

XIX SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS

AVALIAÇÃO DE ERROS DE CALIBRAÇÃO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DA ÁGUA E SEU IMPACTO PARA A GESTÃO DE RECURSOS HÍDRICOS: Estudo de Caso das Bacias do Alto Iguaçu e Barigui

Ana Paula Muhlenhoff¹; Heloise Garcia Knapik²; Cristovão Vicente Scapulatempo Fernandes³

RESUMO --- Um dos principais desafios em gestão de recursos hídricos é a garantia do atendimento a demanda de água de boa qualidade. Sendo assim, 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. Nesse contexto, a modelagem da qualidade da água deve ser entendida como uma importante etapa de apoio ao processo de tomada de decisão para a implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos. Entretanto, a representação numérica da realidade física química e biológica, requer etapas de implementação e calibração de modelos matemáticos de forma formal e desafiadora. Assim, o objetivo desta pesquisa é o de avaliar erros de calibração de dois modelos matemáticos de qualidade da água, QUAL2E e QUAL2K, para as bacias do Alto Iguaçu e Barigui, por meio da comparação entre as simulações sob o ponto de vista da modelagem de resultados e representação numérica.

ABSTRACT --- A major challenge in water resources planning and management is the assurance of achieving criteria of water demand through proper quality. Thus understanding the water quality recovery through its main processes such as depuration, sedimentation and mass balance highlights the complexity of pollution processes in a water body. In such a context, water quality modeling should be understood as vital for decision support systems to implement water resources planning and management instruments. Despite this importance, the numerical representation of physical, chemical and biological processes always implies in a formal and challenging implementation and calibration of its main parameters. The goal of this research is to evaluate potential calibration errors of two mathematical models, Qual2e and Qual2K, to Alto Iguaçu and Barigui Rivers, comparing simulation results and analysing it considering modeling results and its numerical representation.

Palavras-Chave – Modelagem, Erros de calibração, Gestão de Recursos Hídricos.

¹ PIBIC CNPq, DHS/UFPR, Centro Politécnico, Jardim das Américas, Curitiba – PR, CEP: 80001-910; anapaula.dhs@ufpr.br

² Doutoranda CNPq,PPGERHA/UFPR, Centro Politécnico, Jardim das Américas, Curitiba – PR, CEP: 80001-910; heloise.dhs@ufpr.br

³ Professor Associado,DHS/UFPR, Centro Politécnico, Jardim das Américas, Curitiba – PR, CEP: 80001-910; heloise.dhs@ufpr.br

1. INTRODUÇÃO

Dos $1,36 \times 10^8$ m³ de água disponíveis no planeta, 0,8% corresponde a água doce. Destes, apenas 3% representam as águas superficiais e de fácil extração. Recurso fundamental para a existência da vida, um dos principais desafios é o atendimento a demanda de água de boa qualidade visto que a pequena fração deste recurso que pode ser utilizada mais facilmente para abastecimento sofre com a poluição por contaminantes tanto biológicos quanto químicos.

Neste contexto, a modelagem da qualidade da água, que consiste em representar, de maneira simplificada, diferentes interações que ocorrem em um ambiente através de hipóteses estabelecidas a respeito do comportamento do meio físico, químico e biológico e realizada com base na solução de equações que representam o escoamento e o transporte de massa de forma a retratar a variação da concentração da variável de qualidade da água. Em termos de processos de implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos, deve ser entendida como uma importante etapa de apoio ao processo de tomada de decisão para a implementação destes instrumentos. Portanto, a calibração de modelos matemáticos é um item importante que merece destaque considerando a necessidade de adequar os resultados das simulações aos dados observados em campo.

Assim, o objetivo desta pesquisa é o de analisar potenciais impactos de erros de calibração de parâmetros de qualidade da água (Oxigênio Dissolvido – OD, nitrogênio, fósforo e demanda bioquímica de oxigênio – DBO), utilizando os modelos matemáticos QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007) evidenciando as diferenças existentes em termos de modelagem de resultados, para as bacias do rio Barigui e Alto Iguaçu. Adicionalmente, serão abordados aspectos relacionados com o processo de calibração, visando contribuir quando do ponto de vista das bases técnicas para a implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos.

2. DESCRIÇÃO DOS MODELOS

A implementação dos modelos QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007) foi realizada para as bacias do Rio Barigui e Iguaçu, com o objetivo de comparar os resultados fornecidos por cada modelo de qualidade da água, bem como os resultados destas comparações entre si. Desta forma, nos itens seguintes, é apresentada uma descrição dos modelos de qualidade considerados nesta pesquisa.

O modelo QUAL2E

O modelo matemático de qualidade da água QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987), desenvolvido e aperfeiçoado pela USEPA, pode ser utilizado como ferramenta para caracterizar a qualidade da água de rios dentríticos e de boa mistura, bem como para seus tributários, tomando por

base vários parâmetros simultaneamente. O modelo é unidimensional (fluxo apenas em uma direção) com regime de escoamento permanente (vazão não varia com o tempo) e não uniforme, e baseado na solução de equações diferenciais de advecção - difusão, em todos os seus termos, por um sistema implícito de diferenças finitas.

O QUAL2E simula 15 constituintes, em qualquer combinação desejada pelo usuário, apresentando um cálculo detalhado para os ciclos de OD, DBO e nutrientes. A concentração de oxigênio dissolvido está associada à simulação de todos os outros parâmetros do modelo: temperatura, clorofila-a, nitrogênio orgânico, nitrogênio amoniacal, nitrito, nitrato, fósforo orgânico, fósforo dissolvido, coliformes, DBO, um constituinte arbitrário não-conservativo e mais outros três conservativos. Sua interface gráfica permite ao usuário variar os valores dos coeficientes envolvidos no balanço de massa dos constituintes, tanto quanto dados climatológicos, geográficos, fatores de correção para temperatura, dentre outros.

Para efeito de simulação e cálculos é necessária a definição de um elemento de controle. Desta forma, o modelo representa o rio por uma série de tramos, trechos de rio, que possuem características hidráulicas como largura e declividade de fundo e inclinação dos taludes, constantes. Cada tramo pode ser segmentado em até 20 elementos computacionais, unidade fundamental do modelo para o qual será aplicado o balanço de massa.

Para cada elemento computacional, o modelo permite a incorporação de descargas pontuais, tributários, captações e incrementos de vazão referentes a fontes difusas,. Do ponto de vista hidráulico, uma limitação ou simplificação do modelo QUAL2E é a suposição de regime permanente, fator que direciona o uso do modelo apenas para quando as vazões do curso principal, bem como as incrementais sejam essencialmente constantes. Nas figuras 1 e 2, são esquematizados a discretização espacial em tramos e elementos computacionais, na qual o modelo se baseia; e, o balanço de massa para o elemento computacional.

