



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
"JULIO DE MESQUITA FILHO"
INSTITUTO DE GEOCIÊNCIAS E CIÊNCIAS EXATAS



Trabalho de Formatura

Curso de Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL

ESTUDO COMPARATIVO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DE
ÁGUAS SUPERFICIAIS

Alexandre Kniepert Troyano

Rio Claro (SP)
2010

ALEXANDRE KNIEPERT TROYANO

**ESTUDO COMPARATIVO DE MODELOS
MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DE ÁGUAS
SUPERFICIAIS**

Trabalho de Formatura apresentado ao Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Campus de Rio Claro (SP), da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau de Engenheiro Ambiental.

Orientador: Samuel Conceição de Oliveira

Rio Claro (SP)
2010

ALEXANDRE KNIEPERT TROYANO

ESTUDO COMPARATIVO DE MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DE ÁGUAS SUPERFICIAIS

*Trabalho de Formatura apresentado ao Instituto
de Geociências e Ciências Exatas, Campus de Rio
Claro (SP), da Universidade Estadual Paulista
Júlio de Mesquita Filho, para obtenção do grau
de Engenheiro Ambiental.*

Comissão Examinadora

_____ (orientador)

Rio Claro, ____ de _____ de _____.

assinatura do(a) aluno(a)

assinatura do(a) orientador(a)

551.49 Troyano, Alexandre Kniepert
T864e Estudo comparativo de modelos matemáticos de qualidade
de águas superficiais / Alexandre Kniepert Troyano. - Rio
Claro : [s.n.], 2010
61 f. : il., figs., quadros

Trabalho de conclusão de curso (Engenharia Ambiental) -
Universidade Estadual Paulista, Instituto de Geociências e
Ciências Exatas
Orientador: Samuel Conceição de Oliveira

1. Águas subterrâneas. 2. WASP. 3. QUAL2K. I. Título.

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 OBJETIVO	1
1.2 METODOLOGIA E ETAPAS DO TRABALHO.....	2
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
2.1 QUALIDADE DAS ÁGUAS	3
2.1.1 <i>Introdução</i>	3
2.1.2 <i>Parâmetros</i>	4
2.1.3 <i>Legislação Ambiental</i>	6
2.2 DEGRADAÇÃO AERÓBIA EM CORPOS D'ÁGUA	7
2.2.1 <i>Processo de Autodepuração</i>	7
2.2.2 <i>Balanço de Oxigênio Dissolvido</i>	9
2.3 MODELAGEM	12
2.3.1 <i>Os Modelos de Qualidade de Água e sua Evolução</i>	14
2.3.2 <i>Cinética de Oxigenação e de Reaeração</i>	15
2.3.3 <i>Sedimentação da Matéria Orgânica</i>	17
2.3.4 <i>Nitrificação</i>	18
2.3.5 <i>Fósforo</i>	19
3 MODELOS ESTUDADOS	22
3.1 INTRODUÇÃO	22
3.2 QUAL2E E QUAL2K	23
3.3 CE-QUAL-W2	25
3.4 WASP.....	31
3.5 CE-QUAL-ICM	37
4 ESTUDOS DE CASO E DISCUSSÃO	42
5 CONCLUSÃO	50
6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	52

RESUMO

Modelos de qualidade de águas superficiais têm se desenvolvido a partir de 1925, quando Streeter e Phelps elaboraram equações de primeira ordem que representam o balanço de DBO e OD. Desde então, e principalmente desde a década de 60, surgiram novas tecnologias computacionais que possibilitaram a criação de modelos cada vez mais complexos, os quais buscam representar, através da matemática, fenômenos naturais como a eutrofização e autodepuração de rios. Têm como objetivo principal se entender as interações envolventes nos ecossistemas aquáticos e, a partir deste entendimento, servir de suporte para elaboração de planos de gerenciamento de recursos hídricos e nas tomadas de decisão frente à projetos de caráter ambiental e de manejo de tais recursos. A partir disso torna-se de fundamental importância se compreender as estruturas destes modelos para que se possa escolher o mais apropriado ao corpo d'água em estudo. Enquanto modelos unidimensionais, como o QUAL2K, são mais apropriados para rios longos e estreitos, modelos bi (CE-QUAL-W2) ou tridimensionais, como WASP e CE-QUAL-ICM, são mais adequados para corpos d'água mais largos e mais lânticos, com alta taxa de mistura lateral e/ou vertical. Além disso, quanto maior a complexidade do meio a ser estudado, mais complexo será o modelo, o que exige maiores gastos e tempo para que o modelo seja aplicado, influenciando então na escolha do modelo a ser aplicado.

Palavras-chave: águas superficiais, modelos de qualidade de água, WASP, CE-QUAL-W2, CE-QUAL-ICM, QUAL2K

ABSTRACT

Surface water quality models have been developed since 1925, when Streeter e Phelps created first order equations that represent the balance between DO and BOD. Since then, and specially after the '60s, new computational technologies evolved, making it possible to create more complex models, which try to represent, through mathematics, natural phenomena like eutrophication and rivers self-depuration. As main objective of such models is the understanding of aquatic systems and the relationship between them and the environment, so that it can support decision makers in creating water manage plans and in elaborating environmental projects of such resources. Regarding to that, it is of crucial importance the understanding of the models structures, so that one can choose the most appropriate model for the river in question. While one-dimensional models like QUAL2K are more appropriate for long and narrow rivers, bi- or tridimensional models (CE-QUAL-W2, WASP and CE-QUAL-ICM) are more commonly used in wide and slower rivers, with higher lateral and/or vertical mixes rates. Besides, the more complex is the river studied more complex the model should be, which demands more costs and time for the model to be applied.

Keywords: surface water quality models, WASP, CE-QUAL-W2, CE-QUAL-ICM, QUAL2K

Figura 2-1: Esquema de rotas do uso e disposição da água (fonte: Von Sperling, 2007)

Figura 2-2: Perfil de concentração de OD, matéria orgânica e bactérias nas cinco zonas de depuração (fonte: Von Sperling, 2007)

Figura 2-3: Fenômenos integrantes no balanço de OD em um rio (von Sperling, 2007)

Figura 2-4: Esquema dos termos envolvidos no balanço de massa em um reator

Figura 3-1: Segmentação de um rio no QUAL2K (Chapra et al, 2005)

Figura 3-2: estrutura dos modelos QUAL2E e QUAL2K (Fonte: Gonçalves, 2009)

Figura 3-3: Interface gráfica do CE-QUAL-W2

Figura 3-4: Arquivo batimétrico usado na represa El Cajon, México (Barlow, Clark e Obregon, Oliver, 2007)

Figura 3-5: Perfis de concentração de nitrogênio amoniacal simulados pelo CE-QUAL-W2 (Silva, G.V., 2009)

Figura 3-6: Grid do CE-QUAL-W2 (fonte: Wells, Scott A., 2002)

Figura 3-7: Divisão do rio em elementos assemelhando-se a caixas (fonte: EPA, 2009)

Figura 3-8: estrutura funcional do módulo de eutrofização do WASP (fonte: EPA, 2009)

Figura 3-9: Interface gráfica do WASP7

Figura 3-10: Janela de escolha de constantes a serem consideradas no modelo

Figura 3-11: Estrutura do modelo CE-QUAL-ICM (fonte: Cerco, Carl F. e Cole, Thomas, 1995)

Figura 4-1: Grid computacional gerado para a Chesapeake Bay (Ceco, Carl F. e Cole, Thomas M., 1994)

1 INTRODUÇÃO

A alta taxa de crescimento das cidades, o aumento populacional, sua distribuição no espaço e o desenvolvimento industrial têm levado a uma demanda muito grande de água. Os corpos d'água que abastecem as cidades são cada vez mais exigidos e recebem por dia muitas toneladas de efluentes sanitários e industriais.

Essa demanda cada vez maior por água têm exigido esforços governamentais para um planejamento mais adequado de seus diversos usos, de forma que possa satisfazer todas as esferas da sociedade. Para tanto, a Lei Federal de nº 9433 institui, em 1997, a Política Nacional dos Recursos Hídricos, a qual assegura à atual e às futuras gerações água em qualidade e disponibilidade suficientes por meio da utilização racional e integrada. Ainda em termos de legislação, a resolução CONAMA 357/2005 estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes e garante, assim, um controle da qualidade das águas nacionais para que estas cheguem às cidades de forma adequada para o abastecimento.

Nesse contexto, a modelagem matemática configura-se como uma ferramenta valiosa para simulação de parâmetros de qualidade da água, tais como a demanda bioquímica de oxigênio (DBO), o oxigênio dissolvido, a concentração de nitritos, nitratos e de fósforo, fornecendo informações a respeito dos impactos de despejos de efluentes industriais e sanitários no rio.

O ano de 1925 foi um marco para a modelagem de parâmetros de qualidade das águas. Streeter e Phelps desenvolveram um modelo com duas equações de primeira ordem que consideravam as concentrações de matéria biodegradada por oxidação e o fluxo de oxigênio proveniente da reaeração atmosférica. Com o tempo e, principalmente a partir da década de 60, quando houve um grande avanço na informática, foram desenvolvidos modelos cada vez mais complexos, que analisam um maior número de variáveis, simulando sistemas cada vez mais complexos e próximos do real, objeto de estudo do presente trabalho.

1.1 Objetivo

O objetivo principal deste trabalho é realizar um estudo comparativo de diferentes modelos de qualidade de águas superficiais e elaborar um banco de dados que possa auxiliar na escolha de determinado modelo para um corpo d'água, além de servir de

base para estudos posteriores.

Para tanto, foi feita uma análise de modelos matemáticos de qualidade das águas, visando compreender suas respectivas estruturas, variáveis e parâmetros e verificar suas principais aplicabilidades e limitações. Comparou-se também os principais aspectos de cada um, no que diz respeito à dimensionalidade, temporalidade e hidrodinâmica.

1.2 Metodologia e Etapas do Trabalho

O presente trabalho consiste em uma compilação de dados obtidos nas documentações dos modelos QUAL2K, CE-QUAL-W2, WASP e CE-QUAL-ICM, além de teses com estudos já feitos na área e trabalhos reais de aplicação dos modelos, a sua maioria nos Estados Unidos, onde diferentes modelos foram amplamente utilizados como ferramentas de controle de qualidade de corpos d'água. A partir da compilação destes dados foi feita uma análise geral e uma discussão da utilização de tais modelos em corpos d'água com diferentes características, a fim de servir como base para a escolha do modelo mais adequado para determinada situação.

Assim sendo, o presente trabalho possui, em sua revisão bibliográfica, os principais aspectos a se considerar quando do estudo da qualidade de água e da modelagem em si. O capítulo seguinte discutirá as características dos modelos escolhidos, suas estruturas e funcionamentos. No sexto capítulo foi feita uma discussão dos dados levantados, com o propósito de se chegar a uma conclusão quanto aos usos mais adequados para cada um dos modelos analisados. O sétimo capítulo constitui-se das conclusões obtidas a partir da discussão realizada.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Qualidade das Águas

2.1.1 Introdução

Segundo Von Sperling (2005), a qualidade de uma água existente é função das condições naturais e da ação do Homem, por meio do uso e ocupação do solo na bacia hidrográfica.

Mesmo em condições naturais, a água pode sofrer alterações por meio do escoamento superficial e infiltração no solo. Esses processos, típicas fontes difusas de poluição, ocorrem quando a água da chuva carrega consigo partículas, substâncias e impurezas do solo para um corpo d'água, sendo incorporados a ele sólidos em suspensão (ex: partículas de solo) e sólidos dissolvidos (ex: íons vindos da dissolução de rochas).

O uso e ocupação do solo pelo Homem interferem diretamente na qualidade das águas. Por meio do despejo de rejeitos sanitários e industriais, típicas fontes pontuais de poluição, assim como o processo de lixiviação do solo, típica fonte difusa, são alteradas inúmeras características físicas, químicas e biológicas dos corpos d'água.

A qualidade desejável para a água, por outro lado, é função do uso previsto para a água. O Homem usa a água para diversos fins, como abastecimento público ou industrial, irrigação, dessedentação de animais, recreação e lazer, navegação, diluição e transporte de despejos e etc. Dentre eles, o abastecimento urbano e o industrial estão diretamente associados a um tratamento previsto da água, em função de requisitos de qualidade mais exigentes.

Na figura 2-1, abaixo, verifica-se os caminhos da água quando do seu uso em zonas rurais e urbanas.



Figura 2-1: Esquema de rotas do uso e disposição da água (fonte: Von Sperling, 2007)

Na água estão presentes diversos tipos de substâncias que alteram o grau de pureza dela. Essas impurezas são de ordem física, química ou biológica.

De acordo com suas características físicas, os sólidos são divididos em suspensos (com partículas de $1\ \mu\text{m}$ a $10^3\ \mu\text{m}$), coloidais (com partículas de $10^{-3}\ \mu\text{m}$ a $1\ \mu\text{m}$) e dissolvidos (com partículas de $10^{-6}\ \mu\text{m}$ a $10^{-3}\ \mu\text{m}$). De acordo com suas características químicas, são divididos em orgânicos (voláteis) – representam uma estimativa da matéria orgânica nos sólidos - e inorgânicos (ou mineral), não voláteis. Entre as impurezas de ordem biológicas, citam-se restos de animais e vegetais, além de microorganismos como bactérias, protozoários e fungos, muitos deles patogênicos.

2.1.2 Parâmetros

A qualidade das águas é medida por meio de parâmetros pré-estabelecidos, podendo eles ser de natureza física, química ou biológica.

2.1.2.1 Parâmetros Físicos

Os parâmetros físicos fornecem uma primeira impressão de como está a situação de determinada água. À *turbidez* e à *cor* pode-se associar a presença de

efluentes sanitários ou industriais (sólidos dissolvidos), além de sólidos suspensos ou compostos encontrados no meio, como argilas, silte, ferro e manganês. A *temperatura* está relacionada ao grau de solubilidade dos gases. Além disso, a temperatura exerce influência na cinética das reações físicas, químicas e biológicas. A *condutividade* está relacionada à presença de ânions na água (cloretos e nitritos), podendo indicar poluição. *Sabor e odor* não representam obrigatoriamente riscos à saúde, mas podem estar relacionadas a despejos sanitários e industriais, indicando presença de substâncias potencialmente perigosas.

2.1.2.2 Parâmetros Químicos

Estes parâmetros são os normalmente analisados em laboratório e fornecem um quadro das características químicas da água. A partir dessas informações se determina o grau de poluição ou contaminação do meio.

A variação de *pH* pode ser influenciada pelo despejo de efluentes industriais e sanitários, mas não apresenta risco à saúde quando seu valor não é extremamente alto ou baixo. A *alcalinidade* não possui significado sanitário, mas é importante nos processos de tratamento de água para abastecimento, uma vez que água com elevada alcalinidade dificulta o tratamento e/ou correção de pH. A *dureza*, por sua vez, representada pela quantidade de íons Ca^{2+} e Mg^{2+} na água, também não apresenta problemas sanitários, mas está associada à incrustações em caldeiras, quando da precipitação desses íons nas tubulações. Pode causar sabor desagradável e ter efeitos laxativos. A presença de *ferro* e *manganês* origina-se, além de solos ricos nestes compostos (ex: latossolos), de fábricas de fundição ou baterias e é responsável pela coloração avermelhada, no caso de ferro, e coloração negra, no caso do manganês. *Cloretos* podem ser oriundos de águas utilizadas para irrigação, despejo de efluentes sanitários e industriais e conferem sabor salgado à água, o que pode indicar presença de matéria orgânica. *Fósforo total*, apesar de não apresentar problemas de ordem sanitária, proporciona o crescimento de algas e microrganismos, sendo responsável pelo processo de eutrofização nos corpos d'água. O *Nitrogênio* está diretamente associado ao processo de autodepuração de corpos d'água, implicando consumo de oxigênio dissolvido na água. Também influi no processo de eutrofização (na forma de NO_3^-). O *Oxigênio Dissolvido* é o principal parâmetro para caracterizar poluição por matéria orgânica, apresentando concentração de saturação de 9,2 mg/L a 20 °C. A *Demanda Bioquímica de Oxigênio* ($\text{DBO}_{5,20}$) representa uma medida indireta da

quantidade de matéria orgânica. Como referência, o esgoto sanitário possui por volta de 300 mg/L de $\text{DBO}_{5,20}$. A *Demanda Química de Oxigênio (DQO)* é a quantidade de oxigênio necessária para oxidação de matéria orgânica por meio de um agente químico (ex: dicromato de potássio). A presença de *micropoluentes inorgânicos* (mercúrio e cádmio, por exemplo) e *orgânicos* (defensivos agrícolas, por exemplo), indica o grau de contaminação da água e é considerada de alto risco para a saúde humana e da biota.

