

Análise dos Coeficientes de Reaeração e Cinéticos Empregados na Simulação de Qualidade de Água em Rios

Pétrick Anderson Soares, Adilson Pinheiro, Evelyn Zucco

Departamento de Engenharia Civil – FURB

petrickps@gmail.com, pinheiro@furb.br, evelynzucco@gmail.com

Recebido: 26/04/11 - revisado: 03/07/11 - aceito: 26/01/12

RESUMO

Foram avaliados os coeficientes de reaeração e cinéticos usados no processo de simulação da qualidade da água, na rede fluvial de duas bacias. O modelo escolhido para simulação foi o Qual2k. São utilizadas séries de dados de qualidade das águas coletados em 6 pontos da bacia do ribeirão Concórdia e 4 pontos da bacia do ribeirão Garcia. As informações quantitativas foram estimadas através de simulação com modelo hidrológico WIN_IPH2 de transformação de precipitação em vazão. O procedimento de calibração ocorreu através do uso do coeficiente de determinação. Foram calibrados dez coeficientes cinéticos, mais o coeficiente de reaeração. Para cada data de amostragem de água, os coeficientes foram calibrados. Os coeficientes cinéticos ajustados foram correlacionados com as variáveis explicativas, sendo verificado que a vazão explica razoavelmente o coeficiente de reaeração. As concentrações dos constituintes apresentaram influência nos seus coeficientes cinéticos.

Palavras-chave: Qualidade das águas, modelos de simulação, coeficientes cinéticos.

INTRODUÇÃO

Modelos de qualidade de água procuram descrever a variação espacial e temporal das variáveis de interesse. Nas últimas décadas tornou-se recorrente a utilização de modelos matemáticos na geração de cenários e nos estudos de autodepuração dos corpos de água (Park e Lee, 2002; Bongartz *et al.*, 2007; Kannel *et al.*, 2007; Longe e Omole, 2008; Fan *et al.*, 2009). O desenvolvimento dos modelos de qualidade da água apresenta núcleo de processos determinantes, contudo, quando necessário, novos processos são incluídos (Mcintyre *et al.*, 2003; Paliwal *et al.*, 2007; Marsili-libelli e Giusti, 2008).

De acordo com Rauch *et al.* (1998), os modelos de qualidade de água em rios são constituídos de três módulos: hidrodinâmico, onde o fluxo de água é descrito por equações tais como Navier-Stokes ou Reynolds; transporte, onde os constituintes dissolvidos são transportados segundo as equações de advecção e dispersão; e processos de conversão, que estuda as alterações nas concentrações dos constituintes devido a fatores físicos, químicos e biológicos. Os dois primeiros módulos estão relativamente consolidados, enquanto que o terceiro encontra-se em processo de aperfeiçoamento (Park e Lee, 2002; Kannel *et al.*, 2007; Marsili-libelli e Gius-

ti, 2008). Isto ocorre, em parte, pelo fato de que novas variáveis têm sido incorporadas aos modelos, tornando-os mais completos e capazes de simular processos e dinâmicas que antes não eram possíveis de visualizar ou até mesmo modelar (Rauch *et al.*, 1998).

As reações de transformação dos elementos químicos são descritas por expressões matemáticas, representativas das cinéticas envolvidas. Diferentes modelos podem ser empregados, sendo em geral utilizadas cinéticas de primeira ordem (Frémaux, 1989) e coeficientes que representam as velocidades com que as reações ocorrem. Essas velocidades são dependentes de fatores do meio físico, químicos e biológicos. Os coeficientes cinéticos fornecem as informações a respeito das fontes e sumidouros, além do comportamento cinético dos constituintes simulados.

Não obstante a importância do processo de calibração de modelos, boa parte dos estudos similares não apresenta a metodologia de forma clara, em geral, havendo falta de dados de campo para estabelecer a relação entre os cálculos do modelo e os cenários de dados. Além disto, a calibração é feita visando ajuste com os dados de laboratório, produzindo alterações artificiais de constantes que representam as realidades físicas, químicas e biológicas dos cursos de água modelados (Baumle, 2005).

Atualmente ocorre a busca por técnicas e procedimentos que apurem com maior exatidão os coeficientes cinéticos que envolvem os processos de conversão da matéria (Wilcock, 1988; Jha *et al.*, 2004; Pelletier *et al.*, 2006; Kondageski e Fernandes, 2009). Visto a atual dificuldade que existe em transportar as equações empíricas para os cursos de água com características hidráulicas diferentes, muitos pesquisadores promovem a calibração dos coeficientes, ajustando-os a fim de aproximar os resultados obtidos pela modelização com os dados monitorados em campo, normalmente utilizando limites estabelecidos pela literatura. Ocorre que com essa prática, os resultados obtidos são compostos por alto grau de incerteza, já que, em sistemas multiparâmetros, os coeficientes não são interdependentes (Cox, 2003). Outra opção consiste do estudo dos coeficientes cinéticos em campo, adequados às condições que a matemática exige para simular com alto grau de precisão a realidade instalada. Contudo, tais procedimentos requerem certo desenvolvimento técnico, possuem custos relativamente altos e demandam mais tempo dos que outras opções. Mesmo tais estudos sendo considerados os mais adequados (Parker e Gay, 1987; Cox, 2003), as dificuldades técnicas e custos que se apresentam, muitas vezes não permitem o desenvolvimento e aplicação.

Ressalta-se que além do processo de calibração e a obtenção de valores a partir dos modelos empíricos, a determinação do coeficiente de reaeração (k_2) pode envolver métodos como a adição de traçadores (Boxall e Guymmer, 2007), a técnica do balanço do oxigênio dissolvido desenvolvido por Streeter e Phelps em 1925 (Jha *et al.*, 2004) e a técnica do equilíbrio perturbado (Cox, 2003).

Atualmente, os limites adotados para os coeficientes cinéticos são originários de literatura, a partir de características hidráulicas específicas, dificultando assim sua reprodução em outros ambientes. Mesmo sendo compostos de medidas potencialmente imprecisas, além de originarem de bancos de dados pequenos e que refletem condições hidrodinâmicas limitadas (Melching e Flores, 1999; Cox, 2003), diversos trabalhos os adotam, partindo do pressuposto de que os valores são condizentes com a realidade modelada, o que nem sempre é verdadeiro.

