

Aplicação da ferramenta computacional QUALI-TOOL na avaliação da qualidade da água em ambiente lótico

Application of computational tool QUALI-TOOL in assessment of water quality in a lotic environment

- **Data de entrada:**
01/05/2017
- **Data de aprovação:**
18/12/2017

José Eduardo Alamy Filho/Marcio Ricardo Salla/Ariel Ali Bento Magalhães/
Túlio Machado Humberto Guimarães/Carlos Eugenio Pereira

DOI: 10.4322/dae.2019.006

Resumo

Os usos múltiplos dos recursos hídricos geram conflitos de ordem quantitativa e qualitativa em escala de bacia hidrográfica, impulsionando o surgimento de ferramentas computacionais, com os mais diferentes níveis de complexidades, no auxílio à gestão e planejamento das águas superficiais. Este artigo apresenta uma ferramenta de uso livre para a avaliação da qualidade da água em ambiente lótico, denominada QUALI-TOOL, utilizando-se de linguagem de programação Visual Basic com interface gráfica no Excel. A ferramenta permite a simulação dos parâmetros arbitrários (sólidos suspensos, compostos tóxicos, entre outros), oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, fósforo total, nitrogênio orgânico, amônia, nitrato, *Escherichia Coli* e metais pesados. Para o emprego de toda a potencialidade da ferramenta, utilizou-se como área de estudo uma bacia hipotética, cujo trecho de aproximadamente 62,5 km do rio principal recebe tributários, lançamentos pontuais e difusos de cargas poluentes e demandas consuntivas pontuais. Para atestar a acurácia das simulações matemáticas realizadas na ferramenta QUALI-TOOL, as modelagens também foram realizadas em duas outras ferramentas computacionais. De uma forma geral, QUALI-TOOL revelou-se uma ferramenta útil para a comunidade acadêmica e profissional quanto ao planejamento e gestão de recursos hídricos em escala local e de bacia hidrográfica.

Palavras-chave: Qualidade da água. Ambiente lótico. Ferramenta computacional. QUALI-TOOL.

Abstract

The uses of water resources generate conflicts of quantitative and qualitative nature in basin scale, impelling the development of computational tools with the most different levels of complexity, which assist the management and planning in water surface. This paper presents a free tool for evaluation of water quality in lotic environment, called QUALI-TOOL, using a Visual Basic programming language with graphical interface in Excel. The tool allows the simu-

José Eduardo Alamy Filho – Engenheiro Civil. Doutor em Hidráulica e Saneamento pela Escola de Engenharia de São Carlos - EESC, Universidade de São Paulo - USP. Docente Permanente Associado II na Faculdade de Engenharia Civil - FECIV, Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

Marcio Ricardo Salla – Engenheiro Civil. Doutor em Hidráulica e Saneamento pela Escola de Engenharia de São Carlos - EESC, Universidade de São Paulo - USP. Docente Permanente Associado I na Faculdade de Engenharia Civil - FECIV, Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

Ariel Ali Bento Magalhães – Engenheira Civil. Mestre em Engenharia Civil pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil - PPGECC da Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

Túlio Machado Humberto Guimarães – Engenheiro Civil. Mestrando em Engenharia Civil pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil - PPGECC da Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

Carlos Eugenio Pereira – Engenheiro Civil. Doutor em Hidráulica e Saneamento pela Escola de Engenharia de São Carlos - EESC, Universidade de São Paulo - USP. Docente Permanente Associado I na Faculdade de Engenharia Civil - FECIV, Universidade Federal de Uberlândia - UFU.

***Endereço para correspondência:** Avenida João Naves de Ávila, 2121 - Campus Santa Mônica - Santa Mônica - Bloco 1y - Sala 237 - CEP: 38400-902 - Uberlândia, Minas Gerais. E-mail: marcio.salla@ufu.br

lation of arbitrary parameters (suspended solids, toxic compounds and others), dissolved oxygen, oxygen biochemistry, organic nitrogen, ammonia, nitrate, *Escherichia-coli* and heavy metals. For the usage of the tool's full potential, a hypothetical basin was used as the study area, in which 62.5 km of the main river receives tributaries, punctual and diffuse inputs of pollutant loads and punctual consumptive demand. The simulations were also performed in others two computational tools to verify the accuracy of QUALI-TOOL. In general, QUALI-TOOL has proved to be a useful tool for academic and professional community in planning and managing water resources in local and basin scale.

Keywords: Water quality. Lotic environment. Computational tool. QUALI-TOOL.

1 INTRODUÇÃO

A conservação dos recursos hídricos se tornou uma preocupação pungente na sociedade moderna, uma vez que os conflitos de ordem quantitativa e qualitativa pelos usos múltiplos da água são acentuados. A gestão dos recursos hídricos no território brasileiro é integrada e, ao mesmo tempo, descentralizada com valor econômico (REBOUÇAS, 2002), o que acirra os conflitos de interesse entre os diversos fins, principalmente entre abastecimento humano, insumo e matéria-prima para a atividade industrial, irrigação e hidrelétrico.

Em países pobres, com enorme desigualdade entre a densidade populacional e a oferta hídrica, pessoas vivem sem quantidade de água com qualidade necessária para uma vida saudável e digna, com conseqüente mortalidade de milhões de pessoas por doenças de veiculação hídrica, principalmente as crianças.

A partir da década de 30, o comprometimento da qualidade da água superficial nas cidades com elevada densidade populacional impulsionou o surgimento dos primeiros modelos de qualidade da água que, com o passar do tempo, tornaram-se cada vez mais complexos. Atualmente, os modelos com maiores aceitabilidades são QUAL e versões (CHAPRA et al., 2008), WASP (YENILMEZ e AKSOY, 2013), AQUATOX (MAMAQANI et al., 2011), GESCAL (PAREDES-ARQUIOLA et al., 2010a e 2010b), versões de MIKE (DHI, 2017), entre outros. Nas últimas décadas, a necessidade de implantação

de planos de recursos hídricos em escala de bacia hidrográfica motivou o surgimento de ferramentas computacionais que atuam como Sistemas de Suporte à Decisão - SSD e que vinculam a modelagem quantitativa e qualitativa da água, com destaque para Argent et al., (2009), Paredes-Arquiola et al., (2010a, 2010b), Zhang et al., (2011), Sulis e Sechi (2013) e Welsh et al., (2013).

As ferramentas computacionais de qualidade da água em ambientes lêntico e lótico mais sofisticadas, as quais possibilitam concomitantemente a criação da topologia hídrica georreferenciada com a inclusão dos dados de entrada (características hidráulicas e batimétricas, vazão, qualidade da água e coeficientes dos processos bioquímicos e físicos), ainda são de uso comercial, tornando-se muitas vezes inacessíveis à comunidade acadêmica e aos profissionais em início de carreira. Essas constatações podem ser observadas na ferramenta GESCAL (PAREDES-ARQUIOLA et al., 2010a e 2010b). Contudo, as ferramentas mais simples estruturalmente e de uso livre com fácil acesso trazem dificuldades no processo de alimentação dos dados de entrada, uma vez que utilizam planilhas eletrônicas complexas, a depender da extensão do curso de água, do número de afluentes e do passo de discretização adotado. Essas constatações podem ser observadas na ferramenta QUAL-UFMG (VON SPERLING, 2007).

