes constituintes no corpo hídrico, bem como avaliar os diferentes impactos em termos de melhoria de qualidade ambiental (Porto *et al.,* 2007).

Diversos pesquisadores desenvolveram ou aperfeiçoaram modelos de simulação da qualidade da água nas últimas décadas, principalmente no que diz respeito às variáveis OD e DBO. O modelo de Streeter-Phelps, datado de 1925, que propõe um decaimento de primeira ordem para a DBO e para o OD, foi a representação pioneira desta combinação de processos. Os modelos mais recentes, entre eles o QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e o QUAL2K (Chapra *et al*., 2007), possibilitam a simulação de mais variáveis, com detalhamento dos processos físicos, químicos e biológicos que interagem no corpo hídrico.

Contudo, a utilização tanto de modelos mais complexos, como demasiadamente simplificados, requer cuidados e muita fundamentação teórica. Nos últimos anos, pouco tem se dedicado a um estudo mais aprofundado, e pode-se estar desprezando considerações importantes dos processos que estão sendo simulados em virtude de simplificações ou uso inadequado de determinados modelos matemáticos.

Na modelagem da qualidade da água como uma ferramenta para gestão de recursos hídricos, por exemplo, usualmente simulada entre a relação OD e BDO (Bäumle, 2005; Palmieri, 2006; Knapik, 2006, Porto *et al.*, 2007), a inserção de contribuições de nitrogênio, fósforo e algas pode influenciar na tomada de decisões, principalmente quando da implementação de metas progressivas de melhoria da qualidade de água, que requerem um bom diagnóstico da condição atual. Contudo, estudos que abordem tais aspectos não estão devidamente relatados na literatura nacional. Segundo Chapra (1997), limitar-se a estudar o problema da forma tradicional é como enxergar apenas o que

se pode alcançar e considerar que somente essa parcela é significativa. Em gestão de recursos hídricos essa forma de visão merece ser reavaliada.

Neste artigo é realizada uma análise crítica da modelagem da qualidade da água do rio Iguaçu na Região Metropolitana de Curitiba, através da abordagem conceitual dos modelos QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.,* 2007). Ênfase é dada, neste estudo de caso, às diferenças conceituais entre os dois modelos, principalmente em relação às equações para o balanço de massa na simulação da concentração de oxigênio dissolvido, nitrogênio, fósforo e matéria orgânica.

2. MODELOS COMPUTACIONAIS DE QUALIDADE DE ÁGUA: QUAL2E E QUAL2K

Modelos matemáticos de qualidade da água são aproximações da realidade física, química e biológica inerentes aos processos de transporte de massa em corpos hídricos. Esta peculiaridade incentiva o estabelecimento de estratégias de representação que consideram também a complexa dinâmica de uso e ocupação do solo em uma dada bacia hidrográfica e que representam a matriz de fontes de poluição. Neste item ênfase é dada em demonstrar que 2 modelos populares descritos na literatura, QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al*., 2007) são dois modelos completamente diferentes e que partilham de algumas semelhanças.

2.1 O modelo QUAL2E

O modelo de qualidade de água QUAL2E é um modelo de simulação da qualidade da água desenvolvido e aperfeiçoado pela USEPA (Brown e Barnwell, 1987). O QUAL2E é um modelo unidimensional de estado permanente e não uniforme, baseado na solução de equações diferenciais de advecção-dispersão, em todos os seus termos, por um esquema implícito de diferenças finitas, aplicável a rios dendríticos e de boa mistura. Simula a concentração de oxigênio dissolvido associado a outras variáveis de qualidade de água (DBO, temperatura, clorofila-a, nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal, nitrito, nitrato, fósforo orgânico, fósforo dissolvido, coliformes, um constituinte não-conservativo e três constituintes conservativos).

O QUAL2E possui uma interface gráfica que permite ao usuário entrar com diferentes valores aos coeficientes envolvidos no balanço de massa dos constituintes, bem como dados climatológicos, geográficos, fatores de correção de temperatura, entre outros. Esse modelo pode ser utilizado como uma ferramenta para caracterizar a qualidade da água de uma bacia hidrográfica para vários parâmetros simultaneamente, tanto para o rio principal, como para seus tributários. Dessa maneira, ser empregado na elaboração dos planos de bacia, bem como na implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos previstos pela Lei 9.433/97.

A discretização espacial de uma bacia é realizada com a segmentação do rio em trechos, ou tramos, sendo estes subdivididos em elementos computacionais. Os tramos podem ter tamanhos (quilometragem) variados, de acordo com as características da bacia. O critério para a divisão dos tramos é feito agrupando-se trechos com características hidráulicas semelhantes. Cada tramo pode ser segmentado de 1 a até 20 elementos computacionais (volumes de controle), todos com a mesma extensão. O modelo QUAL2E permite a incorporação de descargas pontuais, tributários, captações, incrementos de vazão e poluentes relacionados às fontes difusas. Hidraulicamente, limita-se à simulação de períodos de tempo em que tanto a vazão ao longo do curso principal, quanto às entradas e retiradas sejam essencialmente constantes.

A modelagem é realizada com base em dois componentes básicos: equações para representar o escoamento, e equações de transporte de massa, que retratam a variação da concentração da variável de qualidade de água. Na Figura 1 está representada a discretização espacial em que o modelo se baseia, com a segmentação do canal nos elementos computacionais (sistema bem misturado).

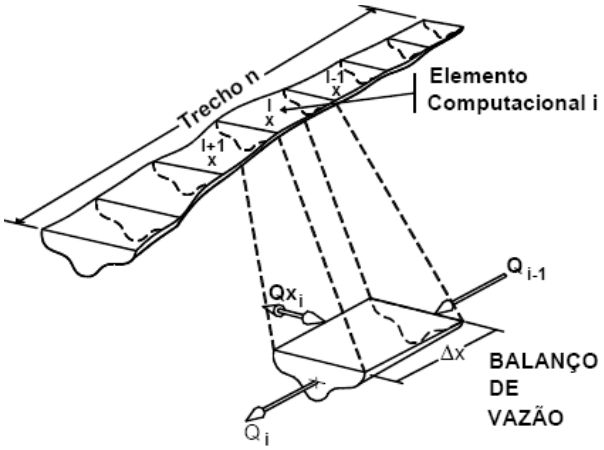

Figura 1 - Representação esquemática de um trecho de rio.
Fonte: Adaptado de Brown e Barnwell (1987)

O modelo QUAL2E utiliza dois mecanismos para a parte de transporte dos poluentes: advecção e dispersão. De acordo com Brown e Barnwell (1987), a equação de transporte unidimensional é resolvida com todos os seus termos por um esquema implícito de diferenças finitas. Esta solução utiliza condição de contorno constante, praticamente desprezando as variações temporais das concentrações. A equação de transporte é utilizada para cada variável simulada, de acordo com os termos internos e externos que interagem na mesma, em função da contribuição lateral, retirada de fluxo e reações químicas internas do modelo.

Para o balanço hídrico ser estabelecido, faz-se necessária a determinação das características hidráulicas para cada elemento computacional. Essas características são a velocidade do

escoamento, a profundidade e a área da seção transversal. No modelo, há duas maneiras para determinação das características hidráulicas: através de coeficientes de descarga, ou pela equação de Manning (Chapra, 1997).