Com o objetivo de desenvolver uma reflexão quanto aos métodos de calibração presentes na literatura, este artigo apresenta a determinação dos coeficientes cinéticos para sistemas fluviais de duas bacias com diferentes usos e ocupação do solo. São comparados dois métodos para a obtenção dos coeficientes cinéticos. O primeiro é a calibração de um

modelo de qualidade das águas, com escoamento permanente e uniforme, e o segundo são os modelos de cálculo baseados nas características hidráulicas e hidrodinâmicas dos cursos de água.

MATERIAL E MÉTODOS

Foi utilizado o modelo de qualidade de água Qual2k (Park e Lee, 2002; Chapra *et al.* 2007) para simulação das concentrações dos constituintes ao longo da rede de drenagem, em duas bacias, uma com uso e ocupação do solo rural e outra urbana. Foram utilizadas séries de dados de qualidade de águas coletados em seis pontos na bacia rural e quatro pontos na bacia urbana. Considerando que o monitoramento não contemplou dados quantitativos, estes foram estimados através de simulação com modelo hidrológico de transformação de precipitação em vazão, Win_IPH2 (Bravo *et al.*, 2006). Por fim, foram analisados os coeficientes cinéticos para cada campanha de amostragem, em função da vazão escoada. Comparações foram efetuadas entre os métodos de determinação do coeficiente de reaeração.

Áreas de Estudo

As áreas de estudo compreendem duas bacias, uma com características rurais e outra extremamente urbanizada, ambas localizadas na região hidrográfica do rio Itajaí, situada na vertente atlântica do estado de Santa Catarina, Brasil.

A bacia do ribeirão Concórdia (Figura 1) apresenta características de ocupação rurais sendo afluente do rio Lontras e, este afluente do rio Itajaí-açu. Possui uma área de drenagem de 30,74 km² e o seu curso principal possui uma extensão de 12,7 km. A ocupação humana na bacia apresenta baixa densidade, onde prevalecem na paisagem, pequenas propriedades familiares rurais. Atualmente, os principais usos do solo são pastagens, correspondentes a 20,35% da área da bacia, e plantio de milho que corresponde a 9,29%. Esta bacia é característica por apresentar alto percentual de área nativa, chegando a representar 47,61% do uso e ocupação do solo (Pinheiro *et al.*, 2008).

O ribeirão Garcia (Figura 1) é um dos principais tributários do rio Itajaí-açu, seu canal principal possui a extensão de 41,9 km e sua bacia de contribuição é de 158 km². Caracteriza-se por ser uma bacia extremamente urbanizada, onde ocorrem muitas plantas industriais. Sua nascente e mais um

pequeno trecho ainda se encontram em região sob alta cobertura florestal, que constitui o Parque Nacional da Serra do Itajaí.

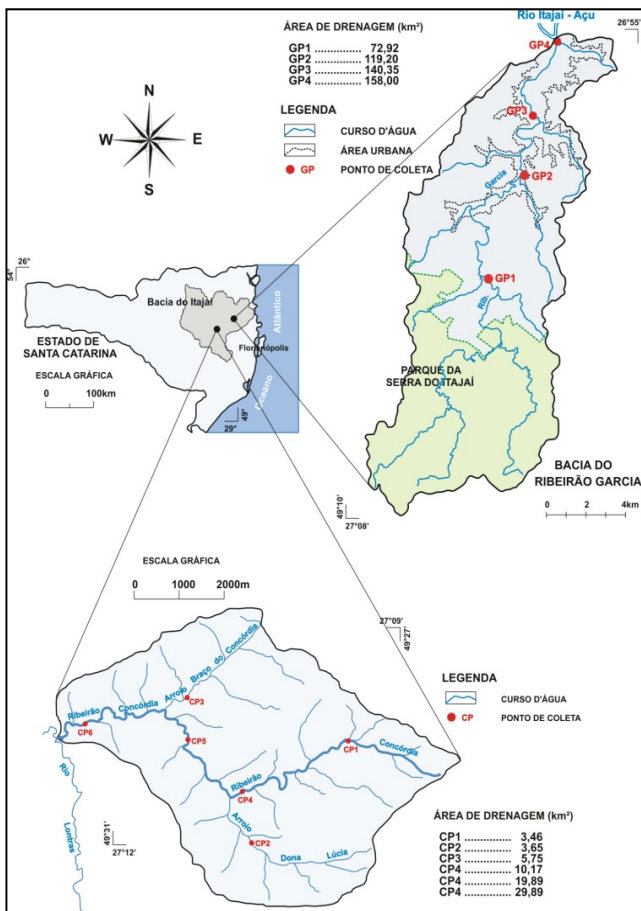


Figura 1 - Bacias do ribeirão Concórdia e do ribeirão Garcia.

Modelo utilizado

Um dos modelos de simulação da qualidade de água superficiais mais utilizados é o Qual2e, distribuído pela USEPA – US Environmental Protection Agency (Brown e Barnwell, 1987). Originalmente desenvolvido em 1970, sofreu diversas modificações. Atualmente a sua mais nova versão é denominada Qual2k (Park e Lee, 2002; Chapra *et al.*, 2007). Diversas pesquisas e trabalhos no Brasil e no exterior foram e, estão sendo desenvolvidos utilizando-se tanto do Qual2e quanto do Qual2k e suas diferentes versões (Park e Lee, 2002; Kannel *et al.*, 2007).

O Qual2k é constituído de equações diferenciais ordinárias para sistemas unidimensionais e

de fluxo constante, podendo ser utilizado para simular o comportamento de diversos indicadores e parâmetros de qualidade da água. Segundo Chapra *et al.* (2007), a estrutura de funcionamento do modelo Qual2k parte dos pressupostos de que o canal simulado apresenta-se bem misturado vertical e lateralmente (unidimensional), que o fluxo é constante e não uniforme, sendo todas as variáveis da qualidade da água simuladas em uma escala de tempo diária. Para isso, o modelo segmenta o corpo simulado em trechos igualmente espaçados e múltiplas interferências podem ser inseridas em todo o segmento. Procedimento importante considerado por esse modelo é a adoção das situações anóxicas reduzindo as reações de oxidação a zero em concentrações baixas de oxigênio. Além disso, a desnitrificação é modelada como uma reação de primeira ordem que ocorre em concentrações reduzidas de oxigênio.