A ferramenta QUALI-TOOL permite a simulação de qualidade da água em ambiente lótico, em es-

cala local e de bacia hidrográfica. Em toda a programação matemática é utilizada a linguagem de programação *Visual Basic Applications* vinculada à planilha eletrônica do Excel®. A principal vantagem da ferramenta, diante das inúmeras opções de ferramentas computacionais ou sistemas de suporte a decisão existentes na literatura, é a facilidade do manuseio a partir de um manual do usuário didático e de uma interface simples, cujo exemplo prático anexado ao manual permite ao usuário desenvolver uma modelagem de forma simples e consistente.

2 OBJETIVOS

O objetivo deste artigo é apresentar uma ferramenta computacional de uso livre, denominada QUALI-TOOL, que simula a qualidade da água em um ambiente lótico. A critério do usuário, a ferramenta permite a simulação de diversos parâmetros, tais como contaminantes arbitrários CA (tais como sólidos suspensos, compostos tóxicos, entre outros), oxigênio dissolvido (OD), demanda bioquímica de oxigênio (DBO), fósforo total (P_{total}), nitrogênio orgânico (NO), amônia (NH_3^+), nitrato (NO_3^-), *Escherichia Coli* (*E.coli*) e metais pesados (Metais). Para este artigo foram avaliados os parâmetros OD, DBO, P_{total} , NO, NH_3^+ e NO_3^- .

A ferramenta QUALI-TOOL foi aplicada em uma bacia hidrográfica hipotética, cujo rio principal recebe tributários, lançamentos pontuais e difusos de cargas poluentes e demandas consuntivas

pontuais. A topologia do sistema hídrico permitiu extrair toda a potencialidade da ferramenta. A fim de avaliar a acurácia dos resultados gerados na ferramenta QUALI-TOOL, as mesmas simulações foram realizadas nas ferramentas GESCAL (PAREDES-ARQUIOLA et al., 2010a e 2010b) e QUAL-UFMG (VON SPERLING, 2007).

3 MATERIAIS E MÉTODOS

Esse item faz uma apresentação da ferramenta computacional QUALI-TOOL e da bacia hidrográfica hipotética analisada, e esclarece os procedimentos adotados para as simulações matemáticas nas ferramentas QUALI-TOOL, GESCAL e QUAL-UFMG.

3.1 QUALI-TOOL

A tela principal da QUALI-TOOL, com a ordem de lançamento dos dados, é ilustrada na Figura 1. Os ícones denominados topologia, discretização, hidráulica e concentrações (resultados) referem-se às planilhas de cálculo, enquanto os ícones seções transversais, vazões pontuais, vazões difusas, concentrações pontuais, concentrações difusas e coeficientes referem-se às planilhas de cadastro, nas quais o usuário deve fornecer os dados e informações de entrada. Em todas as planilhas, os dados de entrada são formatados na cor preta, enquanto os dados calculados são formatados na cor azul.

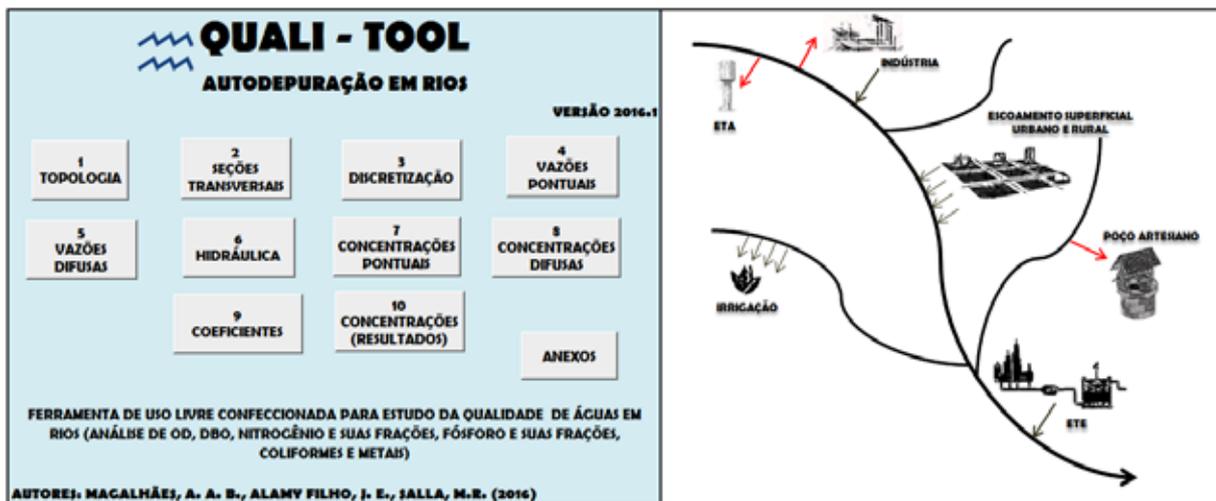


Figura 1 – Tela principal da ferramenta computacional QUALI-TOOL

3.1.1 Topologia

Inserem-se, em metros, as coordenadas UTM X (leste – oeste), Y (norte – sul) e Z (cota do terreno) dos pontos que formam o sistema hídrico, incluindo o rio principal e seus tributários. Finalizado o preenchimento das coordenadas, a ferramenta calcula o comprimento dos cursos de água (em metros) e a declividade longitudinal (em m/m). A melhor representação da morfologia do curso de água tem relação direta com a maior quantidade de coordenadas levantadas. Para isso, aconselha-se a utilização de ferramentas SIG, tais como QGIS e ARCGIS.

Nesta versão da QUALI-TOOL, no rio principal e no limite máximo de quinze afluentes modeláveis, o número de entradas pontuais (tributários, cargas poluidoras de efluente bruto ou tratado e retorno de uma fração de retirada pontual), retiradas pontuais consuntivas (abastecimento público, industrial, irrigação, dessedentação, entre outros), entradas difusas (drenagem superficial ocasionada pelas chuvas e interface com o lençol freático) e retiradas difusas (interface com o lençol freático) é ilimitado. Este texto define afluente modelável como o tributário que sofre o processo de modelagem matemática de autodepuração até seu exutório.

3.1.2 Seções transversais

Devem-se inserir, ao longo de todo o comprimento do curso de água (rio principal e seus tributários), os dados hidráulicos e geométricos da seção transversal, fixos por trecho, tais como: comprimento linear com as mesmas características hidráulicas e geométricas (em metros), largura de base (em metros), rugosidade da calha principal do rio (adimensional) e ângulos (em graus) dos taludes esquerdo e direito.

3.1.3 Discretização

Define-se simplesmente a quantidade de nós que fará parte da malha discretizada. A ferramenta fornece, para cada trecho discretizado, as coordenadas UTM (m), o comprimento linear (m), a declividade de fundo (m/m), a largura de base (m), os ângulos dos taludes esquerdo e direito (°) e o coeficiente de rugosidade de Manning (adimensional).

O maior número de nós resulta em uma modelagem matemática mais precisa pelo Método de Elementos Finitos; na contramão, deixa o processamento matemático em Visual Basic mais lento.

3.1.4 Vazões pontuais e difusas

Descrevem-se e relacionam-se todos os lançamentos e retiradas pontuais e difusas no rio principal e tributários, incluindo o comprimento linear (em metros) a partir do início do rio em que ocorrem essas injeções ou retiradas e o valor da vazão (m^3/s para vazão pontual e $m^3/s, m$ para difusa). Os valores negativos e positivos para a vazão significam, respectivamente, retirada e lançamento pontuais.