No método dos coeficientes de descarga, são utilizadas equações que relacionam, através de coeficientes da seção transversal de cada trecho, a velocidade média e profundidade com vazão. O cálculo a partir da equação de Manning relaciona as características hidráulicas do canal (área da seção transversal, raio hidráulico, declividade longitudinal) com a vazão através de um coeficiente de rugosidade do canal (coeficiente de Manning). O modelo faz ainda a suposição de canal trapezoidal para o cálculo da área da seção transversal. Logo, tanto a área da seção transversal, como o raio hidráulico, podem ser expressos como função da profundidade. Na escolha desse sistema de cálculo, em que a vazão e os dados hidráulicos, como largura do fundo, declividades dos taludes e declividade longitudinal são fornecidos pelo usuário, velocidade do escoamento é resolvida para a profundidade de forma numérica (equação não linear).

O modelo possui determinadas limitações, como número máximo de tramos, número de fontes pontuais, número de elementos de cabeceira e de junção, que diferem de acordo com as diferentes versões do modelo. O método numérico utilizado pelo modelo QUAL2E é o de diferenças finitas regressivo, estruturado em um programa principal e 51 sub-rotinas, cuja linguagem de programação é ANSI FORTRAN 77 (Brown e Barnwell, 1987).

2.2 O modelo QUAL2K

O QUAL2K, assim como o modelo QUAL2E, é um modelo de simulação da qualidade da água unidimensional, de regime permanente e não uniforme, podendo ser utilizado em rios e tributários. O QUAL2K é implementado em planilhas de trabalho do programa *Excel*, utilizando como macrolinguagem o *Visual Basic* (Chapra et al., 2007).

Em relação a discretização espacial, o modelo QUAL2K difere do modelo QUAL2E ao permitir que o sistema hídrico seja segmentado em trechos com elementos de tamanhos diferentes, além de permitir em cada elementos inserir múltiplas cargas e abstrações. No entanto, para um mesmo trecho de rio simulado, as características hidráulicas são consideradas constantes, como por exemplo a inclinação dos taludes, largura de fundo e declividade, assim como no modelo QUAL2E.

A vazão para cada elemento computacional é calculada assim como no modelo QUAL2E, através da utilização de curva-chave (coeficientes de descarga) ou através da equação de Manning. Adicionalmente, no modelo QUAL2K a vazão pode ser calculada a partir da simulação de represas, em que altura e largura da represa são necessários como dados de entrada.

O modelo QUAl2K, diferentemente do modelo QUAL2E, considera a redução de compostos em nível zero de oxigênio, ou seja, condições anóxicas. Na simulação de algas, inclui a

segmentação entre fitoplancton e algas fixas ao fundo do canal, bem como a interferência da presença de algas, detritos e sólidos inorgânicos na inibição da luz. Alcalinidade e carbono inorgânico total são simulados como variáveis de estado, assim como patógenos. Também permite que os coeficientes cinéticos, utilizados na calibração dos processos, sejam especificados ou com um único valor para todos os trechos e/ou para determinados trechos em particular. Ainda, o modelo QUAL2K aborda conceitos diferentes na simulação da matéria orgânica, quando comparado com o modelo QUAL2E, com caracterização das frações dissolvidas e particuladas da DBO.

3. DIFERENÇAS CONCEITUAIS ENTRE OS MODELOS QUAL2E E QUAL2K

Aspectos conceituais relacionados aos mecanismos de transporte físico (advecção e dispersão longitudinal) estão intrinsicamente relacionados aos mecanismos de transporte de massa em corpos hídricos. Neste item ênfase é dada para as diferenças conceituais existentes entre os softwares Qual2E e Qual2K.

3.1 Variáveis simuladas e balanço de massa – QUAL2E

O balanço de massa que o modelo QUAL2E utiliza para calcular as concentrações das variáveis de qualidade de água simuladas é apresentado na Equação 1 e na Figura 2:

$$\underbrace{V\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{Acumulação}} = \underbrace{\underbrace{\frac{\partial\left(A_x D_L \frac{\partial C}{\partial x}\right)}{\partial x}dx}_{\text{Dispersão}} - \underbrace{\frac{\partial\left(A_x \overline{U} C\right)}{\partial x}dx}_{\text{Advecção}}}_{\text{Transporte}} + \underbrace{V\frac{dC}{dt}}_{\text{Cinética}} \pm \underbrace{F_e}_{\text{Fontes externas}} \quad (1)$$

em que V refere-se ao volume; c é a concentração da variável; A_x é a área da seção transversal de cada elemento computacional; D_L é o coeficiente de dispersão longitudinal; $\overline{U}$ é a velocidade média do escoamento; F_c refere-se às fontes externas (entradas ou retiradas).

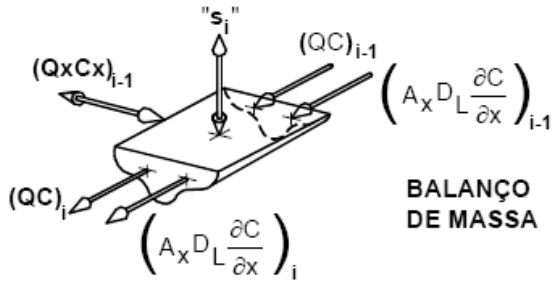

Figura 2 - Representação esquemática do balanço de massa do modelo QUAL2E.

Fonte: Adaptado de Brown e Barnwell (1987)

O termo dC/dt define os processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem em um rio, representando as transformações dos parâmetros independente dos processos de advecção e dispersão. A maior parte dos parâmetros são simulados com um decaimento de primeira ordem. OD, nitrato e fósforo inorgânico são representados com maiores detalhes, incluindo um módulo de interação com algas. O modelo QUAL2E também inclui a interação com sedimentos, mas somente como um sumidouro para as variáveis simuladas, como por exemplo na taxa de sedimentação para DBO (K_3), ou como fonte no caso da demanda de oxigênio pelo sedimento (K_4), conforme apresentado no esquema da Figura 3.

Na Figura 3, os coeficientes *F, K, α, β, σ, ρ* e *μ* representam as taxas nas quais ocorrem as reações de estabilização e sedimentação da matéria orgânica, conversão do nitrogênio de sua forma orgânica para as formas inorgânicas (amoniacal, nitrito e nitrato), decaimento do fósforo, reaeração atmosférica e respiração/ fotossíntese de algas.

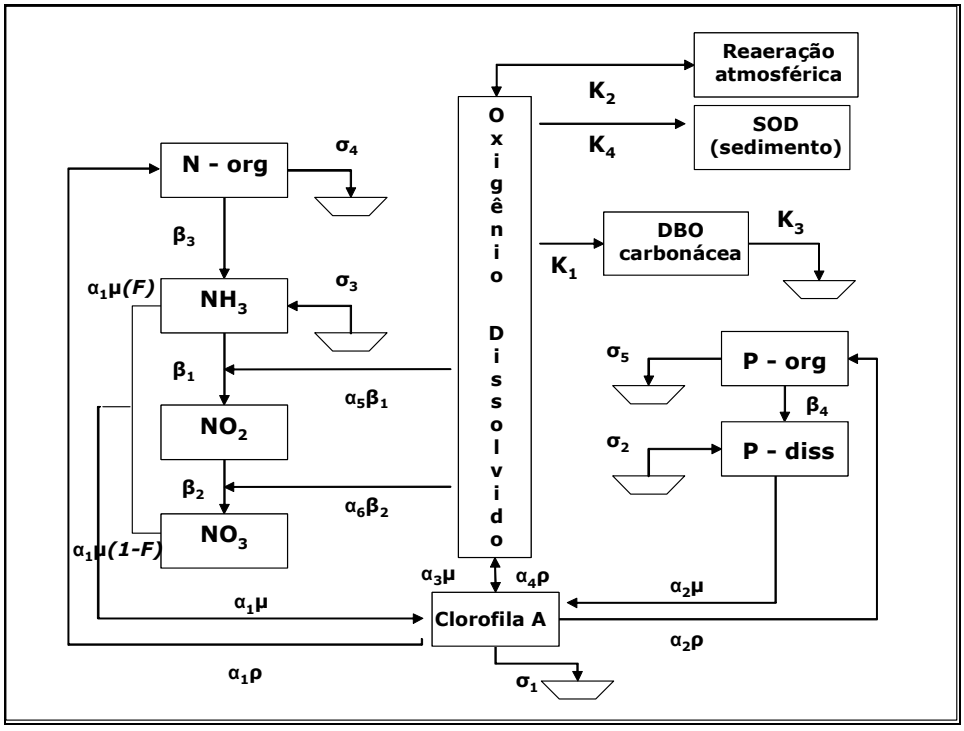

Figura 3: Esquema das inter-relações entre o ciclo do nitrogênio, fósforo, clorofila-a a matéria orgânica na concentração de oxigênio dissolvido do modelo QUAL2E.
Fonte: Adaptado de Brown e Barnwell (1987).