Dados de Entrada

Para a bacia do ribeirão Concórdia, os dados qualitativos utilizados na fase de calibração do modelo foram obtidos junto a EPAGRI – Empresa de Pesquisa Agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina. O período de coleta de dados ocorreu entre os anos de 2004 e 2008, em seis diferentes pontos de monitoramento ao longo da bacia. Dados obtidos junto a FAEMA, Fundação Municipal do Meio Ambiente de Blumenau, foram utilizados na calibração na bacia do ribeirão Garcia, oriundos de campanhas de amostragem de qualidade de água correspondentes ao período de 1998 a 2004, em quatro pontos de monitoramento. Em ambas as bacias, diversos constituintes foram monitorados: oxigênio dissolvido, $DBO_{5,20^{\circ}C}$, fósforo orgânico e inorgânico, nitrogênio total e coliformes termotolerantes.

Os monitoramentos de qualidade da água efetuados não contemplaram a medição de vazões. Dessa forma, foi utilizado o modelo hidrológico Win_IPH2 (Bravo *et al.*, 2006) para estimar as vazões nas datas de amostragem da qualidade das águas. O modelo IPH2 é do tipo conceitual, concentrado, composto por algoritmos de perdas de evaporação e interceptação, separação do escoamento e propagação dos escoamentos superficiais e subterrâneos.

A calibração do modelo na bacia do ribeirão Concórdia foi realizada para o período de janeiro de 2006 a dezembro de 2009. Durante esse período, uma estação pluviométrica e uma fluviométrica com dataloggers situadas próximas ao exutório da bacia estavam em operação, coletando dados em intervalos de dez minutos. A calibração foi realizada com

dados diários. Após a calibração, foi gerada uma série de vazão utilizando a série histórica de precipitação diária coletada na estação de Rio do Sul (código 02749039). A série histórica de dados diários iniciou em 1978, e continua até o presente. A geração de vazões foi realizada para o período do monitoramento dos parâmetros de qualidade das águas, compreendido entre 2004 e 2008.

O mesmo procedimento ocorreu para a bacia do ribeirão Garcia. Para obtenção dos dados foram utilizadas duas estações localizadas na própria bacia, uma fluviométrica (código 83820000), instalada próxima ao exutório, e uma pluviométrica (código 2649009), situada próxima ao centro da bacia. A estação fluviométrica funcionou de 1929 a 1966, sendo posteriormente desativada. Na geração dos valores de vazão, foi utilizada a mesma estação pluviométrica, onde o período de simulação foi aquele do monitoramento dos parâmetros de qualidade das águas na bacia. Na bacia do ribeirão Concórdia a pesquisa desenvolvida pelo Projeto de Recuperação Ambiental e de Apoio ao Pequeno Produtor Rural (PRAPEM/MICROBACIAS) foi utilizada como base para a determinação das cargas lançadas aos corpos de água simulados (Santa Catarina, 2005).

Para a bacia do ribeirão Garcia foi determinado os lançamentos contínuos ao longo dos cursos de água, em função da população residente. Considerou-se, também, um tratamento com sistema individual, tipo tanque séptico – filtro anaeróbio (Metcalf e Eddy, 2003). Para as grandes plantas industriais e para a estação de tratamento de esgotos, foram utilizados valores quali-quantitativos fornecidos pelas próprias empresas responsáveis. Com objetivo de determinar a carga proveniente dos sistemas produtivos animais e dos esgotos domésticos, foram utilizadas dados bibliográficos (Arceivala, 1981; Metcalf e Eddy, 2003; Von Sperling, 2007).

As características hidráulicas dos corpos de água são necessárias como dados de entrada do modelo. O modelo hidráulico utilizado foi a equação de Manning, o qual requer o conhecimento da largura do canal, do coeficiente de rugosidade, da declividade longitudinal do canal e da inclinação dos taludes laterais. O modelo requer, igualmente, a altitude de cada seção simulada. Foram utilizados mapas com escala de 1:10.000, com curvas de níveis de 5 em 5 metros para determinação da declividade longitudinal dos canais. O coeficiente de rugosidade de Manning adotado, para ambas as bacias, foi igual a 0,1 (Chapra *et al.*, 2007). A largura dos canais, a profundidade e a inclinação dos taludes laterais foram determinadas com medições em campo, onde os cursos de água foram divididos em trechos ho-

mogêneos, e os dados levantados foram estendidos para regiões hidraulicamente similares.

A discretização dos canais ocorreu de forma a obter elementos de cálculo de 100 m, objetivando assim mais acurácia da simulação. A bacia do ribeirão Concórdia foi dividida em 6 trechos homogêneos, onde as características hidráulicas eram consideravelmente semelhantes. A bacia do ribeirão Garcia foi dividida em 13 trechos hidraulicamente homogêneos.

Procedimento de Calibração

Os coeficientes cinéticos do modelo Qual2k foram calibrados para as vazões simuladas pelo modelo hidrológico, nas datas de coleta dos parâmetros de qualidade das águas. Foram selecionadas aleatoriamente para cada bacia, quinze datas de coleta para calibração do modelo. A calibração foi realizada através de procedimento manual, onde foi adotado o coeficiente de determinação - CD (Von Sperling, 2007) para análise do desempenho do modelo. Para cada calibração efetuada, foram gerados valores correspondentes de CD de cada constituinte modelado. Foram calculados os valores médios, máximos, mínimos e o desvio padrão das amostras, a fim de caracterizá-las perante o conjunto de valores. O mesmo procedimento ocorreu com os coeficientes cinéticos obtidos pelo processo de calibração, resultando em valores médios, máximos, mínimos e desvios padrões.