3.1.5 Hidráulica

O ícone Hidráulica tem a finalidade de gerar os resultados quantitativos para cada trecho discretizado do rio, da vazão (m^3/s), da velocidade média do escoamento (m/s) e do nível líquido (m). São gerados perfis representativos do fundo do canal, dos pontos amostrais do fundo do canal, da superfície líquida e, por fim, da vazão ao longo do rio principal e de seus tributários. Segue a base teórica:

- vazão: balanço de massa em cada trecho discretizado;
- nível líquido: adoção da equação de Manning, considerando escoamento permanente e uniforme para cada trecho de rio discretizado. As variáveis vazão, declividade de fundo, coeficiente de rugosidade de Manning, largura da base do canal e declividade do talude são fixas em cada trecho de rio discretizado;
- velocidade média do escoamento: equação da continuidade, por meio da divisão da vazão escoada pela área molhada fixa no trecho discretizado.

3.1.6 Concentrações pontuais e difusas

O procedimento para preenchimento dos dados de entrada das concentrações é similar ao anteriormente descrito para as vazões. Nessas planilhas, apenas com um clique nas células de importação de dados pontuais e difusos de vazão, a ferramenta busca automaticamente os dados de

descrição, comprimento linear a partir da injeção e os valores de vazão. Como dado de entrada nessas planilhas, para o rio principal e tributários, deve-se apenas informar as concentrações para os diversos parâmetros de qualidade da água (em mg/L), em todos os lançamentos pontuais e difusos, nesta sequência.

3.1.7 Coeficientes

Neste ícone deve-se informar, para cada trecho discretizado do rio principal e de seus tributários, os coeficientes dos processos físicos e bioquímicos envolvidos nos equacionamentos matemáticos descritos nas equações (3) a (12). A ferramenta permite que o usuário utilize valores de referência da literatura ou que introduza valores aleatórios para cada trecho discretizado.

3.1.8 Concentrações (resultados)

A ferramenta gera, no rio principal e em seus tributários, os perfis de concentração (em mg/L) para todos os parâmetros simulados. Segue a base teórica:

- a concentração dos parâmetros no início de cada segmento ou trecho discretizado é estimada por meio da equação de mistura, conforme ilustra a equação (1).

$$C_i = ((C_j * Q_j) + (C_e * Q_e)) / (Q_j + Q_e) \quad (1)$$

Na equação (1), C_i é a concentração no início de cada segmento discretizado (mg/L); C_j é a concentração de jusante do segmento discretizado anterior (mg/L); Q_j é a vazão de jusante do segmento discretizado anterior (m^3/s); C_e é a concentração de entrada (tributário, efluente bruto ou tratado, entre outros) (mg/L) e Q_e é a vazão de entrada (m^3/s).

- a fim de simular a dispersão, bem como quantificar e acompanhar a evolução longitudinal dos

parâmetros, foi utilizada a equação de difusão-advectação, conforme ilustra a Equação (2).

$$\partial C/\partial t + u_i * \partial C/\partial x_i = \partial(Dx_i * \partial C/\partial x_i)/\partial x_i \pm \Sigma F \quad (2)$$

Na equação (2), C é a concentração do parâmetro (mg/L) no tempo t (dia); D corresponde ao coeficiente de difusão turbulenta (m²/s); x representa a variável espacial na direção i (x, y e z) (m); u representa o vetor velocidade na direção i (x, y e z); F é o termo fonte-sumidouro.

Para agilizar a simulação em ambiente lótico, algumas simplificações na equação de difusão-advectação foram consideradas nesta ferramenta, tais como: escoamento permanente (estado estacionário); escoamento unidirecional (apenas a direção longitudinal x, mantendo constante a concentração dos parâmetros nas direções y e z); desprezou-se o termo difusivo, lembrando que a ferramenta foi desenvolvida para ambiente lótico (CHAPRA, 1997; SALLA et al., 2015 e 2016). A solução numérica da equação (2) foi feita em *Visual Basic* pelo método das diferenças finitas.

As representações matemáticas dos termos Fonte (ΣF) para a simulação dos parâmetros OD, DBO, NO, NH₃⁺, NO₂⁻, NO₃⁻, P_{total}, *E.coli* e metais são demonstradas nas equações (3) a (12), respectivamente.

$$\Sigma F_{OD} = +k_a * 1,024^{(T-20)} * (OD_{sat} - OD) - k_d * 1,047^{(T-20)} * DBO - R_{O2-amonia} * f_{nitr} * k_{an} * 1,080^{(T-20)} * NH_3 - S_d/h \quad (3)$$

$$\Sigma F_{DBO} = -k_d * 1,047^{(T-20)} * DBO - (VS_{MO}/h) * DBO + L_{difuso}/h \quad (4)$$

$$\Sigma F_{NO} = -k_{oa} * 1,047^{(T-20)} * N_{org} - (VS_{NO}/h) * N_{org} \quad (5)$$

$$\Sigma F_{NH3} = +k_{oa} * 1,047^{(T-20)} * N_{org} - R_{O2-amonia} * f_{nitr} * k_{an} * 1,080^{(T-20)} * NH_3 + S_{amonia}/h \quad (6)$$

$$\Sigma F_{NO2} = +R_{O2-amonia} * f_{nitr} * k_{an} * 1,080^{(T-20)} * NH_3 - k_{nn} * 1,047^{(T-20)} * NO_2 \quad (7)$$

$$\Sigma F_{NO3} = +k_{nn} * 1,047^{(T-20)} * NO_2 \quad (8)$$

$$\Sigma F_{Ptotal} = -k_p * 1,047^{(T-20)} * P_{total} - (VSP/h) * P_{total} \quad (9)$$

$$\Sigma F_{E.coli} = -k_b * E.coli \quad (10)$$

$$\Sigma F_{metal i} = -k_{metal i} * Metal_i + S_{metal i}/h \quad (11)$$

$$\Sigma F_{CA} = - (VS_{CA}/h) * CA + S_{CA}/h \quad (12)$$

Nas equações (3) a (12): OD é a concentração de oxigênio dissolvido, em mg/L; OD_{sat} é a concentração de saturação de oxigênio dissolvido, em mg/L; DBO é a demanda bioquímica de oxigênio, em mg/L; NO é a concentração de nitrogênio orgânico, em mg/L; NH₃ é a concentração de nitrogênio amoniacal, em mg/L; NO₂⁻ é a concentração de nitrito, em mg/L; NO₃⁻ é a concentração de nitrato, em mg/L; P_{total} é a concentração de fósforo total (mg/L); *E.coli* é a concentração de coliformes, em NMP/100 mL; Metal_i é a concentração de qualquer metal (cádmio, cobre, chumbo, zinco, cromo, alumínio, cobalto, manganês, níquel, ferro e prata), em mg/L; CA é a concentração de contaminantes arbitrários (sólidos suspensos, compostos tóxicos, entre outros), em mg/L; k_a é o coeficiente de reaeração, em 1/dia; k_d é o coeficiente de decomposição da matéria orgânica carbonácea no rio, em dia-1; k_{an} é o coeficiente de conversão de amônia em nitrito, em 1/dia; k_{oa} é o coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico em amônia, em 1/dia; k_{nn} é o coeficiente de conversão de nitrito em nitrato, em 1/dia; k_p representa a constante de degradação do fósforo total, em 1/dia; k_b é o coeficiente de decaimento de coliforme, em 1/dia; k_{metal i} é o coeficiente de decaimento de qualquer metal i, em 1/dia; VS_{MO} é a velocidade de sedimentação da matéria orgânica carbonácea, em m/dia; VS_{NO} é a velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico, em m/dia; VS_p é a velocidade de sedimentação do fósforo total, em m/dia; VS_{CA} é a velocidade de sedimentação do contaminante arbitrário qualquer (sólidos suspensos, tóxicos, etc), em m/dia; S_d é a demanda de fundo de oxigênio dissolvido no rio, em gO₂/m².dia; L_{difuso} é a carga