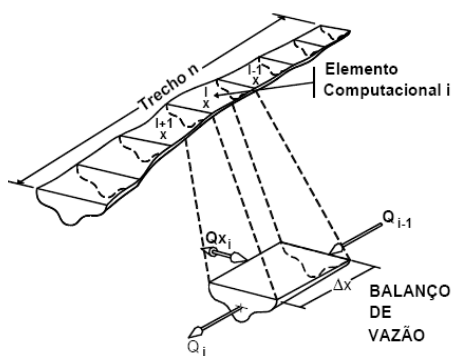


Figura 1 – Representação esquemática de um trecho de rio.
Fonte: Adaptado de Brown e Barnwell (1987).

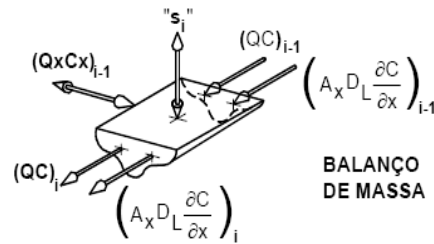


Figura 2 – Representação esquemática do balanço de massa do modelo QUAL2E.
 Fonte: Adaptado de Brown e Barnwell (1987).

A equação geral para o balanço de massa representado na figura 2, é dada por:

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

Transporte

(1)

onde, V é o volume de controle; C é a concentração da variável considerada; A_x corresponde à área da seção transversal para cada elemento computacional; D_L é o coeficiente de dispersão longitudinal; \bar{U} é a velocidade média de escoamento e F_e mantém relação com as fontes externas ao sistema (entradas e retiradas).

Para as equações de transporte presentes no balanço de massa e básicas para a modelagem matemática proposta, o modelo QUAL2E utiliza dois mecanismos: advecção e dispersão e de acordo com Brown e Barnwell (1987), a equação de transporte unidimensional é resolvida por um esquema implícito de diferenças finitas, com condições de contorno constantes, praticamente desprezando as variações temporais. Por sua vez, as equações para a caracterização do escoamento e definição do balanço hídrico, tão fundamentais para a modelagem quanto às anteriores, necessitam da determinação de características hidráulicas para cada elemento computacional. Essas características são a velocidade de escoamento, a profundidade e a área da seção transversal. Existem duas possibilidades para sua determinação: através dos coeficientes de descarga, ou pela equação de Manning (Chapra, 1997).

No método dos coeficientes de descarga, utilizam-se equações que relacionam a vazão do escoamento à velocidade média e à profundidade por coeficientes empíricos. Pela equação de Manning, cada tramo é idealizado como um canal trapezoidal, sob condições de fluxo constantes, para os quais as características hidráulicas são relacionadas por meio de um coeficiente de rugosidade do canal (coeficiente de Manning). Da suposição de canal trapezoidal, a área da seção

transversal bem como o raio hidráulico podem ser expressos em função da profundidade; logo, a determinação da velocidade ocorre por um método iterativo para a profundidade.

O método numérico utilizado pelo modelo é o de diferenças finitas regressivo, estruturado em um programa principal que contém 51 sub-rotinas e cuja linguagem de programação é ANSI FORTRAN 77, de acordo com Brown e Barnwell (1987).

O modelo QUAL2K

O modelo de qualidade da água, QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007), similarmente ao QUAL2E, é unidimensional de regime permanente e não uniforme, podendo ser utilizado para rios e tributários. Este modelo é implementado utilizando-se planilhas do programa Excel e tendo como macrolinguagem o Visual Basic (Chapra *et al.*, 2007). Sua discretização espacial é similar a utilizada pelo modelo QUAL2E, com as ressalvas de que o comprimento dos elementos computacionais pode variar, desde que não dentro de um mesmo tramo, e o número de contribuições e retiradas externas deixa de ser limitado por elemento computacional.

A obtenção da vazão pode ser feita da mesma forma como a descrita para o modelo QUAL2E, pelos coeficientes de descarga (curvas-chave), ou pela equação de Manning, além de um método adicional pelo qual a vazão é obtida através da simulação de represas. O modelo opta entre as três opções da seguinte maneira: se a altura e a largura da represa estão inscritas, esta é a opção escolhida; se estes dados não são fornecidos, mas os coeficientes necessários para viabilizar o método dos coeficientes de descarga, este é o escolhido; se nenhuma das condições anteriores é satisfeita, o modelo QUAL2K opta pela equação e Manning (Chapra *et al.*, 2007).

O balanço de massa considerado pelo modelo contabiliza as entradas e saídas de carga, bem como a dispersão longitudinal, a geração e consumo da substância dentro do volume de controle a exemplo do QUAL2E, conforme esquematizado na figura 3.

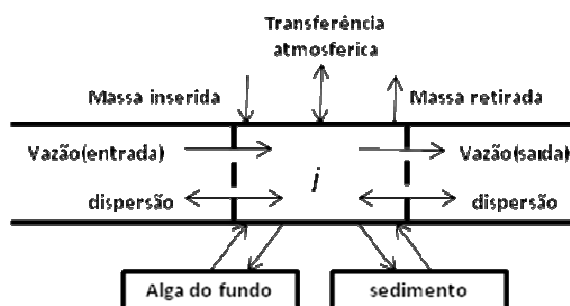


Figura 3 – Representação esquemática do balanço de massa no modelo QUAL2K.
Fonte: Adaptado de Chapra *et al.*, 2007.

Para todo constituinte do modelo, exceto para as variáveis relacionadas às algas de fundo, o balanço de massa pode ser descrito pela equação 2:

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

onde: W_i é a carga do constituinte que chega ao volume de controle i , e S_i é a parcela referente à geração e consumo do constituinte dentro do volume de controle devido a reações ou mecanismos de transporte.

Um dos avanços em relação ao QUAL2E é a possibilidade de simulação considerando ambientes anóxicos. Para a simulação de algas faz a distinção entre algas de fundo e o fitoplâncton, consideradas conjuntamente no outro modelo. Permite também a alteração dos coeficientes de reação para cada constituinte, variando-os tramo a tramo ou não. Os modelos abordam conceitos diferentes na simulação de matéria orgânica, bem como no se refere aos processos de transporte de massa em corpos hídricos. Detalhes destas diferenças estão descritas em Knapik *et al.* (2009).