No modelo QUAL2E são simuladas as etapas de transformação do nitrogênio orgânico para amônia, de amônia para nitrito, e deste para nitrato. A diferença entre o QUAL2E e outros modelos antecessores é a inclusão do nitrogênio orgânico como variável de estado, consideração da sedimentação de nitrogênio orgânico e uma taxa de aporte de nitrogênio devido à presença de algas. A abordagem para a modelagem no nitrogênio pelo modelo QUAL2E fundamenta-se em dois

processos: conversão e redução. No processo de conversão não há perda do conteúdo total de nitrogênio, apenas suas formas são alteradas devido à oxidação/ redução. O processo de remoção/ redução da concentração de nitrogênio pode ocorrer caso alguma forma desse constituinte for assimilado por algas, por exemplo, ou perda por sedimentação da fração orgânica (Chapra, 1997). A simulação da concentração de nitrogênio orgânico pelo modelo QUAL2E envolve as etapas de amonificação, sedimentação e contribuição da biomassa de algas. A abordagem utilizada pelo modelo QUAL2E para a simulação do nitrogênio amoniacal envolve as etapas de amonificação, nitrificação, liberação de amônia pelo sedimento de fundo e incorporação da amônia ou nitrato pela biomassa de organismos aquáticos (algas). Em modelos menos complexos, essa última etapa não é levada em consideração devido à dificuldade de quantificação dos coeficientes (Von Sperling, 2007). Nitrogênio na forma de nitrato é produzido através da oxidação da amônia no primeiro estágio do processo de nitrificação, e removido através da oxidação a nitrato. A remoção do nitrato da coluna d'água se dá através da incorporação pela biomassa de algas.

A modelagem do fósforo é realizada através das transformações das frações orgânica e dissolvida. Para a cinética do fósforo orgânico, o modelo QUAL2E considera a liberação pela respiração dos organismos aquáticos (algas), o decaimento a fósforo dissolvido e a sedimentação. Na fração dissolvida ou inorgânica, estão inclusos os processos de decaimento do fósforo orgânico, a liberação pelo sedimento de fundo e o consumo relativo ao crescimento de algas.

Na modelagem de algas, o modelo QUAL2E calcula a produção e o consumo de oxigênio pela fotossíntese e respiração por meio da concentração de algas em termos de clorofila-a. Os processos simulados consistem no crescimento, respiração e sedimentação. A taxa de respiração, inclui três processos: a respiração endógena das algas, a conversão do fósforo da biomassa para fósforo orgânico, e a conversão do nitrogênio presente na biomassa para nitrogênio orgânico. A taxa de crescimento de algas depende da disponibilidade local de nutrientes (nitrogênio e fósforo) e da intensidade de luz (Brown e Barnwell, 1987).

A modelagem da DBO envolve processos biológicos e físicos de remoção da matéria orgânica da coluna d'água. A desoxigenação carbonácea, representada no modelo QUAL2E pelo coeficiente K_1, é um processo de degradação biológica, e que envolve o consumo de oxigênio presente no ambiente aquático. Já a remoção física da matéria orgânica se dá através do processo de sedimentação, representado no modelo QUAL2E pelo coeficiente K_3.

A abordagem para a modelagem do oxigênio dissolvido realizada pelo modelo QUAL2E incorpora os efeitos dos processos relacionados a DBO, algas, nitrogênio e fósforo. A reaeração atmosférica (K_2), assim como a demanda de oxigênio pelo sedimento (K_4) também estão relacionados à modelagem da concentração do oxigênio dissolvido.

3.2 Variáveis simuladas e balanço de massa – QUAL2K

Adicionalmente às variáveis simuladas no modelo QUAL2E (OD, nitrogênio orgânico, amoniacal e nitrato, fósforo orgânico e dissolvido, e fitoplancton), modelo QUAL2K considera os seguintes parâmetros como variáveis de estado: condutividade, sólidos inorgânicos suspensos, matéria orgânica particulada (detritos), patógenos, alcalinidade, carbono inorgânico total, e biomassa, nitrogênio e fósforo de algas de fundo.

No QUAL2K, exceto para as variáveis relacionadas às algas de fundo, o balanço de massa de cada constituinte do modelo é realizado através da equação 2, utilizando, assim como no QUAL2E, os elementos computacionais como volumes de controle.

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{Q_{i-1}}{V_i} c_{i-1} - \frac{Q_i}{V_i} c_i - \frac{Q_{out,i}}{V_i} c_i + \frac{E'_{i-1}}{V_i}(c_{i-1} - c_i) + \frac{E'_i}{V_i}(c_{i+1} - c_i) + \frac{W_i}{V_i} + S_i \qquad (2)$$

em que: W_i representa a carga externa do elemento i (g/d ou mg/d); S_i representa as fontes externas e/ou sumidouros de constituintes devido aos mecanismos de transferência de massa e reações (g/m³/d ou mg/ m³/d).

Os processos cinéticos considerados no modelo QUAL2K envolvem dissolução, hidrólise, oxidação, nitrificação, desnitrificação, fotossíntese, morte e respiração. No QUAL2E a desnitrificação não faz parte do modelo cinético. Ainda, no modelo QUAL2K o equacionamento do fluxo de massa inclui, além dos processos de advecção e dispersão, os processos de reaeração, sedimentação e demanda de oxigênio pelo sedimento, assim como no QUAL2E, mas também o fluxo do sedimento e fluxo de carbono inorgânico no sedimento, conforme esquema apresentado na Figuras 4 e 5. Na Figura 5, c_T representa a concentração de carbono orgânico total, c_S é a concentração de DBO lenta, c_f é a concentração de DBO rápida, a_p é representa o fitoplâncton, a_b representa algas de fundo, m_o e m_i é a concentração de matéria particulada orgânica e inorgânica, respectivamente, e O representa a concentração de oxigênio dissolvido.

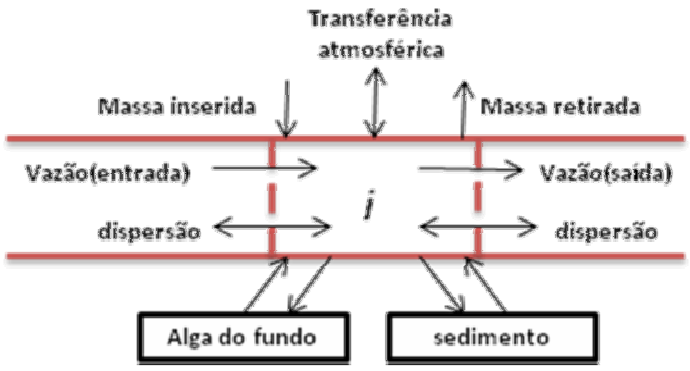

Figura 4: Representação esquemática do balanço de massa do modelo QUAL2K.
Fonte: Adaptado de Chapra *et al*. (2007).