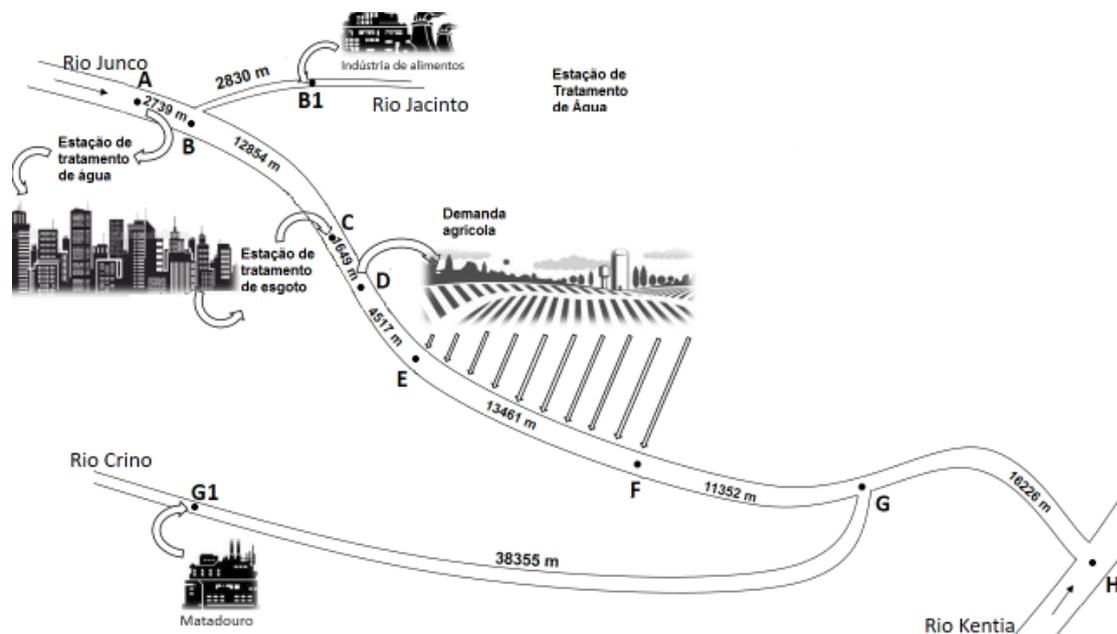


Figura 3 – Topologia do sistema hídrico

De acordo com a Figura 3, o afluente modelável denominado “Rio Jacinto” recebe o lançamento pontual de efluente de uma indústria de alimentos no ponto B1, a uma distância de 2.830 m a montante de sua confluência com o “Rio Junco” no ponto B. O afluente “modelável” denominado “Rio Crino” recebe o lançamento pontual de efluente de um matadouro no ponto G1, a uma distância de 38.355 m a montante de sua confluência com o “Rio Junco” no ponto G. Já o rio principal, denominado “Rio Junco”, possui duas retiradas pontuais (abastecimento público de uma cidade de médio porte no ponto A e irrigação para uma agricultura no ponto D), três entradas ou lançamentos pontuais (afluente modelável “Rio Jacinto” no ponto B, afluente modelável “Rio Crino” no ponto G e efluente sanitário doméstico tratado no ponto C) e uma entrada ou lançamento difuso (carreamento superficial de material orgânico e inorgânico entre os pontos E e F).

No rio principal, a montante da captação superficial para abastecimento público (a montante do ponto A na Figura 3), o curso de água não recebe nenhum tipo de contribuição de efluente, seja pontual e/ou difusa, sendo considerado razoavel-

mente limpo. Ainda no rio principal, a jusante de sua confluência com o afluente modelável “Rio Crino” (a jusante do ponto G na Figura 3), o rio percorre um largo trecho sem lançamentos e retiradas difusas e pontuais até sua foz no “rio Kentia” (ponto H na Figura 3).

O foco desse estudo está no rio principal “Rio Junco” até sua foz no “rio Kentia”, percorrendo uma extensão aproximada de 62,5 km entre os pontos A e H (ver a Figura 3). Obviamente foram considerados os processos de autodepuração nos dois afluentes “modeláveis” (na Figura 3, entre os pontos B1 e B para o “Rio Jacinto” e pontos G1 e G para o “Rio Crino”).

3.3 Simulações matemáticas

O foco do artigo está na apresentação da ferramenta computacional QUALI-TOOL, com consequente avaliação da acurácia dos resultados gerados por meio da comparação com os resultados alcançados pelas ferramentas GESCAL e QUAL-UFMG. Seguem os dados de entrada utilizados nas simulações.

3.3.1 Dados geométricos e hidráulicos

Os dados geométricos e hidráulicos de entrada foram mantidos fixos para as três ferramentas computacionais (ver Tabela 1). Na Tabela 1, L é a extensão do rio (a partir do ponto B1 para o rio

Jacinto, a partir do ponto G1 para o rio Crino e a partir do ponto A para o rio Junco), b é a largura da base do rio, α_{esq} é o ângulo do talude na margem esquerda do rio, α_{dir} é o ângulo do talude na margem direita do rio e η_{calha} é a rugosidade equivalente da parede de fundo e taludes.

Tabela 1 – Dados geométricos e hidráulicos de entrada

Rio Jacinto (afluente modelável)						Rio Junco (rio principal)					
Ponto	L (m)	b (m)	α_{esq}	η_{calha}	α_{dir}	Ponto	L (m)	b (m)	α_{esq}	η_{calha}	α_{dir}
B1	0,0	6,0	47	0,030	75	A	0	14,0	48	0,042	45
Entre B1-B	1168	6,5	50	0,030	70	B	2739	16,0	46	0,042	47
B	2830	7,2	45	0,030	65	C	15593	16,5	46	0,042	49
Rio Crino (afluente modelável)						D	17242	17,5	48	0,042	45
G1	0,0	5,0	45	0,035	48	E	21759	18,0	45	0,042	47
Entre G1-G	19445	5,3	46	0,035	50	F	35220	18,5	46	0,045	48
Entre G1-G	24007	6,5	48	0,036	52	G	46572	21,0	48	0,045	45
G	38355	7,0	50	0,038	55	H	62798	24,0	45	0,043	47

3.3.2 Vazões de entrada

As vazões de entrada foram mantidas fixas para as três ferramentas computacionais. As vazões de entrada estão ilustradas na Tabela 2, onde Q_{af} é a

vazão de montante no ponto inicial das simulações matemáticas no rio principal e seus dois afluentes e L_{inj} é a distância, a partir do início da simulação, em que existe uma entrada ou saída de água.