3. ESTUDO DE CASO

O estudo de caso consistiu na caracterização das áreas de estudo (bacias do Alto Iguaçu e Barigui) seguida da implementação dos modelos de qualidade da água QUAL2E e QUAL2K, assim como da caracterização dos dados utilizados para a calibração – desde a obtenção a necessidade de dados conjuntos de qualidade e quantidade de água, bem como a regularidade destas medições entre pontos de monitoramento, culminando na avaliação dos impactos destes fatores sobre o processo de calibração.

A Bacia do Alto Iguaçu

O presente estudo baseou-se na dinâmica da realidade de uso e ocupação do solo da bacia do Alto Iguaçu, na Região Metropolitana de Curitiba. Cujo rio principal se estende por cerca de 90 km desde suas nascentes junto a Serra do Mar até o limite da Região Metropolitana de Curitiba, com uma área de drenagem que se aproxima de 2.800 km², conforme a figura 4. Foram estudados 86 km do rio Iguaçu, das nascentes na junção dos rios Irai e Palmital até a foz do rio Verde. Para a caracterização da bacia do Alto do Alto Iguaçu, foram utilizadas 26 sub-bacias, cujos efluentes principais 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.

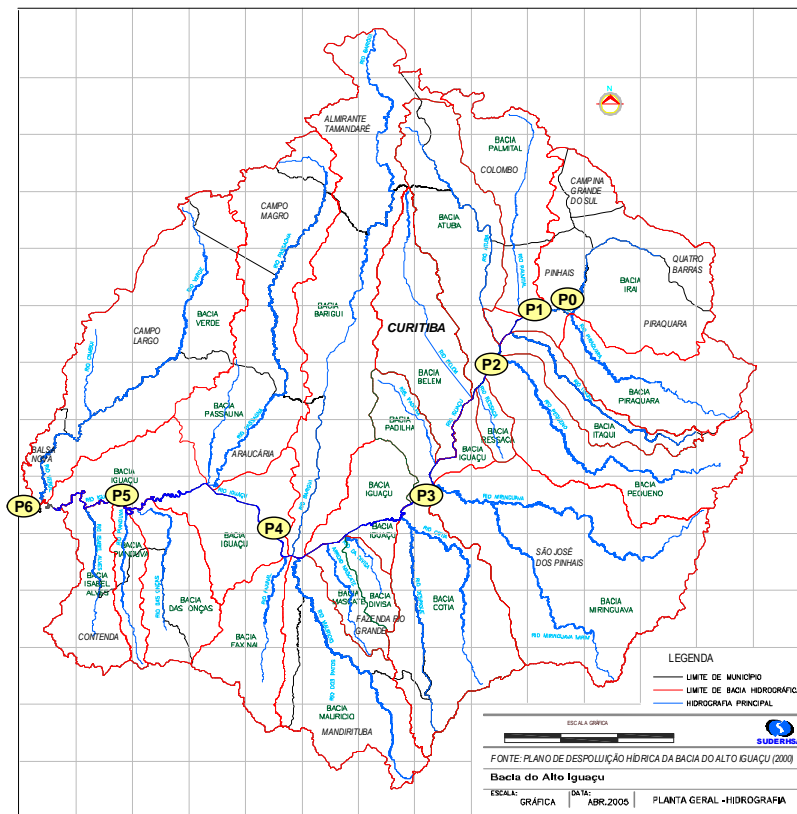


Figura 4 – Bacia do Alto Iguaçu.
 Fonte: Porto *et al.* (2007)

A população pertencente à bacia, distribuída em 14 municípios, é de aproximadamente 3 milhões de habitantes. A bacia contemplada concentra cerca de 25% da população total e 30% da população urbana do estado, com baixos índices de atendimento e tratamento de esgoto. Em decorrência da alta urbanização, vem passando por um processo de ocupação irregular de várzeas e áreas de mananciais, em especial na margem direita do Rio Iguaçu. Como consequência deste processo, tem sido 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 (Porto *et al.*, 2005; Knapik, 2009).

Em relação aos aspectos físicos, é uma região predominantemente plana, apresentando uma grande extensão de várzeas naturais (locais com solos permanentemente úmidos e nível do lençol freático próximo à superfície) em ambas as margens, configurando planícies de inundação bem definidas. Por fim, quanto à presença de atividades industriais na bacia em estudo, a maior parte das indústrias está localizada nas bacias dos rios Barigüi, Belém, Padilha, Passaúna e Atuba. E, de acordo com SUDERHSA (2000), três das cinco indústrias mais poluidoras em termos de DBO estão localizadas na bacia do rio Barigüi, dentre elas: Cocelpa (17t/mês), Companhia Estearina Paranaense (7 t/mês) e Novo Nordisk Bioindustrial (2 t/mês). Mas o mesmo estudo, afirma que em termos de população equivalente, 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.

A Bacia do Rio Barigui

A Bacia do rio Barigui, subacia do Alto Iguaçu, se localiza na Região Metropolitana de Curitiba, entre as coordenadas 25°13'24'' e 25°38'23'' Sul e 49°15'00' e 49°22'29'' Oeste, percorrendo no sentido norte-sul os municípios de Almirante Tamandaré, Curitiba e Araucária. O Rio Barigui é afluente da margem direita do Rio Iguaçu, com extensão de 67 km entre as nascentes, localizadas na Serra da Betara, próxima a divisa dos municípios de Almirante Tamandaré e Rio Branco do Sul, e a foz no Rio Iguaçu (Braga *et al.*, 2005). A figura 5 apresenta a localização da Bacia do Rio Barigui.

Bacia do Rio Barigui

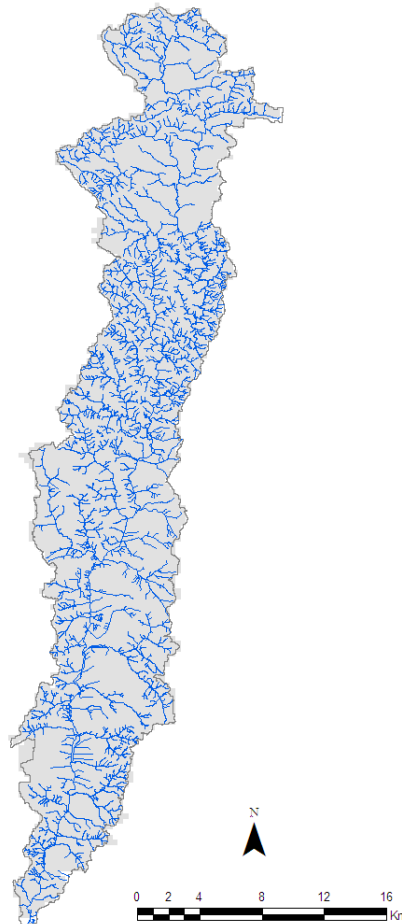


Figura 5 – Bacia do Rio Barigui

O desnível entre as nascentes e a foz é de 97m e a área total de drenagem da bacia é de 279 km², dos quais 120 km² pertencem ao município de Almirante Tamandaré, 144 km², ao de Curitiba e 15 km² ao município de Araucária, sendo o padrão de drenagem predominantemente dentrítico

(Braga *et al.*, 2005). Ainda de acordo com Braga *et al.* (2005), a bacia apresenta uma forte dinâmica quanto ao uso e ocupação do solo apresentando uma matriz de fontes de poluição muito complexa. O rio Barigüi é um exemplo típico da degradação dos recursos hídricos situado em regiões com atividade econômica diversificada e com alta densidade populacional.