2.1.2.3 Parâmetros Biológicos

São microrganismos como bactérias e protozoários prejudiciais à saúde humana. Dentre eles estão os coliformes termotolerantes (*Escherichia coli*, por exemplo), *Streptococos fecais* e os protozoários *Cryptosporidium* e *Giardia sp.*

2.1.3 Legislação Ambiental

A legislação brasileira que diz respeito à qualidade das águas e ao gerenciamento delas é relativamente recente. Um grande avanço para um gerenciamento adequado dos corpos d'água nacionais ocorreu em 1997, com a Lei n. 9.433, que institui a Política Nacional de Recursos Hídricos e cria o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos. O grande objetivo da lei foi de unificar em um sistema órgãos federais, estaduais e municipais, a fim de utilizar racionalmente os recursos hídricos e assegurar à atual e às futuras gerações a necessária disponibilidade de água, reconhecendo ainda a água como um bem econômico.

Em relação à qualidade das águas, as principais leis que servem de referência neste trabalho são a Resolução CONAMA nº 357, de 17 de Março de 2005 e a Portaria nº 518 de 2004, do Ministério da Saúde.

A primeira dispõe sobre a classificação dos corpos d'água e estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes. As águas são divididas entre doce (salinidade $\leq 0,05\%$), salobras (salinidade entre 0,05% e 3%) e salinas (salinidade $\geq 3\%$). Dentro dessas categorias, há uma divisão de classes, incluindo classe especial e classes 1 a 4 para águas doces e classes 1 a 3 tanto para águas salobras como para salinas, totalizando 13 classes, de forma que a classe especial é de uso mais restritivo e a classe 4, menos restritivo, de acordo com a qualidade que se deseja manter. Ainda na resolução, é importante saber que um rio pode se tornar mais ou menos restritivo, de acordo com a pretensão de seu uso. Por exemplo, se se deseja um maior controle de emissão de poluentes em um rio, pode-se restringir seus padrões, ou, em outras

palavras, a sua classe. Sua classificação, porém, não garante a qualidade da água. Ela só é garantida se os padrões de lançamento atenderem aos padrões do corpo receptor.

A Portaria nº 518 de 2004, do Ministério da Saúde, estabelece os procedimentos e responsabilidades relativos ao controle e vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade. Nela são encontrados valores limites para, por exemplo, coliformes fecais, metais, agrotóxicos e compostos orgânicos, que afetam diretamente a qualidade da água para consumo humano.

2.2 Degradação Aeróbia em Corpos D'água

2.2.1 Processo de Autodepuração

É um processo de restabelecimento do equilíbrio no meio aquático, após as alterações induzidas por despejos de efluentes. De acordo com Nuvolari (2003), este processo engloba mecanismos como dispersão, diluição, sedimentação, restabelecendo o equilíbrio no que diz respeito à concentração de matéria orgânica (representado por DBO), oxigênio dissolvido (OD) e coliformes.

Importante ressaltar que, após esse processo, a água encontra-se depurada, mas não purificada. Ainda segundo o autor, o aumento excessivo da concentração de nitrogênio e fósforo (típico de despejos de efluentes sanitários), por exemplo, contribui para a formação de um ecossistema diferenciado, resultante do aumento da concentração de algas (fenômeno denominado eutrofização).

De acordo com von Sperling (2005), este processo ocorre em estágios correspondendo a cinco zonas a partir de uma fonte de lançamento: Zona de Águas Limpas, Zona de Degradação, Zona de Decomposição Ativa, Zona de Recuperação e Zona de Águas Limpas.

A primeira zona, de Águas Limpas, localiza-se à montante da emissão do efluente, apresenta as características do efluente antes do lançamento do mesmo.

A segunda zona, de Degradação, ocorre logo após o ponto de lançamento do efluente e possui elevada concentração de matéria orgânica complexa. O processo de decomposição da matéria orgânica ainda é reduzido, assim como o consumo do oxigênio dissolvido. Inicia-se a proliferação de bactérias aeróbias e um aumento na taxa de produção de gás carbônico como consequência da respiração das bactérias. Com o aumento de CO₂, convertido em ácido carbônico na água, há diminuição do pH

da água, tornando-a mais ácida (**I**). O nitrogênio apresenta-se ainda na sua forma complexa (N₂).

A diminuição do pH da água se dá por meio do aumento da concentração de íons H⁺, da seguinte forma:



A terceira zona, de Decomposição Ativa, é caracterizada pela redução total, ou quase total, da população de peixes e outros seres aeróbios. Nesta zona, a taxa de degradação microbiana e os níveis de consumo de oxigênio estão no seu auge, podendo levar o corpo d'água a um estado anóxico, com ausência de oxigênio. O número de bactérias decompositoras começa a diminuir, principalmente devido ao fato de que começa a haver menos alimento disponível. Na ausência de oxigênio, inicia-se a decomposição por bactérias anaeróbias, podendo gerar como subprodutos o metano, gás sulfídrico, mercaptanas e outros, responsáveis por maus odores. O nitrogênio apresenta-se ainda na forma orgânica e também na forma de amônia.

A quarta zona, de Recuperação, inicia-se o processo de regeneração do meio às suas condições naturais. O consumo de oxigênio é menor, devido à diminuição da atividade microbiana. Isso, juntamente com a introdução de oxigênio por reaeração, promove um aumento nas concentrações deste gás na água. A amônia é convertida a nitritos e esses a nitratos, além da formação de fosfatos, esses dois últimos servindo de alimento para algas. Assim, o número de algas aumenta, gerando ainda mais oxigênio, pela fotossíntese (além de uma conseqüente diminuição de gás carbônico), e uma diversificação maior de microorganismos heterotróficos que se alimentam delas. Dessa forma, com o aumento de oxigênio dissolvido e a diminuição de gás carbônico, o pH tende a aumentar.

No que diz respeito ao oxigênio dissolvido, matéria orgânica e proliferação bacteriana, o corpo d'água volta ao seu estado inicial. Há a predominância das formas completamente oxidadas dos compostos minerais e a concentração de oxigênio está próxima da saturação. A população de peixes e outros seres aeróbios mais sensíveis à redução de oxigênio retomam seu crescimento. A figura 2-2 abaixo representa as curvas de OD, bactérias e matéria orgânica nestas 5 zonas.

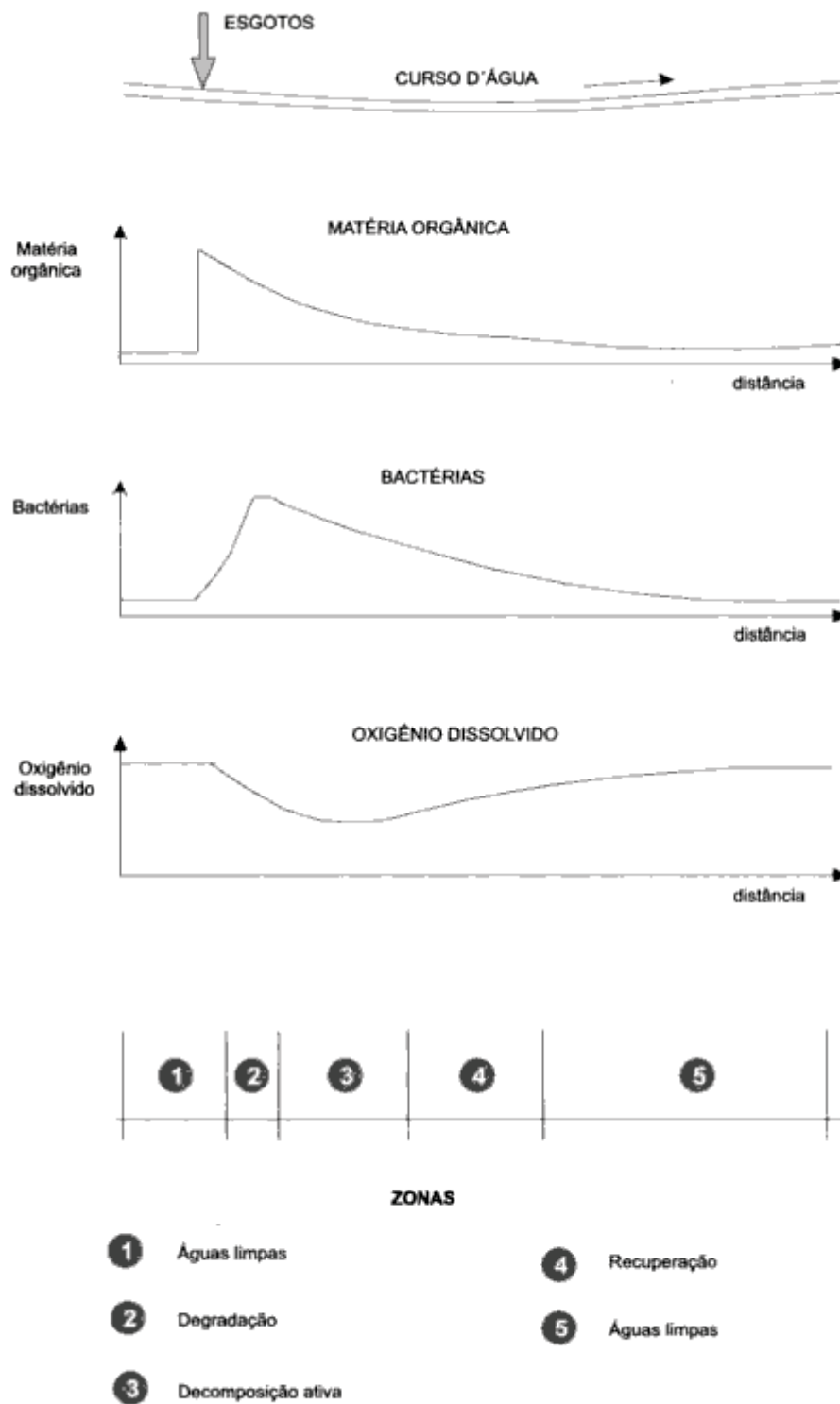


Figura 2-2: Perfil de concentração de OD, matéria orgânica e bactérias nas cinco zonas de depuração (fonte: Von Sperling, 2007)

2.2.2 Balanço de Oxigênio Dissolvido

A partir do exposto anteriormente, pode-se considerar que o oxigênio dissolvido (OD) é o principal parâmetro para se determinar o nível de poluição de um

rio. Diferente da atmosfera, que possui oxigênio em abundância (cerca de 270 mg/L), um rio, ao nível do mar e a 20° C, apresenta concentração de saturação de 9,2 mg/L, o que demonstra alta sensibilidade de um ambiente aquático para qualquer variação da concentração deste componente (Von Sperling, 2007).

Conforme Nuvolari (2003), o consumo de oxigênio dissolvido pode ser medido pela DBO. Ainda segundo o autor, pode-se correlacionar a quantidade acumulada de oxigênio consumido, ou DBO exercida (DBO_e), correspondente à matéria orgânica já oxidada, com a quantidade de matéria orgânica remanescente (DBO_r), a ser oxidada. A soma dessas duas parcelas representa a demanda bioquímica total ou demanda bioquímica última de oxigênio (DBO_u). Em função do tempo, a DBO_e é representada por:

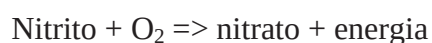
$$DBO_e(t) = DBO_u - DBO_r(t)$$

Pode-se ainda quantificar, por meio de medições, o nível de OD em um rio. Para tanto, é necessário entender quais as fontes de consumo e de produção de OD e, por meio delas, fazer um balanço de massa geral de oxigênio dissolvido.

Em relação às fontes de consumo de oxigênio, os principais fenômenos integrantes no balanço de OD são a oxidação da matéria carbonácea ou orgânica, oxidação da matéria nitrogenada e oxidação do material sedimentado.

Para von Sperling (2007), a oxidação de matéria orgânica ou carbonácea (DBO_c), corresponde à principal fonte de consumo de oxigênio. O consumo de OD se dá pela respiração dos microrganismos decompositores (principalmente bactérias) de matéria orgânica. Assim, quanto maior a quantidade de matéria orgânica em um rio, maior a quantidade de bactérias e, conseqüentemente, maior o consumo de OD por respiração.

A oxidação da matéria nitrogenada (DBO_N) ocorre a partir da conversão da amônia em nitritos (NO_2^-) e nitratos (NO_3^-), no processo de nitrificação, representado por:



A oxidação do material sedimentado (DBO_s), também conhecida por demanda bentônica, ocorre devido à formação de bancos de lodo resultantes do processo de sedimentação dos sólidos em suspensão e também deve ser estabilizado. Somente a camada superior do lodo, da ordem de milímetros, tem contato com o oxigênio da

água. Nas camadas mais abaixo, entretanto, não há disponibilidade de oxigênio, ocorrendo decomposição anaeróbia, podendo gerar gás carbônico, amônia, metano e gás sulfídrico, conforme relatado no item 4.2.1.3.

Por último, mas não menos importante, é a respiração (OD_p), efetuada pelos organismos vivos presentes no ecossistema, que consiste na absorção de O_2 e produção de CO_2 .

Em relação às fontes de produção de oxigênio, os principais contribuintes são a reaeração atmosférica e a produção fotossintética.

A reaeração atmosférica (OD_a) é o principal processo de introdução de oxigênio no meio líquido e consiste na troca gasosa entre a atmosfera e o corpo d'água, que é diretamente proporcional à pressão que o gás exerce sobre o líquido, inversamente proporcional à temperatura da água e também influenciado pela concentração de sais (aumento da salinidade provoca maior densidade do líquido, dificultando a entrada do gás na massa líquida). Como mencionado anteriormente, em condições normais de pressão e temperatura, a concentração de saturação de oxigênio é de 9,2 mg/L.

O processo de fotossíntese (OD_f) é realizado pelos organismos autotróficos, que se utilizam do gás carbônico para a produção de alimento. Para Nuvolari (2003), é um fenômeno complementar à respiração e se dá da seguinte forma:



Em síntese, o balanço de oxigênio dissolvido pode ser representado por:

$$OD = OD_a + OD_f - (DBO_c + DBO_N + DBO_s + OD_p)$$

Os processos que envolvem as transformações de nitrogênio, fósforo e o processo de sedimentação influenciam diretamente nas taxas de consumo e produção de OD, conforme explicitado mais adiante no trabalho e representado na Figura 2-3.

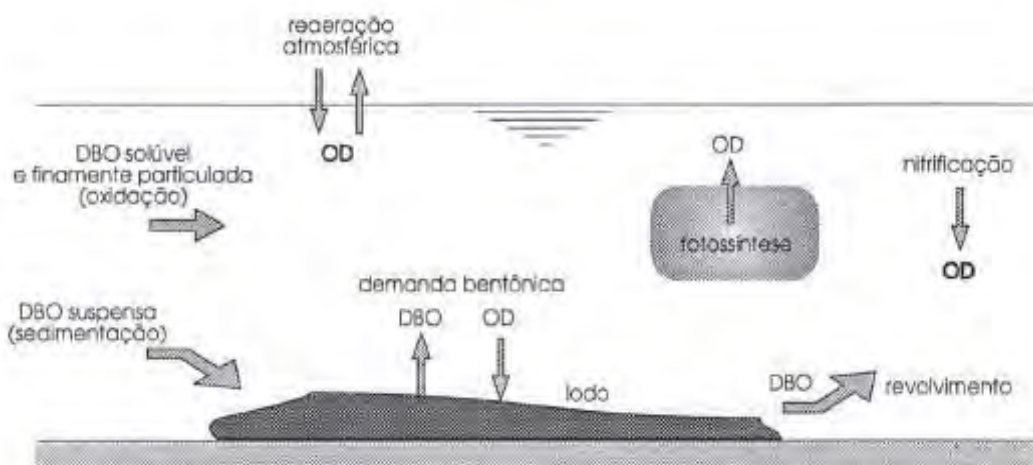


Figura 2-3: Fenômenos integrantes no balanço de OD em um rio (von Sperling, 2007)

2.3 Modelagem

Um rio (ou qualquer outro corpo d'água), segundo von Sperling (2007), é visto como um reator biológico, no qual ocorrem reações químicas e biológicas. Neste reator, a equação de balanço de massa expressa as transferências (transporte) da matéria através dos limites do sistema e todas as transformações (ganhos e perdas de matéria), denominadas reações, que ocorrem dentro dele. Na figura 2-4 estão esquematizadas as transformações da matéria baseando-se no balanço de massa.

Existem dois tipos de modelos que podem ser usados para o estudo da qualidade de água (Chapra, 1997). Os modelos empíricos, baseados por aproximação de dados de base, estimam estatisticamente a relação causa-efeito entre variáveis do sistema. Eles podem ser usados em alguns contextos específicos, mas têm sua aplicabilidade bastante limitada.

Os modelos mecanísticos são baseados no princípio de conservação de massa, segundo o qual, dentro de um volume finito de água, massa não é criada nem destruída, mas apenas transformada de uma espécie em outra.