Tabela 2 – Vazões de entrada pontuais e difusas

Rio Jacinto							
Vazão pontual				Vazão difusa			
Q_{af} (m3/s)	Descrição	L_{inj}	Vazão (m3/s)	Q_{af} (m3/s)	Descrição	L_{inj}	Vazão (m3/s)
1,5	Indústria de alimentos	0	0,8	-	-	-	-
Rio Crino							
1,1	Matadouro	0	0,5	-	-	-	-
Rio Junco							
6,2	Abastecimento público	0	-1,2	Agrícola	21759	35220	0,0001
	Rio Jacinto	2739	2,3				
	Demanda agrícola	15593	-1,8				
	ETE	17242	0,9				
	Rio Crino	46572	1,6				

3.3.3 Concentrações de entrada

As concentrações de entrada foram mantidas fixas para as três ferramentas computacionais (ver Tabela 3). Em função de o estudo ter sido realiza-

do em uma bacia hidrográfica hipotética, foram considerados valores médios da literatura para as concentrações dos diversos parâmetros de qualidade da água.

Tabela 3 – Concentrações pontuais e difusas

Rio	Localização	OD (mg/L)	DBO (mg/L)	NO (mg/L)	NH ₃ ⁺ (mg/L)	NO ₃ ⁻ (mg/L)	P _{total} (mg/L)
Jacinto	Montante ao ponto B1	6,0	4,0	0,1	0,2	0,01	0,6
	Indústria alimentos	1,0	260,0	25,0	8,0	2,0	10,0
	Difuso	---	---	---	---	---	---
Crino	Montante ao ponto G1	5,8	3,0	0,2	0,3	0,02	0,5
	Matadouro	0,5	440,0	1,5	4,5	0,8	20,0
	Difuso	---	---	---	---	---	---
Junco	Montante ao ponto A	6,3	5,0	0,3	0,4	0,02	0,7
	ETE	1,5	65,0	1,3	15,0	0,07	4,5
	Agrícola difusa	5,8	6,0	0,9	0,6	2,5	0,5

3.3.4 Coeficientes de entrada dos processos físicos e bioquímicos

Em uma modelagem de autodepuração em curso de água natural, os coeficientes relacionados aos processos físicos e bioquímicos são calibrados a fim de gerar o melhor ajuste entre os dados de qualidade da água medidos e os perfis simulados. Este artigo utiliza valores da literatura em uma bacia hipotética, focando-se em apresentar uma nova ferramenta computacional de modelagem de qualidade da água em ambiente lótico.

Para a estimativa do coeficiente de reaeração natural k_a (dia⁻¹) foram utilizadas as equações empíricas complementares de O'Connor e Dolbins, Churchill e Owens (CHAPRA, 1997; VON SPERLING, 2007), nas quais k_a é função da velocidade média do escoamento e da profundidade líquida.

Todos os outros coeficientes foram obtidos na literatura (CHAPRA, 1997; VON SPERLING, 2007), mantendo-se fixos no rio principal e nos dois tributários, sendo: coeficiente de decomposição da matéria orgânica carbonácea k_d igual a 0,4 dia⁻¹, velocidade de sedimentação da matéria orgânica carbonácea VS_{MO} igual a 0,1125 dia⁻¹, coeficiente de conversão de nitrogênio orgânico em amônia k_{oa} igual a 0,01 dia⁻¹, velocidade de sedimentação do nitrogênio orgânico VS_{NO} igual a 0,0045 dia⁻¹, coeficiente de conversão de amônia em nitrito k_{an} igual a 0,001 dia⁻¹, coeficiente de conversão de nitrito em nitrato k_{nn} igual a

0,50 dia⁻¹, velocidade de sedimentação do fósforo total VS_p igual a 0,0225 dia⁻¹ e coeficiente de decaimento do fósforo total k_p igual a 0,1 dia⁻¹.

A carga difusa de DBO L_{difusa} , a demanda de fundo de oxigênio dissolvido S_d e o ressurgimento de fundo do fósforo SP foram mantidos nulos em todas as simulações.

3.3.5 Outros dados de entrada

Para a estruturação completa da topologia, além da introdução dos dados geométricos e hidráulicos, dos coeficientes dos processos físicos e bioquímicos, dos dados quantitativos e qualitativos mencionados anteriormente, informações adicionais são solicitadas pelas ferramentas computacionais, tais como comprimento longitudinal em cada trecho de rio, temperatura da água ao longo do trecho de rio estudado e as relações entre as características hidráulicas. Com isso, seguem os dados adicionais:

- a profundidade líquida foi estimada por meio da equação de Manning nas três ferramentas;
- a velocidade média do escoamento foi calculada por meio da equação da continuidade nas três ferramentas;
- a temperatura da água foi mantida fixa em 22°C em todas as simulações;

- as simulações não consideraram o termo difusivo na propagação do poluente na massa líquida (na equação 2, o coeficiente de difusão turbulenta D_x é nulo);
- quanto à discretização dos trechos estudados, foram adotados 50 trechos no rio Jacinto (tributário 1), 500 trechos no rio Crino (tributário 2) e 1000 trechos no rio Junco (rio principal);
- quanto à declividade longitudinal, as ferramentas trabalham de forma diferente.

A ferramenta QUAL-UFMG, a princípio, não solicita a declividade de fundo como dado de entrada, pois estima o coeficiente de reaeração k_a por meio de relação potencial com a vazão do escoamento. Para este artigo foram feitas adaptações em QUAL-UFMG, na qual estimou-se k_a a partir de equações empíricas dependentes da velocidade média do escoamento e da profundidade líquida. Neste contexto, os parâmetros hidráulicos foram estimados com a equação de Manning, mantendo-se a declividade longitudinal fixa para o rio principal e tributários.

A ferramenta GESCAL permite estimar os parâmetros hidráulicos a partir da equação de Manning ou por relações potenciais da velocidade média com a vazão, da profundidade líquida com a vazão e da largura de superfície com a vazão. Na criação da topologia hídrica, quando o usuário opta pela equação de Manning, os valores da largura de base, da declividade de fundo, da declividade de talude e da rugosidade equivalente são únicos para cada trecho da topologia. Essa metodologia traz certas limitações, principalmente quando o trecho é extenso.

Já na ferramenta QUALI-TOOL, a topologia do sistema hídrico é formada a partir de pontos georreferenciados (X, Y e Z) obtidos em ferramenta SIG. A declividade longitudinal de fundo é fixa entre dois pontos. Nesse contexto, a maior quantidade de pontos representativos da topologia aumenta a discretização da declividade longitudinal de fundo.

Essa é a vantagem principal da ferramenta QUALI-TOOL frente às outras ferramentas analisadas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Balanço hídrico e características hidráulicas

A Figura 4 traz os perfis longitudinais da vazão, declividade de fundo, profundidade líquida e velocidade média no rio Junco (rio principal), obtidos por meio das simulações nas ferramentas QUALI-TOOL, QUAL-UFMG e GESCAL.