A bacia possui uma parcela pouco significativa de cobertura vegetal, apresentando menor densidade populacional na região norte enquanto que na região central, caracteriza-se por uma área densamente povoada, encontrando-se quase que totalmente urbanizada no município de Curitiba, sendo menos urbanizada nos outros municípios que a integram. Sua maior fonte de poluição é a orgânica, apresentando também poluição industrial, pois abriga um amplo parque industrial. Sobre a bacia está situado o pólo industrial de Curitiba e RM (Cidade Industrial de Curitiba – CIC), com indústrias de diversos segmentos e portes; logo, as atividades industriais sobre a bacia são bastante diversificadas e os impactos sobre a qualidade das águas em decorrência destes fatores, significativos.

Implementação dos modelos QUAL2E e QUAL2K

Para a implementação dos modelos QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007), os 107 km do Rio Iguaçu e os 67 km do rio Barigui, foram transformados em 106 e 67 elementos computacionais, respectivamente, de mesma extensão, e agrupados em 38 e 26 tramos, respectivamente, de forma que cada tramo corresponde a uma área incremental, cujas características de uso e ocupação do solo, bem como as características hidráulicas, como declividade e largura de fundo, e também as inclinações dos taludes e o coeficiente de rugosidade de Manning, para o cálculo da vazão, sejam semelhantes a ponto de se considerá-las iguais sem prejuízos significativos para a modelagem de qualidade da água.

Na divisão em tramos e elementos computacionais é que se baseia o banco de dados para as Bacias, no qual encontram-se organizados: características hidráulicas, de uso e ocupação do solo, atividades industriais, dados populacionais e referentes ao sistema de coleta e tratamento de esgoto, tramo a tramo, com considerações a respeito do balanço hídrico e contribuições de cargas de nutrientes e orgânicas, estimadas com base nos outros dados da bacia. Apresentam também um detalhamento para os elementos computacionais, no que se refere a entradas e retiradas de cargas poluidoras no sistema.

Essa forma de apresentação dos dados é chamada matriz de fontes de poluição e, para a bacia do Alto Iguaçu, dos estudos que deram base para a construção destas matrizes, fazem parte, 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).

Os modelos em questão simulam diversos poluentes, com a possibilidade de entrada de fontes difusas e pontuais, então, os dados nas matrizes foram organizados de maneira a atender as especificações estruturais de ambos os modelos, bem como suas limitações estruturais. Este fato fica mais evidente na matriz de fontes de poluição construída para o Rio Barigui, visto que esta bacia abriga um número considerável de indústrias e conseqüentemente, um número maior de fontes pontuais, e o modelo QUAL2E só permite uma entrada de carga e vazão por elemento computacional; logo, houve a necessidade de se agrupar dados tendo em vista a limitação imposta pelo modelo.

Dados utilizados na calibração

Para efeito da calibração dos modelos, foram considerados os dados das campanhas de monitoramento realizadas no período de 2005 a 2008 para os 7 pontos de monitoramento no Rio Iguaçu, e os dados de monitoramento dos projetos Barigui (Porto *et al.*, 2005) e Matasul (Reis et al. 2010) nos 4 pontos de monitoramento da qualidade da água localizados no rio Barigui: a 20km da nascente do rio (ponto P1 - Almirante Tamandaré); a 33km da nascente (ponto P2 – Parque Tingui); a 41km da nascente (Parque Barigui) e; a 64km da nascente (Ponte da Caximba).

É interessante destacar que para fins de calibração dos modelos de qualidade da água são necessários dados conjuntos de qualidade e quantidade de água. Fator que dificulta e em certos casos impossibilita o processo de calibração, o qual também sofre interferência da falta de correspondência em relação às datas de coleta de dados, entre os pontos monitorados. Desta forma, considerando a necessidade de dados conjuntos de quantidade e qualidade da água, a calibração para o oxigênio dissolvido, bem como para as frações de fósforo e nitrogênio, com exceção do amoniacal, não puderam ser realizadas para o estudo de caso do rio Barigui.

Para estes parâmetros, a quantidade de dados, quando tomados conjuntamente, torna-se muito pequena e pouco significativa para fins de calibração. Logo, puderam ser realizadas, após o ajuste da vazão, apenas as calibrações para as concentrações de DBO e nitrogênio amoniacal. Entretanto, para o estudo de caso da bacia do Alto Iguaçu, não foram encontradas dificuldades quanto à existência de dados que permitissem a calibração para nenhum dos parâmetros simulados.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Após as simulações para OD, DBO e nutrientes, fez-se necessário adequar os resultados obtidos com os dados observados em campo, ou seja, realizar a calibração do modelo. Calibrar modelos de qualidade da água consiste em variar os coeficientes do modelo a fim de se obter a

melhor aproximação entre os dados resultantes da simulação e os observados em campo (Chapra, 1997). E, de modo geral, as variações nos coeficientes são feitas com base em valores da literatura.

Para a calibração do modelo, a exemplo do que foi realizado por Knapik (2009), as tentativas de ajuste das curvas simuladas de vazão, oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, nitrogênio e fósforo, foram feitas de modo que a curva de simulação estivesse num intervalo de permanência de 25% a 75% dos dados coletados em campo, com o valor ótimo próximo à mediana. Nos itens a seguir são apresentados os resultados das tentativas de simulação quanto à calibração da vazão e dos parâmetros (oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, nitrogênio e fósforo), bem como a discussão a cerca dos resultados obtidos para cada modelo e bacia analisada.