Foram calibrados os coeficientes de reaeração (k_2), taxa de oxidação da DBO rápida (k_{dc}), velocidade de sedimentação do fósforo inorgânico e orgânico (v_{ip}) e (v_{op}), taxa de hidrólise do fósforo orgânico (k_{hp}), taxa de desnitrificação do nitrato (k_{dn}), coeficiente de transferência e sedimentação por desnitrificação do nitrato (v_{di}), taxa de nitrificação da amônia (k_{na}), a taxa de hidrólise e a velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico (k_{hn}) e (v_{on}), respectivamente, e por fim a taxa de decaimento de patógenos (k_{dx}).

Para cada data, foi ajustado, em cada trecho do curso de água, um conjunto de valores diferentes de coeficientes cinéticos. Isso implica na obtenção de valores de coeficientes em função da vazão escoada no trecho. Desta forma têm-se séries de valores de coeficientes cinéticos que podem ser correlacionados com as séries de vazões escoadas. Os coeficientes de reaeração foram comparados com aqueles estimados com as equações apresentados no Quadro 1.

Quadro 1 - Modelos de cálculo do coeficiente de reatuação k_2 a 20°C.

Equação	Autores (ano)	Equação	Faixa de aplicação
(1)	Owens <i>et al.</i> (1964)	$k_2 = 5,3U^{0,67}H^{-1,85}$	$0,05 < U < 0,15$
(2)	Cadwallader e McDonnell (1969)	$k_2 = 186(SU)^{0,5}H^{-1}$	$0,07 < U < 0,65$
(3)	Tsivoglou e Wallace (1972)	$k_2 = 31,6U(1000S)$	$Q < 0,3$
		$k_2 = 15,4U(1000S)$	$Q > 0,3$
(4)	Tsivoglou e Neal (1976)	$k_2 = 31200SU$	$Q < 0,28$
		$k_2 = 15200SU$	$Q > 0,28$
(5)	Melching e Flores (1999)	$k_2 = 517(US)^{0,524}Q^{-0,242}$	$Q < 0,556$
		$k_2 = 596(US)^{0,528}Q^{-0,136}$	$Q > 0,556$

onde U é a velocidade, em $m.s^{-1}$; H é a profundidade, em m; Q é a vazão, em $m^3.s^{-1}$; S é a declividade, em $m.m^{-1}$. Adaptado de: Cox (2003); Jha et al. (2004); Chapra et al. (2007).

Somente foram selecionados os modelos de cálculo que apresentam faixas de aplicação que comportam as características hidráulicas dos ribeirões estudados. O objetivo é discutir as implicações da estimativa dos coeficientes cinéticos no início do processo de modelização da qualidade de águas em cursos de águas naturais.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Estimativa dos dados quantitativos

Nas Figuras 2 e 3 são apresentados os hidrogramas de vazões observadas e simuladas para os ribeirões Garcia e Concórdia. Na bacia do ribeirão Garcia, o hidrograma de vazões simuladas apresentou boa aderência aos valores observados.

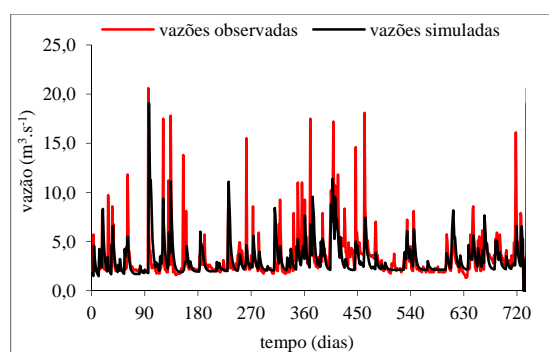


Figura 2 - Vazões observadas e simuladas para a bacia do ribeirão Garcia.

Em períodos de máxima, o modelo superestimou as vazões, em períodos de mínimos, os valores calculados apresentaram maior aderência aos dados observados.

A calibração do modelo para a bacia do ri-

beirão Concórdia apresentou resultados satisfatórios, onde a melhoria no ajuste foi dificultada pela escassez de dados pluviométricos e, por eventuais ausências de dados de vazões.

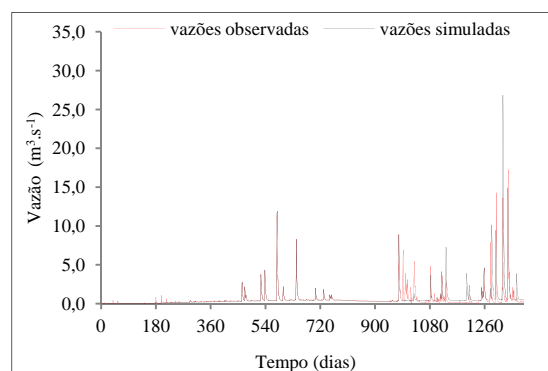


Figura 3 - Vazões observadas e simuladas para a bacia do ribeirão Concórdia.

Após o procedimento de calibração do modelo hidrológico, os parâmetros ajustados foram utilizados para geração das séries vazões nos períodos em que ocorreram os monitoramentos de qualidade da água, nas duas bacias hidrográficas.

Calibração do modelo de qualidade de água

A Tabela 1 apresenta os valores médios, mínimos, máximos e desvio padrão de coeficiente de determinação (CD) para cada constituinte, nas duas bacias. Com exceção do constituinte fósforo orgânico, a bacia do ribeirão Garcia apresentou valores elevados de coeficiente de determinação, indicando que o procedimento de calibração foi adequado. Os valores médios foram de 0,968 na bacia do ribeirão Garcia e de 0,924 na bacia do ribeirão Concórdia.

Tabela 1 - Coeficientes de determinação (CD) obtidos pelo processo de calibração.