Quando não há acúmulo de massa do constituinte no sistema, ou seja, um equilíbrio entre as entradas e saídas no balanço de massa, o sistema, fundamentado então no princípio de conservação de massa, é dito estar no estado estacionário. Para Chapra (1997), a expressão matemática de conservação de massa é um ponto de partida para analisar a resposta de um corpo d'água a influências externas.

Ainda, o sistema pode ser subdividido e equações separadas de balanço de massa podem ser formuladas, além de poder serem adicionadas às subdivisões outras

entradas e saídas de compostos. Essa divisão matemática em compartimentos é conhecida como segmentação e, ainda segundo aquele autor, é fundamental para a aplicação da conservação de massa em problemas de qualidade de água.

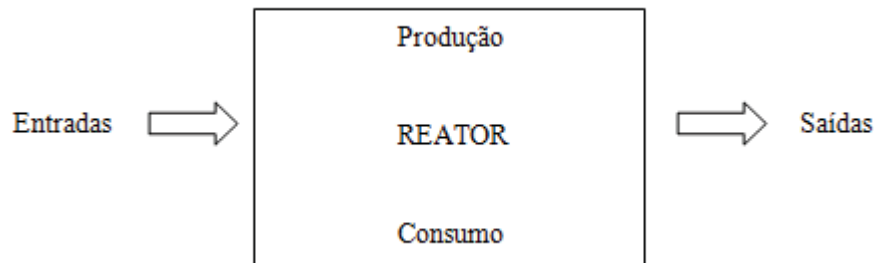


Figura 2-4: Esquema dos termos envolvidos no balanço de massa em um reator

Há também os sistemas em estado dinâmico. Nesses sistemas, a concentração do constituinte no sistema é variável com o tempo, podendo aumentar ou diminuir. A vazão e concentração de entrada são variáveis, além de haver algum outro estímulo externo ao sistema que possa alterar a concentração do constituinte. Segundo von Sperling (2007), estes modelos representam melhor a realidade de um corpo d'água, porém são menos utilizados devido à elevada complexidade de sua estrutura.

O balanço de massa para sistemas reacionais homogêneos e de volume constante pode ser representado pela equação:

$$V \cdot \frac{dC}{dt} = Q \cdot C_0 - Q \cdot C + r_p \cdot V - r_c \cdot V$$

onde:

C = concentração do composto em um tempo t (ML^{-3})

C_0 = concentração afluyente do composto (ML^{-3});

V = volume do reator (L^3);

Q = vazão (L^3T^{-1});

t = tempo;

r_p = taxa da reação de produção do composto ($\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$);

r_c = taxa da reação de consumo do composto ($\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$).

M = unidade de massa

Em sistemas estacionários, $dC/dt = 0$, ou seja, a concentração do constituinte é constante. Há equilíbrio entre os termos positivos e os termos negativos do balanço de massa que, somados, conduzem a um valor nulo. Nos sistemas dinâmicos, $dC/dt \neq 0$, ou seja, a concentração do composto é variável com o tempo, podendo aumentar ou diminuir em função do balanço entre os termos positivos e os negativos (von Sperling, 2007).

2.3.1 Os Modelos de Qualidade de Água e sua Evolução

Os modelos de qualidade de água basicamente caminham junto às demandas de controle da qualidade da água, que por sua vez variaram muito de acordo com o momento histórico.

O trabalho de Streeter e Phelps, em 1925, no Rio Ohio, foi um marco na história da modelagem. Ele considerava as variações das concentrações de oxigênio em um corpo d'água corrente. Esse modelo é constituído, de forma genérica, por duas equações diferenciais ordinárias: uma descreve a oxidação da fração biodegradável da matéria orgânica e a outra, o fluxo de oxigênio proveniente da dinâmica de reaeração atmosférica. Essas equações são nomeadas de, respectivamente, equações de demanda bioquímica de oxigênio ou de desoxigenação e de reaeração e serão explicadas no item a seguir.

Além deste, outros trabalhos considerando medições de OD foram desenvolvidos. A partir de 1960 houve um grande avanço na computação, permitindo que se desenvolvessem modelos ainda mais complexos. Foram desenvolvidos sistemas de 2 dimensões, caracterizando baías e estuários e, ainda, implementou-se o conceito de poluição difusa na programação.

Segundo Chapra (1997), na década de 70 iniciou-se um movimento de conscientização ambiental, que exigia um compromisso ainda maior com o controle da poluição. Nesse período, a eutrofização era o principal problema, fazendo com que surgissem modelos que incluíssem esse fenômeno em suas estruturas computacionais.

A política se envolvia cada vez mais com a questão ambiental e a modelagem da qualidade da água foi se diversificando, adicionando aspectos ainda mais complexos, como os de cadeia alimentar, componentes tóxicos e interações água-sedimento.

Para aquele autor, a evolução da modelagem de qualidade de água nos

últimos 70 anos resultou em um arcabouço teórico unificado englobando poluição por matéria orgânica e contaminação por substâncias tóxicas. Somado a isso, havia uma grande variedade de programas computacionais que poderiam se juntar aos modelos de qualidade de água para fornecer soluções bastante efetivas.

Nos itens a seguir serão apresentadas algumas das principais equações matemáticas desenvolvidas e utilizadas ao longo do tempo que envolvem níveis de oxigênio dissolvido em corpos d'água e que representam, juntas, uma boa aproximação das condições reais de um rio, tendo como base o modelo desenvolvido por Streeter e Phelps.

Os modelos atuais se utilizam de inúmeras outras equações, considerando, além dos parâmetros básicos aqui citados, outros mais específicos a cada situação e região. O modelo WASP, por exemplo, possui um módulo que analisa a cinética de degradação de substâncias tóxicas. O CE-QUAL-ICM, além de modelar os parâmetros OD e DBO, considera interações de fitoplâncton, zooplâncton, bactérias e sedimentos.

2.3.2 Cinética de Oxigenação e de Reaeração

Como mencionado anteriormente, o modelo de Streeter e Phelps consiste de duas equações diferenciais: a de desoxigenação e a de reaeração atmosférica. Matematicamente a cinética do déficit é representada por:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (\text{I})$$

$$\frac{dD}{dt} = -K_1 L + K_2 D \quad (\text{II})$$

e a concentração de oxigênio no tempo é dado por:

$$C(t) = C_s - D(t) \quad (\text{III})$$

onde: L é a DBO última (mg/L); D é o déficit de oxigênio (mg/L); t é o tempo (dia); K_1 e K_2 são os coeficientes de desoxigenação e de reaeração, respectivamente (dia^{-1}); $C(t)$ é a concentração de OD no tempo t (mg/L); C_s é a concentração de saturação de OD (mg/L); e $D(t)$ é o déficit de oxigênio no tempo.

Considerando $t = x/v$, onde x é a posição em relação ao ponto de descarga do efluente (m) e v a velocidade média do fluxo de água (m/s), as soluções das equações I e II, introduzidas na equação III, resultam em:

$$C(x) = C_s - \left[\frac{K_1 \cdot L_0}{K_2 - K_1} \cdot \left(e^{\frac{-K_1}{v}x} - e^{\frac{-K_2}{v}x} \right) + (C_s - C_0) \cdot e^{\frac{-K_2}{v}x} \right] \quad (IV)$$

onde: L_0 é a DBO última inicial (mg/L) e C_0 é a concentração inicial de OD no rio (mg/L);

ou:

$$D(t) = \frac{K_1 \cdot L_0}{K_2 - K_1} \cdot (e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}) + D_0 \cdot e^{-K_2 t} \quad (V)$$

onde: $D(t)$ é o déficit de oxigênio no tempo t ; e D_0 o é o déficit inicial de oxigênio dissolvido, no ponto de mistura do efluente com o corpo receptor.

O coeficiente de desoxigenação K_1 depende das características da matéria orgânica, além da temperatura e da presença de substâncias inibitórias. O valor de K_1 (a 20°C) para esgoto bruto concentrado varia entre 0,35 a 0,45 dia⁻¹, enquanto que para cursos d'água com águas limpas, entre 0,08 e 0,2 dia⁻¹ (Fair et al (1973) e Arceivala (1981)).

A temperatura influencia muito no metabolismo microbiano, afetando as taxas de conversão da matéria orgânica, por meio da equação:

$$K_{1T} = K_{120} \cdot \theta^{(T-20)}$$

onde: $K_{1T} = K_1$ a uma temperatura T qualquer (d⁻¹); $K_{120} = K_1$ a uma temperatura de 20°C (d⁻¹); T = temperatura do líquido (°C); e θ = coeficiente de temperatura (-) (geralmente seu valor é igual a 1,047).

No desenvolvimento das equações do modelo de Streeter e Phelps, há um terceiro coeficiente, K_d , de decomposição da DBO. K_1 é usado somente no cálculo do coeficiente K_T , enquanto que K_d é usado nas demais equações referentes ao parâmetro OD.

O coeficiente de reaeração K_2 tem, de acordo com von Sperling (2007), maior influência no balanço de oxigênio dissolvido do que o coeficiente K_1 . Corpos d'água

mais rasos e mais velozes possuem maior coeficiente de reaeração, dada a maior turbulência e facilidade de mistura. Assim, para pequenas lagoas, seu valor pode variar, para 20°C, de 0,12 a 0,23 dia⁻¹ e, para corredeiras, está entre 1,15 e 1,61 dia⁻¹ (Fair et al (1973) e Arceivala (1981) apud Sperling, 2007).

A temperatura exerce dois efeitos sobre a aeração. O aumento de temperatura reduz a solubilidade de oxigênio dissolvido (como informado no item 3.1.2.2, sua solubilidade máxima é de 9,2 mg/l a 20°C). Além disso, e de maneira oposta, o aumento de temperatura acelera os processos de absorção de oxigênio. Segundo von Sperling, entretanto, essa influência é pouco significativa. A variação de K_2 com a temperatura pode ser representada por:

$$K_{2T} = K_{220} \cdot \theta^{(T-20)}$$

onde: K_{2T} = K_2 a uma temperatura T qualquer (d⁻¹); K_{220} = K_2 a uma temperatura de 20°C (d⁻¹); T = temperatura do líquido (°C) ; e θ = coeficiente de temperatura (-) (geralmente seu valor é igual a 1,024).

Entretanto, Nuvolari (2003) acrescenta que esse equacionamento para o cálculo de concentração de OD pressupõe mistura imediata, não leva em conta a dispersão, só funciona em decomposição aeróbia, não inclui reoxigenação pela fotossíntese e não inclui a sedimentação de matéria orgânica. Nos itens a seguir serão incluídas equações que levam em conta todos estes fatores com objetivo de se formular uma equação geral mais próxima do comportamento real de um rio.

2.3.3 Sedimentação da Matéria Orgânica

Como exposto no item 4.2.2, a sedimentação da matéria orgânica é resultado do acúmulo de sedimentos no fundo dos corpos d'água, formando bancos de lodo.

Para a implementação deste processo nas equações, ao K_1 , coeficiente de desoxigenação, é somado um coeficiente de sedimentação K_s , dado pela relação entre velocidade de sedimentação do poluente e a profundidade média do leito do rio, sendo esta velocidade diretamente proporcional ao tamanho da partícula. Areia (tamanho da partícula = 100μ), por exemplo, sedimenta em uma velocidade muito maior que silte (tamanho da partícula = 10μ). Dessa forma, temos que

$$K_1 = K_d + K_s$$

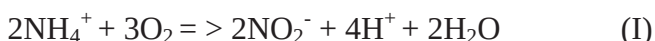
sendo: K_d o coeficiente de decomposição da DBO; e K_s o coeficiente de sedimentação.

Assim, a equação do déficit de oxigênio dissolvido em um determinado tempo t fica:

$$D(t) = \frac{K_d \cdot L_0}{K_2 - (K_d + K_s)} \cdot (e^{-(K_d + K_s)t} - e^{-K_2 t}) + D_0 \cdot e^{-K_2 t}$$

2.3.4 Nitrificação

O processo de nitrificação é importante uma vez que envolve consumo de oxigênio, chamado de demanda nitrogenada. A transformação da amônia em nitritos é utilizada através de bactérias, como as do gênero *Nitrosomonas*, de acordo com a reação I. A oxidação de nitritos a nitratos ocorre principalmente pela atuação de bactérias, como as do gênero *Nitrobacter*, de acordo com a reação II.



Importante salientar que normalmente, os modelos tratam o nitrito e nitrato de forma única, sendo a nitrificação considerada uma etapa de transformação de amônia diretamente a nitrato. Pela soma das equações I e II, obtém-se III:



A equação de desnitrificação (IV) ocorre em ambientes com ausência de oxigênio. Nela, há a redução de nitratos e a liberação de nitrogênio gasoso.



Pela equação, pode-se notar que há aumento na concentração de oxigênio e também o consumo de íons H^+ , colaborando para a diminuição da acidez na água (von Sperling, 2007).

Visando uma modelagem simplificada, são consideradas então duas reações, a de amonificação e a de nitrificação. São três as equações usadas:

Nitrogênio orgânico: $N_{org} = N_{org0} \cdot e^{-K_{oa} \cdot t}$

Amônia: $N_{org} = N_{amon0} \cdot e^{-K_{an} \cdot t} + \frac{K_{oa} \cdot N_{org0}}{K_{an} - K_{oa}} \cdot (e^{-K_{oa} \cdot t} - e^{-K_{an} \cdot t})$

Nitrato: $N_{nitr} = N_{tot0} - (N_{org} + N_{amon})$

onde:

N_{org0} = nitrogênio orgânico na mistura (t=0) (mgN/L)

N_{amon0} = amônia na mistura (t=0) (mgN/L)

N_{nitr0} = nitrato na mistura (t=0) (mgN/L)

N_{tot0} = nitrogênio total na mistura (t=0) (mgN/L)

Uma modelagem mais complexa do nitrogênio, existente em modelos como o QUAL2K, a ser estudado mais adiante, considera a nitrificação em duas etapas separadas, a transformação de amônia para nitrito e a de nitrito para nitrato. Além disso, o modelo considera também sedimentação do nitrogênio orgânico, absorção pelas algas e regeneração de nitrogênio tanto pelo sedimento de fundo quanto pela respiração das algas (Chapra et al, 2005).

O processo de nitrificação é influenciado pela temperatura ambiente, pH, oxigênio dissolvido e substâncias tóxicas ou inibidoras. A temperatura influi na atividade bacteriana, além do grau de solubilidade do oxigênio dissolvido. O pH influencia na forma como a amônia se apresenta, íon amônio NH_4^+ ou na forma livre, NH_3 . Para pH menores que 8, a forma predominante é a de íon amônio. Para pH = 9,5, apresenta-se nas duas formas e para pH maiores que 11, na forma livre. A quantidade de oxigênio é um fator limitante no crescimento de bactérias nitrificantes (von Sperling, 2007).

2.3.5 Fósforo

A presença deste composto na água se deve principalmente ao processo de drenagem pluvial de áreas agricultáveis (onde há uso de fertilizantes) e de áreas urbanas (produtos químicos contendo fósforo), além do despejo de esgoto nos rios. Em relação às águas de esgoto, fósforo se encontra tanto na sua forma solúvel (predominantemente inorgânico, na forma de polifosfatos e ortofosfatos) quanto na forma insolúvel (particulada), ligada à matéria orgânica dos esgotos.

No meio aquático, fósforo é associado ao crescimento de algas, uma vez que serve de nutriente para elas. É consumido nas formas H_2PO_4^- , HPO_4^{2-} e PO_4^{3-} , sendo, assim, o principal ator no processo de eutrofização do corpo d'água.

Quanto à uma modelagem mais simples de fósforo, são considerados três processos: a sedimentação do fósforo orgânico particulado; a conversão de fósforo orgânico particulado a fósforo inorgânico dissolvido; e a liberação de fósforo inorgânico dissolvido pelo sedimento de fundo.

A sedimentação do fósforo orgânico causa uma remoção de P da massa líquida, enquanto que a liberação de fósforo inorgânico pelo sedimento de fundo contribui para a elevação da concentração de P na água. São duas as equações que representam este fenômeno (von Sperling, 2007):

Fósforo orgânico:

$$\frac{dP_{\text{org}}}{dt} = -K_{\text{oi}} \cdot P_{\text{org}} - K_{\text{spo}} \cdot P_{\text{org}}$$

$$\text{Acumula} = -(\text{Conversão } P_{\text{org}} \rightarrow P_{\text{inorg}}) - (\text{Sedimentação})$$

Fósforo inorgânico:

$$\frac{dP_{\text{inorg}}}{dt} = K_{\text{oi}} \cdot P_{\text{org}} + \frac{S_{\text{Pinorg}}}{H}$$

$$\text{Acumula} = (\text{Conversão } P_{\text{org}} \rightarrow P_{\text{inorg}}) + \text{Liberação pelo sedimento de fundo}$$

onde:

P_{org} = concentração de fósforo orgânico (mg/L)

P_{inorg} = concentração de fósforo inorgânico (mg/L)

K_{spo} = coeficiente de remoção do fósforo orgânico por sedimentação (d^{-1})

K_{oi} = coeficiente de conversão de fósforo orgânico a fósforo inorgânico (d^{-1})

S_{Pinorg} = coeficiente de liberação de fósforo inorgânico pelo sedimento de fundo ($\text{gO}_2/\text{m}^2 \cdot \text{d}$)

H = profundidade do curso d'água (m)

De acordo com dados da EPA (apud von Sperling, 2007), o coeficiente de sedimentação do P orgânico possui valores entre 0,02 e 0,05 d^{-1} ; o coeficiente de conversão de P orgânico a P inorgânico entre 0,2 e 0,3; e o fluxo de liberação de P inorgânico pelo sedimento de fundo, entre 0 a 0,2.