Calibração da vazão

A exemplo do realizado por Knapik (2009), o ajuste para a vazão, foi feito estabelecendo-se um coeficiente médio que relacionou os dados das vazões difusas incrementais por tramo, aos dados coletados em campo para as vazões. Para estimar este coeficiente foi feita a razão entre as vazões incrementais com os valores de máximo, mínimo, mediana, 1° e 3° quartis, para os quatro pontos de monitoramento considerados para a calibração do rio Barigui e os sete pontos para a calibração do rio Iguazu. Este coeficiente foi aplicado, de acordo com as áreas de influência de cada ponto de monitoramento. Os resultados para o rio Iguazu e para o Rio Barigui são apresentados na Figura 6.

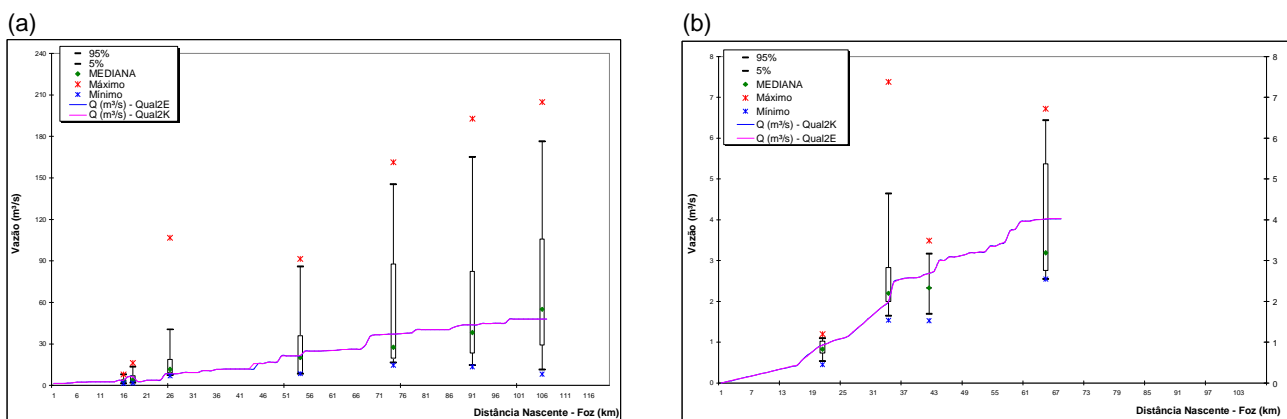


Figura 6 – Calibração da vazão para os modelos QUAL2E e QUAL2K, Rio Iguazu (a) e Rio Barigui (b).

Com os valores calibrados das vazões, foi possível proceder as tentativas de calibração para os parâmetros de qualidade simulados, também utilizando o mesmo processo, para ajuste das curvas aos dados monitorados, com a diferença que os coeficientes utilizados e alterados são os do modelo.

Calibração dos Parâmetros

A calibração dos parâmetros, a exemplo do realizado por Knapik (2009), baseou-se em tentativas de ajuste das curvas de simulação aos dados de campo agrupados na forma de Box plots a

fim de mantê-las num intervalo de 25 a 75% de permanência dos respectivos dados coletados em campo, com valor ótimo próximo à mediana. A calibração consistiu, no ajuste dos coeficientes referentes ao balanço de DBO, relacionada aos 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).

Em relação ao estudo de caso da bacia do Alto Iguazu, foram utilizados os resultados obtidos por Knapik (2009), que fez as simulações para OD, DBO, nitrogênio e fósforo, utilizando o modelo de qualidade da água QUAL2E. E os resultados, para a simulação dos mesmos parâmetros para o QUAL2K, conforme realizado por Knapik *et al.* (2009). As simulações e tentativas de calibração para o estudo de caso da bacia do rio Barigui, adotou a mesma metodologia. Entretanto, no caso do rio Barigui, a falta de dados conjuntos de qualidade e quantidade de água impossibilitou as tentativas de calibração dos parâmetros simulados com exceção das concentrações de DBO e nitrogênio amoniacal.

Ainda com relação às simulações para o rio Barigui, para a calibração da curva de DBO foram feitas diversas alterações no valor do coeficiente de desoxigenação carbonácea. Estas alterações se basearam em valores citados na literatura, conforme apresenta Von Sperling (2006). Contudo, tais variações não resultaram em bons ajustes, o que reflete a existência de erros ou nos dados determinados em campo ou naqueles organizados nas matrizes de fontes de poluição. A figura 7(a) apresenta os resultados obtidos para o ajuste da curva simulada de DBO no modelo QUAL2K aos dados de campo, para diferentes valores do coeficiente de desoxigenação.

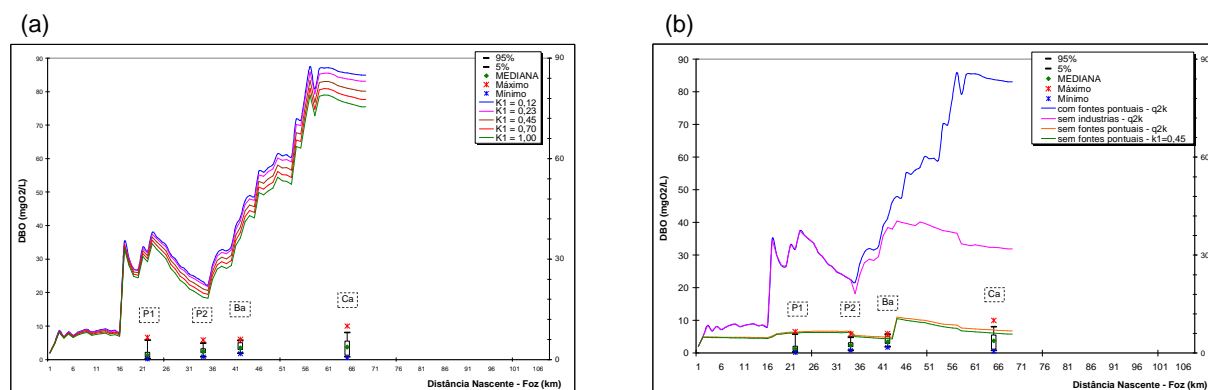


Figura 7 – Curvas de calibração para DBO, Rio Barigui – modelo QUAL2K (a); Tentativas de calibração para DBO, Rio Barigui – modelo Qual2K (b).