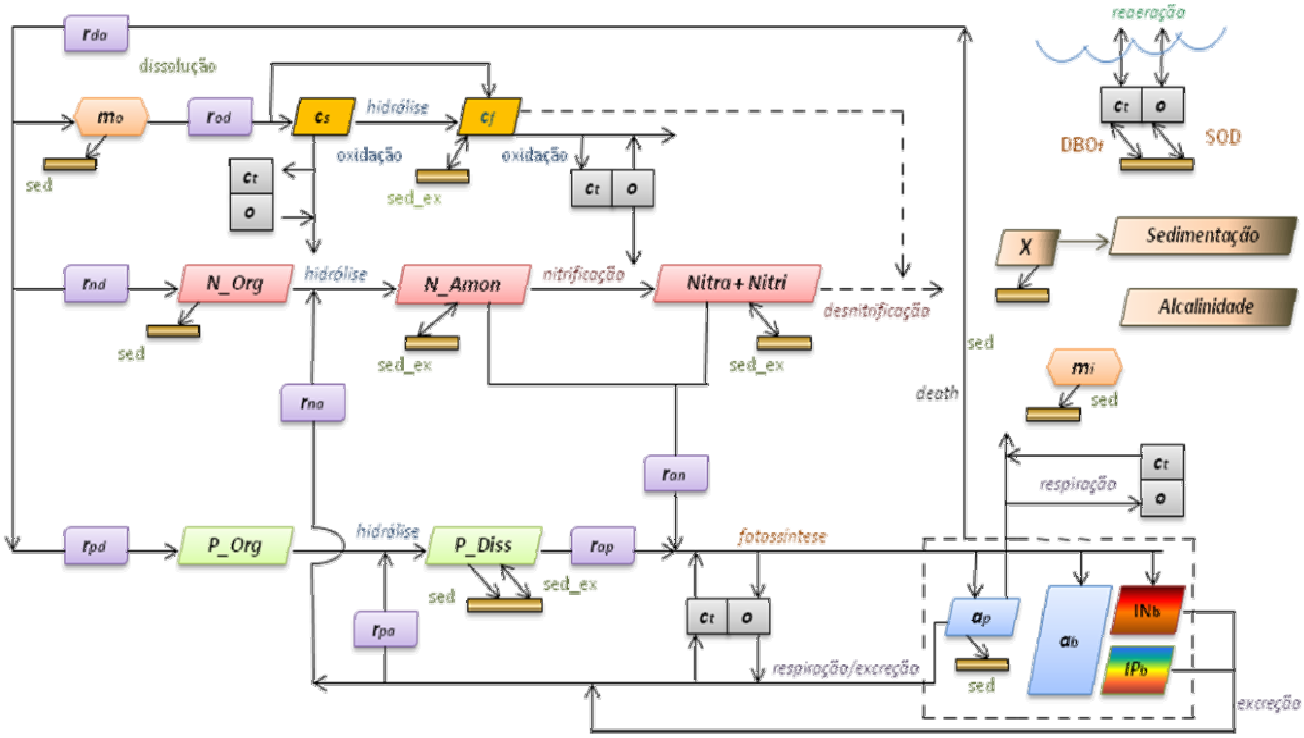

Figura 5: Modelo cinético e processo de transferência de massa do modelo QUAL2K.
Fonte: Adaptado de Chapra *et al*. (2007).

Adicionalmente às variáveis de estado apresentadas, o modelo QUAL2K traz uma abordagem inovadora com relação a variáveis compostas, fundamentadas em 6 principais grupos de constituintes: carbono orgânico total, nitrogênio total, nitrogênio Kjeldahl total, fósforo total, sólidos suspensos totais e demanda última de oxigênio carbonácea. A cinética para carbono orgânico total, por exemplo, envolve as parcelas lenta e rápida da DBO, relacionadas com a razão de oxigênio consumido e carbono orgânico oxidado a dióxido de carbono, a concentração de fitoplâncton e concentração de detritos. Nitrogênio total considera as frações de nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal, nitrato e a produção por fitoplâncton, assim como fósforo total engloba as frações orgânica e dissolvida, bem como a produção por fitoplâncton. Nitrogênio Kjeldahl Total difere de nitrogênio total por não considerar a concentração de nitrato. A variável referente a sólidos suspensos totais considera as frações orgânica e inorgânica, com contribuições de fitoplâncton, relacionado à razão entre a proporção de clorofila-a presente (peso seco), concentração de detritos e de sólidos inorgânicos suspensos.

Na cinética do fósforo, a fração orgânica incorpora aportes devido a morte de plantas, e perdas através do decaimento a fósforo inorgânico e sedimentação. A diferença entre os modelos QUAL2E e QUAL2K está na segmentação da simulação de algas, com diferenciação entre o fitoplâncton (em termos de clorofila-a) e algas de fundo. Ainda, na simulação do fósforo inorgânico, o modelo QUAL2K incorpora a retirada de fósforo inorgânico da coluna d'água através

da sedimentação (casos em que o fósforo inorgânico encontra-se adsorvido em materiais particulados).

Na simulação do "ciclo" do nitrogênio, o modelo QUAL2K possui uma formulação diferente do modelo QUAL2E quando da simulação do processo de nitrificação. A primeira fase da nitrificação, que consiste na oxidação da amônia a nitrito não é considerada pelo modelo QUAL2K, que simplifica o processo considerando como dados de entrada conjunto as concentrações de nitrito e de nitrato na simulação de nitrogênio na forma de nitrato. Ainda, o modelo QUAL2K simula tanto a concentração de nitrogênio amoniacal relacionado aos processos de decaimento de nitrogênio orgânico, respiração/excreção de fitoplâncton e algas de fundo, nitrificação e fotossíntese, bem como os processos químicos entre as formas ionizadas e não ionizadas, considerando que, em ambiente aquático, e dependendo do pH, a concentração total de amônia pode ser encontrada sob duas diferentes formas: íon amônio (NH_4^+), e amônia não ionizada (NH_3).

Com relação à simulação da demanda última de oxigênio carbonácea (CDBOu), o modelo QUAL2K considera de maneira distinta a **fração dissolvida da matéria orgânica**, no caso modelada por duas variáveis, DBO lenta e DBO rápida, e a **fração particulada da matéria orgânica**, simuladas através das contribuições de fitoplâncton e de detritos.

Cabe destacar que, exceto para a modelagem da DBO, existe uma relação entre as variáveis de estado simuladas no modelo QUAL2K e os parâmetros de qualidade de água monitorados em campo, como por exemplo OD, condutividade, nitrogênio, pH, etc. No caso específico da modelagem da DBO, a segmentação ou o maior detalhamento do modelo QUAL2K em relação a outros modelos de simulação de qualidade de água, teve como motivação as dificuldades e particularidades envolvidas na determinação em laboratório da DBO, demonstrando desta maneira, um forte enfoque químico do modelo QUAL2K. Ainda, na formulação do modelo QUAL2K eciste a uma diferenciação entre a DBO carbonácea lenta e rápida, relacionada com a estabilidade da matéria orgânica, uma vez que a taxa de desoxigenação depende tanto das características da matéria orgânica, bem como da temperatura e da presença de sustâncias inibidoras (Von Sperling, 2007). Efluentes domésticos e carbono de fonte autóctone, por exemplo, são considerados DBO rápida, visto serem mais facilmente estabilizados. Efluentes industriais ou carbono de fonte alóctone pedogênica (ácidos fúlvicos), possuem compostos que são mais dificilmente estabilizados, e são, desta forma, considerados como DBO lenta pelo modelo QUAL2K (Chapra *et al*., 2007).