Uma modelagem mais complexa consideraria o balanço de crescimento, decaimento e sedimentação das algas, o que implicaria na conversão de fósforo inorgânico em biomassa algal e o acréscimo dos teores de fósforo orgânico devido às algas. Entretanto, tais dados são difíceis de se obter, pela dificuldade em se representar este balanço.

No CE-QUAL-ICM, por exemplo, são incorporados, dentro do ciclo de fósforo, três grupos diferentes de algas. O fósforo algal retorna à coluna de água como fósforo orgânico dissolvido, fósforo particulado variável e estável (refratário). Uma porção do fósforo particulado é hidrolisado a fósforo orgânico dissolvido. O balanço é perdido para os sedimentos, juntamente com fósforo incorporado na sedimentação das algas. O fósforo orgânico dissolvido é então mineralizado à PO_4^- , voltando a ficar disponível para as algas.

Importante salientar que as concentrações de fósforo a montante do lançamento refletem as condições de baixa ou alta poluição do rio.

3 MODELOS ESTUDADOS

3.1 Introdução

Donigian, Jr. A.S. et al (1995) infere que os modelos de qualidade de água diferem um do outro na representação de quatro atributos-chave: dimensionalidade, temporalidade, parâmetros de hidrodinâmica e/ou carga de poluentes.

De acordo com o texto do autor, dimensionalidade determina como um modelo pode representar espacialmente um corpo d'água. A maioria dos modelos de rios e correntes são unidimensionais, considerando apenas o fluxo longitudinal. Modelos 2-D representam, além da longitude, fluxos laterais ou verticais. Os modelos 3-D descrevem os processos nas três dimensões simultaneamente. Ao se trabalhar com rios de alta velocidade de fluxo longitudinal, geralmente desconsidera-se movimentos de dispersão, enquanto que, para reservatórios ou lagos, este movimento é obviamente maior, tornando importante a aplicação desta variável no modelo a ser usado.

Temporalidade determina como a dinâmica do corpo d'água é representada. Modelos de regime estacionário trabalham com concentrações que não variam com o tempo. Tais modelos são úteis em rios em condições de baixa vazão. De maneira oposta, regimes não-estacionários (dinâmicos) consideram concentrações que variam ao longo do tempo, como por exemplo descargas variáveis de matéria orgânica ao longo de um dia, mudanças na vazão de um rio ou na incidência horária de luz solar sobre a superfície da água.

Informações sobre o comportamento da água também são fundamentais na utilização de um modelo. Como informações de entrada, alguns modelos requerem dados como velocidade da água e turbulência ou até mesmo podem estar associados a programas de simulações hidrodinâmicas, os quais consideram certas particularidades, como a existência de represas.

Ainda, segundo ele, para modelos que trabalham com poluentes tóxicos é importante considerar o processo de deposição e ressuspensão de sedimentos.

Em todos estes modelos há, também, a possibilidade de se entrar com uma variável de degradação de primeira ordem inserida pelo usuário. No caso de modelos para poluentes tóxicos, por exemplo, pode ser usado um algoritmo que prevê a degradação de algum componente orgânico na água por meio da combinação de diversas características da água, como pH, luz e temperatura. O WASP, por exemplo, prevê a degradação de mercúrio e suas diferentes formas na água.

Nos itens a seguir serão descritos alguns modelos e suas características.

3.2 QUAL2E e QUAL2K

O QUAL2K é um modelo desenvolvido a partir do seu antecessor, QUAL2E, e é um dos mais usados mundialmente na modelagem da qualidade de águas superficiais.

É um modelo unidimensional, de regime estacionário e funciona por meio da representação do rio em trechos e subtrechos (ou elementos computacionais) com características distintas entre eles de fluxo (balanço hidrológico), temperatura (balanço térmico) e concentração (balanço de massa). Um elemento computacional é tratado como um reator de mistura completa para cada um destes três parâmetros. As variáveis de qualidade da água são simuladas em uma escala de tempo e podem ser inseridas no programa dados de fontes pontuais e não pontuais de cargas, como mostra a figura 3-1, abaixo.

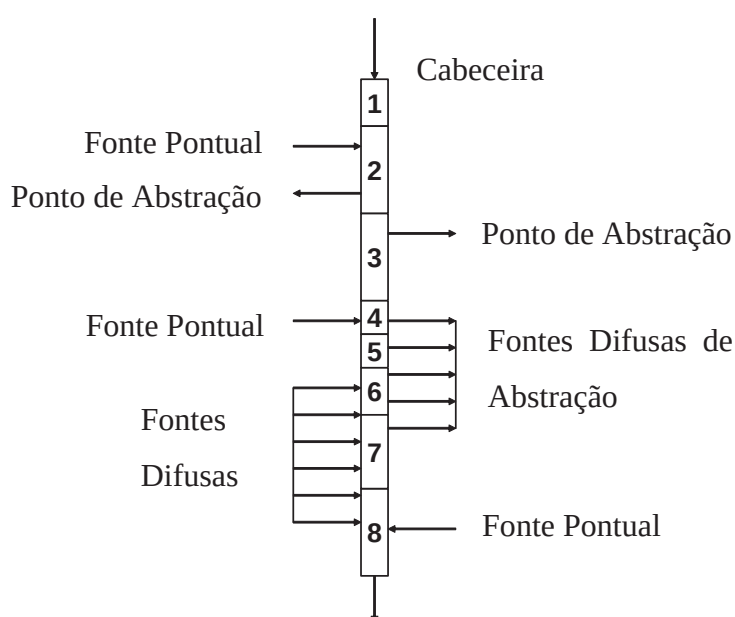


Figura 3-1: Segmentação de um rio no QUAL2K (Chapra et al, 2005)

Ele tem o Excel como interface gráfica de uso e os dados numéricos computacionais são escritos em FORTRAN 90.

Em sua estrutura são consideradas diversas variáveis, sendo elas:

- DBO última (de lenta e rápida oxidação);

- Oxigênio Dissolvido;
- Demanda de Oxigênio por Sedimentação;
- Fotossíntese das algas;
- Ciclo do Nitrogênio (nitrogênio orgânico, amônia, nitrito e nitrato);
- Ciclo do fósforo (sedimentação e mineralização do fósforo orgânico em inorgânico);
- Concentração de Clorofila A como indicador de biomassa das algas;
- Balanço entre crescimento, respiração e sedimentação das algas;
- Temperatura (todas as variáveis dependem da temperatura. O QUAL2E calcula um fator de correção baseado na estrutura básica de Streeter e Phelps (olhar item 3.3.2));
- Colifórmes (indicador de presença de organismos patogênicos);
- 1 constituinte não-conservativo inferido pelo usuário (carga orgânica, por exemplo);
- 3 constituintes conservativos que podem ser descritos ao longo do rio.

A figura 3-2 abaixo esquematiza os principais parâmetros considerados nos dois modelos e possibilita verificar as principais diferenças entre eles.

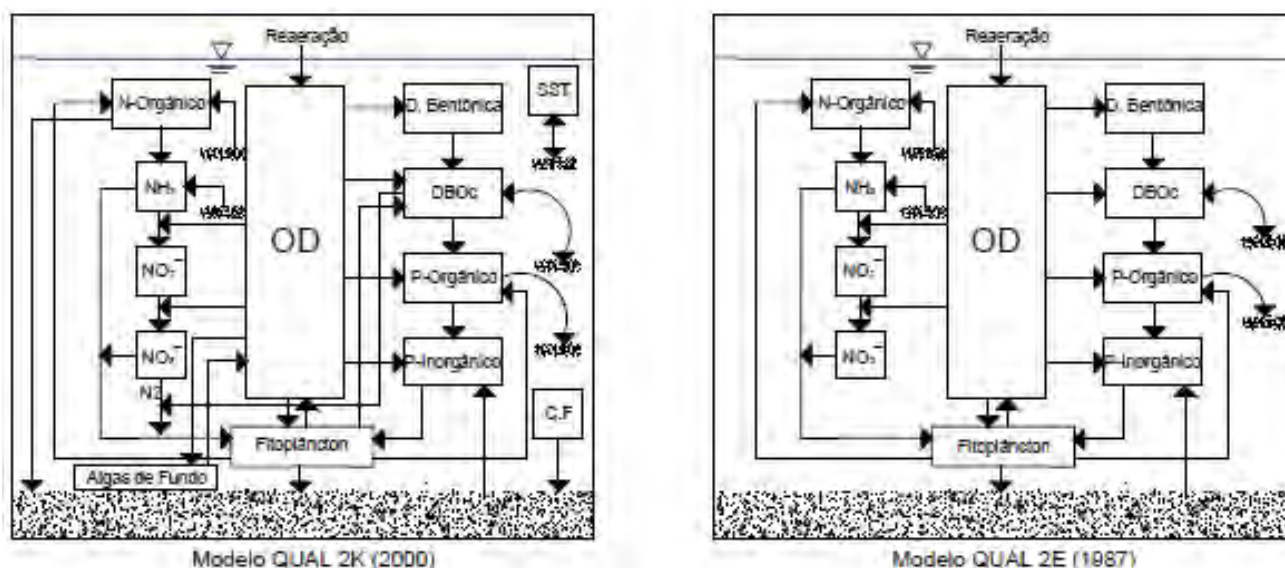


Figura 3-2: estrutura dos modelos QUAL2E e QUAL2K (Fonte: Gonçalves, 2009)

Conforme mencionado, o Q2K divide o sistema em subtrechos. Diferentemente do Q2E, o tamanho destes subtrechos pode variar de um para o outro e diversas cargas

podem ser inseridas para qualquer elemento. Além disso, o Q2K considera também:

- Ambientes onde a taxa de oxigênio está em zero;
- A interação água-sedimento também é diferente. Os fluxos de oxigênio e nutrientes são simulados como função da sedimentação de matéria orgânica particulada;
- O modelo simula a presença de algas de fundo;
- A ausência de luz é calculada como função das algas, detritos e sólidos inorgânicos;
- Tanto a alcalinidade como Carbono Inorgânico Total são simulados;
- A remoção de patógenos é calculada em função da temperatura, luz e sedimentação.

Da sua funcionalidade, o modelo possui três categorias de entradas: O sistema rio/corrente (dados do sistema, descreve-o de forma a ser lido pelo modelo); Variáveis gerais (são as variáveis a serem simuladas, tais como unidades, tipo de simulação, constituintes da qualidade da água e características da bacia); e funções forçadas (entradas inferidas pelo usuário).

Em relação às saídas do sistema, são produzidos três tipos de tabelas, hidráulicas, coeficientes de reação e de qualidade da água. Também são fornecidas análises gráficas de concentração dos constituintes.

3.3 CE-QUAL-W2

Elaborado pelo “*US Army Engineering and Research Development Center*”, este é um modelo bidimensional (longitudinal/vertical) para análise hidrodinâmica e de qualidade de água. Pelo fato de o modelo considerar homogeneidade lateral, ele é melhor aplicado para corpos d’água relativamente longos e estreitos, os quais possuem gradientes longitudinais e verticais de qualidade de água (Cole e Wells, 2008). Desta forma, pode ser aplicado a rios, lagos, reservatórios, estuários e combinações entre eles.

Sua primeira versão, conhecida como LARM (*Laterally Averaged Reservoir Model*) foi criada em 1975 e foi aplicada pela primeira vez em um reservatório. Foram então inseridos algoritmos que consideravam condições para múltiplas ramificações e de entorno de estuários, além de algoritmos de qualidade de água, surgindo o CE-QUAL-W2 versão 1.0. (Cole e Wells, 2008).

Às versões seguintes foram implementados, entre outros, algoritmos que consideram trocas de calor entre sedimento e superfície, estruturas matemáticas para transporte advectivo de massa/calor, a habilidade de modelar múltiplos corpos d'água em um mesmo "grid" computacional, algoritmos de turbulência vertical e de reaeração apropriados para rios, número indefinido de grupos de sólidos suspensos inorgânicos, de sílica e de coliformes, diferentes grupos de algas, DBO, Nitrogênio e suas formas, Fósforo e suas formas e um processador gráfico.

A sua última versão, 3.6, permite ao usuário aplicá-lo a um número indefinido de rios, estuários, lagos e reservatórios ligados em série. Permite ainda modelar diferentes estruturas hidráulicas, como descarregadores de superfície, descarregadores de fundo e circuitos hidráulicos equipados com bombas e turbinas. O modelo pode trabalhar com simulações a longo prazo e com múltiplas fontes pontuais e difusas de poluição, como efeitos de runoff ou precipitações atmosféricas variáveis. Sua estrutura está em Fortran e pode ser acessada e modificada pelo usuário. A figura 3-3 ilustra a interface gráfica do modelo.

Assim como outros modelos, este divide o corpo d'água em segmentos. Esta divisão se dá, neste modelo, a partir da utilização de dados de batimetria obtidos por algum software de SIG, como Spring ou ArcGis. A figura 3-4 ilustra o perfil vertical da represa El Cajon, no México, elaborado a partir de informações batimétricas obtidas (Barlow, Clark e Obregon, Oliver, 2007).

O modelo ainda possui uma interface gráfica compatível com Windows, onde podem ser feitas as entradas e obtidas as saídas. Na figura 3-5 é montado um perfil de concentração de nitrogênio amoniacal da água do Lago do Descoberto, localizado no Distrito Federal (Silva, V.G., 2009). Pode-se observar o gráfico de calibração de cada parâmetro e, junto a ele, um perfil *cromático* das concentrações destes parâmetros em determinado segmento.

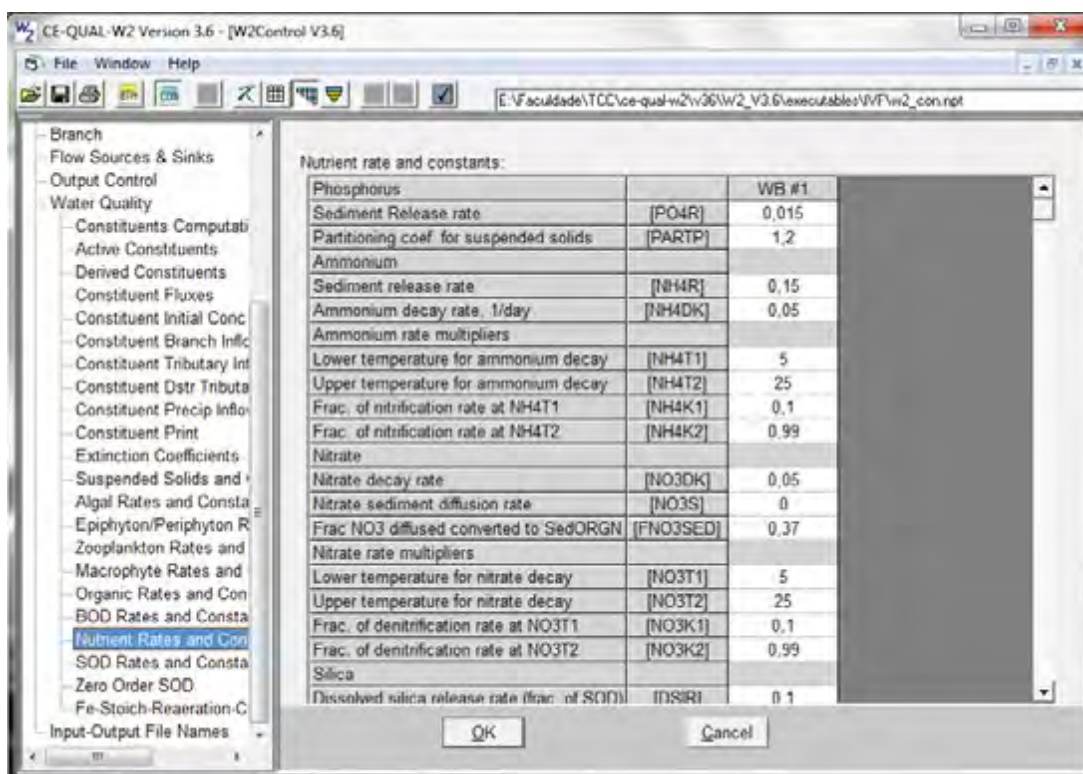


Figura 3-3: Interface gráfica do CE-QUAL-W2

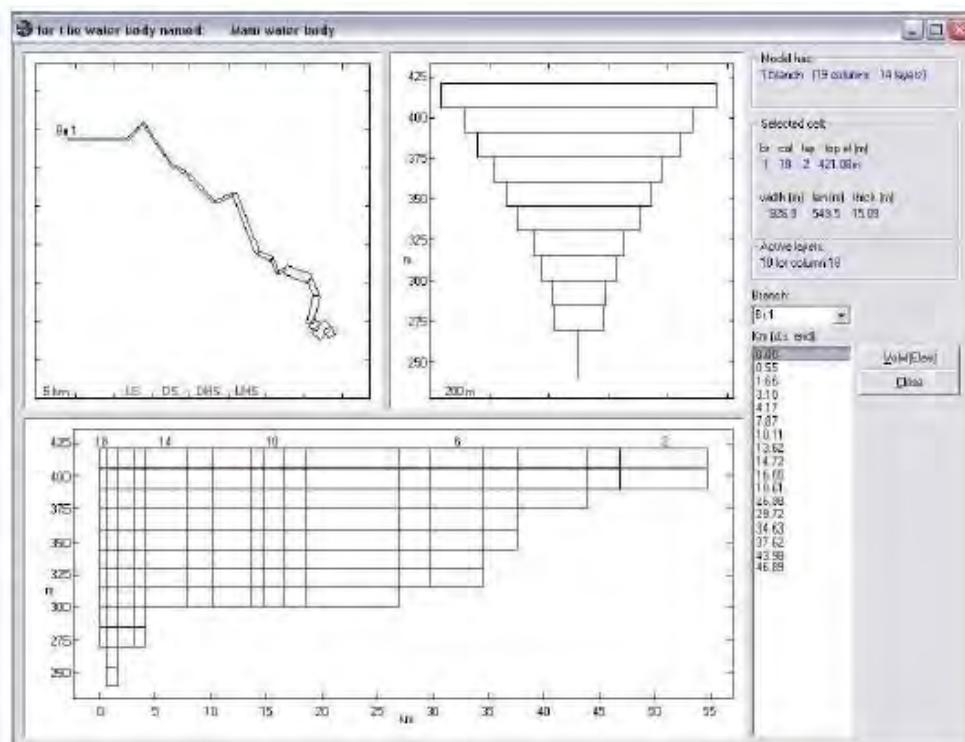


Figura 3-4: Arquivo batimétrico usado na represa El Cajon, México (Barlow, Clark e Obregon, Oliver, 2007)