Para a mesma curva simulada no modelo QUAL2E, os resultados obtidos, do ponto de vista da calibração, foram semelhantes aos apresentados pelo QUAL2K. Como estratégia para identificar onde provavelmente estão os maiores erros, quanto aos dados utilizados, seja para a calibração – dados de campo dos projetos Barigui (Braga *et al.*, 2005) e Matasul (Reis *et al.*, 2010); seja pelos dados de entrada (advindos da matriz de fontes de poluição) para o caso do rio Barigui, foram retiradas todas as entradas referentes a efluentes industriais, realizando novamente a simulação e ajuste da vazão que precede qualquer tentativa de calibração. Entretanto, mais uma vez os resultados obtidos não foram satisfatórios, embora tenham apresentado alguma melhora. Como segunda estratégia foram retiradas todas as cargas de poluição consideradas pontuais, a fim de determinar qual o impacto que estas teriam sobre a concentração de DBO final no rio Barigui. Os resultados destas tentativas, para a simulação no QUAL2K, são apresentados pela figura 7(b).

A figura 7(b) apresenta também, para a simulação que desconsidera as cargas das fontes pontuais sobre o rio Barigui, uma variação no coeficiente de desoxigenação, a fim de observar a qual a influência deste para os resultados obtidos. Além de permitir a observação quanto à possibilidade de se estar superestimando as cargas nos dados de entrada do modelo, sugerindo a possível indicação de onde estariam os erros, embora os dados de monitoramento possam estar subestimando as concentrações de DBO existentes no rio. Por fim, quanto às tentativas de calibração, da mesma forma que para a concentração de DBO, não foram obtidos resultados satisfatórios para a calibração do nitrogênio amoniacal para o rio Barigui.

Comparação das curvas entre os dois modelos

As simulações nos modelos QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007), foram realizadas para o rio Barigui, a exemplo do realizado por Knapik *et al.* (2009) para o rio Iguaçu. As variáveis simuladas foram nitrogênio nas suas frações orgânica e amoniacal, bem como quando na forma de nitrato; fósforo total; oxigênio dissolvido e demanda bioquímica de oxigênio. Conforme descrito, para o estudo de caso da bacia do rio Barigui, a falta de dados de campo impossibilitou as tentativas de calibração para outros parâmetros que não DBO e nitrogênio amoniacal. Entretanto, a resposta dos modelos em relação à demanda bioquímica de oxigênio foi semelhante à obtida para o rio Iguaçu, como mostram as figuras 8(a) e 8(b).

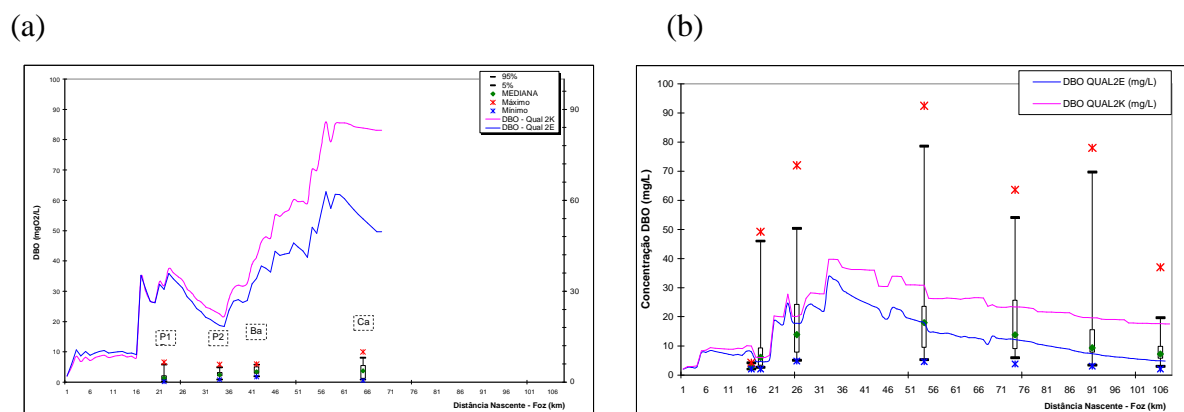


Figura 8 – Resultado das simulações para DBO nos modelos QUAL2E e QUAL2K – Rio Barigui (a); Rio Iguazu (b).

Nas figuras acima, pode-se observar que existem diferenças entre as respostas obtidas de cada modelo. Esta diferença se deve aos processos envolvidos quando da simulação da concentração de DBO. O modelo QUAL2E, considera para esta variável, a retirada de matéria orgânica da coluna d'água através da sedimentação (processo representado pelo coeficiente de sedimentação (K_3), enquanto o modelo QUAL2K não considera este coeficiente, embora faça a distinção entre demanda bioquímica de oxigênio lenta (que não foi simulada para os estudos de caso dos rios Barigui e Iguazu) e rápida. Portanto, para a hipótese de simulação adotada e confirmando os resultados obtidos e apresentados nas figuras 8(a) e 8(b), para este parâmetro, a curva resultante do modelo QUAL2E é menor do que a do modelo QUAL2K.

Quanto ao rio Iguazu, na simulação pelo modelo QUAL2E, foi utilizada a combinação dos coeficientes calibrada por Knapik (2009), sendo o coeficiente de desoxigenação carbonácea (K_1) igual a $0,1 \text{ d}^{-1}$ e K_3 igual a $1,2 \text{ d}^{-1}$. E, na simulação com o modelo QUAL2K, para a desoxigenação carbonácea referente à modelagem da DBO rápida, representada pelo coeficiente K_{dc} , também foi utilizado o valor de $0,1 \text{ d}^{-1}$ (Knapik *et al.*, 2009). A figura 9 mostra, para curvas simuladas pelos dois modelos, dois perfis iguais para a simulação da concentração de DBO. Este resultado é obtido quando deixamos de considerar no modelo QUAL2E o processo de sedimentação, representado por K_3 . Mas apesar dos perfis poderem ser ditos iguais, as informações contidas nos resultados são diferentes, visto que os modelos levam em conta processos diferentes para a simulação (Knapik *et al.*, 2009).

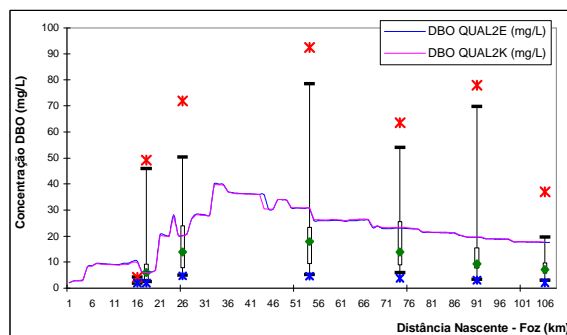


Figura 9 – Resultado da simulação de DBO nos modelos QUAL2E e QUAL2K, sem a consideração de K3 no QUAL2E – Rio Iguaçu.