4. ESTUDO DE CASO DA BACIA DO ALTO IGUAÇU

O estudo de caso desenvolveu-se a partir da dinâmica da realidade de uso e ocupação do solo na bacia do Alto Iguaçu, na Região Metropolitana de Curitiba. Foram estudados 86 km do rio

Iguaçu, desde a sua nascente na junção dos rios Iraí e Palmital, até a foz do rio Verde. A bacia tem com uma área de drenagem de cerca de 3.000 km^2 e a pesquisa engloba 26 sub-bacias utilizadas para a caracterização da Bacia do Alto Iguaçu. Os principais efluentes das respectivas bacias são: Atuba, Belém, Cambuí, Cotia, Despique, Divisa, Faxinal, Iraí, Iraizinho, Isabel Alves, Itaqui, Mascate, Maurício, Miringuava, Miringuava Mirim, Padilha, Palmital, Passaúna, Pequeno, Pianduva, Piraquara, Ressaca, Rio das Onças e Verde.

A população pertencente à bacia é de aproximadamente 3 milhões de habitantes distribuídos em 14 municípios. A bacia em estudo concentra cerca de 25% da população total e 30% da população urbana do estado, com baixos índices de atendimento e tratamento de esgoto. Por ser uma região altamente urbanizada, vem passando por um processo de ocupação irregular de várzeas e áreas de mananciais, em especial na margem direita do Rio Iguaçu. Como conseqüência, nos últimos anos vem sndo observados problemas acerca dos sistemas de abastecimento de água, do tratamento de esgotos sanitários e dos sistemas de drenagem urbana, os quais não acompanham o crescimento das cidades, afetando negativamente o meio ambiente e a qualidade de vida das pessoas. Em relação aos aspectos físicos, é uma região predominantemente plana, apresentando uma grande extensão de várzeas naturais em ambas as margens, configurando planícies de inundação bem definidas. Com relação à atividade industrial, a maior parte das indústrias está localizada nas bacias dos rios Barigüi, Belém, Padilha, Passaúna e Atuba. Em termos de proporcionalidade, a contribuição industrial de dois meses equivale ao esgoto doméstico bruto de um dia da população da bacia do Alto Iguaçu, cabendo à população grande parcela da poluição existente (SUDERHSA, 2000).

Para a implementação dos modelos da qualidade da água (QUAL2E e QUAL2K) foi necessário compilar um banco de dados para a bacia em estudo, com detalhamento de 26 sub-bacias existentes na Bacia do Alto Iguaçu, englobando 14 municípios, Curitiba e Região Metropolitana. Área de cada bacia, extensão dos tributários, características hidráulicas, uso e taxa de ocupação do solo, atividade industrial, dados demográficos e sistema de coleta e tratamento de esgoto formam a malha principal do banco de dados, organizados na forma de matrizes de fontes de poluição. Dos estudos utilizados como fonte desses dados, fazem parte, principalmente, o Plano de Despoluição Hídrica da Bacia do Alto Iguaçu (SUDERHSA, 2000), o Projeto Alto Iguaçu (Fernandes *et al.*, 2005), e o Projeto Bacias Críticas (Porto *et al.*, 2007).

Assim como simulado por Porto *et al*. (2007) e Knapik (2009), o enfoque principal deste estudo é o trecho dos rios Iraí e Iguaçu, numa extensão de 107 quilômetro, em cujo monitoramento de campo para 7 pontos de coleta foi realizado nos anos de 2005 a 2008. As considerações a respeito do balanço hídrico e da contribuição de cargas orgânicas e de nutrientes foram estimadas a partir das matrizes de fontes de poluição de cada afluente, de acordo com Porto *et al.* (2007).

Os modelos de qualidade da água podem integrar a simulação de vários constituintes, com possibilidade de entrada de fontes difusas e pontuais. Assim, os dados foram organizados de maneira a atender as especificações dos modelos analisados, QUAL2E e QUAL2K, bem como as limitações estruturais existentes. A organização dos dados foi feita através de matrizes de fontes de poluição, desenvolvidas no programa Excel, e adequadas ao formato de entrada de dados dos modelos.

A discretização espacial de cada bacia tem como unidade básica a divisão do trecho do rio simulado em elementos de 1 km cada, seguindo, portanto, a segmentação utilizada no modelo QUAL2E. Nesses elementos computacionais que são simulados o balanço da cada variável. Cada conjunto de quilômetro engloba uma área de drenagem específica, ou área incremental. Os dados hidráulicos (largura de base, declividade dos taludes e longitudinal), taxa de uso e ocupação do solo e dados demográficos e sistema de esgotamento sanitário foram discretizados para cada área incremental, denominadas de tramos quando da implementação dos modelos. Nos elementos computacionais foram discretizados a localização de grandes usuários, como indústrias (captação e lançamento), ETEs e ETAs, além do remanescente de efluente doméstico (esgoto sem tratamento) e de tributários.

No presente estudo, a vazão foi calcula através da equação de Manning. As vazões incrementais foram calculadas de acordo com as respectivas áreas de drenagem, com rotina de cálculo implementada nas matrizes de fontes de poluição, e utilização de um coeficiente único de vazão específica, calculado para diferentes perfis de permanência, determinado no Projeto Bacias Críticas (Porto *et al*., 2007). Para o caso estudado, foi simulada a vazão observada em campo, através do ajuste da vazão de 95% de permanência ao perfil mediano das coletas realizadas entre 2005 e 2008.

Para a entrada de dados de qualidade no modelo, foram utilizadas matrizes de fontes de poluição (Cavichiolo *et al*., 2005), baseadas no Plano de Despoluição Hídrica da Bacia do Alto Iguaçu (SUDERHSA, 2000), atualizadas e adequadas às simplificações estruturais existentes do modelo QUAL2E pelo Projeto Bacias Críticas (Porto *et al*., 2007). As matrizes de fontes de poluição caracterizam-se por estarem divididas em quatro grandes grupos de dados. O primeiro corresponde aos dados característicos da bacia em análise (código da bacia, extensão do rio, áreas incrementais), o segundo corresponde às vazões (dados hidráulicos), o terceiro às cargas (difusas e pontuais) e o quarto aos dados de entrada no modelo de qualidade de água (concentração de DBO, nitrogênio, fósforo e OD).

A matriz foi construída dividindo-se cada bacia analisada em tramos, correspondentes às áreas de contribuição existentes em cada uma das 26 sub-bacias consideradas, inclusive para as áreas de drenagem relativas à bacia dos rios Iraí e Iguaçu, trecho este simulado no presente estudo. Nas

matrizes dos afluentes, também foi estimado o balanço hídrico e a contribuição de cargas orgânicas e de nutrientes. Na simulação do trecho de 107 km dos rios Iraí e Iguaçu a entrada dos dados dos afluentes foram considerados como fontes pontuais.