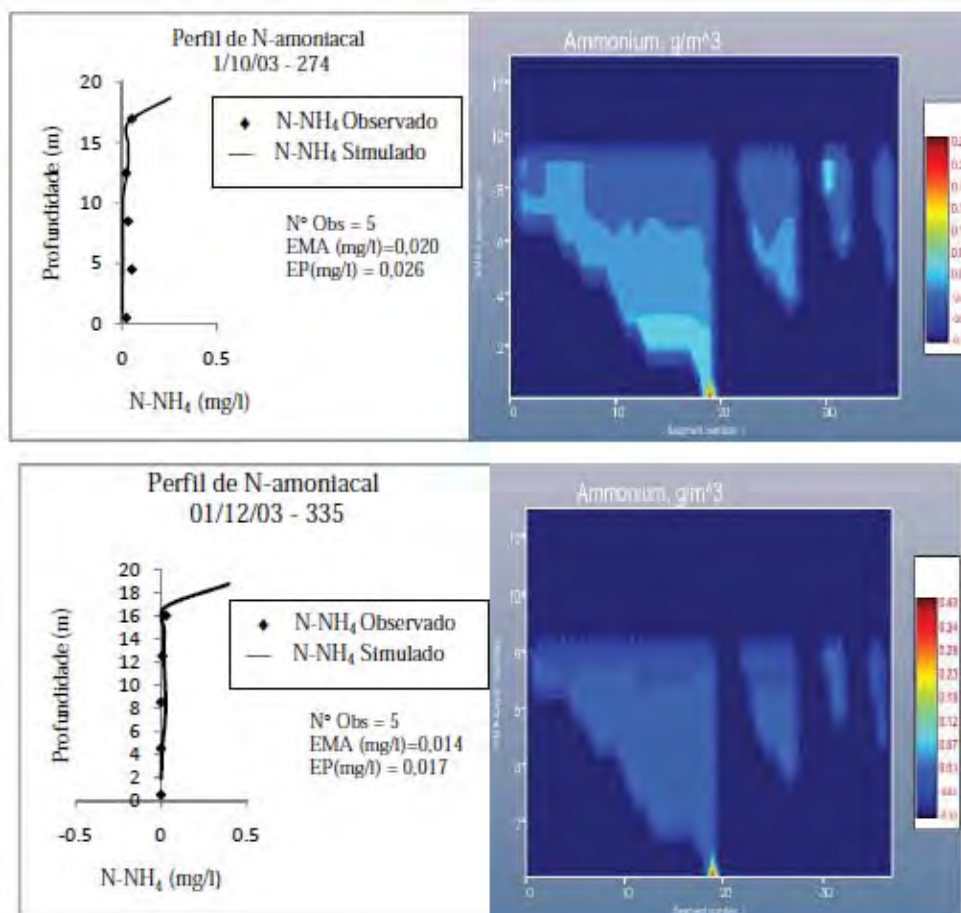


Figura 3-5: Perfis de concentração de nitrogênio amoniacal simulados pelo CE-QUAL-W2 (Silva, G.V., 2009)

O CE-QUAL-W2 funciona a partir da elaboração de três equações dimensionais e, por meio do balanço de massa e mecânica de fluidos, são geradas as equações de média lateral para o movimento de fluido, sendo estas a de continuidade (ou conservação de massa de um fluido) e de conservação de momento para um sistema de coordenadas vertical-longitudinal (Cole e Wells, 2008):

Equação de quantidade de movimento em x:

$$\frac{\partial UB}{\partial t} + \frac{\partial UUB}{\partial x} + \frac{\partial WUB}{\partial z} = gB \sin \alpha + g \cos \alpha B \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{g \cos \alpha B}{\rho} \int_{\eta}^z \frac{\partial \rho}{\partial x} dz + \frac{1}{\rho} \frac{\partial B \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial B \tau_{xz}}{\partial z} + qBU_x$$

Equação de quantidade de movimento em z:

$$0 = g \cos \alpha - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z}$$

Superfície Livre:

$$B_{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \int_{\eta}^h U B dz - \int_{\eta}^h q B dz$$

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial U B}{\partial x} + \frac{\partial W B}{\partial z} = q B$$

Equação de Estado ou Complementar, que relaciona temperatura, densidade e concentração de substâncias dissolvidas:

$$\rho = f(T_w, \Phi_{TDS}, \Phi_{ss})$$

Equação da Conservação de Massa/Calor:

$$\frac{\partial B \Phi}{\partial t} + \frac{\partial U B \Phi}{\partial x} + \frac{\partial W B \Phi}{\partial z} - \frac{\partial \left(B D_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)}{\partial x} - \frac{\partial \left(B D_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)}{\partial z} = q_{\Phi} B + S_{\Phi} B$$

Onde:

B = comprimento;

U = velocidade longitudinal;

W = velocidade vertical;

q = afluente por unidade de comprimento;

α = ângulo do canal;

ϕ = concentração ou temperatura;

η = elevação da superfície da água;

P = pressão;

h = profundidade;

T_w = temperatura da água;

Φ_{TDS} = concentração de sólidos dissolvidos;

Φ_{SS} = concentração de sólidos suspensos;

ρ = densidade.

O modelo se utiliza ainda do esquema numérico ULTIMATE-QUICKEST para o cálculo de dispersão-advecção através de diferenças finitas de terceira ordem.

As variáveis de qualidade de água consideradas nele são:

- Sólidos Dissolvidos Totais;
- Sólidos Suspensos Inorgânicos;
- Fósforo;
- Amônia, Nitrito e Nitrato;
- Sílica dissolvida e particulada;
- Ferro Total;
- Matéria Orgânica Dissolvida e Particulada;
- OD e DBO;
- Algas;
- Epífitas;
- Zooplâncton;
- Macrófitas;
- Carbono Inorgânico Total;
- Alcalinidade;
- Demanda de Oxigênio por Sedimento (em equação de primeira ordem);
- pH;e
- ciclo de carbono, considerando CO_2 , HCO_3 e H_2CO_3 .

A figura 3-6, abaixo, representa a grade de funcionamento do CE-QUAL-W2, em que há conexão entre uma seção de rio e de um reservatório.

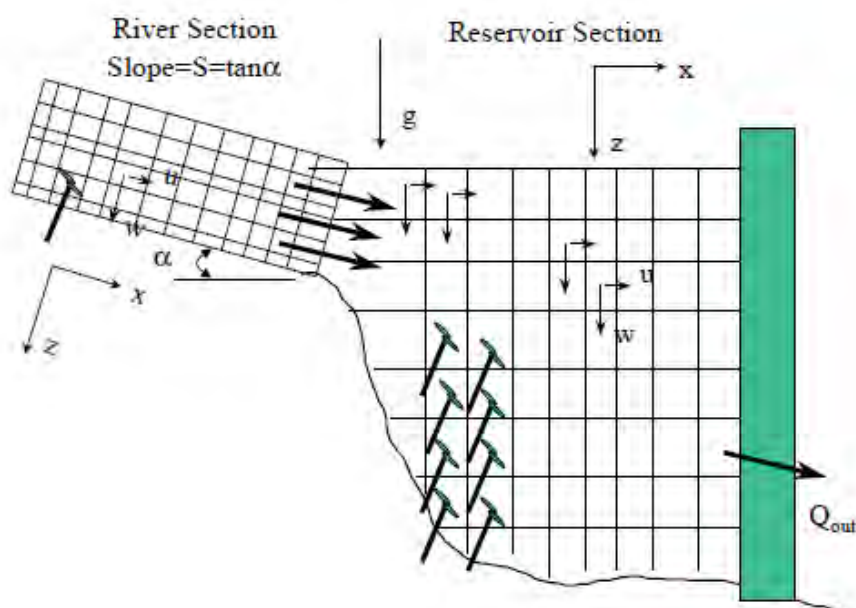


Figura 3-6: Grid do CE-QUAL-W2 (fonte: Wells, Scott A., 2002)

3.4 WASP

O modelo *Water Quality Analysis Simulation Program*, ou WASP, é um modelo dinâmico (diferentemente do QUAL2K) usado para analisar o comportamento da água na ocorrência de fenômenos naturais, como a eutrofização, e simular transporte de diferentes tipos de poluentes na água superficial. Baseia-se na lei de conservação, segundo o qual não há perda nem ganho de propriedades como calor e massa.

É conhecido como um modelo “em caixa” (“box model”), que pode ser trabalhado tridimensionalmente, ou seja, considera, além do fluxo longitudinal, os fluxos horizontal e vertical, o que inclui movimento de dispersão. Dessa forma, este modelo pode ser aplicado a rios, estuários, lagos, reservatórios e áreas costeiras. Ele representa então movimentos de advecção e dispersão, além de fontes de poluição difusas e pontuais.

O rio é segmentado em caixas, as quais não têm forma definida, podendo apresentar qualquer forma, e podem ser atachadas umas às outras, aplicando a uma, duas ou três dimensões.

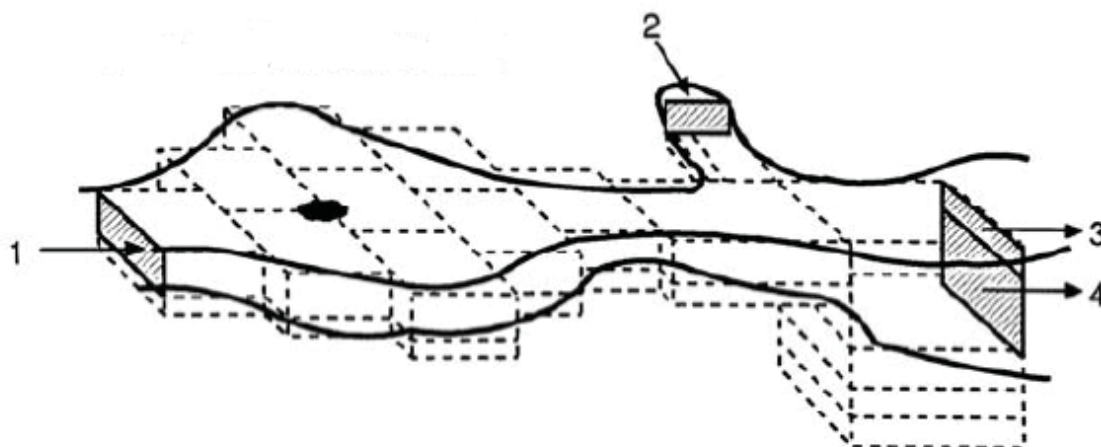


Figura 3-7: Divisão do rio em elementos assemelhando-se a caixas (fonte: EPA, 2009)

O modelo é estruturado em diferentes módulos que executam funções determinadas. O módulo de eutrofização (chamado EUTRO) tem como principal função quantificar as taxas de crescimento e morte do fitoplâncton. Para tanto possui como variáveis a Amônia, Nitrato, Ortofosfato, Oxigênio Dissolvido, salinidade, fitoplâncton (considera diferentes tipos: algas verdes, vermelhas e cianobactérias, entre outros) e perifiton (camada de microorganismos que colonizam superfícies sólidas, de folhas a rochas), detritos particulados, como detritos de carbono, nitrogênio, fósforo e de sílica, e matéria orgânica dissolvida (figura 3-8). Para tais variáveis, são considerados os processos de cinética do fitoplâncton, cinética do perifiton, cinética da sílica, Ciclo do fósforo, Ciclo do nitrogênio, Balanço de oxigênio dissolvido e formação de sedimento.

De maneira geral, a quantidade de fitoplâncton é calculada a partir da diferença entre sua taxa de crescimento e morte e sedimentação:

$$S_{kj} = (G_{pj} - D_{pj} - K_{sj})P_j$$

onde:

S_{kj} = termo de reação para um grupo de algas i , em mgC/L.dia

P_j = população de fitoplâncton i , em mgC/L

G_{pj} = constante de taxa de crescimento, dia⁻¹

D_{pj} = constante de taxa de morte mais respiração, dia⁻¹

K_{sj} = constante da taxa de sedimentação, dia⁻¹

i = tipo de fitoplâncton

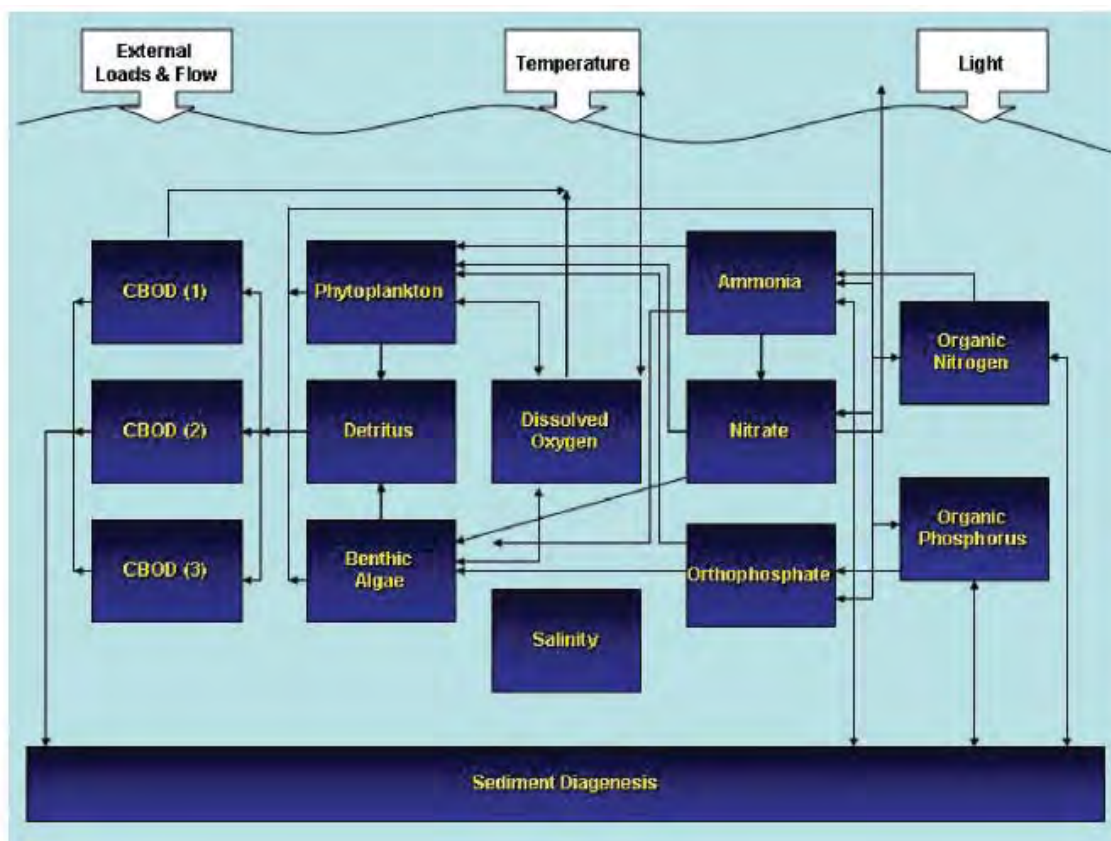


Figura 3-8: estrutura funcional do módulo de eutrofização do WASP (fonte: EPA, 2009)

É importante considerar a disponibilidade de sílica na água, uma vez que determinados tipos de fitoplâncton possuem crescimento limitado por este composto. Nos modelos anteriores do WASP (WASP 6 e predecessores), a sílica não era considerada nos cálculos, já que o fitoplâncton era computado como um grupo geral, sem separação de classes, diferentemente do WASP7, que então incluiu essas classes de fitoplâncton e, assim, a sílica no modelo.