Valores obtidos		DBO _u	Oxigênio Dissolvido	Nitrogênio Total	Fósforo I-norgânico	Fósforo Orgânico	Coliformes Termotolerantes
Bacia do Ribeirão Garcia	Mínimo	0,957	0,766	0,952	0,834	0,418	0,958
	Máximo	0,998	0,995	0,998	0,999	0,999	0,986
	Média	0,989	0,945	0,988	0,978	0,934	0,971
	DP	0,010	0,076	0,014	0,044	0,146	0,008
Bacia do Ribeirão Concórdia	Mínimo	0,656	0,124	0,672	0,970	0,956	0,791
	Máximo	0,999	0,994	0,999	0,999	0,999	0,994
	Média	0,950	0,766	0,943	0,993	0,990	0,902
	DP	0,085	0,222	0,087	0,007	0,012	0,049

Tabela 2 - Valores médios, mínimos, máximos e desvios padrões dos coeficientes cinéticos.

Coeficientes	Bacia do Ribeirão Garcia				Bacia do Ribeirão Concórdia			
	Média (d ⁻¹)	DP (d ⁻¹)	Mínimo (d ⁻¹)	Máximo (d ⁻¹)	Média (d ⁻¹)	DP (d ⁻¹)	Mínimo (d ⁻¹)	Máximo (d ⁻¹)
k ₂	63,49	32,70	1,00	98,00	66,63	29,24	7,00	98,00
k _{dc}	1,69	3,20	0,01	30,00	21,41	20,73	0,02	70,00
k _{hp}	0,82	0,87	0,01	5,00	0,16	0,20	0,01	0,89
v _{op}	0,56	0,73	0,01	4,90	0,18	0,23	0,01	0,90
v _{ip}	1,84	1,60	0,01	5,60	0,24	0,28	0,01	0,94
k _{hn}	5,20	9,51	0,01	40,00	3,27	5,62	0,01	29,00
v _{on}	5,20	9,61	0,01	41,10	3,40	5,90	0,01	28,00
k _{na}	5,32	9,64	0,01	42,19	3,42	5,60	0,01	26,00
k _{dn}	5,26	9,63	0,01	41,22	3,45	6,19	0,01	31,00
v _{di}	5,05	9,12	0,01	41,00	3,48	6,64	0,01	38,00
k _{dx}	9,58	1,80	4,00	11,00	9,61	4,30	4,30	12,70

onde (k₂) coeficiente de reaeração, (k_{dc}) taxa de oxidação da matéria orgânica, (k_{hp}) taxa de hidrólise do fósforo orgânico, (v_{op}) velocidade de sedimentação do fósforo orgânico, (v_{ip}) velocidade de sedimentação do fósforo inorgânico, (k_{hn}) taxa de hidrólise do nitrogênio orgânico, (v_{on}) velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico, (k_{hp}) taxa de hidrólise do fósforo orgânico, (k_{na}) taxa de nitrificação, (k_{dn}) taxa de desnitrificação, (v_{di}) transferência e sedimentação por desnitrificação do nitrato e (k_{dx}) taxa de decaimento dos coliformes termotolerantes.

Os constituintes que apresentaram maiores valores de CD, na bacia do ribeirão Concórdia, foram o fósforo orgânico e inorgânico, com médias de 0,990 e 0,993, respectivamente. Na bacia do ribeirão Garcia, a DBO_u e o nitrogênio total apresentaram valores superiores aos demais, com médias de 0,989 e 0,988. As piores médias ocorreram para o oxigênio dissolvido (0,766) e para coliformes termotolerantes (0,902), ambos na bacia do ribeirão Concórdia.

Coeficientes calibrados

Os valores de coeficiente obtidos no processo de calibração são apresentados na Tabela 2. O

desvio padrão ocorrido para todos os coeficientes foi relativamente alto, demonstrando grande diferenciação entre os trechos e suas características hidrodinâmicas.

Os coeficientes relacionados às reações do fósforo e do nitrogênio total, em ambas as bacias, apresentaram valores superiores aos apresentados por Von Sperling (2007). Para o coeficiente de reaeração, a taxa de oxidação e a taxa de decaimento de coliformes termotolerantes, a bacia do ribeirão Concórdia apresentou valores mais elevados. Para o restante dos coeficientes, ocorreu o inverso, a bacia do ribeirão Garcia resultou nos maiores valores dos coeficientes.

A taxa de oxidação da matéria orgânica representa a velocidade do consumo de oxigênio devido à respiração dos microrganismos decompositores da matéria orgânica presente (Cox, 2003). O valor médio, para a bacia do ribeirão Concórdia, obtido para o k_{dc} foi de 21,41 d⁻¹, e de 1,69 d⁻¹ para a bacia do ribeirão Garcia, mostram que as reações de degradação da matéria orgânica são mais rápidas no sistema fluvial da bacia rural do que na bacia urbana. Valores que variam de 0,12 a 3,40 d⁻¹, foram encontrados para o rio Meia Ponte e para a bacia do alto Iguaçu, respectivamente (Baumle, 2005; Brandelero et al., 2010).

Isso permite supor que interferentes presentes em águas urbanas, reduzem o processo de degradação da matéria orgânica biodegradável, ou que outros componentes químicos não considerados podem interferir no processo descrito pelo coeficiente k_{dc} .

Os coeficientes obtidos na calibração do fósforo, para a bacia do ribeirão Garcia, foram superiores aos obtidos para a bacia do ribeirão Concórdia, apresentando taxas médias das reações entre as duas bacias superior a 5 vezes. É observado que as reações de hidrólise do fósforo orgânico e de sedimentação do fósforo inorgânico na bacia urbana se desenvolvem com velocidades mais elevadas do que aquelas da bacia rural.

Embora escasso naturalmente, o fósforo ocorre em corpos receptores por conta do aporte oriundo de várias atividades antrópicas. A drenagem pluvial de áreas agrícolas e de áreas urbanas pode contribuir para a elevação da concentração de fósforo em corpos de água, além das cargas pontuais, como esgotos domésticos e efluentes industriais. As reações de desnitrificação também são mais rápidas na bacia urbana, mas as relações entre as taxas médias é da ordem de 2 vezes. As águas residuárias normalmente são a maior e mais importante fonte de nitrogênio em cursos de água. São diferentes as formas que o nitrogênio se encontra no esgoto bruto. Mas, predominantemente, apresenta-se em sua forma orgânica e/ou amônia (Von Sperling, 2007). Por ser resultado da presença de nitrogênio, em suas diferentes formas, as taxas e coeficientes k_{hn} , v_{on} , k_{na} , k_{dn} e v_{di} , representam as cinéticas de primeira ordem, onde as velocidades das reações são proporcionais as concentrações das substâncias consideradas.