As considerações com relação às cargas foram feitas através da divisão destas em domésticas, industriais e difusas, cada qual identificando sua origem, vazão do efluente, carga de DBO, nitrogênio e fósforo, e eficiência de remoção (quando existente). Em relação à carga difusa, três categorias de uso de solo foram consideradas: urbano, agrícola e floresta. Para cada sub-bacia, as matrizes foram adequadas quanto aos aportes de matéria orgânica, em termos de DBO, e de nutrientes, como nitrogênio (orgânico, amoniacal, nitrito e nitrato) e fósforo (orgânico e dissolvido), de acordo com o tipo de uso e taxa de ocupação do solo. A contribuição da matéria orgânica, em termos de concentração de DBO, foi estimada segundo Porto *et al.* (2007). Para as contribuições de nitrogênio e de fósforo, foram utilizados valores médios, indicados por Chapra (1997) e Von Sperling (2007).

A carga pontual foi estimada tanto para captações e efluentes industriais, como para efluentes provenientes de esgoto doméstico. No caso do esgoto doméstico, foi utilizada a metodologia apresentada por Von Sperling (2006), com cálculo da vazão do efluente gerada pela população de cada área incremental das bacias em estudo, e das cargas orgânicas e de nutrientes. Foram consideradas o montante de população com efluente coletado e tratado, e também no caso de coleta sem tratamento. A parcela referente ao efluente tratado corresponde às estações de tratamento de esgoto localizadas nas bacias em estudo. Em relação à parcela sem tratamento, a vazão efluente e a carga de poluente foi linearmente distribuída ao longo dos respectivos tramos (áreas).

A contribuição de esgoto doméstico com coleta e tratamento foi estimada a partir do cadastro de grandes usuários do Plano de Despoluição Hídrica (SUDERHSA, 2000), e atualizadas pelo Projeto Bacias Críticas (Porto *et al*., 2007). As estações de tratamento de esgoto foram consideradas como fontes pontuais, com entrada de dados de vazão de efluente, concentração de DBO remanescente, e concentração das frações remanescentes de nitrogênio e de fósforo. A eficiência do tratamento de remoção de matéria orgânica foi estimada de acordo com o cadastro de usuários; já para as frações de fósforo foi considerada uma remoção de 50%, e de 20% para nitrogênio amoniacal e orgânico (Von Sperling, 2007). A concentração de oxigênio dissolvido foi considerada nula para esses lançamentos.

A carga de origem industrial também foi estimada a partir do cadastro de grandes usuários do Plano de Despoluição Hídrica (SUDERHSA, 2000), com relação à contribuição de matéria orgânica. A localização das indústrias foi realizada para cada trecho simulado, tanto para captação, como para o lançamento do efluente. No caso de lançamento, são implementados os valores de

vazão e concentração de DBO remanescente. A concentração de oxigênio dissolvido foi considerada nula para esses lançamentos.

Para a calibração dos modelos utilizados, foram considerados os resultados de Knapik (2009), que utilizou o modelo QUAL2E na modelagem de DBO, OD, nitrogênio e fósforo e calibração de modelos de qualidade de água para o mesmo trecho do rio Iguaçu analisado no presente estudo. A calibração consistiu no ajuste dos coeficientes referentes ao balanço de DBO, relacionada ao processos de desoxigenação (K_1), reaeração (K_2), sedimentação (K_3) e demanda de oxigênio do sedimento (K_4); ao balanço de nitrogênio pelos coeficientes de oxidação da amônia e nitrito (β_1 e β_2), decaimento de nitrogênio orgânico (β_3), liberação de nitrogênio amoniacal pela fauna bentônica (σ_3), sedimentação de nitrogênio orgânico (σ_4) e taxa de consumo de oxigênio pela oxidação da amônia e de nitrito (α_5 e α_6); e o balanço de fósforo pelos coeficientes de decaimento e sedimentação de fósforo orgânico (β_4 e σ_5) e liberação de fósforo inorgânico pela fauna bentônica (σ_2). A metodologia de calibração utilizada por Knapik (2009), a exemplo do que foi realizado por Knapik (2006), Porto *et al.* (2007), e Kondageski (2008), baseou-se em tentativas de ajuste das curvas simuladas de vazão, concentração de OD, DBO, nitrogênio (orgânico, amoniacal, nitrito e nitrato) e fósforo (orgânico e dissolvido) num intervalo de 25 a 75% de permanência dos respectivos dados coletados em campo, com valor ótimo próximo à mediana.

5. COMPARAÇÃO ENTRE AS SIMULAÇÕES

As simulações foram realizadas para as variáveis nitrogênio (orgânico, amoniacal e nitrato), fósforo total, oxigênio dissolvido e demanda bioquímica de oxigênio, nos modelos QUAL2E e QUAL2K.

Na Figura 6 são apresentados os resultados da simulação da concentração de nitrogênio. Para ambos os modelos, a simulação de nitrogênio orgânico (Figura 6 a), nitrogênio amoniacal (Figura 6 b) e nitrogênio total (Figura 6 d), os resultados foram semelhantes, indicando que para estas variáveis as abordagens dos modelos são iguais. Cumpre salientar que estes resultados são coincidentes porque adotou-se a simplificação da simulação sem a consideração da interação entre algas em ambos os modelos.

No entanto, a simulação do processo de nitrificação é diferente, uma vez que o modelo QUAL2K reproduz as concentrações de nitrito juntamente com as de nitrato, fazendo com que as taxas de reação da oxidação da amônia (primeiro estágio da nitrificação) e do nitrito (segundo estágio) não representem as mesmas condições do modelo QUAL2E. Assim, e conforme pode ser observado na Figura 6 (c), os resultados para concentração de nitrito são diferentes, mesmo que fosse adotada a hipótese de desconsiderar a contribuição de nitrito em ambos os modelos.

A concentração de nitrogênio total (Figura 6 d), para este caso específico, resultou em valores semelhantes pois o único processo de remoção de nitrogênio da coluna d'água foi através da sedimentação do nitrogênio orgânico. A diferença mais significativa, neste caso, está no processo de conversão, com abordagens distintas entre os modelos QUAL2E e QUAL2K.