Ainda no WASP7 são identificados 6 níveis de complexidade para o módulo EUTRO. No primeiro nível as equações são as mesmas que as de Streeter e Phelps para OD e DBO; o segundo nível já apresenta uma modificação do modelo de Streeter e Phelps, incluindo-se também a DBO nitrogenada; o terceiro nível apresenta um balanço linear de OD juntamente com o processo de nitrificação; o quarto nível considera um processo simplificado de eutrofização, além de descrever a demanda de sedimentação; o quinto nível já apresenta um processo de eutrofização um pouco mais complexo e também mudanças no meio consequentes da sedimentação; e o sexto nível de complexidade inclui um processo avançado de eutrofização, considera o processo de sedimentação e a influência de perifiton.

O módulo de toxicantes (chamado TOXI) analisa substâncias tóxicas como metais pesados ou compostos orgânicos (como TPH, PAHs, BTEX e PCBs), seus destinos e produtos de reação. São usadas equações de primeira ordem para as reações de transformação para cada composto analisado, podendo ainda ser especificadas para processos em particular, como biodegradação, hidrólise, fotólise, volatilização e oxidação.

O módulo chamado MERCURY (uma extensão do TOXI) analisa especificamente o ciclo e transporte do mercúrio na água e suas diferentes formas (Hg^0 , $Hg(II)$, $MeHg$), além de sólidos como silte e areia. O modelo considera, quanto ao ciclo de mercúrio no ambiente aquático, os processos de oxidação de Hg^0 , redução e metilação (processo de ligação ou substituição de um grupo metila sobre determinada molécula) do $Hg(II)$, e demetilação (processo de eliminação de um grupo metila de uma molécula) de $MeHg$, que podem ser vistos através das equações de oxidação (I), redução (II), metilação (III) e demetilação (IV):

$$(I) \quad S_{k,ox} = k_{ox} \cdot x_{diss} Hg^0_{diss}$$

onde $S_{k,ox}$ é a taxa de oxidação (em $g/m^3 \cdot dia$), k_{ox} é a constante de oxidação (dia^{-1}) e x_{diss} é um multiplicador para fase dissolvida, geralmente com valor igual a 1;

$Hg(II)$ é reduzido a H^0 pela luz do sol na coluna de água através da reação

$$(II) \quad S_{k,red} = k_{red} \cdot L_N(t) \cdot [x_{diss} Hg(II)_{diss} + x_{DOC} Hg(II)_{DOC} + x_{sorb} Hg(II)_{sorb}] \cdot 10^{-6}$$

onde $S_{k,red}$ é a taxa de redução, k_{red} a constante da taxa de redução da superfície, $L_N(t)$ é a intensidade de luz na profundidade do segmento, x_{DOC} é um multiplicador para fase de ligação com carbono orgânico dissolvido, geralmente com valor igual a 0, e x_{sorb} é um multiplicador da fase de absorção, geralmente com valor igual a 1;

$Hg(II)$ é metilado para $MeHg$ na camada superficial de sedimento por:

$$(III) \quad S_{K, meth} = k_{meth} \cdot [x_{diss} Hg(II)_{diss} + x_{DOC} Hg(II)_{DOC} + x_{sorb} Hg(II)_{sorb}]$$

onde $S_{k, \text{meth}}$ é a taxa de metilação e k_{meth} é a constante da taxa de metilação;

MeHg é reduzido para Hg^0 pela luz solar pela equação:

$$(IV) \quad S_{K, \text{rdm}} = k_{\text{rdm}} \cdot L_N(t) \cdot [x_{\text{diss}} \text{MeHg}_{\text{diss}} + x_{\text{DOC}} \text{MeHg}_{\text{DOC}} + x_{\text{sorb}} \text{MeHg}_{\text{sorb}}]$$

onde $S_{K, \text{rdm}}$ é a taxa de redução, k_{rdm} é a constante da taxa de redução superficial.

O módulo conhecido como HEAT analisa todos os processos que afetam a temperatura da água, como troca de calor com a superfície e formação de gelo. Além disso, este módulo permite também a simulação de salinidade (ou sólidos dissolvidos totais), coliformes e duas outras variáveis inferidas pelo usuário.

Em relação às escalas de tempo, o modelo considera um período permanente, sazonal, mensal, diário ou horário, o que dependerá do objetivo e detalhamento buscado na modelagem.

O WASP funciona através de uma interface gráfica própria (figura 3-9), onde o usuário pode inserir os dados de entrada, como as constantes, cargas, propriedades de segmento, propriedades do sistema, escolha de parâmetros a serem modelados (figura 3-10), entre outros. Além disso, o modelo permite importar dados de outros programas, como de SIGs (ArcGis) e modelos hidrodinâmicos. Entende-se por modelos hidrodinâmicos modelos usados para representar padrões detalhados de transporte em ambientes aquáticos. Podem prever transporte de sedimentos, o que inclui metais ou compostos sorvidos nos sedimentos (exemplos: EPD-RIV1 e EFDC).

Como dados de saída, há na estrutura do modelo um processador chamado MOVEM, que fornece informações através de gráficos, podendo ser comparados com dados obtidos em campo ou com dados de outros modelos. estão inclusos arquivos em ASCII e tabelas em Excel.

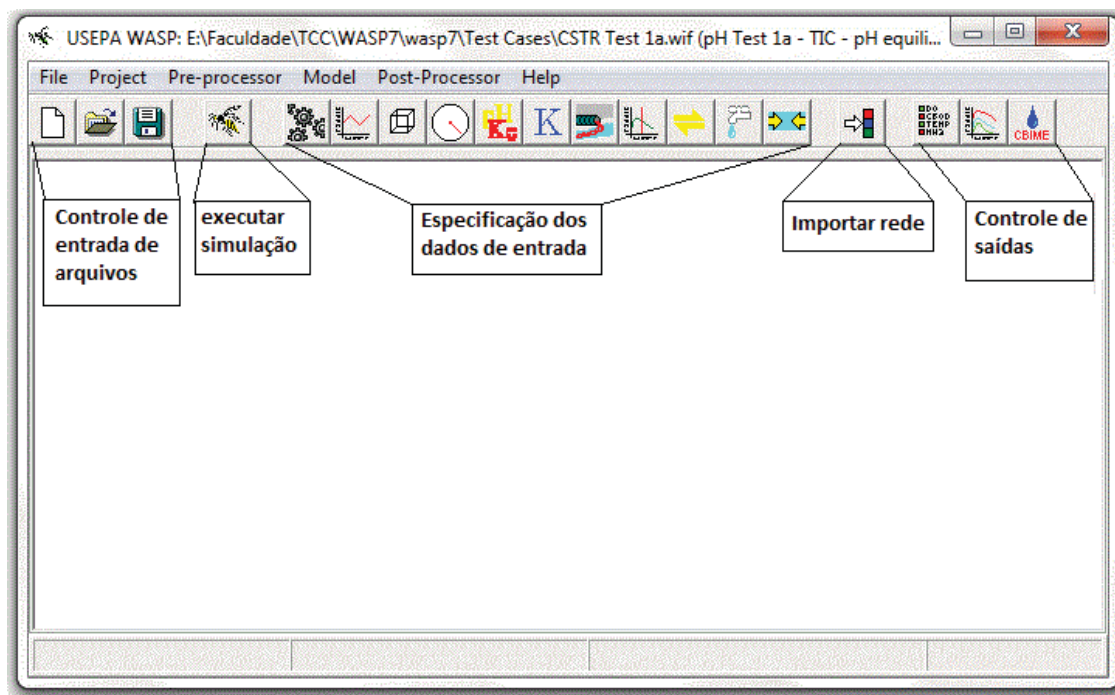


Figura 3-9: Interface gráfica do WASP7

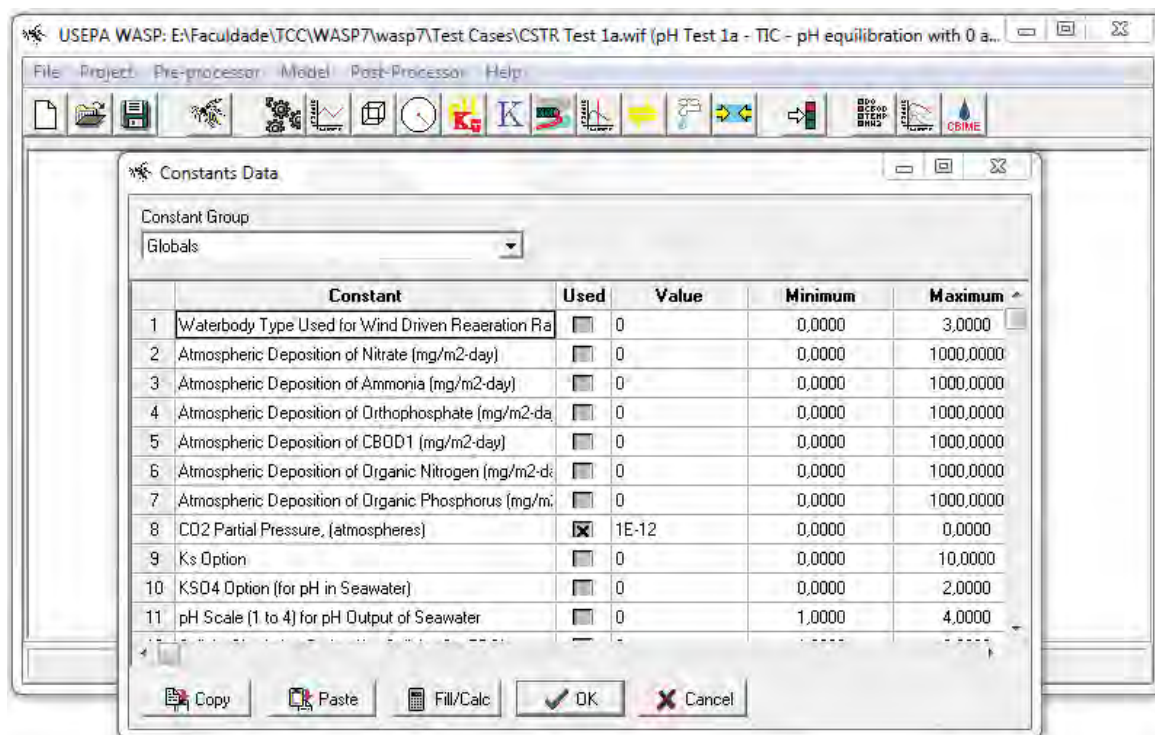


Figura 3-10: Janela de escolha de constantes a serem consideradas no modelo

3.5 CE-QUAL-ICM

O CE-QUAL-ICM é um modelo desenvolvido como parte de um pacote de ferramentas para se estudar o processo de eutrofização da Baía de Chesapeake (Chesapeake Bay), o maior estuário dos EUA. Assim como o WASP, é um modelo dinâmico “em caixa”, ou seja, que processa as concentrações dos constituintes resultantes do transporte e transformação em compartimentos de mistura (“boxes”) que podem ser arranjados em uma, duas ou três dimensões, possibilitando que o modelo seja aplicado a qualquer tipo de corpo d’água.

O modelo trabalha com 22 variáveis, incluindo propriedades físicas (como temperatura e salinidade); diferentes tipos de algas (diatomáceas, algas verdes e cianobactérias), de carbono, de nitrogênio, de fósforo e de sílica; e oxigênio dissolvido. Além disso, a demanda de oxigênio por sedimentação e fluxo de nutrientes podem ser computados por um outro modelo ou especificados pelo usuário e as variáveis podem ser individualmente ativadas ou desativadas.

Fosfato e Sílica dissolvida se prendem a sólidos inorgânicos, principalmente Ferro e Manganês. Devido ao fato de tais nutrientes se prenderem a esses metais e depois se depositarem, podendo então ser removidos, as cinéticas de remoção de ferro e manganês são consideradas no CE-QUAL-ICM.

O modelo não processa dados hidrodinâmicos. Dessa forma, dados de vazão, coeficientes de difusão e volumes devem ser inseridos pelo usuário ou lidos por outro modelo. Cerco, Carl F. e Cole, Thomas (1995) usaram o modelo hidrodinâmico C3HED-WES para computar tais dados da Baía de Chesapeake.

Quanto à sua estrutura, ele é subdividido em um programa principal (MAIN), um programa de inclusão de dados (INCLUDE) e diferentes subrotinas e arquivos, que processam as informações de cada variável inserida.

São 17 as subrotinas lidas no modelo. Elas calculam todas as informações referentes aos processos cinéticos e de sedimentação das variáveis a se considerar (CARBON, NITROG e OXYGEN, por exemplo), além de informações hidrodinâmicas inseridas pelo usuário (HYDRO) e características físicas da água (TEMPER).

Em relação aos arquivos de entrada, eles fornecem todas as informações necessárias para a estruturação do modelo, desde a segmentação do corpo d’água em compartimentos (*Geometry File* e *Map File*) às condições meteorológicas (*Meteorological Input File*) e informações de cargas externas de massa (*External*

Loads File).

Os arquivos de saída (total de 10 arquivos) apresentam os resultados calculados pelo modelo (*Plot File*), além da especificação de todas as entradas feitas no modelo (*Snapshot File*) e diagnóstico da execução do modelo (*Diagnostic File*). O arquivo de cinética (*Kinetics Flux File*) apresenta as transformações de cada variável considerada no modelo, calcula uma média dessas transformações em um tempo determinado pelo usuário e então grava os resultados em uma forma binária para então ser lida. O arquivo Balanço de Massa (*Mass Balance*) relata adição ou remoção de massa de cada célula. Neste arquivo são considerados os arquivos de cargas externas (*external loads*), fluxo bentônico (*benthic fluxes*) e respiração. Importante salientar que, para desenvolvimento e leitura dos dados dos arquivos de saída, é necessário um programa externo (*postprocessor*).

A figura 3-11 representa a estrutura do modelo listando as subrotinas e arquivos.

Da mesma forma que o WASP, o CE-QUAL-ICM baseia seu funcionamento na equação tridimensional de conservação de massa para um volume de controle V_j :

$$\frac{\delta V_j \cdot C_j}{\delta t} = \sum_{k=1}^n Q_k \cdot C_k + \sum_{K=1}^n A_k \cdot D_k \frac{\delta C}{\delta x_k} + \sum S_j$$

onde:

V_j = volume do volume de controle j^{th} (m^3);

C_j = concentração no volume de controle j^{th} ($\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$);

t, x = coordenadas temporal, espacial;

n = número de vazões atachadas ao volume de controle j^{th} ;

Q_k = vazão volumétrica através da face k do volume de controle j^{th} ($\text{m}^3 \cdot \text{seg}^{-1}$);

C_k = concentração da vazão através da face k ($\text{m}^2 \cdot \text{seg}^{-1}$);

A_k = área da face k (m^2);

D_k = coeficiente de difusão da face k ($\text{m}^2 \cdot \text{seg}^{-1}$);

S_j = cargas externas e cinética de geração e consumo no volume de controle j^{th} ($\text{g} \cdot \text{seg}^{-1}$)

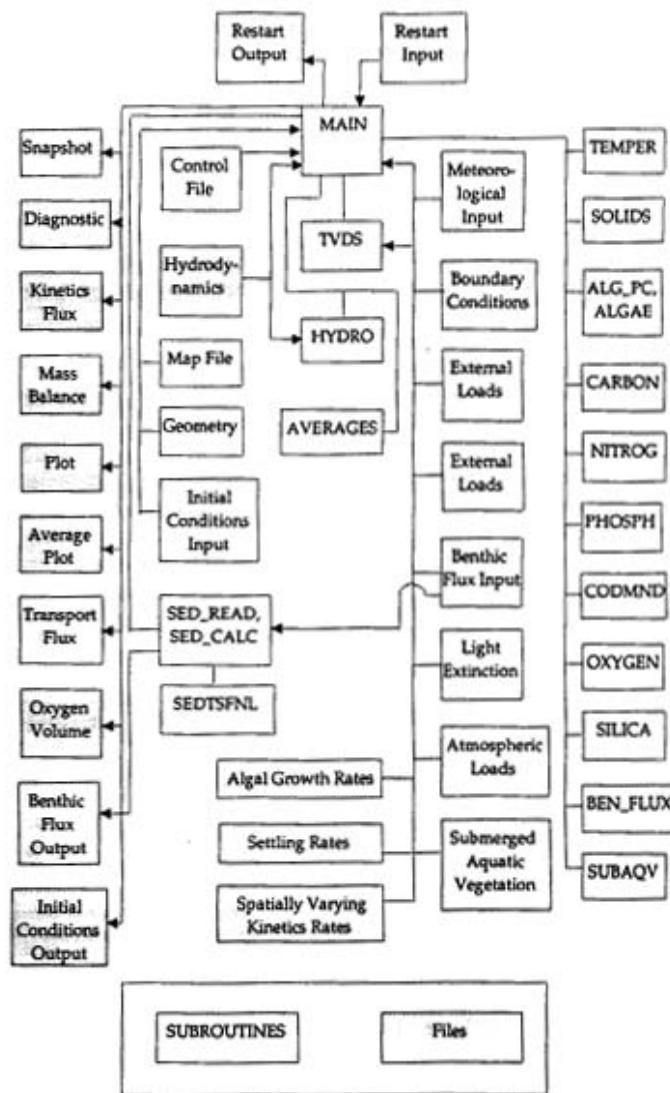


Figura 3-11: Estrutura do modelo CE-QUAL-ICM (fonte: Cerco, Carl F. e Cole, Thomas, 1995)

Esta equação é resolvida em duas etapas. A primeira delas considera efeitos de mudança em um volume de célula, transporte lateral e longitudinal e cargas externas. A segunda etapa considera os efeitos de transporte vertical.