De acordo com a Figura 4a, observa-se que o balanço hídrico apresentou uma mesma tendência para as três ferramentas. Na ferramenta GESCAL, as pequenas oscilações no posicionamento dos picos de vazão estão relacionadas às imprecisões na discretização longitudinal, quando comparada com as outras duas ferramentas. Ainda na ferramenta GESCAL, a evolução da vazão no trecho com contribuição difusa agrícola (entre os pontos E e F na Figura 3) não seguiu a mesma tendência, pois o incremento difuso foi feito por meio de seis entradas pontuais igualmente distribuídas, o que mostra uma limitação dessa ferramenta. Nas ferramentas QUAL-UFMG e QUALI-TOOL, respectivamente, utilizaram-se incrementos difusos únicos para cada 100 m (0,0063 m³/s) e 63 m (0,01 m³/s) de curso de água.

A Figura 4b traz a declividade longitudinal de fundo no rio Junco (rio principal) estimada nas três ferramentas. Observam-se acentuadas variações na ferramenta QUALI-TOOL quando comparada com as outras duas ferramentas, justificado pela metodologia adotada para a criação da topologia do sistema hídrico a partir de pontos georreferenciados. Nas simulações em QUAL-UFMG foram adotados valores fixos de 0,0044 m/m no rio Junco (rio principal), 0,0191 m/m no rio Jacinto (tributário 1) e 0,0050 m/m no rio Crino (tributário 2). Nas simulações em GESCAL foram obtidos valores de 0,0016 a 0,0082 m/m no rio Junco (rio principal), 0,0086 e 0,0265 m/m no rio Jacinto (tributário 1) e 0,0020 a

0,009 m/m no rio Crino (tributário 2). Nas simulações em QUALI-TOOL houve maior discretização longitudinal da declividade de fundo, variando en-

tre 0,0004 a 0,0596 m/m no rio Junco (rio principal), 0,0062 a 0,0359 m/m no rio Jacinto (tributário 1) e 0,0017 a 0,0255 dia-1 no rio Crino (tributário 2).

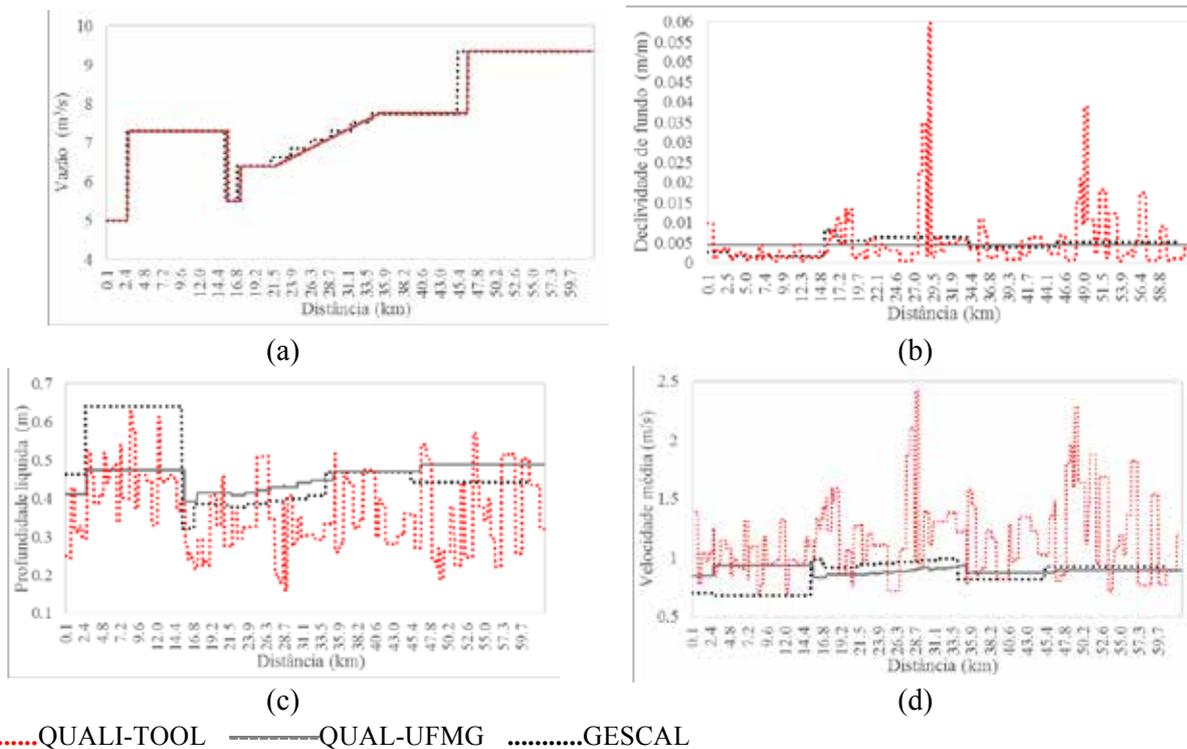


Figura 4 - Perfis longitudinais do rio Junco: (a) Vazão; (b) declividade de fundo; (c) profundidade líquida; (d) velocidade média

As Figuras 4c e 4d apresentam, respectivamente, a profundidade líquida e velocidade média no rio Junco estimadas nas três ferramentas. Obviamente, em função do uso da equação de Manning, as elevadas oscilações da declividade longitudinal de fundo obtidas na ferramenta QUALI-TOOL são carregadas nas estimativas da profundidade líquida e da velocidade média. Focando-se na Figura 4c, existe uma tendência de as profundidades líquidas obtidas na ferramenta QUALI-TOOL resultarem menores do que as obtidas nas outras duas ferramentas. Consequentemente, de acordo com a Figura 4d, as velocidades médias obtidas na ferramenta QUALI-TOOL tendem a ser maiores do que as obtidas nas outras duas ferramentas.

De acordo com a Figura 4c, ao longo do rio Junco foram obtidos valores de profundidade líquida entre 0,16 a 0,62 m na ferramenta QUALI-TOOL, 0,32 a 0,64 m em GESCAL e 0,39 a 0,49 m em QUAL-UFMG. Já na Figura 4d, a velocidade média do escoamento permaneceu entre 0,69 a 2,42 m/s na ferramenta QUALI-TOOL, 0,67 a 0,99 m/s em GESCAL e 0,83 a 0,94 m/s em QUAL-UFMG.

4.1.1 Perfis longitudinais dos parâmetros de qualidade da água

A Figura 5 traz os perfis longitudinais, ao longo do rio Junco (rio principal), dos parâmetros de qualidade da água simulados nas ferramentas QUALI-TOOL, QUAL-UFMG e GESCAL.