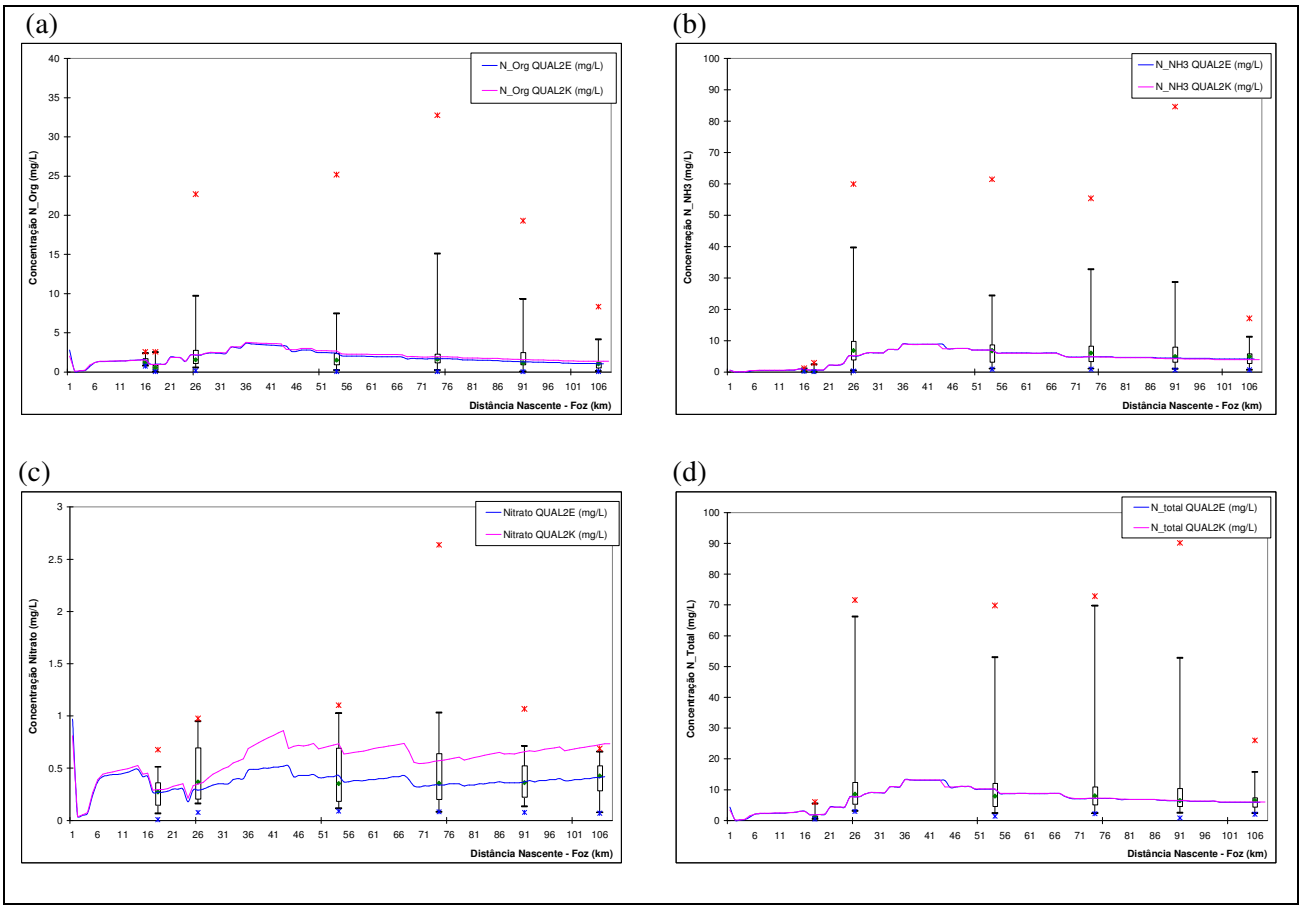

Figura 6: Resultado da simulação da concentração de nitrogênio orgânico (a), nitrogênio amoniacal (b), nitrato (c) e nitrogênio total (d), com os *Box plots* dos dados de monitoramento de 2005 a 2008

Na Figura 7 (a) são apresentadas as curvas de simulação de fósforo total. A simulação foi realizada de maneira simplificada, considerando os processos de sedimentação do fósforo orgânico e decaimento do fósforo orgânico a inorgânico, sem a inclusão da interação com algas, visto que a concentração de clorofila-a no ambiente estudado mostrou-se pouco significativa, conforme apresentado por Knapik (2009). Os resultados dos dois modelos, QUAL2E e QUAL2K, foram semelhantes, uma vez que o modelo cinético, nas condições em que foram simulados, são iguais nos modelos utilizados.

A concentração de oxigênio dissolvido, Figura 7 (b), apresentou diferenças entre os resultados dos modelos utilizados na simulação. O modelo QUAL2K resultou em valores maiores da concentração de OD a partir da seção intermediária do rio Iguaçu. A diferença entre os resultados reflete a diferença no modelo cinético para simulação de OD entre os modelos, uma vez que o modelo QUAL2K considera as duas fases da nitrificação (oxidação da amônia a nitrito, e deste a nitrato) em uma única etapa, bem como simula a demanda de oxigênio pelo sedimento em um módulo específico, e não como um coeficiente do balanço de massa de OD conforme no modelo

QUAL2E. Ao ser simulado, no modelo QUAL2E, o balanço de OD desconsiderando a demanda de oxigênio pelo sedimento (coeficiente K_4), os valores da concentração de OD ficam mais elevados e próximos à simulação pelo modelo QUAL2K, mas ainda com diferenças nos resultados.

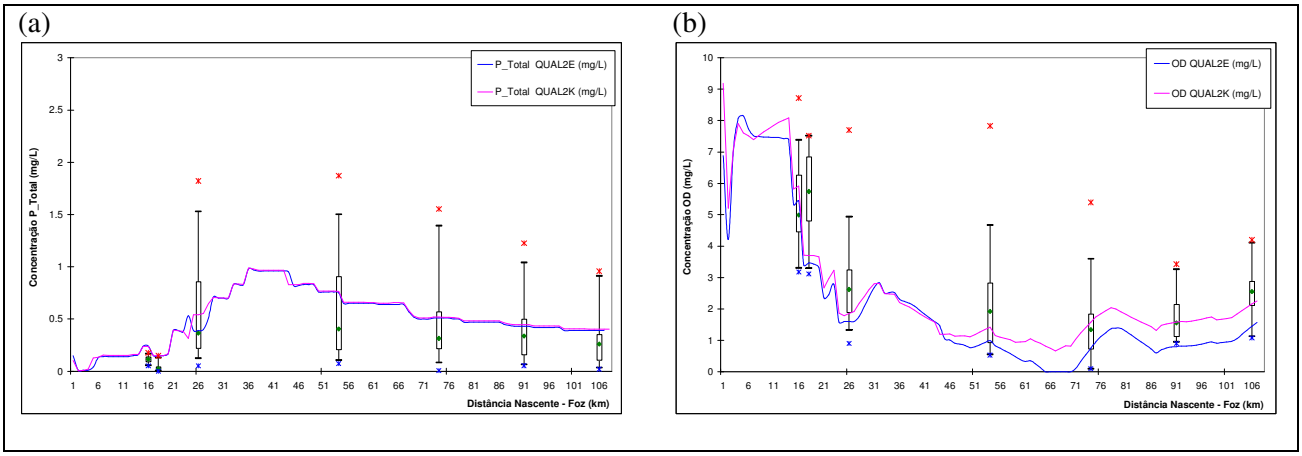

Figura 7: Resultado da simulação da concentração de fósforo total (a) e oxigênio dissolvido (b), com os *Box plots* dos dados de monitoramento de 2005 a 2008.

Na Figura 8 (a) são apresentadas duas curvas de simulação da concentração de DBO para o rio Iguaçu. Na simulação pelo modelo QUAL2E, foi utilizada a combinação dos coeficientes calibrada por Knapik (2009), sendo K_1 igual 0,1 d^{-1} e K_3 igual a 1,2 d^{-1}, incluindo os processos de desoxigenação carbonácea e sedimetação. No modelo QUAL2K, para desoxigenação carbonácea referente à modelagem da DBO rápida, representada pelo coeficiente K_{dc}, também foi utilizado o valor de 0,1 d^{-1}. Conforme apresentado, e levando em consideração que o modelo cinético para simulação da concentração de DBO são distintas nos modelos QUAL2E e QUAL2K, os resultados foram diferentes.