Solução da equação de balanço de massa considerando os transportes lateral e longitudinal:

$$C_j^x = \frac{V_j}{V_j^{t+\Delta t}} + \frac{\Delta t}{V_j^{t+\Delta t}} \left(\sum_{k=1}^{nhf} Q_k C_k + \sum_{k=1}^{nhf} A_k D_k \frac{\delta C}{\delta X_k} + \sum S_j \right)$$

Onde:

C_j^* = concentração no volume de controle j^{th} depois de uma mudança de volume, cargas e processos de transporte lateral/longitudinal;

$V_j^{t+\Delta t}$ = volume do volume de controle j^{th} no tempo $t = \Delta t$;

Δt = tempo considerado;

nhf = número de faces longitudinais e laterais atachadas ao volume de controle j^{th}

A equação de balanço de massa na direção vertical é dada por:

$$\frac{C_j^{t+\Delta t} - C_j^*}{\Delta t} = (1 - \theta) \sum_{k=1}^{nvf} \frac{Q_k C_k}{V_k} + \theta \sum_{k=1}^{nvf} \frac{Q_k^{t+\Delta t} C_k^{t+\Delta t}}{V_k^{t+\Delta t}} + \sum_{k=1}^{nvf} \frac{A_k D_k}{V_k^{t+\Delta t}} \frac{\delta C^{t+\Delta t}}{\delta z}$$

Onde:

Θ = fator de peso implícito ($0 \leq \Theta \leq 1$);

nvf = número de faces verticais;

z = coordenada vertical.

Essas equações são solucionadas da mesma forma que no CE-QUAL-W2, pela aproximação por meio do método QUICKEST.

Como mencionado anteriormente, o modelo CE-QUAL-ICM considera as cinéticas de consumo de ferro e manganês em sua estrutura. Sob o nome de Metais Ativos Totais, as cinéticas do consumo de ambos metais dependem da concentração de oxigênio dissolvido na água. Na presença de oxigênio, estes metais estão quase que totalmente na forma particulada e, sob condições anóxicas, altas frações destes metais estão dissolvidas. A separação das fases dissolvida e particulada destes metais leva em conta a necessidade de uma concentração mínima necessária para ocorrer a precipitação. Este nível mínimo é função do OD:

$$TAMd = \min(TAMdmx e^{-KdotamDO}, TAM) \quad (I)$$

$$TAMp = TAM - TAMd \quad (II)$$

onde:

TAM = concentração de metais ativos totais (mol.m^{-3});

TAMd = metais ativos totais dissolvidos (mol.m^{-3});

TAMp = metais ativos totais particulados (mol.m^{-3});

TAMdmx = solubilidade dos metais ativos totais sob condições anóxicas (mol.m^{-3});

Kdotam = constante que relaciona solubilidade dos metais ativos totais ao oxigênio dissolvido ($\text{m}^3\text{g}^{-1}\text{O}_2$).

No caso em que a concentração de metais excede a solubilidade máxima, TAMdmx, a fração particulada aumenta quando a concentração de oxigênio aumenta. Se $\text{OD} \gg \text{Kdotam}$, praticamente todo metal está na forma particulada. De maneira oposta, se a concentração de metais é menor que sua solubilidade máxima, todo metal está na forma dissolvida até que a solubilidade, dependente do oxigênio, fique abaixo da concentração de metais totais, momento em que ocorre a precipitação de metais particulados.

4 ESTUDOS DE CASO E DISCUSSÃO

Como visto no capítulo anterior, o Q2K e seu predecessor, Q2E, são modelos unidimensionais e de regime estacionário. Dessa forma, eles são usados principalmente para rios com alta velocidade de fluxo longitudinal, desconsiderando-se o processo de dispersão. Além disso, seu uso possui um caráter de planejamento, uma vez que não é tão complexo de usar quanto outros modelos, oferecendo dados menos detalhados (Tsihrintzis et al,1995).

Em um estudo realizado na Coreia por Park e Lee (2001), foram aplicados ambos os modelos de qualidade de água ao rio Nakdong. Este rio, uma importante fonte de abastecimento de água para a região sudeste do país, recebe esgoto sanitário e industrial como fontes pontuais e resíduos vindos de regiões agrícolas e urbanas por escoamento superficial como fontes difusas. O objetivo do estudo foi o de examinar a relação entre estratégias de controle de poluição e a qualidade de água.

Neste estudo ficaram claras as limitações do QUAL2E. Este modelo não possui em sua estrutura interações como a conversão de algas mortas em DBO, desnitrificação (que ocorre na camada anaeróbia de sedimento ou em condições com OD muito baixo) e variação de OD causada por determinadas plantas na zona ripária. Dessa forma, o QUAL2K foi usado para suprimir estas limitações e simular um cenário mais próximo da realidade. Segundo os autores, a comparação dos dados obtidos pelos dois modelos mostrou discrepâncias entre os valores de nitrogênio total, DBO e OD, sendo o QUAL2K se aproximou melhor dos resultados obtidos em campo.

Contradizendo o fato de que estes modelos são mais apropriados em corpos d'água com alta velocidade de fluxo, foi feito um estudo no canal *Tampa Bypass*, na Florida Central, ambiente com correntes de baixa velocidade. Tsihrintzis (1995) relata que o canal foi construído para desviar água do Rio Hillsborough com o objetivo de minimizar enchentes em *Tampa* e *Temple Terrace*, na Flórida. De acordo com o estudo, o uso deste modelo serviu apenas como base para um início de estratégias de modelagem para o canal. Devido ao fato de os coeficientes e taxas usadas pelo modelo não condizerem com a realidade do local, estes foram usados apenas como referência para os ajustes de calibração, o que mostra que tal modelo de qualidade de água possui em sua estrutura, baseada em características específicas de determinada região, uma limitação ao seu uso.

Gonçalves (2009) desenvolveu um modelo de qualidade de água utilizando o software Vensim PLE para suprir determinadas deficiências estruturais dos modelos QUAL2E e QUAL2K. Entre tais deficiências estruturais há, de acordo com o autor (e concordando com Tsihrintzis (1995)), o fato de não ser possível se modificar a estrutura interna deste modelo. Por exemplo, o coeficiente de reaeração usado pelo modelo QUAL2K possui valor típico de regiões temperadas, o que não seria muito adequado para uma aplicação em uma região tropical como o Brasil. Além disso, a análise de rios em estado permanente implica em se usar coeficientes constantes ao longo de um corpo d'água, o que pode mascarar a realidade dos processos envolvidos no sistema (Shanahan et al, apud Gonçalves, J.C., 2009).

Quanto ao modelo bidimensional CE-QUAL-W2, Silva (2009) utilizou-o para analisar a qualidade da água do Lago do Descoberto, localizado no Distrito Federal. De acordo com a autora, o lago é alvo de inúmeras cargas de poluentes e, para se analisar tais impactos e o efeito de eutrofização, foram considerados no modelo os parâmetros temperatura, nitrogênio, fósforo e oxigênio dissolvido. Ainda de acordo com ela, o modelo foi escolhido por: (I) possibilitar uma análise de poluentes no reservatório, como fósforo, OD e clorofila-a; (II) fornecer a saída de montante e jusante no reservatório e na profundidade; (III) simular a relação de causa e efeito entre o carregamento e a resposta do reservatório; e (IV) permitir a adição ou subtração das camadas e dos segmentos estruturados pelo modelo. Primeiro foram simuladas as características hidrodinâmicas (como vazão, nível de água e temperatura) para assim habilitar o modelo para simular os parâmetros de qualidade de água.

A autora constatou, como principais dificuldades no uso do modelo, problemas de calibração e confirmação devido à dificuldade de se obter dados experimentais, além de cargas e efluentes sanitários e industriais não computados pelo modelo.

Um outro trabalho com este modelo envolveu estudantes da Universidade Brigham Young, nos EUA, juntamente com estudantes da ITESO (Universidad Jesuita de Guadalajara). Eles desenvolveram um banco de dados para ser usado no modelo CE-QUAL-W2 aplicado ao estudo de qualidade da água da represa El Cajon, no Rio Santiago, à oeste do México. As altas concentrações de biomassa, sedimento e efluentes sanitários, combinados à alta taxa de precipitação, promovem um agravamento da qualidade da água na represa, sendo então necessário se aplicar um modelo de qualidade de água para entender este quadro e auxiliar na tomada de decisão no que diz respeito à construção de novas represas ao longo do rio (Barlow,

Clark e Obregon, Oliver, 2007). Para o uso do modelo, precisou-se criar quatro arquivos de entrada: um arquivo de batimetria, que possui toda a informação geométrica para o delineamento do reservatório; um arquivo de controle, constituído de parâmetros hidrogeológicos, como coeficientes cinéticos; um arquivo meteorológico, constituindo de dados como velocidade dos ventos, temperaturas e precipitações; e um arquivo de vazões, contendo vazões medidas mensalmente. Para os autores, um bom arquivo de batimetria é essencial para se ajustar o modelo adequadamente. Vários outros arquivos precisariam ser criados, como um arquivo gráfico, um arquivo de vazão de efluente e um arquivo de temperaturas de tributários. Porém, pela impossibilidade de se obter todas as informações necessárias para tal, foram usados dados de outros trabalhos, o que gerou a erros nos resultados. Com falta de tempo e de dados, percebeu-se a dificuldade de se montar um banco de dados adequado para se aplicar o modelo, além do fato de que muitas das variáveis usadas eram as padrões dadas pelo modelo e não as obtidas em campo, demonstrando uma limitação de sua calibração. Apesar de o modelo nunca ter sido rodado, muito de seu funcionamento foi compreendido. Ficaram evidentes os problemas ao se criar o modelo, principalmente no que diz respeito à montagem do arquivo de controle, que apresentou muitos erros e não ficaram claros quais eram eles.

Além destas, o modelo possui limitações intrínsecas às suas características. Uma vez que considera desprezíveis as variações laterais (transversais), ele não é muito indicado para corpos d'água largos e que apresentam alto grau de mistura transversal. Além disso, o modelo não considera a cinética envolvendo sedimento e aquela entre sedimento e superfície, ou seja, deixa a desejar quanto à modelagem da demanda bentônica de oxigênio.

Quanto às simulações, o modelo pode exigir muito da capacidade de operação de um computador e pode ser preciso muito tempo para se fazer uma simulação a longo prazo, que considera o monitoramento de qualidade de água dentro de uma década, por exemplo.

Passando destes modelos para os dinâmicos tridimensionais, foram analisados dois modelos: WASP e CE-QUAL-ICM.

Suárez, J. et al. (1995) utilizou a versão 5 do WASP para estudar as variações diárias da qualidade da água e o impacto de sistemas de esgotos combinados no Rio Nalón, na Espanha. Um modelo baseado no QUAL2E para este era usado como ferramenta de auxílio no planejamento de sistemas de esgoto e estações de tratamento.

Contudo, para se avaliar o impacto causado por descargas de sistemas de esgotos combinados, um modelo estacionário não era muito adequado. Maiores descargas do sistema combinadas com tempestades causam grandes variações nas concentrações de poluentes no rio, fenômeno que seria melhor estudado por meio de um modelo dinâmico. Além disso, em épocas de estiagem o sistema aquático torna-se mais sensível à poluição. Dessa forma, o WASP 5 foi utilizado. Os parâmetros analisados foram DBO, nitrogênio orgânico, amônia, nitratos, nitrogênio total e OD.

A estrutura conceitual, parâmetros, constantes e descargas obtidas pelo QUAL2E foram usadas no WASP. A partir desses dados foi construído o modelo dinâmico, processo que teve duas etapas: a elaboração do modelo WASP em estado estacionário e depois a elaboração deste modelo no estado dinâmico. O WASP no estado estacionário foi elaborado a partir do nível três do módulo de eutrofização (EUTRO), o qual leva em consideração a oxidação da matéria orgânica carbonácea e o ciclo de nitrogênio. Segundo os autores, neste nível do módulo, o estágio de transformação de nitrito a nitrato não é considerado, o que representa uma diferença relevante em relação ao QUAL2E. Além disso, outro problema na simulação da qualidade da água do rio se deu pelo fato de não se ter simulado o processo de consumo de matéria orgânica carbonácea (DBO) e de nitrogênio pela sedimentação de partículas sólidas., o que afeta o perfil de OD.

Em relação ao modelo dinâmico do WASP, foram consideradas diversas fontes de descargas pontuais, de onde haveria variação no despejo de poluentes sanitários e industriais. A temperatura também é um fator determinante na variação diária da qualidade da água, e foi considerada na calibração do modelo.

De acordo com os autores, os dados obtidos a partir do modelo estacionário serviram de forma adequada para a construção do modelo dinâmico. Além disso, a caracterização hidráulica deste tipo de rio é muito complicada e, ao mesmo tempo, sua influência na evolução da qualidade da água é muito importante. Como limitação principal, pode-se citar o problema da não-quantificação do consumo de oxigênio dissolvido pela nitrificação, deficiência suprimida pela sua versão mais atual, o WASP7.

Em Janeiro de 2004, o modelo WASP 7.1 foi usado para se estimar a carga total máxima diária (*Total Maximum Daily Load*, ou TMDL) de clorofila-a na Baía de *Little River* (*Little River Embayment*), localizada na Bacia de *Coosa River* (*Coosa River Basin*) com o objetivo de se assegurar que a qualidade da água no local estava de

acordo com o padrão determinado pela *Federal Clean Water Act*, nos EUA.

Para a execução deste trabalho foram usados três modelos em conjunto: o LSPC (Load Simulation Program em C++), que calcula os efeitos de fontes difusas na qualidade e fluxo da água (no caso, a lixiviação do solo e carregamento de seus nutrientes para a o corpo d'água); o EFDC (Enviromental Fluid Dynamic Code), modelo hidrodinâmico citado anteriormente, que simula o transporte de água para dentro e fora da baía; e o WASP, usado para simular o transporte e destino de nutrientes para dentro e para fora da baía, além da absorção de fitoplâncton por meio da medição de crescimento e morte de algas usando-se como parâmetro a clorofila-a.

Os parâmetros de vazão e transporte calculados pelo modelo EFDC serviram de base para se efetuar a simulação no WASP. Concentrações de DBO, Nitrogênio Total e Fósforo Total foram determinadas pelo modelo LSPC, que prevê as cargas totais de nutrientes fornecidas pelas bacias, incluindo nutrientes advindos da lixiviação do solo causada pelas chuvas, além de cargas de fontes pontuais. Esses dados são usados na calibração do WASP após o fracionamento das cargas de Nitrogênio Total em amônia, nitrito e nitrato, e a carga de Fósforo Total em ortofosfatos e fósforo orgânico.

Segundo o trabalho, as dificuldades encontradas se deram principalmente devido à complexidade dos modelos utilizados, que requerem muitos dados de entrada e de calibração. Em relação ao WASP, o processo de fracionamento dos dados obtidos dos outros dois modelos podem não ser tão precisos, exigindo-se grande número de dados para minimizar o erro.