Os resultados mostram que valores obtidos para a bacia urbana são superiores àqueles da bacia rural. Além disso, condições ambientais, como a presença de compostos tóxicos, pH, temperatura, a própria concentração de nitrogênio e ácido nitroso,

podem ser interferentes significativos nos processos de nitrificação e desnitrificação (Metcalf e Eddy, 2003).

Segundo Chapra *et al.* (2007), a alcalinidade apresenta influência nos processos nitrificantes e desnitrificantes, podendo diminuir a ocorrência do primeiro e aumentar o valor do segundo. Além de interferir nos processos que envolvem o nitrogênio, a alcalinidade pode modificar o comportamento do coeficiente envolvido na hidrólise do fósforo orgânico, k_{hp} , diminuindo seu valor.

Coefficiente de reaeração: Calibração e determinação empírica

Uma forma de obter os valores de coeficientes cinéticos, em especial, o coeficiente de reaeração, é a utilização de modelos empíricos, obtidos através de experimentos em laboratório ou em campo.

Deve-se ressaltar a importância de que as características hidráulicas modeladas apresentem similaridade nas características do corpo de água que originou a equação (Cox, 2003; Jha *et al.*, 2004).

Segundo Von Sperling, (2007) os modelos baseados nos dados hidráulicos de cursos de água, em resposta as suas próprias origens, possuem faixas de aplicação. Ou seja, cada equação responde, teoricamente, a uma faixa de condições hidráulicas específicas, não sendo eficientes em condições diferentes. Utilizando os modelos empíricos constantes do Quadro 1, os coeficientes de reaeração foram calculados e, posteriormente, comparados com os valores obtidos pela calibração manual. Os valores de k_2 obtidos pelas equações de Tsvoglou e Wallace (1972) e Tsvoglou e Neal (1976), foram significativamente superiores aos demais, para ambos os ribeirões. O comportamento ao longo dos trechos simulados encontra-se na Figura 4.

Os valores encontrados nos processo de calibração, para ambos os ribeirões, apresentaram semelhança com os resultados apresentados por Kondageski e Fernandes (2009), os quais, calibrando o modelo com um algoritmo genético na bacia do rio Palmital, obtiveram médias que variaram de 6,877 a 208,217 d⁻¹, com máximos de 528,903 d⁻¹.

Nota-se que os valores calibrados de k_2 apresentam-se na faixa intermediária do eixo “y”, com exceção dos trechos finais dos corpos de água, os valores obtidos pela calibração ficaram acima dos valores calculados pelos modelos empíricos. Nota-se também que a diferença entre os valores calculados

é relativamente grande, sugerindo valores diferentes para as mesmas condições hidráulicas impostas.

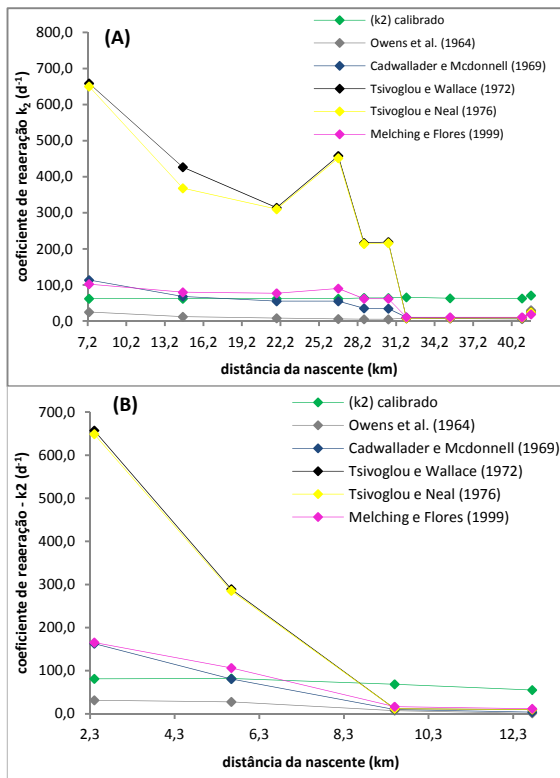


Figura 4 - Valores obtidos pela calibração e os valores calculados para o coeficiente de reaeração k_2 , nas bacias A) do Ribeirão Garcia e B) do Ribeirão Concórdia.

O ribeirão Garcia apresenta, entre o km 32 e a foz, dados calibrados que sugerem valores muito acima de todos os modelos empíricos, justamente na região em que todos os modelos apresentam alto grau de compatibilidade entre si. Nesta parte do ribeirão ocorre grande aporte de esgoto sanitário, ou seja, as características químicas e biológicas da água são altamente afetadas neste trecho.

Através da calibração, na bacia do ribeirão Concórdia apresentou coeficientes cinéticos superiores nos trechos finais do curso de água, repetindo o mesmo comportamento na bacia do ribeirão Garcia.

Na bacia do ribeirão Concórdia, o uso e ocupação do solo evolui de forma difusa e gradativa de montante para jusante, ocorrendo aportes de nutrientes e compostos químicos que podem inter-

ferir nos processos cinéticos.

A Tabela 3 apresenta o coeficiente de Pearson da correlação entre os valores calibrados e os calculados a partir dos modelos empíricos.

A coluna (a), que representa a calibração, é a coluna que apresenta os menores coeficientes, sugerindo baixa relação desta com os modelos empíricos. As equações (2), (3), (4) e (5) apresentam valores de coeficientes de Pearson relativamente altos, e demonstram alta compatibilidade entre os valores calculados por esses modelos. Ocorre que para estes modelos onde existe alta aderência, as variáveis independentes são as mesmas, a velocidade do escoamento e a declividade do corpo de água.