Em relação às concentrações de nitrogênio e fósforo, conforme apresenta Knapik *et al.* (2009) para o rio Iguaçu, os resultados fornecidos pelos modelos em questão indicam que para nitrogênio amoniacal, orgânico e total, as abordagens dos modelos são iguais; conforme apresentam as figuras 10(a), 10(b) e 11(a). Entretanto, esta afirmação só é válida se, como realizado, adote-se a simplificação da simulação sem a interação com as algas.

Os resultados obtidos para a concentração de nitrato evidenciam o que as equações de cada um dos modelos sugerem. Para este constituinte, a simulação do processo de nitrificação é diferente. O modelo QUAL2K considera as concentrações de nitrito juntamente com as de nitrato simplificando o processo de nitrificação a uma única etapa, enquanto o modelo QUAL2E o divide em oxidação da amônia e oxidação do nitrito; logo as taxas envolvidas não representam as mesmas condições em cada um dos modelos, como observado na figura 11(b).

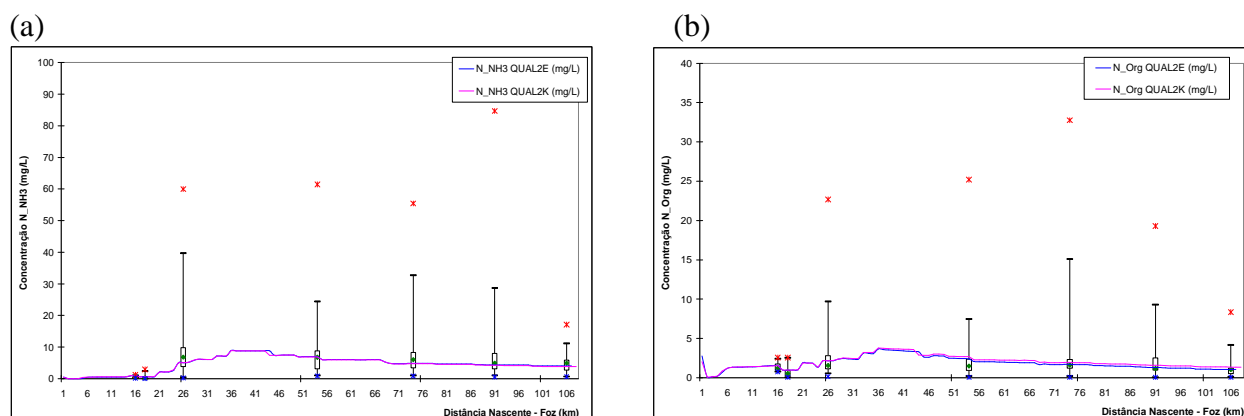


Figura 10 – Resultados das simulações de nitrogênio amoniacal (a) e nitrogênio orgânico (b) nos modelos QUAL2E e QUAL2K – Rio Iguaçu.

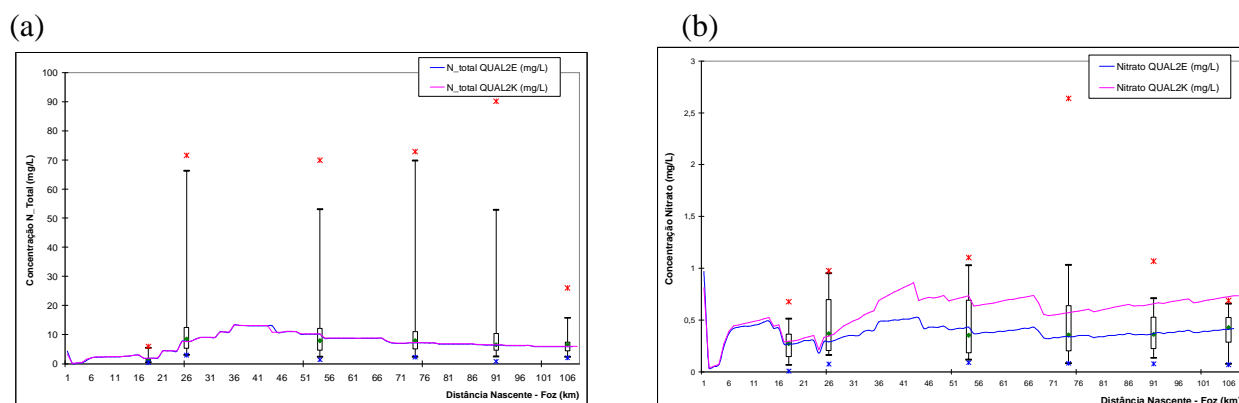


Figura 11 – Resultados das simulações de nitrogênio total (a) e nitrato (b) nos modelos QUAL2E e QUAL2K – Rio Iguazu.

As curvas de fósforo total – figura 12(a) – foram obtidas pela simulação simplificada que considerou apenas os processos de sedimentação do fósforo orgânico e seu decaimento a fósforo inorgânico, sem a inclusão da interação com algas; desta forma, os resultados para os modelos estudados foram semelhantes, uma vez que nas condições adotadas os modelos cinéticos de QUAL2E e QUAL2K são iguais. Por fim – na figura 12(b) – as possíveis diferenças na concentração de oxigênio dissolvido, fornecidas por cada modelo de qualidade estudado, se relacionam com a forma de se simular os processos de nitrificação e de demanda de oxigênio pelo sedimento.

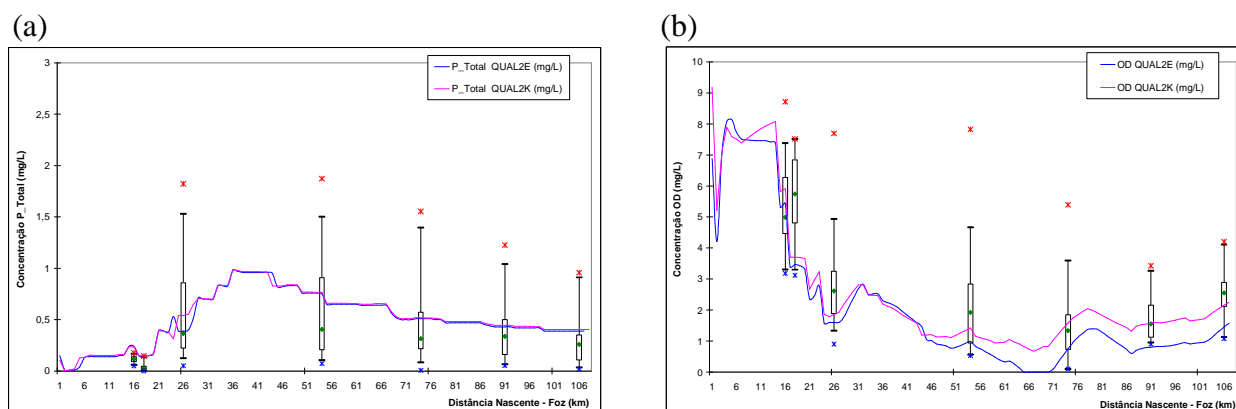


Figura 12 – Resultado das simulações de fósforo total (a) e oxigênio dissolvido (b) nos modelos QUAL2E e QUAL2K – Rio Iguazu.