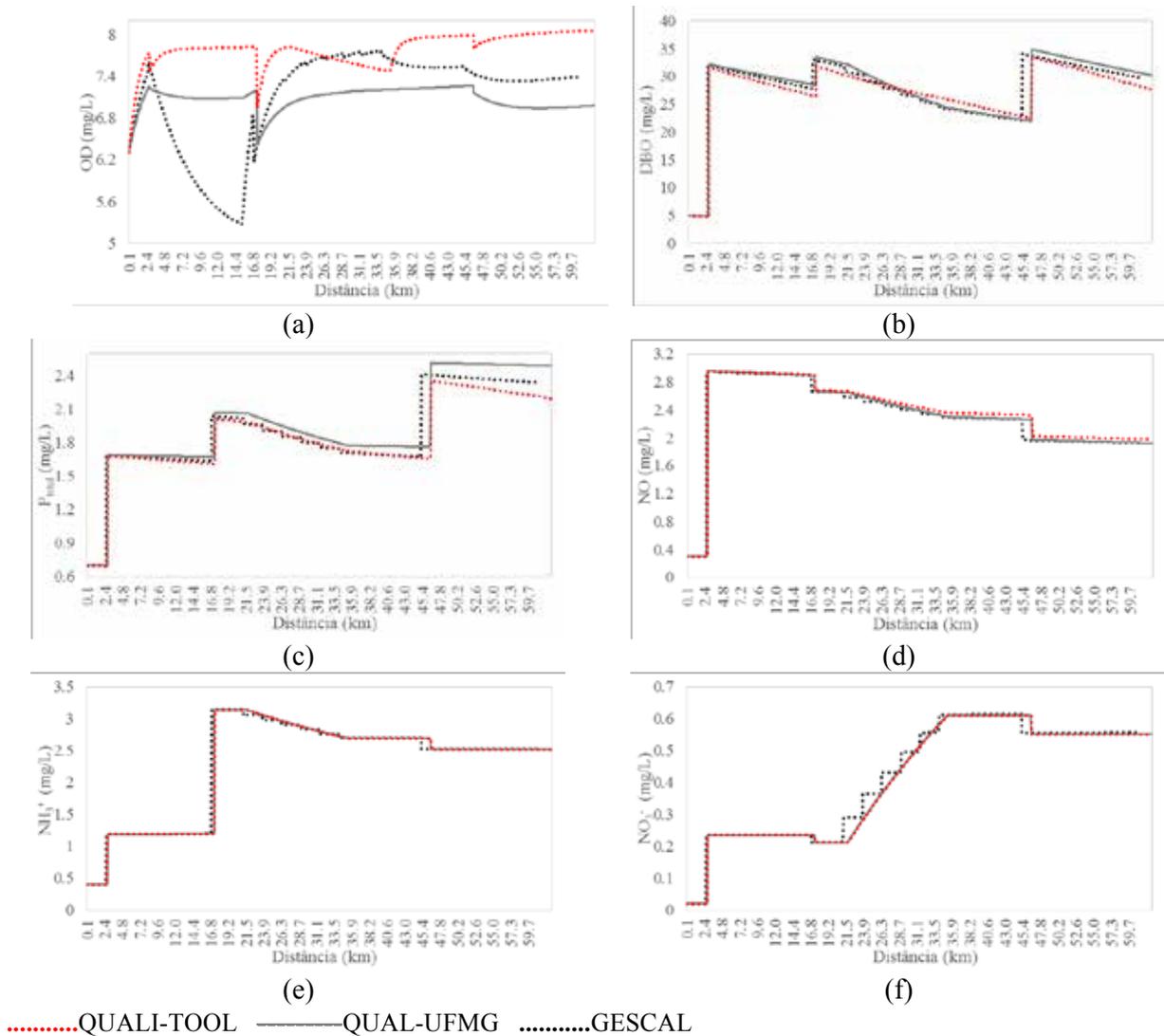


Figura 5 - Perfis longitudinais dos parâmetros de qualidade da água simulados: (a) OD; (b) DBO; (c) P_{total} ; (d) NO; (e) NH_4^+ ; (f) NO_3^-

De acordo com a Figura 5a, observa-se certa inconsistência entre os perfis de OD simulados nas três ferramentas. Essa inconsistência tem relação direta com a metodologia adotada neste artigo para estimar o coeficiente de reaeração k_a , pois, focando-se na equação (3), apenas o coeficiente k_a não é fixo nas simulações. Ainda na equação (3), a desconsideração da demanda de fundo S_d evitou a influência da profundidade líquida h no perfil de OD.

Como já descrito anteriormente, para a estimativa do coeficiente de reaeração natural k_a (dia^{-1}) foram utilizadas as equações empíricas complementares de O'Connor e Dolbins, Churchill e Owens (CHAPRA, 1997; VON SPERLING, 2007), nas quais k_a é função da velocidade média do escoamento e da profundidade líquida. As oscilações da profundidade líquida e velocidade média observadas nas Figuras 4c e 4d justificam as discrepâncias de k_a . Nas simulações em QUAL-UFGM foram obtidos va-

lores de k_a entre 19,5 a 27,6 dia^{-1} no rio Junco (rio principal), 119,7 a 128,7 dia^{-1} no rio Jacinto (tributário 1) e 40,0 a 48,4 dia^{-1} no rio Crino (tributário 2). Nas simulações em GESCAL foram obtidos valores de k_a entre 7,5 a 45,3 dia^{-1} no rio Junco (rio principal), 68,6 a 175,7 dia^{-1} no rio Jacinto (tributário 1) e 20,3 a 75,2 dia^{-1} no rio Crino (tributário 2). Para as simulações em QUALI-TOOL, k_a manteve-se próximo a 90,7 dia^{-1} no rio Junco (rio principal), 67,4 dia^{-1} no rio Jacinto (tributário 1) e 36,1 dia^{-1} no rio Crino (tributário 2). Estes resultados demonstram que as equações empíricas da literatura superestimam k_a , uma vez que estudos em bacias hidrográficas reais fornecem valores de k_a entre 1,0 e 6,0 dia^{-1} (CHAPRA, 2003; VON SPERLING, 2007; PAREDES et al., 2010a; SALLA et al., 2013; SALLA et al., 2016).

As discrepâncias nos valores de profundidade líquida (ilustradas na Figura 4c) justificam as pequenas oscilações nos perfis de DBO (Figura 5b) e P_{total} (Figura 5c). Para entender essa relação, precisa-se retornar nas equações (4) e (9). Na equação (4), a qual representa matematicamente o termo fonte da DBO na equação de advecção-difusão, apenas a profundidade líquida não é fixa. O coeficiente k_d foi mantido fixo em 0,4 dia^{-1} para todas as simulações, valores estes próximo aos encontrados em bacias hidrográficas reais (SALLA et al., 2014 e 2015). Ainda na equação (4), a desconsideração da carga difusa L_{difuso} evitou a influência da profundidade líquida h no perfil de DBO. Já na equação (9), a qual representa matematicamente o termo fonte de P_{total} na equação de advecção-difusão, apenas a profundidade líquida não é fixa. De uma forma geral, as menores profundidades obtidas na ferramenta QUALI-TOOL resultam em maiores sedimentações das parcelas adsorvidas de DBO e P_{total} , lembrando que, nas equações (4) e (9), as velocidades de sedimentação VS_{MO} e VS_p são divididas pela profundidade líquida h .

As simulações da série de nitrogênio na ferramenta QUALI-TOOL geraram perfis muito próximos aos gerados pelas ferramentas QUAL-UFMG e GESCAL. As discrepâncias nos valores de pro-

fundidade líquida não influenciaram nos perfis de NO, NH_3^+ e NO_3^- (ver as Figuras 5d, 5e e 5f). A metodologia adotada na ferramenta GESCAL para a evolução da vazão no trecho com contribuição difusa agrícola ocasionou uma variação em degraus nos perfis de NO, NH_3^+ e NO_3^- , entre os pontos E e F. Essa variação em degrau é mais perceptível no parâmetro NO_3^- , conforme ilustra a Figura 5f.

Ainda com relação às simulações da série de nitrogênio, focando-se nas equações (5) a (8), a comparação dos valores fixos adotados de k_{oa} (0,01 dia^{-1}), VS_{NO} (0,0045 dia^{-1}), k_{an} (0,001 dia^{-1}) e k_{nn} (0,50 dia^{-1}) com valores da literatura fica prejudicada, haja vista que existe enorme variação em seus valores (PAREDES-ARQUIOLA et al., 2007; SOARES et al., 2012).