O modelo CE-QUAL-ICM, como mencionado, faz parte de um pacote de modelos desenvolvidos para se entender o processo de eutrofização de Baía de Chesapeake, nos EUA. Este pacote deveria considerar a resposta da coluna d'água quanto à sedimentação bentônica para atividades de gerenciamento; realizar simulações a curto (anos) e longo prazos (décadas); considerar variações laterais na qualidade de água; determinar respostas da Baía para estratégias de controle de nutrientes em determinadas áreas; prever o tempo de resposta da Baía frente à ações de gerenciamento; estimar a frequência de eventos de qualidade de água críticos; e estimar variações históricas de oxigênio.

Para tanto, o pacote de modelos é constituído de três modelos que se interligam. Os processos de transporte são modelados pelo modelo hidrológico CH3D-WES (Johnson et al, 1993), que prevê velocidade, difusão, elevação da superfície,

salinidade e temperatura em curtas escalas de tempo. Juntamente com este, foi usado um processador Langrangian (Dortch et al, 1992), que filtra as informações hidrodinâmicas obtidas no primeiro modelo e gera as informações de entrada para o próximo modelo, o CE-QUAL-ICM.

Foi criado um grid que compartimentalizou a Baía em 729 células no plano superficial. Os grids hidrodinâmicos e de qualidade de água incluíam de 2 a 15 células, com 1,6 m de espessura na vertical, com um total de 4029 células. O CE-QUAL-CIM foi aplicado durante os anos de 1984 e 1986.

Para calibração do modelo de qualidade de água foram feitas observações e previsões para o rio principal e seus tributários, comparando-se os valores em diversas escalas espaciais e temporais. A figura 4-1 mostra o grid formado na Baía de Chesapeake.

O modelo passou por quatro fases de calibração, sendo mudados inúmeros dados e valores para que o modelo então respondesse da melhor maneira possível. Foram consideradas as cargas externas de quatro fontes: cargas vindas de seus tributários e do Rio Susquehanna, principal fonte de água ao sistema; fontes difusas que entram no sistema por meio das linhas de queda (*fall lines*) do rio; fontes pontuais domésticas e industriais; e cargas carregadas pelas chuvas e ventos até a superfície da água. O termo *Fall Line* diz respeito à uma linha de contato entre duas regiões morfológicas, gerando trechos de corredeiras e cachoeiras.

A calibração do modelo foi, de maneira geral, bastante satisfatória. De acordo com os autores, apesar dos inúmeros exercícios de calibragem, nenhum ajuste forçado das curvas modeladas pode compensar deficiências nas formulações ou inserções de dados. Neste caso específico, foram eliminadas algumas situações em que fosse necessário se forçar a calibração. O método de cálculo de médias de Langrangian, utilizado no modelo, elimina a necessidade de uso de parâmetros de dispersão para o transporte de massa, enquanto que o modelo de sedimentação elimina necessidade de ajustes no fluxo de material entre sedimento e água. Além disso, o CE-QUAL-ICM calcula o balanço de OD usando carbono orgânico ao invés de DBO, diferentemente de outros modelos, que tratam o balanço de OD de maneira interligada ao de DBO, processo de nitrificação, crescimento de algas e respiração, além da demanda bentônica de oxigênio. Isto elimina aproximações equivocadas da produção de DBO por algas e extrapolação de medidas de DBO a curto e longo prazo.

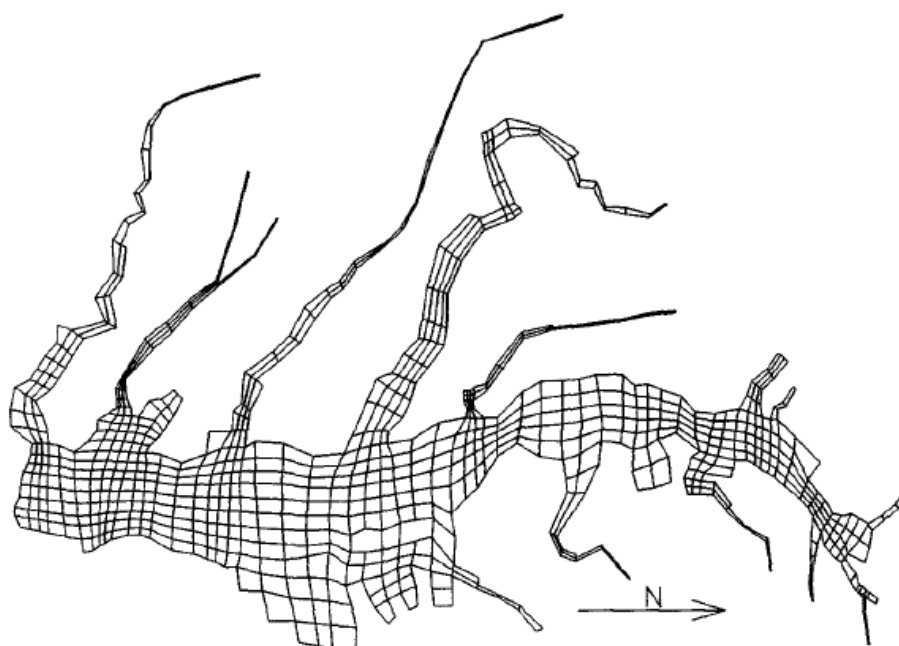


Figura 4-1: Grid computacional gerado para a Chesapeake Bay (Ceco, Carl F. e Cole, Thomas M., 1994)

O principal desafio para realização deste estudo, que ainda significou um grande avanço da modelagem de eutrofização, foi o pareamento entre três modelos diferentes, cada um com uma função específica, para se chegar a resultados satisfatórios. Primeiro, a conexão entre um modelo de eutrofização a um modelo hidrodinâmico tridimensional, os quais operam por meio de um grid que fornece um ambiente com transporte de massa lateral e vertical ao longo do sistema. Segundo, a conexão entre o modelo de eutrofização e o modelo de sedimentação torna necessário que o primeiro modelo forneça informações espaciais e temporais precisas de deposição de carbono orgânico, nitrogênio, fósforo e sílica, além de dados de concentrações de nutrientes e OD para se entender seus efeitos no processo de sedimentação. Terceiro, a capacidade de se modelar a longo prazo, considerando variações ambientais advindas das diferentes temporadas sazonais, permite examinar os efeitos dos nutrientes ao longo das temporadas e se antecipar a respostas do sistema a essas variações, servindo como base para um gerenciamento adequado (Cercó, Carl F. e Cole, Thomas, 1995).

Abaixo segue uma tabela comparativa entre os modelos estudados, onde pode se ver suas principais características:

MODELO		QUAL2E/2K	CE-QUAL-W2	WASP	CE-QUAL-ICM
Corpo d'água	Corrente, Rio	X	X	X	X
	Lago, Reservatório		X	X	X
	Estuário	X	X		
Dimensão	1-D	X	X	X	X
	2-D		X	X	X
	3-D			X	X
Tempo	permanente	X			
	dinâmico		X	X	X
Hidrodinâmica	inserido	X		X	
	simulado		X	X	X
	ligados a outro modelo		X		X
Transporte	advecção	X	X	X	X
	dispersão	X	X	X	X
	Troca bentônica	-/X	X	X	X
Cargas de poluentes	Inserido (permanente)	X	X	X	X
	Inserido (variável)		X	X	X
	Simulados (através de outros modelos)			X	
Outros	Pré-processador	X		X	
	Pós-processador	X		X	

Fonte: Adaptado de Donigian et al, 1995

5 CONCLUSÃO

As características do corpo d'água estão entre os principais aspectos a se considerar no momento de escolha. Dentre as características físicas, deve-se notar que rios mais compridos e pouco largos, de alta velocidade, tendem a possuir baixa taxa de dispersão lateral, ideal para modelos unidimensionais como o QUAL2K. Em contrapartida, corpos d'água mais largos, como rios e reservatórios, possuem águas com menores velocidades de fluxo e também maiores taxas de dispersão lateral e/ou vertical, ideal para modelos bi- ou tridimensionais, como o CE-QUAL-W2 e CE-QUAL-ICM. Além disso, a questão do tempo (estado estacionário ou dinâmico) deve ser levada em conta. Em um modelo de rio em estado estacionário, considera-se que não há variação nas cargas e emissões de poluentes. Isso é muito importante se verificar, uma vez que, em regiões com eventos freqüentes de alta precipitação, por exemplo, a variação de vazões e concentrações de poluentes é bastante alta, sendo então mais adequado um modelo dinâmico, o qual considera estas variações. Outro aspecto a se considerar é que tais modelos foram criados a partir de um determinado corpo d'água (como o CE-QUAL-ICM, para a Baía de Chesapeake). Dessa forma, os coeficientes do modelo são ajustados para as características típicas do local. Caso o modelo não possibilite uma mudança na sua estrutura interna em relação aos coeficientes, com certeza haverá problemas na sua calibração, pois as previsões fornecidas não irão condizer de maneira fiel com a realidade.

Outro aspecto importante é a estrutura do modelo. Os modelos são cada vez mais complexos, exigindo que se tenha um número cada vez maior de dados de entrada para sua calibração e execução. Além disso, alguns modelos possuem estruturas mais específicas para determinadas situações. O WASP, por exemplo, possui um módulo que considera o transporte de poluentes (TOXI), o que torna o modelo ideal para se estudar o comportamento de algum poluente no meio. O CE-QUAL-W2 considera a cinética de consumo de ferro, uma vez que este composto está ligado à concentração de nutrientes por meio de adsorção via deposição. O CE-QUAL-ICM considera, em sua estrutura, quatro grupos diferentes de fósforo: O fósforo algal, fósforo orgânico dissolvido, fósforo particulado variável e estável (refratário), sendo então útil quando se deseja ter uma análise mais detalhada do ciclo de fósforo na água e, de maneira indireta, do processo de eutrofização.

Além destes aspectos, deve-se levar em conta as condições para a aplicação prática de determinado modelo. Modelos unidimensionais são teoricamente mais

simples por considerarem uma quantidade menor de dados de entrada, fato que exige menos tempo e dedicação, fazendo deles programas mais práticos e ideais no âmbito de planejamento. Modelos tridimensionais, por sua vez, são muito mais complexos e podem exigir muito tempo e dedicação para serem calibrados e aplicados, o que implica em gastos maiores. Eles podem oferecer informações muito mais detalhadas, sendo adequados para estudos avançados de determinado corpo d'água. Ressalta-se também que, quanto mais complexo for um modelo, maior a dificuldade em ajustar seus coeficientes, bem como em levantar dados necessários à sua execução, o que potencializa a ocorrência de erros, seja na inserção de dados, seja na obtenção de dados de saída, podendo gerar resultados incoerentes.

Para concluir, não se deve esquecer que os modelos são limitados por si só. As interações entre os parâmetros de qualidade da água são uma mera simplificação de um ecossistema extremamente complexo, o que leva invariavelmente a resultados apenas aproximados da realidade.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AMBROSE, R.B. **WASP7 Mercury Model – Model Theory and User’s Guide**. Supplement to Water Quality Analysis Program (WASP) User Documentation. USA. USEPA. 2009.

AMBROSE, R.B. **WASP7 Multiple Algae – Model Theory and User’s Guide**. Supplement to Water Quality Analysis Program (WASP) User Documentation. USA. USEPA. 2009.

AMBROSE, R.B. **WASP7 Stream Transport – Model Theory and User’s Guide**. Supplement to Water Quality Analysis Program (WASP) User Documentation. USA. USEPA. 2009.

AMBROSE, R.B.; et al. **WASP 5.x, a hydrodynamic and water quality model. Model theory, user’s manual and programmes guide**, US-EPA. 1991.

ATLANTA (cidade). The Georgia Department of Natural Resources. **Total Maximum Daily Load Evaluation for the Little River Embayment in the Coosa River Basin for Chlorophyll a**. 2004. 50 p.

BARLOW, C.; OBREGON, O. **CE-QUAL-W2 water quantity and quality model for El Cajon Reservoir**. Department of Civil and Environmental Engineering, Brigham Young University. EUA. 2007. 43 p.

BRASIL. Código das Águas de 1934. **Código das Águas: e legislação correlata**. Brasília: Senado Federal, Subsecretaria de Edições Técnicas, 2003. 234 p.

BRASIL. Constituição federal de 1988. **Constituição da República Federativa do Brasil: Texto constitucional promulgado em 5 de outubro de 1988**. – Brasília: Senado Federal, Subsecretaria de Edições Técnicas, 2005. 84 p.

BRASIL. Ministério da Saúde. **Portaria nº 518**. 25 de Março de 2004. 15 p.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. **Resolução CONAMA nº 357**. 17 de Março de 2005. 23 p.

CERCO, Carl F., COLE, Thomas M. **Three Dimensional Eutrophication model of Chesapeake Bay**. U.S. Army Corps Engineers. EUA. Vol. I. 1994. 654 p.

CERCO, Carl F., COLE, Thomas M. **User's Guide to the CE-QUAL-ICM Three-Dimensional Eutrophication model**. U.S. Army Corps Engineers. EUA. Versão I. 1995. 320 p.

CHAPRA, S.C.; PELLETIER, G.J.; TAO, H. 2005. **QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.04: Documentation and Users Manual**. Civil and Environmental Engineering Dept., Tufts University, Medford, MA.

CHAPRA, STEVEN C. **Surface water-quality modeling**. Boston, Mass: WCB/McGraw-Hill, 1997. 844 p.

COLE, T.M.; WELLS, S. A. **CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally averaged, Hydrodynamic and Water Quality Model, Version 3.6**. Department of Civil and Environmental Engineering, Portland State University, Portland, OR. 2008.

DONIGIAN, Jr. A.S.; IMHOFF, J.C.; AMBROSE, Jr. R.B. **Modeling watershed water quality**. Environmental Hydrology. Kluwer Academic Publishers, Netherlands. Ed V.P. Singh. 1995. p. 377-426.

DOVER (cidade). Delaware Department of Natural Resources and Environmental Control. **Total Maximum Daily Loads (TMDLs) Analysis for Pocomoke River, Delaware**. Watershed Assessment Section Division of Water Resources. 2005.

EPA - United States Environmental Protection Agency. **Introduction to the Water Quality Analysis Modelling System**. Versão 7. Estados Unidos, 2005.

EPA - United States Environmental Protection Agency. **Rates, Constants, and Kinetics Formulations in Surface Water Quality Modeling**. Athens, Georgia. 2. ed. 455 p. 1985.

GONÇALVES, J.C.S.I. **Desenvolvimento de modelo numérico para a simulação da qualidade da água em rios utilizando o software Vensim PLE**. São Carlos: Escola de engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo; 2009. 203 p.

NUVOLARI, ARIIVALDO et al. **Esgoto Sanitário. Coleta, Transporte, Tratamento e Reuso Agrícola**. São Paulo, SP. 1ª edição. 519 p. 2003.

PARK, S. S.; LEE, Y.S. **A water quality modeling study of Nankdong River, Korea**. Ecological Modelling, Seoul, v.152, p. 65-75, 2001.

SÃO PAULO. Cetesb. Secretaria do Estado do Meio Ambiente. **Variáveis de qualidade das águas**. Disponível em:

< <http://www.cetesb.sp.gov.br/Agua/rios/variaveis.asp>>. Acesso em: 16 de maio de 2010.

SILVA, G.V. **Simulação Bidimensional da Qualidade da Água do Lago do Descoberto (DF/GO)**. Dissertação de Mestrado em Ciências Mecânicas, Publicação ENM DM – 134 A /2009. Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade de Brasília, Brasília, DF. 117 p. 2009.

SILVA, G.V. **Simulação bidimensional da qualidade da água do Lago do Descoberto (DF/GO)**. Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade de Brasília, DF. 2009. 117 p.

SPERLING, M.V. **Estudos e modelagem da qualidade da água de rios.** Série Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias. Belo Horizonte, MG: UFMG. v. 7. 2.ed. 588 p. 2007.

SPERLING, M.V. **Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos.** Série Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias. Belo Horizonte, MG: UFMG. v. 1. 3.ed. 452 p. 2005.

SUÁREZ, J. et al. **Dynamic simulation of water quality in rivers. WASP5 application to the River Nalón (Spain).** WATER POLLUTION 95, 3rd International Conference on Water Pollution, Modelling, Measuring and Prediction, L.C. Wrobel and P. Latinopoulos (eds.), Porto Carras, Greece, 1995, p. 178-188.

TSIHRINTZIS, V.A., FUENTES, H.R., RODRIGUEZ, L. **Modeling Water Quality in Low Velocity Sub-tropical Streams.** WATER POLLUTION 95, 3rd International Conference on Water Pollution, Modelling, Measuring and Prediction, L.C. Wrobel and P. Latinopoulos (eds.), Porto Carras, Greece, April 25-28, pp. 171-178. 1995.

WELLS, Sott. A. **Basis for the CE-QUAL-W2 Version 3 River Basin Hydrodynamic and Water Quality Model.** Department of Civil and Environmental Engineering. Portland State University. Portland, Oregon. 2002.