Considerando que os modelos dispostos na Tabela 3 são recomendados para faixas de condições hidráulicas semelhantes, os valores de k_2 encontrados deveriam, por consequência serem também semelhantes. Enquanto que a velocidade e a profundidade média são fatores independentes e relevantes para algumas equações, para outras, a relevância está na declividade, ou até mesmo na vazão escoada. Esta diferença na concepção das equações resultou valores discrepantes em certos casos e, muito próximos em outros, dependendo sempre de quais eram as variáveis independentes.

Mesmo não tendo valores de coeficientes de Pearson significativos, a calibração na bacia do ribeirão Garcia apresentou valores mais próximos dos obtidos com as equações, quando comparado aos resultados da bacia do ribeirão Concórdia. Contudo, as equações apresentaram coeficientes de Pearson mais próximos, quando comparadas entre si, para a bacia do ribeirão Concórdia, demonstrando maior agrupamento dos valores obtidos. Isto permite dizer que as equações utilizadas para determinar o coeficiente de reaeração se adaptaram melhor às características hidráulicas na bacia do ribeirão Concórdia.

Mesmo tendo condições hidráulicas que permitem a utilização dos mesmos modelos de cálculo, as bacias estudadas possuem uso e ocupação espacial diferenciado. A bacia do ribeirão Concórdia caracteriza-se por ser rural e composta de pequenas propriedades, com uso do solo composto por agricultura anual, pastoreio e áreas com mata nativa e florestas plantadas. A bacia do ribeirão Garcia apresenta elevado grau de urbanização, recebendo despejos indústrias e domésticos em quase a totalidade de sua extensão. Enquanto a primeira recebe cargas pequenas e difusas ao longo de seus canais, a segunda recebe altas cargas pontuais, modificando assim as características da água ao longo do ribeirão.

Tabela 3 - Coeficiente de Pearson da correlação entre para os valores de k_2 calibrados e calculados. (A parte superior da tabela representa a bacia do ribeirão Garcia, e parte inferior, a bacia do ribeirão Concórdia).

Equação	(a)	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
(a)	1,000	0,351	0,333	0,196	0,218	0,339
(1)	0,158	1,000	0,837	0,139	0,155	0,578
(2)	0,080	0,478	1,000	0,487	0,885	0,869
(3)	0,053	0,182	0,887	1,000	0,985	0,932
(4)	0,047	0,185	0,506	0,987	1,000	0,813
(5)	0,014	0,105	0,864	0,802	0,931	1,000

onde (a) é k_2 calibrado; (1) equação de Cadwallader e McDonnell (1969); (2) equação de Melching e Flores (1999); (3) equação de Owens *et al.* (1964); (4) equação de Tsvoglou; Neal (1976); (5) equação de Tsvoglou e Wallace (1972).

CONCLUSÃO

O processo de calibração do modelo Qual2k apresentou resultados significativos, demonstrando alta capacidade de adaptação aos sistemas modelados, bem como dados de monitoramento com alto grau de confiabilidade. Mesmo apresentando alta aderência entre os dados observados e os calculados, os coeficientes cinéticos resultantes nem sempre foram condizentes com os encontrados em literatura.

Quando foram comparados os comportamentos dos coeficientes cinéticos em cada bacia estuda, foi constatada grande diferença. Considerando a diferença substancial que existe entre o uso e ocupação do solo em cada bacia, pode-se notar que características exógenas podem estar interferindo na velocidade das reações que ocorrem nos canais fluviais.

Os modelos empíricos utilizados para determinar o coeficiente de reaeração apresentaram valores diferentes dos encontrados com a calibração, para ambas as bacias. Nota-se uma aproximação maior entre os valores calculados para a bacia do ribeirão Concórdia, demonstrando maior agrupamento dos coeficientes obtidos.

AGRADECIMENTO

Agradecemos MCT/FINEP/CT-HIDRO-IGRH 01/2007, Projeto intitulado “Disponibilidade Hídrica para Aplicação dos Instrumentos de Gestão de Recursos Hídricos. Quantidade e Qualidade de Água”, convênio 2076/07, pelo financiamento de

pesquisa, a CAPES pelas bolsas do primeiro e terceiro autores.

REFERÊNCIAS

- ARCEIVALA, S. J. *Wastewater Treatment and Disposal*. New York: Marcel Dekker, 1981. 292 p.
- BAUMLE, A. M. B. *Avaliação de benefícios econômicos da despoluição hídrica: efeitos de erros de calibração de modelos de qualidade de água*. 2005. 262 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Recursos Hídricos e Ambiental). Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2005
- BONGARTZ, K.; STEELE, T. D.; BABOROWSKI, M.; LINDENSCHMIDT, K. Monitoring, assessment and modelling using water quality data in the Saale River Basin, Germany. *Environmental Monitoring and Assessment*, v. 135, p. 227-240, 2007.
- BOXALL, J. B.; GUYMER, I. Longitudinal mixing in meandering channels: new experimental data set and verification of a predictive technique. *Water Research*, v. 41, n. 2, p. 341-354, Jan 2007.
- BRANDELERO, S. M.; SIQUEIRA, E. Q.; LIMA, A. C. B. Desoxigenação em água superficial de ambiente lótico. *Ambi-água*, Taubaté, v. 5, n. 1, p. 163-171, 2010.
- BRAVO, J. M.; ALLASIA, D.; TASSI, R.; MELLER, A.; COLLISCHONN, W.; TUCCI, C. E. M. *Manual de usuário do modelo hidrológico WIN_IPH2*. Versão 1.0. Porto Alegre: Rutinéia Tassi, 2006. 63 p.
- BROWN, L. C.; BARNWELL, Jr. T. O. *Computer program documentation for the enhanced stream water quality model*