Em função de o foco do artigo ser a apresentação da ferramenta QUALI-TOOL em uma bacia hipotética, não houve a preocupação em avaliar a conformidade ou não dos parâmetros com as resoluções ambientais vigentes de enquadramento do corpo hídrico.

5 CONCLUSÕES

De uma forma geral, as simulações aqui realizadas atestam a acurácia da ferramenta computacional QUALI-TOOL na avaliação de qualidade da água em ambiente lótico.

A adoção da equação de Manning para a quantificação da profundidade líquida traz limitações, uma vez que considerada o escoamento permanente e uniforme para cada trecho de rio discretizado. Neste contexto, a metodologia adotada na ferramenta QUALI-TOOL para obter a declividade longitudinal de fundo minimiza a limitação da equação de Manning. Esse fato é o principal diferencial da ferramenta QUALI-TOOL.

Todavia, nesta primeira versão, a quantidade máxima de 15 tributários no rio principal é a principal limitação da ferramenta, além do que o maior nú-

mero de nós adotados no processo de discretização deixa o processamento matemático em *Visual Basic* mais lento.

É importante alertar que, em estudos de autodepuração em bacias hidrográficas reais, os coeficientes dos processos físicos e bioquímicos sempre devem ser calibrados, a fim do melhor ajuste entre os dados monitorados em campo e os perfis simulados para os diversos parâmetros de qualidade da água. Os valores limítrofes e as equações da literatura para a estimativa dos coeficientes somente devem ser adotados para se ter uma noção inicial da capacidade de autodepuração do curso de água. Contudo, o constante monitoramento de qualidade da água em pontos estratégicos no curso de água é fundamental para o adequado planejamento e gestão de recursos hídricos em escala local e de bacia hidrográfica.

6 REFERÊNCIAS

- ARGENT, R. M.; PERRAUD, J. M.; RAHMAN, J. M.; GRAYSON, G. M.; PODGER, G. M. A new approach to water quality modeling and environmental decision support systems. **Environmental Modelling Software**, v. 24, n. 7, p. 809-818, 2009.
- CHAPRA, S. C. **Surface water-quality modeling**, Waveland Press Inc. McGraw-Hill, Boston. 844p. 1997. ISBN 10-1577666054.
- CHAPRA, S.C. Engineering water quality models and TDMLs. **Journal of Water Resources Planning and Management**, v. 129, n. 4, p. 247-256, 2003.
- CHAPRA, S. C.; PELLETIER, G. J.; TAO, H. **QUAL2K: A Modeling Framework for Simulating River and Stream Water Quality, Version 2.11. Documentation and Users Manual**. Civil and Environmental Engineering Dept. Tufts University, Medford, MA, 109p., 2008.
- DANISH HYDRAULIC INSTITUTE (DHI). **MIKE11. Dynamic modeling of river, channel and reservoir hydraulics**. Disponível em: <<https://www.mikepoweredbydhi.com/>> Acesso em 08 de janeiro de 2017.
- MAMAQANI, A. Y.; KHORASANI, N.; TALEBI, K.; HASHEMI, S. H.; RA-FIEE, G.; KHOSROSHAHI, F. B. Diazinon fate and toxicity in the Tājan River (Iran) ecosystem. **Environmental Engineering Science**, v. 28, n. 12, p. 859-868, 2011.
- PAREDES-ARQUIOLA, J.; ÁLVAREZ, J. A.; SOLERA, A. Manual del programa Gescal de la simulación de la calidad del agua. Valencia (Spain): Universidad Politécnica de Valencia. 2007. Disponível em: <<https://www.upv.es/aquatool/files/manuales/ManualGescal.pdf>>.
- PAREDES-ARQUIOLA, J.; ÁLVAREZ, J. A.; SOLERA, A. A decision support system for water quality issues in the Manzanares River (Madrid, Spain). **Science of the Total Environment**, v. 408, n. 12, p. 2576-2589, 2010a.
- PAREDES-ARQUIOLA, J.; ÁLVAREZ, J. A.; MONERRIS, M. M.; SOLERA, A. Water quantity and quality models applied to the Júcar river basin, Spain. **Journal of water resources planning and management**, v. 24, n. 11, p. 2759-2779, 2010b.
- REBOUÇAS, A. C. **Água doce no mundo e no Brasil**. In: REBOUÇAS, A. C, et al., (orgs.) **Águas Doces no Brasil – Capital Ecológico, Uso e Conservação**, São Paulo: Escrituras, 2ª Ed, Revisada e ampliada. 2002.
- SALLA, M. R.; PEREIRA, C. E.; ALAMY FILHO, J. E.; PAULA, L. M.; PINHEIRO, A. M. Self-depuration study of Jordão river, located in Dourados river Basin. **Engenharia Sanitária e Ambiental**, v. 18, n. 2, p. 105-114, 2013.
- SALLA, M. R.; FERREIRA, A. M.; PEREIRA, C. E.; SCHMIDT, M. A. R. Self-cleaning ability of the middle and lower courses of the Uberaba River, UPGRH-GD8. **Journal of Urban and Environmental Engineering**, v. 8, n. 1, p. 118-133, 2014.
- SALLA, M. R.; MAGALHÃES, A. A. B.; ALVES, L. A.; SCHMIDT, M. A. R.; LIMA, G. Sensibilidade de características morfológicas no comportamento de parâmetros de qualidade da água em rio de porte médio. **Science & Engineering Journal**, v. 24, n. 2, p. 29-37, 2015.
- SALLA, M. R.; FERNANDES, L. E.; PEREIRA, C. E.; JHUNIOR, H. C. S.; LIMA, G. Importance of calibration for mathematical modeling of self-purification of lotic environments. **Acta Limnologica Brasiliensis**, v. 28, n. 27, p. 01-18, 2016.
- SOARES, P. A.; PINHEIRO, A.; ZUCCO, E. Análise dos coeficientes de reações e cinéticos empregados na simulação de qualidade de água em rios. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v. 17, n. 3, p. 163-173, 2012.
- SULIS, A.; SECHI, G. M. Comparison of generic simulation models for water resource systems. **Environmental Modelling & Software**, v. 40, p. 214-225, 2013.
- VON SPERLING, M. **Estudos e modelagem da qualidade da água de rios**. Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 588p. 2007.
- YENILMEZ, F.; AKSOY, A. Comparison of phosphorus reduction alternatives in control of nutrient concentrations in Lake Uluabat (Bursa, Turkey): Partial versus full sediment dredging. **Limnology**, v. 43, p. 1-9, 2013.
- WELSH, W. D.; VAZE, J.; DUTTA, D.; RASSAM, D.; RAHMAN, J. M.; JOLLY, I. D.; WALLBRINK, P.; PODGER, G. M.; BETHUNE, M.; HARDY, M. J. An integrated modelling framework for regulated river systems. **Environ Modell Soft**, v. 39, p. 81-102, 2013.
- ZHANG, X.; HUANG, G. H.; NIE, X.; LI, Q. Model-based decision support system for water quality management under hybrid uncertainty. **Expert Systems with Applications**, v. 38, n. 3, p. 2809-2816, 2011.