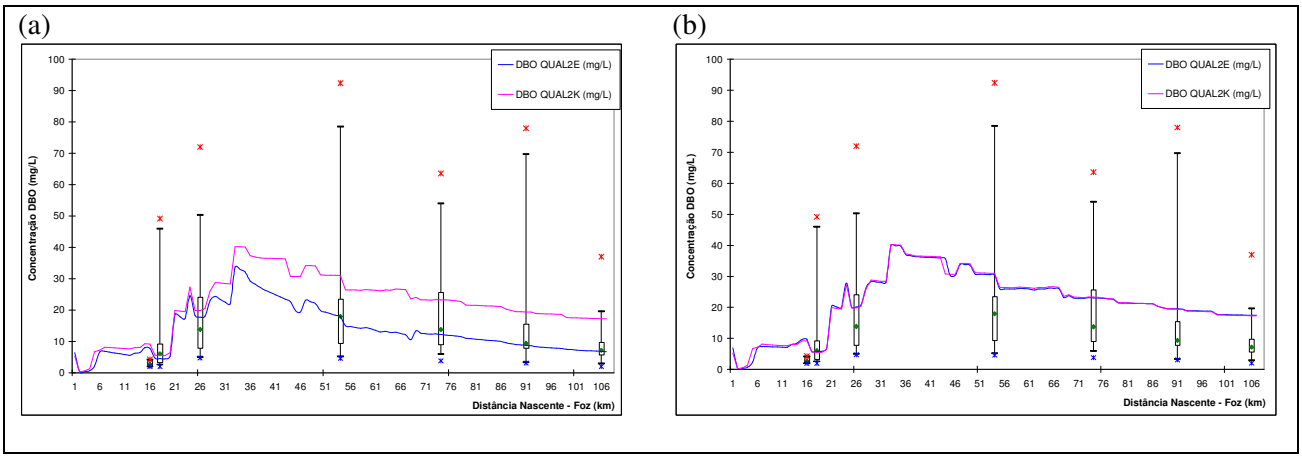

Figura 8: Resultado da simulação da concentração de DBO (a), com consideração de K_1 e K_3 no modelo QUAL2E, e DBO sem a consideração de K_3 no modelo QUAL2E (b).

Já na Figura 8 (b), ambas as curvas, simuladas pelos modelos QUAL2E e QUAL2K, resultaram em perfis iguais da concentração de DBO, no entanto, não compartilham dos mesmos processos. A simulação pelo QUAL2E não incluiu a perda da matéria orgânica da coluna d'água através da sedimentação, representado no modelo pelo coeficiente K_3. Uma vez que a abordagem do modelo QUAL2K já faz a distinção entre matéria orgânica dissolvida e particulada, simulando a retirada pela sedimentação em um módulo distinto de simulação (detritos), restando, portanto, somente a desoxigenação carbonácea como processo de decomposição da matéria orgânica, o modelo cinético equacionado foi o mesmo. No entanto, como o QUAL2K simula DBO dissolvida, os dados de entrada utilizados não são adequados, ou seja, com a abordagem diferente do modelo cinético para a matéria orgânica dos modelos analisados, QUAL2E e QUAL2K, mesmo que se consiga reproduzir, forçadamente, os mesmos valores, as informações contidas no resultado são diferentes.

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

A principal contribuição deste artigo é destacar que os dois modelos computacionais aqui analisados, QUAL2E e QUAL2K, possuem conceitos distintos. Este fato aparentemente passa despercebido quando de uma leitura rápida sobre as peculiaridades de cada modelo, e muitas comparações incoerentes tem sido apresentadas na literatura. No entanto, alerta-se para a necessidade de se considerar, durante o processo de implementação do modelo, uma avaliação crítica da estratégia de estudo para cada parâmetro de Qualidade da Água, e portanto, com impacto significativo sobre a escolha da melhor representação numérica, conforme orientam Chapra *et al.* (2007).

Do ponto de vista das bases técnicas para a implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, entende-se ser esta uma questão relevante, pois tem um impacto significativo sobre as características de monitoramento e por conseguinte, de calibração de parâmetros de qualidade da água destes modelos. Com este enfoque e considerando a experiência de trabalhos anteriores compilados em Porto *et al* (2007), entende-se que o modelo QUAL2E, mesmo com suas limitações, é bastante eficaz para as estratégias requeridas para atividades de gestão de recursos hídricos, em detrimento do modelo QUAL2K, embora com uma interface mais amigável, requer muito mais parâmetros para sua utilização.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPq, através do Edital MCT/CNPq/CT-Hidro nº 40/2006, pela concessão da bolsa de mestrado, do Edital Hidro/GRH 01/2004 da FINEP/CNPq/CT-Hidro, no Projeto Bacias Críticas: Bases Técnicas para a definição de Metas Progressivas para seu Enquadramento e a Integração com os demais Instrumentos de Gestão, e pela concessão da bolsa de iniciação científica, vinculada à Universidade Federal do Paraná.

BIBLIOGRAFIA

BÄUMLE, A. M. B. (2005) *"Avaliação de Benefícios Econômicos da Despoluição Hídrica: Efeitos de Erros de Calibração de Modelos de Qualidade da Água"*. Curitiba, 285 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

BROWN, L, C.; BARNWELL, T. O. Jr. (1987). *"The Enhanced Stream Water Quality Model QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Computer Program Documentation and User Manual."* Athens: United States Environmental Protection Agency, 1987, 189 p.

CHAPRA, S. C. (1997) *"Surface Water Quality Modeling"*. New York: McGraw-Hill, 1997. 844 p.

CHAPRA, S. C.; PELLETIER, G.; TAO, H. (2007) *"QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.07: Documentation and Users Manual."* Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA, 2007, 105 p.

CAVICHIOLO, G.; FERNANDES, C. V. S.; KNAPIK, H. G.; FRANÇA, M. S.; BRAGA, M. C. B.; PORTO, M. F. A. (2005) *"A importância da matriz de fonte de poluição na implementação do enquadramento com metas progressivas"*. In: Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, 16, 2005, João Pessoa. Anais... João Pessoa: ABRH, 2005, 20 p.

FERNANDES, C. V. S.; MARIN, M. C. F. C.; TREVISAN, E.; MACHADO, E. S.; RAMOS, F.; FEIL, A.; RAMOS, F. A.; BÄUMLE, A. M.; GOMES, K. C.; GROXKO, P. G. (2005) *"Análise de Sustentabilidade Econômica e Ambiental de Metas de Despoluição Hídrica: Estudo de Caso do*

Alto Iguaçu". Curitiba: UFPR – Departamento de Hidráulica e Saneamento, 2005. (FINEP/ CT-HIDRO). Projeto concluído.

KNAPIK, H. G. (2006) *"Modelagem da Qualidade da Água da Bacia do Alto Iguaçu: Monitoramento e Calibração"*. Curitiba, 2006. 130 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Curso de Engenharia Ambiental) – Universidade Federal do Paraná.

KNAPIK, H. G. (2009) *"Reflexões sobre monitoramento, modelagem e calibração na gestão de recursos hídricos: estudo de caso da qualidade da água da Bacia do Alto Iguaçu"*. Curitiba, 2009. 174 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

KONDAGESKI, J. H. (2008) *"Calibração de Modelo de Qualidade de Água para Rio utilizando Algoritmo Genético"*. Curitiba, 2008. 163 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental) – Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.

PALMIERE, V., CARVALHO, R. J. (2006) *"QUAL2E model for the Corumbataí River"*. Ecological Modelling, v. 198, p. 269-275.

PORTO, M. F. et al..(2007) *"Bacias Críticas: Bases Técnicas para a definição de Metas Progressivas para seu Enquadramento e a Integração com os demais Instrumentos de Gestão"*. Curitiba: UFPR – Departamento de Hidráulica e Saneamento, 2007. (FINEP/ CT-HIDRO). Projeto concluído.

SUDERHSA. (2000) *"Plano de Despoluição Hídrica da Bacia do Alto Iguaçu"*. Programa de Saneamento Ambiental da Região Metropolitana de Curitiba – Relatórios Finais. Curitiba: SUDERHSA, 2000. Projeto concluído.

VON SPERLING, M. (2006) *"Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos"*. 3. ed. Minas Gerais: DESA / UFMG, 2006. 452 p.

VON SPERLING, M. (2007) *"Estudos e Modelagem da Qualidade da Água de Rios"*. Minas Gerais: DESA / UFMG, 2007. 588 p.