- QUAL2E and QUAL2E-UNCAS. Report EPA/600/3-87/007. Georgia, USA: US Environmental Protection Agency, 1987.
- CADWALLADER, T. E.; MCDONNELL A. J. A multivariate analysis of reaeration data. *Water Research*, v. 3, p. 731-742, 1969.
- CHAPRA, S. C.; PELLETIER, G. J.; TAO, H. *QUAL2K: A modeling framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.07: Documentation and Users Manual*. Medford, MA, USA: Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, 2007. Disponível em: <<http://www.epa.gov/Athens/wwwqtsc/html/qual2k/html>>. Acesso em: 23 out. 2011
- COX, B. A. A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers. *The Science of the Total Environment*, v. 314-316, p. 335-377, Oct 2003.
- FAN, C.; KO, CH.; WANG, WS. An innovative modeling approach using Qual2K and HEC-RAS integration to assess the impact of tidal effect on River Water quality simulation. *Journal of Environmental Management*, v. 90, n. 5, p. 1824-1832, Apr 2009.
- FRÉMAUX, B. *Eléments de cinétique et de catalyse*. Paris: Lavoisier, 1989. 220 p.
- JHA, R.; OJHA, C. S. P.; BHATIA, K. K. S. A supplementary approach for estimating reaeration rate coefficients. *Hydrological Processes*, v. 18, p. 65-79, 2004.
- KANNEL, P. R.; LEE, S.; LEE, Y. -S.; KANEL, S. R.; PELLETIER, G. J. Application of automated QUAL2Kw for water quality modeling and management in the Bagmati River, Nepal. *Ecological Modelling*, v. 202, n. 3-4, p. 503-517, 2007.
- KONDAGESKI, J. H.; FERNANDES, C. V. S. Calibração de Modelo Matemático de Qualidade da Água Utilizando Algoritmo Genético: Estudo de caso do Rio Palmital, PR. *RBRH – Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 14, n. 1, p. 63-73, 2009.
- LONGE, E. O.; OMOLE, D. O. Analysis of pollution status of river Illo, Ota, Nigeria. *Environmentalist*, v. 28, n. 4, p. 451-457, 2008.
- MARSILI-LIBELLI, S.; GIUSTI, E. Water quality modelling for small river basins. *Environmental Modelling & Software*, v. 23, n. 4, p. 451-463, Apr 2008.
- MCINTYRE, N. R.; WAGENER, T.; WHEATER, H. S.; CHAPRA, S. C. Risk-based modelling of surface water quality: a case study of the Charles River, Massachusetts. *Journal of Hydrology*, Amsterdam, v. 274, n. 1-4, p. 225-247, Apr 2003.
- MELCHING, C. S.; FLORES, H. E. Reaeration equations derived from U.S. Geological Survey Database. *Journal of Environmental Engineering*, v.125, n. 5, p. 407-414, May 1999.
- METCALF; EDDY. *Wastewater engineering: treatment and reuse*. 4. ed. Boston: McGraw-Hill, 2003. 1819 p.
- OWENS, M.; EDWARDS, R. W.; GIBBS, J. W. Some reaeration studies in streams. *International Journal of Air and Water Pollution*, v. 8, n. 8/9, p. 469-486, 1964.
- PALIWAL, R.; SHARMA, P.; KANSAL, A. Water quality modelling of the river Yamuna (India) using QUAL2E-UNCAS. *Journal of Environmental Management*, v. 83, n. 2, p. 131-144, Apr 2007.
- PARK, S. S.; LEE, Y. S. A water quality modeling study of the Nakdong River, Korea. *Ecological Modelling*, v. 52, n. 1, p. 65-75, Jun 2002.
- PARKER, G. W; GAY, F. B. *A procedure for estimating reaeration coefficients for Massachusetts streams*. Boston: U.S. Geological Survey, Division of water pollution, 1987.
- PELLETIER, G. J.; CHAPRA, C. S.; TAO, H. QUAL2Kw – a framework for modeling water quality in streams and rivers using genetic algorithm for calibration. *Environmental Modelling & Software*, v. 21, n. 3, p. 419-425, Mar 2006.
- PINHEIRO, A.; BERTOLDI, J.; VIBRANS, A. C.; REFOSCO, J. C. Relação entre uso da terra da faixa ciliar e a qualidade das águas em uma bacia agrícola. In: CONGRESO INTERAMERICANO DE INGENIERIA SANITARIA Y AMBIENTAL DE AIDIS, 31., 2008, Santiago. *Anais...* Santiago: AIDIS, 2008. p. 1-7.
- RAUCH W.; HENZE M.; KONCSOS L.; REICHERT P.; SHANAHAM P.; SOMLYODY L.; VANROLLEGHEM P. River water quality modelling: I. State of the art. *Water Science Technology*, v. 38, n. 11, p. 237-244, 1998.
- SANTA CATARINA (Estado). Empresa de pesquisa agropecuária e Extensão Rural de Santa Catarina. *Relatório Síntese: monitoramento socioeconômico*. Santa Catarina, 2005. 57 p.
- TSIVOGLU, E. C.; NEAL, L. A. Tracer Measurement of Reaeration. III. Predicting the Reaeration Capacity of Inland Streams. *Journal of the Water Pollution Control Federation*, v. 48, n. 12, p. 2669-2689, Dec 1976.

TSIVOGLU, E. C.; WALLACE, J. R. *Characterizing stream reaeration capacity*. Rep. No. EPA-R3-72-012. Washington, D.C.: U.S. Environmental Protection Agency, 1972.

VON SPERLING, M. *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, UFMG, 2007. 588 p.

WILCOCK, R. J. Study of River Reaeration at different flow Rates. *Journal of Environmental Engineering*, v. 114, n. 1, p. 91-105, Feb 1988.

Analysis of Reaeration and Kinetic Coefficients Used in the Simulation of Water Quality in Rivers

ABSTRACT

We evaluated the kinetic coefficients and reaeration used in the simulation of water quality in the river network of two basins. The model chosen for simulation was Qual2k. Water quality data sets collected at 6 points in the Concordia basin and 4 points in the Garcia River basin are used. The quantitative information was estimated by simulation using hydrologic model WIN_IPH2 precipitation transformation of runoff. The calibration procedure used the coefficient of determination. Ten kinetic coefficients, plus the reaeration coefficient were calibrated. The coefficients were calibrated for each sampling date. The adjusted kinetic coefficients were correlated with the explanatory variables, confirming that the flow reasonably explains the reaeration coefficient. Concentrations of these constituents influenced the kinetic coefficients.
Key-words: *Water quality, simulation models, kinetic coefficients.*