Comparação das curvas entre os dois rios

Conforme já descrito, o rio Barigui é afluente da margem direita do rio Iguazu, sendo um exemplo típico da degradação dos recursos hídricos situados em regiões com atividade econômica diversificada e com alta densidade populacional. A bacia do rio Barigui possui uma cobertura vegetal pouco significativa, com a região central, que se localiza no município de Curitiba, densamente povoada, fator que explica o fato de ser a orgânica a maior fonte de poluição da bacia

que também apresenta grande poluição industrial, visto que abriga, em sua porção final e mais próxima ao rio Iguaçu, o pólo industrial de Curitiba e Região Metropolitana.

A bacia do rio Barigui, juntamente com as bacias dos rios Belém, Padilha, Passaúna e Atuba, abrigam a maior parte da atividade industrial presente na bacia do Alto Iguaçu, sendo que três das cinco mais poluidoras, pertencem a bacia do rio Barigui (SUDERHSA, 2000). E, é esta a região da bacia do Alto Iguaçu que se apresenta mais poluída (sua porção intermediária, que drena a cidade de Curitiba). Dentre os afluentes que mais contribuem para esse resultado estão os rios Barigui, Atuba, Palmital, Padilha e Belém. Entretanto, o último trecho do rio Iguaçu, apresenta, em virtude de uma maior contribuição de rios não poluídos, uma melhora significativa em termos de qualidade, visto que tais contribuições permitem uma maior diluição dos poluentes.

Do ponto de vista da modelagem matemática, as características apresentadas podem ser observadas nos resultados das simulações. Em termos de DBO, por exemplo, fica evidente a importância das contribuições industriais nos tramos finais da bacia do rio Barigui (figura 8), enquanto que a curva para o rio Iguaçu, apresenta valores menores para a DBO, nos tramos finais se comparada com a porção intermediária da bacia (figuras 10 e 11). Este comportamento, para o rio Iguaçu, pode ser observado também para os outros parâmetros, enquanto que pelas dificuldades encontradas quando do estudo de caso do rio Barigui, permitem considerações apenas relacionadas a DBO.

5. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em relação aos modelos de qualidade da água QUAL2E (Brown e Barnwell, 1987) e QUAL2K (Chapra *et al.*, 2007), para o equacionamento dos balanços de massa para oxigênio dissolvido, DBO e nutrientes, é possível perceber que são mais evidentes as diferenças do que as semelhanças entre os dois modelos, como das diferentes abordagens em relação ao processo de nitrificação. Também foi possível experimentar, com as tentativas de calibração do modelo QUAL2K para o rio Barigui, a importância de dados conjuntos de quantidade e qualidade da água, assim como dados consistentes no que diz respeito a datas de determinação para todos os pontos, além do cuidado para a determinação destes, visto que possivelmente existem erros que superestimam ou subestimam estes dados.

Das curvas obtidas das simulações, pode-se observar que os resultados obtidos pelos modelos QUAL2E e QUAL2K foram semelhantes. Quando comparadas entre as áreas de estudo, a bacia do rio Barigui e a bacia do Alto Iguaçu, visto que, apesar de não calibradas no caso do rio Barigui, a curva resultante da simulação da demanda bioquímica de oxigênio com o modelo QUAL2K é menor do que a obtida em simulações com o QUAL2E. Esta diferença é decorrente do primeiro

modelo não considerar a perda de matéria orgânica por sedimentação. Entretanto, se não considerarmos o coeficiente de sedimentação no modelo QUAL2E (K_3), as curvas entre os modelos se tornam muito semelhantes, apesar dos processos envolvidos e simulados serem diferentes.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao CNPq pelas bolsas. Adicionalmente, os recursos do Projeto Integra (CNPq/FINEP/CT-Hidro) sob a coordenação do Prof. João Batista Dias de Paiva, foram fundamentais para o desenvolvimento desta pesquisa.

BIBLIOGRAFIA

BAIRD, C. (2002). “*Química Ambiental*”l. 2a ed. Porto Alegre: Bookman, 622 p.

BRAGA, B.; HESPANHOL, I.; CONEJO, J. G. L.; BARROS, M. T. L.; SPENCER, M.; PORTO, M.; NUCCI, N.; JULIANO, N.; EIGER, S. “*Introdução à Engenharia Ambiental*”. São Paulo: Prentice Hall, 2002. 305 p.

BRAGA, M. C. B. *et al.* (2005). “*AVALIAÇÃO DE BENEFÍCIO-CUSTO DE MEDIDAS DE CONTROLE DE CHEIAS E DESPOLUIÇÃO URBANA – ESTUDO DE CASO DA BACIA DO RIO BARIGUP*”. Curitiba: UFPR – Departamento de Hidráulica e Saneamento, Julho/ 2005. (FINEP/CT-HIDRO). Projeto concluído.

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, 189 p.

CHAPRA, S. C. (1997). “*Surface Water Quality Modeling*”.New York: McGraw-Hill, 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, 105 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. (FINEP/ CT-HIDRO). Projeto Concluído.

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.

KNAPIK, H.G.; BASSANESI, K.; FERNANDES, C. V. S. (2009). “*QUALIDADE DA ÁGUA DA BACIA DO RIO IGUAÇU: Diferenças conceituais entre os modelos QUAL2E e QUAL2K*”. In: XVIII Simpósio Nacional de Recursos Hídricos, Campo Grande.

PORTO, M. F. *et al.* (2005). “*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, abril/ 2005. (FINEP/ CT-HIDRO). Projeto concluído.

REIS, N. C; PAIVA, J. B; FERNANDES, C. V. S; PINHEIRO, A. (2010). “*Projeto Matasul – Rede de Pesquisa em Bacias Representativas e Experimentais no Bioma da Mata Atlântica, na Região Sul do Brasil*”. Relatório Final. CNPq. 520 p.

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

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

SUDERHSA. (2000). “*Plano de Despoluição Hídrica da Bacia do Alto Iguaçu.*” Programa de Saneamento Ambiental da Região Metropolitana de Curitiba – Relatório Final. Curitiba: SUDERHSA. Projeto Concluído.